

# PAOLO DEFAZIO

## ISTRUZIONE

---

**Ottobre 2000 Laureato in Chimica** presso l'Università di Siena **VOTO: 110/110**  
Tesi di Laurea in Chimica Teorica (Relatore Prof. Carlo Petrongolo)

**A. A. 2000/2001 Professore a Contratto** per l'Insegnamento di "Chimica generale e inorganica"(22 ore)-Corso integrato di Radiofarmaci-Corso di diploma Universitario in Tecnico Sanitario di Radiologia Medica presso la Facoltà di Medicina e Chirurgia Università di Siena

**Febbraio 2004 Dottore di Ricerca in Scienze Chimiche** presso l'Università di Siena  
Tesi di Dottorato in Chimica Teorica, Titolo Real wavepacket dynamics of Bimolecular Reactions (Relatore Prof. Carlo Petrongolo)

**Giugno 2004-Aprile 2006 Borsa di Post-Dottorato in Chimica Teorica** presso l'Università di Siena.

**Maggio 2006 Conseguimento della S.S.I.S. classi di abilitazioni 59/A e 60/A** presso l'Università di Pisa. **A-28 (ex 59/A) e A-50 (ex 60/A)**

**A. A. 2005/2006 Professore a Contratto** per l'Insegnamento di "Chimica Fisica" (48 ore, 6 CFU) per il C.d.L. in Fisica e Tecnologia Avanzata, Indirizzo Sperimentale presso l'Università di Siena.

**Febbraio 2007 Conseguimento della S.S.I.S. classi di abilitazioni 13/A** presso l'Università di Pisa. **A-34 (ex 13/A)**

**Giugno 2007 Borsa di Post-Dottorato in Chimica Teorica** presso l'Università di Pisa

**A. A. 2006/2007 Professore a Contratto** per l'Insegnamento di "Chimica Fisica" (48 ore, 6 CFU) per il C.d.L. in Fisica e Tecnologia Avanzata, Indirizzo Sperimentale presso l'Università di Siena.

**Ottobre 2007 – Settembre 2010 Assegno di Ricerca** presso l'Università di Siena.

**Ottobre 2010 – Settembre 2011 Assegno di Ricerca** presso l'Istituto di metodologie inorganiche e dei plasmi, CNR di Bari.

01/09/2011 Assegnazione ruolo classe A-34 (decorrenza giuridica)  
01/09/2012 Assegnazione ruolo classe A-34 (decorrenza economica)  
01/09/2013 Conferma ruolo classe A-34 (Piccolomini -Siena)  
01/09/2016 Trasferimento presso ITT Tito Sarrocchi di Siena

PERMANENZE ALL'ESTERO

---

**Agosto-Novembre 2001** presso l'Argonne National Laboratory, Argonne (Illinois) USA  
*Collaborazione con il Dr. Stephen K. Gray*

**Aprile-Giugno 2004** presso il Departament de Química Física I Centre de Recerca  
in Química Teòrica, Universitat de Barcelona, Spain  
*Collaborazione con il Prof. Miguel González*

