

Cari colleghi

Recentemente il collega Piero Macchi ha reso pubblica una sua lettera a Carlo Mealli, Presidente dell' AIC, nella quale ha pronosticato, nientemeno, la prossima *morte della cristallografia*. Non ho capito bene la "diagnosi" del male; la "prognosi" è decisamente infausta. Macchi è forse alquanto pessimista; pone tuttavia un problema molto serio e si augura una ampia discussione sull'argomento.

Vorrei raccogliere l'invito di Macchi con un mio contributo, basato su riflessioni non recenti, che ho a lungo tenuto per me.

Il problema posto da Macchi non riguarda, credo, solo la cristallografia, ma anche più o meno tutte le discipline che sono nello stesso tempo "scienza" e "tecnica". Tra le discipline tradizionali ricordo la geometria: Euclide era uno "scienziato" ma la geometria era ben nota agli agrimensori egizi (che conoscevano, a quanto pare, il teorema di Pitagora ben prima di costui). Nulla di male; è evidente però che misurare i campi coltivati avvalendosi della geometria non è *scienza* ma *tecnica* (ovvero, se si preferisce, *scienza applicata*). La geometria come scienza è un insieme di "verità" stabilite partendo da postulati e definizioni; questa collezione di "verità" (i teoremi) non può essere infinita; la scienza prima o poi si esaurisce. In geometria ciò non è accaduto, credo, solo grazie alla scoperta delle geometrie non Euclidee. A parte, ovviamente, la geometria analitica.

La storia della cristallografia (o se preferite della diffrattometria) non è molto diversa salvo il fatto importante che la cristallografia, vista come scienza, non è fatta solo di definizioni e teoremi ma anche di metodologie sperimentali e di metodi numerici per elaborare le misure. Il suo sviluppo da Laue in poi è legato allo sviluppo di strumentazione sempre più perfezionata e alla sofisticazione dei metodi di analisi numerica (assistiti dai computer). È inevitabile che se cessa la produzione di strumenti nuovi e cessa lo sviluppo di metodi di analisi numerica nuovi si arriva alla fine della "scienza" per esaurimento. Io non ne farei tanto un dramma; anche senza nuovi apporti scientifici la cristallografia resta un formidabile strumento per indagare sulla "natura delle cose". Di cose da indagare ce ne sono tante, come esistono tanti campi coltivati da misurare. L'osservazione della collega Angiola Chiesi Villa che ora anche uno studente è in grado di risolvere una struttura è deprimente per chi ha vissuto una vita a fare questo, non mi sembra però il caso di piangersi su. Cari cristallografi lasciate che le strutture le risolvano gli studenti; voi occupatevi di cose più serie.

La vera questione, secondo me è un'altra: siamo già alla "saturazione" della scienza cristallografica o non ancora? Non parlo della "tecnica", che ha davanti a sé un futuro praticamente illimitato, essendo tale il numero delle sostanze cristallizzabili, ma appunto della "scienza". Esiste ancora uno spazio per fare cose nuove o no? La mia personale opinione è che attraversiamo una fase di stagnazione, ma non siamo affatto alla saturazione.

Spazio per fare cosa? Qui sta il punto! Va chiarita anzitutto la definizione di cristallografo, nel senso di "scienziato" (cosa faccia un cristallografo "tecnico" credo sia chiaro a tutti: indaga sulle strutture cristalline con gli strumenti ed i metodi messi a punto in precedenza, pubblicando noiosi articoli al riguardo). Fare "scienza", secondo me, significa invece

innovare inventando nuovi strumenti e nuovi metodi, o almeno modificare e perfezionare quelli esistenti.

Qui occorre anche fare chiarezza su un punto cruciale e molto importante: innovare vuol dire anche rivedere criticamente i metodi "consolidati", eventualmente rimuovendoli se sbagliati. Secondo me è bene che uno "scienziato" sia un po' "eretico" ed eviti la accettazione supina (o prona, se preferite) delle idee altrui. Mentre nelle scienze matematiche le verità tendono ad essere definitive e immutabili, in cristallografia non è così, almeno per quanto concerne di metodi di elaborazione. Dirò qualcosa più avanti su alcune di queste cose.

A titolo personale, sul fronte degli strumenti non vedo un gran futuro. Cosa c'è ancora da fare: trovare il modo di misurare lo spettro di diffrazione in pochi secondi? Far diffrangere singole molecole? Quali altri strumenti sono necessari o desiderabili? Secondo me esiste carenza solo di strumenti molto particolari, per esempio quelli per studiare le fibre. Si tratta comunque di un segmento molto limitato (e difficile). Auspicare che tutti si buttino nelle fibre non mi sembra il caso. Lo sviluppo di strumenti per lo studio dei cristalli in condizioni "estreme" (di temperatura e pressione) pure rappresenterebbe un trend valido. Naturalmente il progresso sul piano strumentale è anche ciò che modifica l'esistente rendendolo più efficiente, più economico e più affidabile. In ogni caso, le sedi più adatte allo sviluppo di nuovi strumenti sono i grandi centri (come ESRF) e le industrie.

