

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI MILANO

Procedura di selezione per la chiamata a professore di I fascia da ricoprire ai sensi dell'art. 18, comma 1, della Legge n. 240/2010 per il settore concorsuale 04/A1 - **Geochimica, Mineralogia, Petrologia, Vulcanologia, Georisorse ed Applicazioni**, (settore scientifico-disciplinare GEO/06 - Mineralogia)

presso il Dipartimento di Dipartimento di SCIENZE DELLA TERRA "ARDITO DESIO",

(avviso bando pubblicato sulla G.U. 51 del 07/07/2023- Codice concorso 5345)

## **[Monica Dapiaggi]** **CURRICULUM VITAE**

**INFORMAZIONI PERSONALI (NON INSERIRE INDIRIZZO PRIVATO E TELEFONO FISSO O CELLULARE)**

COGNOME	DAPIAGGI
NOME	MONICA
DATA DI NASCITA	29 MAGGIO 1967

### **A. TITOLI**

#### **TITOLO DI STUDIO**

Laurea in Chimica (02 Chimica L1)  
Università degli Studi di Pavia, 16 luglio 1991  
Tesi di Laurea "Sintesi di  $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ : cinetica e meccanismo di formazione"  
Relatore Prof. Giorgio Spinolo, Dipartimento di Chimica Fisica

#### **TITOLO DI DOTTORE DI RICERCA O EQUIVALENTI, OVVERO, PER I SETTORI INTERESSATI, DEL DIPLOMA DI SPECIALIZZAZIONE MEDICA O EQUIVALENTE, CONSEGUITO IN ITALIA O ALL'ESTERO**

*(inserire titolo, ente, data di conseguimento, ecc.)*

Dottorato di Ricerca in Scienze della Terra, VII ciclo  
Università degli Studi di Pavia, 25 ottobre 1995  
Tesi di Dottorato di Ricerca "Indicatori di basso grado metamorfico nel sistema pelitico: studio petrografico e microstrutturale di alcuni fillosilicati"  
Relatore Prof. Fiorenzo Mazzi, Dipartimento di Scienze della Terra

#### **PERIODI DI STUDIO/RICERCA ALL'ESTERO**

- Borsa Erasmus/ECTS per un semestre presso University of Strathclyde (Glasgow, UK), da settembre 1989 a marzo 1990.
- 2 mesi come Research Assistant presso University of Strathclyde (Glasgow, UK), agosto-settembre 1990. Tesi sperimentale "Co-crystallisation of mixtures of glycine and l-alanine", relatore prof. Kevin J. Roberts, Dept. of Pure & Applied Chemistry
- 2 mesi (settembre e ottobre 2006) come Visiting Scientist nel Gruppo del prof. Simon J.L. Billinge (Dept. of Physics and Astronomy, Michigan State University (USA). Il supporto economico per tale permanenza è stato fornito dalla US National Science Foundation attraverso il grant DMR-0703940 (Prof. S.J.L. Billinge).
- 2 mesi (agosto e settembre 2011) come visiting scientist nel gruppo del prof. Michael J. Carpenter (Dept. Of Earth Sciences, University of Cambridge, UK)

## B. ATTIVITÀ DIDATTICA

### INSEGNAMENTI E MODULI

Monica Dapiaggi ha avuto i seguenti corsi in affidamento (fino al 2014 come professore aggregato):

- Fisica dei minerali dall'AA 2009/2010 ad oggi per il corso di Laurea Magistrale in Scienze della Terra (F97), 6 CFU, 48 ore frontali
- Mineralogia per Scienze Naturali dall'AA 2013/2014 ad oggi per il corso di laurea triennale in Scienze Naturali (F66). Corso Fondamentale del secondo anno, 6 CFU (5CFU di lezioni frontali e 1 CFU di esercitazioni, quindi 40 ore di lezioni frontali e 12 ore (con doppio turno) di esercitazioni.
- 1 CFU (12 ore) del corso di attività di campo, tirocinio e laboratorio per il corso di Laurea in Scienze Naturali
- 1.5 CFU (18 ore frontali) del corso di Cristallografia e Esercitazioni dal 2015 al 2021 per la Laurea Magistrale in Scienze della Terra (F97)

Monica Dapiaggi ha avuto in affidamento anche i seguenti corsi in:

- Corso di Mineralogia applicata (24 ore frontali) per il Corso di Laurea in Scienze Geologiche nell'AA 2005/2006, nell'AA 2006/2007 e nell'AA 2007/2008.
- Corso di Analisi chimiche di rocce, minerali e fluidi (24 ore frontali e 12 di esercitazioni) per il Corso di Laurea in Scienze Geologiche nell'AA 2006/2007 e nell'AA 2007/2008

### ATTIVITÀ DI DIDATTICA INTEGRATIVA E DI SERVIZIO AGLI STUDENTI

#### **ATTIVITÀ DI RELATORE DI ELABORATI DI LAUREA, DI TESI DI LAUREA MAGISTRALE, DI TESI DI DOTTORATO E DI TESI DI SPECIALIZZAZIONE**

(inserire numero, anno accademico, ateneo, corso laurea, ecc.)

- Attività di relatore di Tesi di Dottorato di Ricerca: dal 2009 a oggi relatore di 5 tesi di Dottorato di Ricerca in Scienze della Terra

AA Dottorato	Corso di Studi	Cognome Studente	Nome Studente
2007/08	SCIENZE DELLA TERRA	SALA	MARCO
2011/12	SCIENZE DELLA TERRA	BERNASCONI	ANDREA
2013/14	SCIENZE DELLA TERRA	PAGLIARI	LUCIA
2015/16	SCIENZE DELLA TERRA	CONFALONIERI	GIORGIA
2015/16	SCIENZE DELLA TERRA	GALIMBERTI	MATTEO

- Attività di relatore di elaborati di laurea triennale: dal 2009 a oggi relatore di 22 elaborati di laurea triennale (Scienze Geologiche e Scienze Naturali)
- Attività di relatore di tesi di laurea magistrale: dal 2009 a oggi relatore di 19 tesi di laurea magistrale (Scienze della Terra e Scienze Naturali)
- Attività di correlatore: 12 tra elaborati di laurea triennale e tesi di laurea magistrale

#### DETTAGLIO Attività di relatore

AA Laurea	Corso di Studi	Cognome Studente	Nome Studente
2007/08	GEOLOGIA: PROCESSI, RISORSE ED APPLICAZIONI	BERNASCONI	ANDREA
2007/08	SCIENZE GEOLOGICHE	PAGLIARI	LUCIA
2008/09	SCIENZE GEOLOGICHE	CATTANEO	VALENTINA
2008/09	GEOLOGIA: PROCESSI, RISORSE ED APPLICAZIONI	ALESSI	MASSIMO
2009/10	SCIENZE GEOLOGICHE	CONFALONIERI	GIORGIA
2010/11	SCIENZE GEOLOGICHE	SGUAZZINI	ANDREA
2010/11	SCIENZE GEOLOGICHE	POZZOLI	ALICE
2011/12	SCIENZE GEOLOGICHE (CLASSE L-34)	ABATE	LAURA FRANCESCA
2011/12	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	CONFALONIERI	GIORGIA
2011/12	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	GALIMBERTI	MATTEO
2013/14	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	SALVINI	STEFANO
2013/14	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	MAFFIOLI	ALBERTO
2013/14	SCIENZE GEOLOGICHE	MAIETTA	GIANLUCA

2013/14	SCIENZE GEOLOGICHE	MOHAMED	SHAHIN
2014/15	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	CIOLI	SILVIA
2014/15	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	RIGO	FRANCESCA
2014/15	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	PERPENTI	FABIO
2014/15	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	POZZOLI	ALICE
2015/16	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	BIRAGHI	PAOLO GIACOMO
2015/16	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	MAROTTA	GAIA
2015/16	SCIENZE DELLA NATURA (CLASSE LM-60)	SALVINI	STEFANO
2015/16	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	MAINARDI	MARTA
2015/16	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	OMEGNA	ELIA
2015/16	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	SPELTA	BENEDETTA
2016/17	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	BUONOMO	GIULIANO
2017/18	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	MONTAFIA	STEFANIA ELISA
2017/18	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	PANZERI	VERONICA
2017/18	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	TORTI	MELISSA
2018/19	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	BRUSCOLINI	MARGHERITA
2018/19	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	GANDINI	FABIO
2018/19	SCIENZE GEOLOGICHE (CLASSE L-34)	SAVOINI	LUDOVICO
2018/19	SCIENZE GEOLOGICHE (CLASSE L-34)	STEFANELLI	LEONARDO
2019/20	SCIENZE GEOLOGICHE (CLASSE L-34)	BERETTA	MATTEO
2020/21	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	BONOMELLI	SARA
2020/21	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	CERVELLIERI	MATILDE
2020/21	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	MARCONI	ELISA
2020/21	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	PIETRANTUONO	RITA
2020/21	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	VARCHETTA	LARA
2020/21	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	SAVOINI	LUDOVICO
2020/21	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	VAZZOLA	SIMONE
2021/22	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	ALLEVI	LUCA
2021/22	SCIENZE NATURALI (CLASSE L-32)	AMORUSO	ALESSANDRO
2021/22	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	BARONI	CAMILLA GIADA
2021/22	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	BERETTA	MATTEO
2021/22	SCIENZE DELLA TERRA (CLASSE LM-74)	BONO	RICCARDO

#### ATTIVITÀ DI TUTORATO DEGLI STUDENTI DI CORSI DI LAUREA E DI LAUREA MAGISTRALE E DI TUTORATO DI DOTTORANDI DI RICERCA

(inserire anno accademico, corso laurea, ecc.)

