

Linea di ricerca: **Tecniche spettroscopiche avanzate e metodi computazionali per lo studio di sistemi disordinati complessi**

Responsabile: Paola D'Angelo

Uso combinato di tecniche spettroscopiche avanzate e metodi computazionali per lo studio di sistemi disordinati complessi

La ricerca è volta allo studio delle proprietà strutturale e dinamiche di sistemi disordinati quali i D.E.S (deep eutetic solvents) e i liquidi ionici. In particolare tecniche spettroscopiche innovative sviluppate negli ultimi anni presso i sincrotroni quali XES (X-ray emission spectroscopy) e RIXS (Resonant inelastic X-ray scattering) verranno utilizzate insieme alle tecniche convenzionali XAS (X-ray absorption spectroscopy) e XRD (X-ray diffraction) per caratterizzare i D.E.S. in presenza di cationi metallici e i liquidi ionici in presenza di solventi quali l'acqua e solventi organici. I risultati sperimentali verranno analizzati a partire da simulazioni di dinamica molecolare classica e ab-initio.