

Curriculum Vitae

INFORMAZIONI PERSONALI

Nome FRANCESCO
Cognome FERRANTE
Recapiti Facolta' di Scienze MM.FF.NN. - Dipartimento di Fisica e Chimica - Viale delle Scienze, Edificio 17, studio 1/C17 - 09123897979
E-mail francesco.ferrante@unipa.it

FORMAZIONE TITOLI

- In data 10 aprile 2017 ho conseguito l'Abilitazione Scientifica Nazionale a professore di II fascia per il settore concorsuale 03/A2 "Modelli e metodologie per le Scienze Chimiche". L'abilitazione è valida fino al 10 aprile 2023.
- Il 17 gennaio 2005 ho conseguito il titolo di Dottore di Ricerca a compimento del corso di Dottorato svolto dal giugno 2001 al giugno 2004 presso il Dipartimento di Chimica Fisica "F. Accascina" dell'Università degli Studi di Palermo, con una tesi dal titolo "Studio teorico di aggregati tubolari da macrocicli organici".
- Il 30 giugno 2000 ho conseguito la laurea in Chimica presso l'Università degli Studi di Palermo con la votazione di centodieci/centodecimi, discutendo la tesi dal titolo "Studio teorico ab initio di clusters molecolari".

ATTIVITA' DIDATTICA

- Nell'A.A. 2005/2006 ho tenuto le lezioni di Chimica Teorica presso il Corso di Laurea triennale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo con la qualifica di professore a contratto.
- Nell'A.A. 2006/2007 ho tenuto le lezioni di Chimica Teorica presso il Corso di Laurea triennale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo con la qualifica di professore a contratto.
- Nel novembre del 2007 ho tenuto il corso "Metodi della Chimica Computazionale", rivolto agli studenti del XXI ciclo del Corso di Dottorato in Scienze Chimiche presso l'Università degli Studi di Palermo.
- Nell'A.A. 2007/2008 ho tenuto le lezioni di Chimica Teorica presso il Corso di Laurea triennale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo con la qualifica di professore a contratto.
- Nell'A.A. 2010/2011 sono stato titolare dell'insegnamento di Chimica Teorica presso il Corso di Laurea triennale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo.
- Nell'A.A. 2010/2011 ho prestato assistenza al corso di Laboratorio II di Chimica Fisica presso il Corso di Laurea triennale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo.
- Nell'A.A. 2010/2011 ho prestato assistenza nel modulo di Chimica Modellistica Applicata per il corso di Modellistica Chimica presso il Corso di Laurea Magistrale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo.
- Nell'A.A. 2011/2012 sono stato titolare dell'insegnamento di Chimica Teorica presso il Corso di Laurea triennale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo.
- Nell'A.A. 2011/2012 ho prestato assistenza al corso di Laboratorio II di Chimica Fisica presso il Corso di Laurea triennale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo.
- Nell'A.A. 2011/2012 sono stato titolare del modulo di Chimica Modellistica Applicata per l'insegnamento di Modellistica Chimica presso il Corso di Laurea Magistrale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo.
- Nell'A.A. 2012/2013 sono stato titolare dell'insegnamento di Chimica Teorica e Computazionale presso il Corso di Laurea Magistrale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo.
- Nell'A.A. 2012/2013 ho prestato assistenza al corso di Laboratorio di Chimica Fisica presso il Corso di Laurea triennale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo.
- Nell'A.A. 2013/2014 sono stato titolare dell'insegnamento di Chimica Teorica e Computazionale presso il Corso di Laurea Magistrale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo.
- Nell'A.A. 2013/2014 ho prestato assistenza al corso di Laboratorio di Chimica Fisica presso il Corso di Laurea triennale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo.
- Nell'A.A. 2014/2015 sono stato titolare dell'insegnamento di Chimica 2017 Teorica e Computazionale presso il Corso di Laurea Magistrale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo.
- Nell'A.A. 2015/2016 sono stato titolare dell'insegnamento di Chimica 2017 Teorica e Computazionale presso il Corso di Laurea Magistrale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo.
- Nell'A.A. 2016/2017 sono stato titolare dell'insegnamento di Chimica 2017 Teorica e Computazionale presso il Corso di Laurea Magistrale in Chimica dell'Università degli Studi di Palermo.

