

Marco Bruno, Ph.D.

Dipartimento di Scienze della Terra

Università degli Studi di Torino

Via Valperga caluso 35, I-10125

Tel. +39 011 6705126

Fax +39 011 6705128

Skype marco.bruno3

E-mail marco.bruno@unito.it

Web page personale <http://mabruno.weebly.com>



Scopus ID: 7202870250

Nato a Torino, il 23 Settembre 1974; cittadinanza italiana. Ricercatore confermato (RTI) presso l'Università degli Studi di Torino, Dipartimento di Scienze della Terra, Via Valperga Caluso 35, I-10125. Esperto di Crescita cristallina, Mineralogia computazionale e Termodinamica.

Titoli di studio e esperienze lavorative nella ricerca

- 24/11/1998: conseguimento della Laurea in Scienze Geologiche (Facoltà di Scienze M. F. N.) presso l'Università degli Studi di Torino, con votazione 110/110 con lode, svolgendo una tesi dal titolo *Modellizzazione termodinamica di una metagranodiorite dell'unità di Brossasco-Isasca del massiccio Dora-Maira*; relatore: Prof. Marco Rubbo (Università degli Studi di Torino)
- 13/02/2002: conseguimento del dottorato di ricerca in "Mineralogia, Petrologia e Cristallografia", XIV° Ciclo (Sede amministrativa: Modena; Sedi consorziate: Ferrara, Pavia, Torino). Titolo tesi di dottorato: *Granato: un nuovo modello di crescita. Dalla cinetica alla ricostruzione della traiettoria P-T-t*; relatori: Prof. Marco Rubbo (Università degli Studi di Torino) e Prof. Roberto Compagnoni (Università degli Studi di Torino).
- 2002-2004: assegno biennale di ricerca presso l'Università degli Studi di Torino, nell'ambito del progetto di ricerca "Studio di sistemi carbonatici naturali e di laboratorio".
- 2004-2005: assegno di ricerca (durata 11 mesi), presso l'INAF (Osservatorio Astronomico di Padova), nell'ambito del progetto di ricerca "Studio dell'esosfera e della superficie di Mercurio".
- 2005: contratto di collaborazione continuativa (co. co. co.) con l'Università degli Studi di Bologna, nell'ambito del progetto di ricerca "Applicazione di metodi di meccanica quantistica al calcolo di strutture e proprietà chimico-fisiche di biominerali e fillosilicati".
- 2006: borsa di studio semestrale presso l'Università degli Studi di Torino, nell'ambito del progetto di ricerca "Calcolo ab initio dell'energia superficiale di facce morfologicamente importanti della calcite".
- dal 01/10/2006 ricercatore universitario (RU) presso l'Università degli Studi di Torino, Dipartimento di Scienze della Terra.

Premi e riconoscimenti

- 1999: vincitore della medaglia d'argento assegnata dall'Università degli Studi di Torino per la miglior tesi del Corso di Laurea in Scienze Geologiche nell' a.a. 1997-98.
- 1999: premio OPTIME conferito dall'Unione Industriale di Torino per "meriti nello studio".

Attività di ricerca

Descrizione delle ricerche

L'attività di ricerca dello scrivente si concentra maggiormente su alcuni aspetti teorici della cristallografia. L'applicazione di tecniche computazionali (a livello quanto-meccanico, semi-empirico ed empirico) e lo sviluppo di nuovi modelli termodinamici per la determinazione delle proprietà termodinamiche di materiali cristallini, sono i principali campi di ricerca dello scrivente. In particolare, lo studio strutturale delle superfici e delle proprietà termodinamiche ad esse correlate sono oggetto d'indagine del sottoscritto. Tali studi hanno rilevanza e ricadute in molteplici settori della ricerca, dei quali la mineralogia, la cristallografia, le scienze dei materiali, la crescita cristallina e la bio-mineralizzazione sono i principali fruitori. Notevoli ricadute su aspetti tecnologici della produzione di semi-conduttori (crescita di fasi da vapore) e cristallizzazione di massa da soluzioni acquose sono, inoltre, da segnalare. Nel seguito sono elencate e descritte più in dettaglio le ricerche che caratterizzano l'attività dello scrivente.

(1) *Studio delle superfici di minerali* (articoli: [62], [60], [59], [57], [55], [54], [53], [52], [51], [50], [48], [46], [45], [41], [39], [38], [37], [36], [31], [30], [28], [25], [24], [21], [20], [19], [15], [11], [5]). La ricerca si concentra principalmente sulla determinazione delle strutture di superficie di minerali (modificazioni strutturali rispetto al volume del cristallo) e della loro energia libera (energia libera da fornire al sistema per creare la superficie). Tecniche di calcolo quanto-meccaniche (ab initio), semi-empiriche ed empiriche sono applicate a tal fine. Nonché modelli teorici (analitici e/o numerici) sono stati sviluppati, per calcolare grandezze termodinamiche fondamentali alla comprensione dei processi di superficie (i.e., energia statica a 0K, entropia vibrazionale e configurazionale).

