

Curriculum Vitae

INFORMAZIONI PERSONALI

Nome MARCELLO
Cognome MERLI
E-mail marcello.merli@unipa.it

FORMAZIONE TITOLI

Laurea in Sc. Geologiche 1990

Dottorato in Mineralogia e Crisytallografia (VI ciclo) nel 1994

Ricercatore (SSD GEO/06) dal 1998 al 2004.

Professore Associato di Mineralogia dal 2004.

ATTIVITA' DIDATTICA

Dal 1999 al 2004 docente di Cristallografia presso la facoltà di scienze dell' Università di Pavia

Negli A.A. 2004-2005, 2005-2006 e 2006-2007 ha svolto l'attività didattica nell'ambito del Corso di Laurea in *Scienze e Tecnologie per i Beni Culturali* – Polo Didattico delle Madonie (Peralia Sottana) tenendo il Corso di Mineralogia applicata ai Beni Culturali (4 CFU)

Dall' A.A. 2004-2005 tiene il Corso di Mineralogia per Scienze Geologiche nell' ambito del Corso di Laurea Triennale in *Scienze Geologiche* (9 CFU) presso la Facoltà di Scienze dell' Università di Palermo e fino al 2012 il Corso di Cristallografia nell' ambito del Corso di laurea Magistrale in *Scienze Geologiche* (3 CFU) presso la Facoltà di Scienze dell' Università di Palermo.

Dall' A.A. 2013-1014 tiene anche il Corso di Mineralogia nell' ambito del Corso di Laurea Triennale in Scienze della Natura e dell'ambiente (6 CFU)

RICERCHE FINANZIATE

prin 1999 Trasformazioni ordine-disordine nei minerali delle rocce

prin 2002 Coefficienti di distribuzione solido/liquido e meccanismi di incorporazione degli elementi in tracce

prin 2004 Studio dell condizioni di cristallizzazione e stabilita' delle miche attraverso un approccio non convenzionale integrato.

prin 2006 Stabilita' e trasformazioni delle miche: relazioni tra struttura, proprieta' termo-elastiche e condizioni ambientali.

prin 2008 Stabilita' e reattivita' in miche diottaedriche, prevalentemente, e in caoliniti: effetti della complessita' in regimi non ambientali.

prin 2011 DALLE MATERIE PRIME DEL SISTEMA TERRA ALLE APPLICAZIONI TECNOLOGICHE: STUDI CRISTALLOCHIMICI E STRUTTURALI

2015 - Convenzione di collaborazione scientifica

Museo Aperto per Giovani Scien

INCARICHI / CONSULENZE

- Nel triennio 2001-2003 è stato revisore dei conti della Associazione Italiana di Cristallografia.
- Nel triennio 2003-2005 è stato revisore dei conti della Società Italiana di Mineralogia e Petrografia.
- Nel 2006 ha organizzato il Workshop "Mineralogia Computazionale" nell'ambito del Congresso SIMP 2006 (Cagliari – settembre 2006)
- Dal 2005 è componente del Collegio dei Docenti del Dottorato di Ricerca in Geochimica e Vulcanologia dell'Università degli Studi di Palermo.
- Nel triennio 2005-2007 ha fatto parte del Consiglio di Presidenza della Società Italiana di Mineralogia e Petrografia.
- Fa parte della Commissione valutazione ex 60% per il triennio 2010-2012 e 2012-2015
-

ASSOCIAZIONI SCIENTIFICHE

gruppo nazionale di mineralogia (GNM)

