

Relazione sull'attività della delegazione italiana al XXIII Congresso e all'Assemblea Generale della International Union of Crystallography, IUCr (Montreal, 5-12 Agosto 2014)

Il dottor Carlo Mealli (CNR-ICCOM), come rappresentante Italiano del CNR presso l'IUCr, ha guidato la delegazione Italiana formata anche dai dottori Roberta Oberti (CNR-IGG) e Michele Saviano (CNR-IC). Oltre a presenziare alle sessioni scientifiche del Congresso, la delegazione ha partecipato alle sessioni della Assemblea Generale (GA) dell'IUCr, utilizzando i tre voti che spettano all'Italia tra i circa 85 delegati in rappresentanza delle 43 nazioni aderenti. All'assemblea, seppure senza diritto di voto, partecipavano anche le delegazioni "regionali" dell'European, American e Asian Crystallographic Association (ECA, ACA, AsCA).

La GA si è articolata in tre riunioni di circa tre ore ciascuna, tenute il 6, 7 e 10 agosto con il seguente ordine del giorno complessivo:

- 1 Approval of Agenda
- 2 Amendments to Statutes and By-Laws affecting adherence to the Union
- 3 Applications for membership of the Union
- 4 Withdrawal of Adhering Bodies
- 5 Changes in names of Adhering Bodies
- 6 Changes in Category of Adherence of Adhering Bodies
- 7 Approval of Minutes of Twenty-Second General Assembly
- 8 Amendments to Statutes and By-Laws not affecting adherence to the Union
- 9 Report of Executive Committee
- 10 Financial Report
- 11 Ewald Prize
- 12 International Year of Crystallography
- 13 Commission on Journals
- 14 Commission on International Tables
- 15 Committee for the Maintenance of the CIF Standard (COMCIFS)
- 16 *IUCr Newsletter*
- 17 Diffraction Data Deposition Working Group
- 18 IUCr/Oxford University Press Book Series Committee
19. Non-publishing Commissions
- 19.1 Commission on Aperiodic Crystals. 19.2 Commission on Biological Macromolecules. 19.3 Commission on Charge, Spin and Momentum Densities. 19.4 Commission on Crystal Growth and Characterization of Materials. 19.5 Commission on Crystallographic Computing. 19.6 Commission on Crystallographic Nomenclature. 19.7 Commission on Crystallographic Teaching. 19.8 Commission on Crystallography in Art and Cultural Heritage. 19.9 Commission on Electron Crystallography. 19.10 Commission on High Pressure. 19.11 Commission on Inorganic and Mineral Structures. 19.12 Commission on Magnetic Structures. 19.13 Commission on Mathematical and Theoretical Crystallography. 19.14 Commission on Neutron Scattering. 19.15 Commission on Powder Diffraction. 19.16 Commission on Small-Angle Scattering. 19.17 Commission on Structural Chemistry. 19.18 Commission on Synchrotron Radiation. 19.19 Commission on XAFS.
20. Proposals for new Commissions
- 20.1 Commission on Crystallography of Materials. 20.2 Commission on NMR Crystallography
21. Review of existing Commissions
22. Determination of number of elected members of each Commission
23. Regional and Scientific Associates
- 23.1 American Crystallographic Association (ACA). 23.2 Asian Crystallographic Association (AsCA). 23.3 European Crystallographic Association (ECA). 23.4 International Centre for Diffraction Data (ICDD). 23.5 International Organization of Crystal Growth (IOCG)
24. Application by the Latin-American Crystallographic Association to become a Regional Associate
25. Bodies not belonging to the Union
- 25.1 Interdivisional Committee on Terminology, Nomenclature and Symbols of the International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC ICTNS). 25.2 International Council for Science (ICSU). 25.3 ICSU Committee on Data for Science and Technology (CODATA). 25.4 ICSU Committee on Space Research (COSPAR). 25.5 International Council for Scientific and Technical Information (ICSTI). 25.6 International Organization for Standards (ISO)
26. Sponsorship of meetings: Sub-committee on the Union Calendar
27. Date and place of Twenty-Fourth General Assembly