Le principali fasi studiate sono le seguenti:

- i polimorfi del carbonato di calcio (calcite e aragonite, CaCO_3) (articoli: [62], [53], [51], [50], [46], [45], [38], [36], [31], [28], [20]). Uno studio strutturale dettagliato di superficie, tramite simulazioni empiriche e ab initio, è stato al momento eseguito su questi due minerali; inoltre, sempre tramite il calcolo, l'energia di superficie delle diverse facce è stata stimata. Le morfologie di equilibrio e crescita sono state quindi determinate (sia a secco che in soluzione acquosa), e ipotesi sui loro meccanismi di nucleazione e crescita da soluzione acquosa sono state proposte e tuttora risultano essere oggetto di studio. Le principali facce studiate della calcite sono: (10.4), (10.0), (11.0), (21.4), (01.8), (01.2), (00.1). In particolare, lo studio delle cosiddette facce "dipolari", (01.2) e (00.1), ossia superfici che presentano un momento di dipolo perpendicolare ad esse, ha consentito di formulare una legge fondamentale, basata sul principio di simmetria di Curie, che lega la simmetria delle superfici cristalline con la loro stabilità termodinamica.
- NaCl (halite) e LiF (articoli: [60], [45], [25], [24], [21], [19]). Su queste due fasi, strutturalmente molto semplici ma importanti casi di studio, sono stati eseguiti calcoli quanto-meccanici che hanno consentito di determinare per la prima volta il contributo entropico vibrazionale dell'energia libera di superficie delle facce (100) e (111). Inoltre, un nuovo modello termodinamico che consente di determinare come varia l'energia libera di superficie al variare della temperatura, basato sul cristallo-modello di Einstein, è stato proposto. I valori ottenuti con questo modello sono risultati essere in ottimo accordo con quelli calcolati a livello quanto-meccanico.

- Forsterite (Mg_2SiO_4), piropo ($Mg_3Al_2Si_3O_{12}$) e spinello ($MgAl_2O_4$) (articoli: [59], [55], [54], [52]). Olivina, granato e spinello sono tre minerali frequentemente ritrovati come inclusi in diamante. Poiché esiste un ampio dibattito sulla genesi di tali inclusioni, in particolare sulla loro singenesi (inclusi formati contemporaneamente al diamante) o protogenesi (minerali preesistenti inclusi in diamante), uno studio dettagliato delle principali facce di forsterite, granato, spinello e diamante può dare un importante contributo a tale dibattito. Da segnalare una nuova metodologia di lavoro proposta recentemente dallo scrivente, utile alla determinazione di tutte le configurazioni strutturali possibili della faccia di un cristallo. Metodologia applicata in modo rigoroso alle facce (100), (110) e (112) del piropo, e alle facce (100) e (110) dello spinello.

(2) *Studio dei cristalli geminati* (articoli: [61], [53], [44], [43], [40], [34], [30]). Lo studio dei geminati di contatto della calcite ($CaCO_3$), aragonite ($CaCO_3$) e dei geminati di contatto e compenetrazione del gesso ($CaSO_4 \cdot 2H_2O$) è stato affrontato per mezzo di simulazioni empiriche (utilizzo di funzioni empiriche che descrivono le interazioni atomiche); inoltre, i geminati di contatto dell'idrossiapatite monoclina ($Ca_5(PO_4)_3(OH)$) sono stati studiati tramite simulazioni quanto-meccaniche. La struttura all'interfaccia tra i due individui costituenti il geminato è stata quindi determinata. Le energie di geminazione (l'energia necessaria per far geminare un cristallo) sono state calcolate, le quali ci hanno consentito di avanzare ipotesi sul loro meccanismo di formazione.

Le quattro leggi di geminazione (per contatto) della calcite, (10.4), (01.8), (01.2) e (00.1), sono state analizzate in dettaglio. Per la prima volta le strutture e le energie di geminazione sono state calcolate. Le simulazioni hanno mostrato che (i) il geminato (00.1) è il più probabile da osservare nei cristalli, e che (ii) il minimo dell'energia di geminazione si ottiene se l'operazione di geminazione è un asse di rotazione di ordine due perpendicolare all'interfaccia (00.1). Infine è stato dimostrato che i geminati (00.1) sono gli unici che possono generarsi per mezzo di nucleazione eterogenea 2D, mentre la nucleazione 3D (omogenea o eterogenea) è il meccanismo dominante per gli altri geminati.

Le cinque leggi di geminazione (sia di contatto che compenetrazione) del gesso, (100), ($\bar{1}01$), (001), ($20\bar{1}$) e (101) sono state analizzate e studiate con le medesime tecniche computazionali adoperate per i geminati della calcite. I principali risultati si possono riassumere nei seguenti punti: (i) le leggi (100) e ($\bar{1}01$) si confermano essere le più importanti, anche se una distinzione sul loro modo di formazione è necessaria: la geminazione di contatto è favorita per la legge (100), mentre quella di compenetrazione per la ($\bar{1}01$); (ii) un'analisi approfondita sulla trasformazione del meccanismo di geminazione da contatto a compenetrazione permette di mostrare perché i ritrovamenti di cristalli geminati secondo la (100) di contatto potrebbero essere sottostimati, mentre quelli geminati secondo la (100) e ($\bar{1}01$) di compenetrazione sovrastimati; (iii) i geminati di contatto (100) e ($\bar{1}01$) possono essere facilmente confusi da un punto di vista morfologico; tale difficoltà di riconoscimento si riscontra anche per le coppie di geminati di compenetrazione (100) e ($\bar{1}01$), e (001) e ($20\bar{1}$).

Le leggi di geminazione più frequenti dei cristalli di idrossiapatite monoclina ($P2_1/c$) sono state esaminate sia da un punto di vista geometrico/morfologico che reticolare. L'asse di geminazione A_3 , parallelo all'asse di roto-inversione di ordine due del cristallo parente (P), genera due individui geminati (T), mutualmente ruotati di 120° . La struttura delle interfacce dei geminati sono state ipotizzate utilizzando il metodo di Hartman-Perdok. Quindi, l'energia di geminazione per tali interfacce è stata calcolata a livello quanto-meccanico. I valori ottenuti indicano che l'energia di attivazione per la nucleazione di un individuo geminato 3D è difficilmente distinguibile da quella per nucleare un cristallo non geminato. Inoltre, è stato osservato che la struttura di un geminato triplo monoclinico simula la struttura di un cristallo singolo di idrossiapatite trigonale-esagonale.