PUBBLICAZIONI

1. F. Ferrante, G. La Manna, "Theoretical Study of Cystine-Based Cyclobisamides", The Journal of Physical Chemistry A vol. 107, pp. 91-96, **2003**. (DOI: 10.1021/jp0208211)

2. E. Caponetti, D. Chillura Martino, F. Ferrante, L. Pedone, A. Ruggirello, V. Turco Liveri, "Structure of Urea Clusters Confined in AOT Reversed Micelles", *Langmuir* vol. 19, pp. 4913-4922, **2003**. (DOI: 10.1021/la027066n)
3. F. Ferrante, G. La Manna, "ONIOM Study on the Equilibrium Geometries of Some Cyclopeptides", *Journal of Molecular Structure (THEOCHEM)* vol. 634, pp. 181-186, **2003**. (DOI: 10.1016/S0166-1280(03)00340-3)
4. F. Ferrante, G. La Manna, "A New Suggested Class of Organic Tubular Structures", *Chemical Physics Letters* vol. 383, pp. 376-379, **2004**. (DOI: 10.1016/j.cplett.2003.11.055)
5. A. J. Bell, A. Citra, J. M. Dyke, F. Ferrante, L. Gagliardi, P. Watts, "An Ab Initio and DFT Study of the Fragmentation and isomerisation of MeP(O)OMe⁺", *Physical Chemistry Chemical Physics* vol. 6, pp. 1213-1218, **2004**. (DOI: 10.1039/b315944b)
6. F. Ferrante, G. La Manna "Theoretical Design of New Organic Tubular Structures", pubblicato nella serie Recent Research Developments in Physical Chemistry, vol. 7, pp. 307-320, **2004** – Transworld Research Network.
7. J. D. Barr, A. J. Bell, M. Bird, F. Ferrante, J. L. Mundy, J. Murrel, C. M. Timperley, P. Watts, "Fragmentation and Reactions of the Organophosphate insecticide Diazinon and its Oxygen Analogue Diazoxon Studied by Electrospray ionisation Ion Trap Mass Spectrometry", *Journal of the American Society for Mass Spectrometry* vol. 16, pp. 515-523, **2005**. (DOI: 10.1016/j.jasms.2004.12.0)
8. F. Ferrante, V. Turco Liveri, "Time Evolution of Size and Polydispersity of an Ensemble of Nanoparticles Growing in the Confined Space of AOT Reversed Micelles by Computer Simulations", *Colloids and Surfaces A: Physicochem. and Eng. Asp.* vol. 259, pp. 7-13, **2005**. (DOI: 10.1016/j.colsurfa.2005.02.005)
9. J. D. Barr, A. J. Bell, F. Ferrante, G. La Manna, J. L. Mundy, C. M. Timperley, M. J. Waters, P. Watts, "Fragmentations and Reactions of Some Isotopically Labeled Dimethyl Methyl Phosphono and Trimethyl Phosphoro Thiolates and Thionates Studied by Electrospray ionisation ion Trap Mass Spectrometry", *International Journal of Mass Spectrometry* vol. 244, pp. 29-40, **2005**. (DOI: 10.1016/j.ijms.2005.04.004)
