

INFORMAZIONI PERSONALI **Simone Di Muzio**

ESPERIENZE DI LAVORO

15/01/2021-presente **Assegnista di ricerca**

"Simulazione di liquidi ionici" nell'ambito del progetto europeo SILICON ALLOYING ANODES FOR ENERGY DENSE BATTERIES COMPRISING LITHIUM RICH CATHODES AND IONIC LIQUID ELECTROLYTES FOR SAFE HIGH VOLTAGE PERFORMANCE (Si-DRIVE)
supervisor: dott.ssa Annalisa Paolone

Istituto dei Sistemi Complessi-Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR-ISC)
P.le Aldo Moro 5, 00185 Roma

Marzo 2020 – Novembre 2020 **Attività di ricerca post-laurea**

"Simulazioni di dinamica molecolare classica di liquidi ionici e deep eutectic solvents -
Supervisor: prof. Fabio Ramondo
Università degli studi dell'Aquila-Università "La Sapienza" di Roma

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

Dicembre 2020 – presente **Studente di dottorato (senza borsa) in Scienze Fisiche e Chimiche (XXXVI ciclo) SSD: CHIM/02**

Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche-Università degli studi dell'Aquila
Supervisor: prof. Fabio Ramondo e dott.ssa Annalisa Paolone

Marzo 2018-Aprile 2020 **Laurea Magistrale in Scienze Chimiche (LM54)**

Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche-Università degli studi dell'Aquila
Valutazione 110/110

Titolo tesi: Studio strutturale di un deep eutectic solvent: caratterizzazione spettroscopica e computazionale

relatore: prof. Fabio Ramondo

Settembre 2014-Marzo 2018 **Laurea triennale in Scienze e tecnologie chimiche e dei materiali (L27)**

Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche-Università degli studi dell'Aquila

Titolo tesi: Studio quantomeccanico di reazione ossidative di composti furanici

relatore: prof. Fabio Ramondo

Settembre 2009-Luglio 2014 **Diploma di scuola superiore-Istituto Tecnico Industriale-spec. Chimico**

Istituto Tecnico Industriale "Luigi di Savoia"-Chieti

COMPETENZE SCIENTIFICHE

Attività di ricerca Interesse a vari aspetti della chimica fisica mediante approcci sperimentali e computazionali. Negli ultimi anni mi sono focalizzato prevalentemente sullo studio della soft-matter (liquidi ionici e deep eutectic solvents), caratterizzandone la struttura, le proprietà chimico-fisiche e la loro reattività. Parallelamente mi sono occupato di studiare meccanismi di reazione in fase condensata (idrolisi di sali in soluzione) e in fase gas. L'attività di ricerca può quindi essere riassunta come segue:

- Caratterizzazione strutturale di sistemi classificabili come soft-matter (liquidi ionici e deep eutectic solvents), mediante approccio combinato sperimentale-computazionale. Sperimentalmente i sistemi sono studiati mediante misure di diffrazione di raggi X su liquidi (WAXS), spettroscopia infrarossa (FIR e MIR) e RAMAN, analisi termica (DSC, TGA). Da un punto di vista computazionale i sistemi vengono modellati mediante calcoli quantomeccanici (DFT e *ab initio*) e simulazione di dinamica molecolare classica (all-atom force field).
- Studio quantomeccanico e termodinamico (termodinamica ai principi primi) di reazioni idrolitiche di sali organici e inorganici nell'ambito di processi elettrochimici (batterie a ione litio)
- Studio computazionale e sperimentale delle interazioni di liquidi ionici e deep eutectic solvents con superfici quali grafene e suoi derivati strutturali
- Studio computazionale della stabilità chimica ed elettrochimica di liquidi ionici e deep eutectic solvents mediante metodi *ab initio* e DFT
- Studio computazionale dei meccanismi di reazione dei processi di assorbimento chimico di gas inquinanti (CO₂) in solventi alternativi
- Meccanismi di reazione di processi atmosferici (fase gas) mediante analisi dati di spettrometria di massa a luce di sincrotrone e calcoli DFT e *ab initio* ad alto livello di accuratezza (coupled cluster)

