

## **Un approccio combinato Dinamica Molecolare/XAS per lo studio di sistemi disordinati**

La maggior parte dei sistemi di interesse chimico, sia da un punto di vista fondamentale che applicativo, sono caratterizzati dal disordine. I sistemi disordinati comprendono una vastissima categoria di materiali e in generale sono costituiti da molecole che si muovono rapidamente, senza avere una posizione fissata. La natura disordinata di questo tipo di materiali è alla base delle loro proprietà macroscopiche e fa sì che possano presentare un comportamento collettivo estremamente ricco, che soltanto in alcuni casi è stato compreso fino in fondo. Data la complessità della rete di interazioni che si stabiliscono nei sistemi disordinati, conoscerne la struttura rappresenta una delle grandi sfide della ricerca attuale. In questo ambito risulta di fondamentale importanza, per ottenere una descrizione accurata, combinare metodi di indagine differenti e un approccio che si è rivelato estremamente utile per affrontare lo studio di sistemi disordinati è basato sulla combinazione di simulazioni di Dinamica Molecolare e Spettroscopia di Assorbimento dei raggi X. In questo seminario vi mostrerò alcuni esempi di applicazione di questa metodologia combinata allo studio di diversi sistemi liquidi, come soluzioni ioniche, liquidi ionici e solventi eutettici profondi.

In particolare la spettroscopia di assorbimento dei raggi X per la sua selettività atomica e la sua natura a corto raggio rappresenta la tecnica di elezione per lo studio della coordinazione di ioni monoatomici in soluzione e vi mostrerò alcuni risultati ottenuti combinando questa tecnica con la Dinamica Molecolare per ioni metallici trivalenti come lo ione  $\text{Sc}^{3+}$  o gli ioni Lantanidi  $3+$  in acqua e in solventi organici come l'acetonitrile. Inoltre utilizzando l'approccio combinato XAS/Dinamica Molecolare è stato possibile ottenere informazioni strutturali molto accurate su diversi sistemi contenenti liquidi ionici: liquidi ionici puri, in miscele con altri solventi e con sali disciolti al loro interno. I liquidi ionici rappresentano una classe di solventi potenzialmente utilizzabili in moltissime applicazioni grazie alle loro peculiari proprietà. Negli ultimi dieci anni c'è stato in letteratura un grandissimo interesse per lo studio di questi sistemi ma in generale ancora non si è giunti ad una conoscenza dettagliata delle loro proprietà strutturali a causa della complessa rete di interazioni differenti che si instaura all'interno dei liquidi ionici. In questo ambito vi mostrerò come utilizzando un approccio combinato teorico-sperimentale è stato possibile ottenere informazioni accurate sulla struttura di questo tipo di sistemi.