Curriculum Vitae Studiorumque
di Francesco Muniz Miranda

Luogo e data di nascita

**********/1983

Attuale posizione

Ricercatore a tempo determinato di tipo B (RTD-B), SSD Chimica-Fisica (CHIM/02)

Afferenza

Dipartimento di Scienze Chimiche e Geologiche (DSGC), Università degli Studi di Modena e Reggio Emilia (UNIMORE), Via G. Campi 103, 41125, Modena

Altri dati

Telefono di ufficio: *+39 059 2058647*
Email (work): francesco.munizmiranda@unimore.it
Email (home): **********
Website: https://personale.unimore.it/rubrica/dettaglio/fmunizmi
ORCID: https://orcid.org/my-orcid?orcid=0000-0002-7614-2326

Istruzione e formazione

- Dottorato di Ricerca Internazionale (Ph.D.) in "Spettroscopia Atomica e Molecolare" presso il "Laboratorio Europeo di Spettroscopia Non-lineare" (LENS) e l'Università degli Studi di Firenze (UNIFI), con una tesi dal titolo "*Modelling of spectroscopic and structural properties using molecular dynamics*", sotto la supervisione del Professore Emerito Vincenzo Schettino (CHIM/02) e del Professor Roberto Righini (CHIM/02).
  Il LENS è un centro di ricerca internazionale presso UNIFI ma dotato di ampia autonomia statuaria ed amministrativa, in quanto istituito appositamente da una legge italiana (n° 37 del 1991).
  Il coordinatore del dottorato era il Professor Francesco Saverio Pavone (UNIFI, FIS/03).
  Ciclo: XXV
  Il reviewer internazionale che ha valutato la mia tesi è stato il Professor Claus Jørgen Nielsen della *Universitetet i Oslo* (Norvegia).
  La commissione internazionale davanti alla quale ho difeso la tesi era composta dai professori:
  prof. Francesco S. Cataliotti (UNIFI), FIS/03,
  prof. Paolo Foggi (Università di Perugia), CHIM/02
  prof. Federico Moran (*Universidad Complutense de Madrid*),
  prof.ssa Ana Isabel Cremades Rodriguez (*Universidad Complutense de Madrid*).

  Ho difeso la tesi con esito positivo il 15 marzo 2013.

- Laurea Specialistica in Chimica (classe 62/S) presso UNIFI, con una tesi dal titolo "*Spectral Analysis with Wavelet Transform in Molecular Dynamics*" sotto la supervisione del Professor Vincenzo Schettino (CHIM/02).
  Mi sono laureato il 28 settembre 2009. Voto: 110 & lode.

- Laurea in Chimica (1° livello, classe 21) presso UNIFI, con una tesi dal titolo "*Studio Computazionale di Fasi Condensate dell'Azoto*", sotto la supervisione del Professor Gianni Cardini (CHIM/02). Mi sono laureato il 23 aprile 2007. Voto: 110.

- Diploma di Liceo Scientifico, "Leonardo da Vinci", Firenze. Giugno 2002. Voto 100/100.

Posizioni lavorative di ricerca in istituzioni accademiche

- Da Gennaio 2010 a Dicembre 2012 ho usufruito di borsa ministeriale per lo svolgimento del dottorato di ricerca presso LENS/UNIFI.
  Nel concorso pubblico per le borse di dottorato in "Spettroscopia Atomica e Molecolare" del XXV ciclo, presso LENS/UNIFI, sono risultato idoneo col voto più alto pari a 114/120.

- Da Aprile 2013 a Marzo 2016. *Assegnista di ricerca* presso UNIMORE. Supervisor: Dr. Alfonso Pedone (CHIM/03, poi CHIM/02)

- Da Aprile 2016 ad Aprile 2017. *Assegnista di ricerca* presso UNIMORE. Supervisor: Prof Dr. Alfonso Pedone (CHIM/02)

- Da Maggio 2017 a Dicembre 2018. *Postdoctoral fellow* presso *Universiteit Gent* (UGent) a Ghent, in Belgio. Supervisor: Prof. Dr. Veronique Van Speybroeck

- Da Febbraio 2019 a Luglio 2020. "*Chercheur*" in "*Chimie physique*" presso CNRS (*Centre National de la Recherche Scientifique*) a Parigi (Francia). Supervisor: Dr. Ilaria Ciofini

- Da Settembre 2020 a Ottobre 2021. *Ricercatore a tempo determinato di tipo A* (RTD-A) su progetto, presso POLITO (Politecnico Universitario di Torino, Italia), Dipartimento di Scienza Applicata e Tecnologia (DISAT), SSD CHIM/02

- Dal 1° Novembre 2021 (contratto in corso, scadenza ottobre 2024): *Ricercatore a tempo determinato di tipo B* (RTD-B) presso UNIMORE, DSCG, SSD CHIM/02

Affiliazioni a società scientifiche e college di dottorato

- Membro del collegio dei docenti del Dottorato di Ricerca "*Models and Methods for Material and Environmental Sciences*" di UNIMORE – DSCG (dall'anno accademico 2022/2023, cicli 38° e 39°).

- Membro della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana (SCI) dal 2013 in poi, tessera 19074.
- Membro della Divisione di Chimica Fisica della SCI dal 2020 in poi.
- Sono stato membro di ACS (American Chemical Society), card n. 31771560, divisione "*Physical Chemistry*", negli anni 2018 e 2019.
- Sono stato membro della Divisione di Chimica per le Tecnologie della SCI nell'anno 2021.

