

---

ATTI ACCADEMIA NAZIONALE DEI LINCEI  
CLASSE SCIENZE FISICHE MATEMATICHE NATURALI  
**RENDICONTI**

---

GIUSEPPE ALLEGRA

**In memoria di Massimo Simonetta**

*Atti della Accademia Nazionale dei Lincei. Classe di Scienze Fisiche,  
Matematiche e Naturali. Rendiconti, Serie 8, Vol. 81 (1987), n.2, p. 219–225.*

Accademia Nazionale dei Lincei

<[http://www.bdim.eu/item?id=RLINA\\_1987\\_8\\_81\\_2\\_219\\_0](http://www.bdim.eu/item?id=RLINA_1987_8_81_2_219_0)>

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

---

*Articolo digitalizzato nel quadro del programma  
bdim (Biblioteca Digitale Italiana di Matematica)*

*SIMAI & UMI*

<http://www.bdim.eu/>



GIUSEPPE ALLEGRA

**IN MEMORIA DI MASSIMO SIMONETTA**

COMMEMORAZIONE TENUTA NELLA SEDUTA DEL 14 FEBBRAIO 1987



GIUSEPPE ALLEGRA (\*)

## IN MEMORIA DI MASSIMO SIMONETTA

### *L'uomo*

Lo chiamavamo « Attilio Regolo », noi matricole di Ingegneria nell'autunno del 1952, per via di un regolo calcolatore da 70 cm con cui si aiutava nell'eseguire i calcoli, durante le Esercitazioni di Stechiometria al Politecnico di Milano. Io ero affascinato da questo giovane professore, dall'aspetto atletico e dalla parlata facile e chiara, di cui si indovinava che doveva essere molto bravo. Poi, qualche mese dopo, non lo abbiamo visto più; forse aveva avuto un altro incarico di insegnamento all'Università Statale, forse, chissà, era andato in una università americana per un periodo di studio. L'ho poi ritrovato diversi anni dopo, Commissario al mio concorso per la Cattedra di Strutturistica dell'Università di Trieste. In quel periodo abbiamo partecipato assieme un paio di volte alle riunioni del Consiglio Scientifico del Laboratorio C.N.R. « Giordano Giacomello » di Roma. Si era cominciato a parlare di scienza, a fare pian piano amicizia, anche se con lui mi sentivo piuttosto intimidito, nonostante fossi allora pieno di entusiasmo e piuttosto sicuro di me. In una di quelle due occasioni, finita la riunione tutto il gruppo aveva fatto una visita al bar, dove io mi ero offerto di offrire il caffè; con tono calmo ma deciso Massimo si oppose, dicendomi « No, perché potrebbe sembrare una forma di corruzione verso un suo Commissario » e io ricordo di essermi sentito un po' imbarazzato.

In anni ancora successivi, attorno al '75, abbiamo cominciato a vederci in montagna, lui a Champoluc, io ad Antagnod, quattro chilometri di distanza. La montagna piaceva a tutti e due; quanto a me, mi trovavo particolarmente bene con questo amico della cui personalità sentivo tutto il fascino, e che inoltre mi sembrava instancabile, efficiente come un giovanotto e sempre in cerca di nuove gite, possibilmente un po' più lunghe e difficili delle precedenti. E Massimo voleva fare sempre meglio, non voleva essere secondo a nessuno. Ricordo in particolare una lunga gita, alla quale partecipava una signora mia amica che temevo si stancasse nell'occasione. Sulla via del ritorno, mentre mi sentivo piuttosto orgoglioso per aver guidato la comitiva con un ritmo abbastanza lento da non far stancare troppo nessuno, a un tratto Massimo implacabile fa notare che l'anno precedente lui aveva fatto la stessa gita impiegando un'ora di meno . . .

(\*) Discorso commemorativo letto nella seduta del 14 febbraio 1987.

No, decisamente a Massimo non piaceva perdere, che si trattasse di una gita in montagna, di una partita a tennis o di affrontare un problema scientifico.

