

1963-1967: una tesi in cristallografia per la laurea in Chimica

Angelo Gavezzotti, Università di Milano

"When electromagnetic radiation passes through a crystal (or matter in general), the electrons are perturbed by the rapidly oscillating electric field and are set into oscillation about their nuclei, with a frequency identical to that of the incident radiation. According to electromagnetic theory an oscillating dipole acts as a source of an electromagnetic wave. Thus, each electron in the medium acts as a source of a radiation that travels outwards with a spherical wave front. In other words, the incident radiation is scattered by the medium without alteration in its frequency. This is coherent scattering."

J.D.Dunitz, *X-Ray analysis and the Structure of Organic Molecules*, 2nd Corrected Reprint, p. 25, Verlag Helvetica Chimica Acta, Basel, 1995

"...in february 1912, P.P. Ewald came to visit me. ... during the conversation I was suddenly struck by the obvious question of the behaviour of waves which are short by comparison with the lattice-constants of the space lattice. ...The fact that the lattice-constants in crystals is of an order of 10^{-8} cm was sufficiently known...The order of X-ray wavelengths was estimated by Wien and Sommerfeld at 10^{-9} cm.... I immediately told Ewald that I anticipated the occurrence of interference phenomena with X-rays."

Max von Laue, Nobel Lecture, nov 12, 1915

1. Prologo

Nel 1962 si poneva la questione della mia entrata all'Università. La mia famiglia era di origini umilissime e mio padre non c'era più, ma in qualche modo i soldi per far studiare due figli non erano mai mancati; la vita era più semplice e non si dava ancora il caso, come accade adesso, che la televisione stravolgesse la suddivisione dei beni in necessari o voluttuari. Il golf smesso da mio fratello andava ancora benissimo a me, e il telefono era quella scatola di plastica nera appesa al muro che si usava al massimo un paio di volte al giorno. Cibo e affitto non erano ancora regolati dalla stravaganza il primo e dalla speculazione il secondo, sicché la famiglia tirava la fin del mese anche pagando le tasse universitarie, peraltro modestissime - salvo poi scoprire che per le famiglie a basso reddito l'iscrizione era gratuita e era prevista anche una piccola cifra a mo' di sussidio. Il vero problema era la scelta della Facoltà. Volevo qualcosa di affine alle scienze esatte (*naturalis philosophia*) come compenso alle dosi massicce di minori del Trecento, di monadi senza finestre, di aoristi e sostantivi eteroclitici, insomma di *baroco* e *baralipton* propinatemi da un Liceo Classico di stampo medievale, e soprattutto volevo cibo solido su cui affilare i miei denti intellettuali. Alla fine la scelta era ristretta tra il Politecnico e Chimica Industriale; ho scelto la seconda perchè uno zio chimico stava facendo soldi con una piccola azienda di trattamento di materie prime organiche per l'industria farmaceutica; e nella vita, non si sa mai.

Gran parte della Facoltà di Scienze matematiche, fisiche e naturali dell'Università di Milano era ospitata in un singolo edificio, sulla cui facciata campeggiava la scritta 'Università' preceduta dalle tracce della parola 'Regia', affrettatamente scalpellata e finita in discarica assieme al prestigio della famiglia reale, che aveva signorilmente abbandonato al loro incerto destino la capitale, l'esercito e il Paese. I locali in cui erano alloggiati aule e laboratori erano stantii, con vecchi banchi disseminati di bunsen rugginosi e lavandini ingialliti che ingurgitavano ogni sorta di refluo di laboratorio. Le precauzioni erano ignote: si pipettava tetracloruro di carbonio, e in Analitica Qualitativa si gorgogliava acido solfidrico *en plein air*. Il clima culturale, come mi son reso conto più tardi, odorava ancora di inizio secolo, con ricette rosacrociane e calcinazioni nei *gooch*. Il concetto di molecola veniva dalle leggi ponderali, senza che nessuno ci avesse detto che si trattava di insiemi tridimensionali di atomi tenuti insieme da forze elettromagnetiche. Il legame chimico era questione di puntini da spostare con freccette, e gli zuccheri si disegnavano con quei lunghi legami curvi o rettangolari che accennavano al fatto che si trattava di molecole cicliche. La terza dimensione non esisteva; del resto, le dispense si tiravano a ciclostile e l'unico attrezzo didattico era la lavagna col gesso. La termodinamica discendeva in due corsi separati, uno coi cicli di Carnot e l'altro con un oscuro insieme di minacciose formule irte di incomprensibili sommatorie. Nessuno ci ha mai fatto notare la meravigliosa concordanza finale dei

