

3.2 Progetti Strategici

I Progetti Strategici rappresentano uno strumento di promozione della ricerca scientifica da parte del CNR. Finanziati con fondi ordinari, i Progetti Strategici costituiscono spesso una “prova”, anticipando l’avvio dei Progetti Finalizzati, oppure un “ponte” tra la conclusione di un Progetto Finalizzato e la sua continuazione.

Nel 1998 il finanziamento complessivo per i 40 progetti strategici attivi è stato di circa 12 miliardi di lire. Nella tavola 3.2a è riportata la ripartizione percentuale dei fondi per settore di destinazione.

In generale, comunque, nel 1998 i Progetti Strategici hanno registrato una forte flessione nel budget loro riservato pur ottenendo un congruo numero di risultati come mostrato nella tavola 3.2b.

Per i 6 Progetti Strategici che sono stati rinnovati anche per il 1998 quali: *Modellistica computazionale di sistemi molecolari complessi*, *EV - K2 - CNR*, *Museo virtuale dell'informatica*, *Applicazioni industriali della tecnologia microonde*, *Biotechnologia della micorizzazione*,

3.2 Strategic Projects

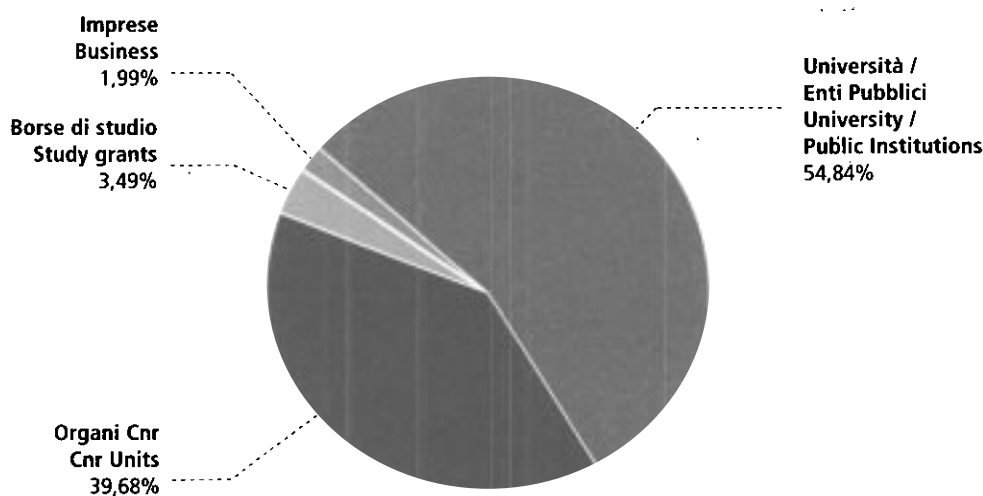
Strategic Projects are instruments for the promotion of scientific research by CNR. Financed by ordinary funds, Strategic Projects often constitute a “trial” period while anticipating the start of Target Projects, or define a “bridge” between the conclusion of a Targeted Project and its continuation.

In 1998, the entire financing for the 40 active strategic projects was approximately 12 billion lira. The percentual divisions of funds per sector is reported in table 3.2a.

In general, however, in 1998 Strategic Projects registered a budget decrease while obtaining an adequate number of results as shown in table 3.2b.

The six Strategic Projects that were renewed in 1998, including Computational Model Design of Molecular Compounds, EV-K2-CNR, a Virtual Museum of Information Technology, Industrial Applications of Microwave Technology, Biotechnology of Micorization and Prototype of technology transfer agency,

3.2a Fondi dei Progetti Strategici per tipologia di spesa
Strategic projects funding by type of third parties



3.2b Risultati dei progetti strategici *Results of strategic projects*

Progetti Projects	A Pubblicistica internazionale International articles	B Pubblicistica nazionale Domestic articles	C Oggetti Objects	D Brevetti Patents	E Trasferiti Transfer
Applicazioni industriali della tecnologia microonde Industrial applications of microwave technology	13	15	4	1	14
Modellistica computazionale di sistemi molecolari complessi Computational models of complex molecular systems	74	17	4	—	—
Museo virtuale dell'informatica Virtual museum of information technology	2	23	8	—	—
EV - K2 - CNR Mount Everest research project	3	33	—	—	14
Biotecnologia della micorizzazione Biotechnology of micorization	20	44	7	1	19
Prototipo di struttura per il trasferimento tecnologico Prototype of technology transfer agency	—	14	2	—	26
Supporto all'attività legislativa del Parlamento Support to parliamentary legislative activity	—	3	1	—	7
Sensori biologici e progettazione di biosensori Biological sensors	42	36	9	—	40
Materiali lapidei e valorizzazione dei materiali Stone materials	—	—	1	—	3
Aperture ed evoluzione di un bacino oceanico dal Mar Rosso all'Atlantico Ocean basin from the Red Sea to the Atlantic	5	5	0	0	4
L'Italia in Europa: governance e politiche per lo sviluppo economico-sociale Italy in Europe: governance and economic policy	41	29	—	—	6
Problemi prioritari e politiche di razionalizzazione del sistema sanitario nazionale Optimization of Italian health system	0	21	2	0	3
Encefalopatia spongiforme bovina Bovine spongiform encephalopathy	8	28	9	—	13
Astronomia submillimetrica Submillimeter astronomy	9	13	—	—	—
Calcolo Simbolico Symbolic calculus	13	1	15	0	0
Modelli e metodi per la matematica e l'ingegneria Models and methods for mathematics and engineering	34	57	4	0	1
Controlli post-trascrizionali dell'espressione genica Post-transcriptional controls of gene expression	28	26	2	1	33
Totale Total	292	365	68	3	183

Fonte: DAS, Reparto III - Organi di ricerca ed attività di agenzia

Source: DAS Unit III - Research units and agency activity.