SCUOLE E CONGRESSI

---

- “*Dinamica quantistica della reazione  $N + O_2 \rightarrow NO + O$  mediante pacchetti d'onda reali*”, P. Defazio and C. Petrongolo, SCI, Sezione Toscana, Siena 15/12/2000.
- “*Wave packet dynamics of the  $N(^4S) + O_2(X^3\Sigma_g^-) \rightarrow NO(X^2\Pi) + O(^3P)$  reaction on the  $X^2A'$  potential energy surface*”, P. Defazio and C. Petrongolo, COFIN00, Roma 27-28 /6/2001.
- “*Dynamics of the reactions  $N(^2D)+H_2 \rightarrow NH(X^3\Sigma + a^1\Delta)$  and  $N+O_2 \rightarrow NO+O$* ”, C. Petrongolo, F. Santoro, P. Defazio, G.C. Schatz, S.K. Gray and C.Oliva, V Girona Seminar on Molecular Similarity, Girona (Spain) 12-13 /7/2001.
- “*Dinamica quantistica della reazione  $N+O_2$* ” P. Defazio and C. Petrongolo, XXXI Congresso Nazionale di Chimica Fisica, Padova 19-23 /6/2001.
- “*Product distribution and JS-CS approximation for the  $N+O_2 \rightarrow NO+O$  reaction*” P. Defazio, C. Petrongolo, C. Oliva and R. Sayós, COFIN00, Ferrara 31/1 - 1/2/ 2002.
- “*Reaction dynamics with the Gray-Balint-Kurti approach*”, C. Petrongolo, P. Defazio, S. K. Gray, F. Santoro, 225th ACS National Meeting, New Orleans (USA) dal 23/3/2003 al 27/3/2003
- “*Real Wave Packet Dynamics of the Reactions  $N(^4S)+NO(X^2\Pi)$  and  $N(^2D)+H_2(X^1\Sigma_g^+)$* ”, P. Gamallo, M. Gonzalez, R. Sayós, P. Defazio, C. Petrongolo, Quantum Reactive Scattering, San Lorenzo de El Escorial (Spain), 20-23/6/2003.
- “*Non-adiabatic processes in spectroscopy and dynamics*”, C. Petrongolo and P. Defazio, 2nd European School on Computational Chemistry, Reaction, and Molecular Dynamics, Barcelona (Spagna) dal 23/6/2003 al 28/6/2003.
- “*Real Wave Packet Dynamics of  $H+HLi$  Collisions*”, P. Defazio and C. Petrongolo, 2nd European School on Computational Chemistry, Reaction, and Molecular Dynamics, Barcelona (Spain), 23-28/6/2003.
- “*A Quantum Dynamics Study of  $D_2 + OH \rightarrow DOH + D$  Reaction*”, P. Defazio and S. K. Gray, V<sup>a</sup> Edizione del Congresso del GICC: Dal Calcolo della Struttura Elettronica alla Bioinformatica, 18-19 /12/2003, Siena.
- “*Real wave packet dynamics of the reactions  $N+NO$  and  $LiH+H'$* ”, C. Petrongolo, P. Gamallo, M. Gonzalez, R. Sayos, P. Defazio, 75 - 76, SASP 2004, La Thuile (Italia) dal 1/2/2004 al 6/2/2004.
- “*Dinamica della reazione  $LiH + H'$* ”, P. Defazio and C. Petrongolo, 33<sup>o</sup> Congresso Nazionale di Chimica Fisica. 21-25 giugno 2004, Napoli.
- “*Quantum study of molecular excitations and dynamics*”, P. Defazio, C.Petrongolo, P. Gamallo, M. Gonzalez, R. Sayos, Mu-Theochem, A Conference in Honour of Professor Jacopo Tomasi, 1-4 agosto 2004, Lucca.

- 'Real wave packet reactive scattering of open shell species in combustion, atmospheric, and astrophysical processes', C. Petrongolo, P. Gamallo, M. Gonzalez, R. Sayos, P. Defazio 227th ACS National Meeting, Anaheim (USA) dal 28/3/2004 al 1/4/2004
- "Product Distributions, Rate Constants, and Mechanisms of  $\text{LiH} + \text{H}$  Reactions", P. Defazio and C. Petrongolo, 34° Congresso Nazionale di Chimica Fisica, 20-24/06/2005 Siena.
- 'Quantum real wave packet method applied to the reaction of atmospheric interest  $\text{N}(4S) + \text{NO}(X2\Pi) \rightarrow \text{N}_2(X1\Sigma_g^+) + \text{O}(3P)$ ', P. Gamallo, M. Gonzalez, P. Defazio, R. Sayos, and C. Petrongolo, 34° Congresso Nazionale di Chimica Fisica, Siena (Italia) dal 20/6/2005 al 24/6/2005
- 'Renner-Teller quantum dynamics of the  $\text{N} + \text{H}_2 \rightarrow \text{NH} + \text{H}$  reaction', P. Defazio and C. Petrongolo, Fourth International Meeting on Photodynamics, Havana (Cuba) dal 6/2/2006 al 10/2/2006.
- 'Quantum dynamics of the  $\text{NH}(a^1\Delta) + \text{H}^2(\text{S})$  reactions on the  $\tilde{\text{A}}^2\text{A}'$  surface', P. Defazio, S. Akpınar, C. Petrongolo, 37° Congresso Nazionale di Chimica Fisica, Camogli (Ge), Italia dal 24/02/2008 al 29/02/2008.
- 'Dinamica QM-RT atomo + diatomo', P. Defazio and C. Petrongolo, Prin 2009, Interdisciplinary Workshop: Nanoscale Modelling of new molecular experiments: theoretical and Computational simulations, Accademia dei Lincei, Roma, 06/03/2009.