UNIVERSITA' di milano - dip.to di scienze della terra

UNIVERSITA' di torino - dip.to di scienze della terra

Socio SIMP

Socio AIC

PUBBLICAZIONI

ScopusEXPORT DATE:13 Oct 2017Merli, M., Bonadiman, C., Diella, V., Sciascia, L., Pavese, A.Fe-periclase reactivity at Earth's lower mantle conditions: Ab-initio geochemical modelling(2017) Geochimica et Cosmochimica Acta, 214, pp. 14-29. <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85026798922&doi=10.1016%2fj.gca.2017.07.030&partnerID=40&md5=794131757d63096c7c60be0846504cc7DOI: 10.1016/j.gca.2017.07.030>DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusCalabrese, I., Gelardi, G., Merli, M., Liveri, M.L.T., Sciascia, L.Clay-biosurfactant materials as functional drug delivery systems: Slowing down effect in the in vitro release of cinnamic acid(2017) Applied Clay Science, 135, pp. 567-574. Cited 2 times.<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85002410281&doi=10.1016%2fj.clay.2016.10.039&partnerID=40&md5=301643b7f32e04414371bf3bd85ad90eDOI: 10.1016/j.clay.2016.10.039>DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusBertolino, V., Cavallaro, G., Lazzara, G., Merli, M., Milioto, S., Parisi, F., Sciascia, L.Effect of the biopolymer charge and the nanoclay morphology on nanocomposite materials(2016) Industrial and Engineering Chemistry Research, 55 (27), pp. 7373-7380. Cited 11 times.<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2->

s2.0-84978712636&doi=10.1021%2fac.iecr.
6b01816&partnerID=40&md5=ea7b7385eac64c50407785e4d9bb6c1eDOI: 10.1021/acs.iecr.
6b01816DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusCalabrese, I., Cavallaro, G., Lazzara, G., Merli, M., Sciascia, L., Turco Liveri, M.L.Preparation and characterization of bio-organoclays using nonionic surfactant(2016) Adsorption, 22 (2), pp. 105-116. Cited 4 times.<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84957441399&doi=10.1007%2fs10450-015-9697-1&partnerID=40&md5=3a996c4eale9f18cfc10.1007/s10450-015-9697-1>DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M., Bonadiman, C., Diella, V., Pavese, A.Lower mantle hydrogen partitioning between periclase and perovskite: A quantum chemical modelling(2016) Geochimica et Cosmochimica Acta, 173, pp. 304-318. Cited 1 time.<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84947797898&doi=10.1016%2fj.gca.2015.10.025&partnerID=40&md5=9a01e721192d75db3e28c5b6d137dd77DOI: 10.1016/j.gca.2015.10.025>DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusCalabrese, I., Merli, M., Turco Liveri, M.L.Deconvolution procedure of the UV-vis spectra. A powerful tool for the estimation of the binding of a model drug to specific solubilisation loci of bio-compatible aqueous surfactant-forming micelle(2015) Spectrochimica Acta - Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy, 142, pp. 150-158. Cited 3 times.<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84923221971&doi=10.1016%2fj.saa.2014.12.095&partnerID=40&md5=4a63a4e98c24e13ec1f32f2bd8d49dd9DOI: 10.1016/j.saa.2014.12.095>DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M., Sciascia, L., Pavese, A., Diella, V.Modelling of thermo-chemical properties over the sub-solidus MgO-FeO binary, as a function of iron spin configuration, composition and temperature(2015) Physics and Chemistry of Minerals, 42 (5), pp. 347-362. Cited 2 times.