Prototipo di struttura per il trasferimento tecnologico, appare molto confortante il fatto che tutti i valori di produttività siano aumentati rispetto al 1997 anche nell'ambito di una riduzione di budget.

appear to be very reassuring considering that productivity values have increased with respect to 1997 even in light of budget reductions.

3.3 Attività verso imprese ed università

Il CNR svolge la sua attività di Agenzia non solo attraverso i Progetti Finalizzati e Strategici, ma anche attraverso la promozione diretta di attività di ricerca svolte da imprese, enti privati e pubblici ed università. Nella fattispecie, questa attività si esplica dietro presentazione, da parte di queste istituzioni, di progetti di ricerca, che, qualora valutati positivamente dal CNR, vengono finanziati attraverso la stipula di contratti e l'erogazione di contributi.

Nella tavola 3.3a si fornisce l'importo complessivo dei contratti assegnati da ciascuna area scientifica nonché il loro numero; rispetto al 1997, si ha una diminuzione dell'importo in quasi tutte le aree scientifiche: così come appare sostanzialmente dimezzato il numero complessivo dei contratti.

3.3 Funding of business and university research

CNR develops its agency activity not only by Targeted and Strategic Projects, but also through direct promotion of research conducted by businesses, public and private organizations and universities. In this case, this activity unfolds after the presentation, by these institutions, of research projects which, if positively evaluated by CNR, are financed by contracts and contributions.

The total amounts of assigned contracts and their respective numbers for each scientific area are provided in table 3.3a. In comparison to 1997, a reduction in total amounts is noted in nearly every scientific field and the entire number of contracts is nearly halved.

3.3a Contratti di ricerca (L/mio)
Research contracts (L/mio)

Area scientifica Scientific area	Importo Amount	Numero Number	Media Average
Medicina Medicine	390	21	19
Geologia Geology	350	1	350
Storia History	140	23	6
Giuridispresenza Law	129	18	7
Economia Economics	25	4	6
Ambiente Environment	50	7	7
Bioteconologie Biotechnologies	28	2	14
Beni Culturali Cultural heritage	56	6	9
Altro Other	750	14	54
Totale Total	1.918	96	52

Fonte: CED; Elaborazione gruppo di redazione
Source: CED; Editorial group elaboration

3.3b Contributi di ricerca (L/mio)
Research grants (L/mio)

Area scientifica Scientific area	Importo Amount	Numero Number	Media Average
Matematica Mathematics	686	60	11
Fisica Physics	2.009	90	22
Chimica Chemistry	3.513	305	12
Medicina Medicine	5.697	384	15
Geologia Geology	1.715	122	14
Agraria Agriculture	1.516	255	6
Ingegneria Engineering	1.818	202	9
Storia History	3.680	651	6
Giurisprudenza Law	2.016	320	6
Economia Economics	1.492	273	5
Innovazione Innovation	2.467	182	14
Informatica Information	585	71	8
Ambiente Environment	306	43	7
Biotecnologie Biotechnologies	785	89	9
Beni Culturali Cultural heritage	905	136	7
Altro Other	400	25	16
Totale Total	29.590	3.208	10

Fonte: CED; Elaborazione gruppo di redazione
Source: CED; Editorial group elaboration

3.3c Altri interventi (L/mio)
Other actions (L/mio)

Area scientifica Scientific area	Importo Amount	Numero Number	Media Average
Matematica Mathematics	513	37	14
Fisica Physics	150	10	15
Chimica Chemistry	170	26	7
Medicina Medicine	570	147	4
Geologia Geology	109	15	7
Agraria Agriculture	255	33	8
Ingegneria Engineering	307	54	6
Storia History	1.477	279	5
Giurisprudenza Law	970	118	8
Economia Economics	647	75	9
Innovazione Innovation	25	5	5
Informatica Information	50	11	5
Beni Culturali Cultural heritage	184	32	6
Altro Other	1.194	114	10
Totale Total	6.621	956	8

Fonte: CED; Elaborazione gruppo di redazione
Source: CED; Editorial group elaboration

La tavola 3.3b evidenzia l'importo dei contributi assegnati nel 1998 alle università e ad altri enti pubblici da ciascuna area scientifica, nonché il numero relativo. Anche qui i dati indicano una diminuzione (circa del 30%) degli importi, così come un calo del numero dei contributi stessi.

Nella tavola 3.3c vengono presentati i contributi, ripartiti per area scientifica, assegnati sotto forma di altri interventi a favore della mobilità del singolo studioso italiano o straniero, dell'organizzazione di congressi, della stampa di periodici, nonché della redazione di opere e trattati.

Table 3.3b illustrates the total sums of allotted contributions in 1998 to universities and other public and private organizations by each scientific area and their relative numbers. The data here also indicates a decrease (approximately 30%) in totals and a fall in the number of the same contributions.

Table 3.3c presents data on grants to mobility of individual scholars, organization of conventions, printing of periodicals, and writing of books.

