

# Recensioni

## IL SEGRETO DELLE COSE

### Storie di uomini e materiali

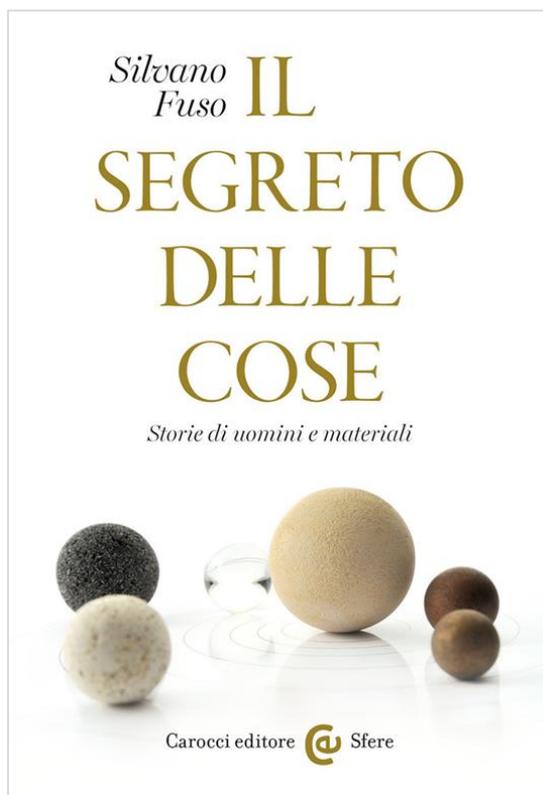
di S. Fuso

Carocci editore

Pag. 255, broccura, 19 euro

**L**o sapete che cos'hanno in comune una farfalla, un opale e un camaleonte? Come scrive l'Autore di questo libro, sembra che abbiano ben poco ma, a ben pensarci, forse una somiglianza c'è e attiene alle variazioni di colore. La domanda è posta al lettore laddove si parla dei cristalli fotonici nel capitolo 'Materiali e luce'. Tutto viene chiaramente spiegato dalla presenza e dal comportamento dei cristalli fotonici naturali presenti sia nelle farfalle, specie del genere *Morpho*, negli opali che nei camaleonti. Nelle prime si tratta di cristalli di chitina, nei secondi di microsfele di silice e acqua, mentre nei camaleonti si tratta di cristalli di guanina, di dimensioni pari a 100 nm. L'uso dell'espressione 'cristalli fotonici' e il loro studio sistematico, si sono diffusi a partire dal 1987 e ora, dopo avere svelato questi misteri della natura, gli scienziati e i tecnologi sono riusciti ad ottenere cristalli fotonici artificiali dalle interessanti proprietà. Essi funzionano anche per lunghezze d'onda piuttosto basse e hanno interessanti applicazioni nei filtri antiriflesso, nei filtri dicroici, nei diodi laser e nei sensori.

Avrete capito da questo 'frammento' che si tratta di un libro dedicato ai materiali, ricco di curiosità e che, nelle intenzioni dell'A., va oltre le apparenze cercando di scoprire la loro struttura e le loro proprietà. Tuttavia, c'è ben altro. Leggendolo con attenzione pare di compiere un viaggio nella storia della civiltà umana, ma sempre con lo sguardo al futuro. Il testo ha un taglio storico e divulgativo, non didattico. È inevitabile tuttavia che ogni tanto vengano richiamati concetti di fisica e chimica per permettere al lettore di calarsi più agevolmente nel resto dei contenuti. Contiene quattordici capitoli, sette dei quali dedicati a categorie specifiche di materiali: legno, pietra, metalli, ceramici, vetri, polimeri e compositi. Troverete quelle che, secondo me, sono vere e proprie sorprese per il lettore non specialista. Tra le altre, nell'interessante capitolo 'legno', ecco comparire i 'superlegni' dove si parla di procedure per ottenere legni con caratteristiche meccaniche paragonabili addirittura ad acciaio e titanio. Nel capitolo 'vetri' si parla della fisica dei vetri di spin dei quali, prima del Nobel a Parisi, la maggior parte di noi forse non sapeva granché. Molto interessante anche il capitolo sui compositi dal quale apprendiamo, tra l'altro, che anche i legamenti che uniscono le due valve delle comuni vongole sono costituiti da un composito. Gli altri capitoli, cui appartiene quello citato inizialmente, parlano delle relazioni fra materiali, elettricità, magnetismo e luce. Tra questi, mi sembra particolarmente ben riuscito quello dedicato al magnetismo. Il racconto parte da lontano, addirittura con la descrizione del comportamento di un magnete fatta da Tito Lucrezio Caro (98/94-50/55 a.C. Nei capitoli seguenti non potevano mancare gli *smart materials* o materiali intelligenti, i nano materiali, quelli da costruzione (innovativi) e quelli per le arti. Insomma, si tratta di un libro che cerca di non dimenticare quasi nulla e questo, forse, è un poco il suo difetto. Zeppo di nomi, date, concetti, sigle e citazioni si fatica talvolta a seguire l'itinerario proposto da Fuso. Nel contempo però bisogna esprimere, senza riserve, l'ammirazione per il suo sforzo e la vastità della cultura scientifica che traspare dal testo. In conclusione si tratta di un libro impegnativo e dal carattere quasi enciclopedico, forse più utile come strumento di consultazione piuttosto



