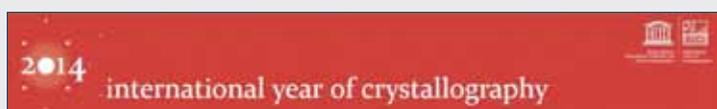




di Norberto Masciocchi<sup>a</sup>,  
Simona Galli<sup>a</sup>,  
Antonietta Guagliardi<sup>b</sup>  
<sup>a</sup>Dipartimento di Scienza  
e Alta Tecnologia  
Università dell'Insubria  
<sup>b</sup>Istituto di Cristallografia  
IC-CNR e To.Sca.Lab

## IL CONGRESSO INTERNAZIONALE DI CRISTALLOGRAFIA MISSCA 2013

Lo scorso settembre, a pochi mesi dalla celebrazione dell'Anno Internazionale della Cristallografia, si sono ritrovati a Como circa 230 ricercatori provenienti da più di 15 Paesi per presentare, in occasione del congresso internazionale organizzato dalle Associazioni di Cristallografia Italiana, Spagnola e Svizzera, i più recenti studi cristallografici condotti in ambiti altamente differenziati. Questo breve resoconto intende illustrare gli argomenti trattati durante il congresso, le prospettive future della ricerca europea in ambito cristallografico e le sue ricadute in diversi settori della chimica, della fisica, delle scienze dei materiali e della terra, della biologia e della tutela del patrimonio culturale, a livello accademico e industriale.



UNESCO ha recentemente deliberato che il 2014 sarà l'Anno Internazionale della Cristallografia. In tale occasione si celebrerà, inter alia, il centenario dell'assegnazione del premio Nobel per la Fisica a Max von Laue per la scoperta della diffrazione dei raggi X da parte dei cristalli, seguito, l'anno successivo, da quello conferito a William Henry e William Lawrence Bragg (padre e figlio, rispettivamente) per la determinazione sperimentale delle prime strutture cristalline tramite i raggi X. Le straordinarie osservazioni e i potenti modelli teorici di von Laue e dei Bragg hanno aperto la porta a un secolo di cristallografia strutturale basata sulla diffrazione di raggi X, neutroni ed elettroni, mediante la quale si sono sviluppati le teorie e i metodi sperimentali utilizzati ancora oggi per la profonda comprensione dell'organizzazione degli atomi nello stato solido (cristallino).

Poco prima dell'inizio di questo anno di celebrazioni, le Associazioni di Cristallografia Italiana, Spagnola e Svizzera (Fig. 1), facendo seguito a una tradizione di con-

gressi congiunti iniziata nel 2007 a Copanello di Staletti (CS) e continuata nel 2010 a Oviedo, hanno nuovamente unito i propri sforzi: il risultato di questa sinergia è la partecipazione di 230 ricercatori (Fig. 2 e 3) al congresso internazionale MISSCA 2013 (*Meeting of the Italian, Spanish and Swiss Crystallographic Associations*), svoltosi nella splendida cornice della settecentesca Villa Olmo di Como all'inizio del mese di settembre 2013.

La scelta della sede ospitante è stata dettata dalla disponibilità dei cristallografi dell'Università dell'Insubria e dell'Istituto di Cristallografia del CNR (sede di Como), che hanno messo a disposizione del MISSCA 2013 anche le risorse umane per un'efficace e capillare organizzazione dell'evento (Fig. 4).

Dei circa 200 contributi presentati durante le quattro giornate del congresso, 5 sono state le relazioni plenarie, più di 60 le presentazioni orali e più di 100 le presentazioni in forma di poster.

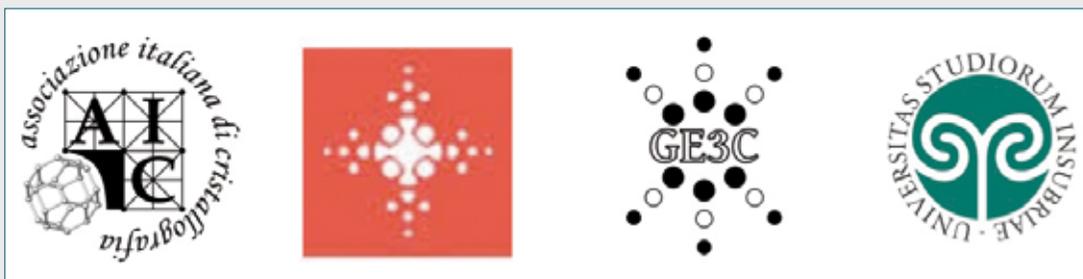


Fig. 1 - Da sinistra a destra: i simboli delle Associazioni di Cristallografia Italiana, Svizzera e Spagnola e quello della sede ospitante, l'Università dell'Insubria



Fig. 2 - Il pubblico di uno dei tanti microsimeposi del congresso MISSCA

## Conferenze plenarie

Le conferenze plenarie, di ampio respiro, hanno permesso di valorizzare ambiti di ricerca altamente differenziati, di elevato interesse scientifico e tecnologico.

