



CONSIGLIO NAZIONALE DELLE RICERCHE
Istituto di Chimica dei Composti OrganoMetallici – ICCOM

Via Madonna del Piano s.10
50019 Sesto Fiorentino (Firenze), Italy
Tel. 0039 055 5225884 FAX 0039 055 5225203

Dr. Carlo Mealli (Dirigente di Ricerca)
e-mail mealli@iccom.cnr.it

25 Febbraio 2010

Caro Piero,

grazie per avere sollevato una questione di interesse generale sulla cristallografia. Il quesito, se si sia arrivati o meno ad un capolinea non è del tutto nuovo e può essere esteso alla chimica stessa, che pure sembra perdere peso come scienza di base. Su questo punto, c'è un dibattito ancora aperto sulla List della Società Chimica Italiana ed anch'io, come cristallografo/chimico, desidero esprimere il mio punto di vista. La cristallografia resta per me un punto di riferimento, anche se ho da tempo trovato nella chimica teorica, non un interesse alternativo, bensì uno strumento per capire le strutture tridimensionali che determiniamo e poi confrontiamo con quelle di banche-dati come il Cambridge, che è una vera e propria miniera d'informazione cui attingere. Studiando il modo come atomi e molecole si organizzano nello spazio attraverso un confronto orizzontale, si ha un'efficiente chiave anche per capire la loro chimica. Il teorico puro utilizza invece i postulati di fisica e matematica per ricostruire *ab-initio* l'assetto strutturale di composti e materiali. Questa è una forma di *riduzionismo* che, anche grazie anche a potenti mezzi di calcolo, permette di simulare bene sistemi reali anche di grandi dimensioni. Accertato quindi che teoria e computer sembrano conoscere i presupposti delle interazioni tra atomi, come umani vorremmo sfruttare concetti intuitivi per predire sulla carta struttura e funzionalità. L'esperienza mi dice che i confronti di strutture, uniti all'analisi delle funzioni d'onda associate, è produttivo e stimola nuove idee.

Penso che il moderno cristallografo, al di là dello sviluppo delle metodologie investigative, abbia come obiettivo non la semplice struttura del materiale studiato ma anche le proprietà che ne derivano. La determinazione delle relazioni struttura/attività ha fortemente contribuito al generale sviluppo di vasti settori come la conoscenza dei processi geologici, la vita, la salute, l'energia e altri ancora. Gli obiettivi sono praticamente inesauribili e perciò la cristallografia resta viva e vitale e continuerà a svolgere un ruolo fondamentale con tecniche, che sono ancora perfettibili. Le conoscenze di stereochemica e funzionalità degli assemblaggi atomici porteranno ancora innovazione per il controllo dei fenomeni di tutta la materia che ci circonda. Per questo sarebbe imperdonabile allentare gli sforzi per l'educazione dei giovani sui fondamenti della cristallografia. Non posso quindi che dissentire dalla tua lapidaria conclusione "*la cristallografia è morta*". Se ciò fosse vero, parafrasando Woody Allen, si potrebbe anche dire che nemmeno "*la chimica si sente troppo bene*", dal momento che si sente spesso dire che le tipologie di composti e reazione sono quasi tutte note. Ma non credo affatto che sia così, e penso che tali conclusioni siano ispirate dall'idea subdola, ma al momento purtroppo vincente, che la ricerca di base sia quasi obsoleta e che solo le scoperte con immediata applicazione contribuiscano al progresso di welfare ed economia. Questo passaggio è in ogni caso difficile ed finisce inoltre con lo scoraggiare le esplorazioni accademiche con un conseguente impoverimento culturale.