(3) *Determinazione delle proprietà termo-elastiche di minerali* (articoli: [56], [35], [33], [23], [22], [18], [17], [14], [13], [9], [1]). Parallelamente alle ricerche sopra descritte, le proprietà termo-

elastiche, quali espansione termica e bulk modulus, sono determinate sia sperimentalmente che a livello computazionale. Tali grandezze sono fondamentali per poter valutare in modo corretto l'energia libera della fasi (energia libera di Gibbs) e, come conseguenza, le curve di equilibrio e i campi di stabilità delle associazioni minerali. Le fasi cristalline studiate, fino ad ora, sono state pirosseni, spinello, berillo e diamante.

Dal punto di vista sperimentale, la variazione del volume di cella del cristallo al variare di pressione e temperatura è determinata mediante diffrazione su cristallo singolo. Dal punto di vista computazionale, le proprietà termo-elastiche sono calcolate mediante simulazioni quanto-meccaniche. Ove possibile, le proprietà termo-elastiche calcolate a livello quanto-meccanico sono state confrontate con quelle determinate sperimentalmente.

(4) *Determinazione del flusso di meteoriti sui pianeti* (articoli: [49], [47], [42], [29], [27], [16], [12], [8], [7]). Tale ricerca è portata avanti in collaborazione con l'Istituto Nazionale di Astrofisica (INAF) di Padova. Sono stati sviluppati modelli di flusso di micrometeoriti su Terra, Luna e Mercurio, allo scopo di studiare l'effetto del loro impatto sul suolo e la formazione dell'esosfera di Mercurio.

Progetti di ricerca finanziati e in corso

- ERC (European Research Council) Starting Grant 2012 no. 307322 (Fondi: 1.423.000 euro, durata: 5 anni; <http://www.indimedea.eu/>): Inclusions in Diamonds, Messengers from the Deep Earth (INDIMEDEA). Coordinatore: Prof. Fabrizio Nestola, Università di Padova; partecipanti: Marco Bruno (Università degli Studi di Torino), Paolo Nimis (Università di Padova), Jeff Harris (Università di Glasgow, UK).

Il ruolo principale dello scrivente, in questo progetto di ricerca, consiste (i) nella determinazione delle relazioni epitassiali tra incluso (olivina, granato, pirosseno, spinello) e diamante, (ii) nella determinazione delle strutture di interfaccia tra incluso e diamante, e (iii) nel calcolo delle energie interfacciali tra incluso e diamante, mediante simulazioni quanto-meccaniche.

- PRIN 2010/2011 (MIUR) no. 2010EARRRZ (Fondi: 76.040 euro, durata: 3 anni): CAP-TO - Ricerche cristallo-chimiche e strutturali su volume e superfici di carbonato-apatiti e sulla transizione stato amorfo- stato cristallino. Coordinatore: Prof. Fernando Camara Artigas; partecipanti: Marco Bruno et al.

Il ruolo principale dello scrivente, in questo progetto di ricerca, consiste (i) nella determinazione delle strutture di superficie delle principali facce dell'apatite, e (ii) nel calcolo dell'energia di superficie di esse, mediante simulazioni quanto-meccaniche.

Programmi di calcolo creati

- **SLAB** (v. 1.0, luglio 2013, <http://mabruno.weebly.com/download.html>) (articoli: [62], [51]) - Il programma è stato scritto in Fortran95 e consente di analizzare l'entropia vibrazionale, l'energia vibrazionale e l'energia libera di Helmholtz, alla temperatura di interesse, di uno slab (faccia del cristallo). Nello specifico questo programma permette di determinare: (i) il contributo di ciascun atomo alle proprietà termodinamiche dello slab; (ii) il contributo di ciascun layer di atomi che formano lo slab, con spessore $d(hkl)$, alle proprietà termodinamiche dello slab; (iii) il contributo alle proprietà termodinamiche di un gruppo di atomi, definito dall'utente; (iv) il contributo termico all'energia libera di superficie di una faccia (hkl).
- **TerCal** – Programma scritto in Fortran90. Consente di eseguire calcoli termodinamici (e.g., curve di reazione, determinazione di associazioni mineralogiche di equilibrio a P e T

stabiliti, determinazione delle reazioni linearmente dipendenti di un sistema) a partire da dati tabulati delle proprietà termodinamiche di minerali e fluidi.

- **GARGROW** – Programma di calcolo scritto in Fortran90 (articoli: [10], [4], [2]). Programma ideato e scritto durante la tesi di dottorato per simulare la crescita del granato in ambiente metamorfico al variare delle condizioni P e T della roccia. Il programma simula anche la diffusione intracristallina all'interno del granato.

Conoscenze informatiche inerenti la ricerca

- Ottima conoscenza dei linguaggi di programmazione Fortran77, Fortran90/95, Fortran 2003.
- Ottima conoscenza del programma di calcolo CRYSTAL (<http://www.crystal.unito.it/>), per simulazioni quanto-meccaniche in sistemi a periodicità 0D, 1D, 2D e 3D..
- Ottima conoscenza del programma di calcolo GULP (<http://www.ivec.org/gulp/>), per simulazioni a livello empirico di materiali a periodicità 0D, 1D, 2D e 3D.
- Ottima conoscenza del programma di calcolo MOPAC (<http://openmopac.net/>), per simulazioni a livello semi-empirico di materiali a periodicità 0D, 1D, 2D e 3D.
- Buona conoscenza del programma di calcolo TINKER (<http://dasher.wustl.edu/tinker/>), per simulazioni a livello empirico di materiali a periodicità 0D, 1D, 2D e 3D.
- Buona conoscenza dei programmi di calcolo GROMACS (<http://www.gromacs.org/>) e LAMMPS (<http://lammps.sandia.gov/>), per simulazioni di dinamica molecolare classica.
- Ottima conoscenza dei seguenti programmi per visualizzazione, manipolazione e analisi di strutture cristalline: GDIS (<http://gdis.sourceforge.net/>), MERCURY, XCRIDEN (<http://www.xcrysden.org/>).
- Ottima conoscenza del programma di calcolo MATLAB.
- Ottima conoscenza degli ambienti Windows e Linux.

