

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 CHIM/02 - Chimica Fisica presso il Dipartimento di Chimica,
(avviso bando pubblicato sulla G.U. n. 23 del 20/03/2020) Codice concorso 4279

Ciro Achille Guido

CURRICULUM VITAE

INFORMAZIONI PERSONALI (NON INSERIRE INDIRIZZO PRIVATO E TELEFONO FISSO O CELLULARE)

COGNOME	GUIDO
NOME	CIRO ACHILLE
DATA DI NASCITA	26/06/1983

E-mail: caguido@gmail.com; ciro.guido@unipd.it

Posizione attuale: assegnista di ricerca, Università di Padova.

- Titoli di ammissione alla procedura:

- 10/05/2019: **Abilitazione Scientifica Nazionale Italiana Professore di seconda fascia** (S. C. 03/A2)
- 20/09/2011: **Diploma di Perfezionamento (Ph.D.) in Chimica**, conseguito presso la **Scuola Normale Superiore** di Pisa, con voto **70/70 e lode**.
Titolo della tesi: "*TD-DFT and TD-DFT/PCM approaches to molecular electronic excited states in gas phase and in solution*".
Relatori: Prof. Jacopo Tomasi e Prof. Benedetta Mennucci.
Relatori esterni: Prof. Carlo Adamo e Prof. Eric Perpète.
Presidente: Prof. Vincenzo Barone.

- A. Organizzazione, direzione e coordinamento di centri o gruppi di ricerca nazionali e internazionali o partecipazione agli stessi e altre attività di ricerca quali la direzione o la partecipazione a comitati editoriali di riviste**- A1. Direzione di progetti di ricerca ottenuti su finanziamento:**

- **11/07/2017 - 10/07/2018. Vincitore del finanziamento LUMOMAT**: 1 anno, 60.000 euro di budget, finanziato da Région des Pays de la Loire (France) e Comunità Europea. Progetto "FC-PolResp", Co-P.I. : Dr. Ciro A. Guido e Prof. D. Jacquemin.
- **11/07/2016 - 10/07/2017. Vincitore del finanziamento LUMOMAT**: 1 anno, 60.000 euro di budget, finanziato da Région des Pays de la Loire (France) e Comunità Europea. Progetto "EE-Fate", Co-P.I. : Dr. Ciro A. Guido e Prof. D. Jacquemin.

- A2. Partecipazione a progetti di ricerca ottenuti su finanziamento:

- **01/10/2018 - 30/09/2020**. Progetto **PlasmoChem** finanziato dal MIUR, nell'ambito dei progetti **FARE**. P.I. Prof. Stefano Corni.
- **01/07/2014 - 30/06/2016**. Progetto **EnLight** finanziato dalla comunità europea, nell'ambito dei progetti **ERC – starting Grant**. P.I. Prof. Benedetta Mennucci.
- **01/09/2012 – 19/06/2014**. Progetto **Dinf DFT** finanziato dalla **Agenzia Nazionale della Ricerca Francese** (Project No.

ANR 2010 BLANC n. 0425). P.I. Prof. Pietro Cortona e Prof. Carlo Adamo.

- **01/05/2011 – 31/07/2012.** Progetto **132081** finanziato dalla **Swiss National Science Foundation**. P.I. Prof. Wanda Andreoni.

- A3. Attività di formazione o ricerca presso qualificati istituti italiani e stranieri:

- 01/10/2018 – in corso: **assegnista di ricerca presso il gruppo del Prof. S. Corni (MIUR FARE Plasmochem).**
- 11/07/2017 – 10/07/2018: **ricercatore postdoc senior presso CEISAM - Université de Nantes.**
- 11/07/2016 – 10/07/2017: **ricercatore postdoc senior presso CEISAM - Université de Nantes.**
- 01/07/2014 – 30/06/2016: **assegnista di ricerca presso il gruppo della Prof. B. Mennucci (ERC starting grant).** Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale, Università di Pisa, Italia.
- 01/09/2012 – 19/06/2014: **Ricercatore CNRS presso il gruppo del Prof. Pietro Cortona.**
- 01/05/2011 – 31/07/2012: **Ricercatore Postdoc presso il gruppo della Prof. Wanda Andreoni.** École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) – Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire.
- 01/01/2011 – 31/04/2011: **Borsa di studio e ricerca presso il gruppo della Prof. Benedetta Mennucci.** Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale – Università di Pisa.
- 25/08/2009 – 31/07/2010: **finanziamento Erasmus placement per la mobilità internazionale** degli studenti della Scuola Normale Superiore di Pisa. Studente Ph.D. in scambio presso il gruppo MSC (Modélisation de Systèmes Complexes) del Prof. Carlo Adamo e École Normale Supérieure de Paris. École Nationale Supérieure de Chimie de Paris-Chimie Paristech (Parigi, Francia)
- 01/01/2008 – 31/12/2010: **Perfezionando della Scuola Normale Superiore di Pisa e membro del gruppo PCM dei Professori Jacopo Tomasi e Benedetta Mennucci.** SNS e Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale – Università di Pisa.

- A4. Organizzazione di congressi e attività per la divulgazione scientifica (terza missione)

- **Workshop internazionale “EnLight Workshop 2016”**, Università di Pisa, 16/06/2016.
Comitato organizzatore:
Benedetta Mennucci
Ciro A. Guido
Stefano Caprasecca
Sandro Jurinovich
- **27/09/2016 “Bright, la Notte dei Ricercatori in Toscana”**, coordinatore per lo stand del gruppo Molecolab della Prof. B. Mennucci.

- A5. Attività di referee per riviste internazionali (peer-reviewed):

- The Journal of Physical Chemistry Letters
- The Journal of Chemical Physics
- Journal of Chemical Theory and Computation
- The Journal of Physical Chemistry A,B,C
- Journal of Computational Chemistry
- Physical Chemistry Chemical Physics
- Chemical Physics Letters
- Journal of Molecular Structure
- Theoretical Chemistry Accounts
- New Journal of Chemistry
- Scientific Reports

- B. Didattica, Didattica integrativa e servizio agli studenti

- B1. Didattica: corsi di laurea:

- A.A. 2015/2016: Esercitazioni di Laboratorio del corso di Chimica Fisica II, **Università di Pisa** (Prof. B. Mennucci): 36 ore di laboratorio, dal 12/04/2016 al 21/04/2016 e dal 10/05/2016 al 12/05/2016. (3 volte a settimana, 3 settimane, 4h per ogni lezione).
- A.A. 2015/2016: Esercitazioni di Laboratorio del corso di Modellistica Molecolare Di Biomolecole, **Università di Pisa** (Prof. B. Mennucci): 12 ore di laboratorio, dal 3/12/2014 al 10/12/2014. (3 lezioni, 4h per ogni lezione).
- A.A. 2014/2015: Esercitazioni di Laboratorio del corso di Chimica Fisica II, **Università di Pisa** (Prof. B. Mennucci): 36 ore di laboratorio, dal 18/03/2015 al 03/04/2015. (3 volte a settimana, 3 settimane, 4h di lezione).
- A.A. 2014/2015: Esercitazioni di Laboratorio del corso di Modellistica Molecolare Di Biomolecole, **Università di Pisa** (Prof. B. Mennucci): 12 ore di laboratorio, dal 3/12/2014 al 10/12/2014. (3 lezioni, 4h per ogni lezione).
- 2010/2011: Esercitatore e supervisore corso di Principi di Chimica Quantistica, **Scuola Normale Superiore di Pisa** (in collaborazione con il Prof. Ivo Cacelli). 24h di lezione
- 2009/2010 Esercitatore e supervisore corso di Principi di Chimica Quantistica, **Scuola Normale Superiore di Pisa** (in collaborazione con il Prof. R. Moccia). 24h di lezione

- B2. Didattica: Post laurea:

- A.A. 2015/2016: Ven 13/05/2016 14:30-16:30 (2:0 h) lezione: "Eccitazioni elettroniche e risposta del solvente" per il corso "Molecular Modeling di Sistemi Complessi", Università di Pisa (corso della Prof. Benedetta Mennucci).

