

Curriculum di Mauro Prencipe

Mauro Prencipe si è laureato in chimica (a indirizzo teorico), presso l'Università di Torino il 8/3/1991, con una tesi dal titolo *Studio ab initio Hartree Fock delle proprietà strutturali ed elastiche degli alogenuri alcalini*. Dalla tesi scaturì una pubblicazione [1] che costituisce il primo lavoro in assoluto riguardante l'applicazione del metodo Hartree-Fock a strutture periodiche eminentemente ioniche. In effetti quel lavoro costituisce ancora oggi il riferimento per chiunque si occupi di metodologie computazionali *ab initio* per strutture cristalline ioniche, come anche dimostra il numero di citazioni ricevute (ad oggi: 99).

Negli anni seguenti, non ancora ricercatore, ha prestato servizio presso il Dipartimento di Scienze Mineralogiche e Petrologiche dell'Università di Torino, sotto la guida del prof. Giovanni Ferraris, ed ha vinto nel 1995 un concorso per un posto da Ricercatore a tempo indeterminato presso lo stesso Dipartimento (che ha in seguito cambiato denominazione in Dipartimento di Scienze della Terra).

Ha ricevuto l'abilitazione al ruolo di Professore Associato e vinto un concorso per lo stesso ruolo, che ricopre dal novembre 2015 presso il dip. Di Scienze della Terra dell'Università di Torino.

Attività scientifica

L'attività scientifica nel decennio 1992-2002, si è prevalentemente concentrata su ricerche sperimentali in campo mineralogico/cristallografico usando tecniche diffrattometriche a raggi X e neutroni anche in condizioni non ambientali (alta temperatura o alta pressione). Le tematiche affrontate coprivano (i) lo studio fenomeni di ordinamento/disordinamento nei minerali; (ii) lo studio di transizioni di fase; (iii) la caratterizzazione strutturale di minerali contenenti idrogeno; (iv) la caratterizzazione strutturale di nuovi minerali; (v) l'evoluzione strutturale di minerali al variare della pressione o della temperatura.

Impadronitosi delle principali tecniche sperimentali di tipo diffrattometrico e di microscopia elettronica, e fatti propri i concetti e i riferimenti culturali alla base delle interpretazioni delle proprietà strutturali dei minerali, o dei materiali cristallini in generale, è poi tornato a occuparsi di metodiche computazionali che costituiscono una parte fondamentale della propria formazione di base ricevuta negli anni della laurea. In particolare, il chiaro intento è stato (ed è attualmente) quello di trasferire in campo mineralogico idee e concetti, potenti ed efficaci, già sviluppati e consolidati in altri ambiti, *in primis* quello chimico-molecolare. In effetti, la distanza tra il *mondo chimico* in senso lato, e quello mineralogico (*cristallochimico* più in particolare) è attualmente significativamente grande; si ravvisa una differenza di linguaggio e la conseguente mancanza di comunicabilità tra i due mondi, che si manifesta ad esempio con la deleteria scarsità di interazioni e collaborazioni tra scienziati appartenenti ai due diversi ambiti. Le ragioni di questa incomunicabilità vanno ricercate nell'evoluzione che la chimica ha avuto negli anni (più o meno a partire dagli anni '50 del secolo scorso), con l'introduzione sistematica del calcolo teorico nella risoluzione di problemi di carattere strutturale, termodinamico e cinetico in ambito molecolare: a parte il contributo *pratico* alla risoluzione di problemi, il calcolo ha portato con sé tutti i concetti di provenienza chimico-quantistica nell'interpretazione delle fenomenologia chimica. Per contro, in campo mineralogico si è rimasti legati a concetti essenzialmente *classici* (nel senso di *non quantistici*) codificati nella forma di *regole* (ad esempio le *regole di Pauling* e loro evoluzioni), che trattano gli atomi come sfere rigide dotate di carica, trascurando le specificità delle interazioni legate alla vera natura del legame chimico, natura che può essere propriamente trattata adeguatamente solo in un contesto formale quantistico. Le ragioni di questa diversità di approccio