Gestione strumenti di calcolo

- Lo scrivente è responsabile unico della gestione del cluster di calcolo INDY (<http://mabruno.weebly.com/linux-cluster-indy.html>), installato nel 2013 presso il Dipartimento di Geoscienze dell'Università degli Studi di Padova e acquistato mediante fondi provenienti dalla Comunità Europea (ERC Starting Grant 2012 no. 307322; <http://www.indimedea.eu>). Il supercomputer INDY è un Cluster LINUX sviluppato per High Performance Computing (HPC). Il cluster è composto da sei Server HPC TWIN SQUARE 16x4 CORE XEON (i.e., sei nodi con 64 core and un front-end con 16 core, per un totale di 400 core; processori Intel Xeon 8-Core E5-2650 2.0Ghz 20MB).
- Lo scrivente è inoltre responsabile della gestione del cluster LINUX installato nel 2012 presso il Dipartimento di Scienze della Terra dell'Università degli Studi di Torino e acquistato mediante fondi PRIN 2010/2011 (MIUR; no. 2010EARRRZ). Il cluster ha 48 core e le medesime specifiche sopra riportate per INDY.

Conoscenze strumenti analitici

- Microscopia ottica a trasmissione.
- Microscopia elettronica a scansione con microanalisi (SEM-EDS).
- Diffrazione raggi X su cristallo singolo.
- Diffrazione raggi X su polveri.
- Microscopia a scansione di sonda SPM (AFM/STM).

Attività didattica

L'attività didattica dello scrivente è sempre stata legata alla Mineralogia e Cristallografia. La maggior parte della didattica è stata svolta, e si svolge tuttora, in corsi fondamentali del secondo anno della Laurea triennale in Scienze Geologiche. Nel seguito sono riportati i dettagli dei corsi tenuti all'Università degli Studi di Torino e le attività ad essi connesse.

- Mineralogia con Laboratorio (Laurea triennale in Scienze Geologiche); corso fondamentale del secondo anno in cui lo scrivente svolge, dall'anno accademico 2006/2007 a tuttora, 32 ore di esercitazioni (2 CFU). Le esercitazioni vertono: (i) sulle proiezioni stereografiche di modellini appartenenti ai diversi sistemi cristallini, (ii) diffrazione su polveri, e (iii) riconoscimento dei minerali in sezione sottile tramite microscopia ottica a trasmissione.
- Proprietà chimico-fisiche dei minerali (Laurea Magistrale in Geoscienze, Georisorse e Geomateriali); corso (opzionale) di 64 ore di lezioni frontali (6 CFU), condiviso con un collega (32 ore di lezione cadauno), tenutosi nell'anno accademico 2009/2010. Le mie lezioni vertevano (i) sui fondamenti della termodinamica classica e statistica e sua applicazione alla determinazione delle principali proprietà termodinamiche dei minerali, e (ii) sulla dinamica molecolare classica per solidi cristallini.
- Laboratorio di Mineralogia (Laurea triennale in Scienze Geologiche); corso (opzionale) di 32 ore di lezioni frontali (3 CFU), tenutosi negli anni accademici 2006/2007, 2007/2008, 2008/2009. Il corso verteva sui fondamenti fisici dell'interazione radiazione X e materia, sulla teoria della diffrazione e sue applicazioni per caratterizzazione e determinazione della struttura dei minerali.
- Mineralogia con Laboratorio (Laurea triennale in Scienze Naturali); corso fondamentale del secondo anno in cui lo scrivente ha svolto, negli anni accademici 2007/2008 e 2008/2009, 16 ore di esercitazioni (1 CFU). Le esercitazioni riguardavano (i) le proiezioni stereografiche di modellini appartenenti ai diversi sistemi cristallini e (ii) esercizi di cristallografia geometrica elementare.
- Complementi di Mineralogia (Laurea triennale in Scienze Geologiche); corso (opzionale) di 32 ore di lezioni frontali (3 CFU), tenutosi nell'anno accademico 2007/2008. Il corso verteva sui difetti, le proprietà termo-elastiche (espansione termica, bulk modulus) e le proprietà termodinamiche (entropia, entalpia, calore specifico) dei minerali.
- Esami di profitto per i seguenti corsi: Mineralogia con Laboratorio (Scienze Geologiche, Scienze Naturali), Laboratorio di Mineralogia (Scienze Geologiche), Proprietà chimico-

fisiche dei minerali (Laurea Magistrale in Geoscienze, Georisorse e Geomateriali), Complementi di Mineralogia (Scienze Geologiche), Crescita cristallina (Scienze Geologiche, Scienze dei Materiali).

- Tutoraggio e co-tutoraggio di tesi triennali e magistrali (Scienze Geologiche, Scienze dei Materiali).

Attività istituzionali, organizzative, editoriali e collaborazioni

Collaborazioni con Enti e Università nazionali e internazionali

- Collaborazione con l'Università di Barcellona (Spagna), per lo studio dei meccanismi di crescita e delle proprietà termodinamiche di NaNO_3 .
- Collaborazione con l'INAF (Osservatorio Astronomico di Padova), per lo sviluppo di modelli d'impatto di meteoriti su Terra, Luna e Mercurio.
- Collaborazione con la Curtin University di Perth (Australia), per lo studio delle principali superfici dell'olivina e della loro interazione con l'acqua.