## ELENCO DELLE PUBBLICAZIONI

### 1. 2012 - Articolo in rivista

Gamallo P, Defazio P, Akpınar S, Petrongolo C (2012). Adiabatic quantum dynamics of  $\text{CH}(X2\Pi) + \text{H}(2S)$  Reactions on the  $\text{CH}_2(X2\text{A}'')$  Surface and Role of the Excited Electronic States. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY*, ISSN: 1089-5639, doi: 10.1021/jp304125m

### 2. 2012 - Articolo in rivista

Akpınar S, Armenise I, Defazio P, Esposito F, Gamallo P, Petrongolo C, Sayos R (2012). Quantum mechanical and quasiclassical Born-Oppenheimer dynamics of the reaction  $\text{N}_2 + \text{O} \rightarrow \text{N} + \text{NO}$  on the  $\text{N}_2\text{O } a3\text{A}''$  and  $b2\text{A}'$  surfaces. *CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0301-0104, doi: 10.1016/j.chemphys.2011.05.005 3.

### 3. 2012 - Articolo in rivista

Defazio P, Gamallo P, Petrongolo C (2012). Nonadiabatic dynamics of  $\text{O}(1Dg^+)$  on three coupled potential surfaces: Symmetry, Coriolis, spin-orbit and Renner-Teller effects. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.3682467

### 4. 2011- Articolo in rivista

Gamallo P, Defazio P, Gonzalez M (2011). Time dependent quantum dynamics study of the  $\text{Ne} + \text{H}$ . *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY*, ISSN: 1089-5639, doi: 10.1021/jp206565n

**5. 2011 - Articolo in rivista**

Defazio P, Bussery-Honvault B, Honvault P, Petrongolo C (2011). Nonadiabatic quantum dynamics of  $C(1D)+H_2 \rightarrow CH + H$ : Coupled-channel calculations including Renner-Teller and Coriolis terms. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.3636083

**6. 2011 - Articolo in rivista**

Defazio P, Gamallo P, Akpınar S, Petrongolo C (2011). Quantum dynamics of Renner-Teller and isotopic effects in  $NH(a)$ . *PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 1463-9076, doi: 10.1039/c0cp02233k

**7. 2010 - Articolo in rivista**

DEFAZIO P, P. GAMALLO, M. GONZÁLEZ, S. AKPINAR, B. BUSSERY-HONVAULT, P. HONVAULT, C. PETRONGOLO (2010). Quantum dynamics of the  $C(1D)+HD$  and  $C(1D)+n-D_2$  reactions on the  $1A'$  and  $1A''$  surfaces. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, vol. 132, ISSN: 0021-9606

**8. 2010 - Articolo in rivista**

Defazio P, Gamallo P, Gonzalez M, Petrongolo C (2010). Renner-Teller quantum dynamics of  $NH(a)$ . *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY*, ISSN: 1089-5639, doi: 10.1021/jp102079n

**9. 2010 - Articolo in rivista**

Defazio P, Akpınar S, Petrongolo C (2010). Quantum calculations of nonadiabatic  $2A_1-2B_2$  conical-intersection effects in the reactions  $N(4S)+O_2(X^3S_g^-)$  and  $N(4S) + O_2(A^3\Sigma_u^-)$ . *CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0301-0104, doi: 10.1016/j.chemphys.2010.07.016

**10. 2009 - Articolo in rivista**

Defazio P, Petrongolo C, McBane GC, Adam L, Hack W, Akpınar S, Schinke R (2009). Relaxation of  $NH(a^1\Sigma^+, v=1)$  in collisions with  $H(2S)$ : An experimental and theoretical study. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY*, ISSN: 1089-5639, doi: 10.1021/jp903839p

**11. 2009 - Articolo in rivista**

Defazio P, Petrongolo C, Bussery-Honvault B, Honvault P (2009). Born-Oppenheimer quantum dynamics of the  $C(1D)+H_2$  reaction on the  $CH_2$   $1A_1$  and  $b^1B_1$  surfaces. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.3226573

