

Il Boro

Un elemento chimico dalla doppia personalità

dell'Ufficio Stampa CNR

Un nuovo studio, firmato Stati Uniti, Italia e Francia, apre uno spiraglio su quello che è sicuramente il più complicato tra gli elementi della Tavola Periodica. Il boro, infatti, ne è il primo elemento solido e non metallico in condizioni normali, con proprietà molto particolari come bassa volatilità, alto punto di fusione (2450 C), più forte dell'acciaio, più duro del corindone e più leggero dell'alluminio. Ed è il solo elemento per cui il cosiddetto 'diagramma di fase' sia rimasto sostanzialmente ignoto sino ad oggi, a ben duecento anni dalla sua scoperta.

"Il nostro studio ha trovato una fase del tutto nuova del boro, a dir poco sorprendente per un elemento chimico, facendo luce su una parte fondamentale del suo diagramma di fase, ovvero sulle strutture che questo assume a seconda della temperatura e della pressione, scoprendo che ha caratteristiche ioniche", spiega Carlo Gatti, ricercatore dell'Istituto di scienze e tecnologie molecolari (Istm) del Consiglio nazionale delle ricerche di Milano e coautore dell'articolo pubblicato su Nature. La ricerca inizia nel 2004 quando nei laboratori americani e francesi viene sintetizzata una nuova forma del boro ad alte temperature e a pressioni sopra le 100.000 atmosfere. "La struttura non poteva essere risolta con i soli dati sperimentali", prosegue Gatti. "Abbiamo quindi predisposto un nuovo metodo teorico, basato su algoritmi che simulano l'evoluzione naturale per arrivare a definire le strutture cristalline più stabili: generando centinaia di strutture cristalline di prova, il computer ne valutava il contenuto energetico, scegliendo le più adatte per l'accoppiamento e per le mutazioni più favorevoli, fino ad arrivare alla struttura più stabile". Ma il gruppo di ricercatori si è accorto ben presto che questa nuova struttura presentava chiari indizi di trasferimento di carica fra i suoi atomi componenti. E a provare in modo inconfutabile la 'doppia personalità' del boro è stato proprio Carlo Gatti, noto per i suoi sofisticati e brillanti studi di legame chimico e proprietà in sistemi non convenzionali. "Combinando calcoli quantomeccanici di struttura a bande con un'analisi topologica della densità elettroni-

ca", sostiene Gatti, "abbiamo avuto conferma della parziale ionicità della nuova fase, individuando i motivi che portano al trasferimento di carica e razionalizzando i rapporti tra ionicità e proprietà della nuova fase".

Ma come può un elemento diventare ionico? "I libri di chimica classica ci dicono chiaramente che il trasferimento di carica avviene solo quando gli atomi hanno una diversa elettronegatività, il che escluderebbe a priori che gli elementi puri possano presentare una fase ionica", prosegue il ricercatore Cnr. "Ma il boro trova una soluzione sorprendente a questo problema: la sua nuova struttura contiene due diversi tipi di aggregati che, a loro volta, presentano una struttura elettronica significativamente diversa".

Gli elementi ionici non sono solo una curiosità, ma hanno proprietà interessanti e potenzialmente importanti, conclude Gatti. E dimostrare che si possa, tramite pressione, variare in modo così significativo delle proprietà, passare da una struttura non ionica ad una struttura ionica come è il sale da cucina e come è questa nuova fase del boro, può aprire nuovi modi di pensare ed avere sicuramente delle ricadute dal punto di vista applicativo, specie nel campo delle nanotecnologie".

info

**Istituto di scienze e tecnologie molecolari
(Istm) del Cnr di Milano**
Carlo Gatti c.gatti@istm.cnr.it

Bibliografia:

Nature, 457, 863-867 (2009).

Il lavoro è stato commentato su Chemical Engineering News 87, 9(2009), nella sezione "News and Views" di Nature, commento di John Tse, Nature 457, 800-801 (2009), New York Times 3 February 2009, page D3 of the New York Edition, Sole 24 Ore 19 febbraio 2009, programma televisivo di Rai 3 (TG3 Leonardo).