Partecipazioni a organi collegiali

- 2014-2016: membro eletto (secondo mandato) della "Commissione Crescita Cristalli" dell'Associazione Italiana di Cristallografia (AIC) (<http://www.cristallografia.org/>).
- 2012-2014: membro eletto (primo mandato) della "Commissione Crescita Cristalli" dell'Associazione Italiana di Cristallografia (AIC) (<http://www.cristallografia.org/>).
- 2014: membro della commissione spazi del Dipartimento di Scienze della Terra, Università degli Studi di Torino.
- 2006-2009: membro del consiglio dei docenti della Scuola di Dottorato in Scienze della Terra, Università degli Studi di Torino.

Organizzazione di congressi

- Giugno 2014: organizzatore della sessione 22g "Olivine and pyroxene mineral interface: from life and planetary evolution, to new promising technologies", Goldschmidt conference 2014, Sacramento, California (USA).
- Novembre 2013: membro del comitato scientifico, congresso Italian Crystal Growth 2013, Parma (Italia); organizzatore della sessione 1 "Fundamentals in crystal Growth: from bulk to surfaces".
- Settembre 2012: membro del comitato scientifico, congresso AIC 2012, Verona (Italia); organizzatore della sessione MS6 "Morphological and dimensional control in crystal growth: theory and applications".

Comunicazioni orali su invito

- Novembre 2010: Seminario alla Facultat de Geologia, Universitat de Barcelona (Spagna); titolo: "Surfaces in ionic or partially ionic crystals: types, structures and thermodynamical quantities".
- Giugno-Luglio 2010: 2nd Meeting of the Italian and Spanish Crystallographic Associations (MISCA II), Oviedo (Spagna), keynote nella sessione MS1 "Crystal growth and Biomineralization".
- Aprile 2010: International school "Adsorption, Absorption and Crystal Growth", Gargnano (Italia), sponsorizzata dalla Associazione Italiana di Cristallografia (AIC); argomento della lezione: "The reconstruction of dipolar surfaces: a preliminary step for adsorption modeling".
- Settembre 2008: SIMP-AIC Joint Meeting, Sestri-Levante (Italia), keynote nella sessione 11a "The polarity in mineral surfaces: fundamental and applied aspects".

Attività editoriale

Lo scrivente è membro dell'Editorial Board dell'**International Journal of Mineralogy** (<http://www.hindawi.com/journals/ijm/editors/>), una recente rivista open access dedicata alla Mineralogia. Inoltre, è revisore per le seguenti riviste scientifiche internazionali:

- American Mineralogist
- Chemistry of Materials
- Computational Materials Science
- CrystEngComm
- Crystal Growth and Design
- Crystal Structure: Theory and Applications
- Periodico di Mineralogia
- Physical Chemistry Chemical Physics
- Surface Science
- The Journal of Physical Chemistry

Pubblicazioni

Dati bibliometrici (fonte: Scopus)

- Anno della prima pubblicazione: 2000
- H-index: 14
- m-index (H-index diviso per il numero di anni dalla prima pubblicazione): 0.9
- Numero di citazioni: 539
- Numero di articoli pubblicati su riviste internazionali con impact factor (IF): 59
- Numero di articoli pubblicati su riviste internazionali con IF come primo autore: 16
- Numero di articoli pubblicati su riviste internazionali con IF come secondo autore: 21

Articoli su rivista

[64] DEMICHELIS R., BRUNO M., MASSARO F. R., PRENCPE M., DE LA PIERRE M., NESTOLA F. (2015). First-principle modelling of forsterite surfaces properties: accuracy of methods and basis sets. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY, in press.

- [63] BRUNO M., RUBBO M., PASTERO L., MASSARO F. R., NESTOLA F., AQUILANO D. (2015). Computational approach to the study of epitaxy: natural occurrence in diamond/olivine and aragonite/zabuyelite. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, in press.
- [62] BRUNO M. (2015). The free energy density of a crystal: calcite (CaCO_3) as a case of study. *CRYSTENGCOMM*, 17, 2204-2211.
- [61] AQUILANO D., BRUNO M., RUBBO M., PASTERO L., MASSARO F. R. (2015). Twin laws and energy in monoclinic Hydroxyapatite, $\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3(\text{OH})$. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, 15, 411-418.
- [60] RUBBO M., BRUNO M., PRENCIPE M. (2015). Thermodynamic study of reconstructed crystal surfaces. The octopolar (111) face of LiF. *SURFACE SCIENCE*, 632, 180-184.
- [59] MASSARO F. R., BRUNO M., NESTOLA F. (2014). Configurational and energy study of the (100) and (110) surfaces of the MgAl_2O_4 spinel by means of quantum-mechanical and empirical techniques. *CRYSTENGCOMM*, 16, 9224-9235.
- [58] NESTOLA F., NIMIS P., ANGEL R. J., MILANI S., BRUNO M., PRENCIPE M., HARRIS J. W. (2014). Olivine with diamond-imposed morphology included in diamond. Syngeneses or protogeneses? *INTERNATIONAL GEOLOGY REVIEW*, 56, 1658-1667.
- [57] AQUILANO D., BRUNO M., RUBBO M., MASSARO F. R., PASTERO L. (2014). Low symmetry polymorph of hydroxyapatite. Theoretical equilibrium morphology of the monoclinic $\text{Ca}_5(\text{OH})(\text{PO}_4)_3$. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, 14, 2846-2852.
- [56] PRENCIPE M., BRUNO M., NESTOLA F., DE LA PIERRE M., NIMIS P. (2014). Toward an accurate estimation of compressibility and thermal expansion of diamond in the [0, 3000K] temperature, and [0, 30GPa] pressure ranges, at the hybrid HF/DFT theoretical level. *AMERICAN MINERALOGIST*, 99, 1147-1154.
- [55] MASSARO F. R., BRUNO M., NESTOLA F. (2014). Analysis of the configurations of a crystal surface. Pyrope ($\text{Mg}_3\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$) as a case of study. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, 14, 2357-2365.
- [54] 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 (Mg_2SiO_4): a preliminary study to understand the nature of geochemical processes at the olivine interface. *THE JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C*, 118, 2498-2506.
- [53] MASSARO F., BRUNO M., RUBBO M. (2014). Surface structure, morphology and (110) twin of aragonite. *CRYSTENGCOMM*, 16, 627-635.
- [52] 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.
- [51] 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.