Organizzazione di convegni scientifici

- Membro del Comitato Organizzatore del Congresso Europeo di Spettroscopia Molecolare EUCMOS XXX, 2010, Firenze, Italia
  https://db.bio-m.org/upload/kalender/5859/programma_EUCMOS_GISR.pdf
- Ho partecipato all'organizzazione del workshop Winter Modeling 2014 (13-14 Marzo 2014) presso l'Università di Modena e Reggio Emilia, di cui peraltro ho anche realizzato l'illustrazione della locandina.
  https://web.archive.org/web/20230609072442/https://www.dscg.unimore.it/site/home/dipartimento/archivio-eventi/promozione/articolo1006025337.html
- Ho partecipato all'organizzazione del workshop "*Journée Chimie Théorique, Modelisation et Simulation*" il 6 Febbraio 2020 presso il Chimie ParisTech
  https://jctmsifn.sciencesconf.org/?forward-action=index&forward-controller=index&lang=en
- Membro del Comitato Organizzatore del VII Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (SCI), 2022, Modena, Italy.
  https://www.soc.chim.it/it/node/2853

Visiting scholarship all'estero

Sono stato "visiting scientist" presso *École Nationale Supérieure de Chimie de Paris* (ENSCP) - *Chimie Paristech*, Paris (France) durante giugno 2016 (mese intero)

Finanziamenti e progetti di ricerca

→ Come PI, Vice-PI o responsabile di unità locale:

- Progetto PRIN (Progetto di rilevante interesse nazionale) da titolo "*Enzylearning*". Call PRIN 2022, come vice-PI e responsabile di unità locale UNIMORE.
- Bando interno UNIMORE: fondo FAR di Dipartimento DSCG/UNIMORE per la ricerca Anno 2023, Linea Post Dottorato, come PI.
- Bando interno UNIMORE: fondo FAR di Dipartimento DSCG/UNIMORE per la ricerca Anno 2022, come PI.

- Nell'anno 2014 sono stato responsabile, in qualità di PI, del progetto sulla simulazione di nano-particelle di oro, affidatomi dal Consorzio Interuniversitario CINECA: AUNANMR-HP10CJ027S – 2014 su base competitiva. I risultati di queste ricerche sono documentati in oltre cinque articoli pubblicati.

Attività come reviewer di riviste scientifiche

- *The Journal of Physical Chemistry*, *ACS Nano*, *Accounts of Chemical Research*, *Inorganic Chemistry*, *ACS Omega* (American Chemical Society)
- *Physical Chemistry Chemical Physics*, *Chemical Communications*, *RSC Advances* (Royal Society of Chemistry)
- *Theoretical Chemistry Accounts* (Springer)
- *Chemical Engineering Journal*, *Journal of Materials Research and Technology*, *Vibrational Spectroscopy*, *Computational and Theoretical Chemistry*, *Journal of Molecular Structure*, *Thin Solid Films*, *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, *Results in Optics* (Elsevier)
- *Journal of Raman Spectroscopy*, *Chem Phys Chem* (Wiley)
- *Scientific Reports* (Nature Portfolio)
- *International Journal of Modern Physics B* (World Scientific)
- *Materials*, *Nanomaterials*, *Metals*, *Applied Sciences*, *Inorganics*, *Molecules*, *Coatings*, *Sensors* (MDPI)
- *Polycyclic Aromatic Compounds* (Taylor & Francis)

Principali collaborazioni

Prof. Dr. Maria Cristina Menziani, UNIMORE
Email: mariacristina.menziani@unimore.it
Prof. Dr. Alfonso Pedone, UNIMORE
Email: alfonso.pedone@unimore.it

Prof. Dr. Veronique Van Speybroeck, UGent
Email: veronique.vanspeybroeck@ugent.be

Prof. Dr. Carlo Adamo, *École nationale supérieure de chimie de Paris* (Chimie Paristech)
Email: carlo-adamo@chimie-paristech.fr

Dr. Ilaria Ciofini, "directeur de recherche" del CNRS
(*Centre national de la recherche scientifique*)
Email: ilaria.ciofini@chimieparistech.psl.eu

Premi

- 2018: Premio "Eolo Scrocco" della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana (SCI).
  https://www.soc.chim.it/sites/default/files/Comunicato_Premi_2018.pdf

- 2014: La mia tesi di dottorato è stata premiata con pubblicazione a cura della casa editrice FUP (Firenze University Press) all'interno dell'iniziativa "Migliore tesi di Dottorato" – UNIFI.
  https://www.fupress.com/autori/muniz-miranda-francesco/134220
  La mia tesi è stata segnalata in modo speciale nello *speech* di apertura dell'anno accademico del professor emerito Luigi Lotti (riportato al seguente weblink: https://issuu.com/comunicazione-unifi/docs/cerimonie_accademiche_2013-2014_f846d44721585a)

Presenza mediatica online

- Il premio "Eolo Scrocco" della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana (SCI) è stato menzionato sul magazine online di UNIFI destinato a raccontare le ricerche accademiche degli *alumni*:
  http://www.unifimagazine.it/riconoscimento-giovane-studioso-fiorentino/

unifimagazine RACCONTARE LA RICERCA PERSONE E STORIE UNIVERSITÀ E SOCIETÀ COS'È

10 ottobre 2018

Premio Scrocco a giovane studioso fiorentino

Da parte della Società della Chimica Italiana per "l'originale contributo allo studio computazionale delle proprietà dei cluster metallici".

Società Chimica Italiana
Divisione di Chimica Teorica e Computazionale
La Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della SCI
Conferisce il
PREMIO EOLO SCROCCO 2018
a
Francesco Muniz-Miranda
Trieste, 21 settembre 2018
Il Presidente
Prof. Vincenzo Barone

Riconoscimento a giovane studioso fiorentino da parte della Società Chimica Italiana.

Si tratta di Francesco Muniz Miranda, dottore di ricerca Unifi, che ha ricevuto il premio Eolo Scrocco nel corso del quinto congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale che si è tenuto presso l'Università di Trieste.

- Il mio talk presso la Scuola Normale Superiore (SNS) di Pisa **"***DFT Strategies to Approach Gold and Silver Nanoclusters*" in occasione del secondo meeting "*Avogadro Colloquia*" del Settembre 2013 è stato ripreso e reso disponibile come video su YouTube dal canale della SNS all'indirizzo: https://www.youtube.com/watch?v=u17McGXJ98E

Supervisione di tesi di laurea, dottorato e di assegnisti di ricerca

- 2016: co-tutor della tesi di laurea in chimica di Federica Lodesani, UNIMORE.
- 2017-2018: supervisione degli studenti di dottorato Kim Phan e Liesbeth De Brucker (UGent).
- 2019-2020: supervisione della tesi di Master di Léon Huet (Chimie ParisTech, Paris).
- 2022-2023: supervisione della tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche di Francesco Fontanive (UNIMORE).
- 2023: supervisione della tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche di Lorenzo Occhi (UNIMORE).
- 2024-in corso: supervisione della tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche di Stefano Righi (UNIMORE).
- 2024-in corso: dal 16 maggio 2024 sono tutor di un assegnista di ricerca (Dr. Alessandro Berselli) su fondi PRIN e da cofinanziamento UNIMORE per la ricerca Anno 2023, Linea Post Dottorato.