- Tutore di vari tirocini curriculari per la Laurea Magistrale in Scienze della Terra, sia interni, sia esterni, presso aziende che hanno convenzioni di ricerca attive. Tutti gli studenti che si sono laureati nella classe LM-74 (si veda tabella nella voce sopra) più uno della F89 hanno effettuato il tirocinio curriculare con Dapiaggi come tutore.
- Tutore di vari Erasmus - traineeship (Lucia Pagliari, Giorgia Confalonieri, Margherita Bruscolini) sia durante il corso di studi di Dottorato di Ricerca, sia durante il corso di studi di Laurea Magistrale.
- Responsabile di una campagna naturalistica sulle analisi dei suoli dell'Orto Botanico di Città Studi (2 CFU) alla quale partecipano circa 20 studenti del corso di Laurea in Scienza Naturale (dal 2019 a oggi)
- tutore del tirocinio di Maria Lacalamita, iscritta al Master 'Operatori per il laboratorio SISTEMA', svolto presso i laboratori del Dipartimento di Scienze della Terra dell'Università degli Studi di Milano nel 2013

#### SEMINARI e DIDATTICA POST-LAUREAM

- Seminario, invitata dal Prof. Simon J.L. Billinge, sulle applicazioni della Pair Distribution Function ai materiali per celle a combustibile presso il Department of Physics and Astronomy della Michigan State University (USA), 2007
- Seminario, sull'espansione termica negativa presso ESRF (European Synchrotron Radiation Facility), invitata dal Dr. Andy N. Fitch e dal Dr. Michela Brunelli, 2012
- Una lezione presso la Scuola di Diffrazione da Materiali Policristallini, Alessandria, 2004

- Due lezioni presso la Scuola di Diffrazione da Materiali Policristallini, Martina Franca, 2007
- Una lezione presso la scuola AIC "Crystallography Beyond Diffraction: the role of spectroscopies and theoretical calculations in revealing structural information", Camerino, 2011
- una serie di lezioni (7 ore) al Master di II livello denominato "Operatori per il laboratorio SISTEMA" su diffrazione da polveri e film sottili, presso il Dipartimento di Chimica dell'Università di Bari (Giugno 2013)
- varie lezioni alla Scuola CRISDI, Torino, dal 2014 al 2021
- varie lezioni nei Workshop AIC (Milano 2016, Bari 2017 e Milano 2019) descritti in dettaglio nella sezione 'ORGANIZZAZIONE WORKSHOP'

## C. ATTIVITÀ DI RICERCA SCIENTIFICA

### ORGANIZZAZIONE, DIREZIONE E COORDINAMENTO DI PROGETTI FINANZIATI NAZIONALI E INTERNAZIONALI O PARTECIPAZIONE AGLI STESSI

1. coordinatore nazionale del progetto "Sviluppo di tecniche innovative per la realizzazione di elettroliti solidi nanostrutturati per celle a combustibile a ossidi solidi", in parternariato con il Dipartimento di Chimica Fisica dell'Università di Pavia, finanziato dalla Fondazione Cariplo (bando 2006) dal settembre 2007 all'agosto 2009.
2. responsabile di unità scientifica del progetto "Realizzazione di elettroliti solidi nanostrutturati per celle a combustibile a ossidi solidi per temperature intermedie", in parternariato con il Dipartimento di Chimica Fisica dell'Università di Pavia, finanziato dalla Fondazione Cariplo (bando 2010) fino ad aprile 2013.
3. Partecipante al PRIN2010 (2010EARRRZ\_003) il cui responsabile è il Prof. Alessandro Pavese e al PRIN 2017 (2017L83S77\_003) il cui responsabile è il Prof. Gilberto Artioli
4. responsabile di varie convenzioni di ricerca commissionata, per applicazioni industriali delle tecniche mineralogiche:
  - o responsabile di varie convenzioni di ricerca commissionata con Prosimet SpA (dal 2011 a oggi, ininterrottamente)
  - o responsabile convenzione con De Nora (1 anno da aprile 2007) e della convenzione con PEMCO-Emails (1 anno da marzo 2008).
  - o co-responsabile della convenzione con Kaolin SpA (1 anno da novembre 2007)
  - o gestisce l'attività conto terzi del laboratorio di diffrazione a raggi X da polveri

### CONGRESSI E WORKSHOP

Scientific Committee per il Congresso AIC Verona (2012) Verona, 11 - 14 Settembre 2012 - XLI Congresso dell'AIC

Scientific and organizing Committee per i seguenti workshops

- Workshop "Analisi di fase Qualitativa e Quantitativa per applicazioni industriali e ambientali", che si è svolto a Milano il 16 febbraio 2016 presso l'Università degli Studi di Milano, via Mangiagalli, 25, Milano. La giornata di studi ha visto la partecipazione di più di settanta iscritti, provenienti da molti Atenei o altre istituzioni di ricerca, nonché di alcuni professionisti operanti nel mondo dell'industria. Il workshop ha avuto il sostegno di Elettra, Panalytical, Cisgem e Assing.
- Workshop "L'esperienza flessibile: studi di diffrazione in condizioni non ambientali", che si è svolto a Bari il 22 Febbraio 2017 presso l'Università degli Studi di Bari, via Orabona, 4, Bari. Il workshop ha visto la partecipazione di settanta iscritti, provenienti da molti Atenei o altre istituzioni di ricerca ed ha avuto il sostegno di Elettra, Istituto di Cristallografia (IC-CNR) nonché la sponsorizzazione di Anton Paar, Assing, Bruker e Panalytical.
- Workshop 'Microscopi Giganti: introduzione alle applicazioni delle grandi sorgenti' che si è tenuto presso l'Università degli Studi di Milano il 13 Maggio 2019. Il Workshop ha visto la partecipazione di più di cento iscritti, provenienti da tutta Italia e da varie industrie lombarde. Il workshop ha avuto il sostegno di Elettra.

## ATTIVITÀ DI REFERAGGIO IN RIVISTE SCIENTIFICHE

Web of Science™

Web of Science CV  
Prepared on July 20th 2023

---

### Monica Dapiaggi

<https://www.webofscience.com/wos/author/rid/A-2479-2014>  
Web of Science ResearcherID: [A-2479-2014](#)  
ORCID: 0000-0002-7815-3213

Peer review awards  
from date range January 2009 - July 2023

 Top reviewers for institution:  
University of Milan 2017

---

### Verified reviews

#### Reviewer Summary

For manuscripts reviewed from date range January 2009 - July 2023

(5) Powder Diffraction	(3) Mineralogical Magazine
(2) Journal of Applied Crystallography	(2) Materials and Structures
(2) Journal of the American Ceramic...	(1) Journal of Materials Research an...
(1) Journal of Physics and Chemistry...	(1) European Journal of Mineralogy
(1) Physical Chemistry Chemical Phy...	(1) Journal of the European Ceramic...
(1) Physics and Chemistry of Minerals	(1) Review of Scientific Instruments

## PARTECIPAZIONE IN QUALITÀ DI RELATORE A CONGRESSI E CONVEGNI DI INTERESSE INTERNAZIONALE

- EPDIC15 (European Powder Diffraction Conference), Bari, 2016 Oral presentation
- EMC2016 (European Mineralogical Conference), Rimini, 2016, Oral presentation
- AIC2017 (Associazione Italiana di Cristallografia), Perugia, 2017 Oral presentation
- SMEC 2007 (Study of Matter at extreme conditions), Miami, 2007 Invited oral
- Workshop on "Total scattering Pair Distribution Function analysis using X-rays and neutrons: powder diffraction and complementary techniques", ESRF, Grenoble, France, 22nd - 23rd October 2007, invited oral
- SMEC2005 (Study of Matter at extreme conditions), Miami, 2005 Invited oral

## ATTIVITÀ DI RICERCA

L'attività di ricerca della candidata è iniziata nel 1998 e non ha avuto interruzioni significative, anche tenendo conto del congedo per maternità (maggio 2009-aprile 2010).

M. Dapiaggi si occupa di tematiche mineralogiche e cristallografiche, come ad esempio misure in condizioni non ambientali delle proprietà fisiche di minerali, di soluzioni solide e di reattività e cinetiche di trasformazione allo stato solido. Alcune di queste tematiche fanno parte della cosiddetta ricerca di base (come ad esempio il cation ordering ad alta temperatura negli spinelli, la valutazione dell'equazione di stato attraverso misure in alta pressione e alta temperatura o le proprietà vibrazionali dei minerali ad espansione termica negativa), altre sono di carattere più applicativo/industriale (come ad esempio la caratterizzazione delle perovskiti drogare utilizzate nelle

celle a combustibile a ossidi solidi o le cinetiche di cristallizzazione di vetri per colate in continuo). L'attività scientifica di M. Dapiaggi può essere suddivisa nelle seguenti tematiche:

*A1 - Diffrazione da polveri in situ in condizioni non ambientali*

*A2 - Espansione termica negativa*

*A3 - Applicazioni del Total Scattering e della Pair Distribution Function a minerali e materiali disordinati e nanocristallini*

*A4 - Applicazioni mineralogiche, gemmologiche e cristallografiche della diffrazione da polveri*

*A1 - Diffrazione da polveri in situ in condizioni non ambientali*

Questa tematica di ricerca è molto ampia e riguarda sia ricerca di base che ricerca applicata: M. Dapiaggi si occupa sin dalla tesi di laurea di diffrazione da polveri ad alta temperatura e ha seguito, in questa veste, numerosi progetti, sia presso l'Università degli studi di Pavia, sia presso l'Università degli studi di Milano, sia attraverso collaborazioni nazionali e internazionali. In particolare, la diffrazione da polveri ad alta temperatura è stata applicata sia con strumenti da laboratorio, sia attraverso il lavoro effettuato presso grandi sorgenti (radiazione di sincrotrone a ESRF in Francia, neutroni termici a ILL in Francia oppure neutroni di spallazione a ISIS nel Regno Unito). L'applicazione di tale tecnica ha spaziato molto nel campo della mineralogia, passando da tematiche molto applicative a tematiche di ricerca di base.