- [50] AQUILANO D., BENAGES-VILAU R., BRUNO M., RUBBO M., MASSARO F. R. (2013). Positive $\{hk.l\}$ and negative $\{hk.\bar{l}\}$ forms of Calcite (CaCO_3) crystal. New open questions from the evaluation of their surface energies. *CRYSTENGCOMM*, 15, 4465-4472.
- [49] HELBERT J., NESTOLA F., FERRARI S., MATURILLI A., MASSIRONI M., REDHAMMER G. J., CAPRIA M. T., CARLI C., CAPACCIONI F., BRUNO M. (2013). Olivine thermal emissivity under extreme temperature ranges: implication for Mercury surface. *EARTH & PLANETARY SCIENCE LETTERS*, 371-372, 252-257.
- [48] MASSARO F. R., MORET M., BRUNO M., AQUILANO D. (2013). Equilibrium and growth morphology of oligothiophenes: periodic bond chain analysis of quaterthiophene and sexithiophene crystals. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, 13, 1334-1341.
- [47] CREMONESE G., BORIN P., LUCCHETTI A., MARZARI F., BRUNO M. (2013). Micrometeoroids flux on the Moon. *ASTRONOMY & ASTROPHYSICS*, 551 (A27), 1-4.
- [46] 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.
- [45] BRUNO M. (2013). The reconstruction of dipolar surfaces: a preliminary step for adsorption modeling. *CRYSTAL RESEARCH & TECHNOLOGY*, 48, 811-818.
- [44] RUBBO M., BRUNO M., MASSARO F. R., AQUILANO D. (2013). Interfaces structure and stress of gypsum ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) penetration twins. *CRYSTENGCOMM*, 15, 958-964.
- [43] RUBBO M., BRUNO M., MASSARO F. R., AQUILANO D. (2012). The five twin laws of gypsum ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$). A theoretical comparison of the interfaces of the penetration twins. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, 12, 3018-3024.
- [42] CREMONESE G., BORIN P., MARTELLATO E., MARZARI F., BRUNO M. (2012). New calibration of the micrometeoroid flux on Earth. *THE ASTROPHYSICAL JOURNAL LETTERS*, 749, L40.
- [41] MASSARO F. R., MORET M., BRUNO M., AQUILANO D. (2012). Equilibrium and growth morphology of oligoacenes: periodic bond chains analysis of naphthalene, anthracene and pentacene crystals. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, 12, 982-989.
- [40] RUBBO M., BRUNO M., MASSARO F. R., AQUILANO D. (2012). The five twin laws of gypsum ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$). A theoretical comparison of the interfaces of the contact twins. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, 12, 264-270.
- [39] MASSARO F. R., MORET M., BRUNO M., RUBBO M., AQUILANO D. (2011). Equilibrium and growth morphology of oligoacenes: periodic bond chains (PBC) analysis of tetracene crystal. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, 11, 4639-4646.
- [38] AQUILANO D., BRUNO M., MASSARO F. R., RUBBO M. (2011). Theoretical equilibrium shape of calcite. 2. $[\bar{4}41]$ zone and its role in biomineralization. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, 11, 3985-3993.
- [37] BENAGES VILAU R., COSTA E., BRUNO M., CUEVAS DIARTE M. A., CALVET

PALLAS T., AQUILANO D. (2011). Experimental and theoretical aspects of the growth and equilibrium morphology of NaNO_3 . A preliminary study. *CRYSTAL RESEARCH & TECHNOLOGY*, 46, 773-778.

[36] MASSIMINO F., BRUNO M., RUBBO M., AQUILANO D. (2011). L-alfa alanine crystals: theoretical and experimental morphology and habit modifications in CaCO_3 solution. *CRYSTAL RESEARCH & TECHNOLOGY*, 46, 789-794.

[35] TRIBAUDINO M., BRUNO M., NESTOLA F., PASQUAL D., ANGEL R. J. (2011). Thermoelastic and thermodynamic properties of plagioclase feldspars from thermal expansion measurements. *AMERICAN MINERALOGIST*, 96, 992-1002.

[34] RUBBO M., BRUNO M., AQUILANO D. (2011). The (100) contact twin of gypsum. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, 11, 2351-2357.

[33] PRENCIPE M., SCANAVINO I., NESTOLA F., MERLINI M., CIVALLERI B., BRUNO M., DOVESI R. (2011). 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.

[32] TONIETTO S., NESTOLA F., REDHAMMER G. J., SILVESTRI A., MOLIN G. M., BRUNO M. (2011). Pyroxene inclusions in paleo-Christian mosaic tesserae: a new tool for constraining the glass manufacturing temperature. *APPLIED PHYSICS A*, 103, 207-212.

[31] MASSARO F. R., BRUNO M., AQUILANO D. (2010). Effect of the surface relaxation on the theoretical equilibrium shape of calcite. I. The [001] zone. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, 10, 4096-4100.

[30] 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 (CaCO_3): equilibrium geometry of the twin boundary interfaces and twinning energy. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, 10, 3102-3109.

