

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

selezione pubblica per n. 1 posto/i di Ricercatore a tempo determinato ai sensi dell'art.24, comma 3, lettera b) della Legge 240/2010 per il settore concorsuale 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche, settore scientifico-disciplinare 03/A2 - Modelli e Metodologie per le Scienze Chimiche, presso il Dipartimento di CHIMICA, (avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 53 del 05/07/2019) Codice concorso 4123

[Francesco Muniz Miranda]

CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	MUNIZ MIRANDA
NOME	FRANCESCO
DATA DI NASCITA	15-10-1983

CURRICULUM - Francesco Muniz-Miranda

Nome: *Francesco*
Cognome: *Muniz Miranda*
Data e luogo di nascita: 15/10/1983, Fiesole (Firenze)
E-mail: f.munizmiranda@gmail.com
f.munizmiranda@peceasy.it
Nome Skype: fra_mu_mi
Cittadinanza: Italiana
Lingue: Italiano (madrelingua)
Inglese (avanzato, C2)

Dal 1 Febbraio 2019 ad oggi: Ricercatore del CNRS (Centre National de la Recherche Scientifique) presso l'Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris, a seguito di concorso internazionale, su progetto ERC della dr. Iliaria Ciofini intitolato "Escaping from the Franck-Condon region: a theoretical approach to describe molecular structural reorganization for reversible energy and information storage at the excited state". La posizione di Ricercatore CNRS ("Chercheur") è riconosciuta corrispondente a quella italiana di Ricercatore RTD(a) per coloro che sono in possesso di dottorato di ricerca, a norma del decreto del MIUR D.M. 662/2016.

15 Maggio 2017 – 31 dicembre 2018: Post-doc all'Università di Gent (UGent) in Belgio, nel gruppo della prof.ssa Veronique Van Speybroeck (Center for Molecular Modeling) e in collaborazione col prof. Dimitri Van Neck, finanziato dal progetto ERC intitolato "Advanced electronic structure characterization of COF materials and metal complexes towards effective photoredox catalysts".

16 Aprile 2016 – 15 Aprile 2017: Post-doc all'Università di Modena e Reggio Emilia (UniMORE) nel gruppo del Prof. Alfonso Pedone e della Prof.ssa Maria Cristina Menziani, finanziato dal progetto UniMORE intitolato "Studio computazionale di proprietà chimico-fisiche di nanoparticelle metalliche funzionalizzate con molecole organiche".

1 Aprile 2013 – 31 marzo 2016: Post-doc all'Università di Modena e Reggio Emilia (UniMORE) nel gruppo del Prof. Alfonso Pedone e della Prof.ssa Maria Cristina Menziani, finanziato dal progetto FIRB intitolato "Nuove Strategie Teorico-Computazionali Multiscala per la progettazione di Composti ibridi Organico-Inorganici Fotoresponsivi per Circuiti Nanoelettronici".

1 Gennaio 2010 – 15 Marzo 2013: Dottorato Internazionale di Ricerca in "Spettroscopia Atomica e Molecolare" presso il Laboratorio Europeo di Spettroscopia Non-lineare (LENS), a seguito di vincita di borsa di studio dell'Università di Firenze.

La mia tesi di dottorato è tra le vincitrici del premio "Miglior tesi di dottorato" dell'Università di Firenze per l'anno 2013 ed è stata quindi pubblicata dalla casa editrice Firenze University Press (FUP). Può essere scaricata gratuitamente da internet all'indirizzo:

<http://www.fupress.com/catalogo/modelling-of-spectroscopic-and-structural-properties-using-molecular-dynamics/2880>

Titoli di Studio Accademici

- ❖ Dottorato Internazionale di Ricerca in "Spettroscopia Atomica e Molecolare", 15 Marzo 2013, Università di Firenze – LENS.
Tutore: Prof. Em. Vincenzo Schettino (Università di Firenze - LENS).
Referee Internazionali: Prof. Dr. Claus Jørgen Nielsen (Università di Oslo)
Prof. Federico Moran (Università di Madrid)
Prof. Ana Isabel Cremades Rodriguez (Università di Madrid)
- ❖ Laurea Specialistica in Chimica, 28 Settembre 2009, Università di Firenze.
Tutore: Prof. Vincenzo Schettino
Voto: 110 su 110, con lode.
- ❖ Laurea Triennale in Chimica, Aprile 2007, Università di Firenze.
Tutore: Prof. Dr. Gianni Cardini, Voto: 110 su 110.

