

INFORMAZIONI PERSONALI **Prestianni Antonio**POSIZIONE RICOPERTA **Personale ctg. D, Area Tecnico-Scientifica**ESPERIENZA
PROFESSIONALE

-
- 27/12/2018–alla data attuale **Personale, Area Tecnico-Scientifica**
Dipartimento di Fisica e Chimica, Università degli Studi di Palermo, Palermo (Italia)
- 28/11/2018–22/12/2018 **Supplenza, docenza di matematica e scienze per la scuola secondaria di primo grado**
Istituto Comprensivo Castellana Sicula - Polizzi Generosa
- 19/12/2013–19/12/2016 **Ricercatore a t.d. - t.pieno (art. 24 c.3-a L. 240/10)**
Università degli Studi di Palermo, Palermo (Italia)
- 2016–2017 **Docente titolare del corso di Chimica Generale ed Inorganica (60 ore – 6 cfu) per il corso di laurea in Scienze e Tecnologie Agrarie**
Università degli Studi di Palermo
- 2015–2016 **Docente titolare del corso di Chimica Generale ed Inorganica (60 ore – 6 cfu) per il corso di laurea in Scienze Forestali ed Ambientali**
Università degli Studi di Palermo
- 2014–2015 **Docente titolare del corso di Chimica Generale ed Inorganica (60 ore – 6 cfu) per il corso di laurea in Scienze Forestali ed Ambientali**
Università degli Studi di Palermo
- 2014–2015 **Docente titolare del corso di recupero di Chimica Generale ed Inorganica (30 ore) per gli studenti di corsi di laurea afferenti alla Scuola di Scienze di Base**
Università degli Studi di Palermo
- 02/04/2012–19/12/2013 **Assegnista Post-Doc nell'ambito del progetto europeo POLYCAT, analisi DFT nell'ambito della catalisi eterogenea su microreattori a matrice polimerica**
Università degli Studi di Palermo
- 01/02/2011–01/11/2011 **Incarico di ricerca CO.CO.CO nell'ambito del progetto europeo POLYCAT**
Università degli Studi di Palermo
- 12/2010–01/2011 **Docente del modulo analisi, valorizzazione e tipicizzazione dei prodotti agricoli**

locali nell'ambito del progetto POR2007.IT.051PO.003/IV/12/F/9.2.5/0474 -
Caratterizzazione spettrofotometrica ed analisi chimica dei grassi vegetali
I.I.S Luigi Failla Tedaldi di Castelbuono (PA)

- 05/01/2009–05/01/2010 **Ricercatore a contratto Fellowship, Analisi DFT (Density Functional Theory) di leganti e complessi di nitrato d'uranile nell'ambito dell'estrazione e del riciclo delle scorie nucleari**
Ecole Nationale Superieure de Chimie de Paris (ENSCP), rue Pierre et Marie Curie, Parigi, (Francia)
- 2008–2009 **Assegnista Post-Doc, analisi DFT applicate allo studio cinetico e termodinamico di catalizzatori eterogenei zeolitici di tipo H-ZSM-5 e H-Y.**
Università degli Studi di Palermo
- 2007–2009 **Assegnista Post - Doc nell'ambito del progetto europeo NANOCAT-STREP (2005-2008) dal titolo: Tailored Nanosized Metal Catalysts via Engineering of their Structure and Local Environment**
Università degli Studi di Palermo

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

- 01/2004–04/2007 **Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche (XVIII ciclo): "Evidenze sperimentali e analisi computazionale nello studio dell'ossidazione catalitica del monossido di carbonio su particelle di oro di taglia nanometrica"**
Università degli Studi di Palermo
- 11/09/2006–16/09/2006 **Attestato di partecipazione alla scuola di dinamica molecolare dal titolo " Modélisation en chimie: technique de la dynamique moléculaire en phase condensée", ENSCP**
ENSCP (Ecole Nationale Superieure de Chimie de Paris), Parigi (Francia)
- 27/09/2004–08/10/2004 **Attestato di partecipazione X scuola nazionale di scienza dei materiali**
Sestri-Levante (GE) (Italia)
- 12/2002 **Abilitazione all'esercizio della professione di chimico**
Università degli Studi di Palermo
- 1996–2002 **Laurea (vecchio ordinamento) in Scienze Chimiche (Voto 105/110)**
Università degli Studi di Palermo
- 1990–1995 **Diploma di maturità scientifica (voto 52/60)**
Liceo Scientifico "E. Medi", Castelbuono (PA) (Italia)
- 05/12/2019–05/12/2019 **Attestato di partecipazione al corso di formazione "L'applicazione di AVA2 e le procedure di Assicurazione di Qualità"**
Università degli Studi di Palermo, Palermo (Italia)

