Curriculum Vitae et Studiorum
Ciro Achille Guido – Ph.D.

INFORMAZIONI PERSONALI

COGNOME	GUIDO
NOME	CIRO ACHILLE
DATA DI NASCITA	26/06/1983
POSIZIONE ATTUALE	PROFESSORE ASSOCIATO CHEM-02/A - CHIMICA FISICA
E-MAIL:	ciro.guido@uniupo.it

- Titoli Accademici:

- 28/10/2025: Professore Associato il S.S.D. CHEM-02/A - Chimica fisica G.S.D 03/CHEM-02 - CHIMICA FISICA

- 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.

- 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.

- 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

- Direzione di progetti di ricerca ottenuti su finanziamento:

- **30/11/2024 – 30/11/2025: PI** progetto spoke 7 **"RODEO** - Rethinking Organic materials: from Design to Efficient Optoelectronics" finanziato da Italian Research Center on HPC, Big Data and Quantum Computing. Tot. 289.176 € (146.495 € alla mia unità)

- **28/09/2023 – 28/02/2026: PI** progetto PRIN2022 "**EnvELOP** - Environmental tuning of microbial rhodopsins Electronic Landscape for New Optogenetic Potentialities" Ministero Università e Ricerca (MUR). Tot. 216.738 € (119.836 € alla mia unità)

- **08/08/2023 – 30/06/2026: PI** progetto Bando Ricerca UPO 2022: "**LiT-Up** - Light Tuned Drug Delivery by Optimized Hydrogels to be Coated on Upconverting nanoparticles" finanziato da MUR - DM 737/2021 del PNR e Compagnia di San Paolo. Totale 45.000 €

- **27/10/2022: Vincitore del finanziamento F-CUR Università di Siena (PI):** 35,000 € (offerta declinata per trasferimento RTD-B in altro ateneo)

- **11/07/2017 - 10/07/2018. Vincitore del finanziamento LUMOMAT:**" Fully Consistent Polarization Response, FCPol-Resp", 60.000 €**,** finanziato da Région des Pays de la Loire (France) e Comunità Europea. **P.I.:** Dr. Ciro A. Guido e Prof. D. Jacquemin. Universitè de Angers e Universitè de Nantes (Francia).

- **11/07/2016 - 10/07/2017. Vincitore del finanziamento LUMOMAT:** "The Fate of Excitation Energy in solution, EE-Fate",

60,000 €**,** finanziato da Région des Pays de la Loire (France) e Comunità Europea., **P.I.:** Dr. Ciro A. Guido e Prof. D. Jacquemin. Universitè de Angers e Universitè de Nantes (Francia).

- 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 **École Normale Superiéure de Paris** e ricerca presso il gruppo MSC (Modélisation de Systèmes Complexes) del Prof. Carlo Adamo presso École Nationale Supérieure de Chimie de Paris-Chimie Paristech (Parigi, Francia)

- Partecipazione a progetti di ricerca ottenuti su finanziamento:

- **01/12/2021 - 27/10/2022.** Programma "Dipartimento d'eccellenza 2018-2022" progetto "Sviluppo, valutazione ed applicazione di software per lo studio della spettroscopia e fotoreattività di cromofori incorporati in cavità proteiche". **Ricercatore Tempo Determinato lett. A.**

- **01/10/2021 - 30/11/2021.** Progetto "**ProID,** Ultrafast Raman Technologies for Protein Identification and Sequencing" H2020-EU.1.2.1 ID:964363, € 2988513,75. Coord. IIT-Genova. Partecipante. Università di Padova (€ 250125). Referente: Stefano Corni. Ricercatore: Ciro A. Guido

- **01/10/2020 - 30/09/2021.** Progetto "**TAME-Plasmons**, a Theoretical chemistry Approach to tiME-resolved molecular Plasmonics", ERC-CoG-2015 - **ERC Consolidator Grant project: GA 681285 2016-2021**, 1,432,890 €. P.I. Prof. S. Corni (Università di Padova, Italia). Researcher: Ciro A. Guido

- **01/10/2018 - 30/09/2020.** Progetto "Simulation of energy and electron transfer for molecules close to plasmonic nanostructures, **PlasmoChem**" **MIUR, "progetti FARE" grant number R164LZWZ4A, 2016-2020** 152,313 € P.I. Prof. S. Corni (Università di Padova, Italia). Researcher: Ciro A. Guido.

