

Curriculum Vitae

INFORMAZIONI PERSONALI

Nome DARIO
Cognome DUCA
Recapiti Dipartimento di Fisica e Chimica

Telefono 091-23897975
Fax 091-590015
E-mail dario.duca@unipa.it
dduca@ccc.unipa.it

FORMAZIONE TITOLI

DD. si è laureato, summa cum laude, in Chimica presso l'Università di Palermo nel giugno 1986 avendo svolto la tesi "Indagini su diorganostagno (IV) derivati con leganti solforati". Ha conseguito l'abilitazione professionale nel novembre dello stesso anno. Dottorando del III anno, nel IV ciclo di "Dottorato in Scienze Chimiche" presso l'Università degli Studi di Palermo, ha vinto, novembre 1990, una borsa per un corso di specializzazione biennale del CNR. Ha usufruito della stessa presso il Dipartimento di Chimica Inorganica di Palermo sino al novembre 1992. Da tale data, ha lavorato per un anno, finanziato da una borsa di studio della Pumex S.p.A. di Lipari, presso l'ICTPN-CNR di Palermo. Dal dicembre 1993 è stato ricercatore dell'ICTPN-CNR ed è stato membro del Consiglio Scientifico dello stesso Istituto. DD. dal novembre 1998 è stato professore associato di Chimica Generale, raggruppamento C03X, presso la Facoltà di Farmacia dell'Università di Salerno. Presso la stessa sede è stato membro del Collegio dei Docenti per il Dottorato di Ricerca in Scienze Farmaceutiche, responsabile del Laboratorio Didattico Informatico e responsabile di fondi 60% e giovani ricercatori. Dal settembre 2001 è professore ordinario di Chimica Generale, raggruppamento CHIM03, presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN. dell'Università di Palermo. In questa, ha ricoperto la carica di presidente del consiglio di corso di laurea in Conservazione e Valorizzazione della Biodiversità, dove deteneva i corsi di chimica generale e inorganica e di laboratorio di chimica generale. Ha pure insegnato nei corsi di laurea in Chimica (chimica inorganica III, elementi di chimica inorganica e modellistica chimica), Scienze Ambientali (chimica generale e inorganica) e Fisica (chimica I). E' stato membro e vice coordinatore del collegio dei docenti per il dottorato in Scienze Chimiche dell'Università di Palermo.

Nel 1994 per un periodo trimestrale, è stato ospite retribuito dell'Accademia delle Scienze d'Ungheria (MTA) presso l'Istituto Centrale di Scienze Chimiche (KFKI). Invitato presso lo stesso Istituto, ha lavorato tre mesi come ricercatore ospite nel 1995 e sei mesi nel 1996 e nel 1997. Nel 1995 per un periodo bimestrale è stato ospite retribuito della MTA presso l'Istituto degli isotopi (IKI-KFKI). Per periodi più brevi, è stato ospite sia in Italia sia all'estero di gruppi interessati ai diversi aspetti della catalisi eterogenea. E' stato relatore invitato presso diverse università, ha partecipato a congressi nazionali e internazionali (anche come relatore plenario) ed ha insegnato presso scuole a tema (sulla catalisi) internazionali.

ATTIVITA' DIDATTICA

DD. attualmente, insegna presso il corso di laurea in Chimica: chimica generale e inorganica (laurea triennale) e chimica metalorganica e catalisi (laurea magistrale). E' inoltre membro del collegio dei docenti per il dottorato in Scienze dei Materiali e Nanotecnologie avente sede consorziata presso le Università di Catania e Palermo. E' tutor istituzionale per gli studenti di primo anno del corso di laurea in Chimica.