Premi

- **2018:** Premio "Eolo Scrocco" della divisione di chimica teorica e computazionale (DCTC) della Società Chimica Italiana (SCI), dato a ricercatori under-35.
<http://www.unifimagazine.it/riconoscimento-giovane-studioso-fiorentino/>
- **2014:** Tesi vincitrice del premio "Miglior tesi di Dottorato" dell'Università di Firenze, con conseguente pubblicazione da parte della casa editrice FUP (Firenze University Press)

Abilitazioni e idoneità

- **2018:** Abilitazione Scientifica Nazionale (ASN) a Professore Associato, nel settore concorsuale 03/B1 (chimica inorganica), conseguita in data 7-8-2018.
- **2017:** Idoneo al concorso CNR per ricercatore a tempo indeterminato presso l'ISTM (Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari), "Bando 367.19 RIC".
- **2009:** Esame di stato come chimico "senior", superato col voto più alto della sessione (Novembre/Dicembre, voto: 203/240) presso l'Università di Firenze.
- **2019:** Nella seconda sessione 2018/2020 ho presentato domanda di Abilitazione Scientifica Nazionale (ASN) a Professore Associato, nel settore concorsuale 03/A2 (chimica fisica), domanda già giudicata ammissibile in base al conseguimento dei valori soglia.

Responsabilità di progetti di ricerca

Nell'anno 2014 sono stato responsabile, in qualità di *Principal Investigator*, del progetto sulla simulazione di nanoparticelle di oro, affidatogli dal Consorzio Interuniversitario CINECA: AUNANMR-HP10CJ027S - 2014.

Research Gate profile:

https://www.researchgate.net/profile/Francesco_Muniz-Miranda

Google Scholar profile:

<https://scholar.google.it/citations?user=puaMVcEAAAAJ&hl=it>

Scopus profile:

<https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=36552987200>

Visiting scholarship all'estero

Sono stato *visiting scholar* all'École Nationale Supérieure de Chimie de Paris (ENSCP) - *Chimie Paristech*, Paris (France), per 1 mese (1–30 giugno 2016), dove ho svolto attività di ricerca nel gruppo del prof. Carlo Adamo.

Attività come Reviewer

A partire dal 2015 ho fatto da reviewer per le seguenti riviste internazionali:

The Journal of Physical Chemistry (6 volte), *ACS Nano*, *Accounts of Chemical Research* per ACS; *Physical Chemistry Chemical Physics* (4 volte), *Chemical Communications* (4 volte) per RSC; *Vibrational Spectroscopy* (2 volte), *Computational and Theoretical Chemistry*, *Journal of Molecular Structure*, *Journal of Molecular Graphics and Modelling* per Elsevier; *Journal of Raman Spectroscopy* (2 volte) per Wiley; *Journal of Computational Electronics* per Springer; *International Journal of Modern Physics B* (2 volte) per World Scientific; *Nanomaterials* (4 volte), *Materials* (2 volte), *Coatings* (2 volte), *Metals*, *Applied Sciences*, *Inorganics*, *Sensors* per MDPI.

Per tale attività ho ricevuto formali ringraziamenti. In particolare, l'editor di *ACS Nano* mi ha personalmente ringraziato in quanto concordava nello specifico sul contenuto della mia revisione.

Affiliazioni

Dal 2013 sono membro della Società Chimica Italiana (SCI), affiliato alla Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (DCTC); dal 2018 sono membro dell'ACS (American Chemical Society). Ho accettato l'invito come Guest Editor della rivista MDPI *Computation*.

SCUOLE E WORKSHOP

- “MSSC2018 – *Ab initio Modelling in Solid State Chemistry*”, Settembre 2018, Torino
- “*Excited States in Complex Systems*”, 2016, Parigi (Francia)
- “*Multiscale Simulations of Soft Matter with Hands-On Tutorials on ESPResSo++ and VOTCA*”, CECAM Workshop, Mainz (Germania), 2016.
- “*Calculation of Solid-State NMR and EPR Parametres Using the GIPAW Method*”, CECAM Tutorial, ETH, Zurigo (Svizzera), 2013.
- “*European Summer School of Scientific Visualization*”, CINECA, Bologna, 2012.
- “*Introduction to Fortran90*”, CINECA, Bologna, 2011
- “*HPC UserDay 2011*”, CINECA, Bologna, 2011
- “*C for scientific programming*”, CINECA, Bologna, 2010.
- VI “*Advanced School of Parallel Programming*”, CINECA, Bologna, 2010.
- “*Computational spectroscopy using Quantum Espresso and related codes*”, CECAM Tutorial, SISSA, Trieste, 2010.
- XIX “*Summer School of Parallel Programming*”, CINECA, Bologna, 2010.
- “*Frontiers in Atomic Physics*”, Firenze, 2010.

.....

ATTIVITA' DIDATTICA

- 2014/2015, 2015/2016, 2016/2017: **Assistenza all'insegnamento** con seminari e lezioni di laboratorio di calcolo per il corso “*Chimica Fisica e Spettroscopia Molecolare*” della laurea magistrale in Chimica, UniMORE.
- 2015/2016: **Assistenza di laboratorio** per il corso “*Chimica Fisica I*” della laurea triennale in Chimica, UniMORE.