- **01/07/2014 - 30/06/2016.** Progetto "**EnLight,** The interplay between quantum coherence and environment in the photosynthetic electronic energy transfer and light-harvesting: a quantum chemical picture", **ERC Starting Grant project: 277755 2011-2016,** 1,300,000 €. PI: Prof. B Mennucci (Università di Pisa, Italia). Researcher: Ciro A. Guido.

- **01/09/2012 – 19/06/2014.** Progetto "**Dinf DFT,** Développement et implementation de Nouvelles fonctionnelles d'échange et corrélation en théorie de la fonctionnelle de la densité**"** finanziato dalla **Agenzia Nazionale della Ricerca Francese, ANR** project. ANR 2010 BLANC n. 0425, 360,000 €. P.I. Prof. Pietro Cortona (École Centrale Paris) e Prof. Carlo Adamo (Chimie-Paristech). Researcher: Ciro A. Guido.

- **01/05/2011 – 31/07/2012.** Progetto **"Advanced atomistic simulations for carbon capture and sequestration",** grant number 200021-132081 from **Swiss National Science Foundation**. 2010-2012. amount: 294,510 CHF. P.I. Prof. Wanda Andreoni (EPFL). Researcher: Ciro A. Guido.

- Attività di formazione o ricerca presso qualificati istituti italiani:

- 28/10/2022: **Ricercatore Tempo Determinato lett. B CHEM-02/A** Università del Piemonte Orientale "A. Avogadro".

- 01/12/2021 – 27/10/2022: **Ricercatore Tempo Determinato lett. A Chim/06** (Dipartimento d'Eccellenza 2018-2022). Università di Siena.

- 01/10/2021 – 30/11/2021: **assegnista di ricerca presso il gruppo del Prof. S. Corni** (H2020 project ProID). Università di Padova.

- 01/10/2020 – 30/09/2021: **assegnista di ricerca presso il gruppo del Prof. S. Corni** (ERC project TAME-Plasmon). Università di Padova.

- 01/10/2018 – 30/09/2020: **assegnista di ricerca presso il gruppo del Prof. S. Corni** (MIUR FARE project Plasmochem). Università di Padova.

- 01/07/2014 – 30/06/2016: **assegnista di ricerca presso il gruppo della Prof. B. Mennucci (ERC EnLight).** Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale, Università di Pisa, Italia.

- 01/01/2011 – 30/04/2011: **Borsa di studio e ricerca presso il gruppo della Prof. Benedetta Mennucci.** Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale – Università di Pisa.

- 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.**
  Scuola Normale Superiore di Pisa – Dip. Chimica e Chimica Industriale. Università di Pisa.

- Attività di formazione o ricerca presso qualificati istituti stranieri:

- 11/07/2017 – 10/07/2018: **ricercatore a contratto presso dipartimento CEISAM Université de Nantes** (CO-PI progetto LUMOMAT FCPol-Resp).

- 11/07/2016 – 10/07/2017: **ricercatore a contratto presso dipartimento CEISAM Université de Nantes** (CO-PI progetto LUMOMAT EE-Fate).
- 01/09/2012 – 19/06/2014: **Ricercatore CNRS presso il gruppo del Prof. Pietro Cortona.** École Centrale Paris.

- 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.

- 25/08/2009 – 31/07/2010: Studente Ph.D. in scambio presso il gruppo MSC (Modélisation de Systèmes Complexes) del Prof. Carlo Adamo e École Normale Superiéure de Paris. **Finanziamento Erasmus placement per la mobilità internazionale** degli studenti della Scuola Normale Superiore di Pisa.
  École Nationale Supérieure de Chimie de Paris-Chimie Paristech (Parigi, Francia)

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

- 1-3/07/2025: **Workshop internazionale "Open Quantum Systems in Chemical Systems: Recent Advances and Future Developments"**, Università di Trieste ed Università del Piemonte Orientale.
  Comitato organizzatore: Emanuele Coccia e Ciro A. Guido,

- 16/06/2016: **Workshop internazionale "EnLight Workshop 2016"**, Università di Pisa,
  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.