I lavori di tesi di F.Lodesani, L. De Brucker, L. Huet, F.Fontanive e L.Occhi sono tutti stati pubblicati con me come primo autore o autore corrispondente.

Sono attualmente contro-relatore della tesi di laurea magistrale in Scienze Chimiche di Brando Scannavini (UNIMORE), relatore Prof. Dr. Francesco Faglioni.

Attività d'insegnamento

→ **Come assegnista / post-doc**

- 2014/2015, 2015/2016, 2016/2017: Assistenza all'insegnamento con seminari e laboratorio di calcolo per l'insegnamento "*Chimica Fisica e Spettroscopia Molecolare*" nel corso di Laurea Magistrale in Chimica (tenuto dalla professoressa Maria Cristina Menziani), UNIMORE per un totale di 30 ore, settore CHIM/02.
- 2015/2016: Assistenza di laboratorio per l'insegnamento "*Chimica Fisica I*" nel corso di Laurea in Chimica (tenuto dal professor Marco Borsari), UNIMORE per un totale di 10 ore, settore CHIM/02.
- 2017/2018: Assistenza all'insegnamento del corso "*Molecular Structure*" (in Inglese), per studenti del Master in *Physics and Engineering* presso *Universiteit Gent* (UGent, Belgio), con lezioni addizionali ed uso di software, per un totale di 10 ore frontali.
- 2019, 2020: Insegnamento del corso "*Chemical Bonding*" (16 ore di lezione, di cui 12 ore nel 2019 e solo 4 ore nel febbraio-marzo 2020 prima dell'emergenza da SARS-CoV-2, in Inglese), per studenti del terzo anno di Bachelor of Science in Chemical Engineering, presso *l'École Nationale Supérieure de Chimie de Paris*, in veste di "Chercheur" in "Chimie physique".
- 2019: assistenza per il laboratorio del corso "*Molecular Modeling*" (8 ore di lezione, in Inglese), per studenti del corso di Laurea in "Ingénierie chimique", presso l'École Nationale Supérieure de Chimie de Paris, in veste di "Chercheur" in "Chimie physique".

→ **Come RTD-B presso UNIMORE**

- Dal A.A. 2021-2022 in poi: Insegnamento del corso "*Chimica Fisica e Spettroscopia Molecolare-Modulo A*" per la Laurea Magistrale in Chimica presso l'Università di Modena e Reggio Emilia (UNIMORE, Italia), SSD CHIM/02.
  Il corso (Modulo A) consta di 6 CFU, composto da 40 ore di lezioni frontali e 20 ore di insegnamento laboratoriale.
- Dal A.A. 2023-2024 in poi: Insegnamento del corso "*Metodi chimico-fisici per la Caratterizzazione di Materiali*" per la Laurea in Chimica presso l'Università di Modena e Reggio Emilia (UNIMORE, Italia), SSD CHIM/02.
  Il corso consta di 6 CFU, composto da 44 ore di lezioni frontali e 8 ore di insegnamento laboratoriale.

Abilitazione scientifica nazionale (ASN) e altre certificazioni

❖ Ho conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale alle funzioni di professore universitario:

✓ di Prima Fascia nel Settore Concorsuale 03/A2 - MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE, con validità dal 12/12/2023 al 12/12/2034 (al momento dell'abilitazione ero RTD-B presso UNIMORE);

- ✓ di Prima Fascia nel Settore Concorsuale 03/B1 - FONDAMENTI DELLE SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI, con validità dal 06/12/2023 al 6/12/2034 (al momento dell'abilitazione ero RTD-B presso UNIMORE);

- ✓ di Prima Fascia nel Settore Concorsuale 02/B2 - FISICA TEORICA DELLA MATERIA, con validità dal 11/05/2021 al 11/05/2032 (al momento dell'abilitazione ero RTD-A presso PoliTO);

- ✓ di Seconda Fascia nel Settore Concorsuale 03/A2 - MODELLI E METODOLOGIE PER LE SCIENZE CHIMICHE, con validità dal 18/09/2019 al 18/09/2030 (al momento dell'abilitazione ero *chercheur* presso CNRS);

- ✓ di Seconda Fascia nel Settore Concorsuale 02/B2 - FISICA TEORICA DELLA MATERIA, con validità dal 06/09/2019 al 06/09/2030 (al momento dell'abilitazione ero *chercheur* presso CNRS);

- ✓ di Seconda Fascia nel Settore Concorsuale 03/B1 - FONDAMENTI DELLE SCIENZE CHIMICHE E SISTEMI INORGANICI, con validità dal 07/08/2018 al 07/08/2029 (al momento dell'abilitazione ero *post-doctoral fellow* presso UGent).

- ❖ Al 17 Maggio 2024, da simulazione effettuata su piattaforma IRIS – UNIMORE, risulto superare tutti e 3 i valori soglia in entrambi i periodi di riferimento 2008/2013/2018-2023 e 2009/2014/2019-2024 per professore sia di 1a che di 2a fascia dei settori concorsuali 03/A2, 03/B1 e 02/B2, nei quali sono abilitato.
  Per brevità, riporto di seguito la tabella per il solo settore concorsuale 03/A2, nel solo periodo più recente (2009*/2014/2019-2024).

UNIMORE
UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MODENA E REGGIO EMILIA

ASN 2023-2025

	Valore	INDICATORE	Soglia	Stato
SECONDA FASCIA	21	Numero articoli ultimi 5 anni	16	✓
	759	Numero citazioni ultimi 10 anni	359	✓
	18	H index ultimi 10 anni	12	✓
	La simulazione ASN per il ruolo di docente di Seconda Fascia ha esito positivo?			SI

	Valore	INDICATORE	Soglia	Stato
PRIMA FASCIA	41	Numero articoli ultimi 10 anni	33	✓
	929	Numero citazioni ultimi 15 anni	825	✓
	19	H index ultimi 15 anni	17	✓
	La simulazione ASN per il ruolo di docente di Prima Fascia ha esito positivo?			SI

* Faccio notare che il mio primo articolo risale al 2010, *non* al 2009.

