

**FORMATO EUROPEO
PER IL CURRICULUM
VITAE**



INFORMAZIONI PERSONALI

Nome

PALAZZETTI FEDERICO

Indirizzo

Telefono

Fax

E-mail

Nazionalità

Data di nascita

1975

Researcher unique identifier ORCID: 0000-0002-1361-0524,
Research ID: M-8170-2015
Scopus author ID: Author ID: 23393263300

ABILITAZIONI

- ABILITAZIONE PRIMA FASCIA SETTORE 03/B1 (2018)
- ABILITAZIONE SECONDA FASCIA SETTORI 03/A2 (2017),
03/B1 (2017), 03/B2 (2017).

ESPERIENZA LAVORATIVA

- Date (da – a)
- Nome e indirizzo del datore di lavoro
 - Tipo di azienda o settore
 - Tipo di impiego
- Principali mansioni e responsabilità

Ottobre 2015 –Ottobre 2019

Università degli Studi di Perugia, Piazza dell'Università 1, Perugia
Università

Ricercatore a tempo determinato di tipo A

- Didattica: 1) titolare di un modulo del corso di laboratorio di chimica generale e inorganica I (primo anno del corso di laurea in chimica, 36 ore, 3 CFU) per gli anni accademici 2017-18 e 2018-19;

2) titolare del corso di chimica computazionale (corso complementare della laurea specialistica in Scienze Chimiche, 42 ore, 6 CFU) per gli anni accademici 2016-2017 e 2017-2018;

3) titolare del corso di computational chemistry (laurea magistrale in Scienze Chimiche, 42 ore, 6 CFU) per l'anno accademico 2018-2019;

09-09-20

4) supporto alla didattica per il corso di chimica generale I e laboratorio (servizio agli studenti e partecipazione alle commissioni di esame) per gli anni accademici 2015-16 e 2016-17;

5) correlatore di tesi di uno studente di laurea triennale e uno di laurea magistrale.

6) responsabilità di un collaboratore di ricerca post laurea e un collaboratore post dottorato.

- Attività di ricerca: Responsabile scientifico "principal investigator" del progetto "ORCHID is an integrated search of stereodynamical mechanisms on the ORigin of CHiral Discrimination by oriented molecular beams, synchrotron radiation, molecular dynamics and computational modeling", nell'ambito del programma di ricerca SIR, Scientific Independence for young Researchers, 2014 (Settore PE4).

- Date (da – a)

- Nome e indirizzo del datore di lavoro

- Tipo di azienda o settore

- Tipo di impiego

- Principali mansioni e responsabilità

Settembre 2014 – Marzo 2018

Scuola Normale Superiore di Pisa, Piazza dei Cavalieri, Pisa

Università

Collaboratore di ricerca (Contratto di collaborazione coordinata e continuativa)

Responsabile di unità del progetto "Materiali nanostrutturati avanzati per cementi eco-sostenibili: studio delle proprietà strutturali e strategie innovative per la loro valorizzazione" nell'ambito del programma di ricerca di alta qualificazione FIRB, Futuro in Ricerca, 2013

- Date (da – a)

- Nome e indirizzo del datore di lavoro

- Tipo di azienda o settore

- Tipo di impiego

- Principali mansioni e responsabilità

Gennaio – Aprile 2014

Università degli Studi di Pisa

Università

Assegnista di ricerca

Attività di ricerca: studio computazionale di complessi di metalli di transizione

- Date (da – a)

- Nome e indirizzo del datore di lavoro

- Tipo di azienda o settore

- Tipo di impiego

- Principali mansioni e responsabilità

Ottobre 2012 – Settembre 2013

Consiglio Nazionale delle Ricerche – Istituto di Metodologie Inorganiche e dei Plasmi (Bari)

Ente di ricerca

Assegnista di ricerca

- Attività di ricerca: Costruzione della superficie di energia potenziale per processi inelastici e reattivi nel sistema CO+CO con particolare riguardo alla caratterizzazione della reazione di formazione di CO₂ a partire da molecole di CO ro-vibrazionalmente eccitate, nell'ambito del programma di ricerca "Planetary Entry Integrated Models" (Phys4Entry) del VII Programma Quadro della UE-Tema 9 "SPACE"

-Didattica: supporto alla didattica (servizi agli studenti e partecipazione a commissione di esami) per il corso di chimica generale e inorganica I presso il dipartimento di chimica dell'Università degli Studi di Perugia.

Tutor di due tesi di laurea triennale.

- Date (da – a)

- Nome e indirizzo del datore di lavoro

- Tipo di azienda o settore

- Tipo di impiego

- Principali mansioni e responsabilità

Luglio 2010 – Luglio 2012 (24 mesi)

Università degli Studi di Perugia, Piazza dell'Università 1, Perugia

Università

Assegnista di ricerca

Attività di ricerca: studio teorico e sperimentale della dinamica dei nanoaggregati

- Date (da – a)

- Nome e indirizzo del datore di lavoro

- Tipo di azienda o settore

- Tipo di impiego

- Principali mansioni e responsabilità

Febbraio 2010 – Aprile 2010

Università degli Studi di Perugia, Piazza dell'Università 1, Perugia

Università

Collaboratore di ricerca

Attività di ricerca: Esperimenti di selezione di conformeri in fasci molecolari supersonici tramite campi elettrici esapolari.

- Date (da – a)
- Nome e indirizzo del datore di lavoro
 - Tipo di azienda o settore
 - Tipo di impiego
- Principali mansioni e responsabilità

Aprile 2006- Novembre 2006
 Università degli Studi di Perugia, Piazza dell'Università 1, Perugia
 Università
 Collaboratore di ricerca
 Attività di ricerca: Modelli di nanoaggregati

09-09-20

- Date (da – a)
- Nome e indirizzo del datore di lavoro
 - Tipo di azienda o settore
 - Tipo di impiego
- Principali mansioni e responsabilità

Febbraio 2006 – Marzo 2006
 Università degli Studi di Perugia, Piazza dell'Università 1, Perugia
 Università
 Borsista
 Attività di ricerca: Modelli di nanoaggregati

ATTIVITA' DI RICERCA PRESSO UNIVERSITA' E CENTRI DI RICERCA ESTERI

- Date (da – a)
- Nome e indirizzo del datore di lavoro
 - Tipo di azienda o settore
 - Tipo di impiego
- Principali mansioni e responsabilità

Luglio 2018 – Agosto 2018
 Department of Chemistry – Osaka University, Osaka (Giappone)
 Università
 "Visiting professor"
 Attività di ricerca: studio sperimentale della dinamica di fotodissociazione dell'alotano (CF₃CHClBr)

- Date (da – a)
- Nome e indirizzo del datore di lavoro
 - Tipo di azienda o settore
 - Tipo di impiego
- Principali mansioni e responsabilità

Agosto-novembre 2011 e novembre 2012 – febbraio 2013 (sei mesi)
 Institute of Applied Molecular Sciences, Academia Sinica, Taipei (Taiwan)
 Ente di ricerca
 "Visiting researcher"
 Attività di ricerca: studio teorico-computazionale della redistribuzione di energia e dinamica in processi fotoindotti

- Date (da – a)
- Nome e indirizzo del datore di lavoro
 - Tipo di azienda o settore
 - Tipo di impiego
- Principali mansioni e responsabilità

Febbraio-aprile e ottobre 2010- novembre 2010 (quattro mesi)
 Graduate School of Science-Department of Chemistry – Osaka University, Osaka (Giappone)
 Università
 "Visiting researcher"
 Attività di ricerca: Esperimenti di selezione di conformeri in fasci molecolari supersonici tramite campi elettrici esapolari.

- Date (da – a)
- Nome e indirizzo del datore di lavoro
 - Tipo di azienda o settore
 - Tipo di impiego
- Principali mansioni e responsabilità

Settembre 2008-gennaio 2009 e maggio-agosto 2009
 Graduate School of Science-Department of Chemistry – Osaka University, Osaka (Giappone)
 Università
 "Visiting researcher"
 Attività di ricerca: Esperimenti di allineamento di molecole chirali e selezione di stati rotazionali in fasci supersonici tramite campi elettrici esapolari.