tra i due campi sono storiche e complesse, e vanno in parte ricondotte all'impossibilità pratica di applicare le metodiche computazionali *ab initio* in campo solidistico, fino ad anni relativamente recenti, almeno per strutture così complesse come sono quelle della maggior parte di minerali. Tuttavia, la molto aumentata disponibilità di risorse computazioni veloci e a costo relativamente basso ha permesso, già a partire dagli anni 2000, l'applicazione di dette metodiche anche in casi strutturalmente e chimicamente complessi, consentendo così la riduzione del divario osservato, e l'introduzione in campo mineralogico di concetti e idee propri della chimica più avanzata. A questo riguardo, le prime ricerche di Mauro Prencipe, a partire dal 2002, si sono concentrate sullo studio della densità elettronica, e le sue implicazioni in cristallografia, attraverso l'applicazione dell'analisi topologica di Bader e della teoria soggiacente (Quantum Theory of Atoms in Molecules and Crystals: QTAIMC). I principali risultati ottenuti da questo tipo di indagini riguardano la caratterizzazione e la classificazione del legame chimico nelle strutture cristalline [2-3], nonché il ruolo del medesimo nel determinare struttura, proprietà e loro evoluzione in condizioni *non ambientali* (principalmente alta pressione; [4]). Contestualmente ha contribuito allo sviluppo e alla determinazione dei migliori modelli, e dei relativi parametri computazionali, per il calcolo di specifiche proprietà delle sostanze cristalline (si veda come esempio particolare il lavoro [5]).

Parallelamente, dato l'utilizzo sempre più esteso delle tecniche spettroscopiche vibrazionali in ambito mineralogico (spettroscopie infrarosse e Raman in particolare), ha lavorato (e ancora attualmente lavora) nel campo del calcolo *ab initio* delle proprietà vibrazionali, che è utile e importante per una corretta identificazione delle frequenze fondamentali negli spettri sperimentali, nonché per la loro assegnazione a *modi normali* specifici [6-11,30].

Il calcolo molto accurato delle frequenze vibrazionali (in particolare, le Hamiltoniane scelte e la calibrazione di tutti gli altri molteplici parametri computazionali, hanno portato a discrepanze medie tra frequenze calcolate e osservate che sono inferiori ai 5 cm^{-1}), e delle loro variazioni con il volume di cella, ha aperto la strada per la simulazione delle proprietà elastiche dei minerali anche in condizioni di alta temperatura, utilizzando i risultati quanto-meccanici (frequenze vibrazionali e loro dipendenza dal volume di cella) all'interno di un formalismo meccanico-statistico, e muovendosi all'interno dell'approssimazione quasi-armonica. L'*algoritmica* messa a punto e discussa in un primo lavoro sulle proprietà termo-elastiche del berillo [12], è stata poi applicata con successo a un certo numero di altre fasi, alcune delle quali importanti per la modellistica della struttura e della dinamica del mantello terrestre [13-17].

In aggiunta al calcolo delle termo-proprietà elastiche, i modelli così raffinati consentono anche: (i) il calcolo delle principali grandezze termodinamiche delle fasi investigate [13-18]; (ii) di sviluppare modelli per soluzioni solide e/o fenomeni di disordinamento [15, 16, 18]; (iii) di proporre modelli esplicativi delle *vere* ragioni dell'espansione termica nei solidi, e alternativi ai modelli correnti, che sono spesso solo di tipo qualitativo, o possono essere addirittura errati [12]. Le tecniche computazionali calibrate per lo studio dei minerali, possono poi essere trasferite in altri settori di interesse tecnologico [19].

Mauro Prencipe ha altresì contribuito alla nascita e allo sviluppo (ormai pieno e maturo) del gruppo che in Dipartimento si occupa del calcolo *ab initio* delle proprietà delle superfici di minerali, per applicazioni nel campo della crescita cristallina, e per lo studio delle interazioni tra fasi solide diverse (o anche per lo studio dei fenomeni di geminazione), tra fasi solide e liquide, o solide e vapore. Tra le pubblicazioni più significative in questo campo, si annovera la prima [20] che ha segnato l'inizio di questa attività sulle superfici, nonché altre che discutono in modo innovativo della termodinamica delle superfici e applicano le metodiche a problematiche diverse concernenti la stabilità di forme [21-29].

E' autore di 57 pubblicazioni su riviste scientifiche internazionali, di cui 34 di stampo computazionale, e di innumerevoli comunicazioni a Congressi, sia nazionali, sia internazionali. Attualmente ha un h-factor pari a 17.

In qualità di referee, collabora con continuità con le riviste *American Mineralogist*; *Physics and Chemistry of Minerals*; *Journal of Raman Spectroscopy*. Collaborazioni sporadiche, sempre in qualità di referee, ci sono anche con *Journal of Chemical Physics*; *Journal of Physical Chemistry*; *Lithos*; *Science*.