10. F. Ferrante, L. Gagliardi, B. E. Bursten, A. P. Sattelberger, "Multiconfigurational Theoretical Study of the Octamethyldimetalates of Cr(II), Mo(II), W(II) and Re(III): Revisiting the Correlation Between the M-M Bond Length and the Transition Energy", *Inorganic Chemistry* vol. 44, pp. 8476-8480, **2005**. (DOI: 10.1021/ic050406i)
11. G. Fontana, G. Savona, F. Ferrante, "Investigation of the Aqueous Transmetalation of -Allylpalladium with Indium: Some Theoretical and Experimental Evidence about the Nature of Allylindium Intermediates", *Letters in Organic Chemistry* vol. 3, pp. 98-102, **2006**. (DOI:10.2174/157017806775224305))
12. M. D. Brown, J. M. Dyke, F. Ferrante, W. Levason, J. S. Ogden, M. Webster, "Unexpected Structural Diversity in Alkali-Metal Azide-Crown Ether Complexes: Syntheses, X-Ray Structures and Quantum Chemical Calculations", *Chemistry – A European Journal* vol. 12, pp. 2620-2629, **2006**. (DOI: 10.1002/chem.200501072)
13. J. S. Ogden, J. M. Dyke, W. Levason, F. Ferrante, L. Gagliardi, "The Characterisation of Molecular Alkali Metal Azides", *Chemistry – A European Journal* vol. 12, pp. 3580-3586, **2006**. (DOI: 10.1002/chem.200501101)
14. F. Ferrante, G. La Manna, "Theoretical Study of the Interaction Between the Sodium Ion and a Cyclopeptidic Tubular Structure", *Journal of Computational Chemistry* vol. 28, pp. 2085-2090, **2007**. (DOI: 10.1002/jcc.20677)
15. D. Duca, F. Ferrante, G. La Manna, "Theoretical Study of Palladium Cluster Structures on Carbonaceous Supports", *The Journal of Physical Chemistry C* vol. 111, pp. 5402-5408, **2007**. (DOI: 10.1021/jp067167k)
16. N. Bertazzi, G. Casella, F. Ferrante, L. Pellerito, A. Rotondo, E. Rotondo, "Solution Structure of R₂Sn(IV)-N-acetylneuraminic acid (R=Me, Bu) complexes in D₂O and DMSO-d₆: Experimental NMR and DFT computational study", *Dalton Transactions* vol. 14, pp. 1440-1446, **2007**. (DOI: 10.1039/b616330k)
17. F. Lo Celso, R. Triolo, F. Ferrante, A. Botti, F. Bruni, R. Mancinelli, M. A. Ricci, A. K. Soper, "CO₂ -Water Supercritical Mixtures: Test of a Potential Model Against Neutron Diffraction Data", *Journal of Molecular Liquids* vol. 136, pp. 294-299, **2007**. (DOI: 10.1016/j.molliq.2007.08.011)