Tecniche computazionali e sperimentali

- Simulazioni quantomeccaniche DFT e *ab initio*
- Simulazioni di dinamica molecolare classica (all-atom force field)
- Analisi termica: Calorimetria differenziale a scansione (DSC) e termogravimetria (TGA)
- Spettroscopia vibrazionale: MIR e FIR, ATR (anche in funzione della temperatura), RAMAN
- Diffrazione di raggi X (WAXS)
- Spettrometria di massa (analisi dati)
- Conoscenza delle procedure di laboratorio chimico e di struttura della materia, preparazione dei campioni sperimentali, padronanza nell'effettuare misure e nell'elaborazione e interpretazione in autonomia dei risultati

Partecipazione a beamtime presso facilities internazionali

- 14-20 novembre 2022 Titolo proposal: "Hydrogen bonding in innovative deep eutectic solvents" AILES beamline Sincrotrone SOLEIL (Parigi)
- 20-26 settembre 2021 Titolo proposal: "Competition between hydrogen bonding and conformational disorder in ionic liquids" AILES beamline Sincrotrone SOLEIL (Parigi)

Partecipazione a progetti di ricerca internazionali

- Progetto europeo Si-Drive (Silicon Alloying Anodes for Energy Dense Batteries comprising Lithium Rich cathodes and ionic liquid electrolytes for safe high voltage performance) grant agreement No 814464
- Progetto CNR-RS "Effect of Conformational flexibility on the phase behaviour of Ionic Liquids" -Joint Bilateral Agreement CNR/Royal Society (UK), Biennal Programme 2022-2023, CUP B89J21032190005

COMPETENZE PERSONALI

Lingua madre Italiano

Altre lingue

| | COMPRESIONE | | PARLATO | | PRODUZIONE SCRITTA |
|---------|-------------|---------|-------------|------------------|--------------------|
| | Ascolto | Lettura | Interazione | Produzione orale | |
| Inglese | B2 | B2 | B2 | B2 | B2 |

Livelli: A1 e A2: Utente base – B1 e B2: Utente autonomo – C1 e C2: Utente avanzato
[Quadro Comune Europeo di Riferimento delle Lingue](#)

- Competenze digitali**
- ottima padronanza di ambienti Windows e Unix, sia in locale sia su cluster di calcolo scientifico
 - conoscenza avanzata di software di calcolo scientifico per la chimica computazionale (Gromacs, Gaussian16, Spartan20, Amber, Travis)
 - ottima conoscenza di software di grafica molecolare (GaussView, VMD, Molden, Avogadro)
 - padronanza di software per elaborazione dati (Origin, Grace, Gnuplot)
 - ottima conoscenza dei software per acquisizione di misure sperimentali
 - padronanza del linguaggio di videoscrittura \LaTeX e del pacchetto Office
 - buona conoscenza del linguaggio di programmazione Fortran90 e conoscenza basilare degli ambienti R e MATLAB
- Partecipazione a scuole nazionali ed internazionali**
- Ottobre 2022: Introduction to HPC-GPU programming-Gran Sasso Science Institute (L'Aquila)
 - Settembre 2022: International Summer School "Ab Initio Modelling in Solid State Chemistry-MSSC2022" (Imperial College di Londra-online)
 - Gennaio 2021: Corso di Quantum Computing (10 ore) -prof. Leonardo Guidoni. Università degli studi dell'Aquila
 - Novembre 2018: Corso di "Modellizzazione teorico computazionale di osservabili classiche e quantistiche in sistemi complessi mediante simulazioni di dinamica molecolare e Perturbed Matrix Method"-dr. Andrea Amedei. Università degli studi dell'Aquila
 - Giugno 2017: Summer School on Atomistic Simulation Techniques- SISSA Trieste e CNRIOM DEMOCRITOS Simulation Centre. Trieste
- Congressi**
- **Oral communication** (20 min) 28th EUCHEM Conference on Molten Salts and Ionic Liquids, Euchemsil 2022; 5-10 Giugno 2022 Patrasso (Grecia) *Role of the lithium salt hydrolysis in aprotic lithiumion batteries: a computational study*
 - **Poster** 31st Topical Meeting of the International Society of Electrochemistry; 15-19 Maggio 2022 Aachen (Germania) *Theoretical investigation of the contribution of the lithium salt hydrolysis to the formation of the SEI*
 - **Poster** Next Generation Nanoelectrochemistry Faraday Discussion 2021; online 29 Novembre 2021- 1 Dicembre 2021 *Thermodynamic description of the formation of SEI: theoretical investigation of the hydrolysis of the lithium salt components of electrolytes*
 - **Oral communication** (15 min) VI International Conference on Ionic Liquid-Based Materials (ILMAT2021), 22-26 Novembre 2021-Obernai (FR) *First principle investigation on the thermodynamic of hydrolysis of lithium salts: pathway to the inorganic SEI components*
 - **Oral Communication** (15 min) Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana (SCI2021)-online, 14-23 Settembre *Thermodynamics of the hydrolysis of lithium salts: pathways to the inorganic SEI components*
 - **Oral Communication** (7 min) I Giovani e la Chimica in Abruzzo"- online 5-6 Luglio 2021- Società Chimica Italiana-sez.Abruzzo *Mechanisms and thermodynamics of the hydrolysis of fluoro-phosphate lithium salts*

