



Antonio Prestianni

Nazionalità: Italiana

CONTATTI

 Viale delle Scienze Ed. 17
90129 PALERMO, Italia (**Lavoro**)

 antonio.prestianni@unipa.it

 (+39) 09123897943

ESPERIENZA LAVORATIVA

27/12/2018 – ATTUALE Palermo, Italia

Personale ctg D, Area Tecnico-Scientifica Dipartimento di Fisica e Chimica, Università degli Studi di Palermo

Responsabile dell'U.O Didattica del dipartimento di Fisica e Chimica
Contact person Erasmus del dipartimento di Fisica e Chimica
Assistenza ai laboratori didattici del corso di laurea magistrale in Chimica

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 Palermo, Italia

Ricercatore a t.d. - t.pieno (art. 24 c.3-a L. 240/10) Università degli Studi di Palermo

2016 – 2017

Docente titolare di Chimica per il corso di laurea in Scienze e Tecnologie Agrarie Università degli Studi di Palermo

2015 – 2016

Docente titolare di Chimica per il corso di laurea in Scienze e Tecnologie Agrarie Università degli Studi di Palermo

2014 – 2015

Docente titolare di Chimica per il corso di laurea in Scienze e Tecnologie Agrarie Università degli Studi di Palermo

2014 – 2015

Docente titolare del corso di recupero di Chimica Generale ed Inorganica 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 Università degli Studi di Palermo

Analisi DFT nell'ambito della catalisi eterogenea su microreattori a matrice polimerica

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 chimica nel progetto POR2007.IT. 051PO.003/IV/12/F/9.2.5/0474 - I.I.S Luigi Failla Tedaldi di Castelbuono (PA)

Docente di analisi, valorizzazione e tipizzazione 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

05/01/2009 – 05/01/2010 Parigi, Francia

Ricercatore a contratto Fellowship, Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Paris (ENSCP)

Analisi DFT (Density Functional Theory) di leganti e complessi di nitrato d'uranile nell'ambito dell'estrazione e del riciclo delle scorie nucleari

2008 – 2009

Assegnista Post-Doc Università degli Studi di Palermo

Analisi DFT applicate allo studio cinetico e termodinamico di catalizzatori eterogenei zeolitici di tipo H-ZSM-5 e H-Y.

2007 – 2009

Assegnista Post - Doc nell'ambito del progetto europeo NANOCAT-STREP Università degli Studi di Palermo

Tailored Nanosized Metal Catalysts via Engineering of their Structure and Local Environment

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 Parigi, Francia

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 Supérieure de Chimie de Paris)

27/09/2004 – 08/10/2004 Sestri-Levante (GE), Italia

Attestato di partecipazione X scuola nazionale di scienza dei materiali

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 Castelbuono (PA), Italia

Diploma di maturità scientifica (voto 52/60) Liceo Scientifico "E. Medi"

05/12/2019 – 05/12/2019 Palermo, Italia

Attestato di partecipazione al corso di formazione "L'applicazione di AVA2 e le procedure di Assicurazione di Qualità" Università degli Studi di Palermo

28/06/2021 – 28/06/2021

Attestato partecipazione al corso di formazione - qualità del lavoro, benessere organizzativo e performance Università degli Studi di Palermo

07/06/2021 – 08/06/2021

Attestato di partecipazione al corso di formazione Il Regolamento di Ateneo in materia di protezione dei dati personali in attuazione del Regolamento UE Università degli Studi di Palermo

03/05/2021 – 04/05/2021

Attestato di partecipazione al corso di formazione Lavoro agile. Aspetti normativi e organizzativi Università degli Studi di Palermo

12/01/2021 – 09/03/2021

Attestato di partecipazione al corso di formazione Strumenti per l'elaborazione e la gestione di progetti di internazionalizzazione e cooperazione internazionale - I ed. Università degli Studi di Palermo

09/07/2020 – 10/07/2020

Attestato di partecipazione al corso di formazione I servizi di front office agli studenti Università degli Studi di Palermo

19/11/2019 – 19/11/2019

Attestato di partecipazione al corso di formazione Ricerca & laboratori

25/10/2021 – 26/10/2021

Attestato di partecipazione al corso di formazione Il rischio da radiazioni ionizzanti in Ateneo ed il nuovo D.Lgs. 101/2020 (ai sensi degli artt. 110 e 111 del D.Lgs. 101/2020 e dell'art. 37 del D.Lgs 81/2008) - Edizione 1 Università degli Studi di Palermo

17/06/2022 – 19/06/2022

Attestato partecipazione al corso di formazione - La relazione con la disabilità Università degli Studi di Palermo