3.3d Richieste di Finanziamento per area scientifica
Funding applications by scientific area

Area scientifica Scientific area	Totale delle richieste Total applications	Richieste non finanziate Rejected	Richieste finanziate Funded	Percentuale non finanziate Percent rejected	Percentuale finanziate Percent funded
Matematica Mathematics	271	174	97	64	36
Fisica Physics	290	190	100	66	34
Chimica Chemistry	755	424	331	56	44
Medicina Medicine	1.757	1.205	552	69	31
Geologia Geology	291	153	138	53	47
Agraria Agriculture	970	682	288	70	30
Ingegneria Engineering	823	567	256	69	31
Storia History	2.713	1.760	953	65	35
Giurisprudenza Law	747	291	456	39	61
Economia Economics	985	633	352	64	36
Innovazione Innovation	651	464	187	71	29
Informatica Information	328	246	82	75	25
Ambiente Environment	307	257	50	84	16
Biotecnologie Biotechnologies	256	165	91	64	36
Beni Culturali Cultural heritage	415	241	174	58	42
Altro Other	232	79	153	36	64
Totale Total	11.791	7.531	4.260	63	37

Fonte: DAS, Reparto III — Organi di ricerca ed attività di agenzia; CED; Elaborazione gruppo di redazione
 Source: DAS, Unit III — Research units and agency activity; CED; Editorial group elaboration

Infine, la tavola 3.3d riporta i dati relativi a tutte le richieste di finanziamento pervenute al CNR nel 1998. Come si può notare, il processo di valutazione ed accettazione delle richieste è molto severo, ed infatti risulta finanziato solo il 36% delle richieste.

In concluding, table 3.3d reports the relative data of all requests for financing that CNR received in 1998. Quite noteworthy, is the extremely severe process of request evaluation and acceptance which ultimately results in the financing of only 36% of total requests.

3.4 Gruppi Nazionali della Protezione Civile

Anche i Gruppi Nazionali della Protezione Civile sono istituzioni verso le quali il CNR opera in qualità di agenzia. Essi coinvolgono strutture diverse per settore di appartenenza.

3.4 National Emergency Relief Groups

CNR also does a great deal of agency work with National Emergency Relief Groups. This includes the involvement of various structures within their appropriate sectors.

La tavola 3.4a riporta le spese nel triennio 1996-1998 dei Gruppi Nazionali della Protezione Civile, dalla quale emerge un modesto incremento dei fondi a disposizione.

Si assiste di conseguenza alla lieve crescita, come appare dalla tavola 3.4b, degli importi destinati ai contratti e contributi di ricerca (vedi tavola 3.3b del CNR Report 1998) gestiti da tali strutture.

La tavola 3.4c mostra, invece, i risultati conseguiti dai Gruppi Nazionali della Protezione Civile nel 1998. Se confrontati con i risultati 1997 emerge un aumento complessivo della produzione scientifica e soprattutto una maggiore finalizzazione dei risultati scaturiti dalle attività di ricerca.

Expenditures for 1996-1998 by National Emergency Relief Groups in table 3.4a report a slight increase in funds available.

As a consequence, table 3.4b demonstrates a slight increase of totals reserved for contracts and research contributions managed by this type of structure (see table 3.3b of the 1998 CNR Report).

Instead, table 3.4c illustrates the results achieved by the National Emergency Relief Groups in 1998.

Compared to the results of 1997, an increase in scientific production is noted and, more importantly, sharper finalization of the results obtained by the research activity.

3.4a Fondi dei Gruppi Nazionali della Protezione Civile (L/mio) *National emergency relief groups funds (L/mio)*

Area scientifica Scientific area	Gruppo Group	1996	1997	1998
Chimica Chemistry	Difesa rischi chimico-industriali Chemical-industrial risk	3.021	3.381	3.882
Geologia Geology	Catastrofi idrogeologiche Hydrogeologic catastrophies	4.939	4.880	5.287
Geologia Geology	Terremoti Earthquakes	3.310	3.385	4.569
Geologia Geology	Vulcanologia Volcano science	6.174	6.520	6.780
Totale Total		17.444	18.166	20.518

Fonte: DBR, Conto consuntivo 1996-97-98 - Importi impegnati
Source: DBR, 1996-97-98 Financial statements

3.4b Gruppi Nazionali della Protezione Civile, contratti e contributi di ricerca (L/mio) *National emergency relief groups, contracts and grants (L/mio)*

Area scientifica Scientific area	Gruppo Group	Importo Amount	Numero Number	Media Average	Tipologia finanziamento Type of fund
Chimica Chemistry	Difesa rischi chimico-industriali Chemical-industrial risk	2.371	54	44	Contratto Contract
Geologia Geology	Catastrofi idrogeologiche Hydrogeologic catastrophies	3.000	70	43	Contratto Contract
Geologia Geology	Terremoti Earthquakes	2.698	32	84	Contratto Contract
Geologia Geology	Vulcanologia Volcano science	2.003	43	47	Contributo Grant
Totale Total		10.072	199	54	

Fonte: CED; Elaborazione gruppo di redazione
Source: CED, Editorial group elaboration

3.4c Risultati dei Gruppi Nazionali della Protezione Civile
National emergency relief groups results

Progetti Projects	A Pubblicistica internazionale International articles	B Pubblicistica nazionale Domestic articles	C Oggetti Objects	D Brevetti Patents	E Trasferiti Transfer
Rischi Chimico-industriali Chemical-industrial risk	30	95	3	1	21
Catastrofi idrogeologiche Hydrogeologic catastrophies	78	333	21	0	321
Terremoti Earthquakes	74	71	0	0	60
Vulcanologia Volcano science	100	166	12	0	19

Fonte: DAS, Reparto III — Organi di ricerca ed attività di agenzia
 Source: DAS, Unit III — Research units and agency activity