Stuart Parkin (IBM Almaden Research Center, San José) ha presentato un'interessante relazione intitolata *Turning insulators into metals!*, spiegando che film di ossidi di metalli di transizione, virtualmente isolanti, se soggetti a intensi campi elettrici e in presenza di liquidi ionici, possono cambiare drammaticamente le loro proprietà di conduzione elettrica, aprendo la via a nuovi sistemi elettronici di immagazzinamento e trasporto di informazione, rapidi e a bassa potenza. In *Mechanisms to regulate the cellular concentration of the bacterial second messenger c-di-GMP*, Tilman Schirmer (Universität Basel) ha illustrato i meccanismi molecolari che governano la sintesi e la degradazione del messaggero secondario c-di-GMP, studiati con tecniche avanzate di biologia strutturale e funzionale. Carlo Gatti (ISTM-CNR, Milano) ha invece presentato una relazione plenaria dal titolo *Chemical bonding in crystals: charge density and beyond*, illustrando le basi teoriche e lo sviluppo storico degli studi sulla densità elettronica, nonché alcuni esempi paradigmatici sull'interpretazione chimico-fisica di anomalie strutturali tramite il formalismo di partizionamento topologico. L'ultima giornata ha beneficiato di due presentazioni plenarie, di Sakura Pascarelli (ESRF, Grenoble), con *Investigating extreme states of matter by X-ray absorption spectroscopy*, e di Cristobal Viedma-Molero, con *Chiral crystallization with nonclassical crystal growth and enantiodiscrimination through oriented attachment*.

Pascarelli ha parlato di esperimenti all'avanguardia condotti su metalli e ossidi metallici in condizioni di pressioni estreme, per mimare le reazioni chimiche che avvengono al centro della terra o studiare la modulazione delle proprietà magnetiche di materiali di interesse tecnologico; Viedma-Molero ha descritto processi spontanei di enantioselezione durante la cristallizzazione mediata da cluster nanostrutturati o da cristalli micro-millimetrici preformati, attraverso un processo di riconoscimento di chiralità e struttura cristallina.

## Microsimeposi tematici

Durante il congresso, le diverse tematiche di ambito cristallografico sono state affrontate in ben 12 microsimeposi, caratterizzati dai seguenti titoli:

- MS1 - Macromolecular Assemblies and Viruses
- MS2 - Structure and Properties of Organic and Inorganic Thin Films
- MS3 - Frontiers in Instrumentation
- MS4 - Molecular Compounds and Intermolecular Interactions
- MS5 - Membrane Proteins and Drug Design
- MS6 - Aperiodic, Nano- and Defective Materials
- MS7 - Quantum Crystallography
- MS8 - Industrial, Forensic and Heritage Crystallography
- MS9 - Crystallography at Non-ambient Conditions
- MS10 - Crystallography for Intelligent Materials
- MS11 - Advances in Crystal Growth and Crystallization Methods
- MS12 - Advances in Polarized X-rays and in Magnetic Neutron Diffraction

Tra i contributi presentati su invito in queste sessioni, segnaliamo gli interventi di Maria Solà (IBMB-CSIC, Barcelona, *TFAM: a highly flexible system to modulate mitochondrial DNA*); Frank Schreiber (Eberhard Karls Universität, Tübingen, *Real-time X-ray scattering studies of thin film growth*); Ian K. Robinson (London Centre for Nanotechnology, *Opportunities for coherence in crystallography*); Berta Gómez Lor (Istituto de Ciencia de Materiales, Madrid, *Semiconducting triindoles: tuning the crystallographic packing and transport properties through CH- $\pi$  interactions*); Michael Hennig (Hoffmann - La Roche Ltd., Basel, *Structural biophysics of membrane proteins to facilitate drug discovery*); Antonio Cervellino (Paul Scherrer Institut, Villigen, *Structure, microstructure and surface superstructure of magnetite/maghemite nanoparticles*); Julia Contreras-García (Université Pierre et Marie Curie, Paris, *NCI: analysis of weak interactions in solids from the electron density*); Miguel A.G. Aranda (Universidad de Malaga e CELLS-ALBA, Barcelona, *From firing ancient potteries to clinkering new eco-cements. Powder diffraction for all-time materials*); Andrzej Grzechnik (Technische Hochschule, Aachen, *Mixed-valence vanadates at extreme conditions*); Stefan Kaskel (Technische Universität Dresden, *New Metal-Organic Frameworks with high porosity and well defined functionality for gas adsorption, separation, and catalysis*); Francesca P.A. Fabbiani (Georg-August Universität, Göttingen, *Crystallisation and structure determination of imidazolium-based room-temperature ionic liquids*); Emilio Lorenzo (ESRF, Grenoble, *Polarized X-rays and magnetic neutron diffraction: key experiments to unravel complex orders in Nature*).