Pubblicazioni su riviste internazionali

- tre lavori in preparazione
- F. Ramondo and **S. Di Muzio** *Reaction Mechanism of CO₂ with choline-amino acid ionic liquids*, Entropy, 2022, 24, 1572
- **S. Di Muzio**, A. Paolone, O. Russina, F. Ramondo *Phenol-cyclohexanol eutectic mixtures: phase diagram and microscopic structure by experimental and computational studies*, Journal of Molecular Liquids, 2022, 360, 119492
- **S. Di Muzio**, O. Palumbo, S. Brutti, A. Paolone *Thermodynamic analysis of the hydrolysis of borate-based lithium salts by Density Functional Theory*, Journal of Electrochemistry Society, 2022, 169, 7, 070523
- O. Palumbo, G.B. Appetecchi, G. Maresca, J-B Brubach, P. Roy, **S. Di Muzio**, F. Trequattrini, D. Bordignon, F. Legrand, A. Falgayrat, L. Rongyn, S. Fantini *Synthesis, Physical Properties and Electrochemical Applications of Two Ionic Liquids Containing the Asymmetric (Fluoromethylsulfonyl (Trifluoromethylsulfonyl)imide Anion Applied Science*, 2022, 12(9), 4524
- **S. Di Muzio**, O. Russina, D. Mastrippolito, P. Benassi, L. Rossi, A. Paolone, F. Ramondo *Mixtures of choline chloride and tetrabutylammonium bromide with imidazole as examples of deep eutectic solvents: their structure by theoretical and experimental investigation* Journal of Molecular Liquids, 2022, 352, 118427
- **S. Di Muzio**, A. Paolone, S. Brutti *Thermodynamics of the Hydrolysis of Lithium Salts: Pathways to the Precipitation of Inorganic SEI Components in Li-Ion Batteries* Journal of Electrochemical Society, 2021, 168, 10, 100514
- **S. Di Muzio**, F. Ramondo, L. Gontrani, F. Ferella, M. Nardone, P. Benassi *Choline Hydrogen Dicarboxylate Ionic Liquids by X-ray scattering, Vibrational Spectroscopy and Molecular Dynamics: H-Fumarate and H-Maleate and their conformations* Molecules, 2020, 25, 4990
- A.R.Smith, **S. Di Muzio**, F. Ramondo and G. Meloni *Peroxy self-reaction leading to the formation of furfural*, Phys. Chem. Chem. Phys., 2019, 21, 10228-10237

Capitoli di libro

- L. Gontrani, **S. Di Muzio**, F. Ramondo, M. Carbone, A. Mariani *MD simulations and X Ray scattering* in Comprehensive Computational Chemistry-Elsevier, 2023 (**in stampa**)

Numero di citazioni (Scopus): 19

Numero di citazioni (Scholar): 21

H-index (Scopus): 3

H-index (Scholar): 3

Dati Personali

Autorizzo il trattamento dei miei dati personali ai sensi del Decreto Legislativo 30 giugno 2003, n. 196 "Codice in materia di protezione dei dati personali".

Il sottoscritto dichiara di essere consapevole che il presente *curriculum vitae* sarà pubblicato sul sito istituzionale dell'Ateneo, nella Sezione "Amministrazione trasparente", nelle modalità e per la durata prevista dal d.lgs. n. 33/2013, art. 15.

Il sottoscritto presenta questo curriculum firmato come dichiarazione sostitutiva di certificazione ai sensi del DPR 445/2000 ed è consapevole delle sanzioni penali nelle quali incorrerebbe per dichiarazioni mendaci. Tale curriculum è accompagnato da fotocopia di un documento di riconoscimento valido (art. 76 DPR 445/2000).

Roma, 24 Marzo 2023

f.to Simone Di Muzio