ISTRUZIONE E FORMAZIONE

- Date (da – a)
- Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione
- Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio

2009
 Dottorato di ricerca in Scienze Chimiche presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Perugia
 Area teorico-computazionale

- Qualifica conseguita
- Livello nella classificazione nazionale (se pertinente)

Dottore di ricerca in Scienze Chimiche

- Date (da – a)
- Nome e tipo di istituto di istruzione o formazione
- Principali materie / abilità professionali oggetto dello studio
 - Qualifica conseguita
- Livello nella classificazione nazionale (se pertinente)

Febbraio – luglio 2002

Programma Erasmus nell'ambito del corso di laurea in chimica presso il Departamento de Quimica – Universidade de Coimbra, Coimbra (Portogallo)
Area teorico-computazionale

- Date (da -a)
- Nome e tipo di istruzione o formazione
- Principali materie/abilità professionali oggetto dello studio
 - Qualifica conseguita
- Date (da -a)
- Nome e tipo di istruzione o formazione
- Principali materie/abilità professionali oggetto dello studio
 - Qualifica conseguita

2005

Corso di laurea in chimica presso il Dipartimento di Chimica dell'Università degli Studi di Perugia

Indirizzo chimico inorganico, orientamento teorico

Dottore magistrale in chimica

1994

Scuola secondaria superiore, Istituto Tecnico Industriale A. Volta (Perugia)

Chimica industriale, impianti chimici

Diploma di perito chimico industriale

COLLABORAZIONI:

COLLABORAZIONI:

- DOTT. BERNARD FIORETTI (PERUGIA)
- PROF. PO-YU TSAI, NATIONAL CHUNG HSING UNIVERSITY, TAICHUNG (TAIWAN)
- DOTT. MORENO MARCELLINI, CNRS, SAINT GOBAIN (FRANCIA)
- PROF. KING-CHUEN LIN, NATIONAL TAIWAN UNIVERSITY E INSTITUTE OF APPLIED MOLECULAR SCIENCES-ACADEMIA SINICA, TAIPEI (TAIWAN)
- PROF. TOSHIO KASAI, NATIONAL TAIWAN UNIVERSITY, TAIPEI (TAIWAN) E OSAKA UNIVERSITY, OSAKA (GIAPPONE)
- DR. MASAOKI NAKAMURA, NATIONAL TAIWAN UNIVERSITY, TAIPEI (TAIWAN)
- PROF. DOCK-CHIL CHE, OSAKA UNIVERSITY, OSAKA (GIAPPONE)
- PROF. MARIO CAPITELLI, NANOTEC ISTITUTO DI NANOTECNOLOGIA, CONSIGLIO NAZIONALE DELLE RICERCHE, BARI.
- DR. PATRICIA R. P. BARRETO, LABORATORIO ASSOCIADO DE PLASMA – INSTITUTO DE PESQUISAS ESPACIAIS (NATIONAL INSTITUTE OF SPATIAL RESEARCHES) – SAO JOSE' DOS CAMPOS, SAO PAULO, BRASILE
- PROF. SSA ALESSANDRA F. ALBERNAZ – INSTITUTO DE FISICA – UNIVERSIDADE DE BRASILIA, BRASILIA (BRASILE)
- PROF. VALTER HENRIQUE CARVALHO SILVA – UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIAS, ANAPOLIS (BRASILE)
- PROF. HIKARU KOBAYASHI – OSAKA UNIVERSITY, OSAKA (GIAPPONE)

09-09-20

RESPONSABILITÀ SCIENTIFICA IN
PROGETTI DI RICERCA:

09-09-20

RESPONSABILITÀ SCIENTIFICA IN PROGETTI DI RICERCA:

- RESPONSABILE SCIENTIFICO "PRINCIPAL INVESTIGATOR" DEL PROGETTO "ORCHID IS AN INTEGRATED SEARCH OF STEREODYNAMICAL MECHANISMS ON THE ORIGIN OF CHIRAL DISCRIMINATION BY ORIENTED MOLECULAR BEAMS, SYNCHROTRON RADIATION, MOLECULAR DYNAMICS AND COMPUTATIONAL MODELING", NELL'AMBITO DEL PROGRAMMA DI RICERCA DI ALTA QUALIFICAZIONE (DECRETO MINISTERIALE 28 DICEMBRE 2015 N. 963) SIR, SCIENTIFIC INDEPENDENCE FOR YOUNG RESEARCHERS, 2014 (SETTORE PE4).
- RESPONSABILE DI UNITÀ DEL PROGETTO "MATERIALI NANOSTRUTTURATI AVANZATI PER CEMENTI ECO-SOSTENIBILI: STUDIO DELLE PROPRIETÀ STRUTTURALI E STRATEGIE INNOVATIVE PER LA LORO VALORIZZAZIONE" NELL'AMBITO DEL PROGRAMMA DI RICERCA DI ALTA QUALIFICAZIONE FIRB, FUTURO IN RICERCA, 2013.

PARTECIPAZIONE A PROGRAMMI DI RICERCA FINANZIATI:

- 2018-2019. FONDO PER LA RICERCA DI BASE DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PERUGIA.
- 2016-2018. FONDO PER LA RICERCA DI BASE DELL'UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI PERUGIA.
- 2008-2010. PRIN 2007. TITOLO DEL PROGETTO: "DINAMICA DI REAZIONI ELEMENTARI E DI INTERAZIONI INTERMOLECOLARI IN SISTEMI GASSOSI E DINAMICA MOLECOLARE IN SOLUZIONI ACQUOSE: ESPERIMENTI MEDIANTE TECNICHE A FASCI MOLECOLARI E SPETTROSCOPIA LASER ED APPROCCI QUANTISTICI ED APPROSSIMATI." (2007H9S8SW_004)

INIZIATIVE EDITORIALI

- editore per la rivista Rendiconti Lincei, Scienze Fisiche e Naturali, "Volume 29, Issue 1, March 2018, Special Section: The Quantum World of Molecules, from Orbitals to Spin Networks";
- editore per la rivista Rendiconti Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL. Memorie di Scienze Fisiche e Naturali. 136° (2018) Vol. XLII, Parte II, Tomo II. "The astrochemical observatory: focus on chiral molecules".

PREMIO SCIENTIFICI

- Conseguimento del premio "Premio annuale dedicato ai giovani studiosi per la migliore pubblicazione – Anno 2016" Università degli Studi di Perugia.

ALTRE INFORMAZIONI

RAPPRESENTANTE IN CONSIGLIO E GIUNTA DI DIPARTIMENTO

- RAPPRESENTANTE DEI DOTTORANDI NEL CONSIGLIO DI DIPARTIMENTO DI CHIMICA (2007-2009)
- RAPPRESENTANTE DEGLI ASSEGNISTI NEL CONSIGLIO DI DIPARTIMENTO DI CHIMICA (2012)
- RAPPRESENTANTE DEGLI ASSEGNISTI NELLA GIUNTA DEL DIPARTIMENTO DI CHIMICA (2012)

CAPACITÀ E COMPETENZE
TECNICHE

*Con computer, attrezzature specifiche,
macchinari, ecc.*

LINGUAGGI DI PROGRAMMAZIONE: FORTRAN 77 E 90, LINGUAGGIO C, PYTHON
SISTEMI OPERATIVI: WINDOWS E LINUX
SOFTWARE: ORIGIN, MATLAB
PROGRAMMI DI STRUTTURA ELETTRONICA: GAUSSIAN E GAMESS

09-09-20

CAPACITÀ E COMPETENZE

PERSONALI

*Acquisite nel corso della vita e della carriera
ma non necessariamente riconosciute da
certificati e diplomi ufficiali.*

MADRELINGUA

ALTRE LINGUA

- Capacità di lettura
- Capacità di scrittura
- Capacità di espressione orale

- Capacità di lettura
- Capacità di scrittura
- Capacità di espressione orale

- Capacità di lettura
- Capacità di scrittura
- Capacità di espressione orale

- Capacità di lettura
- Capacità di scrittura
- Capacità di espressione orale

Capacità di lettura
Capacità di scrittura
Capacità di espressione orale

ULTERIORI INFORMAZIONI

- DAL 1994 AL 2005 HO LAVORATO NELL'AZIENDA DI FAMIGLIA
- DAL 1997 AL 1998 HO SVOLTO IL SERVIZIO DI LEVA OBBLIGATORIO SOSTITUTIVO DEL SERVIZIO MILITARE IN UNA STRUTTURA SANITARIA.
- NEL 1994 HO SVOLTO UNO STAGE FORMATIVO ALLA CENTRALE ENEL DI PIETRAFITTA (PERUGIA).

ITALIANO

INGLESE

ECCELLENTE
ECCELLENTE
ECCELLENTE

PORTOGHESE

ECCELLENTE
ECCELLENTE
ECCELLENTE

SPAGNOLO

BUONO
BUONO
BUONO

FRANCESE

BUONO
SUFFICIENTE
SUFFICIENTE

GIAPPONESE

SUFFICIENTE
(HIRAGANA, KATAKANA E CIRCA CENTO KANJI)
SUFFICIENTE

09-09-20

[Inserire qui ogni altra informazione pertinente, ad esempio persone di riferimento, referenze ecc.]

Lista completa delle pubblicazioni

09-09-20
02-60-60

Fattore h 23, 1256 citazioni (secondo Google Scholar).