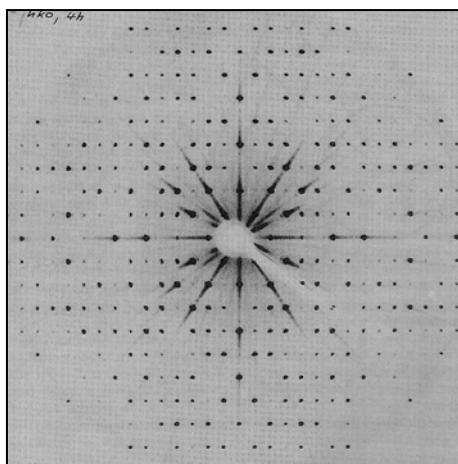
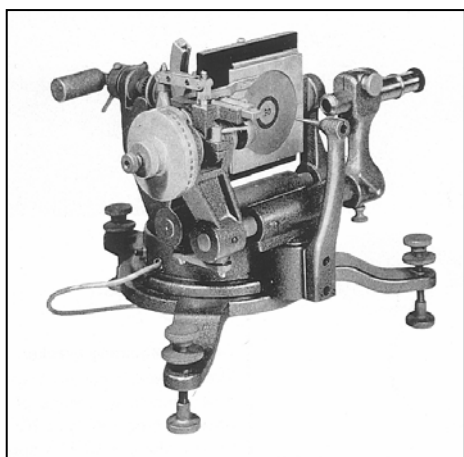
ragionamenti di Clausius e di Boltzmann, nè il fatto che il calore specifico scende dalle vibrazioni; del resto, il corso di spettroscopia era un complementare del quinto anno, quando ormai la funzione di ripartizione era dimenticata alle spalle. Abbiamo forse evitato per un pelo il paracoro, se non il flogisto. In compenso avevamo cinque corsi di matematica - quattro massicci fondamentali e i Complementi - e tre corsi di fisica, le due Istituzioni e il laboratorio: una splendida base culturale che mi ha aiutato per tutta la vita. Allora ho imparato che le formule producevano numeri che potevano essere confrontati con i risultati di misure sperimentali, una scoperta culturalmente sconvolgente; e ho maledetto in cuor mio la memoria dei miei insegnanti di scuola superiore che mi hanno fatto perdere anni su *quistioni* scolastiche e non mi hanno mai parlato di Galileo.

2. I raggi X

Naturalmente a quei tempi non si parlava di Dottorato, e tutto quello che si poteva avere era una Laurea in Chimica, che richiedeva al minimo un anno intero di internato presso un laboratorio di ricerca. Così mi son trovato, un giorno d'estate del 1967, alla presenza di Vladimiro Scatturin - impegnato in quegli anni nella minuziosa stesura dello Statuto dell'Associazione Italiana di Cristallografia - a chiedere di poter iniziare il lavoro come interno nel prossimo autunno; e a chiedere anche, sfrontatamente, se ci fossero possibilità di continuare il lavoro di ricerca dopo la laurea nel suo laboratorio. Scatturin sorrise sotto i baffi che non aveva e rispose, può darsi, bisognerà anche che lei veda com'è il lavoro... sottintendendo, ovviamente, bisognerà che *io* veda come *lei* lavora. Dopodichè mi affibbiò la lettura estiva del Burger azzurro come propedeutica, e mi congedò. L'ho tradito perchè a settembre ho scoperto che il laboratorio di Strutturistica a Chimica Fisica cercava laureandi e mi son quindi rifugiato sotto l'ala, protettiva e sequestrante, di Massimo Simonetta.