RICERCHE FINANZIATE

DD. partecipa, anche nella qualità di responsabile, a progetti locali, nazionali e internazionali. In particolare è:

- responsabile nazionale del progetto NanoCat: Tailored Nanosized Metal Catalysts via Engineering of their Structure and Local Environment – STREP, 6° Programma quadro della Comunità Europea, NMP-2002-3.4.1.1-1 Expanding knowledge in size-dependant phenomena, 2005-2008;
- responsabile locale per il progetto PI2S2-PON "Ricerca" 2000-2006 del consorzio COMETA: Grid Time Dependent Monte Carlo Simulations of Nano Catalytic Systems – (PI2S2-MIUR 01.01.2006-31.12.2008);
- collaboratore del progetto PCCF-PRIN 2006: Protonic Conducting Ceramics for Fuel Cells – PRIN 2006-2008;

- collaboratore del progetto PC-SOFCs-PRIN 2008: PC-SOFCs Study of Chemical Reactivity at the Electrodes and of Electrolyte Proton Conduction by an Integrated Experimental-Computational Approach – PRIN 2010-2012;
- responsabile nazionale del progetto POLYCAT: Modern Polymer-Based Catalysts and Microflow Conditions as Key Elements of Innovations in Fine Chemicals Syntheses – LSICP, 7° Programma quadro della Comunità Europea, NMP-2009-3.2-1 Innovative pathways for sustainable chemical production, 2010-2014;
- responsabile nazionale del progetto SusFuelCat: Sustainable Fuel Production by Aqueous Phase Reforming – Understanding Catalysis and Hydrothermal Stability of Carbon Supported Noble Metals – SSICP, 7° Programma quadro della Comunità Europea, NMP.2012.1.1-1 Rational design of nano-catalysts for sustainable energy production based on fundamental understanding], 2013-2017;
- proponente del progetto LigNan: Tailor-Made Nano-Catalysts for Lignin Valorization – LSICP, 7° Programma quadro della Comunità Europea – NMP.2013.1.1-1 Exploration, Optimisation and Control of Nano-Catalytic Processes for Energy Applications, 2014-2018.

INCARICHI / CONSULENZE

DD. dal 2011 è membro, in rappresentanza dell'Università di Palermo, del Comitato Tecnico Scientifico del Consorzio – coinvolgente le Università di Catania, Messina e Palermo – COMETA.

Nel 2011, ha curato la traduzione della IV edizione del testo didattico Inorganic Chemistry, autori G. L. Miessler e D. A. Tarr, per la Piccin Nuova Libreria di Padova.

E' stato responsabile della postazione informatica per il calcolo scientifico del Dipartimento di Chimica "Stanislao Cannizzaro" (già Dipartimento di Chimica Inorganica e Analitica "Stanislao Cannizzaro") dell'Università di Palermo.

È stato membro della Giunta di Presidenza della Facoltà di Scienze MM.FF.NN. dal 2011 al 2013.

ASSOCIAZIONI SCIENTIFICHE

DD. è membro dell'American Chemical Society e della Società Chimica Italiana, presso la quale nell'ambito della divisione di Chimica Teorica e Computazionale è stato consigliere nel primo direttivo, eletto per il triennio 2011 – 2013.

PUBBLICAZIONE

Una breve selezione di articoli pubblicati da DD. a far data del 2009 è di seguito riportata:

1) Armata, N., Baldissin, G., Barone, G., Cortese, R., D'Anna, V., Ferrante, F., Giuffrida, S., Li Manni, G.,

Prestianni, A., Rubino, T., Varga, Zs., Duca, D.,

“Molecular-level characterization of heterogeneous catalytic systems by algorithmic time dependent Monte Carlo”

Top. Catal., **52**, 431-443 (2009).

2) Armata, N., Baldissin, G., Barone, G., Cortese, R., D'Anna, V., Ferrante, F., Giuffrida, S., Li Manni, G.,

Prestianni, A., Rubino, T., Duca, D.,

“Structural and kinetic DFT characterization of materials to rationalize catalytic performances”

Top. Catal., **52**, 444-455 (2009).