- B3. Attività di supervisione e mentoring:

- 2018/2019: Assistenza alla supervisione della studentessa Giulia Dall'Osto, tesi di laurea, Università di Padova. Relatore Prof. S. Corni.
- 2017/2018: Assistenza alla supervisione della studentessa Ph.D. P. Verità, Università di Nantes (Francia). Relatore Prof. D. Jacquemin.
- 2015/2016: Assistenza alla supervisione della tesi di laurea dello studente Andrea Pasti, Università di Pisa. Relatrice Prof. B. Mennucci.

- C. Conseguimento di premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca. Sono considerate inoltre le partecipazioni in qualità di relatore a congressi e convegni di interesse nazionale e internazionale.

- C1. Fellowship e riconoscimenti:

- **07/09/2018. Fellowship Beatriz de Pinos**, finanziata dal Ministero dell'Istruzione e della Ricerca Spagnolo su fondi della Comunità Europea. 92000 euro di budget.
- **10/05/2019. Abilitazione Scientifica Nazionale Italiana Professore di seconda fascia** (S. C. 03/A2)
La commissione ha riconosciuto che il candidato presenta una maturità scientifica richiesta per le funzioni di professore di II fascia per il settore concorsuale 03/A2.
- **09/02/2018. Abilitazione Scientifica Nazionale Francese alla funzione di Maîtres de Conférences** (Insegnante-Ricercatore/Professore Associato). Qualifica numero: 14231260035D. Periodo 2018-2022.
La commissione ha riconosciuto che il candidato presenta una maturità scientifica richiesta per le funzioni di Maîtres de Conférences per la classe 31 (chimica teorica, fisica ed analitica).
- **07/02/2014. Abilitazione Scientifica Nazionale Francese alla funzione di Maîtres de Conférences** (Insegnante-Ricercatore/Professore Associato). Qualifica numero: 14231260035P. Periodo 2014-2018.
La commissione ha riconosciuto che il candidato presenta una maturità scientifica richiesta per le funzioni di Maîtres de Conférences per la classe 31 (chimica teorica, fisica ed analitica).

- C2. Relatore a congressi e convegni di interesse nazionale e internazionale:

1. **INVITED TALK.** "Simulating advanced excitation energy loss spectroscopies of molecular excitations", Workshop day: Giornata della Chimica Teorica, University of Padua, Padua (Italy). 25/06/2019
2. "Control of Coherences and Optical Responses of Pigment Protein Complexes by Plasmonic Nanoantennae", Plasmonica 2019, International Workshop on Plasmonics, Naples (Italy),

19/06/2019 - 21/06/2019.

3. **INVITED TALK.** "Excited State Gradients for a State-Specific Continuum Solvation Approach: a Lagrangian TDDFT Formulation and Implementation of VEM". Workshop: Journées Scientifiques SolvATE. 16/05/2018 – 18/05/2018.
4. **INVITED TALK.** "Polarizable schemes for simulating excited state processes in multichromophoric systems: from continuum to discrete environment description"
French Network of Theoretical Chemistry, annual day workshop of West-France.
Nantes (France), 10/11/2017.
5. "Excited State Gradients for a State-Specific Continuum Solvation Approach: a Lagrangian TDDFT Formulation and Implementation of VEM"
Coding in Solvation workshop (WATOC satellite meeting), Livorno, Italy, 22-25 August 2017.
6. "On the role of charge transfer states of LH2 system: a state-specific MMPol-TDDFT approach coupled to excitonic models."
DCTC 2015, Italian Chemical Society, Rome, Italy, 14-16 December 2015.
7. "Charge-transfer like excitations in solution: a critical assessment of TDDFT/Continuum Models", ACS Spring 2015 National Meeting, Denver, CO, 22-25 March 2015. Meeting Abstract 202, Volume 249.
8. **INVITED TALK.** "Charge-transfer like excitations in solution: a critical assessment of TDDFT/Continuum Models"
Solution for Solvation, International Workshop to Celebrate Jacopo Tomasi, Scuola Normale Superiore-CNR-Unipi, 31 August – 1 September 2014.
9. "Orbital based tools for TDDFT computational spectroscopy"
9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2014). Badajoz, 2 - 4 July 2014.
10. "Understanding molecular excitation character made simpler"
TD-DFT Conference, Université de Nantes, 23-26 April 2013.
11. "The time dependent problems in solvent model: the PCM point of view"
Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris – Paris, 24 November 2009.
12. "A systematic study of TD-DFT performance in the determination of excited state geometries and properties"
COTAW09, FUNDP - Namur (Belgium), 16-19 September 2009.