COMPETENZE PERSONALI

Lingua madre italiano

Lingue straniere

	COMPRESIONE		PARLATO		PRODUZIONE SCRITTA
	Ascolto	Lettura	Interazione	Produzione orale	
inglese	B2	C1	B2	B1	C1
francese	C1	C1	C1	C1	C1

Livelli: A1 e A2: Utente base - B1 e B2: Utente autonomo - C1 e C2: Utente avanzato
 Quadro Comune Europeo di Riferimento delle Lingue

Competenze organizzative e gestionali

Co-estensione e rendicontazione del progetto POLYCAT-LSICP (2010-2014) :
 Modern Polymer-Based Catalysts and Microflow Conditions as Key Elements of Innovations in Fine Chemicals Syntheses
 Progetto approvato per 10 milioni di euro, inizio 01/10/2010

Competenze professionali

Gestione di Cluster e Workstations ad alte prestazioni per calcolo computazionale basati su sistemi UNIX. Utilizzo dei software Gaussian 09 e SIESTA: molecular modeling basato su calcolo quantomeccanico.

Principali tecniche chimiche e metodi strumentali di laboratorio.
 Sintesi di catalizzatori di metallo supportato mediante i metodi Deposition-Precipitation e SMAD (Solvated Metal Atom Dispersion).

Competenze digitali

AUTOVALUTAZIONE				
Elaborazione delle informazioni	Comunicazione	Creazione di Contenuti	Sicurezza	Risoluzione di problemi
Utente avanzato	Utente avanzato	Utente avanzato	Utente avanzato	Utente avanzato

Competenze digitali - Scheda per l'autovalutazione

Sistemi Operativi conosciuti: Dos, Linux, Symbian, Windows. Android

Linguaggi Web conosciuti: HTML, PHP, WIKI.

Software Generici: Office Suite, Adobe CS, Secure file transfer client, ssh client, terminal X, LATEX.

Software Scientifici: ChemSketch, ChemWin, GSAS (General Structure Analysis System), Matlab, Gaussian 09, SIESTA, molden, molekel, gopenmol, gaussview, kaleidagraph, Origin, Vesta, Avogadro.

Patente di guida A, B

ULTERIORI INFORMAZIONI

Curatela

Curatore della versione italiana del libro di testo "*Chimica Inorganica Descrittiva*" di Geoff Rayner-Canham e Tina Overton. **Edizioni Edises**

Pubblicazioni scientifiche e conferenze

- DFT calculations on subnanometric metal catalysts: a short review on new supported materials**, Cortese, R., Schimmenti, R., Prestianni, A., Duca, D., Theor. Chem. Acc. 2018, 137: 59.
- A Combined Theoretical and Experimental Approach for Platinum Catalyzed 1,2-Propanediol Aqueous Phase Reforming**, Schimmenti, R., Cortese, R., Godina, L., Prestianni,