- Partecipazione a comitati editoriali di riviste:

- 07/10/2022 – in corso: **Review Editor** della rivista open access "Frontiers in Chemistry". Editore Frontiers

- 01/03/2021 – 25/07/2023: **Topic Editor** della rivista open access "Compounds" (ISSN 2673-6918). Editore MDPI

- 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
- RSC Advances
- Chirality

- Didattica, didattica integrativa e servizio agli studenti

- Didattica: corsi di laurea e laurea specialistica in Chimica:

- A.A. 2025/2026: Titolare del Corso di Chimica Teorica e Computazionale, Corso di Laurea Specialistica in Scienze Chimiche, Università del Piemonte Orientale. 5 CFU. Co-tit. con Prof. Cossi (1 CFU)
- A.A. 2024/2025: Titolare del Corso di Chimica Teorica e Computazionale, Corso di Laurea Specialistica in Scienze Chimiche, Università del Piemonte Orientale. 5 CFU. Co-tit. con Prof. Cossi (1 CFU)
- A.A. 2023/2024: Titolare del Corso di Chimica Teorica e Computazionale, Corso di Laurea Specialistica in Scienze Chimiche, Università del Piemonte Orientale. 5 CFU. Co-tit. con Prof. Cossi (1 CFU)
- A.A. 2022/2023: Titolare del Corso di Modellistica Chimica, Corso di Laurea Specialistica in Scienze Chimiche, Università del Piemonte Orientale. 5 CFU. Co-tit. con Prof. Cossi (1 CFU)
- A.A. 2025/2026: Titolare del Corso di Spettroscopie Ottiche, Corso di Laurea Specialistica in Scienze Chimiche, Università del Piemonte Orientale. 6 CFU.
- A.A. 2024/2025: Titolare del Corso di Spettroscopie Ottiche, Corso di Laurea Specialistica in Scienze Chimiche, Università del Piemonte Orientale. 5 CFU. Co-tit. con Dr.ssa D'Amore (1 CFU)
- A.A. 2023/2024: Titolare del Corso di Spettroscopie Ottiche, Corso di Laurea Specialistica in Scienze Chimiche, Università del Piemonte Orientale. 6 CFU.
- A.A. 2022/2023: Titolare del Corso di Spettroscopie Ottiche, Corso di Laurea Specialistica in Scienze Chimiche, Università del Piemonte Orientale. 6 CFU.
- A.A. 2025/2026: Titolare del Corso di Computational Models in Chemistry, Corso di Laurea Specialistica in Scienze Chimiche, Università del Piemonte Orientale. 4 CFU. Co-tit. con Dr.ssa D'Amore (2 CFU)
- A.A. 2024/2025: Titolare del Corso di Computational Models in Chemistry, Corso di Laurea Specialistica in Scienze Chimiche, Università del Piemonte Orientale. 1 CFU. Co-tit. con Dr.ssa D'Amore (5 CFU)
- A.A. 2021/2022: dal 02/03/2002 al 27/04/2022: **Docente** del corso di Laboratorio di Chimica Organica mod. B. **48 ore**. Corso di Laurea in Chimica. Università di Siena. https://www.unisi.it/ugov/person/207774
- A.A. 2015/2016: Ven 13/05/2016 14:30-16:30, **2 ore** di seminario didattico: "Eccitazioni elettroniche e risposta del solvente" all'interno del corso "Modellistica Molecolare di Sistemi Complessi", Università di Pisa (corso della Prof. Benedetta Mennucci).
- A.A. 2015/2016: dal 12/04/2016 al 21/04/2016 e dal 10/05/2016 al 12/05/2016. Esercitazioni di Laboratorio del corso di Chimica Fisica II, **Università di Pisa** (Prof. B. Mennucci): **36 ore**, (3 volte a settimana, 3 settimane, 4h per ogni lezione).
- A.A. 2015/2016: dal 3/12/2014 al 10/12/2014. Esercitazioni di Laboratorio del corso di Modellistica Molecolare Di Biomolecole, **Università di Pisa** (Prof. B. Mennucci): **12 ore** di laboratorio, (3 lezioni, 4h per ogni lezione).
- A.A. 2014/2015: dal 18/03/2015 al 03/04/2015. Esercitazioni di Laboratorio del corso di Chimica Fisica II, **Università di Pisa** (Prof. B. Mennucci): **36 ore** di laboratorio, (3 volte a settimana, 3 settimane, 4h di lezione).
- A.A. 2014/2015: dal 3/12/2014 al 10/12/2014.Esercitazioni di Laboratorio del corso di Modellistica Molecolare Di Biomolecole, **Università di Pisa** (Prof. B. Mennucci): **12 ore** di laboratorio, (3 lezioni, 4h per ogni lezione).
- A.A. 2010/2011: dal 10/01/2011 al 28/03/2011. Esercitatore e supervisore corso di Principi di Chimica Quantistica, **Scuola Normale Superiore di Pisa** (in collaborazione con il Prof. Ivo Cacelli). **24 ore** di lezione (2h a settimana, 12 settimane).
- A.A. 2009/2010: dal 4/01/2010 al 24/05/2010. Esercitatore e supervisore corso di Principi di Chimica Quantistica, **Scuola Normale Superiore di Pisa** (in collaborazione con il Prof. R. Moccia). **24 ore** di lezione (2h a settimana, 12 settimane).