1. Che, D. -C., Nakamura, M., Chang, H. -P., Lin, K. -C., Kasai, T., Aquilanti, V., Palazzetti, F., "UV-Photodissociation of Halothane in a Focused Molecular Beam: Space-Speed Slice-Imaging of Competitive Bond Breaking into Spin-Orbit Selected Chlorine and Bromine Atoms", *J. Phys. Chem. A* (2020), vol. 124, pp. 5288-5296.
2. Sanches-Neto, F. O., Coutinho, N. D., Palazzetti, F., Carvalho-Silva, V. -H. "Temperature dependence of rate constants for the H(D) + CH₄ reaction in gas and aqueous phase: deformed Transition-State Theory study including quantum tunneling and diffusion effects" (2020) vol. 31, pp. 609 – 617.
3. Barreto, P. R. P., Cruz, A. C. P. S., Euclides, H. O., Albernaz, A. F., Palazzetti, F., Pirani, F. "A Quantum Chemical Approach for the Characterization of the Interaction Potential of Propylene Oxide with Rare-Gas Atoms (He, Ne, Ar)" (2020) *Progress in Theoretical Chemistry and Physics*.
4. Rezende, M. V. C. S., Gomes dos Santos, P., Coutinho, N. D., Palazzetti, F., Lombardi, A., Carvalho-Silva, V. H. "Rate constants and first-principles trajectories for attack at tetrahedral carbon: Role of molecular orientation on chiral selectivity" (2019) *AIP Conference Proceedings*, vol. 2186, 030016.
5. Caglioti, C., dos Santos R. F., Palazzetti, F., Lombardi, A., Aquilanti V. "Screen representation of structural properties of alanine in polypeptide chains" (2019) *AIP Conference Proceedings*, vol. 2186, 030015.
6. Lombardi, A., Palazzetti, F., Sevryuk, M. B. "Hyperspherical coordinates and energy partitions for reactive processes and clusters" (2019) *AIP Conference Proceedings*, vol. 2186, 030014.
7. Rezende, M. V. C. S., Coutinho, N. D., Palazzetti, F., Lombardi, A., Carvalho-Silva, V. H., "Nucleophilic substitution vs elimination reaction of bisulfide ions with substituted methanes: exploration of chiral selectivity by stereodirectional first-principles dynamics and transition state theory" (2019) *J. Mol. Mod.* Vol. 25, p. 227.
8. Caglioti, C., dos Santos, R. F., Lombardi, A., Palazzetti, F., Aquilanti, V. "Screens Displaying Structural Properties of Aminoacids in Polypeptide Chains: Alanine as a Case Study" (2019) *Lecture Notes in Computer Sciences*, vol. 11624, pp. 439-449.
9. Coletti, C., Palazzetti, F., Anderson, R. W., Aquilanti, V. "Hypergeometric Polynomials, Hyperharmonic Discrete and Continuous Expansions: Evaluations, Interconnections, Extensions" (2019) *Lecture Notes in Computer Sciences*, vol. 11624, pp. 460-476.
10. Lombardi, A., Palazzetti, F., Aquilanti, V. "Molecular Dynamics of Chiral Molecules in Hyperspherical Coordinates" (2019) *Lecture Notes in Computer Sciences*, vol. 11624, pp. 413-427.
11. Carvalho-Silva, V. H., Vaz, E. C., Coutinho, N. D., Kobayashi, H., Kobayashi, Y., Kasai, T., Palazzetti, F., Lombardi, A., Aquilanti, V. "The Increase of the Reactivity of Molecular Hydrogen with Hydroxyl Radical from the Gas Phase versus an Aqueous Environment: Quantum

- Chemistry and Transition State-Theory Calculations" (2019) Lecture Notes in Computer Sciences, vol. 11624, pp. 450-459.
12. Coletti, C., Aquilanti, V., Palazzetti, A. "Hypergeometric orthogonal polynomials as expansion basis sets for atomic and molecular orbitals: The Jacobi ladder" *Adv. Quant. Chem.* (2019) *in press*. DOI: 10.1016/bs.aiq.2019.05.002.
 13. Nakamura, M., Chang, H. -P., Lin, K. -C., Kasai, T., Che, D. -C., Palazzetti, F., Aquilanti, V. "Stereodynamic Imaging of Bromine Atomic Photofragments Eliminated from 1-Bromo-2-Methylbutane Oriented via Hexapole State Selector" (2019) *J. Phys. Chem. A*, vol. 123, pp. 6635- 6644.
 14. Aquilanti, V., Bitencourt, A. C. P., Caglioti, C., dos Santos, R. F., Lombardi, A., Palazzetti, F., Ragni, M. "Quadrilaterals on the square screen of their diagonals: Regge symmetries of quantum mechanical spin networks and Grashof classical mechanisms of four-bar linkages" (2019) *Rend. Fis. Acc. Lincei*, vol. 30, pp. 67-81.
 15. Nakamura, M., Palazzetti, F., Tsai, P. -Y., Yang, S -Jr., Lin, K. -C., Kasai, T., Che, D. -C., Lombardi, A., Aquilanti, V. "Vectorial imaging of the photodissociation of 2-bromobutane oriented via hexapolar state selection" (2019) *Phys. Chem. Chem. Phys.* Vol. 21, pp. 14164-14172.
 16. Albernaz, A. F., Aquilanti, V., Barreto, P. R. P., Bitencourt, A. C. P., Caglioti, C., Ferreira Dos Santos, R., Lombardi, A., Maciel, G. S., Palazzetti, F. Ragni, M. "Mapping the configurations of four-bar mechanisms as chirality change processes: a clue in evolutionary science" (2018) In: Andrea Lombardi and Federico Palazzetti. *Rendiconti Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL Memorie di Scienze Fisiche e Naturali*. vol. 42, p. 151-162
 17. Lombardi, A., Palazzetti, F., Aquilanti, V., Lin, K. -C., Che, D. -C., Nakamura, M., Kasai, T. "Excited CO Formation in Interstellar Molecular Clouds: Methyl Formate Photodissociation by Ultraviolet Radiation" (2018) In: Andrea Lombardi and Federico Palazzetti. *Rendiconti della Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL Memorie di Scienze Fisiche e Naturali*. vol. 42, p. 107-113
 18. Albernaz, A. F., Barreto, P. R. P., Aquilanti, V., Lombardi, A., Palazzetti, F., Pirani, F. "The astrochemical observatory: The interaction between helium and the chiral molecule propylene oxide" (2018) *AIP Conference Proceedings*, vol. 2040, 020018
 19. Lombardi, A., Palazzetti, F., Aquilanti, V., Grossi G. "Collisions of chiral molecules theoretical aspects and experiments" (2018) *AIP Conference Proceedings*, vol. 2040, 020020 American Institute of Physics, ISSN: 0094-243X
 20. Barreto, P. R. P., Albernaz, A. F., Aquilanti, V., Faginas-Lago, N., Grossi, G., Lombardi, A., Palazzetti, F., Pirani, F. "Potential energy surface for the interaction of helium with the chiral molecule propylene oxide. In: *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*. vol. 10964, p. 593-604, Springer Verlag, ISBN: 9783319951737, doi: 10.1007/978-3-319-95174-4_46
 21. Caglioti, C., Ferreira Dos Santos, R., Aquilanti, V., Lombardi, A., Palazzetti, F. "Screen mapping of structural and electric properties, chirality changing rates and racemization times of chi-