- 2017-2018: **Assistenza di laboratorio** con esercizi pratici con il software Gaussian 16 per studenti del Master in Physics and Engineering, Università di Gent (Belgio).
- 2017/2018: **Assistenza all'insegnamento** per il corso "*Molecular Structure*" (in inglese), presso Università di Gent (Belgio), con lezioni integrative.
- 2019: **Insegnamento** del corso di Chemical Bonding (20 ore complessive di lezione, in inglese), per gli studenti del terzo anno del corso di laurea in Ingegneria Chimica, presso École Nationale Supérieure de Chimie de Paris, in qualità di Ricercatore.
- 2016: Ho co-supervisionato la tesi triennale in Chimica di Federica Lodesani, UniMORE. I contenuti della tesi sono stati poi pubblicati su JPC-C nel medesimo anno.
- 2018: Sono stato co-advisor di due tesi di laurea, dal titolo "*Towards a reliable quantum mechanical description of excited states in open-shell transition metal complexes*" e "*Tuning the optical properties of ruthenium photocatalysts for efficient light capture in covalent organic frameworks*", per il Master in Science presso l'università di Gent (Belgio).

Il Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche di UniMORE mi ha dichiarato cultore della materia nel settore CHIM02 nel periodo 2014-2017.

.....

CONFERENZE SU INVITO

- 1) **F. Muniz-Miranda**, M. C. Menziani, A. Pedone, *Optical Features of Au and Ag-based Nanocluster*, Conference on "Charge Transfer Modeling in Chemistry: new methods and solutions for a longstanding problem", Parigi (Francia), Aprile 2015.
 - 2) **F. Muniz-Miranda** "*Computational investigation of vibrational and UV-vis spectra in molecular and metal systems*", Center for Molecular Modeling (CMM), Gent University (Belgio), Dicembre 2016.
 - 3) **F. Muniz-Miranda**, "*Studies on the optoelectronic properties of metal nanoclusters and complexes*", Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (SCI), Trieste (Italia), Settembre 2018.
-

COMUNICAZIONI A CONFERENZE NAZIONALI ED INTERNAZIONALI

- 1) **F. Muniz-Miranda***, F. Labat, C. Adamo, I. Ciofini, *Modeling aggregation effects on UV-Vis spectra of dyes: Pigment Red 179 as case study*, 18th International Conference "Density Functional Theory and its Applications", Alicante (Spagna), Luglio 2019.
- 2) A. De Vos, K. Lejaeghere, **F. Muniz-Miranda**, P. Van der Voort, V. Van Speybroeck, *Insight in heterogeneous photocatalysis by anchoring a photoactive Ru-complex on a Covalent Triazine Framework*, MOFSIM Conference 2019, Gent (Belgio), Aprile 2019.
- 3) A. De Vos, K. Lejaeghere, **F. Muniz-Miranda**, P. Van der Voort, V. Van Speybroeck, *First-principles insight into Heterogeneous Photocatalysis at photoactive Ru-complexes on Covalent Triazine Frameworks*, 6th International Conference on Metal-Organic Frameworks, Auckland (Nuova Zelanda), Dicembre 2018.
- 4) A. De Vos, **F. Muniz-Miranda**, P. Van der Voort, V. Van Speybroeck, K. Lejaeghere, *Insight in heterogeneous photo catalysis by anchoring a photo active Ru-complex on a Covalent Triazine Framework*, Meeting "Computational spectroscopy: bridging theory and experiment", Como (Italia), Settembre 2018.