- Attività di relatore di tesi, supervisione e mentoring:

- A.A. 2024-A.A. 2027: ***Relatore di Tesi di Dottorato in Chemistry and Biology*** *di Ester Salvi*

- A.A. 2025-2026: ***Relatore di Tesi di Laurea Specialistica in Scienze Chimiche*** *di Lorenzo Bocchi*

- A.A. 2025-2026: ***Relatore di Tesi di Laurea Specialistica in Scienze Chimiche*** *di Alessio Roccio*

- A.A. 2023-2024: ***Relatore di Tesi di Laurea Specialistica in Scienze Chimiche*** *di Ester Salvi*

- A.A. 2023-2024: ***Relatore di Tesi di Laurea Triennale in Chimica*** *di Lorenzo Bocchi*

- A.A 2023/2024: Membro del Consiglio dei docenti del Corso di Dottorato in Chemistry and Biology, Università del Piemonte Orientale.

- *2020/2021:* ***Relatore di Tesi*** *dello studente* Jonas Nijssen, tesi di laurea triennale, B.Sc., KU Leuven University, Belgium. Titolo: "Optical properties of two amino benzothiadiazoles in solution: a computational study"

- *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. Veritè, 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 e Dr. Tarita Biver.

- Conseguimento di premi e riconoscimenti nazionali e internazionali per attività di ricerca.

- Fellowship:

- **30/11/2021. Maria Zambrano Fellowship from Spanish government and EU (NextGenerationEU).**
  MARIA ZAMBRANO GRANTS FOR THE ATTRACTION OF INTERNATIONAL TALENT: **1 classificato (score 100/100)** nel settore Health Sciences per la call Maria Zambrano bandita dal Ministerio de Universidades Spagnolo e l'Università di Barcelona. Declined (https://seu.ub.edu/documentPublic/download/274629).

- **07/09/2018. Marie Skłodowska-Curie Actions-COFUND Fellowship "Beatriu de Pinos"**. 92000 euro di budget. Vincitore fellowship per "outstanding postdoctoral researchers" e host organization in Catalonia (https://euraxess.ec.europa.eu/worldwide/brazil/postdoctoral-research-grants-catalonia-beatriu-de-pin%C3%B3s-programme-2019-msca).
  Titolo del Progetto: "Development of computational models for describing environment polarization and excited state dispersion interactions in photosynthetic light harvesting proteins".

- Abilitazioni Scientifiche:

- **15/03/2021. Abilitazione Scientifica Nazionale Sistema Universitario della Catalunya Professor Lector.** Qualifica numero 1TQLV664H. 2a Convocatoria Lector (2020).

- **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, física 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, física ed analitica).

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

1. "How Dispersion Interactions at the Excited State Can Tune Photochromism of Embedded Chromohores?" Congress "EuChems-CompChem", organized by European Society of Chemistry, Naples University, Napoli (Italy). 15-18/09/2025.

2. **INVITED TALK**. "Exploring Chiral Electronic Transitions: From Chiroptical Spectroscopies to Electron Beam Probes " Congress CD22025, organized by University of Debrecen, Debrecen, (Hungary). 25-28/08/2025.