Partecipazione in qualità di relatore a Scuole in ambito Mineralogico:

- 1) Ha organizzato e tenuto un corso nell'ambito dello *Short Course SC9: Tecniche Computazionali Ab Initio nella Risoluzione di Problemi di Interesse Mineralogico*. Geolitalia 2009, Rimini 7-8/9/2009.
- 2) Ha tenuto una lezione dal titolo *Approccio Computazionale alla nanomineralogia*, nell'ambito della Scuola GNM *Proprietà ed applicazioni dei minerali alla nanoscala*. Otranto (Le) 14-18/6/2004.

Partecipazione a progetti finanziati

Nel corso degli anni ha partecipato a 6 progetti di ricerca a livello nazionale (PRIN):

- 1) Ordine, disordine e transizioni di fase nei feldspati e nei minerali a strati
- 2) Evoluzione strutturale in funzione di chimismo, temperatura e pressione di silicati
- 3) Ordinamenti e transizioni di fase in feldspati e pirosseni
- 4) Transizioni di fase e ordinamenti in feldspati e pirosseni 24
- 5) Transizioni di fase nei feldspati indotte da variazioni di pressione e/o temperatura e modellizzazioni quanto-meccaniche
- 6) Dalle materie prime del sistema Terra alle applicazioni tecnologiche: studi cristallografici e strutturali

E' attualmente anche attivo come collaboratore del progetto europeo INDIMEDEA, Erc starting grant 307322 per lo studio delle inclusioni nei diamanti (<http://www.indimedea.eu/home.htm>). Con riferimento a tale progetto sono state già prodotte le pubblicazioni [17, 28, 29].

Dottorati di ricerca

Il numero complessivo di tesi di Dottorato di ricerca (in sede o fuori sede) seguite e concluse ad oggi è pari a 5. Precisamente:

- 1) Georgeta Ungureanu: *Ab initio modelling of Mechanical, Thermo - Elastic and Thermodynamic properties of Calcium Carbonates Polymorphs*; Università di Torino; anno conseguimento del titolo 2011; ruolo tutore.
- 2) Roman Belousov: *Ab initio quantum-mechanical simulation of earth minerals at extreme conditions of temperature and pressure*; Università di Torino; anno 2012; ruolo tutore.
- 3) Azzurra Zucchini: *Dolomite stability as a function of P, T, pCO₂ and cation ordering. Applications to natural processes*; Università di Perugia; anno 2012; ruolo: in co-tutoraggio con la prof.ssa Paola Comodi

- 4) Isacco Scanavino: *Quantum-mechanical modeling and study of the elastic and structural properties of mineral phases of geological interest*; Università di Torino; anno 2013; ruolo tutore.
- 5) Donato Belmonte: *Ab initio thermodynamics of deep mantle minerals: the system MgO-SiO₂*; Università di Genova, anno 2013; ruolo: in co-tutoraggio con il prof. Giulio Ottonello.

Sta attualmente seguendo in qualità di co-tutore la dott.ssa Claudia Stangarone nel suo Dottorato di ricerca che, tra le altre cose, riguarda la simulazione di spettri IR e Raman di pirosseni (Università di Parma; tutore: prof. Mario Tribaudino).

Attività didattica

Dal 1995 ad oggi, Mauro Prencipe ha tenuto corsi di:

Cristallografia e Complementi di Cristallografia per (i) diploma *Campus* in Scienza dei Materiali; (ii) Corso di Laurea Magistrale in Matematica.

Laboratorio di Fisica dello Stato Solido per il corso di Laurea triennale in Scienza dei Materiali.

Microscopia Elettronica: tecniche di interpretazione di immagine per il corso di Laurea Magistrale in Scienza dei materiali.

Cristallochimica Mineralogica per il corso di Laurea Magistrale in Scienze Geologiche.

Proprietà Chimico Fisiche dei Minerali per il corso di Laurea Magistrale in Scienze Geologiche

Geochimica per il corso di Laurea triennale in Scienze Geologiche

Ha anche tenuto corsi nell'ambito della didattica di terzo livello (dottorato); l'ultimo essendo il corso di **Proprietà termo-elastiche di minerali e loro ruolo nelle modellizzazioni geodinamiche del mantello terrestre**, tenuto in lingua inglese, e attivato nel 2014 e nel 2015, per il Dottorato in Scienze della Terra, della Scuola di Dottorato in Scienze della Natura e Tecnologia Innovative, Università di Torino.

Per la didattica del corso di Cristallografia per il corso di Laurea Magistrale in Matematica, ha direttamente provveduto alla scrittura e pubblicazione del **libro di testo**:

Prencipe Mauro (2012) *Elementi di Cristallografia Geometrica*. Ed. Levrotto & Bella, Torino; ISBN: 9788882181659, p. 1-143.