- ral peroxides and persulfides" (2018) AIP Conference Proceedings, vol. 2040, 020021 American Institute of Physics, ISSN: 0094-243X, Thessaloniki (Greece), 14-18 March 2018, doi: 10.1063/1.5079063
22. Falcinelli, S., Vecchiocattivi, F., Alagia, M., Schio, L., Richter, R., Stranges, S., Catone, D., Arruda, M. S., Mendes, L. A V, Palazzetti, F., Aquilanti, V., Pirani, F. "Double photoionization of propylene oxide: A coincidence study of the ejection of a pair of valence-shell electrons" (2018) The Journal of Chemical Physics, vol. 148, 114302, doi: 10.1063/1.5024408
 23. Lin, K. -C., Tsai, P.-Y., Chao, M.-H., Nakamura, M., Kasai, T., Lombardi, A., Palazzetti, F., Aquilanti, V. Roaming signature in photodissociation of carbonyl compounds. (2018) International Reviews in Physical Chemistry, vol. 37, p. 217-258, ISSN: 0144-235X, doi: 10.1080/0144235X.2018.1488951
 24. Lombardi, A., Palazzetti, F. Chirality in molecular collision dynamics (2018) Journal of Physics. Condensed Matter, vol. 30, p. 1-19, doi: 10.1088/1361-648X/aaa1c8
 25. Lombardi, A., Palazzetti, F. (2018). INTRODUCTION: The quantum world of molecules: from orbitals to spin networks. Rendiconti Lincei, Scienze Fisiche e Naturali, vol. 29, p. 171-172, ISSN: 2037-4631, doi: 10.1007/s12210-018-0678-7
 26. Marcellini, M., Nasedkin, A., Zietz, B., Petersson, J., Vincent, J., Palazzetti, F., Malmerberg, E., Kong, Q, Wulff, M., Van Der Spoel, D., Neutze, R., Davidsson, J. "Transient isomers in the photodissociation of bromiodomethane". The Journal of Chemical Physics, vol. 148, p. 134307, Idoi: 10.1063/1.5005595
 27. Falcinelli, S., Vecchiocattivi, F., Alagia, M., Schio, L., Richter, R., Stranges, S., Catone, D., Palazzetti, F., Aquilanti, V., Pirani, F. "The double photoionization of propylene oxide in the 18.0 – 37.0 eV photon energy range". (2018) In: Elettra Sincrotrone Trieste (Italy). Elettra Highlights 2017-2018. THE ELETTRA HIGHLIGHTS, vol. 2017/2018, p. 88-89, Trieste:Elettra Sincrotrone Trieste
 28. Aquilanti, V., Casavecchia, P., Che, D. -C., Falcinelli, S., Lin, K. -C., Lombardi, A., Kasai, T., Nakamura, M., Palazzetti, F., Pirani, F., Tsai, P. -Y. "The ORCHID project: a search for the Origin of Chiral Discrimination". (2018 In: Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL. Memorie di Scienze Fisiche e Naturali, «Rendiconti della Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL», serie V, vol. XLII, parte II, tomo II. vol. XLII, Parte II, Tomo II, p. 163-173, Roma:Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL
 29. Aquilanti, V., Caglioti, C., Casavecchia, P., Grossi, G., Lombardi, A., Palazzetti, F., Pirani, F. "The astrochemical observatory: Computational and theoretical focus on molecular chirality changing torsions around O - O and S - S bonds" (2017) In: *AIP Conference Proceedings*. vol. 1906, American Institute of Physics Inc., doi: 10.1063/1.5012289
 30. Aquilanti, V., Caglioti, C., Lombardi, A., Maciel, G. S., Palazzetti, F. "Screens for displaying chirality changing mechanisms of a series of peroxides and persulfides from conformational structures computed by quantum chemistry" (2017) In: Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics). vol. 10408, p. 354-368, , doi: 10.1007/978-3-319-62404-4_26

- 09-09-20
31. Barreto P. R.P., Cruz A. C.P.S., Barreto R.L.P., Palazzetti F., Albernaz A. F., Lombardi A., Maciel G. S., Aquilanti V. "The spherical-harmonics representation for the interaction between diatomic molecules: The general case and applications to COCO and COHF" (2017) *Journal of Molecular Spectroscopy*, vol. 337, p. 163-177, ISSN: 0022-2852, doi: 10.1016/j.jms.2017.05.009
 32. Barreto, P. R. P., Euclides, H. D., Albernaz, A. F., Aquilanti, V., Capitelli, M., Grossi, G., Lombardi, A., Macheret, S., Palazzetti, F. "Gas phase Boudouard reactions involving singlet-singlet and singlet-triplet CO vibrationally excited states: implications for the non-equilibrium vibrational kinetics of CO/CO₂ plasmas" (2017) *The European Physical Journal D, Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 71, p. 259 ISSN: 1434-6060, doi: 10.1140/epjd/e2017-80103-1
 33. Faginas-Lago, N., Albertí, M., Lombardi, A., Palazzetti, F. "Acetone-water mixtures: Molecular dynamics using a semiempirical intermolecular potential" (2017) In: *Lecture Notes in Computer Science* (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics). vol. 10406, p. 3-13, Springer Verlag, ISBN: 9783319623979, doi: 10.1007/978-3-319-62398-6_1
 34. Lin, K. -C. Nakamura, M., Yang, S. -Jr., Kasai, T., Che, D. -C., Lombardi, A., Palazzetti, F., Aquilanti, V. "Angular distribution of bromine atomic photofragment in oriented 2-bromobutane via hexapole state selector". In: *AIP Conference Proceedings* (2017) vol. 1906, p. 030008 doi: 10.1063/1.5012287
 35. Lombardi, A., Palazzetti, F., Aquilanti, V., Grossi, G. "Chirality in molecular collisions". In: *AIP Conference Proceedings* (2017) vol. 1906, American Institute of Physics Inc, doi: 10.1063/1.5012291
 36. Lombardi, A., Palazzetti, F., Aquilanti, V., Pirani, F., Casavecchia, P. "The astrochemical observatory: Experimental and computational focus on the chiral molecule propylene oxide as a case study" (2017) In: *Lecture Notes in Computer Science* (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics). vol. 10408, p. 267-280, Springer Verlag, doi: 10.1007/978-3-319-62404-4_20
 37. Nakamura, M. Yang, S.-Jr., Lin, K. -C., Kasai, T., Che, D. -C., Lombardi, A., Palazzetti, F., Aquilanti, V. "Stereodirectional images of molecules oriented by a variable-voltage hexapolar field: Fragmentation channels of 2-bromobutane electronically excited at two photolysis wavelengths" (2017) *The Journal of Chemical Physics* vol. 147, p. 013917. doi: 10.1063/1.4981025
 38. Pedone, A., Palazzetti, F., Barone, V. "Models of Aged Magnesium-Silicate-Hydrate Cements Based on the Lizardite and Talc Crystals: A Periodic DFT-GIPAW Investigation" (2017) *Journal of Physical Chemistry C*, 121, p. 7319-7330, doi: 10.1021/acs.jpcc.7b00708.
 39. Palazzetti, F., Lombardi, A., Nakamura, M., Yang, S.-J., Kasai, T., Lin, K.-C., Tsai, P.-Y., Che, D.-C. Rotational state-selection and alignment of chiral molecules by electrostatic hexapoles (2016) *AIP Conference Proceedings*, 1790, art. no. 020019. DOI: 10.1063/1.4968645
 40. Palazzetti, F., Lombardi, A., Yang, S.-J., Nakamura, M., Kasai, T., Lin, K.-C., Che, D.-C., Tsai, P.-Y. Stereodirectional photodynamics: Experimental and theoretical perspectives (2016) *AIP Conference Proceedings*, 1790, art. no. 020020. DOI: 10.1063/1.4968646

41. Lombardi, A., Palazzetti, F., Aquilanti, V., Grossi, G., Albernaz, A.F., Barreto, P.R.P., Cruz, A.C.P.S. Spherical and hyperspherical harmonics representation of van der Waals aggregates (2016) AIP Conference Proceedings, 1790, art. no. 020005. DOI: 10.1063/1.4968631
42. Gianturco, F.A., Satta, M., Mendolicchio, M., Palazzetti, F., Piserchia, A., Barone, V., Wester, R. Exploring a Chemical Route for the Formation of Stable Anions of Polyynes [C_nH^- ($n=2, 4$)] in Molecular Clouds (2016) Astrophysical Journal, 830 (1), art. no. 2. DOI: 10.3847/0004-637X/830/1/2
43. Nakamura, M., Yang, S.-J., Tsai, P.-Y., Kasai, T., Lin, K.-C., Che, D.-C., Lombardi, A., Palazzetti, F., Aquilanti, V. Hexapole-Oriented Asymmetric-Top Molecules and Their Stereodirectional Photodissociation Dynamics (2016) Journal of Physical Chemistry A, 120 (27), pp. 5389-5398. DOI: 10.1021/acs.jpca.6b02410
44. Lombardi, A., Palazzetti, F., Aquilanti, V., Li, H.-K., Tsai, P.-Y., Kasai, T., Lin, K.-C. Rovibrationally Excited Molecules on the Verge of a Triple Breakdown: Molecular and Roaming Mechanisms in the Photodecomposition of Methyl Formate (2016) Journal of Physical Chemistry A, 120 (27), pp. 5155-5162. DOI: 10.1021/acs.jpca.6b00723
45. Albernaz, A.F., Aquilanti, V., Barreto, P.R.P., Caglioti, C., Cruz, A.C.P.S., Grossi, G., Lombardi, A., Palazzetti, F. Interactions of Hydrogen Molecules with Halogen-Containing Diatomics from Ab Initio Calculations: Spherical-Harmonics Representation and Characterization of the Intermolecular Potentials (2016) Journal of Physical Chemistry A, 120 (27), pp. 5315-5324. DOI: 10.1021/acs.jpca.6b01718
46. Lombardi A., Faginas-Lago N., Grossi G., Palazzetti F., Aquilanti V. Collisional Energy Exchange in CO_2-N_2 Gaseous Mixtures (2016) Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics), 9786 LNCS (PART 2), pp. 246-257. DOI: 10.1007/978-3-319-42085-1_19
47. Kasai, T., Che, D.-C., Tsai, P.-Y., Lin, K.-C., Palazzetti, F., Aquilanti, V. Stereodynamics: From elementary processes to macroscopic chemical reactions (2015) AIP Conference Proceedings, 1702, art. no. 090023. DOI: 10.1063/1.4938831
48. Lin, K.-C., Tsai, P.-Y., Chao, M.-H., Kasai, T., Lombardi, A., Palazzetti, F., Aquilanti, V. Photodissociation of methyl formate: Conical intersections, roaming and triple fragmentation (2015) AIP Conference Proceedings, 1702, art. no. 090025. DOI: 10.1063/1.4938833
49. Latouche, C., Skouteris, D., Palazzetti, F., Barone, V. TD-DFT Benchmark on Inorganic Pt(II) and Ir(III) Complexes (2015) Journal of Chemical Theory and Computation, 11 (7), pp. 3281-3289. DOI: 10.1021/acs.jctc.5b00257
50. Nakamura, M., Tsai, P.-Y., Kasai, T., Lin, K.-C., Palazzetti, F., Lombardi, A., Aquilanti, V. Dynamical, spectroscopic and computational imaging of bond breaking in photodissociation: Roaming and role of conical intersections (2015) Faraday Discussions, 177, pp. 77-98. DOI: 10.1039/c4fd00174e
51. Latouche, C., Palazzetti, F., Skouteris, D., Barone, V. High-accuracy vibrational computations for transition-metal complexes including anharmonic corrections: Ferrocene, ruthenocene, and

