

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.

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^a 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^o 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 LiH + 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 $N(4S)+NO(X2Pi)\rightarrow N2(X1Sigma^+)+O(3P)$ ', 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 $N+H2\rightarrow NH+H$ 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 $NH(a^1\Delta) + H^2(S)$ reactions on the \tilde{A}^2A' 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 $CH(X2P) + H(2S)$ Reactions on the $CH2(X2A'')$ 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 $N2+O\rightarrow N+NO$ on the $N2O a3A''$ and $b2A'$ 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 $O(1Dg^+)$ 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 $Ne + H$. *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 $N(4S)+O_2(X3Sg^-)$ and $N(4S)+O_2(A3??u)$. *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 $NH(a1???, v=1)$ 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 $NH_2 \tilde{A} 2A_1$ 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 $NH(a??1)+H$ 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 $N(D_2)+H_2 \rightarrow NH+H$ 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 a $4A'$ 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