Il Laboratorio di Cristallografia era nel sotterraneo, l'unico luogo dove i generatori di allora, pieni di olio (o di PCB? non l'ho mai saputo) e pesanti un centinaio di chili non corressero il rischio di sfondare i fragili pavimenti del malconcio edificio. Dal pavimento di linoleum sconnesso uscivano vapori dei solventi che i chimici organici buttavano spensieratamente nei lavandini e quindi nelle malridotte tubature di scarico. Le cose che mi hanno colpito maggiormente sono state, nell'ordine: un attaccapanni che recava la scritta "riservato ai docenti"; una serie di bellissimi libri di legno scuro, commissionati a un esperto falegname dal professor Vaciago, che fungevano da sostegno ai libri veri; e il gabinetto del professor Cambi - leggasi "gabinetto" non nel senso scientifico del termine, ma nel senso di cesso, con tanto di tazza, bidet, vasca da bagno e boiler per l'acqua calda. I generatori erano due, uno Rigaku, con un manuale di istruzioni che raccomandava di indossare pantofole nella stanza per non accumulare polvere di strada accanto al prezioso apparecchio; e uno messo assieme tra

gli azzurri monti di Tenno. Troneggiavano due Weissenberg e una Precession, accuratamente allineate al tubo mediante ritagli di nastro doppio adesivo. Dalla camera oscura usciva l'odore degli acidi. Il mio indottrinamento era subito cominciato: la legge di Bragg, la cella unitaria, la sfera di Ewald, gli assi reciproci con la loro brava stellina, tutto disegnato con estrema cura su carta quadrettata. Ricordo quei primi mesi come tempi

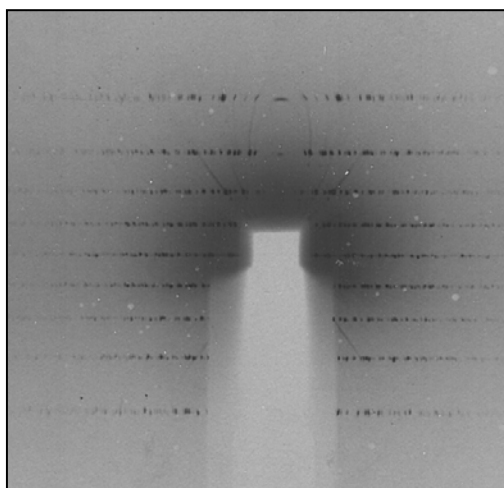


Una macchina "precession" e il relativo fotogramma.

di matite, gomme, temperamatite e righelli. Si passava anche del tempo in biblioteca a sfogliare le riviste per annotare gli articoli di interesse cristallografico: una schedina ciclostilata per ogni articolo, nomi degli autori, citazione, nome del cristallo, dati di cella e gruppo spaziale. Avere una fotocopia significava inoltrare domanda al responsabile, averne un bigliettino con autorizzazione scritta accordata a sua discrezione, portarlo in biblioteca, e attendere che il personale ti riconsegnasse in cambio un pacchettino di fogli unti dai quali ogni traccia di scrittura svaniva al semplice tocco d'un pollice un poco umidiccio.

Ogni laureando veniva associato a un cristallo, dato che raccogliere dati e risolvere una struttura era impresa che poteva richiedere da un minimo di qualche mese a un massimo di un'eternità. Io ero stato appiccicato al DTE, 1,1-di-*p*-toliletilene, molecola che suscitava l'ilarità dei miei di casa che pensavano che si trattasse di un nome cinese. Come ho saputo poi, si trattava di un progetto rischioso perchè non c'erano atomi più pesanti del carbonio, e nessuno sapeva esattamente a cosa si andava incontro in tale caso; fortunatamente dopo una laboriosa scelta del campione cristallino e la sua prima esposizione ai raggi X s'era capito che si trattava di un cristallo centrosimmetrico, $P2_1/c$, e tutti hanno tirato un sospiro di sollievo (anche se io non sapevo ancora perchè). Ecco che i laureandi venivano utili, perchè si trattava di montare pellicole singole e pellicole a pacchi nella camera