28. Consideration of date and place of Twenty-Fifth General Assembly
29. Determination of general policy and timetable for period to Twenty-Fourth General Assembly
30. Preliminary consideration of activities for period 2017–2020
31. Budget estimates for period to Twenty-Fourth General Assembly: determination of unit contribution
32. Confirmation of appointments of Editors of publications of the Union
 - a. 33. Elections
 - b. 33.1 Chairs and members of Commissions
 - c. 33.2 Representatives of the Union on bodies not belonging to the Union
 - d. 33.3 Officers of the Union
34. Any other business

E' stato approvato il report distribuito dall'Executive Committee, anche illustrato nel rapporto del Presidente G. Desiraju. Nella sua relazione e, più in generale, nel Congresso è emerso il plauso per le molteplici attività fin qui svolte nell'ambito dell'anno Internazionale della Cristallografia (IYCr2014). L'unione ha scelto come "General Manager" dell'evento il cristallografo italiano, Michele Zema (Università di Pavia), che è attualmente in distacco presso la sede della IUCr a Chester (UK). L'operato di Zema è stato più volte lodato. In particolare, IYCr2014 si è dimostrato un ottimo viatico per far risaltare nel mondo il contributo della cristallografia alla scienza (ben 49 scienziati operanti nella cristallografia sono stati insigniti del Premio Nobel a partire dal 1912 (www.iucr.org/people/nobel-prize)). In ultima analisi, è chiaramente emerso l'impatto della disciplina sulla vita quotidiana, dovuto soprattutto alla rivoluzione dell'approccio strutturale in chimica, biologia, farmacologia, scienze dei materiali e molto altro. L'Anno Internazionale della Cristallografia ha tenuto la sua cerimonia inaugurale nella sede dell'UNESCO di Parigi (20-21 Gennaio 2014), ed a seguire ci sono stati molti convegni, conferenze scientifico-divulgative, mostre itineranti, pubblicazioni promozionali, film, gare di cristallizzazione nelle scuole, e per l'occasione ci sono state anche molte emissioni filateliche in vari paesi. Sono state organizzate diverse scuole e laboratori aperti (Open Labs) anche a beneficio dei paesi in via di sviluppo, per aiutare la nascita di competenze cristallografiche e di collaborazioni internazionali. La chiusura ufficiale dell'Anno è prevista nel Gennaio 2015 in Marocco, anche se mancano ancora informazioni dettagliate. Per maggiori informazioni su IYCr2014, consultare <http://www.iycr2014.org/> per le attività nel mondo e <http://www.iycr2014.it/> per quelle in Italia. Sono stati esaminati ed approvati i report presentati dalle diverse Commissioni (publishing e non publishing) in cui si articolano le attività della IUCr, dei regional e dei scientific associate.

Citiamo alcuni punti di interesse:

- Sono state illustrate le domande di adesione di un significativo numero di nuove rappresentanze nazionali: Algeria, Cameroon, Costa d'Avorio, Costarica, Malta, Marocco, Repubblica Democratica del Congo, Uruguay. Questo è il risultato di una importante campagna di promozione della cristallografia nelle regioni meno sviluppate, iniziata qualche anno fa e culminata durante l'anno internazionale della cristallografia.
- Sono state approvate le adesioni di Algeria, Costarica, Marocco, Repubblica Democratica del Congo e Uruguay, mentre per Cameroon, Costa d'Avorio e Malta si è notata la mancanza di affidabili comitati nazionali (adhering body) e nella loro attesa è stato deciso di sospendere l'accettazione formale.
- E' stata approvata l'istituzione di un quarto "regional associate" (LACA), che d'ora in poi coordinerà i paesi dell'America Latina.
- E' stata discussa la posizione del Cile, che per alcuni anni non ha pagato la sua quota di adesione alla IUCr. Poiché i cristallografi cileni hanno riconosciuto la necessità di costituire un nuovo adhering body, che dovrebbe farsi carico della cosa, dopo lunga discussione si è deciso di sospendere l'adesione del Cile senza però arrivare alla sua formale espulsione da parte IUCr.
- Nella relazione del tesoriere è emerso che le risorse finanziarie (circa 4.500.000 USD) dell'unione hanno subito soprattutto nell'ultimo anno un calo di più del 10% anche a causa di un calo dei redditi

dei giornali e degli strumenti cristallografici (ora disponibili online gratuitamente e a pagamento solo per le biblioteche). Da notare che anche il nuovo giornale IUCrJ, varato in occasione di IYCr2014, è stato pensato come “open access”, prevedendo però un pagamento da parte degli autori degli articoli al momento della pubblicazione.