09-04-20

- osmocene as test cases (2014) *Journal of Chemical Theory and Computation*, 10 (10), pp. 4565-4573. DOI: 10.1021/ct5006246
52. Palazzetti, F., Maciel, G.S., Kanda, K., Nakamura, M., Che, D.-C., Kasai, T., Aquilanti, V. Control of conformers combining cooling by supersonic expansion of seeded molecular beams with hexapole selection and alignment: Experiment and theory on 2-butanol (2014) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16 (21), pp. 9866-9875. DOI: 10.1039/c3cp54475c
53. Kasai, T., Che, D.-C., Okada, M., Tsai, P.-Y., Lin, K.-C., Palazzetti, F., Aquilanti, V. Directions of chemical change: Experimental characterization of the stereodynamics of photodissociation and reactive processes (2014) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16 (21), pp. 9776-9790. DOI: 10.1039/c4cp00464g
54. Tsai, P.-Y., Chao, M.-H., Kasai, T., Lin, K.-C., Lombardi, A., Palazzetti, F., Aquilanti, V. Roads leading to roam. Role of triple fragmentation and of conical intersections in photochemical reactions: Experiments and theory on methyl formate (2014) *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16 (7), pp. 2854-2865. DOI: 10.1039/c3cp53792g
55. Lombardi, A., Palazzetti, F., Lin, K.-C., Tsai, P.-Y. Effective four-center model for the photodissociation dynamics of methyl formate (2014) *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 8579 LNCS (PART 1), pp. 452-467. DOI: 10.1007/978-3-319-09144-0_31
56. Palazzetti F, Caglioti C, Lombardi A, Grossi G (2014). Struttura del legame perossidico: flessibilità, chiralità e implicazioni protobiologiche. *RENDICONTI - ACCADEMIA NAZIONALE DELLE SCIENZE DETTA DEI XL. MEMORIE DI SCIENZE FISICHE E NATURALI*, p. 137-160, ISSN: 0392-4130
57. Su, T.-M., Palazzetti, F., Lombardi, A., Grossi, G., Aquilanti, V. Molecular alignment and chirality in gaseous streams and vortices (2013) *Rendiconti Lincei*, 24 (3), pp. 291-297. DOI: 10.1007/s12210-013-0249-x
58. Palazzetti, F., Tsai, P.-Y., Lombardi, A., Nakamura, M., Che, D.-C., Kasai, T., Lin, K.-C., Aquilanti, V. Aligned molecules: Chirality discrimination in photodissociation and in molecular dynamics (2013) *Rendiconti Lincei*, 24 (3), pp. 299-308. DOI: 10.1007/s12210-013-0248-y
59. Lombardi, A., Laganà, A., Pirani, F., Palazzetti, F., Lago, N.F. Carbon oxides in gas flows and earth and planetary atmospheres: State-to-state simulations of energy transfer and dissociation reactions (2013) *Lecture Notes in Computer Science (including subseries Lecture Notes in Artificial Intelligence and Lecture Notes in Bioinformatics)*, 7972 LNCS (PART 2), pp. 17-31. DOI: 10.1007/978-3-642-39643-4_2
60. Balucani, N., Bartocci, A., Brunetti, B., Candori, P., Falcinelli, S., Palazzetti, F., Pirani, F., Vecchiocattivi, F. Collisional autoionization dynamics of $\text{Ne}(^3\text{P}_{2,0})\text{-H}_2\text{O}$ (2012) *Chemical Physics Letters*, 546, pp. 34-39. DOI: 10.1016/j.cplett.2012.07.051
61. Palazzetti, F., Maciel, G.S., Lombardi, A., Grossi, G., Aquilanti, V. The astrochemical observatory: Molecules in the laboratory and in the cosmos (2012) *Journal of the Chinese Chemical Society*, 59 (9), pp. 1045-1052. DOI: 10.1002/jccs.201200242

2. Barreto, P.R.B., Albernaz, A.F., Capobianco, A., Palazzetti, F., Lombardi, A., Grossi, G., Aquilanti, V. Potential energy surfaces for interactions of H₂O with H₂, N₂ and O₂: A hyperspherical harmonics representation, and a minimal model for the H₂O-rare-gas-atom systems (2012) *Computational and Theoretical Chemistry*, 990, pp. 53-61. DOI: 10.1016/j.comptc.2011.12.024
63. Che, D.-C., Kanda, K., Palazzetti, F., Aquilanti, V., Kasai, T. Electrostatic hexapole state-selection of the asymmetric-top molecule propylene oxide: Rotational and orientational distributions (2012) *Chemical Physics*, 399, pp. 180-192. DOI: 10.1016/j.chemphys.2011.11.020
64. Barreto, P.R.P., Albernaz, A.F., Palazzetti, F. Potential energy surfaces for van der Waals complexes of rare gases with H 2S and H 2S 2: Extension to xenon interactions and hyperspherical harmonics representation (2012) *International Journal of Quantum Chemistry*, 112 (3), pp. 834-847. DOI: 10.1002/qua.23073
65. Barreto, P.R.P., Albernaz, A.F., Palazzetti, F., Lombardi, A., Grossi, G., Aquilanti, V. Hyperspherical representation of potential energy surfaces: Intermolecular interactions in tetra-atomic and penta-atomic systems (2011) *Physica Scripta*, 84 (2), art. no. 028111. DOI: 10.1088/0031-8949/84/02/028111
66. Lombardi, A., Palazzetti, F., Maciel, G.S., Aquilanti, V., Sevryuk, M.B. Simulation of oriented collision dynamics of simple chiral molecules (2011) *International Journal of Quantum Chemistry*, 111 (7-8), pp. 1651-1658. DOI: 10.1002/qua.22816
67. Aquilanti, V., Grossi, G., Lombardi, A., Maciel, G.S., Palazzetti, F. Aligned molecular collisions and a stereodynamical mechanism for selective chirality (2011) *Rendiconti Lincei*, 22 (2), pp. 125-135. DOI: 10.1007/s12210-011-0123-7
68. Palazzetti, F., Munusamy, E., Lombardi, A., Grossi, G., Aquilanti, V. Spherical and hyperspherical representation of potential energy surfaces for intermolecular interactions (2011) *International Journal of Quantum Chemistry*, 111 (2), pp. 318-332. DOI: 10.1002/qua.22688
69. Lombardi, A., Maciel, G.S., Palazzetti, F., Grossi, G., Aquilanti, V. Alignment and chirality in gaseous flows (2010) *Journal of the Vacuum Society of Japan*, 53 (11), pp. 645-653. DOI: 10.3131/jvsj2.53.645
70. Elango, M., Maciel, G.S., Palazzetti, F., Lombardi, A., Aquilanti, V. Quantum chemistry of C₃H₆O molecules: Structure and stability, isomerization pathways, and chirality changing mechanisms (2010) *Journal of Physical Chemistry A*, 114 (36), pp. 9864-9874. DOI: 10.1021/jp1034618
71. Che, D.-C., Palazzetti, F., Okuno, Y., Aquilanti, V., Kasai, T. Electrostatic hexapole state-selection of the asymmetric-top molecule propylene oxide (2010) *Journal of Physical Chemistry A*, 114 (9), pp. 3280-3286. DOI: 10.1021/jp909553t
72. Barreto, P.R.P., Palazzetti, F., Grossi, G., Lombardi, A., Maciel, G.S., Vilela, A.F.A. Range and strength of intermolecular forces for van der waals complexes of the type H₂X_n-Rg, with X = O, S and n=1, 2 (2010) *International Journal of Quantum Chemistry*, 110 (3), pp. 777-786. DOI: 10.1002/qua.22127
73. Barreto, P.R.P., Ribas, V.W., Palazzetti, F. Potential energy surface for the H₂O-H₂ system (2009) *Journal of Physical Chemistry A*, 113 (52), pp. 15047-15054. DOI: 10.1021/jp9051819