<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84939943531&doi=10.1007%2fs00269-014-0725-6&partnerID=40&md5=43fa520b2a265777e010.1007/s00269-014-0725-6>DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusDapiaggi, M., Pagliari, L., Pavese, A., Sciascia, L., Merli, M., Francescon, F.The formation of silica high temperature polymorphs from quartz: Influence of grain size and mineralising agents(2015) Journal of the European Ceramic Society, 35 (16), art. no. 10252, pp. 4547-4555. Cited 3 times.<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84943816289&doi=10.1016%2fj.jeurceramsoc.2015.08.015&partnerID=40&md5=61b40c8a203dd375375c3c93c0b06ed9DOI: 10.1016/j.jeurceramsoc.2015.08.015>DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusCataldo, S., Gianguzza, A., Merli, M., Muratore, N., Piazzese, D., Turco Liveri, M.L.Experimental and robust modeling approach for lead(II) uptake by alginate gel beads: Influence of the ionic strength and medium composition(2014) Journal of Colloid and Interface Science, 434, pp. 77-88. Cited 9 times.<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84906674930&doi=10.1016%2fj.jcis.2014.07.042&partnerID=40&md5=db67efc2dbbcc9aeb5811b32d62bcf3dDOI: 10.1016/j.jcis.2014.07.042>DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusCalabrese, I., Gelardi, G., Merli, M., Rytwo, G., Sciascia, L., Liveri, M.L.T.New tailor-made bio-organoclays for the remediation of olive mill waste water(2013) IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 47 (1), art. no. 012040, . Cited 2 times.<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84893720833&doi=10.1088%2f1757-899X%2f47%2f1%2f012040&partnerID=40&md5=1f125aee017b7ff5fee241966df0db74DOI: 10.1088/1757-899X/47/1/012040>DOCUMENT TYPE: Conference PaperSOURCE: ScopusCalabrese, I., Cavallaro, G., Scialabba, C., Licciardi, M., Merli, M., Sciascia, L., Turco Liveri, M.L.Montmorillonite nanodevices for the colon metronidazole delivery(2013) International Journal of Pharmaceutics, 457 (1), pp. 224-236. Cited 26 times.<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84888349055&doi=10.1016%2fj.ijpharm.2013.09.017&partnerID=40&md5=b675028c380a3ba45ce2cbb5233d3321DOI: 10.1016/j.ijpharm.2013.09.017>DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M., Sciascia, L.Bader's topological analysis of the electron density in the pressure-induced phase transitions/amorphization in -quartz from the catastrophe theory viewpoint(2013) Physics and Chemistry of Minerals, 40 (6), pp. 455-466. Cited 1 time.<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84878608039&doi=10.1007%2fs00269-013-0583-7&partnerID=40&md5=afd0e347ecd33bbdfd10.1007/s00269-013-0583-7>DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusNestola, F., Merli, M., Nimis, P., Parisatto, M., Kopylova, M., De Stefano, A., Longo, M., Ziberna, L., Manghnani, M.In situ analysis of garnet inclusion in diamond using single-crystal X-ray diffraction and X-ray micro-tomography(2012) European Journal of Mineralogy, 24 (4), pp. 599-606. Cited 11 times.<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-84874615402&doi=10.1127%2f0935-1221%2f2012%2f0024-2212&partnerID=40&md5=964fad7c10.1127/0935-1221/2012/0024-2212>DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusParisi, F., Sciascia, L., Princivalle, F., Merli, M.The pressure-induced ringwoodite to Mg-perovskite and periclase post-spinel phase transition: A Bader's topological analysis of the ab initio electron densities(2012) Physics and Chemistry of Minerals, 39 (2), pp. 103-113. Cited 5 times.<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2->