3.5 Attività internazionali

Da oltre cinquanta anni il CNR assolve l'importante funzione di aderire alle Organizzazioni scientifiche internazionali non governative che raccolgono al loro interno l'intera comunità scientifica mondiale (tavola 3.5a). Con la partecipazione a tali organismi, il CNR consente il necessario raccordo tra le conoscenze e le aspettative della rete scientifica nazionale e quelle degli altri paesi. Appare chiaro come, attraverso questa presenza dell'Ente nelle sedi primarie della circolazione delle idee e dei risultati, si realizzi anche un ulteriore momento di stimolo, confronto e aggiornamento per i propri organi di ricerca. Fra i 7 organismi interdisciplinari, particolare importanza riveste la *European Science Foundation* (ESF) cui aderiscono 65 istituzioni nazionali di ricerca appartenenti a 22 paesi europei. La sua missione è quella di stimolare gli organismi membri ad ideare, allestire e coordinare i progetti di ricerca multilaterali, contribuendo così all'integrazione dei ricercatori europei coinvolti nei vari programmi scientifici. La Fondazione inoltre periodicamente analizza e approfondisce argomenti d'importanza strategica per la politica scientifica dell'Europa. Finanzia *networks* ed euroconferenze e in generale la mobilità dei ricercatori, mentre i programmi scientifici *à la carte* sono realizzati mediante i contributi delle organizzazioni aderenti.

Il CNR è stato fra i soci fondatori e partecipa per l'Italia con una quota largamente mag-

3.5 International activities

For more than 50 years, CNR has performed important functions to support non-governmental international scientific organizations that comprise the world-wide scientific community (table 3.5a).

With the participation in such member bodies, CNR agrees to the necessary connection between knowledge and expectations of the national scientific network and those of other countries. It is clear that CNR participation in international circles stimulates the circulation of ideas and results.

Between the seven interdisciplinary bodies, particular importance is given to the European Science Foundation (ESF) which is composed of 65 national research institutions from 22 European countries. Its mission is to stimulate the member bodies to plan, prepare and coordinate multi-lateral research projects thereby contributing to the integration of European researchers involved in various scientific programs. In addition, the Foundation periodically analyzes and examines strategic important tasks for European scientific policy. It finances networks, Euroconferences and staff mobility while the scientific programs "à la carte" are accomplished by means of support by member organizations.

CNR was a founding member and participates on behalf of Italy with a major quota (more than 70% of the quota per country), together with INFN and INFN. The annual associative

gioritaria (oltre il 70% della quota/paese) insieme all'INFN e all'INFN. La quota associativa annuale ammonta per il 1998 a 924 milioni di Lire.

Un altro aspetto importante dell'attività è rappresentato dalla partecipazione del CNR a grandi progetti internazionali (tavola 3.5b), alcuni dei quali vedono il coinvolgimento di un gran numero di paesi scientificamente avanzati (ODP, APE), altri limitati alla partecipazione europea (JIVE, ERCIM), altri infine più specificamente basati su accordi bilatera-

quota for 1998 amounted to 924 million lira. Another important aspect of the activity is represented by CNR's participation in significant international projects (table 3.5b), some of which involve a large number of scientifically advanced countries (ODP and APE), others are exclusively limited to European participation (JIVE and ERCIM), while others are specifically based on bilateral agreements (ISIS and THEMIS).

• • • • •
3.5a Organismi scientifici internazionali
 ai quali aderisce il CNR
CNR membership in scientific institutions

Area scientifica Scientific area	Numero organismi scientifici internazionali Number of international scientific institutions	Quota associativa annua (L/mio) Annual fee (L/mio)
Matematica Mathematics	2	18
Fisica Physics	9	171
Chimica Chemistry	2	52
Medicina Medicine	6	30
Geologia Geology	11	62
Agraria Agriculture	5	15
Ingegneria Engineering	11	87
Storia History	2	19
Innovazione Innovation	4	87
Ambiente Environment	9	308
Bioteologie Biotechnologies	2	18
Interdisciplinare Interdisciplinary	7	1.196
Totale Total	70	2.063

Fonte: DRI
 Source: DRI

li (ISIS, THEMIS). Particolare rilievo assume la partecipazione italiana alla Sorgente Neutronica Pulsata ISIS. Nel 1998 sono stati condotti 33 esperimenti italiani da 57 ricercatori con risultati di rilievo (38 articoli pubblicati su riviste internazionali, un capitolo di un'opera con editore straniero). Di rilievo è, infine, il Programma *Short Term Mobility*, diretto a permettere lo svolgimento di programmi di ricerca in collaborazione con istituzioni scientifiche straniere di eccellenza nell'interesse esclusivo della ricerca scientifica italiana (tavola 3.5c).

The participation of Italy in the Neutronic Pulse Source ISIS is of particular importance. In 1998, a total of 33 Italian experiments were conducted by 57 researchers with remarkable results, (38 published articles in international journals and one chapter of a book with an international publisher).

Finally, the program Short Term Mobility is directed to allow for involvement and conduction of research programs in collaboration with foreign scientific institutions of excellence in the exclusive interest of Italian scientific research (table 3.5c).