3) Barone, G., Armata, N., Prestianni, A., Rubino, T., Duca, D., Murzin, D. Yu.,
“Confined but-2-ene catalytic isomerization inside H-ZSM-5 models: a DFT study”

J. Chem. Theory Comput., **5 (5)**, 1274-1283 (2009).

4) Giuffrida, S., Barone, G., Duca, D.,

“Adsorbed CO on Group 10 Metal-Fragments: a DFT Study”

J. Chem. Inf. Model., **49**, 1223-1233 (2009).

5) Cammarata, A., Martorana, A., Duca, D.,

“Cation environment in BaCeO₃-based protonic conductors: a computational study”

J. Phys. Chem. A, **113 (22)**, 6381-6390 (2009).

6) D’Anna, V., Duca, D., Ferrante, F., La Manna, G.,

“DFT studies on catalytic properties of isolated and carbon nanotube supported Pd₉ cluster – I: adsorption, fragmentation and diffusion of hydrogen”

Phys. Chem. Chem. Phys., **11**, 4077-4083 (2009).

7) Barone, G., Duca, D., Ferrante, F., La Manna, G.,

“CASSCF/CASPT2 analysis of the fragmentation of H₂ on a Pd₄ cluster”

Int. J. Quantum Chem., **110**, 558-562 (2009).

8) Li Manni, G., Barone, G., Duca, D., Murzin, D. Yu.,

“Systematic conformational search analysis of the SRR and RRR epimers of 7-Hydroxymatairesinol”

J. Phys. Org. Chem., **23**, 141-147 (2010).

9) D’Anna, V., Duca, D., Ferrante, F., La Manna, G.,

“DFT studies on catalytic properties of isolated and carbon nanotube supported Pd₉ cluster – II: hydro-isomerization of butene isomers”

Phys. Chem. Chem. Phys., **12(6)**, 1323-1330 (2010).

10) Barone, G., Li Manni, G., Prestianni, A., Duca, D., Bernas, H., Murzin, D. Yu.,
“Hydrogenolysis of hydroxymatairesinol on Y derived catalysts: A computational study”

J. Mol. Catal. A: Chem., **333**, 136-144 (2010).

11) Giuffrida, S., Fontana, A., Maggio, F., Duca, D.,

“Synthesis, characterization and conformational analysis of chloro-bis(glycylglycinate)germanium(IV) chloride”

New J. Chem., **35 (4)**, 807-819 (2011) – doi: 10.1039/c0nj00851f.

12) Cammarata, A., Emanuele, A., Martorana, A., Duca, D.,

“Cation Environment of BaCeO₃-based protonic conductors II: new computational models”

J. Phys. Chem. A, **115(9)**, 1676-1685 (2011) – doi: 10.1021/jp1069797.

13) Cortese, R., Duca, D.,

“A DFT study of IRMOF-3 catalysed Knoevenagel condensation”

Phys. Chem. Chem. Phys., **13**, 15995-16004 (2011) – doi: 10.1039/c1cp21301f.

14) Ferrante, F., Rubino, T., Duca, D.,

“Butene isomerization and double-bond migration on the H-ZSM-5 outer surface: a density functional theory study”

J. Phys. Chem. C, **115(30)**, 14862-14868 (2011) – doi: 10.1021/jp203284f.

15) Arena, F., Ferrante, F., Spadaro, L., Prestianni, A., Raneri, A., Duca, D.,

“Factors Controlling the energy of nitrogen monolayer coverage on high surface area catalyst oxide carriers”

J. Phys. Chem. C, **115(50)**, 24728-24733 (2011) – doi: 10.1021/jp205370a.

16) Ferrante, F., Barone, G., Duca, D.,

“Relativistic coupled cluster calculations of the electronic structure of KrH⁺, XeH⁺ and RnH⁺”

Theor. Chem. Acc., **131(1)**, 165-171 (2012) – doi: 10.1007/s00214-012-1165-3.

