



ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI E FONDAZIONE «GUIDO DONEGANI»

CONVEGNO LINCEO

# AVOGADRO E CANNIZZARO TRA INTUIZIONE E SISTEMATIZZAZIONE: NASCITA E SVILUPPO DELLA MODERNA CONCEZIONE DELLA STRUTTURA ATOMICA DELLA MATERIA

28 MAGGIO 2026

## ABSTRACT

*Comitato ordinatore:* Vincenzo AQUILANTI (Linceo, Università di Perugia), Luca BINDI (Linceo, Università di Firenze), Paola BONFANTE (Lincea, Università di Torino), Silvia BORDIGA (Lincea, Università di Torino), Carlo DOGLIONI (Vice Presidente dell'Accademia dei Lincei), Giovanni FERRARIS (Linceo, Università di Torino), Massimo INGUSCIO (Linceo, European Laboratory for Nonlinear Spectroscopy - LENS), Annibale MOTTANA (Linceo, Università Roma Tre), Vincenzo SCHETTINO (Linceo, Università di Firenze).

## PROGRAMMA

Nel 2026 ricorre il 250° anniversario della nascita di Amedeo Avogadro e il 200° anniversario della nascita di Stanislao Cannizzaro. Avogadro è scienziato di rinomanza mondiale per la sua nota ipotesi pubblicata nel 1811: "Volumi uguali di gas diversi, nelle stesse condizioni di pressione e temperatura, contengono lo stesso numero di molecole", che ha consentito di stabilire nel corso della prima metà dell'Ottocento la distinzione tra molecola e atomo. Tale distinzione, adottata dagli studiosi della 'Scienza dei cristalli', fu pienamente accettata dalla comunità scientifica solo dopo che nel 1860, al 1° Congresso Internazionale di Chimica a Karlsruhe, Stanislao Cannizzaro fece prevalere il pensiero di Avogadro.

Il convegno si propone di celebrare gli anniversari in oggetto tramite relazioni di esperti su nascita e sviluppo della moderna concezione della struttura atomica della materia, con particolare attenzione ai motivi che hanno tardato il riconoscimento dell'ipotesi di Avogadro ed ai successivi suoi fondamentali successi tramite esempi relativi ad aspetti cristallografici, chimici, fisici, biochimici e di scienza dei materiali.

### Giovedì 28 maggio

10.00 *Indirizzi di saluto* (Presidenza dell'Accademia Nazionale dei Lincei)

10.10 Giovanni FERRARIS (Linceo, Università di Torino): *Le radici minero-cristallografiche dell'ipotesi di Avogadro*

10.40 Vincenzo SCHETTINO (Linceo, Università di Firenze): *Atomi e molecole prima di Avogadro*

11.10 Coffee break

11.30 Vincenzo AQUILANTI (Linceo, Università di Perugia): *Cannizzaro e il congresso di Karlsruhe: l'invenzione delle molecole*

12.00 Giorgio PARISI (Linceo, Università La Sapienza di Roma): *Numero di Avogadro, 1866-1910: Boltzmann, Planck, Einstein, Perrin*

- 12.30 Nicole FABBRI (Università di Firenze – LENS): *Osservare e controllare sistemi quantistici individuali: Atomi intrappolati e centri di colore come atomi artificiali*
- 14.30 Luca BINDI (Linco, Università di Firenze): *La geometria nascosta della cannizzarite: un omaggio alla visione di Avogadro e Cannizzaro*
- 15.00 Enrico MASSA (INRIM): *Il numero di Avogadro: una costante per la metrologia*
- 15.30 Marco CIARDI (Università di Firenze): *Amedeo Avogadro nel contesto politico e culturale del Piemonte preunitario*
- 16.00 Coffee break
- 16.20 Angelo VULPIANI (Università La Sapienza di Roma): *Dagli atomi di Democrito alla legge di Avogadro ed il moto browniano*
- 16.50 Alessia BACCHI (Università di Parma): *La visione molecolare per lo sviluppo dei farmaci*
- 17.20 Silvia BORDIGA (Linco, Università di Torino): *Dalle molecole ai materiali: la meraviglia della chimica nell'organizzare gli spazi vuoti nei materiali microporosi come le zeoliti e i MOF*
- 17.50 Roberta OBERTI (Linco, Università di Pavia – CNR): *Variazioni su un tema strutturale: isomorfismo e proprietà nei minerali*
- 18.20 Martino BOLOGNESI (Linco, Università di Milano): *Un cristallo proteico contiene una pmol di proteina: la biologia strutturale ai tempi di DeepMind*

ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI – ROMA - PALAZZO CORSINI - VIA DELLA LUNGARA, 10  
Segreteria del convegno: [convegni@lincei.it](mailto:convegni@lincei.it) – <http://www.lincei.it>

Tutte le informazioni per partecipare sono disponibili su:

<https://www.lincei.it/it/manifestazioni/avogadro-e-cannizzaro-tra-intuizione-e-sistematizzazione-nascita-e-sviluppo-della>

Per partecipare al convegno è necessaria l'iscrizione online  
Fino alle ore 10 è possibile l'accesso anche da Lungotevere della Farnesina, 10  
I lavori potranno essere seguiti dal pubblico anche in streaming

L'attestato di partecipazione al convegno viene rilasciato esclusivamente a seguito di partecipazione in presenza fisica e deve essere richiesto al personale preposto in anticamera nello stesso giorno di svolgimento del convegno

## Le radici minero-cristallografiche dell'ipotesi di Avogadro

Giovanni FERRARIS (Linco, Università di Torino)

Nel 1811 Avogadro pubblicò [1] l'ipotesi per cui è famoso - a parità di pressione e temperatura, volumi uguali di gas contengono lo stesso numero di molecole (integranti) - supportandola con tre assunzioni: 1) il volume delle molecole integranti, per esempio  $H_2O$ , è trascurabile rispetto alla distanza intramolecolare; 2) in tutti i gas la forza d'attrazione tra le molecole integranti si azzerà alla stessa distanza intermolecolare; 3) le molecole (elementari) degli elementi chimici possono essere poliatomiche (per esempio  $H_2$  e  $O_2$ ). L'ipotesi permise ad Avogadro di spiegare i risultati pubblicati da J. L. Gay-Lussac [2], secondo cui un volume di una sostanza gassosa si combina con un volume uguale, doppio o al più triplo di un'altra sostanza gassosa. Gli stessi risultati non sono invece spiegabili con la teoria della struttura atomica di J. Dalton [3] basata sull'assunzione che gli elementi chimici sono monoatomici (per esempio H e O, per cui la molecola di acqua è HO). Avogadro adottò la sistematizzazione pubblicata da P. J. Macquer [4] e fatta propria da R.-J. Haüy nella sua teoria sulla struttura periodica dei cristalli di minerali [5]. Haüy espose la teoria anche nel suo trattato [6] usato come libro di testo per l'insegnamento della Fisica nelle scuole superiori francesi, e quindi anche da Avogadro che, nel decennio 1809-1819, insegnò Fisica nel Collegio di Vercelli, capitale del Dipartimento della Sesia annesso alla Francia nel periodo 1801-1814 [7].

La teoria di Haüy prevede la traslazione periodica tridimensionale di una molecola integrante che ha la stessa composizione chimica del minerale ed è costituita da molecole elementari di elementi chimici. Le molecole integranti di minerali diversi hanno volumi diversi e, quindi, equidistanze diverse; pertanto volumi uguali dei rispettivi cristalli contengono un numero diverso di molecole integranti. Se, come assume Avogadro, nei gas il volume delle molecole integranti è trascurabile rispetto alla distanza intermolecolare e questa è la stessa in tutti i gas, ne consegue che a parità di pressione e temperatura, volumi uguali di gas contengono lo stesso numero di molecole integranti.