Intanto, a Champoluc e dintorni la nostra amicizia si rafforzava, gli amici suoi e della signora Mirella diventavano anche amici miei e viceversa. La sua energia, il suo entusiasmo per la vita erano contagiosi. Nel 1981 andammo assieme a Ottawa, con tappa a Parigi, per partecipare al Congresso Internazionale di Cristallografia. Durante le lunghe ore di volo io ero affascinato dalla sua conversazione, così pacata e precisa, così chiara anche nell'affrontare argomenti complicati. Massimo in quella circostanza mi ha parlato a lungo dei suoi anni giovanili più belli, di quando era stato a Pasadena, dove, mi diceva con orgoglio, « ho fatto amicizia con persone del calibro di Edgar Heilbronner, di Martin Karplus, di Jack Dunitz . . . ». Queste amicizie avevano avuto grande significato perché avevano resistito nel tempo, segnando tra l'altro la vita scientifica di Massimo e del suo gruppo per gli stimoli e le collaborazioni che ne erano derivati. Ma sentivo soprattutto nelle sue parole l'ammirazione schietta, incondizionata per le capacità individuali e il valore scientifico di questi studiosi. Ancora una volta, Massimo mostrava di non amare la mediocrità mentre si entusiasmava per i valori, gli aspetti positivi della vita; allo stesso modo gli piaceva una gita in montagna, una discesa sugli sci, un viaggio in aereo, un buon pranzo, magari una bella signora. Gli piaceva vivere, insomma, realizzare, guardare avanti. È da notare che la sua visione della vita non era in generale ottimistica, nonostante la grande determinazione ad affrontarla, a viverla; ricordo una volta in cui, dopo aver negato un consenso che gli era stato richiesto, aveva replicato alle obiezioni, con amarezza: « Forse che a me la vita ha mai regalato qualcosa? ». Comunque questa grande immagine di energia e di vita ha contribuito moltissimo allo sbigottimento mio e di molti altri amici, nella circostanza della sua morte. « Ma come », mi ero detto, « proprio Massimo doveva morire, con tutta la sua voglia di vivere, con tutte le cose che ancora gli restavano da fare? ». E, in realtà, di cose ne aveva già fatte moltissime.

### *L'opera scientifica*

Massimo Simonetta ha pubblicato, da solo o in collaborazione, più di quattrocento lavori, nella stragrande maggioranza su riviste a diffusione internazionale. A sua volta, tra i coautori delle sue pubblicazioni, oltre a numerosi, valentissimi allievi, ha potuto annoverare nomi tra i più prestigiosi della Chimica Fisica mondiale (tra questi Pauling, Schomaker, Heilbronner, Winstein, Vogel, Zellinger, Pople, Somorjai, Thomas, Olah). Mentre agli allievi accennerò più avanti, mi piace a questo punto ricordare, a mia volta come allievo del Politecnico, che Massimo ha avuto il privilegio di collaborare con tre grandi maestri, Piontelli, Quilico e Natta, l'ultimo dei quali è stato mio stesso maestro alcuni anni più tardi.

La sua ricerca, che nonostante l'immaturo scomparsa lo ha condotto a produrre risultati in un lunghissimo arco di tempo, ben 43 anni tra il 1943, anno

della prima laurea in Chimica Industriale, e il 1986, anno della sua morte, ha riguardato diversi settori della Chimica Fisica, in particolare i campi della Chimica Teorica e della Chimica Fisica Organica. Massimo ha fornito importanti contributi allo studio quanto-meccanico delle molecole organiche più diverse, sia per l'interpretazione spettroscopica che cinetica, alla cristallografia organica, alla meccanica molecolare, alla dinamica reticolare. In particolare, nell'ambito quanto-meccanico, sono molto notevoli i suoi contributi alla teoria del legame di valenza empirica o *ab-initio*, alla teoria degli orbitali molecolari a differenti livelli di sofisticazione, al metodo del potenziale molecolare. Nella sua tensione incessante verso l'interpretazione razionale e completa del comportamento molecolare, Massimo è parso voler sempre utilizzare tutte le metodologie teoriche e sperimentali che apparissero disponibili; così, se da una parte la chimica quantistica veniva integrata dalla meccanica molecolare e dalla dinamica reticolare, agli studi cinetici in soluzione venivano affiancate la cristallografia a raggi X, per la descrizione geometricamente completa e precisa delle molecole, la risonanza di spin elettronico per lo studio di radicali, la diffrazione di elettroni a bassa energia per lo studio delle superfici.