3. **INVITED TALK**. "How Dispersion Interactions at the Excited State Can Tune Photochromism of Embedded Chromohores" Congresso "Frontiers in Simulation of Photoresponsive Biological Systems" CT4OPTO, PSI-K and CECAM Workshop, organized by CNR-Nano, Siena, (Italy). 7-10/07/2025.

4. **INVITED PERSPECTIVE TALK**. "Non-equilibrium dynamical effects on excited states within polarizable environment: perspectives from an open quantum system approach" Workshop OQSiC 2025, organized by University of Trieste and UPO (Italia) 01-03(07/2025.

5. "CPL of [7]helicenes with alleged exceptional emission dissymmetry values: new hints from the theory" Congresso ChirItaly 2025, Padova, Monteortone (Italy), 10 - 12 Marzo 2025.

6. “Non-equilibrium dynamical effects on excited states within polarizable environment: perspectives from an open quantum system approach” Congresso SCI 2024, Milano (Italia) 26-30/08/2024.

7. “Accurate description of environment effects on triplet states: role of state-specific polarization response and dispersion interactions “ Congresso EuChems 2024, Dublino (Irlanda) 7-11/07/2024.

8. **INVITED TALK**. “Non-equilibrium dynamical effects on excited states within polarizable environment: a non-Markovian TD-SSE approach” Workshop “Wave-T coding workshop” organized by Università di Trieste ed Università di Padova, Rosazzo 15-17 maggio 2024

9. “Non-equilibrium dynamical effects on excited states within polarizable environment: perspectives from an open quantum system approach” Lorentz Center workshop “Accelerating theoretical spectroscopy for complex multiscale materials” Leiden (Olanda) 20-24 Marzo 2023.

10. **INVITED TALK**. “Dispersion Interactions At The Excited State: Influence On Light-Responsive Properties Of Biosystems“ CT4OPTO, PSI-K and CECAM Workshop, organized by CNR-Nano, Modena, (Italy). 3-5/07/2023.

11. **INVITED TALK**. “Ab initio simulation of single amino acid SERS of proteins near plasmonic nanoparticles”. ProID workshop. IIT-Genova (Italy). 27/01/2022

12. “Exploring the spatial features of electronic transitions in biomolecular systems by swift electrons”, Psi-K workshop “Principles of light-induced charge transfer for optogenetics”, CNR Nano, Modena (Italy). 14-16 June 2021.

13. “Non-equilibrium dynamical effects on excited states within Polarizable Continuum models“, CECAM workshop *“Nonequilibrium dynamical solvent effects on excited states: from spectroscopy to photoreactivity*”, CECAM, Lausanne (Switzerland). 14-17 June 2021.

14. **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

15. “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.

16. **INVITED TALK**. “Excited State Gradients for a State-Specific Continuum Solvation Approach: a Lagrangian TDDFT Formulation and Implementation of VEM”. Workshop*: Journées Scientifiques SolvATE*. Organized by Universitè de Nancy (France) 16/05/2018 – 18/05/2018.

17. **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.

18. **INVITED TALK**. “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.

19. “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.

20. “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.

21. **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.

22. “Orbital based tools for TDDFT computational spectroscopy”
9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2014). Badajoz, 2 - 4July 2014.

23. “Understanding molecular excitation character made simpler “
TD-DFT Conference, Université de Nantes, 23-26 April 2013.

24. "The time dependent problems in solvent model: the PCM point of view"

Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris – Paris, 24 November 2009.

25. "A systematic study of TD-DFT performance in the determination of excited state geometries and properties" COTAW09, FUNDP - Namur (Belgium), 16-19 September 2009.

Attività di ricerca:

il Prof. Guido dirige il gruppo di ricerca LIME lab (Light Interacting with Molecules in Environements), la cui attività di ricerca è principalmente focalizzata sullo **sviluppo di modelli quantomeccanici** e relativa implementazione in codici di calcolo, per la simulazione di **proprietà ottiche ed elettroniche in sistemi molecolari e supra-molecolari in presenza di un ambiente polarizzabile esterno**, con applicazioni alla fotofisica e fotochimica. Tale ambiente può rappresentare un solvente isotropico, un ambiente anisotropo discreto quale una cavità proteica e/o la presenza di nanoparticelle metalliche soggette ad eccitazione plasmonica o cristalli molecolari, film etc.
I metodi sviluppati sono implementati in codici di calcolo commerciali (Gaussian) che open access.
All'attività di sviluppo ed implementazione è al contempo accoppiata un'attività di tipo applicativo, tramite collaborazioni con gruppi sperimentali, quali quello di Gregory Pieters (CEA, Francia) dei Professori Pescitelli e Di Bari (Università di Pisa) o del Dr. Vincenzo Grillo dell'Istituto CNR-Nano (Modena).