s2.0-84856222900&doi=10.1007%2fs00269-011-0465-9&partnerID=40&md5=42a8c96d01447e8e48a
10.1007/s00269-011-0465-9DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusSciascia, L., Turco
Liveri, M.L., Merli, M.Kinetic and equilibrium studies for the adsorption of acid
nucleic bases onto K10 montmorillonite(2011) Applied Clay Science, 53 (4), pp.
657-668. Cited 31 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-
s2.0-80051919537&doi=10.1016%2fj.clay.
2011.05.021&partnerID=40&md5=77f62bcbac61ba157f20add17a9f379eDOI: 10.1016/j.clay.
2011.05.021DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M., Sciascia, L.Iteratively
reweighted least squares in crystal structure refinements(2011) Acta
Crystallographica Section A: Foundations of Crystallography, 67 (5), pp. 456-468.
Cited 3 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-
s2.0-84860398174&doi=10.1107%2fs0108767311023622&partnerID=40&md5=c12d4eeb82c87b00b0c
10.1107/S0108767311023622DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M., Nestola,
F., Sciascia, L.Bader's analysis of the electron density in the Pbcn enstatite -
Pbcn protoenstatite phase transition(2011) European Journal of Mineralogy, 23 (2),
pp. 197-205. Cited 6 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-
s2.0-79956304460&doi=10.1127%2f0935-1221%2f2011%2f0023-2089&partnerID=40&md5=40dbf00k
10.1127/0935-1221/2011/0023-2089DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M.,
Sciascia, L., Turco Liveri, M.L.Regression diagnostics applied in kinetic data
processing: Outlier recognition and robust weighting procedures(2010) International
Journal of Chemical Kinetics, 42 (10), pp. 587-607. Cited 12 times.https://
www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-77957554146&doi=10.1002%2fkin.
20510&partnerID=40&md5=38646046e637813fc352e223c1e512c9DOI: 10.1002/kin.
20510DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M., Pavese, A., Curetti, N.Maximum
entropy method: An unconventional approach to explore observables related to the
electron density in phengites(2009) Physics and Chemistry of Minerals, 36 (1), pp.
19-28. Cited 3 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-
s2.0-58049206828&doi=10.1007%2fs00269-008-0255-1&partnerID=40&md5=a58c1ee3b37aca6d28
10.1007/s00269-008-0255-1DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M., Pavese,
A.About the reliability of the maximum entropy method in reconstructing electron
density: The case of MgO(2006) Zeitschrift fur Kristallographie, 221 (9), pp.
613-620. Cited 5 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-
s2.0-33748553342&doi=10.1524%2fzkri.
2006.221.9.613&partnerID=40&md5=af5dda70eb04c8ac8503500984775818DOI: 10.1524/zkri.
2006.221.9.613DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusArtioli, G., Dapiaggi, M.,
Fornasini, P., Sanson, A., Rocca, F., Merli, M.Negative thermal expansion in
cuprite-type compounds: A combined synchrotron XRPD, EXAFS, and computational study
of Cu<inf>2</inf>O and Ag<inf>2</inf>O(2006) Journal of Physics and Chemistry of
Solids, 67 (9-10), pp. 1918-1922. Cited 15 times.https://www.scopus.com/inward/
record.uri?eid=2-s2.0-33748310630&doi=10.1016%2fj.jpcc.
2006.05.043&partnerID=40&md5=488425763e299c467dd7480f5a502335DOI: 10.1016/j.jpcc.
2006.05.043DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusVerardo, G., Geatti, P., Merli, M.,
Strazzolini, P.5-Substituted 4,5-dihydro-1,2,4-triazin-3(2H)-ones from the
unprecedented reaction between -n-protected amino acid hydrazides and NaBH<inf>4</
inf>(2006) European Journal of Organic Chemistry, (11), pp. 2638-2643. Cited 1
time.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-
s2.0-33744957488&doi=10.1002%2fejoc.
200500989&partnerID=40&md5=f822133725036568516bcc5e2227a89eDOI: 10.1002/ejoc.
200500989DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M.Outlier recognition in
crystal-structure least-squares modelling by diagnostic techniques based on
leverage analysis(2005) Acta Crystallographica Section A: Foundations of
Crystallography, 61 (4), pp. 471-477. Cited 3 times.https://www.scopus.com/inward/
record.uri?eid=2-
s2.0-29844457856&doi=10.1107%2fs010876730501809X&partnerID=40&md5=0679ba5a2ff786021da
10.1107/S010876730501809XDOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusVerardo, G., Geatti,
P., Merli, M., Castellarin, E.E.Synthesis of 3-substituted dihydro-1-phenylamino-1h-
pyrrolo[1,2-a]imidazole-2,5(3h,6h)-diones from -amino acid phenylhydrazides and
levulinic acid(2004) European Journal of Organic Chemistry, (13), pp. 2833-2839.
Cited 7 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-
s2.0-4544293837&doi=10.1002%2fejoc.
200400112&partnerID=40&md5=68032888802f7c45bd2b6e1583e1a21bDOI: 10.1002/ejoc.
200400112DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusVerardo, G., Geatti, P., Martinuzzi,
P., Merli, M., Toniutti, N.Condensation reaction between -amino acid
phenylhydrazides and carbonyl compounds(2003) European Journal of Organic
Chemistry, (19), pp. 3840-3849. Cited 10 times.https://www.scopus.com/inward/
record.uri?eid=2-
s2.0-0141891467&partnerID=40&md5=a95d00d55594ebed78334e0c7a4743d9DOCUMENT TYPE:
ArticleSOURCE: ScopusMerli, M., Cámara, F.Topological analysis of the electron
density of the clinopyroxene structure by the maximum entropy method: An
exploratory study(2003) European Journal of Mineralogy, 15 (5), pp. 903-911. Cited
6 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-