- A., Ferrante, F., Duca, D., Murzin, D.Yu., J. Phys. Chem. C 121, 14636, 2017.
- **Graph-Based Analysis of Ethylene Glycol Decomposition on a Palladium Cluster**, Cortese, R., Schimmenti, R., Ferrante, F., Prestianni, A., Decarolis, D., Duca, D., J. Phys. Chem. C 121, 13606, 2017.
 - **The Complete Basis Set Full-CI Roto-vibrational Spectroscopic Constants of AlH, AlH⁺ and AlH⁻**, F. Ferrante, A. Prestianni, N. Armata, Theor. Chem. Acc. 2017, 136: 3.
 - **H₂ hitting on graphene supported palladium cluster: molecular dynamics simulations**, A. Prestianni, F. Ferrante, D. Duca, Theor. Chem. Acc. 2017, 136:6.
 - **A DFT Investigation on the Nucleation of Homo-and Heteronuclear Metal Clusters on Defective Graphene**, F. Ferrante, A. Prestianni, R. Cortese, R. Schimmenti, D. Duca, J. Phys. Chem. C 120, 12022, 2016.
 - **Growth of sub-nanometric palladium clusters on boron nitride nanotubes: a DFT study**, R. Schimmenti, R. Cortese, F. Ferrante, A. Prestianni, D. Duca, Phys. Chem. Chem. Phys. 18, 1750, 2016.
 - **α-D-Glucopyranose Adsorption on a Pd₃₀ Cluster Supported on Boron Nitride Nanotube**, A. Prestianni, R. Cortese, F. Ferrante, R. Schimmenti, D. Duca, S. Hermans, D. Yu. Murzin, Topics in Catalysis 59, 1178, 2016.
 - **Investigation of Polyol Adsorption on Ru, Pd, and Re Using vdW Density Functionals**, R. Cortese, R. Schimmenti, N. Armata, F. Ferrante, A. Prestianni, D. Duca, D. Yu Murzin, J. Phys. Chem. C 119, 17182, 2015.
 - **Shape-dependence of Pd nanocrystal carburization during acetylene hydrogenation**, M. Crespo-Quesada, S. Yoon, M. Jin., A. Prestianni, R. Cortese, F. Cárdenas-Lizana, D. Duca, Y. Xia, A. Weidenkaff and L. Kiwi-Minsker, J. Phys. Chem. C 119, 1101, 2015.
 - **Structure Sensitivity of 2-methyl-3-butyn-2-ol Hydrogenation on Pd: Computational and Experimental Modeling**, A. Prestianni, M. Crespo-Quesada, R. Cortese, F. Ferrante, L. Kiwi-Minsker and D. Duca, J. Phys. Chem. C 118, 3119, 2014.
 - **Computational investigation of alkynols and alkyndiols hydrogenation on a palladium cluster**, F. Ferrante, A. Prestianni, D. Duca, J. Phys. Chem. C 118, 551, 2014.
 - **Density functional theory investigation on the nucleation and growth of small palladium clusters on a hyper-cross-linked polystyrene matrix**, A. Prestianni, F. Ferrante, Sulman E.M., D. Duca, J. Phys. Chem. C 118, 21006, 2014.
 - **Oxygen-Assisted Hydroxymatairesinol Dehydrogenation: A Selective Secondary- Alcohol Oxidation over Gold Catalysts**, A. Prestianni, F. Ferrante, O. A. Simakova, D. Duca, D. Yu Murzin, Chem. Eur. J. 19, 4577, 2013.
 - **Propan-2-ol dehydration on H-ZSM-5 and H-Y zeolite: a DFT study**, A. Prestianni, R. Cortese, D. Duca, Reac. Kinet., Mech. Cat. 108, 565, 2013.
 - **Factors Controlling the Energy of Nitrogen Monolayer Coverage on High Surface Area Catalyst Oxide Carriers**, F. Arena, F. Ferrante, L. Spadaro, A. Prestianni, A. Raneri, D. Duca, J. Phys. Chem. C 115, 24728, 2011.
 - **A Density Functional Theory Study of Uranium (VI) Nitrate Monoamides Complexes**, Prestianni, L. Joubert, A. Chagnes, G. Cote, C. Adamo, Phys. Chem. Chem. Phys., 13, 19371, 2011.
 - **Hydrogenolysis of hydroxymatairesinol on Y derived catalysts: a computational study**, G. Barone, G. Li Manni, A. Prestianni, D. Duca, H. Barnas, D. Yu. Murzin, J. mol catal. A: Chem. 333, 136, 2010.
 - **IR Fingerprints of U(VI) Nitrate Monoamides Complexes: A Joint Experimental and Theoretical Study**, A. Prestianni, L. Joubert, A. Chagnes, G. Cote, M.-N. Ohnet, C. Rabbe, M.-C. Charbonnel, and C. Adamo, J. Phys. Chem. A 114, 10878, 2010.
 - **Acridine orange in a pumpkin-shaped macrocycle: Beyond solvent effects in the UV-visible spectra simulation of dyes**, T. Le Bahers, S. Di Tommaso, C. Peltier, G. Fayet, R. Giacobazzi, V. Tognetti, A. Prestianni, F. Labat, J. Mol. Struct.: THEOCHEM 954, 45, 2010.
 - **Structural and kinetic DFT characterization of materials to rationalize catalytic performance**, N. Armata, G. Baldissin, G. Barone, R. Cortese, V. D'Anna, F. Ferrante, S. Giuffrida, G. Li Manni, A. Prestianni, T. Rubino, D. Duca, Topics in catal. 52, 444, 2009
 - **Molecular-level characterization of heterogeneous catalytic systems by algorithmic time dependent Monte Carlo**, Armata, N., Baldissin, G., Barone, G., Cortese, R., D'Anna, V., Ferrante, F., Giuffrida, S., Li Manni, G., Prestianni, A., Rubino, T., Varga, Z., Duca, D. Topics in

catal. 52, 431, 2009.