Weissenberg, facendo attenzione al malefico angolino ritagliato che doveva stare proprio in quell'angolino, e a non rompere la carta nera avvitando il tappo del contenitore; piacevolmente la cui gestione malaccorta poteva risultare in lastre esposte a rovescio o dotate di generosi sbaffi neri. Ma ricordo ancora l'emozione provata misurando con un righello la distanza tra due filari di un fotogramma di cristallo rotante e ricavandone, con l'aiuto della sola calcolatrice, la lunghezza di un lato di cella del mio cristallo; o il calcolo dell'angolo cui inclinare il cursore della Weissenberg per raccogliere la diffrazione da ciascun singolo strato. Fisica, matematica, formule, e un numero da confrontare con un risultato sperimentale!... E poi, le sere passate a osservare l'andirivieni del carrello tra due scatti dell'interruttore di cambio direzione, e la promessa maliziosa fatta alla fidanzatina di farle vedere un vero cristallo - e la sua espressione di orrore alla vista di quel granellino biancastro annegato in una goccia di colla viscida in cima a un capillare da 0.5 millimetri.



Una camera per film e un fotogramma da cristallo rotante

In realtà, il laboratorio disponeva di un nuovissimo diffrattometro automatico chiamato PAILRED, acquistato in compartecipazione con il laboratorio di Scatturin, ma si trattava di una macchina bizzosa e ritenuta, forse non a torto, poco affidabile. Idealmente, tale gioiello avrebbe dovuto raccogliere automaticamente le intensità diffratte pilotando e allineando da solo il cristallo mediante un ingegnoso sistema geometrico; i risultati dovevano essere automaticamente trasferiti su scheda perforata. In pratica, il maledetto affare trovava modo di piantarsi per le ragioni più svariate, dato che l'elettronica era approssimativa e le parti meccaniche traballanti. La più

divertente (si fa per dire) delle sue *performances* era quella di incastrare le schede nella perforatrice, in modo che tutti i riflessi raccolti nella notte venivano perforati sulla stessa scheda, che veniva estratta il mattino successivo come se fosse passata attraverso una trebbiatrice. Dopo aver gettato l'anima oltre l'ostacolo per qualche settimana, i dati raccolti sono stati ritenuti inaffidabili e si è deciso (non da me, certamente) di procedere a una nuova raccolta fotografica. Daccapo, quindi, alle Weissenberg, alle lastre, e alla camera oscura.

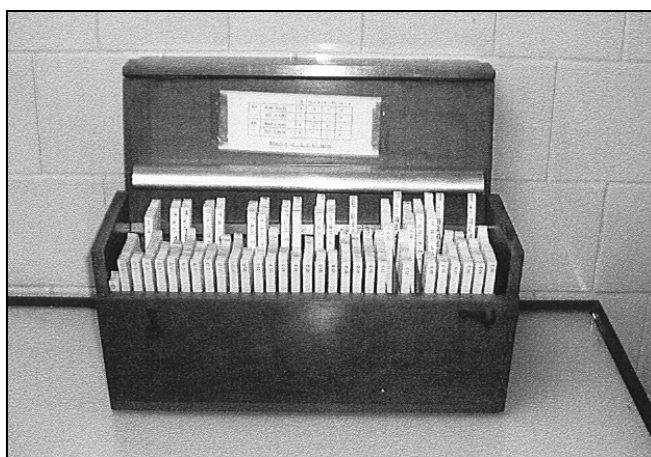
Anche la nuova agonia, come dio volle, ha avuto un termine. Una volta ottenuto un bel pacco di lastre nitide e asciutte, si trattava di stimare a vista le intensità delle macchie. Noi laureandi eravamo stati istruiti a compiere una specie di integrazione visiva, ammucciando tutto il nero di ogni singola macchia e confrontandolo col nero (anch'esso doverosamente ammucciato) di una serie di macchie di opacità crescente preparate su una apposita scala graduata, dato che il microdensitometro veniva giudicato strumento meno affidabile dell'occhio umano (anche di un laureando). Il risultato è stato, dopo settimane di lavoro, una serie di quaderni recanti, per ogni macchia, gli indici di Miller e l'intensità visiva approssimativa. Il tutto da trasferire, questa volta a mano, riflesso dopo riflesso, alla perforatrice - trun, trun, trun, trun - su schede di carta. Ma a dispetto delle lunghe ore trascorse in compiti noiosi e in procedure macchinose, con mezzi spesso di fortuna, il morale era eccellente. Alegggiava per il laboratorio un'aria pionieristica; stavamo facendo qualcosa che non molti avevano fatto prima con successo, e si citavano nomi come Bragg, Perutz, Kendrew, Hodgkin. E soprattutto, la ricompensa finale di molti sforzi sarebbe stata non una polverina, non un grafichetto, non un numerino. Sapevamo che se fossimo stati abili e perseveranti, avremmo visto gli atomi.