Nel suo saggio del 1811 Avogadro non cita fonti a cui collegare la sua ipotesi; ritenere che essa derivi da considerazioni di calcolo aritmetico sarebbe troppo banale. All'epoca la scienza dei cristalli aveva un ruolo centrale, tanto che il primo tomo del ponderoso trattato di Avogadro intitolato *Fisica de' corpi ponderabili* [8, 9] è dedicato alla Cristallografia. Pertanto, ritengo ragionevole supporre che a maturare l'ipotesi di Avogadro abbia contribuito il modello di struttura dei cristalli pubblicato da Haüy nel 1784 [5] ed illustrato anche nel manuale di Fisica [6] utilizzato a lezione da Avogadro.

[1] Avogadro A. (1811), *Essai d'une manière de déterminer les masses relatives des molécules élémentaires des corps, et les proportions selon lesquelles elles entrent dans ces combinaisons*, J. Phys. Chim. Hist. Natur. 73, pp. 58-76.

[2] Gay-Lussac J.L. (1809), *Mémoire sur la combinaison des substances gazeuses, les unes avec les autres*, Mém. Soc. Phys. Chim. de la Soc. d'Arcueil 2, pp. 207-237.

[3] Dalton J. (1808), *A new system of chemical philosophy*, Manchester.

[4] Macquer P.J. (1766), *Dictionnaire de chymie*, Paris.

[5] R.-J. Haüy (1784), *Essai d'une théorie sur la structure des cristaux*, Paris.

[6] Haüy R.-J. (1803), *Traité de Physique*, Paris.

[7] Ferraris G. (2016), *Amedeo Avogadro scienziato a Vercelli*, in "Vercellesi Illustri. Uomini di Scienza e di Cultura" a cura di A. Ruffino, pp. 10-42, Vercelli.

[8] Avogadro A. (1837-1841), *Fisica de' corpi ponderabili*, 4 vol., Torino.

[9] Ferraris G. (2013), *Amedeo Avogadro e la cristallografia*, Quaderni dell'Accademia delle Scienze di Torino, 19, pp. 41-52.

## Atomi e molecole prima di Avogadro

Vincenzo SCHETTINO (Linco, Università di Firenze)

La legge di Avogadro del 1811 (*Volumi uguali di gas diversi nelle stesse condizioni di temperatura e pressione contengono un ugual numero di molecole*) anche se di importanza fondamentale per l'interpretazione atomistica dei fenomeni chimici è stata accettata dalla comunità scientifica solo con molto ritardo. Questo è stato spesso attribuito allo stato di isolamento di Avogadro nel Piemonte sabauda e alla scarsa diffusione del suo fondamentale lavoro. Ma la realtà è molto diversa. Nel 1814, traendo ispirazione dalla legge delle molecole integranti di Haüy, una legge del tutto analoga era stata formulata da Ampère che pure era a conoscenza dell'articolo di Avogadro. Nel 1815 la stessa legge era stata poi formulata anche da Prout. In seguito, la legge di Avogadro era stata usata per la determinazione di pesi atomici e molecolari da chimici famosi come Berzelius, Dumas, Gaudin, Gerhardt, Laurent con diversi livelli di successo e spesso, per inadeguatezza dei dati sperimentali disponibili, era stata considerata un caso particolare applicabile solo ai gas semplici.

La difficoltà generale che impediva di accogliere la legge di Avogadro derivava da:

- la visione positivista adottata dai chimici per affrancarsi dall'alchimia, secondo la quale solo i risultati sperimentali erano da prendere in considerazione e il concetto di atomo, non osservabile sperimentalmente, conservava un carattere filosofico. La stessa teoria atomica di Dalton non era accettata da tutti e, comunque, la distinzione tra atomo e molecola non era chiara;
- le teorie della chimica vigenti nella prima metà del XIX secolo (la teoria dualistica di Berzelius, la teoria dei radicali, la teoria dei tipi) avevano carattere classificatorio piuttosto che interpretativo dei dati sperimentali disponibili che, del resto, talora non concordavano nelle varie scuole di chimica. A questo si aggiungeva l'enorme messe di dati che si andava accumulando con la nascente chimica organica che richiedeva nuovi modelli di interpretazione delle reazioni chimiche e della composizione delle sostanze (la valenza, la teoria della struttura).