Tesi di Laurea del quale è stato relatore:

- 1) Roman Belousov (2008): *Quantum mechanical ab initio study of the effect of vacancies on the compressibility of spinel (MgAl₂O₄)*. Università di Torino; MaMaSELF Program (Scienza dei Materiali).

- 2) Isacco Scanavino (2009): *Approccio quanto-meccanico al calcolo delle proprietà termo-elastiche dei minerali: compressibilità ed espansione termica del minerale berillo*. Università di Torino, Corso di Laurea Magistrale in Scienze Geologiche.

Bibliografia citata nella sezione scientifica del presente curriculum:

- [1] Prencipe M., Zupan A., Dovesi R., Aprà E., V.R. Saunders (1995) Ab initio study of the structural properties of LiF, NaF, KF, LiCl, NaCl and KCl. *Physical Review B*, 51, 3391-3396.
- [2] Prencipe M. (2002). Ab initio Hartree-Fock study and charge density analysis of beryl ($\text{Al}_4\text{Be}_6\text{Si}_{12}\text{O}_{36}$). *Physics and Chemistry of Minerals*, 29(8), 552–561.
- [3] Prencipe M., Tribaudino M., Nestola F. (2003). Charge-density analysis of spodumene ($\text{LiAlSi}_2\text{O}_6$), from ab initio Hartree-Fock calculations. *Physics and Chemistry of Minerals*, 30, 606–614.
- [4] Prencipe M., Nestola F. (2006). Minerals at high pressure. Mechanics of compression from quantum mechanical calculations in a case study: the beryl ($\text{Al}_4\text{Be}_6\text{Si}_{12}\text{O}_{36}$). *Physics and Chemistry of Minerals*, 34, 37–52.
- [5] Prencipe M., Nestola F. (2005). Quantum-mechanical modeling of minerals at high pressures. The role of the Hamiltonian in a case study: the beryl ($\text{Al}_4\text{Be}_6\text{Si}_{12}\text{O}_{36}$). *Physics and Chemistry of Minerals*, 32, 471–479.
- [6] Prencipe M., Pascale F., Zicovich-Wilson C.M., Saunders V.R., Orlando R., Dovesi R. (2004). The vibrational spectrum of calcite (CaCO_3): an ab initio quantum-mechanical calculation. *Physics and Chemistry of Minerals*, 31, 559–564.
- [7] Prencipe M., Noel Y., Civalleri B., Roetti C., Dovesi R. (2006). Quantum-mechanical calculation of the vibrational spectrum of beryl ($\text{Al}_4\text{Be}_6\text{Si}_{12}\text{O}_{36}$) at the Γ point. *Physics and Chemistry of Minerals*, 33, 519–532.
- [8] Prencipe M., Noel Y., Bruno M., Dovesi R. (2009). The vibrational spectrum of lizardite-1T [$\text{Mg}_3\text{Si}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$] at the Γ point: A contribution from an *ab initio* periodic B3LYP calculation. *American Mineralogist*, 94, 986–994.
- [9] Prencipe M. (2012). Simulation of vibrational spectra of crystals by ab initio calculations: an invaluable aid in the assignment and interpretation of the Raman signals. The case of jadeite ($\text{NaAlSi}_2\text{O}_6$). *Journal of Raman Spectroscopy*, 43, 1567–1569.
- [10] Prencipe M., Mantovani L.U., Tribaudino M., Bersani D., Lottici P. (2012). The Raman spectrum of diopside: a comparison between ab initio calculated and experimentally measured frequencies. *European Journal of Mineralogy*, 24, 457–464.
- [11] Prencipe M., Maschio L., Kirtman B., Salustro S., Erba A., Dovesi R. (2014) Raman spectrum of $\text{NaAlSi}_2\text{O}_6$ Jadeite. A quantum mechanical simulation. *Journal of Raman Spectroscopy*, 45, 703-709.
- [12] Prencipe M., Scanavino I., Nestola F., Merlini M., Civalleri B., Bruno M., Dovesi R. (2010). High-pressure thermo-elastic properties of beryl ($\text{Al}_4\text{Be}_6\text{Si}_{12}\text{O}_{36}$) from ab initio calculations, and observations about the source of thermal expansion. *Physics and Chemistry of Minerals*, 38, 223–239.
- [13] Ungureanu C.G., Prencipe M., Cossio R. (2010). Ab initio quantum-mechanical calculation of CaCO_3 aragonite at high pressure: thermodynamic properties and comparison with experimental data. *European Journal of Mineralogy*, 22, 693–701.
- [14] Ungureanu C. G., Cossio R., Prencipe M. (2012). An Ab-initio assessment of thermo-elastic properties of CaCO_3 polymorphs: Calcite case. *Calphad*, 37, 25–33.