Attraverso la diffrazione da polveri in situ è possibile seguire le cinetiche di reazione allo stato solido, ottenere le costanti cinetiche, il tipo di meccanismo di reazione e l'energia di attivazione apparente del processo o dei processi studiati. Questo tipo di studio può essere effettuato attraverso una serie di isoterme oppure attraverso una serie di rampe a diversa velocità di riscaldamento. I risultati devono essere confrontati con quelli ottenuti con altre tecniche, in modo da confermarne l'affidabilità. In genere si usano tecniche complementari, quali ad esempio quelle calorimetriche. Questo approccio è stato utilizzato per lo studio della decomposizione termica dell'olivina, che produce ematite (a circa 600°C) e silice amorfa, che a temperatura più elevata reagisce con l'olivina residua a dare pirosseno. A temperatura maggiore di 1130°C l'ematite si trasforma in magnetite. Per ognuna di queste reazioni è stato possibile valutare il meccanismo di reazione più probabile e i risultati delle reazioni sono stati studiati dal punto di vista tessiturale attraverso analisi in microscopia elettronica a scansione. Inoltre, il dettaglio delle relazioni strutturali tra le varie fasi è stato studiato attraverso microscopia elettronica in trasmissione (TEM) su campioni sottoposti a quenching durante la reazione.

I risultati di questo studio sono stati pubblicati nella seguente memoria:

*Gualtieri, A.F., Gemmi, M., Dapiaggi, M. (2003)*

*Phase transformations and reaction kinetics during the temperature-induced oxidation of natural olivine*

*American Mineralogist, 88, 1560-1574*

Un esempio più applicativo del medesimo approccio è lo studio della cristallizzazione di vetri industriali, utilizzati come lubrificante nelle colate di acciaio in continuo. La cinetica di formazione delle fasi cristalline, in questo caso, è di cruciale importanza per la reologia dei materiali e quindi la loro efficacia come lubrificanti ad alta temperatura. E' molto importante verificare quali fasi si formino durante la devitrificazione e se la devitrificazione del campione fosse controllata dalla sua composizione o da fattori cinetici relativi alla formazione delle varie fasi implicate nel processo. Sono state utilizzate due rampe di riscaldamento in due in due diversi intervalli di temperatura a fini esplorativi e in seguito l'analisi cinetica completa della formazione di una delle fasi, la cuspidina. E' stato possibile valutare il suo meccanismo di formazione e l'energia di attivazione apparente del processo, ben confrontabile con dati ottenuti dall'analisi calorimetrica classica. I risultati di questa analisi sono stati pubblicati nella memoria:

*Dapiaggi, M., Artioli, G., Righi, C., Carli, R. (2007)*

*High temperature reactions in mold flux slags: Kinetic versus composition control.*

*Journal of non-crystalline solids, 353, 2852-2860*

Sempre dal punto di vista applicativo, la diffrazione da polveri ad alta temperatura può essere utilizzata per lo studi di tipo ambientale, come ad esempio il meccanismo di incorporazione di cationi radiogenici (provenienti da scorie nucleari) in matrici minerali e successivamente la loro stabilità termica. Le scorie nucleari, contengono tipicamente vari cationi sotto forma di cloruri (ottenuti dalle celle di raffinazione), che devono essere incorporate in matrici chimicamente e termicamente stabili. L'utilizzo di strutture cristalline, al posto dei più tradizionali vetri, ha diversi vantaggi: una migliore stabilità chimica, una migliore resistenza alla lisciviazione e una maggiore stabilità termica. A questo scopo è stata studiata l'incorporazione del potassio nella struttura della sodalite, attraverso reazione allo stato solido tra Na-sodalite e il cloruro di potassio. I risultati sono stati pubblicati nella memoria:

*Dapiaggi, M., Artioli, G., Mazzocchia, C., Merlini, M. (2006).  
Structural characterisation of high temperature K-exchanged sodalite.  
Zeitschrift fur kristallographie, 23, 437-442*

Un'altra applicazione ambientale della diffrazione da polveri ad alta temperatura è quella della decomposizione termica di un anfibolo fibroso che fa parte della categoria degli asbesti. Si tratta dell'asbesto più pericoloso e la sua inertizzazione termica è ovviamente molto importante dal punto di vista ambientale. Per decomposizione termica, infatti, si formano fasi stabili e non pericolose dal punto di vista ambientale. I risultati della cinetica di decomposizione della crocidolite sono presentati nella seguente memoria:

*Gualtieri A. F., Levy D., Belluso E., Dapiaggi M. (2004)  
Kinetics of the Decomposition of Crocidolite Asbestos: A Preliminary Real-Time X-Ray Powder  
Diffraction Study  
Material Science Forum 443-444: 291-294*

Tematiche relative alla ricerca mineralogica di base hanno invece riguardato l'equazione di stato di alcuni minerali, quali la biotite naturale, lo spinello magnesio-ferrite ( $MgFe_2O_4$ ) e lo spinello zinco-cromite ( $ZnCr_2O_4$ ). E' necessario avere a disposizione dati strutturali di buona qualità, al fine di valutare la distribuzione dei cationi tra i vari siti cristallografici e dati di costanti di cella molto accurati e precisi a tutte le temperature studiate. Questo viene in genere effettuato attraverso l'utilizzo di uno standard di posizione, quale il silicio NBS. La posizione dei picchi dello standard, e di conseguenza la sua costante reticolare, possono essere utilizzati per valutare la presenza di aberrazioni strumentali (quali errore di zero o di spostamento del campione) o per valutare la temperatura 'vera' sperimentata dal campione. Poiché la camera calda utilizzata è stata tarata accuratamente per la temperatura, in genere lo standard viene utilizzato per valutare l'errore di zero del goniometro (in questo caso, l'errore di spostamento del campione dalla sua posizione sul cerchio goniometrico non dovrebbe essere apprezzabile, a causa della presenza del motore che tiene il campione nella sua corretta posizione a tutte le temperature). Le stesse misure vengono effettuate in alta pressione: la combinazione di dati di alta temperatura e alta pressione consente infatti di valutare l'equazione di stato dei minerali.

I risultati sono stati pubblicati nelle seguenti tre memorie:

*Levy, D., Diella, V., Dapiaggi, M., Sani, A., Gemmi, M., Pavese, A. (2004)  
Equation of state, structural behaviour and phase diagram of synthetic  $MgFe_2O_4$ , as a function of  
pressure and temperature  
Physics and Chemistry of minerals, 31, 122-129*

*Levy, D., Diella, V., Pavese, A., Dapiaggi, M., Sani, A. (2005)  
P-V equation of state, thermal expansion and P-T stability of synthetic zincochromite ( $ZnCr_2O_4$   
spinel).  
American Mineralogist, 90, 1157-1162*

*Pavese, A., Curetti, N., Diella, V., Levy, D., Dapiaggi, M., Russo, U. (2007)  
P-V and T-V Equations of State of natural biotite: An in-situ high-pressure and high-temperature  
powder diffraction study, combined with Mössbauer spectroscopy  
American Mineralogist, 92, 1158-1164*

Un ulteriore studio del cation ordering in uno spinello è stato effettuato accoppiando diffrazione a raggi X e diffrazione neutronica, per sfruttare il diverso 'peso' degli elementi nelle due procedure di scattering. Lo spinello in studio è tri-sostituito:  $Mg(Al_{0.5}Fe_{0.5})_2O_4$  ed è stato necessario raffinare le occupanze dei siti contenenti Mg e Al attraverso i dati di diffrazione neutronica (Mg e Al sono cationi isoelettronici), mentre una combinazione di neutroni e raggi X è stata necessaria per raffinare le occupanze totali dei siti.

I risultati sono stati pubblicati nella seguente memoria:

*Marinoni, N., Levy, D., Dapiaggi, M., Pavese, A., Smith, R.J. (2011)  
In situ high temperature X-ray and neutron powder diffraction study of cation partitioning in  
synthetic  $Mg(Fe_{0.5}Al_{0.5})_2O_4$  spinel.  
Physics and Chemistry of Minerals, 38, 11-19*

La diffrazione da polveri ad alta temperatura, come già accennato, è stata anche utilizzata per studi di carattere più applicativo, relativi a progetti interdisciplinari che legano la mineralogia e la cristallografia alla scienza dei materiali. Uno di questi progetti interdisciplinari ha riguardato la

collaborazione con il Dipartimento di Chimica Generale e Inorganica dell'Università degli studi di Parma. Il progetto riguarda il polimorfismo del manganito di bismuto, a struttura perovskitica. Questa perovskite subisce diverse transizioni di fase con la temperatura, attraverso le quali cambiano le sue proprietà elettriche e magnetiche. Al fine di seguire le variazioni strutturali che accompagnano queste transizioni di fase, è necessario avere a disposizione degli ottimi dati di diffrazione da polveri, in modo da poter valutare accuratamente tali variazioni. I risultati della diffrazione da polveri ad alta temperatura, accoppiati con dati TEM ad alta risoluzione, hanno consentito di mettere in relazione le proprietà con le caratteristiche strutturali dei vari polimorfi. A questo proposito è stata pubblicata la seguente memoria:

*Montanari, E., Calestani, G., Migliori, A., Dapiaggi, M., Bolzoni, F., Cabassi, R., Gilioli, E. (2005)  
High-Temperature Polymorphism in Metastable BiMnO<sub>3</sub>.  
Chemistry of materials, 17, 6457-6467*

Un'altra applicazione della diffrazione da polveri in situ, effettuata con i dati ottenuti con la camera calda presente presso il laboratorio del Dipartimento di Scienze della Terra di Milano, ha riguardato lo studio dell'espansione termica di membrane di una zeolite sintetica, depositata su supporti costituiti da alfa-allumina.