18. A. J. Bell, F. Ferrante, S. E. Hall, V. Mikhailov, D. Mitchell, C. M. Timperley, P. Watts, N. Williams, "Fragmentations and Reactions of Protonated O,O-Dimethyl Ethylphosphonate and Some Isotopomers Produced by Electrospray Ionisation in an Ion Trap Mass Spectrometer", *International Journal of Mass Spectrometry* vol. 269, pp. 46-54, **2008**. (DOI: 10.1016/j.ijms.2007.09.004)
19. M. D. Brown, M. F. Davis, J. M. Dyke, F. Ferrante, W. Levason, J. S. Ogden, M. Webster, "Synthesis, Structures and DFT Calculations on Alkaline-Earth Metal Azide-Crown Ether Complexes", *Chemistry – A European Journal* vol. 14, pp. 2616-2624, **2008**. (DOI: 10.1002/chem.200701502)
20. N. Armata, J. M. Dyke, F. Ferrante, G. La Manna, "A Computational Study on Cesium Azide Trapped in a Cyclopeptidic Tubular Structure", *Journal of Chemical Theory and Computation* vol. 4, pp. 542-548, **2008**. (DOI: 10.1021/ct700307r)
21. A. Botti, F. Bruni, R. Mancinelli, M. A. Ricci, F. Lo Celso, R. Triolo, F. Ferrante, A. K. Soper, "Study of Percolation and Clustering in Supercritical Water-CO₂ Mixtures", *The Journal of Chemical Physics* vol. 128, pp. 164504-1-164510-7, **2008**. (DOI: 10.1063/1.2898538)
22. G. Casella, F. Ferrante, G. Saielli, "DFT Calculations on ¹J(¹¹⁹Sn,¹³C) and ²J(¹¹⁹Sn,¹H) of Di- and Trimethyltin(IV) Compounds", *Inorganic Chemistry* vol. 47, pp. 4796-4807, **2008**. (DOI: 10.1021/ic8000976)
23. J. S. Ogden, J. T. Graham, J. T. Joy, F. Ferrante, "Matrix Isolation Studies and DFT Calculations on Molecular Alkali Metal Bromates", *Physical Chemistry Chemical Physics* vol. 11, pp. 650- 654, **2009**. (DOI: 10.1039/b813021c)
24. N. Armata, G. Baldissin, G. Barone, R. Cortese, V. D'Anna, F. Ferrante, S. Giuffrida, G. Li Manni, A. Prestianni, T. Rubino, Zs. Varga, D. Duca, "Molecular-Level Characterization of Heterogeneous Catalytic Systems by Algorithmic Time Dependent Monte Carlo", *Topics in Catalysis* vol. 52, pp. 431-443, **2009**. (DOI: 10.1007/s11244-008-9178-9)
25. N. Armata, G. Baldissin, G. Barone, R. Cortese, V. D'Anna, F. Ferrante, S. Giuffrida, G. Li Manni, A. Prestianni, T. Rubino, D. Duca, "Structural and Kinetic DFT Characterization of Materials to Rationalize Catalytic Performance", *Topics in Catalysis* vol. 52, pp. 444-455, **2009**. (DOI: 10.1007/s11244-008-9176-y)