- 5) **F. Muniz-Miranda***, *Computational UV-vis spectroscopy*, Simposio “Modeling of nanoporous materials at the nanoscale”, Utrecht University, Utrecht (Paesi Bassi), Settembre 2018.
- 6) S. Caporali, **F. Muniz-Miranda**, M. Muniz-Miranda, *Adsorption of xanthine on citrate-stabilized gold nanoparticles*, 25th International Symposium on Metastable, Amorphous and Nanostructured Materials (ISMANAM 2018), Roma (Italia), Luglio 2018.
- 7) **F. Muniz-Miranda***, M. C. Menziani, A. Pedone, *Optical Excitations in Au and Ag nanoclusters*, Excited States in Complex Systems, ESCS 2016, ChimieParisTech, Parigi (Francia), Novembre 2016.
- 8) **F. Muniz-Miranda***, F. Lodesani, F. Tavanti, D. Presti, D. Malferrari, A. Pedone, *Supercritical CO₂ Confined in Palygorskite and Sepiolite Minerals: A Classical Molecular Dynamics Investigation*, Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (SCI), Pisa (Italia), Ottobre 2016.
- 9) **F. Muniz-Miranda**, F. Tavanti, M. C. Menziani, A. Pedone, *Molecular Modelling of metal nanoclusters and nanoparticles: from TDDFT calculations to coarse grained MD simulations*, Workshop “Nanostructured Metal Optics”, Scuola Normale Superiore, Pisa (Italia), Aprile 2016.
- 10) M. C. Menziani, **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, *Modeling unconventional bioactive glasses*, 2nd International Workshop “Challenges of Atomistic Simulations of Glasses and Amorphous Materials”, Wuhan (Cina), Giugno 2015.
- 11) **F. Muniz-Miranda**, M. C. Menziani, A. Pedone, *Structural and Optical Properties of organically Protected Gold and Silver Nanoclusters*, Winter Modelling 2014 - Special Edition, Pisa (Italia), Dicembre 2014.
- 12) **F. Muniz-Miranda**, M. C. Menziani, A. Pedone, *Structural and optical properties of gold and silver nanoclusters*, WATOC Conference, Santiago (Cile), Ottobre 2014.
- 13) **F. Muniz-Miranda**, M. C. Menziani, A. Pedone, *Effects of Organic Ligands on the Optical Properties of Undecagold Nanoclusters*, XXV Congresso SCI, Rende (Italia), Settembre 2014.
- 14) **F. Muniz-Miranda***, M. C. Menziani, A. Pedone, *Simulating Ag-based nanoclusters at the quantum-chemical level*, 7th International Conference of Molecular Electronics (Elecmod17), Strasburgo (Francia), Agosto 2014.
- 15) **F. Muniz-Miranda**, M. C. Menziani, A. Pedone, *Effects of Organic Ligands on the Optical Properties of Undecagold Nanoclusters*, 7th International Conference of Molecular Electronics (Elecmod17), Strasburgo (Francia), Agosto 2014.
- 16) **F. Muniz-Miranda***, M. C. Menziani, A. Pedone, “*Ab initio Investigation of a Gold Nanocluster: is the Optical Spectrum due to Ligands?*”, Winter Modelling 2014, Modena (Italia), Marzo 2014.
- 17) **F. Muniz-Miranda***, M. C. Menziani, A. Pedone, *DFT Strategies to Approach Gold and Silver Nanoclusters*, 2nd Avogadro Colloquia, Scuola Normale Superiore, Pisa (Italia), Settembre 2013. Video: <https://www.youtube.com/watch?v=u17McGXJ98E>
- 18) R. Righini, **F. Muniz-Miranda**, R. Chelli, V. Volkov, *Structure and dynamics of a membrane associated anchor dipeptide*, Second International Conference «Transient Chemical Structures in Dense Media», Parigi (Francia), Novembre-Dicembre 2011.

- 19) M. Pagliai, **F. Muniz-Miranda**, V. Schettino, M. Muniz-Miranda, *Competitive Solvation and Chemisorption in Silver Colloidal Suspensions*, UK Colloids Conference, Londra (U.K.), Luglio 2011.
- 20) **F. Muniz-Miranda***, M. Pagliai, G. Cardini, R. Righini, V. Schettino, *Spectroscopic properties of hydrogen bonded systems by wavelet analysis*, XXX EUCMOS (European Congress of Molecular Spectroscopy), Florence (Italy), Agosto-Settembre 2010.
- 21) M. Pagliai, **F. Muniz-Miranda**, G. Cardini, R. Righini, V. Schettino, *Hydrogen bond dynamics of methyl acetate in methanol*, XXX EUCMOS (European Congress of Molecular Spectroscopy), Florence (Italy), Agosto-Settembre 2010.

* **presenting author**

PUBBLICAZIONI (in riviste e libri *peer reviewed*)

- 1) **F. Muniz-Miranda**, L. De Bruecker, A. De Vos, F. Vanden Bussche, C. V. Stevens, P. Van Der Voort, K. Lejaeghere, V. Van Speybroeck, *Optical Properties of Isolated and Covalent Organic Framework-Embedded Ruthenium Complexes*, Journal of Physical Chemistry A, Online Publication Date: 19 Jul 2019, Doi: 10.1021/acs.jpca.9b05216
- 2) A. De Vos, K. Lejaeghere, **F. Muniz Miranda**, C. V. Stevens, P. Van Der Voort, V. Van Speybroeck, *Electronic properties of heterogenized Ru(II) polypyridyl photoredox complexes on covalent triazine frameworks*, Journal of Materials Chemistry A, **2019**, 7, 8433-8442, Doi: 10.1039/C9TA00573K
- 3) N. Tahir, **F. Muniz-Miranda**, J. Everaert, P. Tack, T. Heugebaert, K. Leus, L. Vincze, C. V. Stevens, V. Van Speybroeck, P. Van Der Voort, *Immobilization of Ir(I) complex on covalent triazine frameworks for C-H borylation reactions: A combined experimental and computational study*, Journal of Catalysis, **2019**, 371, 135-143, Doi: 10.1016/j.jcat.2019.01.030
- 4) **S. Caporali**, F. Muniz-Miranda, **A. Pedone**, **M. Muniz-Miranda**, *SERS, XPS and DFT Study of Xanthine Adsorbed on Citrate-Stabilized Gold Nanoparticles*, Sensors, **2019**, 19, 2700 (pp. 1-10), Doi:10.3390/s19122700
- 5) **F. Muniz-Miranda**, *Metal Clusters: a TD-DFT Study (Cluster Metallici: uno studio TD-DFT)*, La Chimica e L'Industria, Anno II, N. 3 – Maggio/Giugno **2019**, pp. 62-64, ISSN: 2283-5458, <http://dx.medra.org/10.17374/CI.2019.101.3.67>
- 6) **F. Muniz-Miranda** (corresponding), A. Pedone, M. Muniz-Miranda, *Raman and computational study on the adsorption of xanthine on silver nanocolloids*, ACS Omega, **2018**, 3, 13530-13537, Doi: 10.1021/acsomega.8b02174
- 7) C. Gellini, **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, M. Muniz-Miranda, *SERS active Ag-SiO₂ nanoparticles obtained by laser ablation of silver in colloidal silica*, Beilstein Journal of Nanotechnology, **2018**, 9, 2396-2404, Doi: 10.3762/bjnano.9.224