3. I calcolatori: o meraviglia!

Gironzolando per il Laboratorio avevo un giorno scoperto due magnifiche scatole di legno di noce, pressappoco della forma di due vasi da gerani, contenenti una incredibile quantità di striscioline di carta recanti una ancor più incredibile quantità di numeri scritti a macchina. Si trattava delle famose strisce di Beevers e Lipson, e i numerini non erano altro che i valori di $2\pi hx$ per ogni valore possibile di h e di x . La dose di pazienza richiesta per portare a termine somme di Fourier con quel mezzo mostruosamente inefficiente testimonia della testardaggine umana, quando sia in gioco una motivazione che trascende ogni ostacolo - quella della scoperta scientifica.

Nelle lunghe ore passate in laboratorio senza qualcosa di preciso da fare, avevo cominciato a prender confidenza con la meraviglia di quei tempi, che troneggiava in uno stanzone del nostro sotterraneo: l'IBM 1620. Questa strabiliante macchina consisteva di due grossi armadi e forniva una potenza di calcolo trascurabile; disponeva di un compilatore Fortran, ma in tal caso

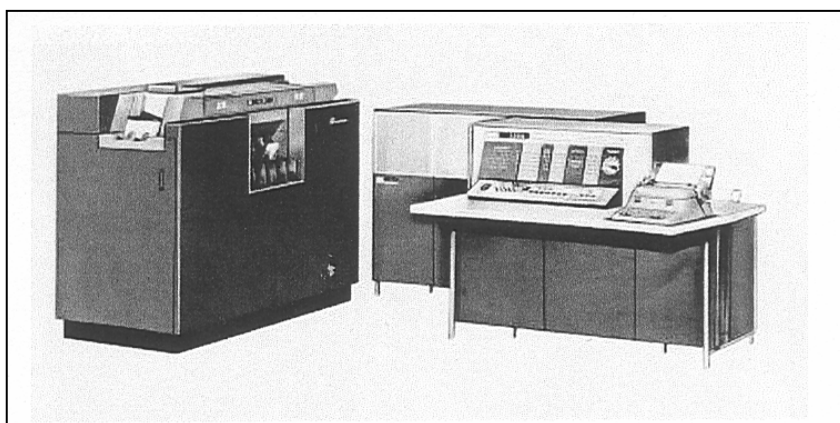
la memoria era quasi tutta occupata dalle routines di sistema e l'utilizzatore aveva a disposizione non più di 7500 parole (un modesto PC odierno ne immagazzina 500.000.000). Per avere a disposizione più memoria, di conseguenza, ho cominciato a imparare il linguaggio simbolico e il base, che consiste nel prendere una parola per volta e indirizzarla, spostarla, mascherarla, applicargli *flags*, insomma, vezzeggiarla come se fosse un neonato. Calcolare una radice quadrata richiedeva qualche decina di istruzioni. Questo esercizio, al giorno d'oggi prerogativa dei soli sistemisti,



Le strisce di Beavers e Lipson

mi ha dato una comprensione intima del *modus operandi* delle macchine calcolatrici. Per ovvi motivi, i cristallografi sono stati tra le prime categorie di scienziati ad avere una assoluta necessità di disporre di mezzi di calcolo, dovendo maneggiare larghe quantità di dati numerici con calcoli ripetitivi, ma eravamo nella condizione di falegnami che dovessero costruirsi viti e chiodi. Quando, più tardi, il laboratorio ha deciso di dotarsi di un sistema coordinato di programmi per il trattamento di dati cristallografici, ho passato lunghe giornate aiutando a organizzare tutta la faccenda: in compenso, ho imparato in ogni minimo dettaglio cosa significa correggere, scalare e ordinare i dati, risolvere il problema della fase, calcolare sintesi di Fourier e raffinare parametri posizionali e termici. Slater diceva che programmare un computer è la più rigida delle scuole intellettuali, perchè insegna che nulla funziona finche tutto non è perfetto in ogni minimo dettaglio. Chi interpreta la cosa in maniera più pedestre considera che programmare è come risolvere le parole incrociate. Naturalmente al giorno d'oggi si comprano pacchetti di programmi a scatola chiusa, comprese le deviazioni standard che possono dipendere (e spesso dipendono) dalla generosità del programmatore.