- **A DFT investigation of CO oxidation over neutral and cationic gold clusters**, A. Prestianni, A. Martorana, F. Labat, I. Ciofini and C. Adamo, J. Mol. Struct.: THEOCHEM 903, 34, 2009.
- **But-2-ene Catalytic Isomerization on 22T H-ZSM-5 Zeolite Cavity: a DFT Study**, G. Barone, N. Armata, A. Prestianni, T. Rubino, D. Duca, D. Yu. Murzin, J. Comp. Theo. Chem. 5, 1274, 2009.
- **CO oxidation on cationic gold clusters: a theoretical study**, A. Prestianni, A. Martorana, F. Labat, I. Ciofini and C. Adamo, J. Phys Chem. C 112, 18061, 2008.
- **Metal-support and preparation influence on the structural and electronic properties of gold catalysts**. M. P. Casaletto, A. Longo, A. M. Venezia, A. Martorana, and A. Prestianni, J. Appl. Catal. A: General; 302, 309, 2006.
- **Metal-Support Interaction and Redox Behavior of Pt(1 wt %)/Ce_{0.6}Zr_{0.4}O₂**. G. Deganello, L.F. Liotta, A. Longo, G. Pantaleo F. Giannici, A. Martorana, A. Prestianni A. Balerna. J. Phys. Chem. B; 110, 8731, 2006.
- **XPS study of supported gold catalysts: the role of Au⁰ and Au⁺ species as active sites**, M. P. Casaletto, A. Longo, A. M. Venezia, A. Martorana., and A. Prestianni, Surface and interface analysis, 38, 215, 2006.
- **Theoretical Insights on O₂ and CO Adsorption on Neutral and Positively Charged Gold Clusters**, A. Prestianni, A. Martorana, F. Labat, I. Ciofini and C. Adamo, J. Phys. Chem. B, 110, 12240, 2006.
- **Structural evolution of Pt/ceria-zirconia TWC catalysts during the oxidation of carbon monoxide**. A. Martorana, G. Deganello, A. Longo, A. Prestianni, L. Liotta, A. Macaluso, G. Pantaleo, A. Balerna, S. Mobilio. J. Solid State Chem. 177, 1268, 2004.
- **In situ XRD Study of TWC Catalysts: effects of Pt and Pd metals on reductive and oxidative conditions** A. Martorana, G. Deganello, A. Longo, A. Prestianni, L. Liotta, A. Macaluso, G. Pantaleo, A. Balerna, S. Mobilio. Presentato al convegno CAPOC6, Bruxelles, 22-24 Ottobre 2003.
- **Effects of Pt metal on reductive and oxidative conditions in the TWC Catalysts: in situ XRD study**. A. Martorana, G. Deganello, A. Longo, A. Prestianni, L. Liotta, A. Macaluso, G. Pantaleo, A. Balerna, S. Mobilio. Presentato al convegno congiunto AIC-SILS, Trieste 21-25 luglio 2003.
- **Debye function analysis of synchrotron XRD data: stacking faults and microstrains inspherical palladium crystallites**, A. Balerna, A. Longo, A. Martorana, A. Prestianni XII congresso della Società Italiana di Luce di Sincrotrone, AIC-SILS Camerino, 5-8 Luglio 2004.
- **Nanostructured gold catalysts for low temperature CO oxidation**, A. Prestianni M. P. Casaletto, G. Deganello, A. Longo, A. M. Venezia, A. Martorana., XIII congresso della Società Italiana di Luce di Sincrotrone, AIC-SILS Modena 7-9 Luglio 2005.
- **XPS study of supported gold catalysts: the role of Au⁰ and Au⁺ species as active sites**, M. P. Casaletto, A. Longo, A. M. Venezia, A. Martorana., A. Prestianni ECASIA05 (European Conference on Applications of Surface and Interface Analysis) Vienna 25-30 settembre 2005.
- **On the occurrence of noncrystallographic arrangements in nanostructured Au samples prepared by SMAD: an EXAFS and XRD study**. A. Longo, A. Prestianni, A. Martorana, A. Balerna, T. Comaschi, C. Meneghini, S. Mobilio. Primo Workshop SILS, Gargnano (BS) 2-3 Marzo 2006.
- **Structural study of nanostructured Au clusters prepared by metal vapour deposition**, A. Martorana, A. Prestianni, A. Longo, A. Balerna, T. Comaschi, C. Meneghini and S. Mobilio, AIC-SILS Napoli 6-8 Luglio 2006.
- **Propan-2-ol dehydration on acidic zeolite fragments: a DFT study**, A. Prestianni, G. Barone, D. Duca, 2nd European Chemistry Congress, Torino 16-20 Settembre 2008.
- **A combined experimental and density functional theory study of nitrate uranyl(VI) monoamide complexes in gas and liquid phases** A. Prestianni, L. Joubert, C. Adamo, G. Cote, A. Chagnes, M-N Ohnet, C. Rabbe, M-C Charbonnell, P. Moisy, VHM Canet-Plage 27 Maggio - 1 Giugno 2009.
- **Hydroxymatairesinol Oxidation to Oxomatairesinol on Gold** A. Prestianni, D. Duca, D. Y. Murzin, XXIV Congresso Nazionale della Società Chimica Italiana Lecce 11-16 settembre 2011.
- **Computational approaches used in the POLYCAT EU project**, Cortese, R; Ferrante, F; Armata, N; Lo Celso, F; Prestianni, A; Duca, D, I Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, DCTC 2012, Pisa 22-23 Febbraio 2012.
- **POLYCAT, hypercrosslinked polystyrene, catalysis**, Armata, N; Cortese, R; Ferrante, F;