- 8) M. Muniz-Miranda, **F. Muniz-Miranda**, S. Caporali, N. Calisi, A. Pedone, *SERS, XPS and DFT investigation on palladium surfaces coated with 2,2'-bipyridine monolayers*, Applied Surface Science, **2018**, 457, 98-103, Doi: 10.1016/j.apsusc.2018.06.232
- 9) M. Muniz-Miranda, **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, *SERS and DFT investigation on push-pull molecules: 4-Dimethylamino- 4'-nitrostilbene adsorbed on silver colloidal nanoparticles*, ChemistrySelect, **2018**, 3, 8698-8702, Doi: 10.1002/slct.201801825
- 10) **F. Muniz-Miranda** (corresponding), A. Pedone, M. Muniz-Miranda, *Spectroscopic and DFT investigation on the photo-chemical properties of a push-pull chromophore: 4-Dimethylamino-4'-nitrostilbene*, Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, **2018**, 190, 33-39, Doi: 10.1016/j.saa.2017.08.072
- 11) F. Tavanti, **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, *The effect of alkaline cation on the intercalation of Carbon Dioxide in Sepiolite Minerals: a Molecular Dynamics Investigation*, Frontiers in Materials, **2018**, 5, article 12, pp. 1-9, Doi: 10.3389/fmats.2018.00012
- 12) M. Muniz-Miranda, **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, *Spectroscopic and computational studies on ligand-capped metal nanoparticles and clusters*, in "Metal Nanoparticles and Clusters", Deepak, Francis Leonard (Ed.), Springer Series in Materials Science, Springer International Publishing, Switzerland, **2018**, ISBN: 978-3-319-68052-1, Doi: 10.1007/978-3-319-68053-8_3, Chapter 3, pp. 55-87
- 13) C. Gellini, F. L. Deepak, M. Muniz-Miranda, S. Caporali, **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, C. Innocenti, C. Sangregorio, *Magneto-Plasmonic Colloidal Nanoparticles Obtained by Laser Ablation of Nickel and Silver Targets in Water*, The Journal of Physical Chemistry C, **2017**, 121, 3597-3606, Doi: 10.1021/acs.jpcc.6b11628
- 14) **F. Muniz-Miranda** (corresponding), M. C. Menziani, A. Pedone, *Assessment of the basis set effect on the structural and electronic properties of organic-protected gold nanoclusters*, Theoretical Chemistry Accounts, **2016**, 135:94, pp. 1-9, Doi: 10.1007/s00214-016-1856-2
- 15) **F. Muniz-Miranda**, F. Lodesani, F. Tavanti, D. Presti, D. Malferrari, A. Pedone, *Supercritical CO₂ confined in Palygorskite and Sepiolite Minerals. A classical Molecular Dynamics investigation*, The Journal of Physical Chemistry C, **2016**, 120, 26945-26954, Doi: 10.1021/acs.jpcc.6b09983
- 16) **F. Muniz-Miranda**, D. Presti, M. C. Menziani, A. Pedone, *Electronic and optical properties of the Au₂₂[1,8-bis(diphenylphosphino) octane]₆ nanoclusters disclosed by DFT and TD-DFT calculations*, Theoretical Chemistry Accounts, **2016**, 135:5, p.1-9, Doi: 10.1007/s00214-015-1764-x
- 17) A. Pedone, **F. Muniz-Miranda**, A. Tilocca, M. C. Menziani, *The antioxidant properties of Ce-containing bioactive glass nanoparticles explained by Molecular Dynamics simulations*, Biomedical glasses, **2016**, 2, pp. 19-28, Doi: 10.1515/bglass-2016-0003
- 18) M. Muniz-Miranda, **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, *Raman and DFT study of methimazole chemisorbed on gold colloidal nanoparticles*, Physical Chemistry Chemical Physics, **2016**, 18, 5974-5980, Doi: 10.1039/C5CP07597