❖ Sono risultato idoneo (3° in graduatoria) al concorso per l'assunzione come Ricercatore CNR a tempo pieno e indeterminato (III livello) presso l'Istituto di Scienze e Tecnologie Molecolari – Sezione di Perugia (Bando 367.19 RIC), il 10/07/2017.

❖ Ho superato l'esame di stato di abilitazione alla professione di chimico, sezione A "senior" dei laureati specialistici/magistrali, con voto 203 su 240, dicembre 2009, presso UNIFI.
Presidente della commissione: prof. Stefano Chimichi (ordinario CHIM/06).
Il tasso di superamento dell'esame di abilitazione nella sessione di novembre/dicembre 2009 è stato inferiore al 30% dei candidati.

Descrizione dell'attività di ricerca

→ Come RTD-B presso UNIMORE (per maggiori dettagli: vedere relazione su periodo da RTD-B)

Dal 1° novembre 2021, sono ricercatore a tempo determinato presso UNIMORE nel SSD CHIM/02, e mi sono occupato prevalentemente di:

- Spettri Raman Intensificati dalla Superficie (SERS): Utilizzo calcoli di chimica quantistica per studiare come le superfici metalliche nanostrutturate intensifichino il segnale Raman, permettendo di analizzare singole molecole attraverso una doppia intensificazione— elettromagnetica e chimica. Questo permette di esplorare fenomeni come il trasferimento di carica e la geometria di interazione molecolare.

- Legami ad Idrogeno e Blue-Shift nei Gruppi Nitrile: Ho ripreso studi del mio dottorato sul comportamento unico dei gruppi nitrile nei legami ad idrogeno, che contrariamente al comune *red-shift*, mostrano un *blue-shift*. Questo studio estende la comprensione delle interazioni nitrile con ioni metallici e ha implicazioni in biochimica.

- Idrolisi di Vetri Boratici: Ho analizzato i meccanismi di reazione dei vetri boratici in diverse soluzioni, contribuendo a superare la mancanza di dati sperimentali attraverso metodi quantistici, in collaborazione con due laureandi.

- Depolimerizzazione Enzimatica: Recentemente, ho iniziato a esplorare i meccanismi di depolimerizzazione catalizzati da enzimi tramite MD e QM/MM, nell'ambito del progetto PRIN 2022 "*Enzylearning*".

- Oltre a questi progetti principali, ho collaborato con altri accademici su vari studi, tra cui il *modeling* termodinamico di complessi di ferro (collaboratori UNIMORE di altri SSD) e il *modeling* classico dell'acqua (collaboratori POLITO), nonché il *modeling* della formazione di framework organometallici con collaboratori di UGent e di *Universiteit Utrecht*.

→ **Precedente al contratto RTD-B presso UNIMORE**

La mia attività di ricerca precedente si è svolta all'interno della chimica fisica computazionale, applicata principalmente a problemi spettroscopici, di stabilità termodinamica, e strutturali.

1. La mia attività triennale come dottorando (2010-2012) presso UNIFI / LENS ha riguardato lo sviluppo e l'applicazione di metodi di indagine tempo-frequenza per correlare tra loro dati spettroscopi e strutturali provenienti da traiettorie di simulazione di dinamica molecolare ab initio (Car-Parrinello). I sistemi studiati spaziano da problemi di solvatazione in solventi polari/apolari e protici, a segnali vibrazionali dati dall'interazione con molecole di acqua strutturale incluse in cristalli idrati. Lo scopo era chiarire l'origine di segnali infrarossi e Raman soggetti a red/blueshift per interazione con l'ambiente.
2. A quest'ultimo riguardo, ho iniziato una attività di spiegazione di spettri Raman intensificati da superficie (SERS) tramite *modeling* computazionale ab initio che continua ininterrottamente da allora.
3. Nella mia ricerca post-dottorale mi sono invece dedicato prevalentemente al *modeling* di spettroscopia UV-Vis con metodi basati sulla teoria del funzionale della densità dipendente dal tempo (TD-DFT) in sistemi che spaziano dai *nanocluster* metallici protetti da ligandi organici a *covalent organic framework* (COF) a molecole organiche soggette a meccanocromismo (variazione dell'assorbimento Uv-Vis in funzione dello stato di aggregazione). Ho altresì adottato approcci DFT per confermare/interpretare/predire la stabilità relativa di conformeri e la stechiometria di composti di coordinazione di centri metallici, attività iniziata in Belgio e che continua tutt'ora.
4. Durante il mio periodo di ricerca in Francia ho sviluppato metodi di analisi e quantificazione del trasferimento di carica in transizioni UV-Vis, metodi che poi ho applicato in tutt'altro contesto, come per esempio all'interpretazione dell'effetto SERS, e che continua tutt'ora.
5. Ho applicato metodi basati sulla dinamica molecolare classica per studiare cristalli molecolari con parziale disordine orientazionale, sistemi polimerici amorfi come le membrane di Nafion, ed infine attualmente per lo studio di enzimi con attività depolimerizzante verso membrane di plastica, per il progetto PRIN 2022 di cui sono co-PI.
   Per lo studio di questi ultimi sto ho usato anche metodi multiscala QM/MM appresi in Francia (seppur diretti, in quel caso, a tutt'altra applicazione, vedasi il meccanocromismo).

Didattica integrativa e 3ª missione

- "Notte della ricerca" di UNIMORE Settembre 2022 - Modena
- "Scuola di chimica di base" di UNIMORE Settembre 2022, 4 ore, Modena
- "Scuola di chimica di base" di UNIMORE Febbraio 2023, 4 ore, Modena
- "Corso di aggiornamento per docenti delle scuole secondarie di 2° grado 2023/2024", Febbraio 2024, 4 ore, titolo: *"Orbitali: introduzione ai concetti di chimica quantistica"*

Altri riconoscimenti ed attività varie

- Quando ero studente della laurea triennale in Chimica presso UNIFI sono stato ringraziato nel corpo del testo dell'edizione italiana e nella prefazione di quella inglese del manuale di Meccanica Quantistica del Prof. Dr. Kenichi Konishi, FIS/02, Università degli Studi di Pisa:
  Meccanica quantistica: nuova introduzione, Pisa University Press, ISBN-10: 8867410385
  Quantum Mechanics: A New Introduction, Oxford University Press, ISBN-10: 0199560277
  Nello specifico, ho portato alla sua attenzione alcuni riferimenti bibliografici da cui desumere la (mancata) analogia tra parentesi di Poisson classiche {…} e commutatori quantistici […]- in coordinate generalizzate.
- Il DSCG di UNIMORE mi ha dichiarato "cultore della materia" nel SSD CHIM02 nel periodo 2014-2016
- L'editore MDPI mi ha offerto di fare da "Guest Editor" e/o "Topic Editor" per le riviste Nanomaterials (IF 4.3), Materials (IF 3.0), Inorganics (2.6), Applied Sciences (IF 2.5).
- Sono stato eletto rappresentante degli assegnisti di ricerca nel consiglio del DSCG di UNIMORE per un biennio.