Le principali tematiche di ricerca:

1. Teoria dei sistemi quantistici aperti nel formalismo delle equazioni di Schroedinger stocastiche
2. Modelli polarizzabili con approccio state-specific (VEM approach)
3. Interazioni di dispersione molecola-environment allo stato eccitato
4. Descrizione teorica di spettroscopie ottiche e chirali di sistemi in fase condensata
5. Fotochimica di rodopsine per applicazioni in optogenetica
6. Interazione elettrone-molecola
7. Applicazioni computazionali allo studio di effetti TADF, ESIPT, AIE per materiali organici

- Competenze tecniche:

- Competenze Informatiche:

- Sistemi Operativi: GNU/Linux e UNIX per workstations, Apple IOS and MS Windows.
- Linguaggi di Programmazione: FORTRAN 77 and 95, Python, OpenMP, MPI, awk and bash scripting.
- Software per quantum chemistry and modeling: GAUSSIAN 16, GAMESS, Molcas, OpenMolcas, GaussView, CPMD, AMBER, VMD. **Sviluppo ed implementazione di subroutines per GAUSSIAN G09 e G16**.
- Altri software: Matlab, Grace, Gnuplot, Origin, MS Office.

- Software e moduli computazionali sviluppati:

- **OAM-EELS** (C. A. Guido, Università di Padova, 2020).
Programma Fortran per il calcolo di probabilità di perdita di energia elettronica risolte nel momento angolare per interazione molecola – elettroni veloci.

- **Gaussian 09, development version I09**: implementazione del Vertical Excitation Method (VEM) e relativi gradienti analitici. Collaborazione con Giovanni Scalmani, Gaussian Inc.

- **Gaussian 16**: implementazione del Vertical Excitation Method (VEM) e relativi gradienti analitici. Collaborazione con Giovanni Scalmani, Gaussian Inc.; Implementazione delle metriche di caratterizzazione degli stati eccitati

- **EXAT** (S. Jurinovich, L. Cupellini , C. A. Guido e B. Mennucci, Università di Pisa, 2014).
Python software per il calcolo di proprietà eccitoniche. https://zenodo.org/record/4282773

- **NTOBuilder** (L. Cupellini, S. Caprasecca e C. A. Guido, Università di Pisa, 2018).
https://zenodo.org/record/3948078
Python software per la caratterizzazione di eccitazioni elettroniche ottenute con approcci TDDFT e Coupled Cluster.

- Lingue:

- Italiano: madrelingua.
- Inglese: scritto e parlato. Livello: Ottimo
- Francese: scritto e parlato. Livello: Ottimo
- Spagnolo: scritto e parlato. Livello: Base.

- Collaborazioni (nazionali ed internazionali):

- Gregory Pieters (CEA, France)
- Stefano Corni (Padova University, Italy)
- Benedetta Mennucci (Pisa University, Italy)
- Carles Curutchet (Barcelona University, Spain)
- Gennaro Pescitelli (Pisa University, Italy)
- Francesco Zinna (Pisa University, Italy)
- Lorenzo di Bari (Pisa University, Italy)
- Denis Jacquemin (Nantes University, France)
- Carlo Adamo (Chimie Paristech, France)
- Laura Zanetti-Polzi (CNR-Nano, Italy)
- Giovanni Scalmani (Gaussian Inc., U.S.A.)
- Pietro Cortona (École Centrale Paris, France)
- Xavier Blase (CNRS Grenoble, France)
- Jacob Kongsted (Copenhagen University, Denmark)
- Vincenzo Grillo (CNR-Nano, Modena, Italy)
- Enzo Rotunno (CNR-Nano, Modena, Italy)
- Francesco De Angelis (IIT, Genova, Italy)
- Nicolò Maccaferri (Umeå University, Umeå, Sverige)

LISTA DELLE PUBBLICAZIONI

39 lavori pubblicati: 38 journal articles, 1 book chapter

Citation Metrics

Web of Science (WoS): Ciro A. Guido - D-3533-2012
WoS ResearcherID: AAG-4460-2020
Scopus author ID: 15072889800
ORCID number: 0000-0003-1924-2862

h-index: **25** (fonte: Scopus e WebOfScience)

Times cited: **2502** from 2058 articles.

