

## IL MONDO DELLA RICERCA



Consiglio Nazionale  
delle Ricerche  
Area Territoriale della Ricerca Bari



Il connubio  
Gazzetta-Cnr

● A giugno ha preso il via la collaborazione fra Gazzetta e Consiglio Nazionale delle Ricerche. Oggi pubblichiamo la 23<sup>a</sup> puntata. Le precedenti uscite hanno riguardato altrettanti lavori di ricerca realizzati da: Istituto per i Processi Chimico-Fisici (Ipcf), Istituto di Sistemi e Tecnologie Industriali Intelligenti per il Manifatturiero Avanzato (Stima), Istituto di Cristallografia (IC), Istituto ISPA (Istituto di Scienze delle Produzioni Alimentari del Cnr), Istituto di Ricerca per la Protezione Idrogeologica (Cnr-Irapi), Istituti Nanotec e Processi chimico fisici, Istituto di Biomembrane, Bioenergetica e Biotecnologie Molecolari, Istituto di Bioscienze e Biorisorse (IBBR), Istituto di chimica dei composti organometallici (Cnr-Iccm), Istituto di Ricerca sulle Acque, Istituto per il Rilevamento Elettromagnetico dell'Ambiente (Irea) dell'Istituto per la Scienza e Tecnologia dei Plasmi (Istp), Istituto di Tecnologie Biomediche (ITB), dell'Istituto per le Tecnologie della Costruzione (Itc-Cnr) e «Matematica per l'Ambiente» dell'Istituto per Applicazioni del Calcolo di «Mario Picone» (Iac-Cnr), dell'Istituto sui Sistemi e Tecnologie Industriali Intelligenti per il Manifatturiero Avanzato (Stima-Cnr) con l'Ispa di Foggia e Isp-Cnr e di Irpi-Cnr e Uniba, Istituto per la Scienza e tecnologia dei plasmi (Istp), dell'Istituto di fotonica e nanotecnologie (Cnr-Ifn) e dell'Istituto Cnr Nanotec.

L'area di Bari del Cnr si compone di 17 Istituti con circa 400 fra ricercatori-tecnologi e personale tecnico-amministrativo.

IC-CNR  
Il dott.  
Corrado  
Cuocci  
analizza  
dati di  
diffrazione  
con  
il software  
Expo  
(a destra)



# Alla scoperta dell'ordine atomico che svela le strutture dei cristalli

Gli studi a carattere multidisciplinare dell'Istituto barese di Cristallografia

● Nell'immensa varietà di materiali naturali o artificiali, antichi o moderni di cui siamo circondati, è sorprendente che ognuno possieda specifiche proprietà che lo rendono adatto ad uno scopo. Conoscere la struttura della materia a livello atomico e molecolare è il modo chiave per risalire alle proprietà dei materiali. All'Istituto di Cristallografia (IC) del Consiglio nazionale delle ricerche (Cnr), area territoriale della Ricerca di Bari, ci occupiamo di cristalli per scoprire come sono disposti i loro atomi nello spazio, investigando sia l'aspetto metodologico che quello applicativo.

**CRISTALLI** - I cristalli sono ovunque - alimenti, farmaci, dispositivi tecnologici, sistemi biologici e minerali - e gli atomi che li compongono sono posizionati in maniera rigorosamente ordinata e periodica. Grazie a questa peculiarità è possibile determinare la loro struttura atomica facendo ricorso alla Cristallografia, una scienza poco nota ma preziosa per i suoi impieghi, per le sue basi teoriche e il suo carattere multidisciplinare.

**METODOLOGIE E SOFTWARE** - Quando un fascio di raggi X, analoghi a quelli che si usano per le comuni radiografie, investe un materiale cristallino, produce un'immagine complessa che può essere registrata tramite uno strumento specifico, il diffrattometro. La strumentazione che si utilizza varia a seconda che si tratti di un piccolo cristallo (decimi di millimetro) oppure di una minutissima polvere di cristalli (millesimi di millimetro). L'immagine così ottenuta può essere analizzata grazie ad un lavoro affascinante ma impegnativo, che richiede competenza e utilizzo di calcoli sofisticati.

All'IC sviluppiamo metodi cristallografici innovativi, cioè sistemi per interpretare le immagini diffrattometriche, che implementiamo nei software per rendere il più accurato e automatico possibile il processo di ricostruzione della struttura del materiale cristallino. Questi software sono disegnati affinché la risoluzione della struttura sia basata sul solo dato sperimentale e non sia prerogativa del «bravo cri-



stallografo» ma accessibile anche ai meno esperti. Ci siamo dati, insomma, un obiettivo ambizioso che abbiamo raggiunto per le polveri cristalline mettendo a punto il software Expo, da EXtraction (estrazione di informazioni dall'immagine diffrattometrica) e POWder (polvere).

Expo è distribuito in tutto il mondo a più di 13.000 utenti appartenenti a gruppi di ricerca e aziende che lo richiedono attraverso il sito web dell'Istituto e lo usano per applicazioni scientifiche e tecnologiche. La ditta giapponese Rigaku fornisce Expo in dotazione dei diffrattometri che vende sul mercato internazionale.

Alla Guilin University of Electronic Technology in Cina lo hanno usato recentemente per elucidare il rapporto struttura-proprietà di una serie di materiali semiconduttori a base di bismuto e selenio. La disposizione atomica a strati di questi composti ha fatto luce sulle loro eccezionali proprietà di elevata conducibilità elettronica e bassa conducibilità termica, consentendo di progettarli con proprietà predefinite.

**MATERIALI** - Analizziamo cristalli anche «in casa». Con ricercatori del Dipartimento di Farmacia - Scienze del Farmaco dell'Università di Bari, abbiamo ultimamente usato EXPO per determinare la struttura di alcune molecole di interesse farmacologico sintetizzate in solventi non convenzionali che hanno un impatto ambientale molto basso, chiamati DES, e che possono sostituire quelli convenzionali ad alto impatto ambientale. I risultati hanno confermato la validità di questo protocollo mostrando la possibilità che i DES siano utilizzati come mezzi di reazione, sostenibili per l'ambiente, per la preparazione di molecole farmacologicamente attive.

La nostra ricerca, condotta da Francesco Baldassarre, Nicola Corriero, Corrado Cuocci, Aurelia Falcicchio, Rosanna Rizzi, contribuisce allo sviluppo di nuovi materiali compatibili con le esigenze tecnologiche moderne e con le necessità in tema di ambiente, sostenibilità, energia e salute.

**Angela Altomare**  
Istituto di Cristallografia, Cnr, Bari