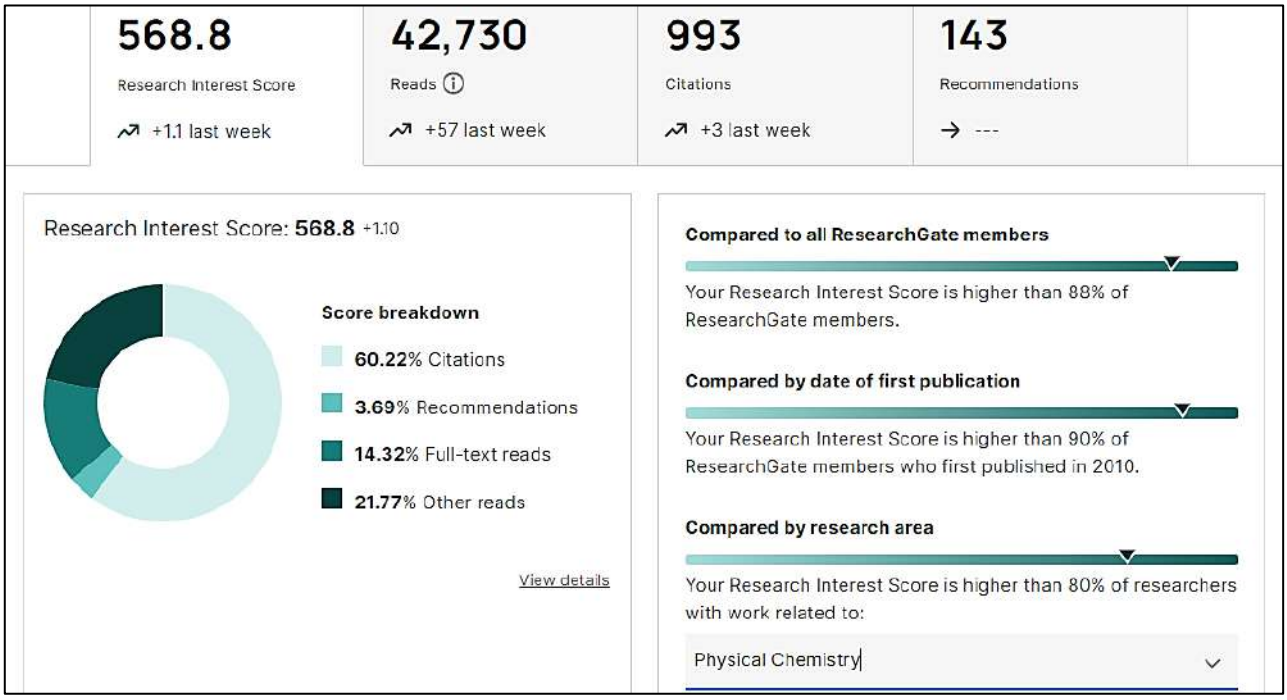
Scuole e workshop

- "Theory, Applications and Tools for Multiscale Kinetic Modeling, 13-15 Luglio 2020, Politecnico Milano (*online*)
- "MSSC2018-Ab initio Modelling in Solid State Chemistry", Settembre 2018, Torino. (1 settimana)
- "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 (1 settimana).
- "Calculation of Solid-State NMR and EPR Parametres Using the GIPAW Method", CECAM Tutorial, ETH, Zurigo (Svizzera), 2013 (1 settimana).
- "European Summer School of Scientific Visualization", CINECA, Bologna, 2012 (1 settimana).
- "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 (1 settimana).
- "Computational spectroscopy using Quantum Espresso and related codes", CECAM Tutorial, SISSA, Trieste, 2010 (1 settimana).
- XIX "Summer School of Parallel Programming", CINECA, Bologna, 2010 (1 settimana).
- "Frontiers in Atomic Physics", Firenze, 9-10 Aprile 2010.

Indicatori bibliometrici e produzione scientifica totale

Numero totale di pubblicazioni scientifiche: 51 (Scopus)
Numero totale di citazioni: 929 (Scopus), 1088 (Google Scholar)
h-index: 19 (Scopus), 21 (Google Scholar)

ResearchGate riporta la seguente analisi bibliometrica (https://www.researchgate.net/profile/Francesco-Muniz-Miranda/stats).



La mia attività di ricerca comincia nel 2010 con l'inizio del dottorato presso il LENS/UNIFI.
Tengo a far notare che l'unico anno solare in assenza di pubblicazioni scientifiche (2013) ha coinciso con la fine del dottorato (UNIFI) e l'inizio del mio primo contratto da assegnista (UNIMORE) su temi sempre di chimica computazionale ma abbastanza diversi da quelli precedenti.
Il marcato calo di produttività nell'anno solare 2023 coincide con l'essermi fatto carico per la prima volta di un monte ore di didattica frontale pari a 112 (con creazione da zero di un nuovo corso da 6 CFU), quasi il doppio dello standard per un RTD-B (60 ore).

Si può osservare che:

- Sono 1° autore di 18 articoli su riviste internazionali con IF, ed unico autore di 1 di questi; sono inoltre *corresponding author* di 9 articoli su riviste internazionali con IF.
  Sono complessivamente "autore di riferimento" (1° autore e/o *corresponding author*) di 19 articoli su riviste internazionali con IF: questo ammonta ad oltre il 35% della mia produzione scientifica complessiva (51 "prodotti della ricerca").

- Sono "autore di riferimento" (nello specifico, primo autore) del 1° e del 2° dei miei articoli più citati. Gli articoli di cui sono "autore di riferimento" (1° autore e/o *corresponding author*) sono stati citati 372 volte, e questo ammonta ad oltre il 40% delle citazioni totali ricevute dalla mia produzione scientifica complessiva (929 citazioni): pertanto, gli articoli di cui "autore di riferimento" sono mediamente *più citati* dei "prodotti della ricerca" di cui sono invece uno dei co-autori.