- 19) **F. Muniz-Miranda** (corresponding), M. C. Menziani, A. Pedone, *Influence of Silver Doping on the Photoluminescence of Protected Ag_nAu_{25-n} Nanoclusters: A Time-Dependent Density Functional Theory Investigation*, Journal of Physical Chemistry C, **2015**, 119, 10766-10775, Doi: 10.1021/acs.jpcc.5b02655
- 20) **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, G. Battistelli, M. Montalti, J. Bloino, V. Barone, *Benchmarking TD-DFT against Vibrationally Resolved Absorption Spectra at Room Temperature: 7-Aminocoumarins as Test Cases*, Journal of Chemical Theory and Computation, **2015**, 11, 5371–5384, Doi: 10.1021/acs.jctc.5b00750
- 21) **F. Muniz-Miranda**, M. C. Menziani, A. Pedone, *DFT and TD-DFT Assessment of the Structural and Optoelectronic Properties of Organic-Ag₁₄ Nanocluster*, Journal of Physical Chemistry A, **2015**, 119, 5088–5098, Doi:10.1021/jp507679f
- 22) **F. Muniz-Miranda**, *Modelling of spectroscopic and structural properties using molecular dynamics*, Firenze University Press (FUP), **2014**, e-ISBN: 978-88-6655-690-9, http://www.fupress.com/archivio/pdf/2880_6983.pdf
- 23) M. Muniz-Miranda, **F. Muniz-Miranda**, S. Caporali, *SERS and DFT study of copper surfaces coated with corrosion inhibitor*, Beilstein Journal of Nanotechnology, **2014**, 5, 2489-2497, Doi: 10.3762/bjnano.5.258
- 24) **F. Muniz-Miranda** (corresponding), M. C. Menziani, A. Pedone, *On the opto-electronic properties of phosphine and thiolate-protected undecagold nanoclusters*, Physical Chemistry Chemical Physics, **2014**, 16, 18749-18758, Doi: 10.1039/c4cp02506g
- 25) **F. Muniz-Miranda** (corresponding), M. C. Menziani, A. Pedone, *Assessment of Exchange-Correlation Functionals in Reproducing the Structure and Optical Gap of Organic-Protected Gold Nanoclusters*, Journal of Physical Chemistry C, **2014**, 118, 7532-7544, Doi: 10.1021/jp411483x
- 26) A. J. Clark, A. Cornia, F. Felluga, A. Gennaro, F. Ghelfi, A. A. Isse, M. C. Menziani, **F. Muniz-Miranda**, F. Roncaglia, D. Spinelli, *Arylsulfonyl Groups: the Best Cyclization Auxiliaries for the Preparation of ATRC γ -Lactams can be Acidolytically Removed*, European Journal of Organic Chemistry, **2014**, 30, 6734-6745, Doi: 10.1002/ejoc.201402769
- 27) M. Muniz-Miranda, B. Pergolese, **F. Muniz-Miranda**, S. Caporali, *SERS effect from Pd surfaces coated with thin films of Ag colloidal nanoparticles*, Journal of Alloys and Compounds, **2014**, 615, S357-S360, Doi: 10.1016/j.jallcom.2013.12.063
- 28) **F. Muniz-Miranda** (corresponding), M. C. Menziani, A. Pedone, *DFT on a Gold Nanocluster*, La Chimica e L'Industria, Anno XCVI, N.1- Gennaio/Febbraio, **2014**, pp. 51-52, ISSN: 2283-5458, http://chim.it/sites/default/files/chimind/pdf/2014_1_51_ca.pdf
- 29) **F. Muniz-Miranda**, M. Pagliai, G. Cardini, R. Righini, *Hydrogen-bond Effects in the Vibrational Spectra of 1,3-Propanediol in Acetonitrile: Ab initio and Experimental Study*, Journal of Chemical Physics, **2012**, 137, 244501, Doi: 10.1063/1.4770499
- 30) **F. Muniz-Miranda**, M. Pagliai, G. Cardini, R. Righini, *Bifurcated Hydrogen Bond in Lithium Nitrate Trihydrate Probed by ab Initio Molecular Dynamics*, Journal of Physical Chemistry A, **2012**, 116, 2147-2153, Doi: 10.1021/jp2120115

- 31) M. Pagliai, **F. Muniz-Miranda**, V. Schettino, M. Muniz-Miranda, *Competitive Solvation and Chemisorption in Silver Colloidal Suspensions*, Progress in Colloid and Polymer Science, **2012**, 139, 39-44, Doi: 10.1007/978-3-642-28974-3_8
- 32) **F. Muniz-Miranda**, M. Pagliai, G. Cardini, V. Schettino, *Wavelet Transform for Spectroscopic Analysis: Application to Diols in Water*, Journal of Chemical Theory and Computation, **2011**, 7, 1109-1118, Doi: 10.1021/ct100625e
- 33) V. Volkov, R. Chelli, **F. Muniz-Miranda**, R. Righini, *Structural Properties of a Membrane Associated Anchor Dipeptide*, Journal of Physical Chemistry B, **2011**, 115, 5294-5303, Doi: 10.1021/jp109284z
- 34) M. Pagliai, **F. Muniz-Miranda**, G. Cardini, R. Righini, V. Schettino, *Spectroscopic properties with a combined approach of ab initio molecular dynamics and wavelet analysis*, Journal of Molecular Structure, **2011**, 993, 438-442, Doi: 10.1016/j.molstruc.2011.02.007
- 35) M. Muniz-Miranda, M. Pagliai, **F. Muniz-Miranda**, V. Schettino, *Raman and computational study of solvation and chemisorption of thiazole in silver hydrosol*, Chemical Communications, **2011**, 46, 3138-3140, Doi: 10.1039/c0cc05217e
- 36) M. Pagliai, **F. Muniz-Miranda**, G. Cardini, R. Righini, V. Schettino, *Hydrogen Bond Dynamics of Methyl Acetate in Methanol*, Journal of Physical Chemistry Letters, **2010**, 1, 2951-2955, Doi: 10.1021/jz10109