Ogni ricercatore creativo ha l'intimo desiderio di fare prima o poi scoperte pionieristiche, che purtroppo sono rare. Il mancato raggiungimento di questo obiettivo è causa di sofferenza intima, ma sarebbe errato concluderne che esso dipende da una mancanza di genio oppure che sta lavorando in un campo oramai sterile. Ancora più negativo è l'invito a trasformarsi in semplici esecutori di tecniche, seppur avanzate, ma mirate alla sola produttività. Secondo me, si può essere ancora innovativi muovendoci in territori di ricerca già battuti. Se molto pochi sono i veri *pionieri*, i

colonizzatori hanno un loro importante ruolo. Per fertilizzare un settore, c'è bisogno di grande dedizione e di un adeguato background culturale, che ci porti a sperimentare vantaggiosi sentieri alternativi. Il limitarsi a calpestare quelli noti alla fine cancella il sentiero stesso. E qui, concordo pienamente con te riguardo alla differenziazione tra *training*, ed *education*. Una cosa è allenare i giovani a sfruttare al meglio una tecnica e raggiungere un'alta specializzazione; un'altra cosa è educarli a pensare in maniera indipendente e renderli capaci di fare ricerche innovative.

Nello specifico della cristallografia, mi sembra di trovare nelle tue considerazioni l'implicito messaggio che ci siano rimasti ben pochi orizzonti, il che induce a un ridimensionamento della proposta educativa ed cancellazione di insegnamenti e cattedre corrispondenti. Se si sta andando in questa direzione, le associazioni cristallografiche nazionali ed internazionali dovrebbero comunque intensificare gli sforzi per assicurare esse stesse la diffusione di una disciplina comunque complessa. Bisogna evitare che la cristallografia diventi un mero servizio di fornitura-dati ad altre scienze, perdendo creatività e sviluppo di nuove idee. Sapendo che tu stesso sei un ricercatore appassionato e competente, mi è persino venuto il dubbio che le tue conclusioni negative non siano altro che una forma di scongiuro verso scenari paurosi e da combattere.

Tornando ai chimici, secondo un analogo registro, i ricercatori finiranno per essere utilizzati nella ripetizione sistematica di tante reazioni simili al fine, per esempio, di trovare empiricamente il miglior sostituto per l'ottimizzazione di un processo. Invece, il ricercatore motivato (chimico, ma anche cristallografo) dovrebbe ricercare nuovi ragionati obiettivi, magari spaziando in campi limitrofi, come ad esempio la biologia molecolare. Ma per questo sono fondamentali le conoscenze di base, soprattutto sulla capacità di atomi e molecole di interagire tra sè. Non si può conseguire un premio Nobel avendo trovato soluzioni a problemi biochimici a partire dalla struttura, essendo convinti nell'intimo che le proprie discipline di base (chimica e cristallografia), siano ormai obsolete. A questo proposito mi colpisce la tua frase che uno come Kornberg avrebbe solo ringraziato in maniera ossequiosa i cristallografi per averlo aiutato ma senza sentirsi davvero parte della loro comunità.

Chimica e cristallografia hanno tuttora una dignità tale da poter essere al centro di futuri progetti scientifici. Giudico pertanto una grossa mancanza il fatto che la roadmap europea per la ricerca scientifica del futuro (sono ben 48 i progetti approvati) non contenga alcun titolo che richiami specificatamente queste discipline. Secondo i promotori queste sono già inserite d'autorità al servizio ad altri settori, come le scienze della vita, l'ambiente, l'energia, etc. Ma lo studio a livello atomico della realtà materiale che ci circonda sta alla base di tutto e l'attenzione ad esso non può essere ridimensionata, pena un generale inaridimento.