COMPETENZE LINGUISTICHE

LINGUA MADRE: italiano

Altre lingue:

inglese

Ascolto	Lettura	Produzione orale	Interazione orale	Scrittura
B2	C1	B1	B2	C1

francese

Ascolto	Lettura	Produzione orale	Interazione orale	Scrittura
C1	C1	C1	C1	C1

Livelli: A1 e A2: Livello elementare B1 e B2: Livello intermedio C1 e C2: Livello avanzato

COMPETENZE DIGITALI

Alfabetizzazione informatica e digitale - avanzato | Sicurezza (avanzato) | Comunicazione e collaborazione (avanzato) | Risoluzione dei problemi (avanzato) | Creazione di contenuti digitali (avanzato)

ULTERIORI INFORMAZIONI

Competenze organizzative

Competenze organizzative 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

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 quanto-meccanico.

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).

Curatela

Curatela

Pubblicazioni 2022-2017

Pubblicazioni scientifiche e conferenze

Applied Catalysis B: Environmental 300, 120715 (2022)

DFT and kinetic evidences of the preferential CO oxidation pattern of manganese dioxide catalysts in hydrogen stream (PROX), Francesco Arena, Francesco Ferrante, Roberto Di Chio, Giuseppe Bonura, Francesco Frusteri, Leone Frusteri, Antonio Prestianni, Sara Morandi, Gianmario Martra, Dario Duca

Data in brief 38, 107369 (2021)

Structural, energetic and kinetic database of catalytic reactions: Benzyl alcohol to benzaldehyde oxidation on MnOx clusters, L Gucci, F Ferrante, A Prestianni, F Arena, D Duca

Molecular Catalysis 513, 111735 (2021)

Benzyl alcohol to benzaldehyde oxidation on MnOx clusters: Unraveling atomistic features, L Gucci, F Ferrante, A Prestianni, F Arena, D Duca

Catalysts 10 (11), 1306 (2020)

H2 Transformations on Graphene Supported Palladium Cluster: DFT-MD Simulations and NEB Calculations F Ferrante, A Prestianni, M Bertini, D Duca

Inorganica Chimica Acta 511, 119812 (2020)

DFT insights into the oxygen-assisted selective oxidation of benzyl alcohol on manganese dioxide catalysts, L Gucci, F Ferrante, A Prestianni, R Di Chio, AF Patti, D Duca, F Arena

Molecular Catalysis 493, 110891 (2020)

Alkane dehydrogenation on defective BN quasi-molecular nanoflakes: DFT studies, R Cortese, D Campisi, A Prestianni, D Duca

Theor. Chem. Acc. 2018, 137: 59

DFT calculations on subnanometric metal catalysts: a short review on new supported materials, Cortese, R., Schimmenti, R., Prestianni, A., Duca, D., .

J. Phys. Chem. C 121, 14636, 2017.

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, 13606, 2017.

Graph-Based Analysis of Ethylene Glycol Decomposition on a Palladium Cluster, Cortese, R., Schimmenti, R., Ferrante, F., Prestianni, A., Decarolis, D., Duca, D.,

Theor. Chem. Acc. 2017, 136: 3.

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, 136:6.

H₂ hitting on graphene supported palladium cluster: molecular dynamics simulations, A. Prestianni, F. Ferrante, D. Duca,

Pubblicazioni

Pubblicazioni 2016-2011

- **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, *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.

Pubblicazioni 2011-2004

- **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.

Conferenze

Conferenze nazionali

- **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 in spherical palladium crystallites**, A. Balerna, A. Longo, A. Martorana, A. Prestianni XII congresso della Società Italiana di Luce di Sinchrotrone, 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 Sinchrotrone, AIC-SILS Modena 7-9 Luglio 2005.
- **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.
- **Hydroxymatairesinol Oxidation to Oxomatairesinol on Gold** A. Prestianni, D. Duca, D. Y. Murzin, XXIV Congresso Nazionale della SCI 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; LoCelso, 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.
- **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

Conferenze internazionali

- **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.
- **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.
- **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.
- **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.
- e, F.; Prestianni, A.; Duca, D. Chitel 2015 abstracts book. Torino 2015
- **NAOs and vdW-DF for simulating co-adsorption of water and polyols on metal surfaces**, Cortese, R.; Schimmenti, R.; Ferrante, F.; Prestianni, A.; Duca, D, 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.

Patente di guida

• Patente di guida: A

• Patente di guida: B

Autorizzo il trattamento dei miei dati personali presenti nel CV ai sensi dell'art. 13 d. lgs. 30 giugno 2003 n. 196 - "Codice in materia di protezione dei dati personali" e dell'art. 13 GDPR 679/16 - "Regolamento europeo sulla protezione dei dati personali".