**12. 2009 - Articolo in rivista**

Gamallo P, Defazio P (2009). Born-Oppenheimer and Renner-Teller coupled-channel quantum dynamics of the  $N(2D)+HD$  reactions. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.3190329

**13. 2009 - Articolo in rivista**

Defazio P, Petrongolo C (2009). Rotational steric and coriolis effects on the  $F + HCl \rightarrow HF + Cl$  reaction on the  $12A'$  ground-state surface. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY*, ISSN: 1089-5639, doi: 10.1021/jp8106414

**14. 2008 - Articolo in rivista**

Gamallo P, Defazio P, Gonzalez M, Petrongolo C (2008). Renner-Teller coupled-channel dynamics of the  $N(2D)+H_2$  reaction and the role of the  $NH_2$   $2A_1$  electronic state. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.3046882

**15. 2008 - Articolo in rivista**

Akpınar S, Defazio P, Gamallo P, Petrongolo C (2008). Quantum dynamics of  $NH(a^1\Sigma^+)$  +H reactions on the  $NH_2$   $A_2$   $1$  surface. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.3005653

**16. 2007 - Articolo in rivista**

Defazio P, Petrongolo C (2007). Coriolis coupling effects on the initial-state-resolved dynamics of the  $N(2D) + H_2 \rightarrow NH + H$  reaction. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.2798105

**17. 2007 - Articolo in rivista**

Martinez R, Gonzalez M, Defazio P, Petrongolo C (2007). Searching for resonances in the reaction  $Cl+CH_4 \rightarrow HCl+CH_3$ : Quantum versus quasiclassical dynamics and comparison with experiments. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.2762210

**18. 2006 - Articolo in rivista**

Defazio P, Petrongolo C (2006). Renner-Teller quantum dynamics of the  $N(2D) + H_2 \rightarrow NH + H$  reaction. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.2229212

**19. 2006 - Articolo in rivista**

Gamallo P, Sayos R, Gonzalez M, Petrongolo C, Defazio P (2006). Quantum real wave-packet dynamics of the  $N(4S) + NO(X2P) \rightarrow N_2(X1Sg+) + O(3P)$  reaction on the ground and first excited triplet potential energy surfaces: Rate constants, cross sections, and product distributions. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.2186643

**20. 2005 - Articolo in rivista**

Defazio P, Petrongolo C, Gamallo P, Gonzalez M (2005). Product distributions, rate constants, and mechanisms of  $LiH+H$  reactions. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.1914765

**21. 2003 - Articolo in rivista**

Defazio P, C. Petrongolo (2003). Dynamics of the  $N(2D) + H_2$  reaction on the  $X2A''$  surface, propagating real wave packets with an arcos mapping of the Hamiltonian. *JOURNAL OF THEORETICAL AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY*, ISSN: 0219-6336

**22. 2003 - Articolo in rivista**

Defazio P, Gray SK (2003). A quantum dynamics study of  $D_2 + OH \rightarrow DOH + D$  on the WSLFH potential energy function. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY. A, MOLECULES, SPECTROSCOPY, KINETICS, ENVIRONMENT, & GENERAL THEORY*, ISSN: 1089-5639, doi: 10.1021/jp030190a

**23. 2002 - Articolo in rivista**

Defazio P, Petrongolo C, Oliva C, Gonzalez M, Sayos R (2002). Quantum dynamics of the  $N(4S) + O_2$  reaction on the  $X2A'$  and  $4A'$  surfaces: Reaction probabilities, cross sections, rate constants, and product distributions. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.1494781

**24. 2001 - Articolo in rivista**

Defazio P, Petrongolo C, Gray SK, Oliva C (2001). Wave packet dynamics of the  $N(4S) + O_2(X3g) \rightarrow NO(X2) + O(3P)$  reaction on the  $X2A$  potential energy surface. *THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS*, ISSN: 0021-9606, doi: 10.1063/1.1386653

**Autorizzo il trattamento dei miei dati personali ai sensi del Dlgs 196 del 30 giugno 2003 e dell'art. 13 GDPR.**

Siena, 20/03/2026