74. Lombardi, A., Palazzetti, F., Grossi, G., Aquilanti, V., Castro Palacio, J.C., Rubayo Soneira, J. "Hyperspherical and related views of the dynamics of nanoclusters" (2009) *Physica Scripta*, 80 (4), art. no. 048103. DOI: 10.1088/0031-949/80/04/048103
75. Maciel, G.S., Barreto, P.R.P., Palazzetti, F., Lombardi, A., Aquilanti, V. A quantum chemical study of H₂S₂: Intramolecular torsional mode and intermolecular interactions with rare gases (2008) *Journal of Chemical Physics*, 129 (16), art. no. 164302. DOI: 10.1063/1.2994732
76. Aquilanti, V., Grossi, G., Lombardi, A., Maciel, G.S., Palazzetti, F. "The origin of chiral discrimination: Supersonic molecular beam experiments and molecular dynamics simulations of collisional mechanisms" (2008) *Physica Scripta*, 78 (5), art. no. 058119. DOI: 10.1088/0031-8949/78/05/058119
77. Lombardi, A., Palazzetti, F. "A comparison of interatomic potentials for rare gas nanoaggregates" (2008) *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 852 (1-3), pp. 22-29. DOI: 10.1016/j.theochem.2007.12.011
78. BARRETO P. R. P, ALBERNAZ A. F, MACIEL G. S, F. PALAZZETTI, LOMBARDI A, GROSSI G (2008). Desenvolvimento de Superfícies de Energia Potencial para Sistemas de Cinco Corpos com Caráter Quiral. REVISTA PROCESSOS QUÍMICOS, vol. 2, p. 37-50, ISSN: 1981-8521
79. Barreto, P.R.P., Vilela, A.F.A., Lombardi, A., Maciel, G.S., Palazzetti, F., Aquilanti, V. "The hydrogen peroxide-rare gas systems: Quantum chemical calculations and hyperspherical harmonic representation of the potential energy surface for atom-floppy molecule interactions" (2007) *Journal of Physical Chemistry A*, 111 (49), pp. 12754-12762. DOI: 10.1021/jp076268v
80. Lombardi, A., Palazzetti, F., Peroncelli, L., Grossi, G., Aquilanti, V., Sevryuk, M.B. "Few-body quantum and many-body classical hyperspherical approaches to reactions and to cluster dynamics" (2007) *Theoretical Chemistry Accounts*, 117 (5-6), pp. 709-721. DOI: 10.1007/s00214-006-0195-0

09-09-20

COMUNICAZIONI ORALI SU INVITO

1. "Interactions of propylene oxide with rare-gas atoms: representation and characterization of potential energy surfaces" in XXIV Quantum Systems in Physics Chemistry and Biology (QSCP), Odessa (Ucraina) 18-24 agosto 2019.
1. "Statistics of energy partitions for many-particle systems" in STATISTICAL THERMODYNAMICS AND CHEMICAL KINETICS: FAR AWAY FROM EQUILIBRIUM, Accademia Nazionale dei Lincei, Roma, 25-26 giugno 2019.
2. "Telling Left from Right: Molecular Orientation in the Stereodynamical Selection of Chirality" in XXIII Quantum Systems in Physics Chemistry and Biology (QSCP), Mopani Camp, Kruger Park (South Africa) 22-29 September 2018.
3. "Ab-initio activation energy in Boudouard reaction" HYPERSONIC METEOROID ENTRY PHYSICS - 61st Course of the International School of Quantum Electronics. Erice. Dal 03-10-2017 al 08-10-2017

4. Plenary lecture at II Symposium on Theoretical and Structural Chemistry SQTEA, Anapolis (Goias – Brazil) 16-18 May 2017.
5. "The astrochemical observatory and the search for chirality" in: "Molecole nel mondo dei quanti: dagli orbitali alle reti di spin - The quantum world of molecules: from orbitals to spin networks". Fondazione "G. Donegani" Accademia Nazionale dei Lincei Roma 27-28 aprile 2017.
6. VI Seedmol. Simposio de Estrutura Eletronica e Dinamica Molecular. Alto Paraiso, Goias, Brasile. Titolo della presentazione: "Stereodynamical Selection of Chirality in Aligned and Oriented Molecular Beams". Dal 19-09-2016 al 23-09-2016
7. International Workshop: Mirror Images in Molecules: High Resolution Spectroscopy Features. Dipartimento di Chimica "Ciamician" Università degli Studi di Bologna. Dal 27-05-2016 al 28-05-2016
8. ICCMSE 2016, 12TH INTERNATIONAL CONFERENCE OF COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCES AND ENGINEERING. Atene, Grecia. Titolo: "Spherical and hyperspherical – harmonics representation of van der Waals aggregates". Dal 17-03-2016 al 20-03-2016
9. International Workshop 2008 on Molecular Dynamics and Symmetry - Part 2. Shiomi Memorial Lecture Room - Osaka University Graduate School of Science - Osaka (Japan). Comunicazione orale: "Floppy molecules - Rare gas systems: role for the dynamics of chirality changing collisions". 1 novembre 2008

COMUNICAZIONI ORALI SU CONTRIBUTO

10. "IL CAMMINO DI UN MAESTRO E DEI SUOI ALLIEVI: VINCENZO CAGLIOTI E LA CHIMICA A ROMA NEL NOVECENTO" in XVIII CONVEGNO NAZIONALE di STORIA e FONDAMENTI della CHIMICA Roma, 8-10 Ottobre 2019 Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL, Biblioteca, Scuderie Vecchie di Villa Torlonia, Via Lazzaro Spallanzani, 7 Roma.
11. "Interactions of Propylene Oxide with Rare-Gas Atoms: Representation and Characterization of Potential Energy Surfaces" in 12th EUROPEAN CONFERENCE ON COMPUTATIONAL THEORETICAL CHEMISTRY PERUGIA, 1-5 SETTEMBRE 2019.
12. "The project orXid, ORigin of CHiral Discrimination: A physico-chemical view" in "The astrochemical observatory: focus on chiral molecules L'osservatorio astrochimico: obiettivo sulle molecole chirali" Biblioteca dell'Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL Scuderie Vecchie di Villa Torlonia - Via L. Spallanzani, 1/A Roma 22-23 marzo 2018.
13. "Alignment and orientation in the stereodirected photodissociation dynamics of chiral molecules". ICCMSE 2018, 14TH INTERNATIONAL CONFERENCE OF COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCES AND ENGINEERING. Salonicco, Grecia. Dal 14-03-2018 al 18-03-2018
14. "Stereodynamics of Photodissociation Dynamics of Oriented Chiral Molecules" in Photochemistry Meeting 2017 Sala dei Notari, Palazzo dei Priori - Perugia, 14-16 dicembre.
15. "Screens for Displaying Chirality Changing Mechanisms of a Series of Peroxides and Persulfides from Conformational Structures Computed by Quantum Chemistry" in 17° International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2017) "Workshop on Quantum Mechanics: Computational Strategies and Applications" Università di Trieste. Dal 03-07-2017 al 06-07-2017.
16. PALAZZETTI F. 2017 "Molecular alignment and orientation in the stereodynamical selection of chirality" in ICCMSE 2017, 13TH INTERNATIONAL CONFERENCE OF COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCES AND ENGINEERING. Salonicco, Grecia. Dal 22-04-2017 al 25-04-2017
17. PALAZZETTI F. 2016 "Molecular and roaming mechanisms in the photodecomposition of methyl formate" in Stereodynamics 2016. Dr. Poe Lecture Hall, Institute of Atomic and Molecular Sciences Academia Sinica, Taipei, Taiwan. Dal 06-11-2016 al 11-11-2016
18. PALAZZETTI F. 2016 "Molecular orientation in supersonic beams and stereodynamical selection of chirality" in Workshop CECAM "Molecular chirality from a physical and theoretical chemistry perspective". Dal 10-10-2016 al 12-10-2016
19. PALAZZETTI F (2016) Chirality - Monastero dei Benedettini – Coro di notte - Università di Catania Piazza Dante 32 - Catania. (In allegato il programma del convegno). Dal 03-09-2016 al 05-09-2016