### **Cannizzaro e il congresso di Karlsruhe: l'invenzione delle molecole**

Vincenzo AQUILANTI (Linco, Università di Perugia)

Tra le ricorrenze e coincidenze che in questo anno 2026 appartengono alla nostra identità, ineludibili sono il 250° della nascita di Amedeo Avogadro (1776) e il 200° di Stanislao Cannizzaro (1826): se Avogadro gettò le basi, con il suo principio, per l'ipotesi particellare, che si dimostrerà fondamentale per le leggi dei gas, rendendone interpretabili le loro proprietà, Cannizzaro ne fece architrave della chimica moderna, chiarendo il concetto di molecola. Con il "Sunto" celebre presentato e diffuso al Congresso di Karlsruhe (1860), stabilì metodi sperimentali per determinare pesi atomici e molecolari, e stabili unità di misura e linguaggio alla disciplina, fondando la teoria della struttura molecolare e del legame chimico.

Questa coralità di saperi che qui si incentrano è cifra fondativa e unificante dei "primi Quaranta", società di scienziati sparsi in un'Italia divisa, motore dell'evoluzione della scienza nei secoli cosiddetti oscuri.

Nella storia della chimica e della fisica trovano un ponte privilegiato tra i "primi Quaranta", Boscovich e Volta (di cui nel 2027 ricorrono rispettivamente il 250° e il bicentenario della scomparsa): hanno offerto modelli di ricerca innovativa e ispirato in particolare Padre Angelo Secchi, fondatore dell'astrofisica italiana, il quale è ricordato come il "chimico del cielo" per l'uso della spettroscopia, quale chiave per leggere la composizione della materia stellare. Sarà nostro compito affrontare questi temi nel prossimo anno.

### **Osservare e controllare sistemi quantistici individuali: Atomi intrappolati e centri di colore come atomi artificiali**

Nicole FABRI (Università di Firenze – LENS)

La concezione moderna dell'atomo, chiarita e sistematizzata nel corso del XIX e del XX secolo grazie al contributo fondativo di Amedeo Avogadro e Stanislao Cannizzaro, ha trasformato l'atomo da ipotesi concettuale a unità fondamentale della materia. Oggi questa evoluzione trova una naturale prosecuzione nella possibilità di osservare e controllare singoli sistemi quantistici in laboratorio.

In questo intervento verranno presentati due approcci sperimentali apparentemente distinti ma concettualmente complementari: atomi neutri intrappolati in pinzette ottiche e atomi artificiali ("centri di colore") nel diamante.

Nel primo caso, trappole ottiche fortemente focalizzate consentono la manipolazione deterministica di singoli atomi e di piccoli array programmabili. Il controllo preciso degli stati interni, delle interazioni e della dinamica coerente rende questi sistemi una delle architetture più promettenti per la simulazione di modelli quantistici complessi e per la realizzazione di calcolatori quantistici scalabili. Nel secondo caso, i centri di colore nel diamante offrono un sistema solido che riproduce, in forma ingegnerizzata, le proprietà quantistiche di atomi isolati. L'accesso ottico agli stati di spin e tempi di coerenza eccezionalmente lunghi li rendono particolarmente adatti alla realizzazione di sensori quantistici ad altissima sensibilità, miniaturizzabili e capaci di operare anche in condizioni ambientali.

L'intervento discuterà come queste piattaforme, pur appartenendo a contesti fisici diversi, condividano elementi concettuali fondamentali — controllo di singole particelle quantistiche, interazione luce-materia e possibilità di integrazione in architetture ibride — mostrando come l'idea di atomo, da strumento di sistematizzazione della materia, sia oggi divenuta direttamente accessibile all'esperimento e offra una piattaforma essenziale per la realizzazione dei dispositivi quantistici di prossima generazione.