D. Competenze di attinenza al bando in oggetto:

- L'argomento principale della mia attività di ricerca presso il Dipartimento di Scienze Chimiche dell'Università di Padova è incentrato sulla riformulazione del problema della descrizione quantomeccanica di sistemi molecolari in presenza di un ambiente esterno polarizzabile e/o nanoparticelle metalliche in termini della teoria dei sistemi quantistici aperti. Più in particolare, sfruttiamo una formulazione tramite equazioni di Schrödinger stocastica nel caso non-Markoviano. Lo scopo principale è ottenere una formulazione coerente delle eccitazioni elettroniche molecolari in presenza di mezzi esterni anche nei casi di tempi molto brevi, per descrivere in maniera accurata le spettroscopie ultrafast.
- In collaborazione con il gruppo sperimentale di Vincenzo Grillo del CNR di Modena, abbiamo proposto un nuovo tipo di spettroscopia a perdita di energia elettronica, accoppiata al sorting del momento angolare orbitale degli elettroni scatterati per misurare la simmetria del potenziale di transizione molecolare durante le eccitazioni elettroniche. L'uso di un fascio annulare di elettroni permette di usare questa tecnica nel campo molecolare prevenendo il danneggiamento molecolare.
- Ho inoltre sviluppato competenze nell'ambito della modellizzazione di sistemi supra-molecolari di interesse biologico, tramite formulazioni di tipo eccitonico. In particolare ho lavorato allo sviluppo di modelli eccitonici da interfacciare a simulazioni di tipo QM/MM polarizzabili per descrivere processi di trasferimento di energia in sistemi pigmento-proteina, quali i complessi Light Harvesting in piante e batteri. Il modello eccitonico è stato inoltre esteso al calcolo di spettri ECD e implementato in un modulo python (EXAT) che permette il calcolo di proprietà eccitoniche a partire da risultati ottenuti tramite il software Gaussian (G09 e G16).

- Competenze Informatiche:

- Sistemi Operativi: GNU/Linux e UNIX per workstations, Apple IOS and MS Windows.
- Linguaggi di Programmazione: FORTRAN 77 and 95, gawk and bash scripting, elementi di Python.
- **12/11/18 -14/11/18 Corso Cineca: OpenMP and MPI for parallel computing**

- **19/11/18 - 21/11/18 Corso Cineca: Debugging and optimization for scientific computing.**
- Software per quantum chemistry and modeling: GAUSSIAN G09, GAMESS, GaussView, CPMD, AMBER e VMD.
Sviluppo ed implementazione di subroutines per GAUSSIAN G09 e G16.
- Altri software: Mathematica, Grace, Gnuplot, Origin, MS Office.

- Moduli computazionali sviluppati:

- **EXAT** (S. Jurinovich, L. Cupellini, C. A. Guido e B. Mennucci, Università di Pisa, 2014).
Modulo Python per il calcolo di proprietà eccitoniche. <https://molecolab.dcci.unipi.it/tools/gaussian-tools/>
- **MakeNTO** (L. Cupellini, S. Caprasecca e C. A. Guido, Università di Pisa, 2018).
Modulo Python per il calcolo di proprietà eccitoniche.
- **G09, development version I09**: implementazione del Vertical Excitation Method (VEM) e relativi gradienti analitici.
Collaborazione con Giovanni Scalmani, Gaussian Inc.

- Lingue:

- Italiano: madrelingua.
- Inglese: scritto e parlato.
- Francese: scritto e parlato.
- Spagnolo: conoscenza di base.