che di divulgazione, altamente raccomandabile agli studenti che oggi seguono corsi sui materiali, molto aggiornati sui quelli nuovissimi, un po' meno su quelli considerati frettolosamente 'tradizionali'. A questo proposito, ci può stare una piccola riflessione.

I lettori più anziani, *pardon*, "i meno giovani", ricorderanno senz'altro quando, anche nelle nostre Università, si cominciò a valutare l'opportunità di istituire corsi di laurea specifici dedicati alla scienza dei materiali. Come si legge nell'introduzione del libro, ciò avvenne verso la fine degli anni Ottanta, sulla scia di quanto già realizzato prima negli Stati Uniti, poi in Giappone e più tardi in Europa. Qui il Regno Unito, la Germania, la Francia e l'Olanda ci precedettero. A conti fatti e a titolo di curiosità, se diamo un'occhiata alla classifica delle Università che la rivista *Nature*, nel 2021, ha reputato le migliori al mondo nel campo citato, abbiamo delle sorprese. Infatti troviamo sul podio, al primo posto una Università asiatica (Nanyang Technological University, Singapore) seguita nell'ordine dal MIT (U.S.A.), Stanford (U.S.A.), Cambridge (UK), Harvard (U.S.A.) a pari merito con la National University of Singapore. Per trovare un'università italiana dobbiamo scendere al 75° posto dove si colloca il Politecnico di Milano a pari merito, peraltro, con la Columbia University <https://www.topuniversities.com/university-rankings/university-subject-rankings/2021/materials-sciences>. Non vi sembra un risultato che suscita qualche interrogativo anche sui nostri corsi? D'altronde, tra i pochissimi scienziati italiani citati nell'indice dei nomi di questo libro, a parte gli storici (Galvani, Marconi, Volta), risalta quello di Giulio Natta (1903-1979) che proprio al Politecnico, dal 1938 al 1973, ricoprì la cattedra di chimica industriale. Per la verità, a lui fa compagnia un altro Premio Nobel, ossia Giorgio Parisi (n. 1948) che, è giusto ricordarlo, quando uscì il libro non era ancora stato premiato. All'indice dei nomi si aggiunge un glossario ed un'utile bibliografia della quale il lettore, desideroso di approfondire gli argomenti trattati, potrà avvalersi per saperne di più.

