

## **Un approccio multidisciplinare per lo studio delle proprietà strutturali di sistemi in fase condensata**

Matteo Busato

*Dipartimento di Chimica, Sapienza Università di Roma, P.le A. Moro 5, 00185 Roma, Italy  
matteo.busato@uniroma1.it*

Lo studio di solventi maggiormente ecosostenibili in sostituzione a più tradizionali solventi organici ha dominato la ricerca in ambito chimico riguardante i sistemi in fase condensata nell'ultimo ventennio. Nello specifico, i liquidi ionici ed i solventi a eutettico profondo sono tra i sistemi più studiati grazie a caratteristiche peculiari come una trascurabile tensione di vapore, scarsa infiammabilità, elevato potere solvatante sia per specie cariche che neutre, e (spesso) elevata biocompatibilità. Tuttavia, la complessità di questi sistemi, dove numerose interazioni puntuali tra le specie in soluzione influiscono sulle proprietà chimico-fisiche macroscopiche, rende necessario l'utilizzo di un approccio multidisciplinare per la comprensione delle loro proprietà strutturali, con l'obiettivo di favorirne l'utilizzo in svariati campi applicativi.

In questo seminario vi mostrerò i risultati di alcuni filoni di ricerca portati avanti nel corso della mia attività. In particolare, vi mostrerò degli studi circa la solvatazione in liquidi ionici di ioni metallici di interesse tecnologico, energetico e ambientale come gli ioni  $\text{Co}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$  e  $\text{Ag}^+$ . Un approccio combinato tra simulazioni di dinamica molecolare, teoria del funzionale di densità, e spettroscopia di assorbimento ai raggi-X ha permesso una comprensione approfondita non solo circa la coordinazione di questi ioni metallici nei liquidi ionici studiati, ma anche della loro termodinamica in soluzione e in particolare per il processo di trasferimento da matrici acquose, importante per interessi di tipo estrattivo.

In aggiunta, vi mostrerò i risultati di alcuni studi circa le proprietà strutturali di solventi a eutettico profondo ottenuti tramite spettroscopie tradizionali come la spettroscopia Raman, all'infrarosso e UV-Vis, insieme a scattering dei raggi-X e simulazioni di dinamica molecolare. I dati ottenuti hanno evidenziato una peculiare evoluzione strutturale dei sistemi studiati in particolare in presenza di cosolventi, mostrando come l'ottenimento di una visione chiara circa queste proprietà richieda un approccio *ad hoc* per ogni sistema. Il possibile impatto di questi studi è di favorire la proliferazione di solventi maggiormente sostenibili nelle attività applicative, oltre che di allargarne e possibilmente metterne in discussione l'attuale interpretazione nel dibattito scientifico in essere.