26. V. D'Anna, D. Duca, F. Ferrante, G. La Manna, "DFT Studies on Catalytic Properties of Isolated and Carbon Nanotube Supported Pd₉ Cluster – I: Adsorption, Fragmentation and Diffusion of Hydrogen", *Physical Chemistry Chemical Physics* vol. 11, pp. 4077- 4083, **2009**. (DOI: 10.1039/b820707k)
27. G. Casella, F. Ferrante, G. Saielli, "Karplus-Type Dependence of Vicinal ¹¹⁹Sn-¹³C and ¹¹⁹Sn-¹H Spin-Spin Couplings in Organotin(IV) Derivatives: a DFT Study", *European Journal of Organic Chemistry* vol. 2009-21, pp. 3526-3534, **2009**. (DOI: 10.1002/ejoc.200900197)
28. F. D'Anna, F. Ferrante, R. Noto, "Geminal Ionic Liquids: A Combined Approach to Investigate their Tridimensional Structure", *Chemistry – A European Journal* vol. 15, pp. 13059-13068, **2009**. (DOI: 10.1002/chem.200901788)
29. G. Barone, D. Duca, F. Ferrante, G. La Manna, "CASSCF/ CASPT2 Analysis of the Fragmentation of H₂ on a Pd₄ Cluster", *International Journal of Quantum Chemistry* vol. 110, pp. 558-562, **2010**. (DOI: 10.1002/qua.22119)
30. F. Cheng, J. M. Dyke, F. Ferrante, A. L. Hector, W. Lewason, G. Reid, M. Webster, W. Zhang, "Synthesis and Structural Characterisation of Germanium(II) Halides Complexes with Neutral N-donor Ligands", *Dalton Transactions* vol. 39, pp. 847-856, **2010**. (DOI: 10.1039/b911016J)
31. V. D'Anna, D. Duca, F. Ferrante, G. La Manna, "DFT Studies on Catalytic Properties of Isolated and Carbon Nanotube Supported Pd₉ Cluster – II: Hydro-Isomerization of Butene Isomers", *Physical Chemistry Chemical Physics* vol. 12, pp. 1323-1330, **2010**. (DOI: 10.1039/b920949m)
32. G. Casella, F. Ferrante, G. Saielli, "A DFT Study of the Karplus-Type Dependence of Vicinal ³J(Sn-C-X-C), X=N,O,S, in Organotin(IV) Compounds: Application to Conformationally Flexible Systems", *Organic and Biomolecular Chemistry* vol. 8, pp. 2711- 2718, **2010**. (DOI: 10.1039/c000679c)
33. J. S. Ogden, D. C. Harrowven, R. S. Wyatt, F. Ferrante, J. P. Cannady, "Matrix Isolation Studies on the Co-condensation Reactions of Molecular SiO and GeO: The Characterisation of the Novel Cyclic Species SiGeO₂, Si₂GeO₃ and SiGe₂O₃", *Physical Chemistry Chemical Physics* vol. 12, pp. 6157-6162, **2010**. (DOI: 10.1039/c001453b)