Tra gli altri interventi orali, ci permettiamo di segnalare, in una lista non esaustiva, quelli che hanno maggiormente suscitato l'interesse del pubblico dei congressisti: Evelyn Moreno-Calvo (Institut de Ciència de Materials, Barcelona, *Quatsomes: vesicular structures formed by self-assembly of sterols and quaternary ammonium surfactants*); Fabiola Liscio, (IMEM-CNR, Bologna, *Control of octathiophene fibers orientation fabricated by lithographically wetting process*); Jürg Sche-



Fig. 3 - Esempio reale di una transizione irreversibile ordine-disordine

fer (Paul Scherrer Institut, Villigen, *HEIMDAL: a time-of-flight neutron powder diffractometer going beyond today's designs by offering additionally a SANS and an imaging option*); Alessia Bacchi (Università di Parma, *Crystals form landscapes of organometallic catalysts precursors*); Sam Yong Park (Yokohama City University, *The structural basis for an essential subunit interaction in influenza virus RNA Polymerase*); Federica Bertolotti (Università dell'Insubria e To.Sca.Lab, Como, *Silver and copper nitropyrazolates: a case of highly defective crystals characterized by the Debye Function Approach*); Piero Macchi (Universität Bern, *Calculation of crystal optical properties from molecular electron density*); Ewa Patyk (Uniwersytet Adama Mickiewicza, Poznań, *Compressed stacking in pyrimidine and pyrazine*); José Manuel Delgado López (IACT-CSIC, Granada, *Bioinspired apatite nanocrystals functionalized with monoclonal antibodies for targeted cancer therapy*); Naomi E. Chayen (Imperial College London, *Smart materials for protein crystallization*); Olha Sereda (Centre Suisse d'Electronique et Microtechnique, Neuchâtel, *Materials for hydrogen storage: their XRD investigations*); Alessandro Bombardi (Diamond Light Source Ltd., *Recent results from X-ray resonant and non-resonant magnetic diffraction on functional materials*).

## Altri interventi

Come in altre occasioni, sono stati assegnati alcuni prestigiosi premi per diverse tipologie di attività scientifiche a laureandi, dottorandi e scienziati di chiara fama; tra questi riconoscimenti, citiamo il premio intitolato alla memoria del Prof. Nardelli (Università di Parma), assegnato alla giovane ricercatrice Laura Cendron (Università di Padova, *Structural and functional studies on HydF, an enzyme with a key role in the maturation of the [FeFe]-hydrogenase catalytic core*); il premio alla carriera (intitolato alla memoria del Prof. Mammi, Università di Padova), conferito a Roberta Oberti (IGG-CNR, Pavia, *Chipping, baking and squeezing amphiboles (and more): the importance of crystal-chemical models*); la medaglia MISCA a Juan Manuel García Ruiz (IACT-CSIC, Granada), che ha presentato un'interessantissima e affascinante conferenza plenaria dal titolo *Crystals and (my) life*.

A completamento dell'evento, sono state organizzate tre sessioni speciali su temi di grande attualità, che hanno coinvolto il pubblico con interventi mirati e discussioni aperte sul presente e sul futuro di specifici

ambiti di interesse scientifico, applicativo e didattico: nello specifico, si sono svolte una tavola rotonda dedicata alla biocristallografia, curata da Giuseppe Zanotti (Università di Padova) e da Armando Albert (IQC-CSIC, Madrid); una incentrata sul grafene, organizzata da Michele Saviano (IC-CNR, Bari); una sulle iniziative delle tre Associazioni di Cristallografia per celebrare l'Anno Internazionale, gestita da Michele Zema (International Union of Crystallography e Università di Pavia) e da Fermín Otálora (IACT-CSIC, Granada).

Significativamente, ha partecipato ai lavori del congresso anche una decina di sponsor commerciali, molti dei quali hanno avuto la possibilità di presentare i loro prodotti più recenti e di più alta tecnologia a un pubblico interessato, grazie all'organizzazione di sessioni dedicate.

## Conclusioni

In conclusione, gli argomenti trattati nelle diverse presentazioni testimoniano la vivacità e la trasversalità della cristallografia in ambiti differenziati, con ricadute applicative non indifferenti: dalle nanotecnologie (elettronica organica, memorie allo stato solido, *drug delivery*), a importanti prodotti di larga diffusione (cementi, vetri, batterie), alle scienze della vita (farmaci, proteine e medicina rigenerativa) e della terra (aspetti mineralogici e petrografici) e alla tutela dell'ambiente e dei beni culturali. In particolare, la provenienza accademica o industriale dei vari relatori, che si colloca ben oltre i confini delle tre Associazioni co-organizzatrici del congresso MISSCA 2013, ha permesso lo svolgimento di un evento scientifico e culturale di livello europeo. Pertanto, questo congresso ha inaugurato l'Anno Internazionale della Cristallografia con una succosa anticipazione della serie di eventi che si stanno organizzando a livello nazionale e internazionale. Tali eventi avranno carattere divulgativo per essere indirizzati alle scuole superiori e a un pubblico più vasto: convegni, rassegne e pubblicazioni didattiche, come la mostra itinerante denominata "CRISTALLI!" che, inizialmente allestita presso le sale espositive del Centro di Ateneo per i Musei dell'Università di Padova, sarà in parte ospitata in altre città, quali Como, Modena, Firenze, Napoli e Cosenza.



Fig. 4 - Giovani (e meno giovani) del team organizzatore comasco