*Lissinantti Gualtieri M., Gualtieri A. F., Hedlund J., Jareman F., Sterte J., Dapiaggi M. (2004)  
Accurate measurement of the thermal expansion of MFI zeolite membranes by in situ HTXRPD.  
Studies in Surface Science and Catalysis, 154A, 703-709.*

Ancora un'applicazione che riguarda l'espansione termica riguarda l'influenza delle condizioni ossidanti sul coefficiente di espansione termica della magnetite (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>). Poiché ci troviamo in presenza di una discreta quantità di ferro bivalente, è stato verificato che la quantità di ossigeno nell'immediato intorno del campione ha una forte influenza sulla trasformazione del ferro (II) a ferro (III); poiché le loro dimensioni sono diverse, è diversa la loro influenza sull'espansione della cella della magnetite in funzione della temperatura. I risultati di questa ricerca sono stati pubblicati nella seguente memoria:

*Levy, D., Artioli, G., Dapiaggi, M. (2004)  
The effect of oxidation and reduction on thermal expansion of magnetite from 298 to 1173K at  
different vacuum conditions  
Journal of Solid State Chemistry, 177, 1713-1716*

Attraverso i finanziamenti dei progetti Fondazione Cariplo (Bando 2006 e bando 2010), è stata avviata una collaborazione scientifica con il Dipartimento di Chimica Fisica dell'Università degli Studi di Pavia, che si è dimostrata molto ricca di spunti di ricerca e di relative pubblicazioni. Entrambi i progetti finanziati sono relativi ai materiali per celle a combustibile a ossidi solidi (un progetto sulle applicazioni tradizionali e uno sulle temperature intermedie). I materiali studiati sono principalmente zirconie e cerie nanocristalline. Un lavoro interessante è stato effettuato sul comportamento termico della zirconia nanocristallina non drogata, che cristallizza nel sistema tetragonale fino a una dimensione limite delle particelle di circa 20 nm. Poiché la fase tetragonale è stabilizzata solo dalle dimensioni, con il riscaldamento (e la conseguente crescita dei grani) comincia a formarsi la fase monoclinica (stabile termodinamicamente).

Tale lavoro è stato pubblicato nella memoria:

*Dapiaggi, M, Maglia, F., Tredici, I, Maroni, B., Borghini, G, Anselmi-Tamburini, U (2010)  
Complex thermal evolution of size stabilized tetragonal zirconia  
Journal of Physics and Chemistry of Solids, 71, 1038-1041*

Ulteriori esempi di applicazioni mineralogiche della diffrazione in situ ad alta temperatura a tematiche di tipo industriale possono essere trovati in due lavori: uno sulla cinetica di decomposizioni di calcari di varia origine e composizione chimica (per produzione di clinker) e uno sulla cinetica di formazione della cristobalite da quarzo industriale con varia granulometria (per produzione di sanitary-ware).

Tali lavori sono stati pubblicati nelle memorie:

*Marinoni, N, Allevi, S, Marchi, M, Dapiaggi, M (2012)  
A kinetic study of thermal decomposition of limestones using in-situ high temperature powder  
diffraction*

*Journal of the American Ceramic Society, 95, 2491-2498*

e

*Pagliari, L, Dapiaggi, M, Pavese, A, Francescon, F (2013)  
A kinetic study of the quartz-cristobalite phase transition  
Journal of the European Ceramic Society, 33, 3403-3410.*

Quest'ultimo lavoro ha poi prodotto vari approfondimenti sul comportamento in alta temperatura del quarzo (e sull'influenza di mineralizzatori e delle dimensioni medie dei grani) e sul meccanismo di formazione del vetro silicatico nel processo di produzione delle ceramiche tradizionali:

*Monica Dapiaggi, Lucia Pagliari, Alessandro Pavese, Luciana Sciascia, Marcello Merli, and Fernando Francescon (2015)*

*The formation of silica high temperature polymorphs from quartz: Influence of grain size and mineralising agents.*

*JOURNAL OF THE EUROPEAN CERAMIC SOCIETY, 35(16):4547-4555*

*Monica Dapiaggi, Alessandro Pavese, Alberto Maffioli, Valeria Diella, and Fernando Francescon (2017)*

*Control of the amorphous content in traditional ceramics by means of alternative fluxing agents.*

*JOURNAL OF THE EUROPEAN CERAMIC SOCIETY, 37(4):1831-1838*

#### *A2 - Espansione termica negativa*

M. Dapiaggi si occupa da anni di tematiche relative ai minerali a espansione termica negativa, in particolare di cuprite e ossido di argento (I), ossido di renio (VI) e nantokite. Lo studio del comportamento vibrazionale di tali composti in funzione della temperatura, accoppiato all'analisi del secondo cumulante EXAFS, fornisce informazioni cruciali per la comprensione dei motivi alla base dell'espansione termica negativa. Tale tematica di ricerca si è svolta in stretta collaborazione con il gruppo EXAFS del Dipartimento di Fisica dell'Università degli Studi di Trento. L'espansione termica negativa viene in genere imputata alla presenza dei cosiddetti Rigid Unit Modes (RUMs), vibrazioni a bassa frequenza, legate alla presenza di vibrazioni perpendicolari negli atomi 'a ponte', che legano i poliedri nelle strutture a framework. All'aumentare della temperatura, tali vibrazioni aumentano di intensità, consentendo in modo dinamico l'accorciamento delle distanze di legame. In realtà, non sempre la presenza di RUMs è in grado di spiegare, da sola, l'espansione termica negativa. In particolare, nella cuprite e nell'ossido di argento (I), che hanno la stessa struttura a framework, costituita da due catene di tetraedri interpenetrate, le ragioni dell'espansione termica negativa sembrano più complesse. Dal 2003 ad oggi sono stati fatti molti progressi nella comprensione delle ragioni per l'espansione termica negativa nella struttura tipo cuprite, accoppiando dati prettamente locali (da misure EXAFS) a dati cristallografici, sia da polveri che da cristallo singolo, a calcoli ab initio (in collaborazione con l'Università di Palermo), a dati provenienti da misure di total scattering (in collaborazione con la Michigan State University). Da settembre 2006, infatti, la candidata ha cominciato ad applicare a queste tematiche le tecniche di analisi del comportamento locale delle strutture attraverso il total scattering e la Pair Distribution Function, in collaborazione con il gruppo del Prof. Simon Billinge alla Michigan State University (USA).

I risultati di questi studi sono stati pubblicati nelle seguenti memorie:

*Dapiaggi, M., Tiano, W., Artioli, G., Sanson, A. e Fornasini, P. (2003).*

*The thermal behaviour of cuprite: a combined XRD-EXAFS approach  
Nuclear Instruments and Methods, Physics Research B 200, 231-236*

*Tiano, W., Dapiaggi, M., Artioli, G. (2003)*

*Thermal expansion in cuprite-type structures from 10 K to decomposition temperature: Cu<sub>2</sub>O and Ag<sub>2</sub>O*

*Journal of Applied Crystallography, 36, 1461-1463*

*Sanson, A., Dalba, A., Fornasini, P., Grisenti, R., Rocca, F., Artioli, G., Dapiaggi, M., Tiano, W. (2005)*

*EXAFS and XRD study of local dynamics in Cu<sub>2</sub>O and Ag<sub>2</sub>O.*

*Physica scripta, t115, pp. 271-273*

*Sanson, A., Rocca, F., Dalba, G., Fornasini, P., Grisenti, R., Dapiaggi, M., Artioli, G. (2006)*

*Negative thermal expansion and local dynamics in Cu<sub>2</sub>O and Ag<sub>2</sub>O*

*Physical Review B, 73, 214305-1-214305-13*

*Artioli, G., Dapiaggi, M., Fornasini, P., Sanson, A., Rocca, F. (2006)*

*Negative thermal expansion in cuprite-type compounds: A combined synchrotron XRPD, EXAFS, and computational study of Cu<sub>2</sub>O and Ag<sub>2</sub>O.*

*Journal of Physics and Chemistry of solids, 67, 1918-1922*

*Fornasini, P., Sanson, A., Vaccari, M., Artioli, G., Dapiaggi, M. (2007)*

*Local lattice dynamics and negative thermal expansion in crystals.*  
*Journal of Physics, 92, 012153-1-012153-4*

*Dapiaggi, M., Kim, H.J., Bozin, E.S., Billinge, S.J.L. (2008)*  
*Study of the negative thermal expansion of cuprite-type structures by means of temperature-dependent Pair Distribution Function analysis: Preliminary results*  
*Journal of Physics and Chemistry of Solids, 69, 2182-2186*

I risultati di quest'ultimo lavoro sono stati presentati al congresso SMEC (Study of Matter at Extreme Conditions), a Miami, nell'aprile 2007, con un contributo invited oral dal titolo:

“Study of the negative thermal expansion of cuprite-type structures by means of temperature-dependent Pair Distribution Function analysis: preliminary results”

Inoltre, al Workshop on “Total scattering Pair Distribution Function analysis using X-rays and neutrons: powder diffraction and complementary techniques”, ESRF, Grenoble, France, 22nd - 23rd October 2007, nella sessione “Applications in Breakthrough Areas”, è stata invitata (invited oral) a presentare un contributo dal titolo:

“Pair distribution function analysis applied to negative thermal expansion materials: preliminary results on Cu<sub>2</sub>O and Ag<sub>2</sub>O”

Un ulteriore esempio di espansione termica negativa è quello relativo all'ossido di renio (ReO<sub>3</sub>). In questo caso, l'espansione termica è molto piccola e quindi difficilmente misurabile senza un'elevata risoluzione nello spazio reciproco, come nella beamline ID31 a ESRF (European Synchrotron Radiation Facility). Le variazioni sulla cella elementare sono sulla 5 cifra decimale in Å: è quindi necessaria un'ottima precisione (sulla sesta decimale), unita a un'ottima accuratezza.