34. S. Cataldo, S. Fabiano, F. Ferrante, F. Previti, S. Patanè, B. Pignataro, "Organoboron Polymers for Photovoltaic Bulk Heterojunctions", *Macromolecular Rapid Communications* vol. 31, pp. 1281- 1286, **2010**. (DOI: 10.1002/marc.201000057)
35. F. Ferrante, F. Lo Celso, R. Triolo, R. P. Taleyarkhan, "The Chemistry of Acetone at Extreme Conditions by Density Functional Molecular Dynamics Simulations", *The Journal of Chemical Physics* vol. 134, pp. 064502-1–064502-7, **2011**. (DOI: 10.1063/1.3533943)
36. G. Fontana, M. Abbate, G. Casella, C. Pellerito, A. Longo, F. Ferrante, "Synthesis, Chemical Characterization and Preliminary In Vitro Antitumor Activity Evaluation of New Ruthenium(II) Complexes with Sugar Derivatives", *Polyhedron* vol. 30, pp. 1671- 1679, **2011**. (DOI: 10.1016/j.poly.2011.03.046)
37. F. Ferrante, T. Rubino, D. Duca, "Butene Isomerization and Double Bond Migration on the Outer Surface of H-ZSM-5: A DFT Study", *The Journal of Physical Chemistry C* vol. 115, pp. 14862- 14868, **2011**. (DOI: 10.1021/jp203284f)
38. F. Arena, F. Ferrante, L. Spadaro, A. Prestianni, A. Raneri, D. Duca, "Factors Controlling the Energy of Nitrogen Monolayer Coverage on High Surface Area Catalyst Oxide Carriers", *The Journal of Physical Chemistry C* vol. 115, pp. 24728-24733, **2011**. (DOI: 10.1021/jp205370a)
39. F. Ferrante, G. Barone, D. Duca, "Relativistic Coupled Cluster Calculations of the Electronic Structure of KrH^+ , XeH^+ and RnH^+ ", *Theoretical Chemistry Accounts* vol. 131, pp. 1165-1171, **2012**. (DOI: 10.1007/s00214-012-1165-3)
40. D. Duca, F. Ferrante, F. Lo Celso, "Construction and Characterization of Models of Hypercross-linked Polystyrene", *Colloid and Polymer Science* vol. 290, pp. 1443-1450, **2012**. (DOI: 10.1007/s00396-012-2704-0)
41. A. Bagno, G. Casella, F. Ferrante, G. Saielli, "A DFT Study of the Vicinal $^3J(^{119}Sn,^{13}C)$ and $^3J(^{119}Sn,^1H)$ Coupling Constants in Trimethyl- and Chlorodimethyl-Stannyl Propanoates", *Journal of Organometallic Chemistry* vol. 724, pp. 139-146, **2013**. (DOI: 10.1016/j.jorganchem.2012.10.041)
42. A. Prestianni, F. Ferrante, O. A. Simakova, D. Duca, D-Yu. Murzin, "Oxygen-Assisted Hydroxymatairesinol Dehydrogenation: A Selective Secondary-Alcohol Oxidation over a Gold Catalyst", *Chemistry – A European Journal* vol. 19, pp. 4577-4585, **2013**. (DOI: 10.1002/chem.201202957)
43. F. D'Anna, P. Vitale, F. Ferrante, S. Marullo, R. Noto, "The Gelling Ability of Some Diimidazolium Salts: Effect of Isomeric Substitution on Cation and Anion", *ChemPlusChem* vol. 78, pp. 331-342, **2013**. (DOI: 10.1002/cplu.201300016)
44. B. Maggio, G. Fontana, D. Raffa, F. Ferrante, G. Daidone, "Radical Cyclization and 1,5 Hydrogen Transfer in Selected Aromatic Diazonium Salts. Access to New Chemiotypes of Pharmaceutical Interest", *Heterocycles* vol. 89, pp. 83-101, **2014**. (DOI: 10.3987/COM-13-12863)
45. F. Ferrante, A. Prestianni, D. Duca, "Computational Investigation of Alkynols and Alkyndiols Hydrogenation on a Palladium Cluster", *The Journal of Physical Chemistry C* vol. 118, pp. 551-558, **2014**. (DOI: 10.1021/jp410878j)
46. A. Prestianni, M. Crespo-Quesada, R. Cortese, F. Ferrante, L. Kiwi-Minsker, D. Duca, "Structure Sensitivity of 2-Methyl-3-butyn-2-ol Hydrogenation on Pd: Computational and Experimental Modeling", *The Journal of Physical Chemistry C* vol. 118, pp. 3119-3128, **2014**. (DOI: 10.1021/jp4114859)
47. A. Prestianni, F. Ferrante, E. M. Sulman, D. Duca, "Density Functional Theory Investigation on the Nucleation and Growth of Small Palladium Clusters on a Hyper-Cross-Linked Polystyrene Matrix", *The Journal of Physical Chemistry C* vol. 118, pp. 21006-21013, 2014. (DOI: 10.1021/jp506320z)
48. R. Cortese, F. Ferrante, S. Roggan, D. Duca, "N-doped Carbon Networks: Alternative Materials Tracing New Routes for Activating Molecular Hydrogen", *Chemistry – A European Journal* vol. 21, pp. 3806-3814, 2015. (DOI: 10.1002/chem.201405896)
49. V. Figà, C. Chiappara, F. Ferrante, M. P. Casaletto, F. Principato, Z. Chen, H. Usta, A. Facchetti, B. Pignataro, "Symmetric Naphthalenediimidequaterthiophenes for Electropolymerized Electrochromic Thin Films", *Journal of Materials Chemistry C* vol. 3, pp. 5985-5994, 2015. (DOI: 10.1039/C5TC00746A)