Marco Taddia

## CHEMISTRY AT THE FRONTIER WITH PHYSICS AND COMPUTER SCIENCE Theory and Computation

S. Rampino

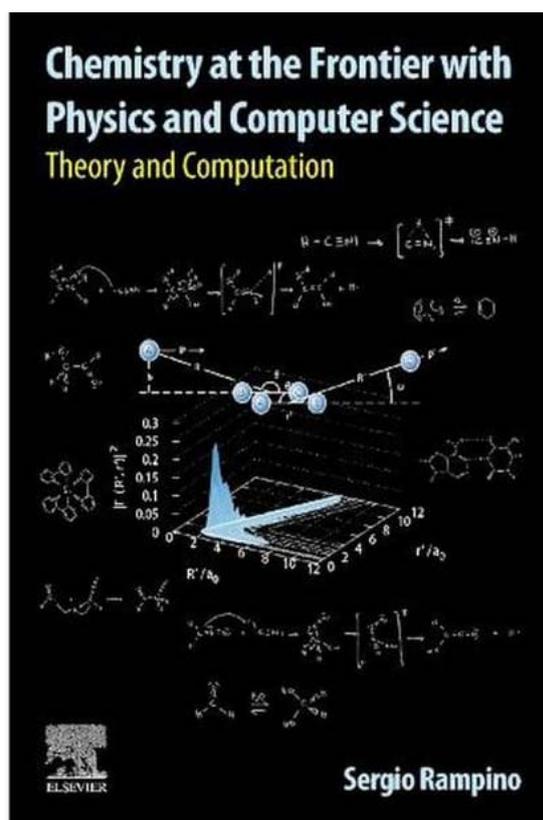
Elsevier

Pag. 294, broccura, 182 euro

Paperback ISBN: 9780323908658

eBook ISBN: 9780323908665

**N**el recensire il libro di Rampino ho preferito (e spero che l'autore non me ne voglia) iniziare dall'ultima sezione (la quarta) "Chemistry and Computer Science". In essa, infatti, nel capitolo 21 "Towards Open Molecular Science", a mio avviso, l'autore coglie in pieno il fatto che l'evoluzione delle tecnologie di rete informatiche abbia costituito un elemento della formazione, dello sviluppo, della trasformazione e della diffusione delle conoscenze in chimica e in fisica così dirompente da creare un vero e proprio salto di discontinuità nel loro uso. Sta di fatto che tale discontinuità è oggi un fattore di grande impatto sociale e culturale che, nel caso delle scienze chimiche (come evidenziato nel già citato capitolo 21), ha già portato alla realizzazione di librerie di dati condivisi (come, ad esempio, quelle di astrochimica (<https://kida.astrochem-tools.org/>) di grande interesse oggi) oltre che alla formazione dei laboratori chimici distribuiti METACHEM (<https://www.cost.eu/actions/D23/>) e GRIDCHEM (<https://www.cost.eu/actions/D37/>) di COST (<https://www.cost.eu/>), alla costruzione dell'organizzazione virtuale COMPICHEM ([https://link.springer.com/chapter/10.1007/11751540\\_70](https://link.springer.com/chapter/10.1007/11751540_70)) di EGEE (<https://eu-egee-org.web.cern.ch/index.html>) e della comunità di ricerca virtuale in scienze molecolari e materiali CMMST ([https://wiki.egi.eu/wiki/VT\\_Towards\\_a\\_CMMST\\_VRC](https://wiki.egi.eu/wiki/VT_Towards_a_CMMST_VRC)) di EGI (<https://www.egi.eu/>). Inoltre il



## Recensioni

libro fornisce interessanti dettagli sulla formazione e strutturazione di specifiche iniziative per il consolidamento in Europa della "Open Science Cloud" (EOSC) (<https://digital-strategy.ec.europa.eu/en/policies/open-science-cloud>) della quale illustra i principi di base, discute le caratteristiche fondamentali (come la riproducibilità della ricerca, la disponibilità dei codici sorgente, l'accessibilità dei dati e la condivisione di strumenti didattici) e indica le strutture che forniscono i relativi presidi tecnologici.

Gli altri importanti strumenti di acquisizione delle conoscenze chimiche tramite computer sono discussi nel libro in "Data driven Chemistry" (cap. 20), "Virtual Reality" (cap. 19) e "Scientific Computing" (cap. 18).

"Data driven Chemistry" - I metodi di intelligenza artificiale e gli algoritmi apprendimento automatico hanno raggiunto un così alto livello di efficienza e affidabilità da essere impiegati sistematicamente per ottimizzare l'uso di grandi masse di dati prodotte dalle varie applicazioni. Con le enormi masse di dati accessibili via rete (quali quelle della progettazione di catalizzatori, della costruzione dei potenziali di interazione molecolare, della individuazione di famiglie di processi reattivi e di sintesi, del trattamento di dati prodotti da esperimenti e calcoli con forte variabilità e/o rumore di fondo, etc. citate nel libro) infatti, anche un ricercatore esperto può perdersi a causa delle non ovvie e molteplici interrelazioni che possono collegarli.