RIASSUNTO DELL'ATTIVITÀ DI RICERCA SCIENTIFICA

LENS – Università di Firenze (1-1-2010 – 15-3-2013)

Durante il mio corso di dottorato ho studiato le proprietà vibrazionali delle molecole mediante la dinamica molecolare Car-Parrinello, insieme alla trasformazione "wavelet". Quest'ultima è una trasformata integrale che consente una localizzazione ottimale del segnale in spazi sia di frequenza sia di tempo. In questo modo, è possibile seguire l'evoluzione temporale della risposta vibrazionale di una molecola, ad esempio mediante la funzione di auto-correlazione della velocità, ottenuta mediante dinamica molecolare.

Ho applicato metodi di analisi temporale della frequenza a vari sistemi molecolari che sono tutti caratterizzati dalla presenza di legami a idrogeno, ottenendo correlazioni dirette tra proprietà strutturali e vibrazionali. In questo campo, ho studiato lo scambio di legami a idrogeno in sistemi di acqua confinata, fornendo informazioni sul suo meccanismo.

In collaborazione con il Dipartimento di Chimica dell'Università di Firenze, mi sono interessato anche all'interpretazione computazionale dei dati SERS (surface-enhanced Raman scattering) per molecole adsorbite su nanoparticelle di metalli nobili (argento, oro, rame) mediante l'approccio DFT, al fine di identificare le specie adsorbite ed il loro orientamento rispetto al substrato, così come la natura dei siti attivi di superficie ed il tipo d'interazione che si instaura tra legante e metallo. Tale collaborazione è proseguita anche negli anni a seguire.

Università di Modena e Reggio Emilia - UniMORE (1-4-2013 – 15-4-2017)

Come assegnista di ricerca del Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche di UniMORE, ho lavorato allo studio computazionale di nanocluster di oro e di argento, sotto la supervisione del Prof. Alfonso Pedone e della Prof.ssa Maria Cristina Menziani. Le nanoparticelle metalliche funzionalizzate trovano ampie applicazioni in nanomedicina, optoelettronica e sensoristica, specialmente quelli formati con oro e argento, che sono i più promettenti per le loro proprietà ottiche.

È stato notato che i "band-gap" di questi nanosistemi sono inversamente correlati alle dimensioni dei cluster; piccole particelle ("nanocluster") hanno band gap nell'ordine di 1-3 eV, con perdita di parte delle loro proprietà metalliche.

Ho eseguito analisi comparative di calcoli DFT su nanocluster di oro e argento costituiti da un nucleo di 11-25 atomi di metallo protetti da fosfine e/o tioli, al fine di identificare i funzionali di scambio e correlazione in grado di riprodurre correttamente strutture e band gap dei nanocluster, le cui proprietà ottiche ho simulato adottando l'estensione "time-dependent" (TD-DFT).

Questi calcoli mi hanno permesso di studiare nanocluster misti Au/Ag ("nanoleghe"). Una procedura sintetica è stata scoperta per un'intera famiglia di questi sistemi, contenente un nucleo stechiometrico $\text{Au}_{25-n}\text{Ag}_n$, con n numeri interi compresi tra 13 e 9. Un esempio di questa famiglia (con nuclei $\text{Au}_{12}\text{Ag}_{13}$ e $\text{Au}_{13}\text{Ag}_{12}$) mostra una resa di fluorescenza oltre 200 volte maggiore di altre miscele con stechiometria diversa [Angew. Chem. Int. Ed. 2014, 53, 2376-2380]. Ho scoperto che queste proprietà sono legate alla natura dell'atomo centrale del cluster: se si tratta di un atomo d'oro, la fluorescenza decresce, mentre quando l'atomo centrale è argento la fluorescenza aumenta drasticamente. Tale comportamento è correlato alla natura del primo stato eccitato (S_1), che si trova principalmente sull'atomo centrale quando questo è argento, mentre è diffuso su tutti gli atomi di metallo se l'atomo centrale è oro. Nel primo caso, lo stato S_1 è "bright" e questo influenza la risposta di fluorescenza, mentre questo stato è "dark" se l'atomo centrale è d'oro. Le mie previsioni computazionali [J. Phys. Chem. C 2015, 119 (19), 10766-10775] sono state confermate dopo due mesi da misure spettroscopiche ultraveloci [J. Phys. Chem. C 2015, 119 (32), 18790-18797] da parte di un gruppo di ricerca indipendente.