## **La geometria nascosta della cannizzarite: un omaggio alla visione di Avogadro e Cannizzaro**

Luca BINDI (Linco, Università di Firenze)

La cannizzarite, un solfosale complesso di Pb–Bi descritto per la prima volta nelle fumarole di Vulcano, rappresenta uno degli esempi più affascinanti di aperiodicità strutturale nel mondo minerale. La sua architettura cristallina, a lungo considerata anomala, incarna un ordine geometrico nascosto che mette in discussione la cristallografia classica e risuona profondamente con l'eredità concettuale di Amedeo Avogadro e Stanislao Cannizzaro. Durante la presentazione, l'autore esplorerà come le moderne indagini strutturali rivelino questo ordine celato e collochino la cannizzarite nel più ampio quadro dei composti a strati con *misfit* variabile, gruppo che include tutti i minerali del gruppo della cilindrite molto conosciuti per le loro applicazioni tecnologiche.

Una attenta analisi strutturale della cannizzarite  $7H:12Q$  di Vulcano dimostra che questo minerale non è una singola fase periodica, ma un'architettura composita costruita dall'alternanza di due distinti moduli strutturali: strati  $Q$  pseudotetragonali di tipo (100)PbS e strati  $H$  pseudoesagonali a doppio ottaedro di tipo (111)PbS. Questi sottosistemi sono commensurabili lungo una direzione nel piano, ma disaccoppiati lungo quella perpendicolare, dando origine a una corrispondenza a lungo raggio espressa da uno specifico rapporto  $H:Q$ . La cannizzarite quindi non è una fase con stechiometrica fissa, bensì una serie omologa a *misfit* variabile.

L'incorporazione di Cd e In nella cannizzarite del vulcano Kudriavy (Russia) produce un diverso rapporto  $H:Q$ , ossia  $3H:5Q$ . In questo caso, la più semplice corrispondenza tra gli strati corrisponde alla più breve realizzazione periodica della struttura composita. La coesistenza di distinti rapporti  $H:Q$  riflette un principio cristallografico modulare: la struttura si adatta variando la proporzione dei suoi sotto-reticoli costituenti, pur preservandone la topologia interna.

Questa adattabilità geometrica richiama la profonda intuizione di Avogadro e Cannizzaro circa la natura discreta e numerabile della materia. La cannizzarite dimostra che, anche quando la periodicità traslazionale appare compromessa da *misfit* e modulazioni, l'ordine strutturale persiste in uno spazio con dimensionalità superiore. Come evidenziato nel più ampio contesto dei cristalli aperiodici, il fallimento della classica "legge di razionalità degli indici" in minerali quali la calaverite (AuTe<sub>2</sub>) condusse all'introduzione della cristallografia nel superspazio, in cui i pattern di diffrazione richiedono più indici dei tre convenzionali riferiti allo spazio convenzionale. La cannizzarite appartiene a questa stessa linea: la sua geometria è pienamente razionale quando descritta in termini di sottostrutture interagenti e periodicità estese.

La cannizzarite diventa così più di una curiosità mineralogica. È un laboratorio naturale in cui chimica, geometria e simmetria convergono. La sua geometria nascosta – emergente dall'interazione tra strati  $Q$  e  $H$ , tra commensurabilità e *misfit*, tra periodicità e modulazione – illustra come la natura realizzi principi strutturali complessi molto prima della loro formalizzazione teorica, principi che di lì a poco avrebbero trovato una manifestazione ancora più sorprendente nella scoperta dei quasicristalli.

Rendendo omaggio ad Avogadro e Cannizzaro, riconosciamo nella cannizzarite una metafora cristallografica della loro visione: la materia è discreta, ordinata e governata da relazioni numeriche, anche quando tale ordine si rivela soltanto attraverso la lente raffinata della moderna scienza strutturale.