"Virtual Reality" - Le applicazioni nelle quali i risultati numerici dei calcoli possono stimolare l'intuizione del ricercatore chimico sono quelle che mimano in virtuale le corrispondenti immagini della realtà (ciò torna estremamente utile sia ai fini dell'addestramento all'utilizzo delle apparecchiature chimiche sia (se non soprattutto) come supporto operativo, specialmente in 3 dimensioni, per combinare le azioni condotte dall'utente con i comportamenti simulati del sistema chimico riportato a dimensione umana in modalità immersiva.

"Scientific Computing" - L'ambiente di base nel quale le applicazioni scientifiche computazionali illustrate nel libro si sono sviluppate e diffuse come strumenti operativi fondamentali della ricerca sono sia i linguaggi interpretati (come Java e Python) sia i linguaggi compilati (come C, C++ e Fortran con specifico riferimento al 95). Di fatto lo sviluppo del Fortran, il linguaggio maggiormente usato per le applicazioni numeriche intensive della chimica, ha seguito passo passo la crescita delle prestazioni dei computer evolvendo dal calcolo seriale a quello parallelo multi-core con memoria condivisa o distribuita. Pur essendo la programmazione dei computer a memoria condivisa più semplice l'aumento dei conflitti di accesso alla memoria al crescere delle dimensioni del problema ha progressivamente reso più conveniente la distribuzione sia dei processi che dei dati su reti di computer e l'aggregazione collaborativa dei ricercatori in metalaboratori e organizzazioni virtuali che hanno poi costituito la base su cui EOSC è stato varato.

Le sezioni 2 e 3 del libro sono appunto quelle nelle quali, una volta posizionati in Sez. 1 i capisaldi della chimica nell'ambito della fisica dei sistemi molecolari facendo esplicito riferimento all'equazione di Schrödinger, all'Hamiltoniano molecolare e all'approssimazione di Born-Oppenheimer nonché all'importanza delle reazioni e dei legami chimici nello sviluppo delle conoscenze della materia anche tramite un breve excursus storico, si entra nel vivo dell'analisi del ruolo da essi giocato nello sviluppo della chimica teorica e computazionale. A questo scopo il libro affronta nella Sez. 2 il viaggio nel mondo della dinamica dei nuclei mettendo in vetrina le reazioni atomo-diatomo ( $A + BC \rightarrow AB + C$  o  $AC + B$ ). A questo proposito viene discussa la potenza investigativa delle tecniche a fasci molecolari (in particolare quelli incrociati) e ne vengono illustrate le capacità di:

- caratterizzare l'efficienza delle varie ramificazioni del processo reattivo;
- determinare le proprietà energetiche e steriche dei prodotti di reazione;
- identificare le possibili applicazioni avanzate (come quelle dei processi che avvengono nello spazio interstellare).

Nel libro i nodi centrali della dinamica dei nuclei e del trattamento delle reazioni chimiche vengono dipanati a partire dalla determinazione (compresa la sua formulazione analitica) della superficie di energia potenziale della reazione prototipo dell'idrogeno atomico (H) con la corrispondente molecola ( $H_2$ ) grazie al fatto che per essa sono stati effettuati molti calcoli ab initio al fine di determinare non solo in grande dettaglio le strutture della superficie di energia potenziale ma anche l'effetto delle sue varie zone (incluse quelle a lungo raggio) sulla dinamica e sulle proprietà dei prodotti. A tale scopo nel libro vengono confrontate superfici di energia potenziale costruite con particolare cura e vengono usati diversi approcci dinamici (classici e quantistici). L'analisi è estesa anche ad altri sistemi (come C +  $CH^+$ ) e a metodi approssimati per il calcolo delle corrispondenti velocità di reazione in processi astrochimici.

Una maggiore mole di lavoro viene riportata e discussa nella Sez. 3 del libro per quanto riguarda le strutture elettroniche e i legami chimici dal momento che, tradizionalmente, il lavoro del chimico teorico e computazionale è stato per tali sistemi esteso a dimensioni molto maggiori e ad effetti molto più fini inclusi quelli relativistici. Un motivo finale in più per aggiungere questo libro nello scaffale dei vostri preferiti nella vostra biblioteca personale.

*Antonio Laganà*