- Quanto scritto sopra è in linea con le metriche di Scopus (vedere figura a destra), le quali nel periodo standard 2013-2022 riportano che il FWCI (Field-Weighted Citation Impact) degli articoli di cui sono *first author* è di 1.14 mentre per gli articoli di cui sono *co-author* è inferiore, e pari a 1.09.
  In ogni caso, entrambe le metriche FWCI sono > 1; ricordo che "*A FWCI of* ***more than 1*** *indicates higher than expected citations based on the global average for similar publications*."

La fonte dei dati dei precedenti tre paragrafi è il *database* Scopus, aggiornato al 17 maggio 2024.

Articoli scientifici in riviste internazionali con impact factor (IF aggiornato al 2022)

1) **F. Muniz-Miranda**, L. Occhi, F. Fontanive, M.C. Menziani, A. Pedone, *Quantum-Chemistry Study of the Hydrolysis Reaction Profile in Borate Networks: A Benchmark*. Molecules **2024**, 29, 1227, Doi: 10.3390/molecules29061227
Luogo di pubblicazione: Basilea (Svizzera).
Editore: MDPI
Impact Factor: 4.600

2) A. Gualtieri, M. Cocchi, **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, E. Castellini, L. Strani, *Iron Nuclearity in Mineral Fibres: Unravelling the Catalytic Activity for Predictive Modelling of Toxicity*. Journal of Hazardous Materials. **2024**, 469, 134004, Doi: 10.1016/j.jhazmat.2024.134004
Luogo di pubblicazione: Amsterdam (Paesi Bassi)
Editore: Elsevier
Impact Factor: 13.6

3) L. Rigamonti, L. Marchi, V. Fiorini, S. Stagni, S. Zacchini, D. Pinkowicz, K. Dziedzic-Kocurek, A. Forni, **F. Muniz Miranda**, R. Mazzoni, *Trapping an unprecedented octacoordinated iron (ii) complex with neutral bis-tetrazolylpyridyl ligands and solvent molecules*. Dalton Transactions, **2024**, 53, 3490-3498, Doi: 10.1039/D3DT04026G
Luogo di pubblicazione: Cambridge (U.K.)
Editore: Royal Society of Chemistry
Impact Factor: 4.0

4) M. Muniz-Miranda, **F. Muniz-Miranda**, M.C. Menziani, A. Pedone, *Can DFT Calculations Provide Useful Information for SERS Applications?*, Molecules, **2023**, 28, 575, Doi: 10.3390/molecules28020573
Luogo di pubblicazione: Basilea (Svizzera).
Editore: MDPI
Impact Factor: 4.600

5) **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, M.C. Menziani, M. Muniz-Miranda, *DFT and TD-DFT Study of the Chemical Effect in the SERS Spectra of Piperidine Adsorbed on Silver Colloidal Nanoparticles*, Nanomaterials, **2022**, 12, 2907, Doi: 10.3390/nano12172907
Luogo di pubblicazione: Basilea (Svizzera).
Editore: MDPI
Impact Factor: 5.719

6) R. Capelli, **F. Muniz-Miranda**, G.M. Pavan, *Ephemeral ice-like local environments in classical rigid models of liquid water*, The Journal of Chemical Physics, **2022**, 156, 214503, Doi: 10.1063/5.0088599
Luogo di pubblicazione: College Park (Maryland, USA)
Editore: American Institute of Physics
Impact Factor: 3.488

7) M. Filez, C. Caratelli, M. Rivera-Torrente, **F. Muniz-Miranda**, M. Hoek, M. Altelaar, A. J.R. Heck, V. Van Speybroeck, B.M. Weckhuysen, *Elucidation of the pre-nucleation phase directing metal-organic framework formation*, Cell Reports Physical Science, **2021**, 2, 100680, Doi: 10.1016/j.xcrp.2021.100680
Luogo di pubblicazione: Amsterdam (Paesi Bassi)
Editore: Elsevier
Impact Factor: 8.9

8) **F. Muniz-Miranda**, *Computational Approaches to the Electronic Properties of Noble Metal Nanoclusters Protected by Organic Ligands*, Nanomaterials, 2021, 11, 2409 (pp. 1-12), Doi: 10.3390/nano11092409
Luogo di pubblicazione: Basilea (Svizzera).
Editore: MDPI
Impact Factor: 5.719

9) C. Micheletti, P. Minei, M. Carlotti, V. Mattoli, **F. Muniz-Miranda,** A. Perfetto, I. Ciofini, C. Adamo, G. Ruggeri, A. Pucci, *Mechanochromic LLDPE Films doped with NIR Reflective Paliogen Black,* Macromolecular Rapid Communications, **2021**, 42, 2000426 (pp. 1-8), Doi: 10.1002/marc.202000426
Luogo di pubblicazione: Weinheim (Germania).
Editore: John Wiley & Sons
Impact Factor: 5.734

10) L. Huet, A. Perfetto, **F. Muniz-Miranda** (corresponding), M. Campetella, C. Adamo, I. Ciofini, *General density-based index to analyze charge transfer phenomena: from models to butterfly molecules,* Journal of Chemical Theory and Computation, **2020**, 16, 4543–4553, Doi: 10.1021/acs.jctc.0c00296
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 6.006

11) S. M. J. Rogge, P. G. Yot, J. Jacobsen, **F. Muniz-Miranda**, S. Vandenbrande, J. Gosch, V. Ortiz, I. E. Collings, S. Devautour-Vinot, G. Maurin, N. Stock, V. Van Speybroeck, *Charting the Metal-Dependent High-Pressure Stability of Bimetallic UiO-66 Materials*, ACS Materials Letters, **2020**, *2*, 438-445, Doi: 10.1021/acsmaterialslett.0c00042
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 8.312