3.5b Progetti internazionali ai quali il CNR partecipa
CNR participation in international projects

Progetto Projects	Acronimo Acronym	Costo annuo (L/mio) Annual cost (L/mio)
Scattering Neutron Source	ISIS	2.050
Telescopio Eliografico per lo studio del Magnetismo e delle Instabilità Solari Heliographic Telescope	THEMIS	300
European Science Foundation	ESF	236
Airborne Polar Experiment	APE	120
Ocean Drilling Program	ODP	1.250
Centro Europeo per il Calcolo Atomico e Molecolare Atomic and molecular calculus	CECAM	210
International Computer Science Institute	ICSI	570
European Research Consortium for Informatics and Mathematics	ERCIM	134
Archivi della Letteratura Latino-Americana, Caraibica e Africana Archives of Latin-American, Caraibic and African literature	AALCA	135
Joint Institute for VLBI in Europe	JIVE	215
Centro Internazionale Fisica Teorica Theoretical Physics	CIFT	250
OCSE - Biological Resources Management	OCSE	100
World Wide Web Consortium	W3C	9
Totale Total		5.445

Fonte: DRI
 Source: DRI

3.5c Programma Short Term Mobility
Short Term Mobility programme

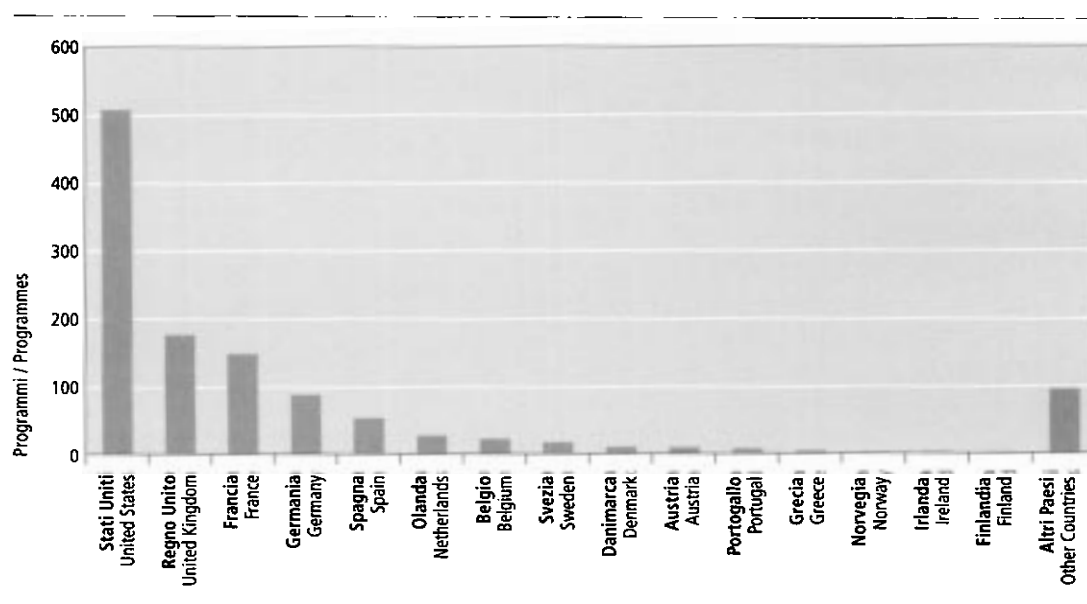
	1995-96			1997			1998		
	Domande pervenute Applications	Soggiorni finanziati Funded		Domande pervenute Applications	Soggiorni finanziati Funded		Domande pervenute Applications	Soggiorni finanziati Funded	
		Numero Number	%		Numero Number	%		Numero Number	%
Personale CNR CNR Personnel	109	100	92	99	69	70	62	32	52
Personale altre istituzioni Other institutions	660	316	48	560	331	59	381	151	40
Stranieri Strangers	183	63	34	159	93	58	60	30	50
Totale Total	952	479	50	818	493	60	503	213	43
	1995-96			1997			1998		
Stanziamento (L/mld) Budget (L/bio)	4,0			2,5			2,0		
Spesa (L/mld) Expenditure (L/bio)	3,2			3,6			1,6		

Fonte: DRI
Source: DRI

Nella tavola 3.5d viene riportato il numero di progetti svolti nell'ambito del Programma *Short Term Mobility* suddiviso per nazioni destinatarie degli interventi.

Table 3.5d reveals the number of projects conducted in the Short Term Mobility program subdivided by participating countries.

3.5d Programma Short Term Mobility: nazioni destinatarie
Short Term Mobility programme: destination countries



Fonte: DRI
Source: DRI

Aria più pulita: nuovi materiali per il controllo ambientale

◊ ◊ ◊

Il composto indicato come $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{(5+8)}$ ha rappresentato per molti anni un problema di strutturistica chimica molto complicato. L'interesse intorno a questo materiale deriva dalla sua capacità di assorbire grandi quantità di ossidi di azoto, gas tossici prodotti nei processi di combustione come conseguenza ineliminabile della presenza maggioritaria di azoto nell'atmosfera. Questi gas sono tra i responsabili di fenomeni come le piogge acide e l'assottigliamento dello strato di ozono. L'applicabilità delle proprietà di assorbimento, tuttavia, è risultata nulla fino a che, con la nostra ricerca, non si sono individuati i dettagli della struttura cristallina e si è risolto il problema cruciale della stabilità del materiale nelle condizioni di esercizio, cioè a 400 °C in presenza di forti concentrazioni di acqua e anidride carbonica. Questa scoperta ha aperto la strada allo sviluppo di prodotti industriali innovativi con un mercato potenziale stimato di centinaia di milioni di Euro/anno.