[29] BORIN P., BRUNO M., CREMONESE G., MARZARI F. (2010). Estimate of neutral atoms contribution to the Mercury exosphere caused by a new flux of micrometeoroids. *ASTRONOMY & ASTROPHYSICS*, 517 (A89), 1-5.

[28] 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 (CaCO_3). *CRYSTENGCOMM*, 12, 3626-3633.

[27] BORIN P., CREMONESE G., MARZARI F., BRUNO M., MARCHI S. (2009). Statistical analysis of micrometeoroids flux on Mercury. *ASTRONOMY & ASTROPHYSICS*, 503, 259-264.

[26] 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.

[25] BRUNO M., AQUILANO D., PRENCIPE M. (2009). Quantum-mechanical and thermodynamical study on the (110) and reconstructed (111) faces of NaCl crystals. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, 9, 1912-1916.

[24] AQUILANO D., PASTERO L., BRUNO M., RUBBO M. (2009). {100} and {111} forms of

the NaCl crystals coexisting in growth from pure aqueous solution. *JOURNAL OF CRYSTAL GROWTH*, 311, 399-403.

[23] NESTOLA F., SECCO L., BRUNO M., PRENCIPE M., MARTIGNAGO F., PRINCIVALLE F., DAL NEGRO A. (2009). The effect of non-stoichiometry on the high-temperature behaviour of MgAl₂O₄ spinel. *MINERALOGICAL MAGAZINE*, 73, 301-306.

[22] NESTOLA F., SMYTH J. R., PARISATTO M., SECCO L., PRINCIVALLE F., BRUNO M., PRENCIPE M., DAL NEGRO A. (2009). Effect of non-stoichiometry on the spinel structure at high-pressure: implications for the Earth's mantle mineralogy. *GEOCHIMICA ET COSMOCHIMICA ACTA*, 73, 489-492.

[21] 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.

[20] BRUNO M., MASSARO F. R., PRENCIPE M. (2008). Theoretical structure and surface energy of the reconstructed {01.2} form of calcite (CaCO₃) crystal. *SURFACE SCIENCE*, 602, 2774-2782.

[19] 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.

[18] TRIBAUDINO M., BRUNO M., IEZZI G., DELLA VENTURA G., MARGIOLAKY I. (2008). The thermal behavior of Na-richrichterite. *AMERICAN MINERALOGIST*, 93, 1659-1665.

[17] TRIBAUDINO M., NESTOLA F., BRUNO M., BOFFA BALLARAN T., LIEBSKE C. (2008). Thermal expansion along the NaAlSi₂O₆-NaFe³⁺Si₂O₆ and NaAlSi₂O₆-CaFe²⁺Si₂O₆ solid solutions. *PHYSICS AND CHEMISTRY OF MINERALS*, 35, 241-248.

[16] BRUNO M., CREMONESE G., MARCHI S. (2007). Neutral sodium atoms release from the surfaces of the Moon and Mercury induced by meteoroid impacts. *PLANETARY AND SPACE SCIENCE*, 55, 1494-1501.

[15] BRUNO M., PRENCIPE M. (2007). Ab initio quantum-mechanical modeling of the (001), ($\bar{1}$ 01) and (110) surfaces of zabuyelite (Li₂CO₃). *SURFACE SCIENCE*, 601, 3012-3019.

[14] NESTOLA F., TRIBAUDINO M., BOFFA BALLARAN T., LIEBSKE C., BRUNO M. (2007). The crystal structure of pyroxenes along the jadeite-hedenbergite and jadeite-aegirine joins. *AMERICAN MINERALOGIST*, 92, 1492-1501.

[13] NESTOLA F., ROTIROTI N., BRUNO M., TRIBAUDINO M., VAN SMAALEN S., OHASHI H., REDHAMMER G. J. (2007). Low-temperature behavior of NaGaSi₂O₆. *AMERICAN MINERALOGIST*, 92, 560-569.

[12] BRUNO M., CREMONESE G., MARCHI S. (2006). Neutral sodium atoms release from the surface of the Moon induced by meteoroid impacts. *MONTHLY NOTICES OF THE ROYAL ASTRONOMICAL SOCIETY*, 367, 1067-1071.

[11] BRUNO M., PRENCIPE M., VALDRE' 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.

[10] BRUNO M., RUBBO M. (2006). The metamorphic history of Monte Mucrone metagranodiorite constrained by garnet growth modelling. *PERIODICO DI MINERALOGIA*, 75, 3-22.

[9] NESTOLA F., BOFFA BALLARAN T., LIEBSKE C., BRUNO M., TRIBAUDINO M. (2006). High-pressure behaviour along the jadeite $\text{NaAlSi}_2\text{O}_6$ – aegirine $\text{NaFeSi}_2\text{O}_6$ solid solution up to 10 GPa. *PHYSICS AND CHEMISTRY OF MINERALS*, 33, 417-425.

[8] CREMONESE G., BRUNO M., MANGANO V., MARCHI S., MILILLO A. (2005). Release of neutral sodium atoms from the surface of Mercury induced by meteoroid impacts. *ICARUS*, 177, 122-128.

[7] CREMONESE G., BRUNO M., MARCHI S. (2005). Neutral sodium atoms release from the surfaces of the Moon and Mercury induced by meteoroid impacts. *MEMORIE DELLA SOCIETÀ ASTRONOMICA ITALIANA*, 6, 63-66.

[6] BRUNO M., MESSIGA B., REBAY G., RUBBO M. (2004). High pressure coronites in the western Alps: a record of reaction pathways. *PERIODICO DI MINERALOGIA*, 73, 97-107.

[5] PASTERO L., COSTA E., BRUNO M., RUBBO M., SGUALDINO G., AQUILANO D. (2004). Morphology of calcite (CaCO_3) crystals growing from aqueous solutions in the presence of Li^+ ions. Surface behavior of the {0001} form. *CRYSTAL GROWTH & DESIGN*, 4, 485-490.