Sui metodi di elaborazione (ovviamente usando computer) c'è invece, a mio giudizio, parecchio spazio per innovare (e criticare). I problemi aperti sono quelli difficili: molti parametri, dati pochi e sparsi (comprendo nella categoria le proteine). Si sente il bisogno, secondo me, di inventare procedure nuove, ma anche quello di mandare al macero procedure sbagliate. Nel mio piccolo, credo di aver dato qualche contributo critico, tra la generale indifferenza. A volte penso che non è tanto difficile fare cose nuove, quanto spiegarle al prossimo e persuadere che certi studiosi possono anche avere sbagliato, cosa imbarazzante quando trattasi di defunti, che non possono difendersi in prima persona (ci sono in giro procedure sbagliate, o almeno dubbie, vecchie di 50 anni). Fare lavori critici sulle procedure consolidate è cosa facile a dirsi, ma difficile a farsi, particolarmente per le procedure in voga da poco tempo.

E' ovvio che per demolire una procedura consolidata occorre come prima cosa capirla. Purtroppo si è andata affermando una deprimente tendenza di scrivere articoli fatti apposta per non essere capiti. Il fine ultimo sembra essere "stupire il lettore" rimuovendo dalla sua mente ogni velleità di dissentire. A questo si aggiunge - è una mia opinione - una deplorable timidezza nel criticare i metodi attuali ed una fiducia fuori misura nelle procedure più accorsate, "firmate" da grandi nomi: conviene fare così perché lo dice quel grande. A dire il vero, forse sto scoprendo l'acqua calda: la deplorable abitudine di fare scienza evocando antichi padri (vedi ad es. Aristotele) esiste da tempo, torna in auge nei periodi di decadenza e fa solo guai.

Pubblicare eresie è un mestiere difficile. Si scatena contro tutto la potente casta della IUCr. Ecco un suggerimento per il futuro: facilitare la vita agli eretici, creando per esempio un rivista del tipo *Heretical Ideas in Crystallography*, dove uno possa esprimere le sue opinioni, magari, perché no, affiancate e confrontate a quelle antagoniste sostenute da un

adatto "avvocato del diavolo" nominato dall'editore. Le eresie sono tuttavia poche; forse può bastare un piccola sezione di una rivista esistente.

Tornando alla "scienza cristallografica" e alla sua stagnazione, diciamo la verità: quasi nessuno se ne frega; il popolo vive di rendita collezionando strutture inutili e pubblicazioni noiose e ripetitive.

Dopo aver tanto parlato di eresie sarebbe doveroso (augurandomi di non imbartermi in un novello Torquemada) di elencarne qualcuna, anche per non passare per uno che predica bene e razzola male. Però non desidero affatto che questo mio contributo degeneri in una esibizione personale. Le eresie sono comunque tre; due sono documentate in pubblicazioni, la terza è *in pectore*; gli argomenti sono: 1) la convenienza di trattare tutti i problemi difficili usando coordinate interne *strettamente non-ridondanti*, 2) la convinzione che i *restraints* (usati da tutti a piene mani) siano una enorme boiata, 3) che le proteine possono essere benissimo raffinate con il metodo dei minimi quadrati, qualora si usino come variabili *solo gli angoli di torsione*. Su questo tema ho lavorato "in segreto"; se interessa a qualcuno, passerei volentieri il testimone.

Tornando ai problemi generali, consentitemi un'altra eresia: sono convinto che il declino della "cristallografia scientifica" sia cominciato con l'avvento dei computer. Sembra una bestemmia, ma è un fatto che i computer hanno creato la categoria di quelli che ho chiamato *i cristallografi del mouse*. Presentando un mio programma di calcolo, alcuni anni fa, ebbi a scrivere, nel manuale d'uso, la seguente frase un po' provocatoria: *se siete abituati a lavorare muovendo un mouse a casaccio senza usare il cervello, desistete; questo scritto non fa per voi; è rivolto a chi usa la testa, non il mouse*.

Facendo mente locale su queste cose ho scoperto che il popolo bue, non solo usa il mouse come succedaneo del cervello, ma, quasi sempre, non sa affatto quello che fa, nemmeno a grandi linee. Se uno prova a parlare con chi studia le proteine e gli chiede: come si raffinano? Prontamente ti risponde: "con il metodo dei gradienti coniugati". Prova a chiedergli in che consiste questo metodo matematico; non lo sa. Però sa che il metodo è efficace con le matrici "sparse". Che significa "matrice sparsa"? Non lo sa. Di quali matrici parla? Idem. Perché le matrici per le proteine sono "sparse" e per le altre sostanze no? Come sopra. Non vorrei essere maligno, ma vorrei tanto sapere se i bravi studenti di Parma, menzionati dalla simpatica Angiola, vanno annoverati tra i cristallografi *veri* o tra *quelli del mouse*.

Potrei procedere su altri argomenti. Fate caso: nessuno dice *ho usato questa procedura matematica*, dice solo ho usato *questo programma* (designato immancabilmente con un acronimo fantasioso e vagamente allusivo). Cosa fa di preciso questo programma? Il cristallografo del mouse non lo sa quasi mai.

Queste poche considerazioni sono giusto un contributo per stimolare una discussione; non certo per chiudere la questione. Bisognerebbe parlare di cosa fare. Non ho una ricetta, solo qualche timida proposta. Cominciare con un elenco di problemi non ancora risolti (o non risolti in modo soddisfacente) e relative soluzioni (quando esistono) sottoponendo ad una critica feroce le soluzioni correnti. La soluzione ventilata da Macchi di coniugare le

indagini diffrattometriche con altre indagini (es. calcoli teorici) mi sembra valida per rendere le pubblicazioni più interessanti e più motivate, ma non risolve il problema di fondo.

Per ora lascio la parola ad altri per ulteriori contributi e proposte. Grazie per l'attenzione.

Attilio Immirzi

(aimmirzi@unisa.it)