Inoltre, ho studiato mediante simulazioni di dinamica molecolare le possibilità di cattura di CO_2 da parte di differenti minerali e le proprietà antiossidanti delle nanoparticelle di vetro bioattive, così come le proprietà spettroscopiche di nanoparticelle plasmoniche (con dimensioni tra 10-50 nm) funzionalizzate con molecole organiche mediante approccio DFT, al fine di valutare le loro prestazioni come biosensori e dispositivi catalitici.

École nationale supérieure de Chimie de Paris (1-6-2016 – 30-6-2016)

Come Visiting Scholar presso *École Nationale Supérieure de Chimie de Paris - Chimie ParisTech*, Parigi (Francia), ho svolto nel mese di giugno 2016 attività di ricerca nel gruppo del Prof. Carlo Adamo, su nanocluster di rame mediante calcoli semiempirici di tipo DFT-B.

Università di Gent - Belgio (15-5-2017 – 31-12-2018).

Il gruppo di ricerca della Prof.ssa Veronique Van Speybroeck presso il Center for Molecular Modeling (CMM) dell'Università di Gent (Belgio) si concentra sulla modellazione di trasformazioni complesse in materiali nanoporosi quali zeoliti, strutture metallo-organiche (MOF) e strutture covalenti organiche (COF) al fine di ottenere una visione chimico-fisica delle reazioni chimiche e delle trasformazioni di fase. A tale scopo viene impiegato un insieme di tecniche di modellazione, basate su metodi come DFT o campi di forza derivati da primi principi. In particolare, io ho studiato le strutture elettroniche dei materiali COF e dei complessi metallici, da utilizzare come efficaci catalizzatori fotoredox. A tal fine, mi sono occupato di questi argomenti: (1) simulazioni delle strutture e degli spettri ottici dei complessi di Ru(II) a livelli di teoria DFT e TD-DFT, nel vuoto e come parte di strutture organiche covalenti (COF); (2) indagine computazionale sul legame tra cationi Ir e COF mediante DFT e metodi semi-empirici; (3) analisi DFT della stabilità relativa di sistemi metallo-organici (MOF) contenenti Ce e Zr, e sviluppo dei campi di forza ad essi relativi.

A questo proposito, ho già pubblicato tre articoli sul *Journal of Catalysis*, *Journal of Materials Chemistry A*, *Journal of Physical Chemistry A*. Ho anche inviato altri due articoli per la pubblicazione alla rivista *Applied Catalysis B: Environmental* ed alla rivista *Advanced Functional Materials*, intitolati rispettivamente "Elucidating the Promotional Effect of a Covalent Triazine Framework in Aerobic Oxidation" ed "Ir(III) Complex Tethered to a Bipyridine Covalent Triazine

Framework: A Heterogeneous Catalyst that Outperforms its Homogeneous Counterpart”, sempre in collaborazione con ricercatori stranieri.

Sono stato invitato a tenere una conferenza all’università di Gent dal titolo: “Computational investigation of vibrational and UV-Vis spectra in molecular and metal systems”, ho partecipato al Simposio in onore del Premio Nobel Roald Hoffmann “*Chemical Bonding in the 21st Century*” (Royal Academy of Belgium for Science and Art, Brussels -28-5-2018) ed ho presentato a settembre 2018 una mia comunicazione orale dal titolo “Computational UV-vis spectroscopy” al Simposio “*Modeling nanoporous materials at the nanoscale*”, presso l’Università di Utrecht (Paesi Bassi). Tre mie comunicazioni sono state presentate al Meeting “*Computational Spectroscopy: bridging theory and experiment*” (Settembre 2018, Como, Italia), alla *6th International Conference on Metal-Organic Frameworks* (Dicembre 2018, Auckland, Nuova Zelanda) ed alla *MOFSIM 2019 Conference* (Aprile 2019, Gent, Belgio).

Ho svolto anche attività didattica integrativa in lingua inglese per il corso “*Molecular Structure*”, oltre che essere co-tutore di due tesi di laurea.

École nationale supérieure de Chimie de Paris (1 Febbraio 2019 – fino ad oggi)

Come ricercatore del CNRS (Centre National de la Recherche Scientifique) presso l’Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris, mi sto occupando dei metodi di “embedding” elettronico nei calcoli sugli stati eccitati di cristalli molecolari.

Come attività didattica in qualità di Ricercatore in Chimica Fisica ho tenuto il corso di Chemical Bonding (20 ore complessive, in lingua inglese) per gli studenti del terzo anno della laurea in Ingegneria Chimica (programma del corso: ione He⁺ ed atomo He, teoria delle perturbazioni, metodo variazionale, spin, operatori di momento angolare, seconda quantizzazione, metodo di Hartree Fock, metodo di Huckel).

Nel luglio 2019 ho presentato una mia comunicazione dal titolo “Modeling aggregation effects on UV-Vis spectra of dyes: Pigment Red 179 as case study” alla *18th International Conference on Density Functional Theory and its Applications*, Alicante (Spagna).

Data

3-8-2019

Luogo

Firenze