## **Il numero di Avogadro: una costante per la metrologia**

Enrico MASSA (INRIM)

La determinazione del numero di Avogadro ha affascinato generazioni di scienziati, costituendo una delle sfide più rilevanti della metrologia moderna. Nel corso del tempo, sono state sviluppate numerose e ingegnose tecniche di misura, che hanno progressivamente contribuito alla riduzione dell'incertezza associata alla sua determinazione. A partire dagli anni '70 del Novecento si è affermato un approccio sperimentale basato sull'impiego del silicio naturale. In tale contesto, il metodo X-Ray Crystal Density (XRCD) si è consolidato come tecnica di riferimento per la rideterminazione del numero di Avogadro, grazie alla sua elevata accuratezza e solidità teorica. Nel 2004, un consorzio internazionale di ricerca, denominato International Avogadro Coordination (IAC), ha avviato un ambizioso progetto finalizzato alla produzione di un lingotto di silicio, ad altissima purezza, arricchito con l'isotopo <sup>28</sup>Si. Tale innovazione ha consentito di migliorare significativamente le prestazioni del metodo XRCD, riducendo le fonti

di incertezza legate alla composizione isotopica del materiale. La collaborazione ha coinvolto i principali istituti metrologici e ha condotto, nel 2018, alla determinazione del numero di Avogadro con il più basso livello di incertezza e la più elevata accuratezza mai raggiunti fino ad allora. Questo risultato ha costituito un passaggio fondamentale nel processo di definizione del valore numerico del numero di Avogadro come costante esatta, contribuendo in modo determinante alla ridefinizione del Sistema Internazionale delle unità di misura (SI), oggi fondato su sette costanti numeriche esatte e prive di incertezza. Il seminario ripercorre le tappe storiche, i presupposti concettuali e i progressi tecnologici che hanno reso possibile la rideterminazione del numero di Avogadro e la sua successiva elevazione a costante definita, evidenziandone il ruolo centrale nell'evoluzione della metrologia contemporanea.

### **Amedeo Avogadro nel contesto politico e culturale del Piemonte preunitario**

Marco CIARDI (Università di Firenze)

Amedeo Avogadro nasce il 9 agosto 1776 a Torino, la capitale del Regno di Sardegna. Il padre Filippo, conte di Quaregna e Ceretto (località non molto distanti da Biella) è uno dei più importanti giuristi e politici del Regno di Sardegna. Anche Amedeo intraprende gli studi giuridici, laureandosi nel 1796, nel convulso periodo che fa seguito alla Rivoluzione francese. Un percorso di studi che avrà non pochi riflessi nello sviluppo della sua metodologia scientifica. Dopo aver iniziato a lavorare in vari uffici legali, Avogadro rimane colpito, come molti altri giovani del suo tempo, dall'invenzione della pila di Alessandro Volta. Decide così di iniziare a studiare i fenomeni elettrici, prima come autodidatta, poi seguendo le lezioni di Fisica sperimentale di Anton Maria Vassalli Eandi, una volta riaperta l'università durante il periodo napoleonico. È l'avvio di una lunga carriera, non priva di difficoltà accademiche, che lo costringeranno a mantenere, durante la Restaurazione e nel periodo risorgimentale, una posizione lavorativa presso la Camera de' Conti di Torino, dopo un decennio di insegnamento presso il Collegio di Vercelli. Molto importante (e scarsamente conosciuta) è la sua attività come membro dell'Accademia delle Scienze di Torino (di cui è socio dal 1819), per la quale esaminerà oltre cento richieste di *privilegio* (così veniva definita la concessione del brevetto) sulle questioni più disparate, dalle macchine per migliorare la filatura della seta ai primi torchi meccanici per la stampa, dagli apparecchi aerostatici ai battelli a vapore, la cui introduzione nel Regno di Sardegna caldeggerà a più riprese. Tra le molte altre cose, Avogadro sarà membro del Consiglio Superiore della Pubblica Istruzione, della Commissione Superiore di Statistica, per quale effettuerà numerose ricerche in campo meteorologico, socio corrispondente della Reale Società di Agricoltura, membro onorario dell'Accademia medico-chirurgica, nonché uno dei protagonisti della revisione del sistema di pesi e misure nel Regno di Sardegna. Morirà a Torino il 9 luglio 1856, quattro anni prima del celebre convegno di Karlsruhe, che vedrà come protagonista Stanislao Cannizzaro, nel nome di Avogadro.