◊ ◊ ◊

Nel corso di una ricerca iniziata nel 1995, in collaborazione con il CNR-CSSD, il CNR-LAMEL ed il Dipartimento di Chimica Fisica ed Inorganica dell'Università di Bologna, su materiali ossianionici imparentati con gli ossidi superconduttori ad alta temperatura critica, si sono scoperte interessanti proprietà di reattività chimica, legate alla capacità di tali materiali di scambiare spontaneamente piccoli gruppi anionici. Queste inusuali proprietà chimiche sono legate al fatto che la struttura cristallina dei composti in esame è costituita da una matrice altamente ordinata su cui si dispone una sottostruttura totalmente disordinata di cationi legati ai gruppi anionici.

Questa osservazione ci ha indotto a riconsiderare molti composti noti del sistema Ba-Cu-O,

A cleaner air: new materials for environmental control

◊ ◊ ◊

For many years, the compound $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{(5+8)}$ has represented a hard problem in crystal chemistry. The interest in such a material stems from its capability of absorbing enormous amounts of nitrogen oxides. These are toxic gases produced in any combustion process as a consequence of the presence of nitrogen in the atmosphere. Nitrogen oxides are responsible for serious environment problems like acid rains and the thinning of the ozone layer.

So far, the remarkable absorption capabilities of $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{(5+8)}$ could not be exploited until our recent results have revealed very subtle details of the crystal structure that, in turn, allowed the solution of the problem of the instability of $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{(5+8)}$ under the typical working conditions, $T \sim 400^\circ\text{C}$ and high concentration of H_2O and CO_2 . This is resulting in the development of innovative denox systems that show a potential global market of several hundred millions Euro per year

◊ ◊ ◊

In collaboration with CNR CSSD, CNR LAMEL and the Dept. of Physical and Inorganic Chemistry

of the University of Bologna, we started in 1995 a research on a class of oxyanionic materials related to the high T_c superconducting oxides that were showing interesting properties of chemical reactivity like spontaneous exchange of small anions. Such unusual properties were related to peculiar features of their crystal structure that is based on a highly ordered template on which a totally disordered sub structure of cations and anionic groups is superimposed.

These results have compelled us to reconsider some compounds in the Ba-Cu-O system, in particular $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{(5+8)}$, as the existing structural determinations were so inconsistent that there was little consensus even on the composition of such compound that was often referred in

ed in particolare il composto $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{(5+\delta)}$, la cui descrizione strutturale presentava notevoli incongruità, al punto che la letteratura non era univoca nemmeno sulla sua composizione, riportando spesso lo stesso composto con formule tipo BaCuO_{2+x} . Si è scoperto che questo composto è capace di assorbire grandi quantità di ossidi di azoto (NO_x), specie inquinanti dannose per la loro tossicità e perché sono co-responsabili dei fenomeni delle piogge acide e dell'assottigliamento dello strato di ozono. La enorme produzione di ossidi di azoto deriva dal fatto che in un qualunque processo di combustione, l'azoto, componente maggioritario dell'atmosfera, reagisce con l'ossigeno, indipendentemente dalla pulizia del combustibile usato.

Un paziente lavoro ci ha rivelato che in realtà quello che veniva definito come $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{(5+\delta)}$ è una famiglia di composti di composizione simile e tuttavia distinti da sottili peculiarità strutturali che originano proprietà chimiche molto diversificate.

La caratteristica comune di tutti i composti tipo $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{(5+\delta)}$ è quella di risultare dalla intercalazione di due edifici cristallini distinti e incommensurati tra loro. La elevatissima reattività chimica di tali composti consegue dall'indeterminazione della distanza di legame Ba-O, essendo quest'ultimo ione esclusivamente legato alla periodicità della struttura contenente il rame. Si vengono così a creare dei siti dove il bario ha un carattere quasi metallico e, all'opposto, dei siti in cui il bario risulta estremamente ossidato. Da questa necessariamente sommaria descrizione strutturale si può qualitativamente comprendere come i composti tipo $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{(5+\delta)}$ siano in grado di assorbire piccole molecole gassose: infatti una molecola assorbita su un sito attivo genera una distorsione locale che favorisce la sua diffusione su un sito attivo adiacente, creando una sorta di pompaggio microscopico. Perché questa proprietà risulti applicabile nell'abbattimento degli ossidi di azoto è necessario che tale meccanismo di pompaggio agisca selettivamente sulle specie altamente nocive presenti nei fumi di scarico in concentrazioni da 100 a 1000 volte più basse di quelle di molecole altrettanto affini quali CO_2 e H_2O .

literature as BaCuO_{2+x} . The interest on such a compound derives from the discovery of its capability to absorb enormous quantities of nitrogen oxides (NO_x), pollutants dangerous not only for their toxicity but also for their role in promoting acid rains and thinning of the ozone layer. The production of nitrogen oxides from human activities is enormous as it is intrinsically related to any combustion process: the atmospheric nitrogen gets oxidised to some extent no matter how clean is the fuel or the burning. After a long and difficult work of structural determination, we have discovered that what used to be defined $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{(5+\delta)}$ is actually a whole family of compounds with similar composition and slightly different structural features originating very different chemical behavior.

The common feature in all the compounds like $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{(5+\delta)}$ is the intercalation of two distinct crystal structures that are incommensurate. The very high reactivity is related to the indetermination of the Ba-O interatomic distance, as the oxygen atoms are exclusively bond to the substructure containing copper. Therefore, there are sites in which barium has almost a metal character and, on the contrary sites where the barium is over-oxidised. This simplified structural picture helps in the qualitative understanding of the absorption of large amounts of small molecules: a molecule absorbed on an active site produces a local structural distortion that promotes its diffusion to a nearest active site, activating a sort of microscopic pump. However, to be able to apply such a property in de- NO_x devices it is necessary that the absorption acts selectively on the dangerous molecular species. The NO_x concentration in typical fumes is, in fact, 100 to 1000 times lower than the concentration of the similarly active molecules of water and carbon dioxide.