Per sostenere che la cristallografia ha perso percezione dall'esterno, tu sottolinei come i costruttori di apparecchiature si affidino sempre più al concetto di "utilizzabile anche dai non esperti". Ovviamente è interesse del costruttore farsi vanto delle funzionalità applicative e la stessa politica dei prezzi rientra in una logica commerciale per portare la cristallografia al servizio di tutti. Da qui non si può automaticamente concludere che gli spazi per gli esperti siano ormai chiusi. Al contrario, dato il vasto carattere multidisciplinare, la cristallografia è un chiavistello per aprire porte in tante diverse discipline scientifiche. Se si sa leggere come gli atomi si leghino tra loro e si organizzino nelle strutture possiamo dire la nostra su qualsiasi disciplina scientifica che si occupi della materia. Personalmente, ho acquistato coscienza di tutto questo partecipando a lungo alle attività della cristallografia internazionale. Avendo organizzato il congresso mondiale IUCr 2005, sono entrato d'ufficio anche nei comitati di programma dei congressi 2002 e 2008 ed ho visto un incredibile panorama dei più svariati interessi. Perciò mi sento fiero di avere dato il mio piccolo contributo ad una comunità scientifica con un così ampio ventaglio culturale. Lungi dall'esaurirsi, la cristallografia sta prospettando molte nuove opportunità. Per esempio, con i sincrotroni di terza generazione e le linee FEL si è aperta la possibilità di determinare la struttura non dal cristallo ma dalla particella isolata. Nel 2005 a Firenze avemmo la possibilità di ascoltare la pionieristica conferenza di David Sayre sull'argomento. Né si può dimenticare che si è enormemente potenziata l'applicazione di tecniche cristallografiche a sistemi sempre più complessi, nel campo biologico e di

caratterizzazione/design di nuovi materiali. Con tecniche *in-situ* e *time resolved*, spesso associate a quelle spettroscopiche, è ora possibile studiare effetti cinetici di estremo interesse per la chimica e la biochimica. In molti sincrotroni esistono sofisticate *beamlines* di diffrazione, microdiffrazione e small angle scattering che permettono studi avanzati. E potrei continuare.

Un'ulteriore critica da te sollevata riguarda l'entusiasmo manifestato (anche da me come presidente AIC) per i tre premi Nobel della chimica 2009, che hanno dimostrato come sono fatte e funzionano le fabbriche delle proteine, cioè i ribosomi. Ma credi davvero che questi scienziati avrebbero ottenuto tali risultati senza usare la cristallografia ad alto livello? Siccome per me non è credibile, lasciami gioire per questo risultato che è prestigioso per tutta la nostra comunità.

Ho trovato i contenuti degli ultimi congressi a cui ho partecipato (IUCr di Osaka, ECA di Istanbul ed AIC di Salerno) culturalmente molto interessanti con avanzati risultati prodotti da ricercatori competenti e motivati sfruttando dati cristallografici. D'altra parte, come tu fai notare, esiste anche la gente meno meritevole, come i sedicenti cristallografi che hanno fatto carriera scientifica sfruttando la sola tecnica e limitandosi a fornire puri servizi ad altre categorie di ricercatori. Tuttavia, un comportamento opportunistico non è un problema legato alla disciplina semmai alla nostra società che non riesce a fare valutazioni appropriate dei vari contributi ai fini di finanziamento e carriera. Permettimi, ma ciò non deve assolutamente screditare la disciplina nel suo insieme.

Chiudo con un breve commento sui tuoi rilievi alla mia elezione a Presidente AIC ed, in particolare, che non sarei più da tempo un cristallografo ma un chimico-teorico. A parte il mio impegno continuato per la comunità, ho cercato finora di illustrare cosa significhi trovare nelle strutture il mio pane scientifico quotidiano. Trovo altresì che uno studio associato delle funzioni d'onda aiuti a capire meglio i problemi strutturali della materia e quindi della chimica in senso lato. A questo proposito lasciami citare un nostro recente ed apprezzato articolo (*Inorg. Chem.* 2009, 48, 3840) ispirato dagli insensati aspetti elettronici di due distinte molecole già pubblicate. Ci siamo resi conto che i problemi erano causati da gravi errori tecnici commessi nelle determinazioni strutturali ai raggi-X (vedi nel nostro articolo le referenze ai lavori su *Inorg. Chem.* ed *Organometallics*). Quindi, per provare la correttezza della nostra intuizione, abbiamo ripetuto con cura gli studi cristallografici riuscendo ad indicare esattamente l'origine degli errori fatti. Oggi sembra andar di moda il produrre strutture false (vedi *Acta Cryst.* E66, e1-e2, 2010), ma nel nostro caso la buona fede degli autori non è da mettere in discussione. In ogni caso credo che il nostro background combinato di chimica e cristallografia sia valso a identificare la criticità di certi risultati pubblicati ed offrire per essi una soluzione adeguata.

Cordiali saluti.
Carlo Mealli