- Altre Informazioni Accademiche:

- **11/10/2007: Laurea Magistrale in Chimica – Curriculum Chimica-Fisica** conseguita presso l'Università di Pisa con voto **110/110 e lode**.
Titolo della tesi: *"Metodi Quantistici Per Il Calcolo Dello Scattering Raman Risonante Di Molecole In Soluzione"*.
Relatori: Prof. Jacopo Tomasi e Prof. Benedetta Mennucci.
- **21/10/2005: Laurea triennale in Chimica** conseguita presso l'Università di Pisa con voto **110/110 e lode**.
Titolo della tesi: *"Studio termodinamico delle interazioni polimero-tensioattivo in acqua"*. Relatore: Prof. Paolo Gianni.
- Corsi scientifici seguiti:
 - "Photophysics in Nanoscience 2007" tenuto dal Prof. Gregory D. Scholes (Università di Toronto, Canada), organizzato dalla "Scuola di dottorato Galileo Galilei" dell'Università di Pisa.
 - "Chimica Computazionale" tenuto dal Prof. Michele Parrinello. Voto 30/30. Scuola Normale Superiore di Pisa.
 - "Chimica Supramolecolare e Magnetochimica" tenuto dal Prof. Dante Gatteschi. Voto 28/30. Scuola Normale Superiore di Pisa.
 - "Metodi avanzati in Chimica Teorica" tenuto dal Prof. Renato Colle. Voto 29/30. Scuola Normale Superiore di Pisa.
 - "Molecular Modeling" tenuto dal Prof. Vincenzo Barone. Scuola Normale Superiore di Pisa.
 - "Hybrid Quantum Mechanics/Molecular Mechanics (QM/MM) Approaches to Biochemistry and Beyond" CECAM Workshop tenuto dai Professori Mauro Boero (Università di Strasbourg, Francia), Carme Rovira (Università di Barcelona, Spagna), Ari P. Seitsonen (Università di Zurigo, Svizzera) e Ivano Tavernelli (EPFL, Svizzera). Losanna, 11-15 Febbraio 2011.

- Collaborazioni (nazionali ed internazionali):

- Stefano Corni (Padua University, Italy)
- Benedetta Mennucci (Pisa University, Italy)
- Denis Jacquemin (Nantes University, France)
- Carlo Adamo (Chimie Paristech, France)
- Giovanni Scalmani (Gaussian Inc., U.S.A.)
- Carles Curutchet (Barcelona University, Spain)
- Pietro Cortona (École Centrale Paris, France)
- Xavier Blase (CNRS Grenoble, France)
- Jacob Kongsted (Copenhagen University, Denmark)

LISTA DELLE PUBBLICAZIONI TOTALI

30 totali: 29 articoli, 1 capitolo di un libro.

Citation Metrics

Web of Science: Ciro A. Guido - D-3533-2012

Sum of the Times Cited: **1220** by 973 articles.

Numero di citazioni escludendo autocitazioni del sottoscritto: 1136

Numero di citazioni escludendo autocitazioni del sottoscritto e di tutti i co-autori: 909

h-index: **16**

ResearcherID: D-3533-2012

[numero di citazioni per articolo]

Journal articles:

