



Dr. Lorenzo Ulivi

AI CNR
Ufficio Accordi e Relazioni Internazionali

Programma MOBILITÀ DI BREVE DURATA, anno 2013

Relazione Scientifica di Lorenzo Ulivi

Il periodo di permanenza presso la New York University (New York City, NY, USA) ha permesso di sviluppare la collaborazione con il Prof. Zlatko Bačić ed i suoi studenti, per mettere a punto il metodo di confronto dei dati sperimentali di diffusione anelastica di neutroni, ottenuti nei nostri esperimenti sui clatrati-idrati, con la teoria sviluppata dal Prof. Bačić.

I clatrati-idrati sono degli importanti composti molecolari, formati da molecole di acqua, solidi intorno a 0 °C o meno, la cui struttura cristallina presenta al suo interno delle cavità, dette gabbie, che intrappolano molecole di una diversa specie (spesso di un gas). Particolare interesse hanno i clatrati in cui la molecola intrappolata è idrogeno, sia perché promettenti per l'immagazzinamento di questo gas per scopi energetici, sia per le peculiari proprietà, legate al comportamento quantistico della molecola di idrogeno nano-confinata nella gabbia. Lo studio sperimentale di questi composti, mediante spettroscopia, sia neutronica che Raman, portato avanti dal nostro gruppo, ha fornito risultati che richiedono, per la loro interpretazione, un confronto con la teoria. Il gruppo del Prof. Zlatko Bačić, all'Università di New York, ha sviluppato un metodo di calcolo rigorosamente quantistico della dinamica 5-dimensionale della molecola di idrogeno nella gabbia del clatrato.

L'attività svolta durante questa mia visita presso la New York University (1 - 22 ottobre 2013) ha riguardato la modellizzazione della dinamica della molecola di HD in clatrati idrati aventi differenti strutture, e, quindi, in diversi tipi di gabbie. Si sono ricostruite, partendo da dati cristallografici, le strutture di queste gabbie, che permetteranno il calcolo quantistico dello spettro neutronico. Inoltre, si sono analizzati vari tipi di potenziali intermolecolari e scelti alcuni di questi, da usare nel calcolo, per permettere un confronto ancora più realistico tra dati sperimentali e teoria.

Durante la mia permanenza, inoltre, si è iniziata la stesura di un articolo comune.

In fede
Lorenzo Ulivi