Un altro motivo per il diminuito budget 2013-2014 è quello dei significativi sforzi finanziari fatti per sponsorizzare e coordinare le attività principali di IYCr2014, ed in particolare gli open labs (lancio di laboratori cristallografici nei paesi in via di sviluppo con apparecchiature donate dalle ditte produttrici ma insegnanti supportati dall'IUCr).

- Il decimo premio Ewald, attribuito ogni 3 anni dalla IUCr ad una carriera scientifica, è stato assegnato congiuntamente da A. Janner e T. Janssen, entrambi dell'Università di Nijmegen (Olanda) per lo sviluppo dato alla cristallografia nell'iperspazio e la sua analisi ai cristalli aperiodici.

- Le proposte italiane avanzate nei mesi scorsi dalla “Commissione per la partecipazione del CNR alla IUCr” per nuovi membri italiani nelle diverse commissioni tecniche sono state tutte accolte. Per il prossimo triennio, un membro italiano è presente in molte commissioni (M. Zema, R. Angel, R. Oberti, A. Cornia, D.M. Proserpio, A. Altomare, G. Resnati, G. Aquilanti). Inoltre, due colleghi italiani sono presidenti di commissione: G. Artioli dell'Università di Padova e A. Zappettini del CNR-IMEM). Con l'approvazione delle due nuove commissioni “Commission on Crystallography of Materials” (studi computazionali per i nuovi materiali) e “Commission on NMR Crystallography”, il numero totale è salito a 21.

- Durante l'assemblea, la nostra delegazione ha fortemente raccomandato di migliorare il sistema di selezione dei candidati e di elezione del presidente di Commissione, al fine di uniformare i criteri del sistema, che in alcuni casi non ha funzionato correttamente.

- Il XXIV congresso, assegnato tre anni fa a Hyderabad (India), si terrà dal 21 al 29 agosto 2017.

- La GA ha ascoltato le presentazioni delle nazioni che si sono candidate ad ospitare il congresso IUCr del 2020. Al nuovo bid hanno partecipato Praga (Repubblica Ceca) e Parigi (Francia) ed il progetto di Praga è stato approvato per votazione da parte dell'Assemblea.

- La delegazione italiana si è molto adoperata anche per avere un maggior numero di editor italiani nelle varie riviste IUCr, prendendo contatti sia con il presidente che con il Chief Editor Samar Hasnain. Una lista di potenziali candidati italiani di provata esperienza è stata proposta per vari ruoli.

- La parte più vivace dell'assemblea è stata dedicata alla elezione del nuovo presidente e del nuovo Executive Committee. Per la prima volta si è votato con il sistema elettronico, riducendo così di molto i tempi della complessa procedura.

Per la presidenza, Marvin Hackert (USA) ha prevalso per soli 4 voti su Claude Lecomte, ed anche Mike Glazer (UK) è stato eletto vice-presidente con soli 3 voti di scarto nei confronti di Elena Boldyreva. Tesoriere è stato confermato L. van Meervelt (B). I nuovi membri dell'Executive committee sono ora S. Garcia Granda (E), W. Depmeier (D), M. Kuzel (CZ), tutti per 6 anni, e M. Takata (J) per 3 anni. Continuano il loro mandato per i prossimi 3 anni M. Guss (Australia), e H. Dabkowska (Canada).

Il XXIII congresso IUCr si è svolto nel grande e funzionale Palazzo dei Congressi di Montreal, al centro della città, che ha permesso lo svolgimento di 4 plenary lectures, 38 Keynote lectures e 112 Microsymposia con fino ad otto sessioni parallele. I partecipanti sono stati quasi 2500. I contenuti scientifici sono stati molto ricchi e di primaria importanza. Delle quattro conferenze plenarie, una è stata tenuta da Dan Schectman, premio Nobel 2011 per la Chimica per la scoperta e la caratterizzazione dei quasi cristalli. Altro speaker di eccellenza è stato D. Bish, responsabile della progettazione del laboratorio cristallografico miniaturizzato ed automatizzato, montato sulla sonda Curiosity che invia prime informazioni quantitative sulla composizione del suolo di Marte. Inoltre hanno parlato J. M.