12) S. Abednatanzi, P. G, Derakhshandeh, P. Tack, **F. Muniz-Miranda**, Y.Y. Liu, J. Everaert, M. Meledina, F. Vanden Bussche, L. Vincze, C. V. Stevens, V. Van Speybroeck, H. Vrielinck, F. Callens, K. Leus, P. Van Der Voort, *Elucidating the Promotional Effect of a Covalent Triazine Framework in Aerobic Oxidation,* Applied Catalysis B: Environmental, **2020**, *269*, 118769, Doi: 10.1016/j.apcatb.2020.118769
Luogo di pubblicazione: Amsterdam (Paesi Bassi).
Editore: Elsevier
Impact Factor: 19.503

13) M. Muniz-Miranda, A. Zoppi, **F. Muniz-Miranda**, N. Calisi, *Palladium Oxide Nanoparticles: Preparation, Characterization and Catalytic Activity Evaluation,* Coatings **2020**, *10*, 207 (pp. 1-10), Doi: 10.3390/coatings10030207

Luogo di pubblicazione: Basilea (Svizzera).
Editore: MDPI
Impact Factor: 2.881

14) M. Muniz-Miranda, **F. Muniz-Miranda**, E. Giorgetti, *Spectroscopic and Microscopic Analyses of Fe_3O_4/Au Nanoparticles Obtained by Laser Ablation in Water*, Nanomaterials, **2020**, *10*, 132 (pp. 1-14), Doi: 10.3390/nano10010132
Luogo di pubblicazione: Basilea (Svizzera).
Editore: MDPI
Impact Factor: 5.076

15) **F. Muniz-Miranda,** P. Minei, L. Contiero, F. Labat, I. Ciofini, C. Adamo, F. Bellina, A. Pucci, *Aggregation effects on pigment coatings: Pigment Red 179 as case study*, ACS Omega, **2019**, *4,* 20315-20323, Doi: 10.1021/acsomega.9b02819
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 3.512

16) A. Zoppi, S. Caporali, **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, M. Muniz-Miranda, *Adsorption of Trans-Zeatin on Laser-Ablated Gold Nanoparticles for Transport into Plant Cells and Growth Stimulation*, ACS Applied Nano Materials **2019**, *2*, 7319−7327, Doi: 10.1021/acsanm.9b01801
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 5.097

17) I. Lopez-Tocon, S. Valdivia, J. Soto, J. C. Otero, **F. Muniz-Miranda**, M. C. Menziani, M. Muniz-Miranda, *A DFT Approach to the Surface-Enhanced Raman Scattering of 4-Cyanopyridine Adsorbed on Silver Nanoparticles,* Nanomaterials, **2019**, *9*, 1211; Doi: 10.3390/nano9091211
Luogo di pubblicazione: Basilea (Svizzera).
Editore: MDPI
Impact Factor: 5.076

18) **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, **2019**, *123*, 6854−6867, Doi: 10.1021/acs.jpca.9b05216
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 2.781

19) 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
Luogo di pubblicazione: Basilea (Svizzera).

Editore: MDPI
Impact Factor: 3.576

20) 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
Luogo di pubblicazione: Londra (UK).
Editore. Royal Society of Chemistry
Impact Factor: 12.732

21) 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
Luogo di pubblicazione: Amsterdam (Paesi Bassi).
Editore: Elsevier
Impact Factor: 7.920

22) 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
Luogo di pubblicazione: Amsterdam (Paesi Bassi).
Editore: Elsevier
Impact Factor: 6.707

23) **F. Muniz-Miranda**, 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
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 3.512

24) C. Gellini, **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, M. Muniz-Miranda, *SERS active Ag–SiO_2 nanoparticles obtained by laser ablation of silver in colloidal silica*, Beilstein Journal of Nanotechnology, **2018**, *9*, 2396-2404, Doi: 10.3762/bjnano.9.224
Luogo di pubblicazione: Francoforte (Germania).
Editore: Beilstein Institute
Impact Factor: 3.649

25) 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

Luogo di pubblicazione: Chichester (UK).
Editore: Wiley-VCH
Impact Factor: 2.109

26) 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
Luogo di pubblicazione: Losanna (Svizzera).
Editore: Frontiers Media
Impact Factor: 3.515

27) **F. Muniz-Miranda**, 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
Luogo di pubblicazione: Amsterdam (Paesi Bassi).
Editore: Elsevier
Impact Factor: 4.098

28) 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*, Journal of Physical Chemistry C, **2017**, *121*, 3597-3606, Doi: 10.1021/acs.jpcc.6b11628
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 4.126

29) **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*, Journal of Physical Chemistry C, **2016**, *120*, 26945-26954, Doi: 10.1021/acs.jpcc.6b09983
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 4.126

30) 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
Luogo di pubblicazione: Varsavia (Polonia).
Editore: De Gruyter
Impact Factor: 2.286

31) **F. Muniz-Miranda**, 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
Luogo di pubblicazione: Berlino (Germania).

Editore: Springer
Impact Factor: 1.702

32) 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/C5CP07597A
Luogo di pubblicazione: Londra (UK).
Editore. Royal Society of Chemistry
Impact Factor: 3.676

33) **F. Muniz-Miranda**, D. Presti, M. C. Menziani, A. Pedone, *Electronic and optical properties of the Au_{22}[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
Luogo di pubblicazione: Berlino (Germania).
Editore: Springer
Impact Factor: 1.702

34) **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
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 6.006

35) **F. Muniz-Miranda**, M. C. Menziani, A. Pedone, *DFT and TD-DFT Assessment of the Structural and Optoelectronic Properties of Organic-Ag_{14} Nanocluster*, Journal of Physical Chemistry A, **2015**, 119, 5088–5098, Doi:10.1021/jp507679f
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 2.781

36) **F. Muniz-Miranda**, 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
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 4.126

37) 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
Luogo di pubblicazione: Francoforte (Germania)

Editore: Beilstein Institute
Impact Factor: 3.649

38) 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
Luogo di pubblicazione: Amsterdam (Paesi Bassi).
Editore: Elsevier
Impact Factor: 5.315

39) 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
Luogo di pubblicazione: Chichester (UK).
Editore: Wiley-VCH
Impact Factor: 3.021

40) **F. Muniz-Miranda**, 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
Luogo di pubblicazione: Londra (UK).
Editore. Royal Society of Chemistry
Impact Factor: 3.676

41) **F. Muniz-Miranda**, 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
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 4.126

42) **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
Luogo di pubblicazione: College Park (Maryland, USA)
Editore: American Institute of Physics
Impact Factor: 3.488