17) Ferrante, F., Lo Celso, F., Duca, D.,

“Construction and characterization of models of hypercrosslinked polystyrene”

Coll. Polym. Sci., **290**, 1443-1450 (2012) – doi: 10.1007/s00396-012-2704-0.

18) Cammarata, A., Ordejón, A., Emanuele, A., Duca, D.,

“Y:BaZrO₃ perovskite compounds I: DFT study on the unprotonated and protonated local structures”

Chem. Asian J., **7**, 1827-1837 (2012) – doi: 10.1002/asia.201100974.

19) Cammarata, A., Emanuele, A., Duca, D.,

“Y:BaZrO₃ perovskite compounds II: designing protonic conduction by using MD models”

Chem. Asian J., **7**, 1838-1844 (2012) – doi: 10.1002/asia.201100975.

20) Cortese, R., Sifontes Herrera, V. A., Duca, D., Murzin, D. Yu.,

“L-Arabinose conformers adsorption on ruthenium surfaces: a DFT study”

J. Phys. Chem. C, **116**, 14908–14916 (2012) – doi: 10.1021/jp3026336.

21) Armata, N., Cortese, R., Triolo R., Duca, D.,

“Alkali-Metal-Azides interacting with MOFs”

ChemPhysChem, **14** (1), 220–226 (2013) – doi: 10.1002/cphc.201200752.

22) Prestianni, A., Cortese, R., Duca, D.,

“Propan-2-ol Dehydration on H-ZSM-5 and H-Y Zeolite: a DFT Study”

Reac. Kinet. Mechanisms Catal., **108** (2), 565–582 (2013) – doi: 10.1007/s11144-012-0522-5.

23) Prestianni, A., Ferrante, F., Simakova, O.A., Duca, D., Murzin, D.Yu.,

“Oxygen-Assisted Hydroxymatairesinol Dehydrogenation: A Selective Secondary-Alcohol Oxidation over a Gold Catalyst”

Chem. Eur. J, **19** (14), 4577–4585 (2013) – doi: 10.1002/chem.201202957.

24) Ferrante, F., Prestianni, A., Duca, D., "Computational Investigation of Alkynols and alkyndiols Hydrogenation on a Palladium Cluster"

J. Phys. Chem. C, **118 (1)**, 551–558 (2014) – doi: 10.1021/jp410878j.

25) Prestianni, A., Crespo-Quesada, M., Cortese, R., Ferrante, F., Kiwi-Minsker, L., Duca, D.,

"Structure Sensitivity of 2-methyl-3-butyn-2-ol Hydrogenation on Pd: Computational and Experimental Modeling"

J. Chem. Phys. C, **118 (6)**, 3119–3128 (2014) – doi: 10.1021/jp4114859.

26) Prestianni, A., Ferrante, F., Sulman, M.E., Duca, D.,

"DFT Investigation on the Nucleation and Growth of Small Palladium Clusters on a Hypercrosslinked Polystyrene Matrix"

J. Chem. Phys. C, **118 (36)**, 21006–21013 (2014) – doi: 10.1021/jp506320z.

27) Crespo-Quesada, M., Yoon, S., Jin, M., Prestianni, A., Cortese, R., Cárdenas-Lizana, F., Duca, D., Weidenkaff, A., Kiwi-Minsker, L.,

"Shape-Dependence of Pd Nanocrystal Carburization during Acetylene Hydrogenation"

J. Chem. Phys. C, **119 (2)**, 1101–1107 (2015) – doi: 10.1021/jp510347r.

28) Cortese, R., Ferrante, F., Roggan, S., Duca, D.,

"N-Doped Carbon Networks: Alternative Materials Tracing New Routes for Activating Molecular Hydrogen"

Chem. Eur. J, **21**, 3806–3814 (2015) – doi: 10.1002/chem.201405896.