50. C. Pellerito, O. Morana, F. Ferrante, G. Calvaruso, A. Notaro, S. Sabella, T. Fiore, "Synthesis, Chemical Characterization, Computational Studies and Biological Activity of New DNA Methyl-transferases (DNMTs) Specific inhibitor. Epigenetic Regulation as a New and Potential Approach to Cancer Therapy", *Journal of Inorganic Biochemistry* vol. 150, pp. 18-27, 2015. (DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2015.06.001)
51. F. Ferrante, N. Armata, G. Lazzara, "Modeling of the Halloysite Spiral Nanotube", *The Journal of Physical Chemistry C* vol. 119, pp. 16700-16707, 2015. (DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b04281)
52. R. Cortese, R. Schimmenti, N. Armata, F. Ferrante, A. Prestianni, D. Duca, D-Yu. Murzin, "Investigation of Polyols Adsorption on Ru, Pd and Re Using vdW Density Functionals", *The Journal of Physical Chemistry C* vol. 119, pp. 17182-17192, 2015. (DOI: 10.1021/acs.jpcc.5b04007)
53. P. Vitale, F. D'Anna, F. Ferrante, C. Rizzo, R. Noto, "-Conjugated Diimidazolium Salts: Rigid Structures to Obtain Organized Materials", *Physical Chemistry Chemical Physics* vol. 17, pp. 26903-26917, 2015. (DOI: 10.1039/c5cp03808a)
54. R. Schimmenti, R. Cortese, F. Ferrante, A. Prestianni, D. Duca, "Growth of Sub-Nanometric Palladium Clusters on Boron Nitride Nanotubes: A DFT Study", *Physical Chemistry Chemical Physics* vol. 18, pp. 1750-1757, 2016. (DOI: 10.1039/C5CP06625E)
55. G. Casella, F. Ferrante, G. Saielli, "DFT Calculation of NMR (^{113}Cd) in Cadmium Complexes", *Polyhedron* vol. 117, pp. 48-56, 2016. (DOI: 10.1016/j.poly.2016.05.038)
56. F. Ferrante, A. Prestianni, R. Cortese, R. Schimmenti, D. Duca, "A DFT Investigation on the Nucleation of Homo- and Heteronuclear Metal Clusters on Defective Graphene", *The Journal of Physical Chemistry C* vol. 120, pp. 12022-12031, 2016. (DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b02833)
57. A. Prestianni, R. Cortese, F. Ferrante, R. Schimmenti, D. Duca, S. Hermans, D-Yu. Murzin, "-d-Glucopyranose Adsorption on a Pd 30 Cluster Supported on Boron Nitride Nanotube", *Topics in Catalysis* vol. 59, pp. 1178-1184, 2016. (DOI: 10.1007/s11244-016-0638-3)
58. F. Ferrante, Antonio Prestianni, Nerina Armata, "The Complete Basis Set Full-CI Roto-vibrational Spectroscopic Constants of AlH , AlH^+ and AlH^- ", *Theoretical Chemistry Accounts* vol. 136, pp. 3(1)-3(9), 2017. (DOI: 10.1007/s00214-016-2026-2)
59. Antonio Prestianni, F. Ferrante, Dario Duca, "H₂ Hitting on Graphene Supported Palladium Cluster: Molecular Dynamics Simulations", *Theoretical Chemistry Accounts* vol. 136, pp. 6(1)-6(8), 2017. (DOI: 10.1007/s00214-016-2033-3)
60. F. Ferrante, Nerina Armata, Giuseppe Cavallaro, Giuseppe Lazzara, "Adsorption Studies of Molecules on the Halloysite Surfaces: a Computational and Experimental Investigation", *The Journal of Physical Chemistry C* vol. 121, pp. 2951-2958, 2017. (DOI:10.1021/acs.jpcc.6b12876)
61. Remedios Cortese, Roberto Schimmenti, F. Ferrante, Antonio Prestianni, Donato Decarolis, Dario Duca, "Graph Based Analysis of Ethylene-Glycol Decomposition on a Palladium Cluster", *The Journal of Physical Chemistry C* vol. 121, pp. 13606-13616, 2017. (DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b00850)
62. Roberto Schimmenti, Remedios Cortese, Lidia Godina, Antonio Prestianni, F. Ferrante, Dario Duca, Dmitry Yu. murzin, "A Combined Theoretical and Experimental Approach for Platinum Catalyzed 1,2-Propanediol Aqueous Phase Reforming", *The Journal of Physical Chemistry C* vol. 121, pp. 14636-14648, 2017. (DOI:10.1021/acs.jpcc.7b03716)
63. Francesca D'Anna, Carla Rizzo, Paola Vitale, Salvatore Marullo, F. Ferrante, "Supramolecular Complexes Formed by Dimethoxypillar[5]arene and Imidazolium Salts: a Joint Experimental and Computational Investigation", *New Journal of Chemistry* vol. 41, pp. 12490-12505, 2017. (DOI:10.1039/C7NJ02598J)