Tra i risultati più significativi si possono citare, nel campo quantomeccanico quelli che hanno portato a predire l'esistenza e la separabilità di isomeri ottici in fosfine sostituite e la stabilità a temperatura ambiente del *cis*-1,2-divinilciclopropano; inoltre quelli ottenuti combinando meccanica molecolare e diffrazione di raggi X per dedurre a priori le strutture cristalline e studiare vibrazioni e rotazioni di molecole in cristalli organici; quelli riguardanti le geometrie di coppie ioniche in soluzione ottenute da calcoli di potenziale molecolare abbinati a spettroscopia ESR, gli studi su cammini di reazione allo stato solido e sulle strutture di molecole adsorbite su superfici metalliche. Forse l'argomento che lo appassionava di più nel suo ultimo anno di vita è stata l'applicazione della teoria estesa di Hückel allo studio di aggregati di atomi metallici (o « clusters »), come modelli di centri catalitici per varie reazioni organiche.

Il problema generale della catalisi, del resto, lo aveva sempre appassionato, inducendolo a mantenere sempre vivo il suo interesse per i problemi di chimica industriale; si apre qui tutto un altro capitolo della sua ricerca, consistente nella progettazione e realizzazione di reattori per la sintesi del metanolo, ammoniaca, urea e impianti per etilendiammina, etilbenzene, dodecilbenzene, fenolo, stirene ed etilene da « steam cracking ».

Credo si possa dire con sicurezza che Massimo Simonetta ha svolto una funzione di grande rilievo nello stimolare continuamente non solo i suoi allievi, ma tutto l'ambiente scientifico italiano a un modo di vedere la scienza molto moderno e continuamente innovativo. Sempre teso verso l'ultima frontiera e aiutato dal fascino indiscutibile che gli dava tra l'altro la sua giovanile vitalità e la chiarezza delle sue presentazioni, con le frequenti visite a centri di ricerca stranieri ha saputo essere, tra l'altro, eccellente ambasciatore della scienza mondiale in Italia. Se si considera poi che nel periodo immediatamente successivo alla guerra il nostro ambiente scientifico si apriva con difficoltà, quasi con timore, alle novità, sia in termini di modelli teorici che di metodologie sperimentali,

tali, si può facilmente cogliere l'importanza della sua funzione. Ad esempio, nel campo della Chimica Teorica non si è mai adagiato nell'accettare un dato modello come esclusivo ed esauriente, ma via via ha saputo adottare la teoria del legame di valenza, degli orbitali molecolari, del potenziale molecolare, tutti ai livelli di sofisticazione che riteneva i più adatti al problema in esame. Massimo era per sua inclinazione intellettuale un teorico; eppure quando, nella seconda metà degli anni 60, gli era sembrato che non tutte le promesse della chimica quantistica potessero essere rapidamente esaudite, ha saputo apprezzare e valorizzare con ammirevole flessibilità i metodi sperimentali della cristallografia diffrattometrica, delle diverse spettroscopie, della risonanza di spin e della diffrazione superficiale di elettroni per lo studio delle strutture molecolari che lo interessavano. Con le parole di un suo allievo, parole che, sono certo, tutti vorrebbero sottoscrivere, Massimo Simonetta insegnò a fuggire il provincialismo nella ricerca, sia in primo luogo all'interno del suo gruppo, sia, di riflesso, in tutto l'ambiente chimico-fisico italiano.