Once the synthesis process to obtain selective absorbers has been found, we have started a quite fruitful co-operation with the Süd Chemie Group, that bought the licenses of the different international patents we had produced. The aim is to convert our materials into industrial products like: de- NO_x systems for power plants and large combustion facilities, de- NO_x components for automotive exhausts, or purifiers for high contamination environments and so on. The estimated global potential market for de-

Una volta individuato il processo di sintesi dei materiali del tipo $\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{(5+\delta)}$ selettivi nei confronti degli NO_x , si è iniziata una fruttuosa collaborazione con il gruppo Süd Chemie, licenziatario dei brevetti internazionali conseguiti, al fine di industrializzare le applicazioni dei nuovi materiali: sistemi de- NO_x per centrali termoelettriche e grandi combustori, componenti di marmitte per autoveicoli, purificatori per ambienti ad alto rischio, con un mercato potenziale stimato totale dell'ordine delle centinaia di milioni di Euro/anno.

◻ ◻ ◻

CNR

Istituto di Spettroscopia Molecolare

NO_x devices and systems is of the order of several hundred millions Euro/year.

◻ ◻ ◻

CNR

Institute of Molecular Spectroscopy

Un modello matematico per il cuore

• • •

La descrizione matematica dell'intero sistema cardiaco è una sfida sia modellistica che computazionale.

La ricerca riguarda la simulazione degli eventi bioelettrici cardiaci che, generando correnti che si diffondono nel corpo, sono l'origine della morfologia osservata negli usuali elettrocardiogrammi.

La scoperta delle leggi che governano l'evoluzione del processo di attivazione cardiaca consente inferenze più mirate ed affidabili sullo stato della funzionalità elettrica cardiaca e quindi permetterà di migliorare l'attività diagnostica basata sull'analisi degli elettrocardiogrammi.

* * *

Durante un battito cardiaco, flussi di correnti elettriche si diffondono nel cuore, sostenuti e rinforzati da processi biochimici reattivi, che si innescano all'interno delle membrane cellulari; essi raggiungono progressivamente ogni punto del muscolo determinandone la successiva contrazione.

La descrizione di questa fondamentale attività di natura bioelettrica dipende dal dettaglio con cui si rappresenta il tessuto cardiaco: si parte dalla scala microscopica delle membrane di ogni singola cellula, si passa per la tipica struttura a fibre, si arriva infine, dopo un delicato processo di omogeneizzazione, ad un modello macroscopico continuo. Quest'ultimo traduce il comportamento fortemente anisotropo del miocardio e, pur essendo ancora estremamente complesso, è praticamente l'unico che consente di effettuare simulazioni sull'intero cuore e le cui previsioni possono essere confrontate con dati sperimentali.

A livello macroscopico, la prima fase del battito è caratterizzata dal processo di attivazione elettrica, cioè dalla propagazione di un

A mathematical model of the heart

• • •

The mathematical description of the whole cardiac system is a modelling and computational challenge.

Our research target is the simulation of bio-electrical cardiac phenomena which, in generating electrical currents within the body, are at the origin of the morphology characteristically found in electrocardiograms.

The mathematical formulation of the laws controlling the evolution of the activation process of the myocardium will result in more reliable and precise information about its electric functions. This in turn will enable the improvement of the diagnostic activity based on electrocardiogram analysis.