s2.0-0344663919&doi=10.1127%2f0935-1221%2f2003%2f0015-0903&partnerID=40&md5=99046c77c10.1127/0935-1221/2003/0015-0903DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M., Pavese, A., Ranzini, M.Study of the electron density in MgO, (Mg<inf>0.963</inf>Fe<inf>0.037</inf>)O and Cu<inf>2</inf>O by the maximum entropy method and multipole refinements: Comparison between methods(2002) Physics and Chemistry of Minerals, 29 (7), pp. 455-464. Cited 7 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-

s2.0-0036672825&doi=10.1007%2fs00269-002-0253-7&partnerID=40&md5=a44d150e9bef70c855e7.10.1007/s00269-002-0253-7DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M., Capsoni, D., Bini, M., Massarotti, V.Chemical bonding study in Ca substituted Y<inf>2</inf>BaNiO<inf>5</inf> by analysis of charge density distribution(2002) Solid State Communications, 121 (4), pp. 193-198. Cited 1 time.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-

s2.0-0037074347&doi=10.1016%2fs0038-1098%2801%2900452-5&partnerID=40&md5=087dc3bc30e8.10.1016/S0038-1098(01)00452-5DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M.Least-squares refinements of crystal structures: Leverage analysis and the effects of truncating data(2002) Zeitschrift fur Kristallographie, 217 (37316), pp. 103-108. Cited 2 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-

s2.0-1542352868&doi=10.1524%2fzkri.217.3.103.20651&partnerID=40&md5=61e3fba89ffc60f01c85a30c054e687dDOI: 10.1524/zkri.217.3.103.20651DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M., Cámara, F., Domeneghetti, C., Tazzoli, V.Leverage analysis of X-ray single crystal diffraction data from orthopyroxene and pigeonite(2002) European Journal of Mineralogy, 14 (4), pp. 773-784. Cited 9 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-

s2.0-0036311791&doi=10.1127%2f0935-1221%2f2002%2f0014-0773&partnerID=40&md5=860391652.10.1127/0935-1221/2002/0014-0773DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusBrizi, E., Molin, G., Zanazzi, P.F., Merli, M.Ordering kinetics of Mg-Fe²⁺ exchange in a Wo<inf>43</inf>En<inf>46</inf>Fs<inf>11</inf> augite(2001) American Mineralogist, 86 (3), pp. 271-278. Cited 16 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-

s2.0-0035064816&partnerID=40&md5=8aeba4c7384617c4c90141566453cd5aDOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M., Oberti, R., Caucia, F., Ungaretti, L.Determination of site population in olivine: Warning on X-ray data treatment and refinement(2001) American Mineralogist, 86 (1-2), pp. 55-65. Cited 15 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-

s2.0-0035095095&partnerID=40&md5=926b29bce0d2310e2cad1456484562dcDOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusBoiocchi, M., Caucia, F., Merli, M., Prella, D., Ungaretti, L.Crystal-chemical reasons for the immiscibility of periclase and wüstite under lithospheric P, T condition(2001) European Journal of Mineralogy, 13 (5), pp. 871-881. Cited 10 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-

s2.0-0034804515&doi=10.1127%2f0935-1221%2f2001%2f0013%2f0871&partnerID=40&md5=75bb76k.10.1127/0935-1221/2001/0013/0871DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusPavese, A., Diella, V., Pischedda, V., Merli, M., Bocchio, R., Mezouar, M.Pressure-volume-temperature equation of state of andradite and grossular, by high-pressure and -temperature powder diffraction(2001) Physics and Chemistry of Minerals, 28 (4), pp. 242-248. Cited 29 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-