09-09-20

20. PALAZZETTI F (2012). Stereodynamics of chirality: a key in the evolution of life. In: CECAM 2012 - Theoretical and Computational Astrochemistry. Pisa - Italia, 30 agosto - 1 settembre
21. PALAZZETTI F, MACIEL GS, LOMBARDI A, GROSSI G, AQUILANTI V (2012). Chiral effects in oriented molecules collisions: investigating the origin of the building blocks of life. In: IV Workshop of Italian Astrobiological Society. Perugia - Italia, 19-21 settembre
22. D. -C. CHE, K. KANDA, T. KASAI, PALAZZETTI F, V. AQUILANTI (2011). Utilizzo di campi elettrici esapolari per la selezione di stati rotazionali e l'orientazione di molecole "asymmetric-top". In: TUMA 2011 - XXX Convegno Interregionale delle Sezioni Toscana Umbria Marche Abruzzo della Società Chimica Italiana. Università degli Studi di Perugia - Perugia, 30 giugno - 1 luglio
23. PALAZZETTI F (2011). Spherical and Hyperspherical Harmonics in the Representation of Potential Energy Surfaces. In: Spin Networks in Atomic and Molecular Physics, Quantum Chemistry and Quantum Computing. CECAM-ETHZ, Zurigo, Svizzera, 27-29 giugno
24. MACIEL G.S, F. PALAZZETTI, LOMBARDI A, AQUILANTI V (2008). Interazione di H₂S₂ con i gas nobili. In: XXVII Congresso Interregionale - Toscana Umbria Marche Abruzzo (TUMA). L'Aquila- Basilica di Collemaggio, 23-25 Giugno 2008

ORGANIZZAZIONE DI CONVEGNI

1. Membro del comitato organizzatore e scientifico del convegno "Observatory for Astrochemical Kinetics and related aspects" Biblioteca dell'Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL Scuderie Vecchie di Villa Torlonia - Via L. Spallanzani, 1/A Roma 27-28 giugno 2019.
2. Membro del comitato organizzatore e scientifico del convegno "The astrochemical observatory: focus on chiral molecules. L'osservatorio astrochimico: obiettivo sulle molecole chirali" Biblioteca dell'Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL Scuderie Vecchie di Villa Torlonia - Via L. Spallanzani, 1/A Roma 22-23 marzo 2018.
3. Membro del comitato ordinatore del convegno: "Molecole nel mondo dei quanti: dagli orbitali alle reti di spin - The quantum world of molecules: from orbitals to spin networks". Fondazione "G. Donagani" Accademia Nazionale dei Lincei Roma 27-28 aprile 2017.
4. XIV INTERNATIONAL WORKSHOP ON QUANTUM REACTIVE SCATTERING. Università degli Studi di Trieste, Trieste. Dal 03-07-2017 al 06-07-2017.
5. WORKSHOP CECAM "Molecular chirality from a physical and theoretical chemistry perspective", EPFL-Losanna (Svizzera), 10-12 october 2016. (Finanziamento assegnato in seguito a revisione tra pari: 12000 CHF).
6. Organizzazione. 16° International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2016) "Quantum Mechanics: Computational Strategies and Application" Pechino (Cina). Dal 04-07-2016 al 07-07-2016

09-09-20

CHAIRMAN DI SESSIONE

1. In XXIV Quantum Systems in Physics Chemistry and Biology (QSCP), Odessa (Ucraina) 18-24 agosto 2019.
2. In XXIII Quantum Systems in Physics Chemistry and Biology (QSCP), Mopani Camp, Kruger Park (South Africa) 22-29 September 2018.

3. In "The astrochemical observatory: focus on chiral molecules L'osservatorio astrochimico: obiettivo sulle molecole chirali" Biblioteca dell'Accademia Nazionale delle Scienze detta dei XL Scuderie Vecchie di Villa Torlonia - Via L. Spallanzani, 1/A Roma 22-23 marzo 2018.
4. In ICCMSE 2018, 14TH INTERNATIONAL CONFERENCE OF COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCES AND ENGINEERING. Salonicco, Grecia. Dal 14-03-2018 al 18-03-2018
5. In 17° International Conference on Computational Science and Its Applications (ICCSA 2017) "Workshop on Quantum Mechanics: Computational Strategies and Applications " Università di Trieste. Dal 03-07-2017 al 06-07-2017.
6. XIV INTERNATIONAL WORKSHOP ON QUANTUM REACTIVE SCATTERING. Università degli Studi di Trieste, Trieste. Dal 03-07-2017 al 06-07-2017.
7. PALAZZETTI F. 2017 "Molecular alignment and orientation in the stereodynamical selection of chirality" in ICCMSE 2017, 13TH INTERNATIONAL CONFERENCE OF COMPUTATIONAL METHODS IN SCIENCES AND ENGINEERING. Salonicco, Grecia. Dal 22-04-2017 al 25-04-2017
8. PALAZZETTI F. 2016 "Molecular orientation in supersonic beams and stereodynamical selection of chirality" in Workshop CECAM "Molecular chirality from a physical and theoretical chemistry perspective". Dal 10-10-2016 al 12-10-2016

POSTER

1. CAGLIOTI C., PALAZZETTI F., FIORETTI B. "Preliminar characterization of peptides in toxins from venom of *Euscorpis italicus*" European Biotechnology Congress 2020. Praga, Repubblica Ceca, 24-26 settembre 2020. ACCETTATO. Ancora da stabilire se è per un poster o una comunicazione orale
2. CAGLIOTI C., PALAZZETTI F., RONDONI G., CONTI E. "Relevance of the four-bar linkage model for describing the foraging behavior of entomophagous insects" in 6th International Entomophagous Insects Conference. Perugia, 9-13 settembre 2019.
3. "TETRAHEDRA TO COMPACT AND CLASSIFY MOLECULAR PROPERTIES: THE CASE OF POLYPEPTIDES" in 12th EUROPEAN CONFERENCE ON COMPUTATIONAL THEORETICAL CHEMISTRY PERUGIA, 1-5 SETTEMBRE 2019.
4. PALAZZETTI F. "An Integrated Search of Stereodynamical Mechanisms on the Origin of Chiral Discrimination" in Stereodynamics 2016. Dr. Poe Lecture Hall, Institute of Atomic and Molecular Sciences Academia Sinica, Taipei, Taiwan. Dal 06-11-2016 al 11-11-2016
5. 8th Photodynamics, Oaxaca (Messico): 2 poster. "Theoretical tools for the computation of spectroscopic properties of transition metal complexes: the case of metallocenes" e "Molecular orientation: a prerequisite for enantioselective photodissociation processes" Dal 27-10-2014 al 31-10-2014.
6. Barreto P R P, Albernaz A F, Palazzetti F, Cavalli S, Lombardi A, Maciel G S (2014). Chirality change in collisions: A hyperspherical approach. In: Stereodynamics 2014. p. 59, San Pietroburgo - Russia, 17 - 22 agosto
7. BARRETO PRP, ALBERNAZ AF, PALAZZETTI F, LOMBARDI A, GROSSI G, AQUILANTI V (2012). Hyperspherical harmonics representation of binary interactions H₂O – H₂, N₂, and O₂. A minimal model for the H₂O – rare-gas-atom systems.. In: European Conference on the Dynamics of Molecular Systems – MOLEC 2012. Oxford - Regno Unito, 9-14 settembre

8. F: Palazzetti, G. S. Maciel, A. Lombardi, G. Grossi, V. Aquilanti (2012). Experiments and theory on the stereodynamical manifestations of molecular chirality. In: 7th International Meeting on Photodynamics and Related Aspects.
9. MACIEL GS, PALAZZETTI F, GROSSI G, AQUILANTI V (2012). Conformers analysis and selection in seeded supersonic molecular beams of 2-butanol. In: XXXVIII Congresso de Químicos Teóricos de Expressão Latina. Natal - Brasile, 3 - 6 dicembre
10. PALAZZETTI F (2012). Experiments and theory in the stereodynamics of the chiral molecule 2-butanol. In: Understanding chemical reactivity: from modeling to experiments – Quantum Days in Bilbao 2012. Bilbao - Spagna, 23-24 luglio
11. PALAZZETTI F, MACIEL GS, LOMBARDI A, GROSSI G, AQUILANTI V (2012) (2012). Molecules at the mirror – Stereodynamics of chirality. In: IV Seedmol . Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular. Pirenópolis - Brasile, 24-28 settembre
12. PALAZZETTI F, MACIEL GS, LOMBARDI A, GROSSI G, AQUILANTI V (2012). Experiments and theory in the stereodynamical manifestations. In: 7th International Meeting on Photodynamics and Related Aspects. Maresias - Brasile, 14 - 20 ottobre
13. PALAZZETTI F, MACIEL GS, LOMBARDI A, GROSSI G, AQUILANTI V (2012). Molecular Stereodynamics of Chirality: experiments and theory. In: Molecular Reaction Dynamics in Gases, Liquids and Interfaces: Faraday Discussion 157. Assisi - Perugia (Italia), 25-27 giugno
14. D. -C. CHE, K. KANDA, M. NAKAMURA, T. KASAI, PALAZZETTI F (2011). Orientation of chiral molecules through hexapolar electric fields: propylene oxide and 2-butanol. In: XXIV International Symposium on Molecular Beams. università Brodeaux 1, Talence, Bordeaux - Francia, 23-26 maggio
15. BARRETO P. R. P, V. W. RIBAS, PALAZZETTI F (2010). Potential Energy Surface for H₂O?X₂ systems with X = H, O, N. In: Book of Abstract - Molec 2010. Curia-Anadia (Portogallo), 5-10 settembre 2010
16. KANDA K, CHE D.-C, PALAZZETTI F, KASAI T, AQUILANTI V (2010). Trajectory simulations of asymmetric-top molecules in hexapolar electric fields and state-selection. In: Annual Meeting of Japan Society for Molecular Science 2010. Toyonaka Campus, Osaka University - Osaka (Giappone), 14-17 settembre 2010
17. KANDA K, PALAZZETTI F, CHE D.-C-, AQUILANTI V, KASAI T (2010). Orientation of the chiral molecule propylene oxide by electrostatic hexapole rotational state-selection. In: STEREODYNAMICS 2010. Santa Cruz, California, USA, 28 novembre - 3 dicembre 2010