ATTIVITA' SCIENTIFICHE

- Da gennaio a giugno del 2001 sono stato borsista del CNR, nell'ambito del progetto "Applicazioni industriali della tecnologia a microonde"; la ricerca è stata svolta presso il Dipartimento di Chimica Fisica dell'Università degli Studi di Palermo.
- Dal 22 marzo al 23 aprile 2004 ho effettuato un periodo di ricerca presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Southampton (UK).
- Da giugno 2005 a maggio 2009 sono stato titolare di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica Fisica "F. Accascina" dell'Università degli Studi di Palermo, dal titolo "Studio teorico di sistemi modello di interesse chimico-fisico".

- Da luglio 2009 a giugno 2010 sono stato titolare di un assegno di ricerca presso il Dipartimento di Chimica Fisica "F. Accascina" dell'Università degli Studi di Palermo, dal titolo "Indagini strutturali, cinetiche e computazionali nel campo della soft matter".
- In data 1 novembre 2010 ho preso servizio come ricercatore universitario presso la Facoltà di Scienze MM.FF.NN. dell'Università degli Studi di Palermo, per il settore scientifico-disciplinare CHIM/02.
- Responsabile scientifico (a partire dal 19 aprile 2013) del progetto PRIN-2009 dal titolo "Beni Culturali sommersi e storico-artistici: nanotecnologie e metodologie standard e neutroniche" (codice 2009P2WEAT 001)
- Ho svolto attività di ricerca scientifica nell'ambito del progetto STREP denominato NANOCAT (NANOCAT Project - funded in the frame of the 6th Framework Programme of the European Community, Contract No. NMP3-CT-2005-506621).
- Ho svolto attività di ricerca scientifica nell'ambito del progetto POLYCAT (POLYCAT Project - Modern polymer-based catalysts and micro-flow conditions as key elements of innovations in fine chemical synthesis, funded by the 7th Framework Programme of the European Community; G.A. No. CP-IP 246095)
- Ho svolto attività di ricerca scientifica nell'ambito del progetto SusFuelCat (SusFuelCat Project - Sustainable fuel production by aqueous phase reforming – Understanding catalysis and hydrothermal stability of carbon supported noble materials, funded by the 7th Framework Programme of the European Community; G.A. No. 310490)
- Ho svolto attività di ricerca scientifica nell'ambito del progetto PLAST Ics (Formazione di tecnologi esperti in materiali, processi e modellizzazione per l'elettronica su supporti flessibili - PLASTICS; PON 2007-2013 - codice PON02 00355 3416798/F1)
- Ho svolto attività di ricerca scientifica nell'ambito del progetto FIRB Futuro in Ricerca 2012 dal titolo "Nanotubi di argilla per la progettazione di materiali intelligenti ecosostenibili" (codice RBFR12ETL5)
- Ho svolto attività di ricerca scientifica nell'ambito del progetto TECLA (Nanotecnologie e nanomateriali per i beni culturali - TECLA; PON 2007-2013 - codice PON03PE 00214 1/7)

AMBITI DI RICERCA

Chimica Teorica e Computazionale

- Calcolo di proprietà molecolari (strutturali, spettroscopiche) mediante l'utilizzo dei metodi della chimica quantistica
- Simulazioni di Dinamica Molecolare classica e ab initio

In particolare:

- Studio computazionale di meccanismi di reazione catalizzate da cluster metallici
- Calcolo degli spettri NMR di composti organometallici con inclusione degli effetti relativistici
- Utilizzo di metodi coupled cluster per il calcolo delle costanti spettroscopiche di molecole esotiche in ambito astrochimico