1. "An Open Quantum System Theory for Polarizable Continuum Models "
C.A.Guido, M. Rosa, R. Cammi and S. Corni, J. Chem. Phys. 2020, accepted, DOI: 10.1063/5.0003523
2. "On the description of the environment polarization response to electronic transitions"
C. A. Guido* and S. Caprasecca, Int. J. Quantum Chem. DOI: 10.1002/qua.25711 (2018). **INVITED PERSPECTIVE**
***Corresponding Author. [6 citations]**
3. "First-principles investigation of the double ESIPT process in a thiophene-based dye"
P. V  rit  , C. A. Guido and D. Jacquemin, Phys. Chem. Chem. Phys., 2019, Advance Article DOI: 10.1039/C8CP06969G
Journal Impact Factor: 4.449 **[6 citations]**
4. "Coupling to Charge Transfer States Is the Key to Modulate the Optical Bands for Efficient Light-Harvesting in Purple Bacteria"
L. Cupellini, S. Caprasecca, C. A. Guido, F. M  h, T. Renger and B. Mennucci. J. Phys. Chem. Lett. 9, 6892 (2018). **[13 citations]**
5. "Excited State Dipole Moments in Solution: Comparison Between State-Specific and Linear-Response TD-DFT Values"
C. A. Guido*, B. Mennucci, G. Scalmani and D. Jacquemin, J. Chem. Theory Comput., 14, 1544 (2018). **[17 citations]**
***Corresponding Author.**
6. "Density-dependent formulation of dispersion interactions in hybrid QM/MM models"
C. Curutchet, L. Cupellini, J. Kongsted, S. Corni, L. Frediani, A. Hykkerud Steindal, C. A. Guido, G. Scalmani, B. Mennucci, J. Chem. Theory Comput., 14, 1671 (2018).
Journal Impact Factor: 5.301 **[10 citations]**
7. "The Bethe-Salpeter formalism with polarizable continuum embedding: combining state-specific and linear-response features"
I. Duchemin, C. A. Guido, D. Jacquemin and X. Blase, Chem. Sci. 9, 4430 (2018).
Journal Impact Factor: 9.211 **[9 citations]**
8. "EXAT: EXcitonic Analysis Tool"
S. Jurinovich, L. Cupellini, C. A. Guido and B. Mennucci, J. Comput. Chem. 39, 279 (2017).
Journal Impact Factor: 3.229 **[8 citations]**
9. "Metrics for Molecular Electronic Excitations: A Comparison between Orbital- and Density-Based Descriptors"
M. Savarese, C. A. Guido, E. Br  mond, I. Ciofini and C. Adamo, J. Phys. Chem A 121, 7543 (2017).
Journal Impact Factor: 2.883 **[17 citations]**
10. "Excited State Gradients for State-Specific Continuum Solvation Models: the Vertical Excitation Model within a Lagrangian TDDFT formulation"
C. A. Guido*, G. Scalmani, B. Mennucci and D. Jacquemin, J. Chem Phys. 146, 204106 (2017).
***Corresponding Author.**
Journal Impact Factor: 2.894 **[11 citations]**