Corresponding author (*).

- **Journal articles:**

1. "Accurate description of environment effects on singlet–triplet inversion: role of state–specific polarization response on structures and energies" E.Salvi, G. Agostini, S. Veglianti, G. Juliani Costa, L. De Vico, D, Padula and C. A. Guido* Journal of Computational Chemistry, DOI: 10.1002/jcc.70267 (2025) IF: 4.8 Q1 Chemistry and Material Sciences.

2. "Role of ions in solvated Amino acids Raman spectra", Dall'Osto, Giulia; Vaccarelli, Ornella; Malyshev, Dmitry; Bhuvanendran, Hinduja; Andersson, Magnus; Maccaferri, Nicolò; Guido, Ciro; Corni, Stefano, J. Phys. Chem. B, just accepted (2025). IF: 2.9

3. Quantum Chemistry Calculations Calculations of Circularly Polarized Luminescence(CPL): From Spectral Modeling to Moelcular Design" **C. A. Guido***, F. Zinna and G. Pescitelli, Chemical Reviews, DOI: 10.1021/acs.chemrev.5c00359. IF: 55.8 Q1 Chemistry and Material Sciences

4. **"**Porosity Local Analysis (PoLA): a new approach to describe the porous volume distribution in amorphous carbons" Zoccante; M. D'Amore, **C. A. Guido,** A. Fortunelli, G. Conter, L. Marchese, M. Cossi *ACS Omega*, 10, 31623-31637 (2025). IF: 10.5 Q1 Chemistry and Material Sciences.

5. **"**CPL calculations of [7]helicenes with alleged exceptional emission dissymmetry values" **C. A. Guido***, F. Zinna and G. Pescitelli *J. Mater. Chem. C*, 11, 10474-10482 (2023). IF: 8.067 Q1 Chemistry and Material Sciences.

6. "A Simple Protocol for Capturing both Linear-Response and State-Specific Effects in Excited-State Calculations with Continuum Solvation Models" **C. A. Guido***, A. Chrayteh, G. Scalmani, B. Mennucci and D. Jacquemin *J. Chem. Theory Comput*, 17, 5155 (2021). IF: 6.006 Q1 Physical and Theoretical Chemistry.

7. "Exploring the spatial features of electronic transitions in molecular and biomolecular systems by swift electrons" **C. A. Guido*** E. Rotunno, M. Zanfrognini, S. Corni and V. Grillo, *J. Chem. Theory Comput*, **17**, 2364 (2021). IF: 6.006. Q1 Physical and Theoretical Chemistry. **Selected for ACSLiveSlides**

8. "Hybrid theoretical models for molecular nanoplasmonics". E. Coccia, J. Fregoni, **C. A. Guido**, M. Marsili, S. Pipolo and S. Corni J. Chem. Phys. **153**, 200901 (2020) IF: 3.488. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

9. "Investigating ultrafast two-pulse experiments on single DNQDI fluorophores: a stochastic quantum approach ". G. Dall'Osto, E. Coccia, **C. A. Guido** and S. Corni, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22**, 16734 (2020). IF: 3.676. Q1 Physical and Theoretical Chemistry.

10. "An Open Quantum System Theory for Polarizable Continuum Models " **C.A.Guido**, M. Rosa, R. Cammi and S. Corni, *J. Chem. Phys.* 152, 174114 (2020) IF: 3.488. Q1 Physical and Theoretical Chemistry.

11. "On the description of the environment polarization response to electronic transitions" **Invited Perspective**.
C. A. Guido* and S. Caprasecca, *Int. J. Quantum Chem.* **119**, e25711 (2019).
IF: 2.444. Q1 Physical and Theoretical Chemistry.