Lo Celso, F; Prestianni, A; Duca, D, XL Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Inorganica, Sestri Levante 9 - 13 settembre 2012.

- **Selective hydrogenation of 2-methyl-butyn-2-ol on Pd catalysts** Cortese, R; Ferrante, F; Prestianni, A; Duca, D, Il Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, DCTC 2013, Padova, 20-22 Febbraio 2013.
- **Computational approaches employed in the SusFuelCat project**, Ferrante, F; Armata, N; Cortese, R; Lo Celso, F; Prestianni, A; Duca, D, Il Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana, DCTC 2013, Padova, 20-22 Febbraio 2013.
- **Hydrogenation of but-2-yne-1,4-diol on a palladium cluster: a computational study** Duca, D; Ferrante, F; Prestianni, A, 10th Congress on Catalysis Applied to Fine Chemicals, Turku (Finland), 16-19 giugno 2013.
- **Computational approaches employed in the SusFuelCat Project** Ferrante, F; Armata, N; Cortese, R; Lo Celso, F; Prestianni, A; Duca, D, DCTC13 Il Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana
- **Selective hydrogenation of 2-methyl-butyn-2-ol on Pd catalysts** Cortese, R., Ferrante, F., Prestianni, A., and Duca, D. Atti del II Congresso della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della Società Chimica Italiana 2013
- **Growth of Palladium Clusters on a Boron Nitride Nanotube Support**, Schimmenti, R.; Cortese, R.; Ferrante, F.; Prestianni, A.; Duca, D. Chitel 2015 abstracts book. Torino 2015
- **NAOs and vdW-DF for simulating CO₂ adsorption of water and polyols on metal surfaces**, Cortese, R.; Schimmenti, R.; Ferrante, F.; Prestianni, A.; Duca, D. Chitel 2015 abstracts book. Torino 2015.
- **Computational Investigation of Palladium Supported Boron Nitride Nanotube Catalysts**, Schimmenti, R., Cortese, R., Ferrante, F., Prestianni, A., and Duca, D. EuropaCat XII Abstract book 2015.
- **DFT investigation of polyalcohols reforming on palladium cluster**, Schimmenti, R., Cortese, R., Ferrante, F., Prestianni, A., and Duca, D. FisMat 2015 Book of abstract.
- **Computational study of metal-free N-doped carbon networks as hydrogenation catalysts**. Schimmenti, R., Cortese, R., Ferrante, F., Prestianni, A., and Duca, D. FisMat 2015 book of abstract.
- **Palladium clusters on BNNT as catalysts for biomass conversion**, Schimmenti, R., Cortese, R., Ferrante, F., Prestianni, A., and Duca, D. FisMat 2015 book of abstract.
- **Theoretical Investigation of Aqueous Phase Reforming of 1,2 Propanediol over a Pt catalyst**, Schimmenti, R., Cortese, R., Ferrante, F., Prestianni, A., and Duca, D. FisMat 2015 book of abstract.