18. LOMBARDI A, AQUILANTI V, PALAZZETTI F, MACIEL G.S (2010). Stereodynamical Origin of Chiral Discrimination. In: STEREODYNAMICS 2010. Santa Cruz, California - USA, 28 novembre - 3 dicembre 2010
19. Aquilanti V., Cappelletti D., Roncaratti L.F., Pirani F., Barreto P., Palazzetti F., Maciel G.S. (2009). Molecular beam scattering as a tool for measurement of anisotropies of intermolecular forces and weak chemical bonds . In: "ISMB 2009" XXIII International Symposium on Molecular Beams. p. 19-20, Dalian, China, 1 -5 June 2009
20. BARRETO P.R.P, RIBAS V.W, PALAZZETTI F, V. AQUILANTI (2009). Potential Energy Surface for H₂O X₂, with X=H,N and O, System. In: Quantum Systems in Chemistry and Physics. In: Quantum Systems in Chemistry and Physics. SAN LORENZO DE EL ESCORIAL:-, San Lorenzo de El Escorial, Madrid (Spain), 13- 19 September (2009)
21. Palazzetti F., Che D. C., Okuno Y., Aquilanti V., Kasai T. (2009). State-selected and aligned beams of the chiral asymmetric top propylene oxide molecule using a hexapole electrostatic field . In: ISMB 2009 "XXIII International Symposium on Molecular Beams". Dalian (Cina), 1 -5 June 2009
22. RIBAS V.W, BARRETO P.R.P, PALAZZETTI F, AQUILANTI V. (2009). Potential Energy Surface for H₂O-H₂ dimer . In: 13th International Conference on the Application of the Density Functional Theory in Chemistry and Physics DFT09. p. 88, LIONE:-, Lione, Francia, 31 Agosto - 4 Settembre 2009
23. VINCENZO AQUILANTI, DAVID CAPPELLETTI, LUIZ F. RONCARATTI, FERNANDO PIRANI, F. PALAZZETTI, GLAUCIETE S. MACIEL, G. GROSSI (2009). ANISOTROPIES OF INTERMOLECULAR FORCES AND WEAK CHEMICAL BONDS BY MOLECULAR BEAMS. In: IBER 2009 - 10th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics. p. 24, Santiago de Compostela- Spagna, 12-15 luglio 2009
24. AQUILANTI, Vincenzo, GROSSI, Gaia, LOMBARDI, Andrea, MACIEL GLAUCIETE S, PALAZZETTI, FEDERICO (2008). Origin of Chiral Discrimination: Supersonic Molecular Beam Experiments and Molecular Dynamics Simulations of Collisional Mechanisms. In: "Chitel 08".
25. BARRETO P.R.P, VILELLA A.F.A, PALAZZETTI FEDERICO, LOMBARDI ANDREA, MACIEL GLAUCIETE S, V. AQUILANTI (2008). "H₂S₂ Interaction with rare gases. In molec 2008 - XVII European Conference on Dynamics of Molecular Systems, 2008". In: MOLEC XVIII European Conference on Dynamics of Molecular Systems. Coimbra, Portogallo, 5-10 Settembre 2010
26. F. Palazzetti, V. Aquilanti, A. Lombardi, G. Maciel, P. Barreto (2008). Sterodynamics of chiral discrimination: Orientation in molecular beams and molecular dynamics simulations of collisional mechanisms. In: Stereodynamics 2008 - The 12th International Symposium of Stereodynamics of Chemical Reactions. Dalian - Cina, 13-18 Ottobre 2008

- 09-09-06
27. MACIEL, GLAUCIETE SARMENTO, PALAZZETTI, FEDERICO, LOMBARDI, Andrea, GROSSI, Gaia, AQUILANTI, Vincenzo (2008). Origin of chiral discrimination: supersonic molecular beam experiments and molecular dynamics simulations of collisional mechanisms. In: 1st Italian Astrobiology Society Workshop. Cortona, Italy, 29-30 maggio 2008
 28. P. R. P. Barreto, A. F. A. Vilela, F. Palazzetti, A. Lombardi, G. S. Maciel (2008). H₂S₂ Interactions with rare gases. In: Molec-2008: XVII European Conference on Dynamics of Molecular Systems. p. 115, St. Petersburg, Russia, 23-28 agosto 2008
 29. PALAZZETTI F, AQUILANTI V, LOMBARDI A, MACIEL GLAUCIETE S, BARRETO P.R.P (2008). Collisional origin of chiral discrimination: orientation in molecular beams and molecular dynamics simulations. In: MOLEC XVII 2008 European Conference on Dynamics of Molecular Systems. p. 116, St. Pietroburgo (Russia), 23-29 Agosto 2008
 30. PALAZZETTI F, LOMBARDI A, BARRETO P. R. P, MACIEL G. S, AQUILANTI V (2008). Trattazione classica delle collisioni con cambiamento di chiralita': interazioni tra H₂S₂ e gas nobili. In: Chitel 08. Cetraro (Cosenza), 3-8 luglio
 31. P. Barreto, A. Vilela, A. Lombardi, G. Maciel, F. Palazzetti, V. Aquilanti (2007). Hyperspherical harmonic representation in the atom-floppy molecule systems. . In: Molecular and Nanodynamics from Atoms to Biomolecules. A symposium in honour of Professor Anna Giardini.. Roma, Università La Sapienza, 12-13 Ottobre 2007
 32. P. Barreto, Vilela P., A. Lombardi, G. Maciel, F. Palazzetti, V. Aquilanti (2007). Forze intermolecolari di interesse per la dinamica delle collisioni con cambiamento di chiralità: sistemi Acqua Ossigenata- gas nobili. In: XXXIII Congresso De Quimicos Teoricos de Expresion Latina. La Habana (Cuba), 17-21 Settembre 2007
 33. Palazzetti F., Lombardi A., Barreto P., Vilela A., Maciel G.S., Aquilanti V. (2007). Van der Waal Interactions of H₂O₂ with rare gases: role for the dynamics of chirality changing collisions. In: Quantum Systems in Chemistry and Physics XII. Royal Holloway, University of London, UK, 30 Agosto-5 Settembre 2007
 34. Barreto P., Vilela A., A. Lombardi, G. Maciel, F. Palazzetti, V. Aquilanti (2007). Interazioni intermolecolari dell'acqua ossigenata. In: XVI Convegno Interregionale Toscana, Umbria, Marche, Abruzzo (TUMA). Assisi, Italia, 26-28 Settembre 2007
 35. LOMBARDI A, AQUILANTI V, F. PALAZZETTI, M. B. SEVRYUK, F. CALVO, F. X. GADEA, YURTSEVER E. (2006). Internal dynamics and heat capacities of neutral and ionic clusters: hyperspherical analysis and invariant energy partitions.. In: MOLEC XVI European Conference on Dynamics of Molecular Systems. p. 195-196, Levico Terme (Trento), 11-15 September 2006

36. A. Lombardi, V. Aquilanti, F. Palazzetti, M. B. Sevryuk (2006). Dinamica e termodinamica delle transizioni di fase di nanoaggregati: partizioni ipersferiche dell'energia. In: La XXXIeme Congrès Des Chemistes Théoriciens d'Expression Latine. Cotes de Carthage, Tunisie, 1-6 settembre 2006

Il sottoscritto FEDERICO PALAZZETTI, dichiara che tutti i fatti riportati nel presente curriculum corrispondono a verità ai sensi e per gli effetti degli artt. 46 e 47 del D.P.R. 445/2000.

Il sottoscritto dichiara di essere a conoscenza delle sanzioni penali cui incorre in caso di dichiarazione mendace o contenente dati non più rispondenti a verità, come previsto dall'art. 76 del D.P.R. 28.12.2000, n. 445.

Il sottoscritto dichiara di essere a conoscenza dell'art. 75 del D.P.R. 28.12.2000, n. 445, relativo alla decadenza dai benefici eventualmente conseguenti al provvedimento emanato, qualora l'Amministrazione, a seguito di controllo, riscontri la non veridicità del contenuto della suddetta dichiarazione.

Si allega a tale scopo copia del documento di identità in corso di validità

Perugia, 09-09-2020
(luogo e data)

Firma ¹