43) M. Pagliai, **F. Muniz-Miranda**, V. Schettino, M. Muniz-Miranda, *Competitive Solvation and Chemisorption in Silver Colloidal Suspensions*, Progress in Colloid and Polymer Science (Supplement of Colloid & Polymer Science), **2012**, 139, 39-44, Doi: 10.1007/978-3-642-28974-3_8
Luogo di pubblicazione: Berlino (Germania)
Editore: Springer
Impact Factor: 1.931

44) **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
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 2.781

45) 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
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 2.991

46) 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
Luogo di pubblicazione: Amsterdam (Paesi Bassi).
Editore: Elsevier
Impact Factor: 3.196

47) **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
Luogo di pubblicazione: Washington (USA).
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 6.006

48) 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
Luogo di pubblicazione: Londra (UK)
Editore. Royal Society of Chemistry
Impact Factor: 6.222

49) 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/jz1010994
Luogo di pubblicazione: Washington (USA)
Editore: American Chemical Society
Impact Factor: 6.475

Sono stato "caldamente" ringraziato per le "fruttuose discussioni" negli *Acknowledgements* dell'articolo:

- M. Turelli, I. Ciofini, Q. Wang, A. Ottochian, F. Labat, C. Adamo, "*Organic compounds for solid state luminescence enhancement/aggregation induced emission: a theoretical perspective*", Phys. Chem. Chem. Phys., **2023**, 25, 17769-17786.

Capitoli di libri di editori internazionali

1) D. Presti**, F. Muniz-Miranda,** F. Tavanti, A. Pedone, *Structure Analysis and Properties Calculations*, in "Atomistic Computer Simulations of Inorganic glasses: Methodologies and Applications", ISBN: 978-111893907-9, 978-111893906-2, Wiley, **2022**, pp. 89–122, Doi: 10.1002/9781118939079.ch4
Luogo di pubblicazione: Chichester (UK).
Editore: Wiley-VCH

2) 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, ISBN: 978-3-319-68052-1, Doi: 10.1007/978-3-319-68053-8_3, Capitolo 3, pp. 55-87, **2017**
Luogo di pubblicazione: Cham (Svizzera).
Editore: Springer

Monografie e articoli in riviste senza impact factor

1) **F. Muniz-Miranda**, *Modelling of spectroscopic and structural properties using molecular dynamics*, Firenze University Press (FUP), **2014**, e-ISBN: 978-88-6655-690-9, DOI: 10.36253/978-88-6655-690-9,
http://www.fupress.com/archivio/pdf/2880_6983.pdf
Luogo di pubblicazione: Firenze (Italia)
Editore: Firenze University Press

2) **F. Muniz-Miranda**, *Metal Clusters: a TD-DFT Study* (*Cluster Metallici: uno studio TD-DFT*), La Chimica & 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
Luogo di pubblicazione: Milano (Italia)
Editore: Società Chimica Italiana

Comunicazioni a congressi e conferenze

1) **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, M.C. Menziani, *QM Study of energy barriers of breaking networks: hydrolysis of borate networks*, DFT 2024 Paris, 20th International Conference on Density Functional Theory and its Applications, August 25 to 30, 2024.

Contributo sottomesso ed accettato come comunicazione orale per il congresso che si terrà in agosto 2024 ***prossimo venturo***.

2) **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, M.C. Menziani *Combined computational and experimental study on the blue-shift of C≡N stretching*, XLIX Congresso di Chimica Fisica (SCI), Torino 4-7 settembre **2023**, Abstract ID.T4007 https://www.cdcf49.unito.it

Contributo sottomesso ed accettato come comunicazione orale (riportato nel libro degli abstract) ma relazione ***non*** tenuta per concomitante urgenza medica familiare.

3) **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, M.C. Menziani, M. Muniz-Miranda, *Chemical effect in the SERS spectra of piperidine adsorbed on silver colloidal nanoparticles*, Workshop della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale (SCI), Firenze, 8 aprile **2022**.
https://soc.chim.it/it/node/2803

4) **F. Muniz-Miranda**, A. Pedone, M.C. Menziani, M. Muniz-Miranda, *On the use of simple computational models to interpret SERS spectra of adsorbed molecules: case studies*, XLVIII Congresso di Chimica Fisica (SCI), Genova, 4-7 luglio **2022**.
https://www.xlviiicncfge.unige.net/

5) J. Everaert, N. Tahir, **F. Muniz-Miranda,** P. Tack, T. Heugebaert, K. Leus, L. Vincze, C. 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*, Symposium "Chemical Research in Flanders" (CRF-2), Blankenberge (Belgio), Ottobre 2019.

6) **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.

7) 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.

8) 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.

9) 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.

10) **F. Muniz-Miranda**, V. Van Speybroeck, *Computational UV-vis spectroscopy*, Simposio "Modeling of nanoporous materials at the nanoscale", Utrecht University, Utrecht (Paesi Bassi), Settembre 2018.

11) 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**.**

12) **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.

13) 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.

14) **F. Muniz-Miranda**, M. C. Menziani, A. Pedone, *Structural and optical properties of gold and silver nanoclusters*, WATOC Conference, Santiago (Cile), Ottobre 2014.

15) **F. Muniz-Miranda**, M. C. Menziani, A. Pedone, *Simulating Ag-based nanoclusters at the quantum-chemical level*, 7th International Conference of Molecular Electronics (Elecmol7), Strasburgo (Francia), Agosto 2014.

16) **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 (Elecmol7), Strasburgo (Francia), Agosto 2014.

17) M. Muniz-Miranda, **F. Muniz-Miranda**, S. Caporali, *SERS and DFT study of copper surfaces coated with corrosion inhibitor*, 5th International Conference on Nanostructures SElf-Assembly (NANOSEA 2014), Marsiglia (Francia), Luglio 2014.

18) **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.

19) M. Muniz-Miranda, B. Pergolese, **F. Muniz-Miranda**, S. Caporali, *SERS effect from Pd surfaces coated with thin films of Ag colloidal nanoparticles*, 20th International Symposium on Metastable, Amorphous and Nanostructured Materials (ISMANAM 2013), Torino (Italia), Giugno-Luglio 2013.

20) 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.

21) 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.

22) **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.

23) 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.

In fede,

Francesco Muniz Miranda

Ph.D. in Spettroscopia Atomica e Molecolare

Modena, 17 maggio 2024