[4] BRUNO M. (2002). Garnet: a new growth model. From kinetics to reconstruction of the P-T-t path. *PLINIUS*, 27, 57-61.

[3] BRUNO M., COMPAGNONI R., HIRAJIMA T., RUBBO M. (2002). Jadeite with the Ca-Eskola molecule from an ultra-high pressure metagranodiorite, Dora-Maira Massif, Western Alps. *CONTRIBUTIONS TO MINERALOGY AND PETROLOGY*, 142, 515-519.

[2] BRUNO M., COMPAGNONI R., RUBBO M. (2001). The ultra-high pressure coronitic and pseudomorphous reactions in a metagranodiorite from the Brossasco-Isasca Unit, Dora-Maira Massif, western Italian Alps: a petrographic study and equilibrium thermodynamics modelling. *JOURNAL OF METAMORPHIC GEOLOGY*, 19, 33-43.

[1] TRIBAUDINO M., PRENCIPE M., BRUNO M., LEVY D. (2000). High pressure behaviour of Ca-rich C2/c clinopyroxenes along the join diopside-enstatite ($\text{CaMgSi}_2\text{O}_6$ - $\text{Mg}_2\text{Si}_2\text{O}_6$). *PHYSICS AND CHEMISTRY OF MINERALS*, 27, 656-664.

Capitoli su libro

[1] RUBBO M., BRUNO M. (2003). Coronitic reactions: constraints to element diffusion during UHP metamorphism. In: *Ultra-High Pressure Metamorphism* (vol. 5, pp. 261-306): Carswell D. A., Compagnoni R. (HUNGARY).

Contributi a congresso

- Colloque annuel du GFCC (2000), Marseille, Francia. Poster: Borghi A., Bruno M., Compagnoni R., Rubbo M., Garnet growth and zoning in a metagranodiorite from M. Mucrone (Sesia Zone, western Alps).

- SIMP (2000), Pavia, Italia. Posters: Rubbo M., Bruno M., Modelling the kinetics of growth and the zoning of garnets.
- SIMP (2000), Pavia, Italia. Posters: Bruno M., Compagnoni R., Hirajima T., Rubbo M., Jadeite with Ca-Eskola molecule from a metagranodiorite at ultra-high pressure conditions.
- XXXII Congresso AIC (2002), Bressanone, Italia. Poster: Bruno M., Rubbo M., Evaluation of garnet growth rate in metamorphic rocks.
- COSPAR (2004), Parigi, Francia. Poster: Cremonese G., Bruno M., Mangano V., Marchi S., Morbidelli A., Meteoroid-induced vaporization on Mercury.
- GEOITALIA (2005), Spoleto, Italia. Poster: Bruno M., Nestola F., Tribaudino M., High temperature behaviour of clinopyroxenes along the joins hedenbergite-jadeite and jadeite-acmite.
- II International Workshop on Layered Materials, Vercelli (TO), Italia. Poster: Prencipe M., Bruno M., Dovesi R., First principle calculation of the vibrational spectrum of lizardite-1T [Mg₃Si₂O₅(OH)₄].
- SIMP-AIC (2008), Sestri-Levante, Italia. Comunicazione orale: The energies of reconstructed surfaces: an ab initio quantum-mechanical and thermodynamical study on NaCl, LiF and CaCO₃.
- SIMP-AIC (2008), Sestri-Levante, Italia. Poster: Nestola F., Smyth J. R., Parisatto M., Secco L., Princivalle F., Bruno M., Principe M., Dal Negro A., The effect of non-stoichiometry at high-pressure and high-temperature: implications for the earth's mantle mineralogy.
- SIMP-AIC (2008), Sestri-Levante, Italia. Poster: Bruno M., Prencipe M., Rubbo M., Ab initio quantum-mechanical and thermodynamical study on NaCl, LiF and CaCO₃ reconstructed surfaces.
- SIMP-AIC (2008), Sestri-Levante, Italia. Poster: Pastero L., Aquilano D., Bruno M., Rubbo M., Morphology of halite growing from pure aqueous solution. Experiments and preliminary theoretical considerations.
- SIMP-AIC (2008), Sestri-Levante, Italia. Poster: Rubbo M., Bruno M., Prencipe M., Vibrational modes on (100) surface of LiF crystal.
- AIC (2009), Salerno, Italia. Poster: Aquilano D., Bruno M., Rubbo M., Surface polarity in intrinsically polar and in non-polar crystals. Symmetry of crystal bulk and surface reconstruction.
- II Meeting of the Italian and Spanish Crystallographic Associations (MISCA II) (2010), Oviedo, Spagna. Poster: Bruno M., Aquilano D., Rubbo M., The role of the interfaces in twinning and mixed-crystals formation.
- FIST (2011), Udine, Italia. Poster: Pastero L., Costa E., Bruno M., Aquilano D., Morphological change of calcite crystals grown from aqueous solution in the presence of L - and D/L - Aspartic acid.
- AIC (2012), Verona, Italia. Poster: Rubbo M., Bruno M., Massaro F.R., Aquilano D., Past and new views on Gypsum twins.
- AIC (2012), Verona, Italia. Poster: Costa E., Bruno M., Ferrero S., Aquilano D., The contact angle between a liquid drop and a flat crystal surface. A simple and reliable measurement method.
- GOLDSCHMIDT (2013), Firenze, Italia. Poster: Nestola F., Nimis P., Milani S., Angel R. J., Bruno M., Harris J. W., Crystallographic relationships between diamond and its olivine inclusions. An update.
- SGI-SIMP (2014), Milano, Italia. Comunicazione orale: The energy and crystal morphology of diamond inclusions to explain their genesis.