s2.0-0034915211&doi=10.1007%2fs002690000144&partnerID=40&md5=cc9dec8df3c2b732dedd5064.10.1007/s002690000144DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusBettinetti, G., Cairra, M.R., Callegari, A., Merli, M., Sorrenti, M., Tadini, C.Structure and solid-state chemistry of anhydrous and hydrated crystal forms of the trimethoprim-sulfamethoxypyridazine 1:1 molecular complex(2000) Journal of Pharmaceutical Sciences, 89 (4), pp. 478-489. Cited 45 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0033812553&doi=10.1002%2f%28SICI%291520-6017%28200004%2989%3a4%261t%3b478%3a%3aAID-JPS5%26gt%3b3.0.CO%3b2-5&partnerID=40&md5=5944aba7bc24d2elb3b1b2e9846ed709DOI: 10.1002/(SICI)1520-6017(200004)89:4<478::AID-JPS5>3.0.CO;2-5DOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M., Ungaretti, L., Oberti, R.Leverage analysis and structure refinement of minerals(2000) American Mineralogist, 85 (3-4), pp. 532-542. Cited 17 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-

s2.0-0034011462&partnerID=40&md5=8e1e9a2dadbd2915c1aecd48e746dfDOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusGiumanini, A.G., Toniutti, N., Verardo, G., Merli, M.Reaction of nitrosobenzene with 4-methoxy-N-methylaniline(1999) European Journal of Organic Chemistry, (1), pp. 141-143. Cited 14 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-

s2.0-0032809167&partnerID=40&md5=8e3ddd9e478b40602e332c623e5a9f2bDOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusMerli, M.Crystal-chemical complexity in natural garnets: structural constraints on chemical variability(1995) European Journal of Mineralogy, 7 (6), pp. 1239-1249. Cited 45 times.https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-

s2.0-0029476370&partnerID=40&md5=75a50964f85db251c3136b6edal3648eDOCUMENT TYPE: ArticleSOURCE: ScopusUngaretti, L., Leona, M., Merli, M., Oberti, R.Non-ideal solid-solution in garnet: crystal-structure evidence and modelling(1995) European Journal

of Mineralogy, 7 (6), pp. 1299-1312. Cited 53 times. <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0029500709&partnerID=40&md5=26cc9e74aa14d16a9c51ae40439bd278> DOCUMENT TYPE: Article SOURCE: Scopus Quartieri, S., Chaboy, J., Merli, M., Oberti, R., Ungaretti, L. Local structural environment of calcium in garnets: A combined structure-refinement and XANES investigation (1995) Physics and Chemistry of Minerals, 22 (3), pp. 159-169. Cited 25 times. <https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-0029501775&doi=10.1007%2fBF00202296&partnerID=40&md5=9aecc709bb234e3a50531bb25310.1007/BF00202296> DOCUMENT TYPE: Article SOURCE: Scopus

ATTIVITA' SCIENTIFICHE

L'attività scientifica del Prof. Marcello Merli relativa al triennio in questione si è articolata sulle seguenti linee di ricerca:

- 1) studio metodologico relativo agli algoritmi di raffinamento cristallografico basato sulla "Leverage analysis"
- 2) studio metodologico volto all'ottimizzazione del metodo di massimizzazione dell'entropia (MEM) per la ricostruzione di densità elettroniche sperimentali
- 3) studi cristallografici basati sulla analisi di densità elettroniche teoriche ottenute con metodi ab-initio
- 4) lavori di routine di risoluzione di strutture

Relativamente alla linea di ricerca 1), quale naturale continuazione di ricerche intraprese prima del triennio in questione, gli studi hanno portato all'introduzione in raffinamenti cristallografici di alcuni estimatori statistici funzione del cosiddetto "leverage" di ciascun dato, ossia di quel numero adimensionale che rappresenta l'influenza che ciascun dato ha sulla stima delle variabili in un processo di regressione. Tali estimatori sono, ad esempio, i cosiddetti DFFIT, DFBETAS, COVRATIO, FVARRATIO e così via. La loro valutazione permette di esercitare un buon controllo del processo di raffinamento cristallografico, riuscendo ad identificare gli effettivi "outliers" di un raffinamento. La leverage analysis è stata introdotta in cristallografia negli anni '80 da Prince, ma purtroppo non è mai stata oggetto di adeguata attenzione da parte della comunità scientifica cristallografica.