11. "The Control of Coherences and Optical Responses of Pigment-Protein Complexes by Plasmonic Nanoantennae."
S. Caprasecca, C. A. Guido, and B. Mennucci. *J. Phys. Chem. Lett.*, 7, 2189 (2016).
Journal Impact Factor: 8.539 [8 citations]
12. "Circularly Polarized Luminescence from Axially Chiral BODIPY DYEmers: an Experimental and Computational Study"
F. Zinna, T. Bruhn, C. A. Guido, J. Ahrens, M. Bröring, L. Di Bari, and G. Pescitelli. *J. Chem. Eur. J.* 22, 16089 (2016).
Selected as cover article.
Journal Impact Factor: 5.771 [50 citations]
13. "An Ab Initio Description of the Excitonic Properties of LH2 and Their Temperature Dependence"
L. Cupellini, S. Jurinovich, M. Campetella, S. Caprasecca, C. A. Guido, S. M. Kelly, A. T. Gardinier, R. Cogdel, and B. Mennucci. *J. Phys. Chem. B*, 120, 11348 (2016).
Journal Impact Factor: 3.187 [33 citations]
14. "Electronic Excitations in Solution: The Interplay between State Specific Approaches and a TD-DFT Description"
C. A. Guido*, D. Jacquemin, C. Adamo and B. Mennucci. *J. Chem. Theory Comput.* 11, 5782 (2015).
***Corresponding Author.** Top 20 monthly most read articles.
Journal Impact Factor: 5.301 [71 citations]
15. "Negative Solvatochromism of Push-pull Biphenyl Compounds: A Theoretical Study"
S. Meng, S. Caprasecca, C. A. Guido, S. Jurinovich, and B. Mennucci. *Theor. Chem. Acc.* 134, 150 (2015).
Journal Impact Factor: 1.806 [1 citation]
16. "Circular Dichroism and TDDFT Investigation of Chiral Fluorinated ArylBenzyl Sulfoxides"
R. Berardozzi, C. A. Guido, M. A. M. Capozzi, C. Cardellicchio, L. Di Bari and G. Pescitelli. *Eur. J. Org. Chem.* 25/2015, 5554 (2015). [11 citations]
Journal Impact Factor: 3.068
17. "The role of magnetic-electric coupling in the exciton-coupled ECD spectra. The case of bis-phenanthrenes."
S. Jurinovich, C. A. Guido, T. Bruhn, G. Pescitelli and B. Mennucci, *Chem. Comm.* 51, 10498 (2015).
Journal Impact Factor: 6.567 [23 citations]
18. "Plasmon Enhanced Light-Harvesting: Multiscale Modeling of the FMO Protein Coupled With Gold Nanoparticles".
O. Andreussi, S. Caprasecca, L. Cupellini, I. Guarnetti Prandi, C. A. Guido, S. Jurinovich, L. Viani, and B. Mennucci,
J. Phys. Chem. A 119, 5197 (2015).
Journal Impact Factor: 2.883 [12 citations]
19. "Effective Electron Displacements: a tool for TD-DFT Computational Spectroscopy"
C. A. Guido*, P. Cortona and C. Adamo, *J. Chem. Phys.* 140, 104101 (2014).
***Corresponding Author.**
Journal Impact Factor: 2.894 [43 citations]
20. "On the metric of charge transfer molecular excitations: a simple chemical descriptor"
C. A. Guido*, P. Cortona, B. Mennucci and C. Adamo, *J. Chem. Theory Comput.* 9, 3118 (2013).
***Corresponding Author.** Top 20 monthly most read articles
Journal Impact Factor: 5.301 [169 citations]
21. "Benchmarking TD-DFT for excited state geometries of organic molecules in gas-phase and in solution"
C. A. Guido*, S. Knecht, J. Kongsted and B. Mennucci, *J. Chem. Theory Comput.* 9, 2209 (2013).
***Corresponding Author.** Top 20 monthly most read articles
Journal Impact Factor: 5.301 [68 citations]
22. "One Third: a new recipe for the PBE0 paradigm"
C. A. Guido, E. Brémond, C. Adamo and P. Cortona *J. Chem. Phys.* 138, 021104 (2013).
Top 20 most read communications of 2013
Journal Impact Factor: 2.894 [64 citations]
23. "The Fate of a Zwitterion in Water from Ab-Initio Molecular Dynamics: Monoethanolamine (MEA)-CO₂"
C. A. Guido, F. Pietrucci, G. A. Gallet and W. Andreoni, *J. Chem. Theory Comput.* 9, 28 (2013).
Top 20 monthly most read articles
Journal Impact Factor: 5.301 [38 citations]

24. "Practical computation of electronic excitation in solution: vertical excitation model"
A. V. Marenich, C. J. Cramer, D. G. Truhlar, C. A. Guido, B. Mennucci, G. Scalmani and M. J. Frisch, Chemical Science, 2, 2143 (2011).
Journal Impact Factor: 8.668 **[138 citations]**

25. "On the TD-DFT Accuracy in Determining Single and Double Bonds in Excited-State Structures of Organic Molecules"
C. A. Guido*, D. Jacquemin, C. Adamo and B. Mennucci, J. Chem. Phys. A, 114, 13402 (2010).
***Corresponding Author.** Top 20 monthly most read articles
Journal Impact Factor: 2.883 **[61 citations]**

26. "A fully automated implementation of VPT2 Infrared intensities "
V. Barone, J. Bloino, C. A. Guido and F. Lipparini, Chem. Phys. Lett. 496, 157 (2010).
Top 20 monthly most read articles
Journal Impact Factor: 1.860 **[99 citations]**

27. "Planar vs. twisted intramolecular charge transfer mechanism in Nile Red: new hints from theory"
C. A. Guido, B. Mennucci, D. Jacquemin and C. Adamo, Phys. Chem. Chem. Phys. 12, 8016 (2010).
Journal Impact Factor: 4.449 **[83 citations]**

28. "Structures and properties of electronically excited chromophores in solution from the polarizable continuum model coupled to the Time-Dependent Density Functional Theory "
B. Mennucci, C. Cappelli, C. A. Guido, R. Cammi and J. Tomasi, J. Phys. Chem. A 113, 3009 (2009).
Journal Impact Factor: 2.883 **[136 citations]**