Tale lavoro è stato pubblicato nella memoria:

*Dapiaggi, M, Fitch, A.N. (2009)*  
*Negative (and very low) thermal expansion in ReO<sub>3</sub> from 5 to 300 K*  
*Journal of Applied Crystallography, 42, 253-258.*

### *A3 - Applicazioni del Total Scattering e della Pair Distribution Function a minerali e materiali disordinati e nanocristallini*

L'analisi del total scattering dei materiali disordinati consente di avere informazioni sia locali (entro qualche decina di Å) sia medie (qualche migliaio di Å). Dal punto di vista formale, le informazioni medie corrispondono a quelle ottenibili attraverso le tecniche cristallografiche convenzionali, per il cui il vero valore aggiunto della tecnica consiste nelle informazioni locali. Localmente, infatti, le strutture possono avere un comportamento diverso da quello cristallografico ed è proprio questa informazione che consente di studiare minerali disordinati e/o nanocristallini. La presenza di disordine locale nelle strutture mineralogiche è molto diffuso in natura e può essere di varia origine: tale disordine, che di solito non è presente alla scala cristallografica, può cambiare anche in misura notevole le proprietà fisiche dei minerali, come ad esempio il loro comportamento in alta temperatura o in alta pressione.

A fine 2007 è stata invitata dal Prof. Simon J.L. Billinge a tenere un seminario sulle applicazioni della Pair Distribution Function ai materiali per celle a combustibile presso il Department of Physics and Astronomy della Michigan State University (USA).

Il primo lavoro sul total scattering e sull'analisi della PDF è stato quello di cercare di comprendere le ragioni per l'espansione termica negativa nella struttura della cuprite (si veda la sezione apposita), in modo non convenzionale. Le PDF (in funzione della temperatura) di cuprite e ossido di argento sono state analizzate in dettaglio, mostrando che anche la cuprite presenta degli aspetti peculiari, relazionabili al diffuse scattering, presente soprattutto alla temperatura in cui avviene la variazione da NTE a espansione termica positiva. Il lavoro è stato pubblicato nella (già citata) memoria:

*Dapiaggi, M., Kim, H.J., Bozin, E.S., Billinge, S.J.L., Artioli, G. (2008)*  
*Study of the negative thermal expansion of cuprite-type structures by means of temperature-dependent pair distribution function analysis: preliminary results.*  
*Journal of Physics and Chemistry of Solids, 69, 2182-2186*

Dopo aver studiato il diffuse scattering nei materiali cristallini, l'interesse si è temporaneamente spostato verso la struttura locale degli amorfi. Durante la tesi di dottorato di Andrea Bernasconi, è stato effettuato uno studio a tutto tondo sulle variazioni della struttura locale di glaze industriali in funzione

della loro composizione chimica, in modo da poterle mettere in relazione con le proprietà macroscopiche, quali per esempio reologia o viscosità. Il lavoro è stato pubblicato nella memoria:

*Bernasconi, A., Dapiaggi, M., Pavese, A., Bowron, D.T., Imberti, S. (2012)*

*Local structure of Si-Al-Ca-Na-O glasses from coupled neutron and X-ray total scattering data  
Journal of Physical Chemistry B, 116, 13114-13123)*

e nella sua correzione (errore dell'editorial office della rivista)

*Bernasconi, A., Dapiaggi, M., Pavese, A., Bowron, D.T., Imberti, S. (vol 116, 13115, 2012) (2013)*

*Local structure of Si-Al-Ca-Na-O glasses from coupled neutron and X-ray total scattering data  
Journal of Physical Chemistry B, 117, 961-961*

Più recentemente, la collaborazione con il CNR-IENI di Genova ha prodotto un altro lavoro sulla struttura locale del titanato di bario (drogato con Zr), che ha la struttura della perovskite a temperatura ambiente, con interessanti proprietà elettriche in funzione delle distorsioni locali. La struttura locale è stata studiata attraverso la PDF, ma anche attraverso la spettroscopia Raman. Il lavoro è stato pubblicato nella seguente memoria:

*Buscaglia, V., Tripathi, S. Petkov, V., Dapiaggi, M., Deluca, M., Gajovic, A., Ren, Y. (2014)*

*Average and local atomic-scale structure in BaZrxTi1-xO3 (x=0.1,0.2,0.4) ceramics by high-energy X-ray diffraction and Raman Spectroscopy  
Journal of Physics- Condensed Matter, 26, 065901*

Lo studio della zirconia tetragonale non drogata si è concluso con un lavoro sul rapporto tra la struttura locale e la stabilizzazione della fase di alta temperatura, pubblicato nella memoria:

*Dapiaggi, M., Maglia, F., Pagliari, L., Tredici, I.G., Rotiroti, N. (2014)*

*The role of local structural distortions in the stabilisation of undoped nanocrystalline tetragonal zirconia  
Chemistry and Physics of Materials, 147, 395-402*

Lavorando spesso su dati di total scattering raccolti alle grandi sorgenti (sincrotrone o neutroni di spallazione), la candidata ha trovato molto interessante fare un confronto tra dati da luce di sincrotrone ottenuti con una beamline ottimizzata per raccogliere molto velocemente con detector 2D e con una beamline più tradizionale con un set di detector multichannel preceduti da cristalli analizzatori, ottimizzata per l'alta risoluzione. Tali dati sono poi stati confrontati con dati raccolti con un diffrattometro da laboratorio, ottimizzato per l'altra energia, con un anticatodo di molibdeno.

Tale confronto è stato pubblicato nella memoria:

*Giorgia Confalonieri, Monica Dapiaggi, Marco Sommariva, Milen Gateshki, Andy N. Fitch, and Andrea Bernasconi (2015)*

*Comparison of total scattering data from various sources: the case of a nanometric spinel.  
POWDER DIFFRACTION, 30(1):S65-S69*

Questi dati sono poi stati utilizzati per lo studio della struttura locale dello spinello nanometrico Zn-Al:

*Giorgia Confalonieri, Nicola Rotiroti, Andrea Bernasconi, and Monica Dapiaggi (2020).*

*Structural study of nano-sized gahnite (ZnAl2O4): From the average to the local scale.  
NANOMATERIALS, 10(5)*

La linea di ricerca sui materiali amorfi si è arricchita nel tempo di vari lavori, tutti in collaborazione con Andrea Bernasconi, con dati raccolti presso la sorgente di neutroni di spallazione ISIS (Chilton, UK) e con dati di alta energia raccolti presso ESRF a Grenoble (F):

*Andrea Bernasconi, Monica Dapiaggi, Alessandro Pavese, Giovanni Agostini, Maurizio Bernasconi, and Daniel T. Bowron (2016)*

*Modeling the structure of complex aluminosilicate glasses: The effect of zinc addition. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B, 120(9):2526-2537*

*Andrea Bernasconi, Monica Dapiaggi, Daniel Bowron, Stefano Ceola, and Stefano Maurina (2016)*

*Aluminosilicate-based glasses structural investigation by high-energy X-ray diffraction.  
JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE, 51(19):8845-8860*

Andrea Bernasconi, Monica Dapiaggi, Jonathan Wright, Stefano Ceola, Stefano Maurina, Fernando Francescon, and Alessandro Pavese (2018)

High temperature investigation of SiO<sub>2</sub>-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-ZnO-Na<sub>2</sub>O glass for ceramic glaze: in-situ/ex-situ synchrotron diffraction and conventional approaches. CERAMICS INTERNATIONAL, 44(6):6395-6401,

Andrea Bernasconi, Monica Dapiaggi, Chiara Milanese, Marco Alloni, and Alessandro Pavese (2021)  
Structure of soda-lime-aluminosilicate glasses as revealed by in-situ synchrotron powder diffraction experiments.

JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS, 568, 120932

Durante il dottorato di ricerca di Giorgia Confalonieri, l'attenzione si è spostata sul rapporto struttura-proprietà di alcune soluzioni solide di perovskiti disordinate: titanato di bario dopato con varie quantità di cerio. La presenza dello ione dopante varia le proprietà variando la struttura locale del cristallo, che viene sottoposta a una notevole quantità di strain locale, dovuto a una distorsione accoppiata a un tilting dei poliedri a coordinazione 6.

Tali studi sono stati pubblicati nelle memorie:

Giorgia Confalonieri, Vincenzo Buscaglia, GianCarlo Capitani, Giovanna Canu, Nicola Rotiroti, Andrea Bernasconi, Alessandro Pavese, and Monica Dapiaggi (2018)

Local distortion and octahedral tilting in BaCe<sub>x</sub>Ti<sub>1-x</sub>O<sub>3</sub> perovskite.

JOURNAL OF APPLIED CRYSTALLOGRAPHY, 51(5):1283-1294

Giovanna Canu, Giorgia Confalonieri, Marco Deluca, Lavinia Curecheriu, Maria Teresa Buscaglia, Mihai Asandulesa, Nadejda Horchidan, Monica Dapiaggi, Liliana Mitoseriu, and Vincenzo Buscaglia (2018)

Structure-property correlations and origin of relaxor behaviour in BaCe<sub>x</sub>Ti<sub>(1-x)</sub>O<sub>(3)</sub>. ACTA MATERIALIA, 152:258-268

Giorgia Confalonieri, Vincenzo Buscaglia, Giovanna Canu, Maria Teresa Buscaglia, and Monica Dapiaggi (2019)

The local and average structure of Ba(Ti, Ce)O<sub>3</sub> perovskite solid solution: effect of cerium concentration and particle size.

