

ELABORATO FINALE PER IL CONSEGUIMENTO
DELLA LAUREA TRIENNALE IN CHIMICA
A.A. 2011/2012

a) Cognome e nome: Amabile Roberto

b) Titolo dell'elaborato:

Ab initio study of CO₂ clathrate hydrate — Studio *ab initio* del clatrato idrato di CO₂

c) Relatore: Prof. Cardini Gianni - gianni.cardini@unifi.it

Questo elaborato finale fa parte di un progetto di ricerca più vasto sul clatrato di CO₂, una specie chimica supramolecolare di tipo host-guest in cui l'intero reticolo di H₂O accoglie le molecole discrete di CO₂ nelle cavità intermolecolari. Abbiamo studiato la dinamica della fase massiva del clatrato nell'insieme microcanonico NVE a due diversi regimi di temperatura tramite simulazioni di dinamica molecolare Car-Parrinello (CPMD). Abbiamo mostrato come la struttura sia stabile, in queste condizioni, per almeno alcune decine di *ps*. Le analisi condotte comprendono: la densità spettrale degli stati fononici che fornisce lo spettro completo del sistema; le funzioni di distribuzione radiale a coppie che descrivono compiutamente la geometria della cella; l'ordine orientazionale tramite i polinomi di Legendre. I risultati dell'analisi confermano la rotazione delle molecole di CO₂ in tutte le gabbie del clatrato.