29. "Calorimetric investigation of the aggregation of lithium perfluorooctanoate on poly(ethyleneglycol) oligomers in water "
P. Gianni, L. Bernazzani, C. A. Guido and V. Mollica, THERMOCHIMICA ACTA, 451, 73 (2006).
Journal Impact Factor: 1.938 **[10 citations]**

○ **Book chapters:**

1. "Computational studies of environmental effects and their interplay with experiment"

B. Mennucci, S. Caprasecca and C. A. Guido, Advances in Physical Organic Chemistry, Volume 50, 2016, Elsevier. DOI: 10.1016/bs.apoc.2016.04.001. **[4 citations]**

Comunicazioni tramite poster:

1. Ciro A. Guido, Enzo Rotunno, Matteo Zangrognini, Vincenzo Grillo, Stefano Corni
"Simulating advanced excitation energy loss spectroscopies of molecular excitations" ISTCP-X, Tromsø (Norway), 11-17 July 2019.
2. "Excited State Gradients for a State-Specific Continuum Solvation Approach: a Lagrangian TDDFT Formulation and Implementation of VEM"
WATOC 2017, Munich (Germany), 27 August - 1 September 2017.
3. Guido Ciro Achille, Jurinovich Sandro, Loco Daniele, Pescitelli Gennaro and Mennucci Benedetta
"A QM excitonic scheme for simulating electronic circular dichroism spectra of multichromophoric systems."
International Congress of Quantum Chemistry 2015, IAQMS, Beijing (China), 8-13 June 2015.
4. Guido Ciro Achille, Cortona Pietro, Mennucci Benedetta and Adamo Carlo
"On the metric of charge transfer molecular excitations: a simple chemical descriptor".
DFT 2013, Durham University (U.K.), 9th -13th September 2013.
5. Guido Ciro Achille, Brémond Eric, Adamo Carlo and Cortona Pietro
"One Third: a new recipe for the PBE0 paradigm".
GDR CoDFT 2013, Guidel Plage (France), 21th – 24th May 2013.
6. Guido Ciro Achille, Mennucci Benedetta, Jacquemin Denis and Adamo Carlo
"Planar versus twisted intramolecular charge transfer mechanism in Nile Red: new hints from theory".
Italian National Congress of Physical Chemistry, Società Chimica Italiana, Stresa (Italy), 20-24 September, 2010.
7. Guido Ciro Achille, Mennucci Benedetta, Jacquemin Denis and Adamo Carlo
"Planar versus twisted intramolecular charge transfer mechanism in Nile Red: new hints from theory".
IX Girona Seminar: Electron Density, Density Matrices, and Density Functional Theory, University of Girona, Girona (Spain), 5th – 8th July 2010
8. Guido Ciro Achille, Mennucci Benedetta, Jacquemin Denis and Adamo Carlo
"Planar versus twisted intramolecular charge transfer mechanism in Nile Red: new hints from theory".
Winter Modeling 2010, Scuola Normale Superiore di Pisa, Pisa (Italy), 26th February 2010
9. Guido Ciro Achille, Mennucci Benedetta and Adamo Carlo, "A systematic study of TD-DFT performance in the determination of excited state geometry and properties".
DFT09, Université Claude Bernard Lyon 1, Lyon (France) 31th August – 4th September 2009
10. Guido Ciro Achille, Mennucci Benedetta, Cappelli Chiara, Cammi Roberto, Tomasi Jacopo, "TDDFT-IEFPCM study of electronic excited state structures and properties in solution".
Winter Modeling '08. Pisa, 17th December 2008
11. Guido Ciro Achille, Cappelli Chiara, Mennucci Benedetta, Cammi Roberto, Tomasi Jacopo,
"Julolidine-Malononitrile and IndolineDimethine-MalonoNitrile: a TDDFT-IEFPCM study of electronic excited state structures and properties in solution".
XIV ESCMQC. Isola d'Elba (Italy), 8th -12th September 2008

Data

18/04/2020

Luogo

Padova