JOURNAL OF SYNCHROTRON RADIATION, 26, 1280-1287

Giovanna Canu, Francesco Giannici, Alessandro Chiara, Giorgia Confalonieri, Alessandro Longo, Maria Teresa Buscaglia, Monica Dapiaggi, Vincenzo Buscaglia, and Antonino Martorana (2021)

Characterisation of scheelite LaW<sub>0.16</sub>Nb<sub>0.84</sub>O<sub>4.08</sub> ion conductor by combined synchrotron techniques: Structure, W oxidation state and interdiffusion.

JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS, 857, 157532

L'expertise sul total scattering ha portato anche altri frutti nel campo delle collaborazioni internazionali, in questo caso con il gruppo del prof. Miguel Aranda all'Università di Malaga, in Spagna. Questo gruppo di ricerca è uno dei leader mondiali nello studio dei cementi, dei calcestruzzi e dei meccanismi di idratazione. La candidata si è occupata del raffinamento strutturale dei dati di PDF del gel CSH (primo prodotto dell'idratazione del cemento).

Questa collaborazione ha portato a due pubblicazioni molto importanti (e molto citate):

Ana Cuesta, Jesus D. Zea-Garcia, Diana Londono-Zuluaga, Angeles G. De la Torre, Isabel Santacruz, Oriol Vallcorba, Monica Dapiaggi, Susana G. Sanfelix, and Miguel A. G. Aranda (2018).

Multiscale understanding of tricalcium silicate hydration reactions.

SCIENTIFIC REPORTS, 8, 9825

Ana Cuesta, Isabel Santacruz, Angeles G. De la Torre, Monica Dapiaggi, Jesus D. Zea-Garcia, and Miguel A. G. Aranda (2021)

Local structure and Ca/Si ratio in C-S-H gels from hydration of blends of tricalcium silicate and silica fume.

CEMENT AND CONCRETE RESEARCH, 143, 106405

Un altro interessante aspetto del total scattering e della struttura locale dei materiali cristallini si evidenzia nel confronto tra i risultati ottenuti con PDF e con EXAFS. Il confronto tra i dati di diffrazione e quelli spettroscopici era già stato ampiamente utilizzato nella linea di ricerca sulla espansione termica

negativa. Qui il discorso si amplia, mettendo in gioco la struttura locale e completa la fruttuosa collaborazione con il Dipartimento di Fisica dell'Università di Trento:

*P. Fornasini, R. Grisenti, M. Dapiaggi, G. Agostini, and T. Miyayaga (2017)*  
*Nearest-neighbour distribution of distances in crystals from extended X-ray absorption fine structure.*  
*JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS, 147(4), 044503*

*P. Fornasini, R. Grisenti, M. Dapiaggi, and G. Agostini (2021)*  
*Local structural distortions in SnTe investigated by EXAFS.*  
*JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER, 33(29), 295404*

#### *A4 - Applicazioni mineralogiche, gemmologiche e cristallografiche della diffrazione da polveri*

Durante la collaborazione con il Dipartimento di Chimica Fisica dell'Università degli studi di Pavia, la candidata ha dovuto affrontare tematiche strutturali nell'ambito delle soluzioni solide metastabili ottenute per Self-propagating High temperature Synthesis (SHS) o, più semplicemente, combustion synthesis. Tale metodo di sintesi è uno dei principali argomenti di ricerca del Dipartimento ed è una tecnica alternativa alla classica reazione tra polveri in condizioni isoterme. Lo studio di questi processi si è focalizzato sulla possibilità di formare soluzioni solide metastabili a struttura cubica o tetragonale di formula generale  $Zr(1-x)MxO(2-y)$ . Mediante SHS è stato possibile sintetizzare soluzioni solide a struttura cubica con contenuti di ferro e cobalto di circa il 10%, mentre rame e nichel non si sciolgono nella zirconia in modo apprezzabile. L'interesse per le soluzioni solide metastabili  $Zr(1-x)FexO(2-y)$ , e l'assenza di informazioni al riguardo nella letteratura ha stimolato uno studio approfondito della loro struttura. Tale studio è stato condotto mediante spettroscopia Mössbauer, Extended X-ray Absorption Fine Structure (EXAFS), X-ray Absorption Near Edge Structure (XANES) e diffrazione X facendo uso dei metodi diretti. La struttura è stata risolta a partire dal solo spettro di diffrazione da polveri supponendo la presenza dei soli Zr e O; a questo punto una Fourier difference ( $F_o - F_c$ ) ha evidenziato la presenza di densità elettronica residua al centro della cella elementare compatibile con la presenza di Fe (II) nella posizione interstiziale (0.5, 0.5, 0.5).

Attraverso le misure XANES è stato possibile individuare la presenza del ferro in due diversi stati di ossidazione, Fe(II) e Fe(III). L'occupazione del sito interstiziale, data la breve distanza di legame Fe-Zr misurata (2.64 Å), fornisce l'evidenza della formazione di un legame diretto Fe-Zr, confermato dalle misure EXAFS. I risultati sperimentali relativi a questo studio sono riassunti nella memoria:

*Ghigna, P., Spinolo, G., Anselmi-Tamburini, U., Maglia, F., Dapiaggi, M., Spina, G. e Cianchi, L.*  
*(1999)*

*Fe-Doped Zirconium Oxide Produced by Self-Sustained High-Temperature Synthesis: Evidence for an Fe-Zr Direct Bond.*

*Journal of the American Chemical Society, 121, 301-307*

L'interesse della candidata si è esteso, oltre alle possibili applicazioni della diffrazione X alla scienza dei materiali o alla mineralogia, anche a questioni metodologiche, in particolare per quanto riguarda l'accuratezza e l'affidabilità dei metodi di affinamento strutturale applicato a dati provenienti da diffrazione da polveri. Il lavoro si basa sul raffinamento di un numero statisticamente significativo di (almeno 50) spettri simulati, ottenuti dall'aggiunta di rumore casuale (avente distribuzione di Poisson) a uno spettro teorico ottenuto da un modello ben preciso. La struttura è quella dello spinello di nichel e alluminio ( $NiAl_2O_4$ ). Quando si effettua un raffinamento strutturale a partire da dati di diffrazione da polveri, è particolarmente interessante avere una qualche indicazione sulla validità del modello che si sta utilizzando per il raffinamento. Per questo motivo, lo spettro simulato con un certo modello (che chiameremo 'giusto') è stato raffinato utilizzando un modello 'sbagliato'. È stato verificato che il modello 'giusto' e il modello 'sbagliato' sui parametri termici sono indistinguibili dal punto di vista dei parametri statistici che indicano la bontà del raffinamento, mentre per quanto riguarda i fattori di scattering (riferiti agli atomi neutri nel modello 'giusto' e agli ioni nel modello 'sbagliato'), nel particolare caso della struttura studiata, il parametro GoF è molto più alto (circa un ordine di grandezza) nel caso del modello 'sbagliato'; ciò fornisce delle indicazioni preziose sulla validità del modello utilizzato per il raffinamento. I risultati di questa indagine sono presentati nella memoria:

*Dapiaggi, M., Anselmi-Tamburini, U. e Spinolo, G. (1998).*

*Computer simulation approach to reliability and accuracy in powder diffraction structure refinement.*  
*Journal of Applied Crystallography, 31, 379-387*

L'interesse della candidata è stato rivolto, nel corso degli anni, anche all'analisi quantitativa effettuata attraverso diffrazione X da polveri, raffinando gli spettri multifasici con il metodo Rietveld, accoppiato, in caso di presenza di amorfo, a una classica RIR (Reference Intensity Ratio). Il primo lavoro si riferisce alla quantificazione di un minerale pericoloso (cristobalite) nei gusti ceramici utilizzati per la fusione di piccoli oggetti in bronzo. Poiché si era in presenza di una notevole quantità di amorfo, si è proceduto alla quantificazione dello stesso attraverso l'introduzione di uno standard interno (metodo RIR). I risultati sono riassunti nella memoria:

*Rimoldi, B., Dapiaggi, M. e Artioli, G. (2001)  
Inquinamento da cristobalite nella produzione di piccoli particolari metallici,  
Giornale degli Igienisti Industriali, 26, 230-241*

M. Dapiaggi è da sempre interessata alle applicazioni della diffrazione da polveri e allo studio dei suoi vantaggi e dei suoi limiti. Negli ultimi due anni si è infatti occupata di studiare quale sia il limite di detezione della diffrazione da polveri e quali siano le condizioni strumentali più adatte a ottenere i migliori risultati per il riconoscimento delle fasi. I risultati sono stati pubblicati nella seguente memoria:

*Dapiaggi M., SALA M, ARTIOLI G, FRANSEN M.J. (2007).  
Evaluation of the phase detection limit on filter-deposited dust particles from Antarctic ice cores.  
ZEITSCHRIFT FÜR KRISTALLOGRAPHIE. vol. suppl. 26, pp. 73-78*

La necessità di studiare il limite di detezione in diffrazione da polveri su campioni depositati su filtro era dovuta alla collaborazione con l'Università di Milano-Bicocca per il lavoro di tesi di dottorato di ricerca di Marco Sala, su un progetto che riguarda lo studio mineralogico-cristallografico dei minerali presenti nel particolato raccolto nelle carote di ghiaccio antartico. Durante tale progetto, è stata notata la presenza di carbonati di calcio metastabili a temperatura ambiente, come ad esempio la ikaite, che è stabile fino a 8 °C; a temperatura più elevata essa si trasforma nella fase termodinamicamente stabile a temperatura ambiente, la calcite. La presenza di ikaite nel ghiaccio è stata dimostrata attraverso spettroscopia Raman e la presenza di piccolissime quantità di calcite dopo la fusione del ghiaccio è stata verificata attraverso diffrazione da polveri. I risultati di tale studio sono stati pubblicati nella seguente memoria:

*Sala M, Delmonte B, Frezzotti M, Proposito M, Scarchilli C., Maggi V, Artioli G, Dapiaggi M, Marino F, Ricci P C, De Giudici G. (2008)  
Evidence of calcium carbonates in coastal (Talos Dome and Ross Sea area) East Antarctica snow and firn: Environmental and climatic implications  
Earth and Planetary Science Letters, 271, 43-52*

Uno sviluppo metodologico ha riguardato il lavoro di tesi di dottorato di Andrea Bernasconi, che ha confrontato vari metodi di determinazione del contenuto di amorfo in una miscela cristallina, cercando le strategie migliori per la migliore accuratezza dei risultati. Tale lavoro è stato pubblicato nella memoria:

*Bernasconi, A., Dapiaggi, M., Gualtieri, A.F. (2014).  
Accuracy in quantitative phase analysis of mixtures with a large amorphous content. The case of zircon-rich sanitary-ware glazes  
Journal of Applied Crystallography, 47, 136-145*

Altre applicazioni delle tecniche della cristallografia e della mineralogia classiche hanno riguardato la relazione tra le proprietà elettriche e la struttura (e la microstruttura) di alcune perovskiti sostituite. In questo caso, si tratta di un lavoro interdisciplinare, legato alla scienza dei materiali, in cui le tecniche cristallografiche possono venire applicate e risultano di importanza fondamentale per la comprensione dei meccanismi in atto nelle applicazioni tecnologiche dei materiali oggetto di studio. I risultati di tale ricerca sono stati pubblicati nella memoria:

*Bassoli M, Buscaglia M.T, Bottino C, Buscaglia V, Molinari M, Maglia F, Parravicini, G, Dapiaggi M. (2008).  
Defect chemistry and dielectric properties of Yb<sup>3+</sup>:CaTiO<sub>3</sub> perovskite.  
Journal of Applied Physics, vol. 103, pp. 014104-1-014104-10*

Molto interessante dal punto di vista della ricerca di base è stato anche il lavoro sul confronto tra simulazioni di tipo static lattice e raffinamenti strutturali riguardanti il sito preferito di incorporazione di alcuni cationi nella struttura dei granati.

I risultati sono stati pubblicati nella memoria:

*Maglia F, Buscaglia V, Gennari S, Ghigna P, Dapiaggi M, Speghini A, Bettinelli (2006).  
Incorporation of Trivalent Cations in Synthetic Garnets A<sub>3</sub>B<sub>5</sub>O<sub>12</sub> (A = Y, Lu-La, B = Al, Fe, Ga).*

La collaborazione con l'Università degli Studi di Pavia ha portato anche a una ulteriore collaborazione scientifica, cominciata nel 2005 e ancora attiva, con il CNR-IENI (sede di Genova). Da allora, la collaborazione ha portato a varie pubblicazioni scientifiche su riviste importanti, a elevato impact factor. I lavori hanno riguardato la chimica e la fisica di materiali a struttura perovskitica, come ad esempio i titanati di bario. Il primo di questi lavori riguarda la sintesi di nanotubi di titanato di bario attraverso una reazione allo stato solido. Tale metodo è convenzionale per le normali sintesi di materiali microcristallini, ma del tutto innovativo per quanto riguarda i nanotubi.

Il lavoro è stato pubblicato nella seguente memoria:

*Buscaglia, M.T., Harnagea, C., Dapiaggi, M., Buscaglia, V., Pignolet, A., Nanni, P. (2009).  
Ferroelectric BaTiO<sub>3</sub> nanowires by a topochemical solid state reaction  
Chemistry of Materials, 21, 5058-5065*

M. Dapiaggi si è occupata anche dell'applicazione della diffrazione da polveri alla gemmologia: in particolare si è occupata del riconoscimento e della caratterizzazione di giade e turchesi sintetici e naturali. Tali risultati sono stati pubblicati nelle seguenti memorie:

*Adamo I, Pavese A, Prospero L, Diella V, Ajo D, Dapiaggi M, Mora C, Manavella F, Salusso F, Giuliano V. (2006).*

*Characterization of omphacite jade from the Po valley, Piedmont, Italy.  
The Journal of Gemmology, vol. 30, pp. 215-226*

#### E

*Pavese A, Prospero L, Dapiaggi M (2005).  
Use of IR-spectroscopy and diffraction to discriminate between natural, synthetic and treated  
turquoise, and its imitations.  
Australian Gemmologist, vol. 22, pp. 366-371*

Le soluzioni solide e gli effetti delle sostituzioni isomorfe sulle proprietà termiche, strutturali e microstrutturali è argomento ancora molto dibattuto nella mineralogia moderna. Attraverso diffrazione ad alta risoluzione con luce di sincrotrone, è stato possibile valutare e quantificare il microstrain presente in una soluzione solida piropo-grossularia in funzione del contenuto di Ca nel sito dodecaedrico. Il risultato è estremamente interessante, in quanto l'andamento del root mean strain in funzione della composizione è sovrapponibile all'andamento dell'entalpia di miscela di eccesso. Gli effetti energetici della sostituzione risultano quindi legati alla presenza di strain (cioè di deformazioni locali) nell'intorno del sito coinvolto nella sostituzione. I risultati sono stati pubblicati nella memoria:

*Dapiaggi M., Geiger C. A., Artioli G. (2005).  
Microscopic strain in synthetic pyrope-grossular solid solutions determined by synchrotron X-ray  
powder diffraction at 5 K: the relationship to enthalpy of mixing behavior.  
American Mineralogist, vol. 90, pp. 506-509*

Un altro interessante lavoro mineralogico riguarda la cristallografia della julgoldite-Fe<sup>3+</sup>, termine di solo ferro della famiglia mineralogica delle pumpellyiti. La diffrazione da polveri da dati da sincrotrone è stata accoppiata alla spettroscopia Mössbauer: attraverso i risultati delle due tecniche è stato possibile valutare la distribuzione cationica tra i vari siti. I risultati sono stati pubblicati nella seguente memoria:

*Artioli G, Geiger C.A., Dapiaggi M. (2003)  
The crystal chemistry of julgoldite-Fe<sup>3+</sup> from Bombay, India, studied using synchrotron X-ray powder  
diffraction and <sup>57</sup>Fe Mössbauer spectroscopy  
American Mineralogist, 88, 1084-1090*

A partire dai già citati progetti finanziati dalla Fondazione Cariplo, sono stati effettuati tutta una serie di studi sui materiali (principalmente zirconia e ceria, variamente sostituite) nanocristallini e sulle loro proprietà elettriche.

Sono state inoltre studiate le variazioni strutturali dei materiali densificati, ovvero portati ad elevata densità senza provocare grande crescita dei grani, attraverso la spark plasma synthesis.

Per quanto riguarda la zirconia nanocristallina non drogata, essa è stata sintetizzata nella sua forma tetragonale e poi densificata; sono state prese in considerazione varie caratteristiche del materiale finito e vari parametri durante la sintesi delle nanopolveri.

Tali lavori sono stati pubblicati nelle memorie:

*Maglia, F., Dapiaggi M., Tredici, I., Maroni, B., Anselmi-Tamburini, U. (2010).*

*Synthesis of fully dense nanostabilized undoped tetragonal zirconia.*  
*Journal of the American Ceramic Society, 93, 2092-2097*

e

Tredici, I.G., Maglia, F., Dapiaggi M., Spinolo, G., Anselmi-Tamburini, U. (2012).  
*Synthesis of bulk tetragonal zirconia without stabilizer: the role of precursor nanopowders*  
*Journal of the European Ceramic Society, 32, 343-352*

Un altro materiale preso in considerazione per i progetti della Fondazione Cariplo è stato l'anatasio. Anche in questo caso, si è trattato di studiare le variazioni strutturali indotte dalla densificazione e le proprietà elettriche del prodotto finale.

Il lavoro è stato pubblicato nella seguente memoria:

*Maglia, F., Dapiaggi M., Tredici, I.G., Anselmi-Tamburini, U. (2012).*  
*Synthesis of fully dense anatase TiO<sub>2</sub> through high pressure field assisted rapid*  
*Nanoscience and nanotechnology letters, 4, 205-208*

La ceria nanocristallina, drogata con vari quantitativi di samario (da 2 a 30 at %) e successivamente densificata, è stata oggetto di uno studio sulle proprietà di trasporto degli ioni ossigeno. Il lavoro è stato pubblicato nella seguente memoria:

*Maglia, F., Farina, F., Dapiaggi M., Tredici, I.G., Anselmi-Tamburini, U. (2012).*  
*Transport properties in bulk nanocrystalline Sm-doped ceria with doping content between 2 and 30*  
*at%*  
*Solid state ionics, 225, 412-415*

Sempre in collaborazione con il Dipartimento di Chimica Fisica dell'Università degli Studi di Pavia, un argomento legato alla procedura di densificazione di materiali nanometrici risulta quello sul cosiddetto LSGM (ossido misto di La, Sr, Ga, Mg), del quale sono state misurate le proprietà elettriche, strutturali e microstrutturali. Il lavoro è stato pubblicato nella memoria:

*Maglia, F., Anselmi-Tamburini, U., Chiodelli, G., Camurlu, H.E., Dapiaggi, M., Munir, Z.A. (2009).*  
*Electrical, Structural and microstructural characterization of nanometric La<sub>0.9</sub>Sr<sub>0.1</sub>Ga<sub>0.8</sub>Mg<sub>0.2</sub>O<sub>3-δ</sub>*  
*(LSGM) prepared by high-pressure spark plasma sintering*  
*Solid State Ionics, 180, 36-40*

Un ulteriore tema di ricerca, sviluppato in collaborazione con il Dipartimento di Chimica Fisica dell'Università degli Studi di Pavia, riguarda la formazione di film sottili di ZnO a partire dalla decomposizione termica di idrogel metallici, nel quale la candidata si è occupata del setup del diffrattometro da polveri, al fine di ottenere dei buoni dati di diffrazione da film sottili. Il lavoro è stato pubblicato nella seguente memoria:

*Tredici, I.G., Resmini, A., Pin, S., Ghigna, P., Rovetta, T., Patrini, M., Rotiroti, N., Dapiaggi M., Anselmi-Tamburini, U. (2013).*  
*Mechanisms of zinc oxide nanocrystalline thin film formation by thermal degradation of metal-loaded hydrogels*  
*Journal of Physical Chemistry C, 117, 25108-25117*

L'utilizzo della tecnica di spark plasma sintering ha portato anche a una collaborazione internazionale prestigiosa, con il prof. Michael A. Carpenter del Dept. Of Earth Sciences della Cambridge University. M. Dapiaggi ha svolto un periodo di ricerca presso il gruppo del prof. Carpenter, che è sfociato nella memoria:

*L. Pagliari, M. Dapiaggi, F. Maglia, T. Sarkar, A. K. Raychaudhuri, T. Chatterji, and M. A. Carpenter (2014).*  
*Strain heterogeneity and magnetoelastic behaviour of nanocrystalline half-doped La, Ca manganite, La<sub>0.5</sub>Ca<sub>0.5</sub>MnO<sub>3</sub>.*  
*JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER, 26(43), 435303*

Un'altra collaborazione internazionale si è sviluppata con un gruppo di chimici fisici Sloveni, interessati al rapporto struttura proprietà di alcuni materiali ceramici a base di niobio. La collaborazione si è esplicitata nella memoria (e nella successiva correzione):

*Jitka Hrescak, Goran Drazic, Marco Deluca, Iztok Arcon, Alojz Kodre, Monica Dapiaggi, Tadej Rojac, Barbara Malic, and Andreja Bencan (2017)*  
*Donor doping of K<sub>0.5</sub>Na<sub>0.5</sub>NbO<sub>3</sub> ceramics with strontium and its implications to grain size, phase composition and crystal structure.*

(correzione) Jitka Hrescak, Goran Drazic, Marco Deluca, Iztok Arcon, Alojz Kodre, Monica Dapiaggi, Tadej Rojac, Barbara Malic, and Andreja Bencan. Donor doping of  $K_{0.5}Na_{0.5}NbO_3$  ceramics with strontium and its implications to grain size, phase composition and crystal structure (vol 37, pg 2073, 2017). JOURNAL OF THE EUROPEAN CERAMIC SOCIETY, 37(8):3015

La candidata ha anche varie collaborazioni all'interno del Dipartimento di Scienze della Terra, di tipo più votato alla geologia che alla mineralogia. Il gruppo di sedimentologia del dipartimento si avvale spesso di queste collaborazioni: questo ha portato ad alcune partecipazioni a congressi e alla pubblicazione della memoria:

Zembo, I., Trombino, L., Bersezio, R., Felletti, F., Dapiaggi, M. (2012).

*Climatic and tectonic controls on pedogenesis and landscape evolution in a quaternary intramontane basin (Val D'Agri Basin, Southern Apennines, Italy)*  
*Journal of Sedimentary research*, 82, 283-309

Il Gruppo di sedimentologia del Dipartimento ha anche collaborato con la candidata per la caratterizzazione delle materie prime ( i calcari, principalmente) per la produzione di clinker. Le loro caratteristiche petrografiche e microstrutturali portavano a diversi risultati (e a diverse rese) nella produzione di clinker. Il lavoro è stato pubblicato nella memoria:

Matteo Galimberti, Nicoletta Marinoni, Giovanna Della Porta, Maurizio Marchi, and Monica Dapiaggi (2017)

*Effects of limestone petrography and calcite microstructure on OPC clinker raw meals burnability.*  
*MINERALOGY AND PETROLOGY*, 111(5):793-806, OCT 2017.

M.Dapiaggi negli ultimi anni ha iniziato una proficua collaborazione con i paleontologi del Dipartimento, sia con il gruppo della Dott. Crippa, per la quantificazione dei polimorfi del carbonato di calcio in varie tipologie di fossili, sia con il gruppo della Prof. Bottini per l'analisi chimica in alta risoluzione di nanofossili.

Nel primo caso, sono stati pubblicati due lavori:

Gaia Crippa, Giovanni Pasinetti, and Monica Dapiaggi (2020)

*How did the carrier shell xenophora crispa (Konig, 1825) build its shell? evidence from the recent and fossil record.*

*LETHAIA*, 53(4):439-451

Gaia Crippa, Silvia Lischi, Andrea Chiari, Monica Dapiaggi, and Mauro Cremaschi (2023).

*Discovering fire events in the has1 settlement on the dhofar coast (oman) by a multi-methodological study of mollusk shells.* *QUATERNARY RESEARCH*, 113:105-121

Nel secondo caso, il lavoro di ricerca si è svolto presso la linea ID16B del sincrotrone ESRF, dove sono stati analizzati, in alta risoluzione (50 nm), parecchi esemplari di coccoliti, rivelando interessanti novità sulla distribuzione spaziale di alcuni elementi in traccia. Il lavoro è stato pubblicato nella seguente memoria:

Cinzia Bottini, Monica Dapiaggi, Elisabetta Erba, Giulia Faucher, and Nicola Rotiroti (2020).

*High resolution spatial analyses of trace elements in coccoliths reveal new insights into element incorporation in coccolithophore calcite.*  
*SCIENTIFIC REPORTS*, 10(1), JUN 17 2020.

L'ultimo lavoro di questo elenco è una collaborazione industriale, perché ben rappresenta ed esemplifica il lavoro di ricerca degli ultimi anni: i dati vengono dal sincrotrone ESRF, è un'applicazione del concetto di economia circolare ed è un perfetto esempio di quello che negli ultimi anni si tende a chiamare 'mineralogia industriale'. Il lavoro riguarda la quantificazione delle varie forme cristalline dell'ossido di nichel in rifiuti industriali da utilizzare come materie prime seconde. Il NiO è un materiale cancerogeno e mutageno e deve quindi essere eliminato nelle materie prime seconde, prima del loro riutilizzo. Le analisi chimiche forniscono il nichel totale come nichel ossido, ma non consentono la sua speciazione (ovvero se è presente come NiO o come, per esempio  $NiAl_2O_4$  o come amorfo). Inoltre, la quantità massima di nichel che la legge consente per il riutilizzo del rifiuto è di 1000 mg/kg di NiO. Il lavoro riguarda la speciazione del nichel, la determinazione del suo detection limit (come NiO e come  $NiAl_2O_4$ ) e la sua quantificazione. Il lavoro è pubblicato nella memoria:

Monica Dapiaggi, Marco Alloni, Riccardo Carli, Nicola Rotiroti, and Giorgia Confalonieri (2021).  
*Quantification of classified nickel species in spent FFC catalysts.*  
*WASTE AND BIOMASS VALORIZATION*, 12(12, SI):6513-6521, DEC 2021.

## **D. ATTIVITÀ GESTIONALI, ORGANIZZATIVE E DI SERVIZIO**

**INCARICHI DI GESTIONE E AD IMPEGNI ASSUNTI IN ORGANI COLLEGIALI E COMMISSIONI, PRESSO RILEVANTI ENTI PUBBLICI E PRIVATI E ORGANIZZAZIONI SCIENTIFICHE E CULTURALI, OVVERO PRESSO L'ATENEO O ALTRI ATENEI**

Presso l'Università degli Studi di Milano

- Presidente della Commissione Paritetica Docenti Studenti (CPDS) del Collegio Didattico Interdipartimentale di Scienze Naturali (dal 2021)
- Membro della Commissione Paritetica Docenti Studenti (CPDS) del Collegio Didattico Interdipartimentale di Scienze Naturali (dal 2018)
- Membro del Collegio dei Docenti del Dottorato di Ricerca in Scienze della Terra (dal 2005 a oggi)
- Membro della giunta del Dottorato di Ricerca in Scienze della Terra dal 2015 al 2021
- Membro della Commissione Formazione Internazionale del Dipartimento di Scienze della Terra dal 2021 (dal 2015 al 2020 membro della Commissione Erasmus, ora incorporata nella Commissione sopra citata)
- Membro della Commissione valutazione bandi, art 45 e fondi tutorato del CDI di Scienze Naturali dal 2018
- Membro della Commissione Orari per il corso di Laurea in Scienza Geologiche dal 2014 al 2020

Presso l'Associazione Italiana di Cristallografia

- Eletta per due cicli (6 anni) nella Commissione Strumentazione e Calcolo (chair per il secondo triennio) nel periodo 2015-2020

**PARTECIPAZIONE A PROCEDURE DI VALUTAZIONE COMPETITIVE NAZIONALI E INTERNAZIONALI**

- Membro del Recruitment Board di ANR (Agence Nationale de la Recherche )-France 2021-2022
- Membro del Recruitment Advisory Board Innova-XN (France) 2020-2021
- Membro della Commissione di selezione per un beamline scientist per la sorgente di luce sincrotrone Sesame (Giordania) nel 2022
- Membro del panel di selezione di ESRF (European Synchrotron Radiation Facility) dal 2016 al 2020
- Membro del panel di selezione di ISIS (Spallation Neutron Source, UK) dal 2018 al 2022
  
- Membro della Commissione di Valutazione per una Gara Aperta per l'acquisto di un diffrattometro a raggi X da polveri presso l'Università di Torino nel 2019
- Membro della Commissione per il Reclutamento di un Ricercatore a tempo determinato di tipo A presso l'Università degli Studi di Parma nel 2018
- Membro della Commissione per una procedura di Valutazione (passaggio RTD-B a professore di seconda fascia) presso l'Università degli Studi di Milano nel 2018
- Membro della Commissione per una procedura di Valutazione (passaggio RTD-B a professore di seconda fascia) presso l'Università degli Studi di Padova nel 2022

Data

31 luglio 2023

Luogo

Varallo Pombia