- [15] Scanavino I., Belousov R., Prencipe M. (2012). Ab initio quantum-mechanical study of the effects of the inclusion of iron on thermoelastic and thermodynamic properties of periclase (MgO). *Physics and Chemistry of Minerals*, 39, 649–663.
- [16] Scanavino I., Prencipe M. (2013) Ab-initio determination of high-pressure and high-temperature thermoelastic and thermodynamic properties of low-spin (Mg_{1-x}Fe_x)O ferropericlase with x in the range [0.06, 0.59]. *American Mineralogist*, 98, 1270–1278.
- [17] Prencipe M., Bruno M., Nestola F., De La Pierre M., Nimis P. (2014) Toward an accurate *ab initio* estimation of compressibility and thermal expansion of diamond in the [0, 3000K] temperature, and [0, 30GPa] pressures ranges, at the hybrid HF/DFT theoretical level. *American Mineralogist*, 99, 1147-1154.
- [18] Zucchini A., Prencipe M., Comodi P., Frondini F. (2012) *Ab initio* study of cation disorder in dolomite. *Calphad*, 38, 177-184.
- [19] Scanavino I., Prencipe M. (2013) *Ab initio* determination of the bulk modulus of chromium nitride CrN. *RSC Advances*, 3, 17813-17821.
- [20] Bruno M., Prencipe M., Valdrè G. (2006). Ab initio quantum-mechanical modeling of pyrophyllite [Al₂Si₄O₁₀(OH)₂] and talc [Mg₃Si₄O₁₀(OH)₂] surfaces. *Physics and Chemistry of Minerals*, 33, 63–71.
- [21] Bruno M., & Prencipe M. (2007). Ab initio quantum-mechanical modeling of the (001), and (110) surfaces of zabuyelite (Li₂CO₃). *Surface Science*, 601, 3012–3019.
- [22] Bruno M., Aquilano D., Pastero L., Prencipe M. (2008). Structures and Surface Energies of (100) and Octopolar (111) Faces of Halite (NaCl): an Ab initio Quantum-Mechanical and Thermodynamical Study. *Crystal Growth & Design*, 8, 2163–2170.
- [23] Rubbo M., Bruno M., Prencipe M. (2009). Quantum-Mechanical and Thermodynamical Study on the (100) Face of LiF Crystals. *Crystal Growth & Design*, 9, 404–408.
- [24] Bruno M., Massaro F.R., Rubbo M., Prencipe M., Aquilano, D. (2010). (10.4), (01.8), (01.2), and (00.1) Twin Laws of Calcite (CaCO₃): Equilibrium Geometry of the Twin Boundary Interfaces and Twinning Energy. *Crystal Growth & Design*, 10, 3102–3109.
- [25] Bruno M., Massaro F.R., Prencipe M., Aquilano D. (2010). Surface reconstructions and relaxation effects in a centre-symmetrical crystal: the {00.1} form of calcite (CaCO₃). *CRYSTENGCOMM*, 12, 3626–3633.
- [26] Bruno M., Massaro F.R., Pastero L., Costa E., Rubbo M., Prencipe M., Aquilano D. (2013) New estimates of the free energy of calcite/water interfaces for evaluating the equilibrium shape and nucleation mechanisms. *Crystal Growth & Design*, 13, 1170-1179.
- [27] Bruno M., Prencipe M. (2013) A new calculation strategy to analyze the vibrational free energy of a slab and calculate the vibrational contribution of the surface free energy. *CRYSTENGCOMM*, 15, 6736-6744.
- [28] De La Pierre M., Bruno M., Manfredotti C., Nestola F., Prencipe M., Manfredotti C. (2014) The (100), (110) and (111) surfaces of diamond: an ab initio B3LYP study. *Molecular Physics*, 112, 1030-1039.
- [29] Bruno M., Massaro F.R. Prencipe M., Demichelis R., De La Pierre M., Nestola F. (2014) Ab initio calculations of the main crystal surfaces of forsterite (Mg₂SiO₄): a preliminary study to understand the nature of geochemical processes at the olivine interface. *Journal of Physical Chemistry C*, 118, 2498-2506.
- [30] Aliatis I., Lambruschi E., Mantovani L., Bersani D., Andò S., Gatta D., Gentile P., Salvioli-Mariani E., Prencipe M., Tribaudino M., Lottici P.P. (2015) A comparison between ab initio calculated and measured Raman spectrum of triclinic albite (NaAlSi₃O₈). *Journal of Raman Spectroscopy*, 46, 501-508.