Tali lavori rappresentano quindi l'unico esempio di produzione scientifica relativo a tale argomento. Ciò ha suscitato l'interesse dell'IUCR, che ha invitato per il XXI IUCR meeting a Osaka (agosto 2008) il Prof. Marcello Merli a tenere una lecture su tali questioni. La ricerca si è spinta fino all'introduzione di metodi robusti nel raffinamento cristallografico e nella valutazione di modelli di cinetica chimica.

La ricerca metodologica ed applicativa sul metodo di massimizzazione dell'entropia nella ricostruzione delle densità elettroniche sperimentali (linea di ricerca 2) ha portato ad una puntualizzazione sul ruolo della introduzione di una informazione a priori in un processo MEM ed ad una applicazione del metodo per la stima della carica del sito M1 nelle fengiti.

Dal punto di vista metodologico, è stata valutata l'influenza che una mappa affetta da errori in qualche pixel introdotta inizialmente nel processo MEM come "guess values" può avere sul risultato finale, mostrando che sono comunque necessarie mappe iniziali relativamente prossime alla mappa vera ed un'alta risoluzione dei dati iniziali. Tale studio ha implicato la produzione di mappe teoriche di riferimento costruite con metodi quanto-meccanici, consentendo l'acquisizione delle tecniche di modellizzazione ab-initio delle strutture, aprendo così una ulteriore linea di ricerca (linea 3).

(in quanto confrontata coi risultati dell'analisi Mosbauer) dell'occupazione (parziale) del sito M1, sia in campioni con una discreta occupazione di tale sito, sia in altri con debolissimo accumulo di carica. Tale analisi ha implicato un set-up metodologico delle strategie di raffinamento MEM (uso di pesi unitari, eliminazione di outliers dal raffinamento cristallografico preliminare ad ogni processo MEM etc.), unitamente all'impiego di cognizioni e tecniche di analisi topologica secondo Bader della densità elettronica. Il riconoscimento del bacino atomico, inteso come volume racchiuso entro la cosiddetta "zero-flux surface" teorizzata da Bader, su cui fare l'integrazione della funzione densità elettronica ha consentito una affidabile valutazione della carica elettronica presente nei vari siti della struttura, tra cui, naturalmente, il sito M1.

La linea di ricerca 3) si è man mano affermata nel panorama delle ricerche del Prof. Merli ed ha così preso piede. Relativamente agli studi sulla cuprite si segnala il riconoscimento delle interazioni tra atomo ed atomo, possibile in modo rigoroso solo se si applica l'analisi della topologia di Bader della densità elettronica. Tale analisi si è spinta in un'interpretazione della transizione di fase orto-protoenstatite in termini di Teoria delle Catastrofi, applicata allo studio dell'analisi topologica di Bader. Si è potuto riconoscere, infatti, non solo la rottura di due legami nel sito M2 della ortoenstatite (con conseguente cambio della coordinazione), ma pure il suo meccanismo intimo, che si è dimostrato essere il risultato di una coalescenza tra il punto di sella tra Mg ed O nel sito M2 ed un suo vicino punto critico di anello, comportando una situazione di instabilità strutturale. Anche in questo caso si tratta di un approccio piuttosto inedito. Tale indagine è stata applicata a fasi di mantello profondo come la ringwoodite e il quarzo.

AMBITI DI RICERCA

Mineralogia e cristallografia. Metodi di raffinamento cristallografico. Calcolo di densità elettroniche. Modellizzazione ab-initio di minerali e studio della densità elettronica