I dati di diffrazione del mio DTE erano finalmente pronti, sotto forma di una grossa scatola con qualche migliaio di schede perforate. La prima cosa da fare era mediare i dati da diffrattometro con quelli da vista e portare tutti i riflessi indipendenti sotto un'unica scala assoluta. Questo compito veniva eseguito da un programma chiamato "Scalatura III" (chissà che ne era stato di I e II) che funzionava così: innanzitutto si poneva sul lettore il pacco di schede col programma e si azionava l'apposito tasto per caricarlo (l'equivalente del moderno sistema operativo!). L'operazione richiedeva una decina di minuti. A quel punto la macchina accendeva un bottone rosso che diceva "reader no feed": ho fame di dati. Allora si caricavano con gran cura le schede con le intensità dei riflessi e si schiacciava di nuovo il bottone di lettura. Un sibilo meccanico annunciava l'introduzione della prima scheda: si estraevano gli orologi e si cronometrava il tempo necessario a elaborarla, mentre le decine di lucette sulla "faccia" del computer ammiccavano accendendosi e spegnendosi a velocità folle. Dopo una decina di secondi, si sentiva entrare la seconda scheda, e così via. Ogni tanto il perforatore di schede si animava improvvisamente e deponeva con cautela nel cestino sottostante una scheda con un riflesso indipendente mediato. Tutto ciò avveniva di sera, perchè la scalatura durava tutta la notte, sempre ammesso che non ci fossero intoppi come ad esempio una scheda mal posizionata che si stracciava entrando nel lettore. Si favoleggiava di un collega che per non perdere la notte di calcolo aveva sostituito la cinghia di trasmissione del motore del lettore con una bretella improvvisata....



Il mitico IBM 1620 con lettore di schede, consolle e stampante
(ossia macchina per scrivere)

A questo punto si poneva il problema scientifico vero: risolvere il problema della fase, ossia, nel nostro caso, determinare i segni "più" o "meno" da porre davanti a ciascuna intensità nella sintesi di Fourier (o lettore moderno sotto i trent'anni: sai tu perchè nel mio caso la fase era solo

un segno?) Si sentiva parlare di "metodi diretti", ma i cristallografi più anziani sembravano conceder loro più o meno le stesse possibilità di successo dell'elisir di Dulcamara. In realtà si trattava innanzitutto di disporre di un calcolatore in grado di elaborare il programma scritto da Robert Long, del gruppo di ricerca di Ken Trueblood all'Università della California, per l'applicazione del metodo di Sayre ai gruppi spaziali centrosimmetrici. Per fortuna il centro di calcolo dell'Istituto di Matematica si era appena dotato di un IBM 7040, che funzionava così: bisognava rivolgersi in segreteria, ottenere una prenotazione di tempo di calcolo, portare il proprio pacchetto di schede, e ritirare il risultato l'indomani mattina, sotto forma di un tabulato di carta a scorrimento continuo formato 40x25 centimetri (!). Se il tabulato era troppo sottile, significava che per qualche motivo il programma non aveva potuto funzionare; se il tabulato era troppo spesso, significava disastro sotto forma di qualche "loop" indesiderato.

A quei tempi nessuno si sarebbe sognato di usare un programma senza capirne il funzionamento in dettaglio. Armato di matita e gomma (ancora matite!) e di un rotolo di vecchia carta da tracciato del PAILRED (di cui usavo il retro bianco) ho passato un'intera settimana a decifrare il codice istruzione per istruzione, ammirando l'incredibile ingegnosità del programmatore che aveva fatto vere e proprie acrobazie per contenere dati e programma nella sola, scarsa memoria centrale. C'erano, è vero, delle scelte da fare e degli indicatori da indirizzare; ma siccome nessuno aveva esperienza, abbiamo finito per affidarci al caso. La richiesta di tempo-macchina voleva indicato, ovviamente, *quanto* tempo: non avevamo idea, chiedemmo qualche ora, anche se avrebbe potuto essere benissimo necessario qualche giorno.