### *I riconoscimenti*

Massimo Simonetta nel 1950 e nel 1951 è stato *visiting professor* al California Institute of Technology di Pasadena sotto la guida di Linus Pauling. Questo soggiorno si è ripetuto nel 1958 e ha avuto un'impronta decisiva nella sua attività di scienziato. È stato anche *visiting professor* all'Università di Mosca e di Kiev (1972), all'Università di San Paolo (1973), al Brasenose College di Oxford (1975) e all'Università di California (1977).

Fu Socio nazionale dell'Accademia dei Lincei, membro emerito dell'Istituto Lombardo di Scienze e Lettere e dell'Accademia delle Scienze di Torino, socio onorario della Società di Chimica Svizzera, membro dell'International Academy of Quantum Molecular Science e della European Academy of Arts and Sciences, Centenary Lecturer 1983 della Royal Society of Chemistry.

Ha vinto il premio Poma per la Chimica Teorica e il premio Presidente della Repubblica per le Scienze Fisiche e Naturali (1969). È stato membro dei comitati di redazione di diverse riviste scientifiche internazionali. Nel 1975 ha ricevuto il diploma di 1<sup>a</sup> classe e Medaglia d'oro ai benemeriti della scuola, della cultura e dell'arte.

Ha partecipato, anche con diverse conferenze plenarie, a innumerevoli congressi nazionali e internazionali, e ha tenuto cicli di lezioni in vari Paesi del mondo, l'ultimo dei quali in Brasile due mesi prima della morte.

### *Gli allievi*

L'alto valore scientifico degli allievi di Massimo Simonetta è una delle testimonianze più alte della sua validità come scienziato e come docente. Attraverso la loro opera nella scienza e nella didattica, essi rappresentano ora la più significativa testimonianza della grande varietà dei suoi interessi scientifici.

Giorgio Favini si è dedicato a vari aspetti della cinetica ed anche al calcolo dell'energia e della geometria degli stati molecolari, alla spettroscopia elettronica e vibrazionale. Paolo Beltrame ha approfondito soprattutto la cinetica molecolare nei suoi aspetti energetici, entropici, nei modelli dei complessi attivati e nello studio degli impedimenti sterici. Sergio Carrà, partendo dalle strutture e transizioni elettroniche delle molecole, mediante la teoria degli orbitali molecolari, si è poi occupato di meccanismi di reazione; oggi ha allargato i suoi interessi a molti campi della Chimica Fisica Applicata. Carlo Mario Gramaccioli e Angelo Mugnoli, anche attraverso l'esperienza maturata in importanti laboratori stranieri, hanno allargato il nucleo cristallografico originario creato da Alessandro Vaciego in seno al gruppo di Simonetta, approfondendo l'analisi strutturale di molte molecole organiche. Tra queste meritano un cenno particolare i derivati annulenici sintetizzati nel laboratorio del Prof. Vogel. In seguito, lo stesso Gramaccioli e Giuseppe Filippini si occupavano di vari aspetti della dinamica reticolare. Aldo Gamba, specialista di spettri elettronici, ha tra l'altro studiato l'effetto solvente in diverse reazioni organiche, la natura delle rotazioni ristrette di gruppi sostituenti, l'interazione in coppie ione-solvente. Angelo Gavezzotti ha approfondito la natura delle interazioni tra strati di molecole allo stato cristallino, dell'adsorbimento di molecole organiche su superfici metalliche, della formazione di « clusters » metallici. Riccardo Destro ha esteso gli studi cristallografici di interessanti molecole organiche a condizioni di bassa temperatura. Altri nomi dovrebbero essere citati, che non è possibile fare adeguatamente in questo breve spazio, tra cui Barzagli, Bianchi, Branca, Casalone, Cattania, Cremaschi, Gianinetti, Mariani, Morosi, Ortoleva, Pilati, Pitea, Raimondi, Suffritti. A tutti gli allievi di Massimo va oggi il nostro compiacimento più vivo per l'alta testimonianza scientifica che essi offrono in campo internazionale, assieme all'augurio più cordiale di conquiste sempre più alte. Il loro successo sarà il più bel coronamento della grande avventura scientifica avviata da Massimo Simonetta.