### **Dagli atomi di Democrito alla legge di Avogadro ed il moto browniano**

Angelo VULPIANI (Università La Sapienza di Roma)

Dopo l'intuizione visionaria di Democrito e gli sviluppi della chimica culminati nella legge (ipotesi) di Avogadro, la svolta definitiva per l'accettazione dell'esistenza degli atomi, come reali entità fisiche e non mera speculazione, avvenne all'inizio del Novecento. Il moto browniano, per lungo tempo considerato solo un fenomeno curioso, ha avuto un ruolo fondamentale per l'affermazione dell'ipotesi atomica. La spiegazione teorica, di A. Einstein, e la verifica sperimentale, di J. Perrin, del coefficiente di diffusione di una particella colloidale, ha permesso di chiudere definitivamente la dura polemica che vide contrapposti Boltzmann e la scuola energetista di Ostwald e Mach: gli atomi non si vedono ma si possono contare.

### **La visione molecolare per lo sviluppo dei farmaci**

Alessia BACCHI (Università di Parma)

La cristallografia ha portato la visione molecolare nella scienza, ha popolato di immagini e strutture la chimica moderna, la biologia molecolare, le scienze farmaceutiche, la fisica dello stato solido: la scienza moderna ha talmente incorporato questa nuova visione del mondo che ormai lo sviluppo di qualsiasi nuovo composto non può prescindere da un'interpretazione strutturale a livello atomico o molecolare. Grazie alla cristallografia moderna in questi 100 anni l'immaginario scientifico si è arricchito di splendide architetture molecolari, di meravigliose simmetrie, e il concetto di relazione tra forma e funzione si è esteso dal mondo macroscopico delle macchine meccaniche e degli organismi biologici al microscopico mondo delle macchine

molecolari, dove dettagli grandi quanto un decimiliardesimo di metro determinano con precisione inesorabile le proprietà di un materiale per l'elettronica, l'efficacia di un farmaco, la funzione di un enzima. I modelli tridimensionali delle molecole sono diventati per gli scienziati dei mezzi per rappresentare il reale a scala nanometrica, e per il pubblico sono diventate icone rappresentative del metodo scientifico.

Le prime ricerche volte a determinare la struttura delle molecole biologicamente attive risalgono agli anni '30, grazie allo sviluppo della cristallografia a raggi X, che rappresenta tuttora una tecnica essenziale nella scoperta e nello sviluppo di nuovi farmaci. La maggior parte dei farmaci in commercio è costituita da cristalli molecolari. L'organizzazione delle molecole all'interno del cristallo determina molte delle loro proprietà fisiche e influisce in modo decisivo sui processi di produzione e formulazione dei farmaci solidi, oltre che su caratteristiche chiave come la velocità di dissoluzione e la stabilità. La possibilità di correlare il modello strutturale con le proprietà del materiale rappresentano uno dei principali punti di forza della visione molecolare del mondo a scala nanometrica.

### **Dalle molecole ai materiali: la meraviglia della chimica nell'organizzare gli spazi vuoti nei materiali microporosi come le zeoliti e i MOF**

Silvia BORDIGA (Lincea, Università di Torino)

La capacità della chimica di trasformare entità molecolari in strutture ordinate nanostrutturate che mostrano proprietà peculiari a livello microscopico, rappresenta una straordinaria opportunità di ricerca. In questo contributo si esplora come i principi fondanti della chimica – dall'intuizione atomico-molecolare di Avogadro alla sistematizzazione ponderale di Cannizzaro – trovino continuità ideale nello studio dei materiali microporosi, quali zeoliti e metal-organic frameworks (MOFs). Questi materiali, caratterizzati da un'architettura interna ricca di volumi vuoti organizzati e modulabili, incarnano la capacità della chimica di "dare forma al vuoto", creando spazi in grado di ospitare molecole, catalizzare reazioni e separare miscele di molecole molto simili, con selettività anche molto elevate. Nel contributo saranno illustrati i principi di autoassemblaggio molecolare e di progettazione reticolare che consentono di controllare dimensione, forma e funzionalità dei pori, espandendo le prospettive applicative di zeoliti e MOF nei campi della separazione e della catalisi.