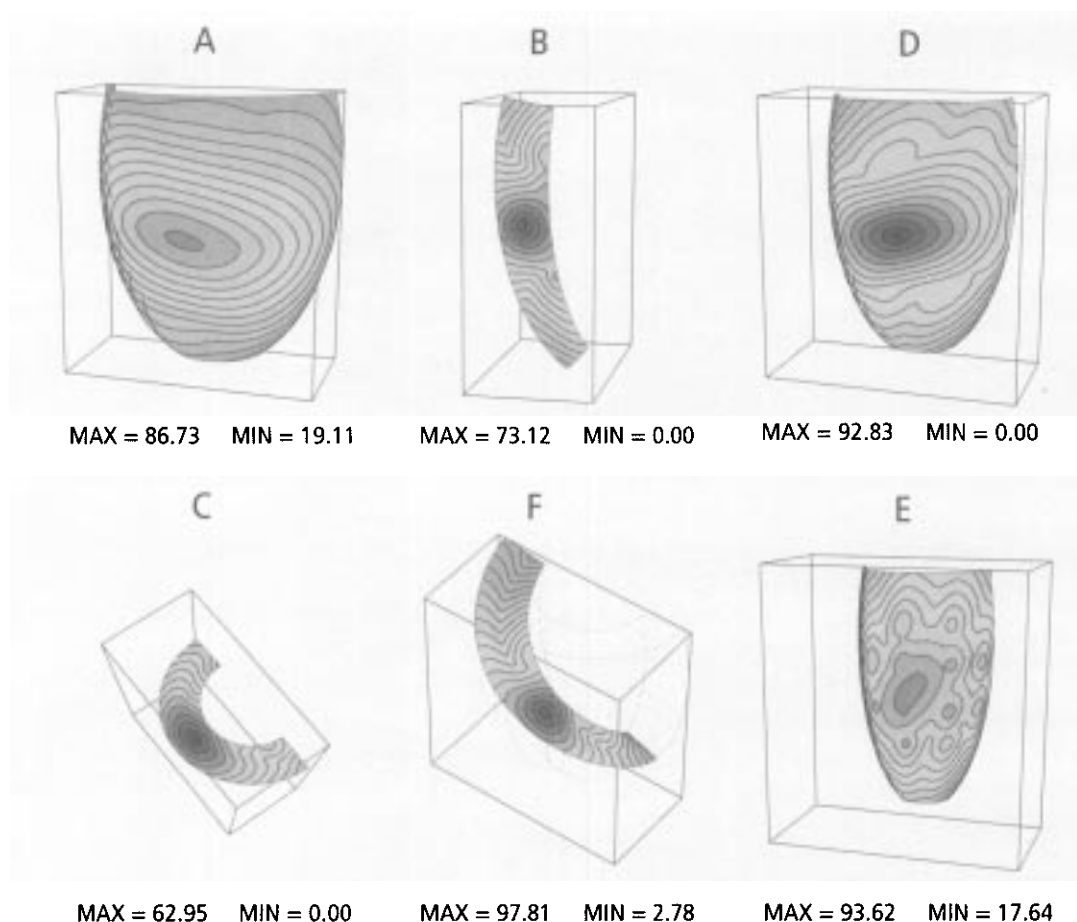
* * *

During the heartbeat, electrical current fluxes, supported and reinforced by bio-chemical reactions inside the cellular membranes, diffuse in the heart. Progressively, they reach every point of the muscle and they determine its successive contraction.

The modelling of this bio-electrical fundamental activity depends on the details used in representing the cardiac tissue: starting from the microscopic scales of a single cardiac cell, through the typical fibre structure, finally, we formulate, after a careful process of homogenisation, a continuous macroscopic model.

This model describes the strong anisotropic behaviour of the myocardium. It is still extremely complex, but it is the only practical model that allows a global simulation of the whole heart and a comparison between the experimental data and its predictions.

At the macroscopic level, the first phase of the heartbeat is characterised by a process of electric activation where we have the propagation of the "excitation front". During this phase the potential of the cells undergoes an abrupt variation through a thin layer (1mm thick) moving in



Propagazione della attivazione generata da uno stimolo applicato a metà parete in un modello monoventricolare che incorpora la struttura anisotropa del miocardio. Su varie sezioni della parete ventricolare sono tracciate le isocrone di attivazione.

Propagation of an activation generated by applying a stimulus in the middle of the ventricular wall. The mono-ventricular model takes into account the anisotropic structure of the Myocardium. The activation isochrones are shown on the different sections of the ventricular wall.

cosiddetto “fronte di eccitazione”: in tale fase il potenziale delle cellule subisce una brusca variazione attraverso una sottile superficie (dello spessore di circa 1 mm) che si muove nel tempo e, appunto, invade tutto il cuore nell’arco di un battito.

Il risultato principale della ricerca è l’individuazione della struttura delle leggi geometriche anisotrope che governano il moto dei fronti di eccitazione in un miocardio normale. Solo lo studio rigoroso del comportamento asintotico di sofisticati modelli matematici alle derivate parziali di tipo reazione-diffusione consente l’identificazione corretta di queste leggi.

time, and sweeping the whole heart during an heartbeat.

The main result of our research has been to characterise the structure of the geometric anisotropic laws that govern the motion of the excitation fronts in a normal myocardium.

This complex problem cannot be solved either by a simple inspection of the experimental data or by formal arguments. Only a rigorous analysis of the asymptotic behaviour of sophisticated mathematical models, involving systems of partial differential equations of reaction-diffusion type, allows the correct identification of these laws.

The advances of the mathematical theory have

Lo sviluppo della teoria matematica ha reso accessibile la simulazione numerica del processo di eccitazione elettrica in modelli dell'intero cuore. Ha fornito inoltre strumenti per l'interpretazione delle caratteristiche multifasiche presenti negli elettrogrammi dovute all'effetto della struttura anisotropa.

Gli sviluppi futuri riguarderanno il raffinamento e l'estensione delle leggi di moto al trattamento sia di tessuti patologici che della fase di disattivazione.

Tale ricerca interdisciplinare si pone al crocevia tra elettrocardiologia, biomatematica, calcolo delle variazioni e analisi numerica e costituisce un fertile terreno per una più stretta collaborazione tra l'Istituto di Analisi Numerica, l'Università degli Studi di Pavia, la Scuola Normale Superiore di Pisa ed il Cardiovascular Research and Training Institute dell'Università dello Utah.

La ricerca è stata svolta anche nell'ambito di un Progetto Integrato e di un Progetto Strategico del CNR, e di Progetti di Ricerca di Interesse Nazionale del MURST.

CNR

Istituto di Analisi numerica

made feasible the numerical simulation of the electrical excitation process on models of the whole heart. Moreover, these developments have provided tools for interpreting the multi-phase wave shapes displayed by the electrograms, showing a strong influence of the anisotropic structure.

The future developments will concern the refinement and the extension of the motion laws to the analysis both of the pathological tissues and of the electrical de-activation phase.

The whole research, typically interdisciplinary, stands at the crossroads between Electro-cardiology, Bio-mathematics, Variational Calculus and Numerical Analysis. It represents a cross-fertilization area for a closer co-operation among the IAN, the University of Pavia, the Scuola Normale of Pisa and the Cardiovascular Research and Training Institute of the University of Utah.

The research was supported by "Progetto Integrato del CNR", "Progetto Strategico del CNR" and by the "Progetti di Ricerca di Interesse Nazionale del MURST".

CNR

Institute for numerical Analysis