Numero di cicli	Numero di segni "+"	Numero di segni "-"	Indice di consistenza
11	85	112	0.79873
9	105	92	0.75657
11	93	104	0.74502
13	92	105	0.71139
10	92	105	0.70068

Gli indici di consistenza più alti nella storica prima volta di uso del programma di Robert Long per l'applicazione dei metodi diretti (1968)

Il mio tabulato, una mattina di primavera del 1968, era dello spessore giusto, circa una cinquantina di pagine (si scriveva parecchio, a quei tempi) e portava alla fine una tabella con sedici possibili tentativi e sedici indici di consistenza. L'indice più alto non era poi così tanto più alto degli altri

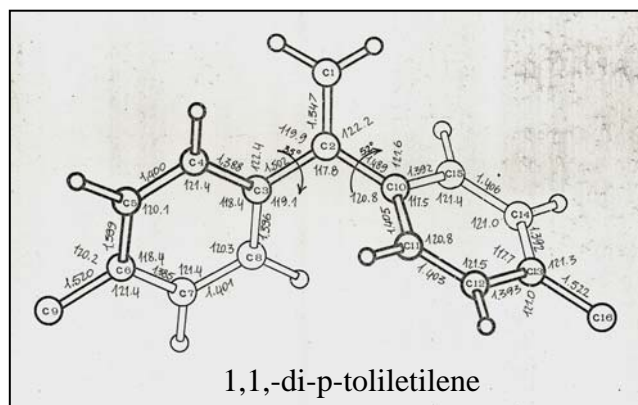
quindici, sicché il mio entusiasmo per il successo del calcolo non era molto condiviso dai miei supervisori, che guardavano al risultato con occhio assai scettico.

Il passo successivo era l'assegnazione manuale dei segni ai riflessi e il calcolo di una sintesi di Fourier (la cosiddetta "E-map"). Questo si poteva fare sul nostro 1620, ma il programma richiedeva che i dati fossero disposti in una ben precisa sequenza di indici di Miller (diciamo, tutti gli l per dati hk , tutti i k per un dato h , etc.) sicché era indispensabile ricorrere ai servizi di uno straordinario apparato, conservato presso il Politecnico, chiamato selezionatore di schede. La macchina era un grosso armadio alto circa un metro e largo due, con una serie di rulli attraverso i quali le schede scorrevano a velocità folle, cadendo nei raccoglitori sottostanti a seconda di dove fossero i fori in ciascuna colonna. Programmare ogni fessura per selezionare la scheda relativa era affare dell'utente, ovviamente. La cosa ha richiesto una mezza mattinata di grattacapi (conditi da qualche esternazione da carrettiere e da una manciata di schede stracciate dal Moloch) ma alla fine il nostro pacchetto era pronto, ben selezionato - ma ahimè, c'era in corso un progetto dei chimici teorici per qualche calcolo di orbitale molecolare (diciamo per l'etilene), il 1620 era prenotato per diversi giorni, e il progetto di un laureando non aveva una priorità particolarmente alta, sicché i segni del metodo di Sayre son rimasti una settimana circa sullo scaffale. Ma alla fine è giunto il dì fatidico, e una mattina entrando in laboratorio ho trovato un lungo ricciolo di carta a rullo della macchina per scrivere del 1620 con una lunghissima serie di numeri: la mia tanto sospirata Fourier.

Armato di forbici e colla, ho cominciato a tagliare le pagine e a ricomporre le varie sezioni con le coordinate appropriate, e a tracciare a matita delle isoipse che contornavano le zone di alta densità. Alla fine della giornata avevo una lista approssimativa di coordinate atomiche corrispondenti a un certo numero di picchi, ma, ovviamente, non era disponibile alcun mezzo per vedere se questa serie di punti tracciasse qualche pezzo della mia molecola di DTE. L'entusiasmo aguzza l'ingegno: disegnata su un largo pezzo di carta una base di cella nel piano xz , con l'appropriato angolo monoclinico, dopo averla quadrettata ho tracciato le coordinate relative, ottenendo un disegno in proiezione che però rivelava ben poco di preciso. Mi serviva la terza coordinata; in un angolo c'era una serie di spilloni da calza con palline di carta nera, evidentemente ammucchiati lì da qualche laureando precedente che aveva avuto la mia stessa idea. Le palline nere andavano infilzate sugli spilloni all'altezza giusta, e lo spillone andava conficcato nel graticcio di base alle coordinate giuste. Dopo un'oretta, guardavo il risultato di questa strana operazione con occhio dubbioso e inesperto.