### **Variazioni su un tema strutturale: isomorfismo e proprietà nei minerali**

Roberta OBERTI (Lincea, Università di Pavia – CNR)

Molte delle relazioni di questo convegno testimoniano come la visione atomica della materia abbia prodotto una vera rivoluzione nello studio e nella previsione delle sue proprietà. Una rivoluzione che però si declina in maniere diverse, a seconda che si tratti di composti molecolari o non molecolari di minerali.

I minerali infatti non sono rappresentabili in termini di molecole discrete, ma si possono descrivere come ripetizioni continue nello spazio di una unità strutturale riconducibile ad una formula unitaria. Un'ulteriore complicazione al loro studio è data dalla presenza di serie isomorfe, nelle quali rimane costante il motivo (la impalcatura) strutturale, ma varia la composizione cristallografica (cioè la natura degli ioni che occupano i diversi siti strutturali). Non è un dettaglio da poco, perché le caratteristiche di ogni possibile sostituente (numero atomico, dimensione, stato di ionizzazione, reattività) in ogni singolo sito strutturale determinano in maniera significativa sia le proprietà del minerale (*in primis* il volume) sia la sua risposta al variare delle condizioni ( $P$ ,  $T$ ,  $f_{O_2}$ ) del contesto geologico.

Solo da una quarantina d'anni si è riusciti a decifrare la composizione cristallografica di famiglie minerali complessi, e si è quindi cominciato a collegarla con le condizioni di formazione. Un'informazione estremamente preziosa, quest'ultima, per la modellizzazione quantitativa dei processi che hanno portato alla formazione del nostro Pianeta, ma anche dei materiali extraterrestri.

**Un cristallo proteico contiene una pmol di proteina:  
la biologia strutturale ai tempi di DeepMind**  
Martino BOLOGNESI (Lincoo, Università di Milano)

In natura, alcuni organelli cellulari, come i perossisomi, ospitano frequentemente microcristalli di proteine endogene. In laboratorio, è possibile crescere cristalli di proteine a partire da campioni puri, utilizzando tecniche biochimiche adeguate. Considerate le dimensioni delle molecole proteiche (ad esempio, circa 100 Å di diametro), il loro ordinamento in un reticolo cristallino lascia ampi spazi vuoti, che possono occupare tra il 30% e l'80% del volume del cristallo. Questa struttura unica rappresenta un'aggregazione della materia del tutto peculiare, compatibile con il mantenimento delle proprietà funzionali biologiche delle proteine.

I cristalli proteici hanno giocato un ruolo centrale in una delle più importanti rivoluzioni concettuali della biologia. Con l'avvento della Biologia Strutturale, le analisi 3D di proteine e acidi nucleici hanno chiarito i meccanismi fondamentali del riconoscimento biologico, dell'azione degli enzimi e delle interazioni tra proteine nei loro complessi, essenziali per il funzionamento cellulare. Attualmente, conosciamo la struttura 3D di circa 250.000 macromolecole biologiche, principalmente proteine, grazie alla cristallografia a raggi X. Le implicazioni tecnologiche nel campo delle scienze della vita e delle biotecnologie sono innumerevoli.

Recentemente, a partire dal 2020, i progressi nella comprensione delle strutture 3D delle proteine hanno dato vita a una nuova rivoluzione, grazie all'implementazione della 'famiglia' AlphaFold, basata su machine learning addestrate su oltre 200.000 strutture proteiche. Questo approccio rivoluzionario consente di prevedere la struttura 3D di una proteina, e successivamente dei suoi complessi macromolecolari, a partire dalla sua sequenza di aminoacidi, con un'accuratezza paragonabile a quella degli approcci sperimentali.

AlphaFold, e correlati, rappresentano un cambio di paradigma, con impatti, impensabili pochi anni fa, sui settori della ricerca biologica, biochimica e biofisica. Anche in questo caso, le ricadute applicative, come la progettazione di farmaci mirati, sono molteplici e in continuo sviluppo. È un assioma comune in tutti i settori dell'intelligenza artificiale che i progressi e gli aggiornamenti si susseguano a ritmi serrati.