29) Cortese, R., Duca, D.,

"Modeled Catalytic Properties of MOF-Based Compounds" in "Metal-Organic Frameworks: Materials Modeling Towards Potential Engineering Applications"

(Jianwen Jiang ed.) p. 517–551 Pan Stanford Publishing (Taylor & Francis Group), Singapore 2015, ISBN: 978-981-4613-45-3.

30) Cortese, R., Schimmenti, R., Armata, N., Ferrante, F., Prestianni, A., Duca, D., Murzin, D. Yu.,

"Investigation of Polyol Adsorption on Ru, Pd, and Re Using vdW Density Functionals"

J. Chem. Phys. C, **119 (30)**, 17182–17192 (2015) – doi: 10.1021/acs.jpcc.5b04007.

31) Schimmenti, R., Cortese, R., Ferrante, F., Prestianni, A., Duca, D.,

"Growth of sub-nanometric palladium clusters on boron nitride nanotubes: a DFT study"

Phys. Chem. Chem. Phys., **18**, 1750–1757 (2016) – doi: 10.1039/c5cp06625e.

32) Prestianni, A., Cortese, R., Ferrante, F., Schimmenti, R., Duca, R., Hermans, S., Murzin, D. Yu.,

"D-Glucopyranose Adsorption on a Pd30 Cluster Supported on Boron Nitride Nanotube"

Topics Catal., accepted for publication (2016).

33) Ferrante, F., Prestianni, A., Cortese, R., Schimmenti, R., Duca, D.,

"A DFT Investigation on the Nucleation of Homo- and Heteronuclear Metal Clusters on Defective Graphene"

J. Chem. Phys. C, submitted (2016).

ATTIVITA' SCIENTIFICHE

L'attuale interesse scientifico di DD. verte sullo studio di sistemi complessi inorganici e di processi catalitici. In particolare è centrato:

- sulla caratterizzazione morfo-strutturale e cinetica di catalizzatori metallici supportati, attraverso l'uso di modelli matematici stocastici (algoritmi Monte Carlo e *time dependent* Monte Carlo) e deterministici (algoritmi ODEs, vettoriali e grafici);
- sullo studio dei fenomeni di base della catalisi eterogenea (bi- e tri-fase) (e sull'interconnessione degli stessi a comporre i processi globali) attraverso approcci di dinamica molecolare, quanto meccanici (*ab initio* HF, post-HF e DFT) e Monte Carlo;
- sullo studio strutturale attraverso metodi semiempirici (AM1 e PM3) di molecole di interesse biologico e sul rapporto struttura chimismo delle stesse;
- sullo sviluppo di metodi che permettano la simulazione di proprietà spettroscopiche di sistemi mono- e bi-fase (gas-solido) di molecole d'interesse biologico, farmaceutico e catalitico mediante l'applicazione di metodi di calcolo *ab-initio*.
- sulle relazioni elementari esistenti fra processi catalitici diversi: in particolare, sulle connessioni modellistiche rilevabili fra processi catalitici omogenei eterogenei ed enzimatici.

AMBITI DI RICERCA

Nel corso della sua attività scientifica DD. ha definito:

- tecniche di titolazione che sfruttavano le spettroscopie ^1H NMR e Mössbauer utili allo studio di correlazione struttura-attività biologica a diversi pH di complessi di diorgano-stagno(IV) con leganti solforati;
- metodi per la preparazione di catalizzatori mono- e bi-metallici supportati su *carrier* naturale impiegando precursori organometallici non commerciali di Ni, Pd e Pt;
- nuovi reattori a bagno e a flusso e linee di reazione e analisi, GC e HPLC, da impiegare nello studio di reazioni eterogenee trifase;
- un metodo HPLC e algoritmi dedicati, da utilizzare nello studio morfo-strutturale di materiali usati come *carrier* di catalizzatori eterogenei, che hanno permesso di approfondire conoscenze strutturali già acquisite mediante tecniche SAXS e SANS sulla pomice di Lipari e determinare la natura frattalica di questo *carrier* catalitico naturale;
- algoritmi didattici e applicativi per lo studio di sistemi SAXS;
- algoritmi deterministici, vettoriali e stocastici impiegati nello studio del meccanismo d'idrogenazione di alchini, alcheni, dieni e miscele degli stessi su superfici di Pd, Pt e Pd-Pt, allo scopo di determinare correlazioni struttura-attività di sistemi catalitici;
- il nuovo metodo *time dependent* Monte Carlo che ha permesso di studiare sistemi non all'equilibrio mediante metodi Monte Carlo;
- un approccio computazionale che impiegando calcoli quantomeccanici e simulazioni Monte Carlo ha permesso una riscrittura del meccanismo di assorbimento, desorbimento, diffusione e idrogenazione su superfici metalliche, con caratteristiche morfo-strutturali diverse, di idrocarburi insaturi;
- algoritmi che permettono di trattare, anche graficamente, generiche reazioni su superfici metalliche strutturalmente diverse;
- algoritmi quanto meccanici per il calcolo di integrali di transizione e metodi per la riproduzione computazionale di spettri fotoelettronici.

Ha inoltre contribuito allo studio:

- strutturale e di attività di molecole metallorganiche di interesse biologico ed organiche di interesse farmacologico;
- strutturale di specie impiegate come substrati o specie modello in catalisi;
- strutturale mediante tecniche WAXS, SAXS, TEM e XPS di materiali aventi prospettive di impiego in catalisi;
- di correlazione fra struttura-morfologia di materiali e loro attività in catalisi;

- di modellizzazione di spettri IR, NMR, Mössbauer e XAS mediante approcci quanto meccanici.

ALTRE ATTIVITA

DD. è stato organizzatore:

- ottobre 2002, del *Mediterranean Seminar on Computational Chemistry for Complex System*;
- marzo 2007, del *5th NANOCAT Meeting*;
- marzo 2007, del *COST Action D26 – Integrative Computational Chemistry – Final Meeting*;
- aprile 2011, della *2nd POLYCAT General Assembly*;
- febbraio 2012, del Primo Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della SCI;
- febbraio 2013, del Secondo Congresso Nazionale della Divisione di Chimica Teorica e Computazionale della SCI.

Ha svolto e svolge attività di *referee* per:

- Journal of Catalysis,
- Physical Chemistry Chemical Physics,
- Theoretical Chemistry Accounts,
- European Journal of Inorganic Chemistry,
- Industrial & Engineering Chemistry Research,
- Journal of Molecular Catalysis A: Chemical,
- Journal of the American Chemical Society,
- Catalysis Letters,
- Studies in Surface Science and Catalysis,
- Surface Science,
- Tetrahedron,
- Spectrochimica Acta A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy,
- Journal of Computational Chemistry,
- Fuel Processing Technology,
- Journal of Molecular Structure (Theochem),
- Journal of Molecular Graphics and Modelling,
- Journal of Physical Chemistry,
- Journal of Physical Chemistry Letters,
- Chemical Engineering Journal,
- Chemical Physics Letters,
- Physical Chemistry Letters,
- Platinum Metal Review,
- Computational and Theoretical Chemistry,
- Microporous and Mesoporous Materials,
- Materials Chemistry and Physics,
- Topics in Catalysis,
- Polymer,
- Journal of Materials Chemistry,
- ACS Catalysis,
- Inorganic Chemistry,
- Arabian journal of Chemistry,
- Bulletin of Chemical Reaction Engineering & Catalysis,
- International Journal of Quantum Chemistry,
- Applied Surface Science.

Svolge regolarmente attività come valutatore di progetti PRIN e FIRB. È stato valutatore ANVUR per il VQR 2004-2010.

E' un canottiere in attività e, per il quadriennio olimpico in corso, è il direttore sportivo della Società Canottieri Palermo.