12. "First-principles investigation of the double ESIPT process in a thiophene-based dye"
P. Vérité, **C. A. Guido** and D. Jacquemin, *Phys. Chem. Chem. Phys*., **21**, 2307 (2019).
IF: 3.676. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

13. "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. Müh, T. Renger and B. Mennucci. J. Phys. Chem. Lett. **9**, 6892 (2018). IF: 6.475. : Q1 Material Science (miscellaneous)

14. "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).
IF: 6.006. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

15. "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).
IF: 6.006. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

16. "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).
IF: 9.825. Q1 Chemistry.

17. "EXAT: EXcitonic Analysis Tool"
S. Jurinovich, L. Cupellini, **C. A. Guido** and B. Mennucci*, J. Comput. Chem.* **39**, 279 (2017).
IF: 3.376. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

18. "Metrics for Molecular Electronic Excitations: A Comparison between Orbital- and Density-Based Descriptors"
M. Savarese, **C. A. Guido**, E. Brémond, I. Ciofini and C. Adamo, *J. Phys. Chem A* 121, 7543 (2017).
IF: 2.781. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

19. "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 Phy*s. 146, 204106 (2017).
IF: 3.488. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

20. "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).
IF: 6.475. Q1 Material Science (miscellaneous)

21. "Circularly Polarized Luminescence from Axially Chiral BODIPY DYEmers: an Experimental and Computational Study" Selected as cover article.
F. Zinna, T. Bruhn, **C. A. Guido**, J. Ahrens, M. Bröring, L. Di Bari, and G. Pescitelli. *Chem. Eur. J.* 22, 16089 (2016).
IF: 5.236. Q1 Chemistry (miscellaneous)

22. "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).
IF: 2.991. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

23. "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).
Top 20 monthly most read articles.
IF: 6.006. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

24. "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).

IF: 1.702. Q2 Physical and Theoretical Chemistry

25. "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).
IF: 3.021. Q1 Organic Chemistry

26. "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).
IF: 6.222. Q1 Chemistry (miscellaneous)

27. "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).
IF: 2.781. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

28. "Effective Electron Displacements: a tool for TD-DFT Computational Spectroscopy"
C. A. Guido*, P. Cortona and C. Adamo, *J. Chem. Phys.* 140, 104101 (2014).
IF: 3.488. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

29. "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).
Top 20 monthly most read articles
IF: 6.006. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

30. "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).
Top 20 monthly most read articles
IF: 6.006. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

31. "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
IF: 3.488. Q1 Physical and Theoretical Chemistry.

32. "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
IF: 6.006. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

33. "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).
IF: 9.825.Q1 Chemistry

34. "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).
Top 20 monthly most read articles
IF: 2.781. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

35. "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
IF: 2.328. Q2 Physical and Theoretical Chemistry

36. "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).
IF: 3.676. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

37. "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).

IF: 2.781. Q1 Physical and Theoretical Chemistry

38. "Calorimetric investigation of the aggregation of lithium perfluorooctanoate on poly(ethyleneglycol) oligomers in wate " P. Gianni, L. Bernazzani, **C. A. Guido** and V. Mollica, THERMOCHIMICA ACTA, 451, 73 (2006). IF: 3.115. Q2 Physical and Theoretical Chemistry

- **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.

Comunicazioni tramite poster:

1. E.Salvi, and C. A. Guido **"**State-Specific Solvation Effects on First-Order Derivative Couplings: Enhancing NACME Accuracy " Euchems-CompChem, Napoli, (Italia) 15-18/09/2025

2. E.Salvi, D, Padula and C. A. Guido **"**Accurate description of environment effects on singlet–triplet inversion: role of state–specific polarization response on structures and energies" Congresso SCI 2024, Milano (Italia)

3. Ciro A. Guido, Enzo Rotunno, Matteo Zanfrognini, Vincenzo Grillo, Stefano Corni "Simulating advanced excitation energy loss spectroscopies of molecular excitations" ISTCP-X, Tromso (Norway), 11-17 July 2019.

4. "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.

5. 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.

6. 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.

7. 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.

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". *Italian National Congress of Physical Chemistry*, Società Chimica Italiana, Stresa (Italy), 20-24 September, 2010.

9. 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

10. 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

11. 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

12. 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

13. 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 27/10/2025 Luogo Alessandria