Garcia-Ruiz sul self-assembly di nanomateriali e J.Miao sulla Tomografia elettronica alla risoluzione atomica.

La presenza di cristallografi italiani è stata buona (20-30 unità) ma bisogna tenere conto che Montreal si trova oltreoceano ed è oggi difficile trovare sovvenzionamenti per lunghe e costose trasferte. Purtroppo non ci sono state keynotes di italiani, riflettendo anche l'assenza di colleghi italiani nel Comitato Scientifico del Congresso a differenza dei precedenti Congressi IUCr, dove si è potuto introdurre e far selezionare alcuni nostri contributi. Numerosa invece è stata la partecipazione italiana nei 120 Microsimposi, sia come chairs che come speakers. E' emerso che anche in Italia si possono affrontare con successo tematiche di frontiera, sia per lo sviluppo metodologico che per le applicazioni della cristallografia.

A nostro giudizio, sono risultate molto interessanti le relazioni al congresso sugli sviluppi di apparecchiature, come in particolare i nuovi rivelatori, sempre più sensibili e veloci, e sulle caratteristiche delle sorgenti nelle large-scale facilities, sia per quanto riguarda i sincrotroni che gli XFEL (Free Electron Laser). L'incredibile potenza di queste sorgenti e la frequenza dei bunch di elettroni circolanti permettono ormai di risolvere strutture di sostanze estremamente complesse come i ribosomi, partendo da un numero di singole unità cristalline di pochi micron, che vengono irraggiate per pochi minuti. Inoltre questo permette anche di studiare con efficacia il loro comportamento dinamico. I progressi si registrano ormai mese dopo mese, ma i costi di progettazione e gestione delle nuove facilities sono elevatissimi, anche tenuto conto che ognuna di queste sorgenti diventa "obsoleta" nel giro di 3-4 anni. In ogni caso, in questo settore si stanno sviluppando grandi innovazioni per il futuro della ricerca cristallografica ed è auspicabile che anche l'Italia faccia ogni sforzo per affacciarsi su questo settore di avanguardia per mantenere la competitività internazionale.

Grande attenzione è stata rivolta anche al mondo in rapido sviluppo delle strutture magnetiche e al loro impatto sulle scienze dei materiali. Rispetto a questo, si deve notare che l'Italia è entrata con Andrea Cornia (Modena) a far parte della relativa Commissione tecnica dell'IUCr, la cui candidatura fu proposta insieme con molte altre approvate dalla Commissione CNR-IUCr.

Nel Programma di Montreal erano previsti anche quattro "satellite meeting", due dei quali (Computing ed Electron Diffraction) hanno dovuto essere annullati per un insufficiente numero dei partecipanti.

Infine, è importante rilevare come l'attività della comunità cristallografica italiana sia tuttora molto apprezzata in ambito internazionale per tutta l'attività svolta in passato e quella in corso. Questo permette di mantenere rapporti eccellenti con i vertici dell'IUCr, ma anche con le realtà regionali, in particolare quella europea. Da questo punto di vista l'Italia è uno dei paesi che più si sono distinti per gli eventi IYCr2014. Tra l'altro ha fortemente voluto ed organizzato con successo la prima edizione della scuola europea di cristallografia (ECS1, Pavia 27 agosto-6 settembre). L'evento, che si è appena concluso con grande plauso, era stato pensato per offrire ai giovani nuove possibilità di apprendimento della cristallografia, visto che il mondo Accademico sembra aver quasi cancellato l'insegnamento dai propri programmi. Il risultato è stato ampiamente consono alle aspettative. Anche alla luce di questo risultato, la scuola ECS continuerà negli anni a venire, svolgendosi ogni anno in un paese diverso tra quelli appartenenti all'ECA.

In fede
Carlo Mealli
Roberta Oberti
Michele Saviano

Firenze, 20 Settembre 2014