Dato lo scarso livello di stima di cui godevano le mie probabilità di successo, nessuno si interessava alle mie manipolazioni. Tuttavia, uno dei supervisori, entrando per caso nella stanza, ha osservato con fare casuale che cinque palline nere, tra la dozzina circa che avevo sistemato, formavano

un pezzo di esagono. L'interesse dei "seniors" si è risvegliato di colpo: dopo una seconda occhiata a quelle cinque palline, sapevamo che la mia tesi si sarebbe conclusa con successo e che nel giro di un tempo relativamente breve si sarebbe potuto preparare un buon articolo su una rivista cristallografica di prestigio.



Grafica molecolare stile 1967

La conferma definitiva, comunque, doveva venire da un calcolo di fattori di struttura. Venne apprestato in tutta fretta un pacchettino con un centinaio di riflessi "di fiducia" (a quei tempi ogni riflesso aveva una sua storia, e li si conosceva quasi di persona), e il calcolo relativo passò in priorità assoluta in quanto foriero di un grande evento nel laboratorio e in tutto l'Istituto. Persino i chimici teorici e gli impiantisti misero il naso nella stanza del 1620 per vedere cosa succedeva. Dopo una mezz'oretta, ingoiata l'ultima scheda, la macchina per scrivere si risvegliò per scrivere il fattore di scala; sapevamo che quello era il prologo. Dopo un'altra agonia di un paio di minuti, il *click-click-click* annunciò: $R = 15.64$. Era fatta.

4. Epilogo

Il successo col DTE ci aveva talmente ringalluzziti che ci siamo messi a progettare un programma di calcolo di analisi conformazionale basato sui nuovissimi risultati diffrattometrici e spettroscopici. In uno dei primi congressi dell'Associazione Italiana di Cristallografia, a Torino (1970) mi avevano concesso un paio di minuti per rispondere a domande sulla nostra comunicazione. Mentre qualcuno nell'uditorio sembrava interessarsi blandamente alle mie costanti di *stretching* e alle trasformazioni di coordinate, si è improvvisamente sentita una voce tonante dal fondo della

sala: "Signori, vorrei ricordare che questo è un Congresso di *Cristallografia!*" Il commento era ancora pienamente giustificato; ma il termine "cristallografia" era destinato a mutare ben presto significato, per divenire il dogma principale della nuova chimica strutturale.

Qualcuno potrebbe pensare che aver speso mesi di tempo per fare cose che oggi sono interamente fatte dalle macchine, e per portare a termine compiti ingrati come il confronto di centinaia di macchioline nere con una scala graduata, sia cosa che rendesse infelici. Al contrario, avevamo la magnifica sensazione di avere a che fare con un problema ben definito, difficile ma non impossibile, la cui soluzione avrebbe portato nuova significativa conoscenza nell'arena chimica: il modo in cui due anelli benzenici legati allo stesso atomo di carbonio si contorcono per evitare l'impedimento sterico. La felicità umana è sempre un gradiente, mai un livello. Io sono stato particolarmente fortunato, perchè una mano benevola ha messo quell'indice di consistenza in testa alla lista, mentre c'è chi in quegli stessi anni ha speso gli stessi mesi e portato a termine gli stessi ingrati compiti senza aver la soddisfazione di "vedere gli atomi". Ma abbiamo tutti condiviso la straordinaria fortuna di aver assistito allo sviluppo iniziale di un metodo di ricerca che nel giro di pochi anni avrebbe cambiato il modo di pensare chimico, trasferendo per sempre le molecole da Flatlandia al mondo degli oggetti reali.

Giugno 2007

Desidero ringraziare Riccardo Bianchi, Gianluigi Casalone, Riccardo Destro, Giuseppe Filippini, Carlo Maria Gramaccioli, Carla Mariani, Angelo Mugnoli e tutti gli altri colleghi della "compagnia del seminterrato".