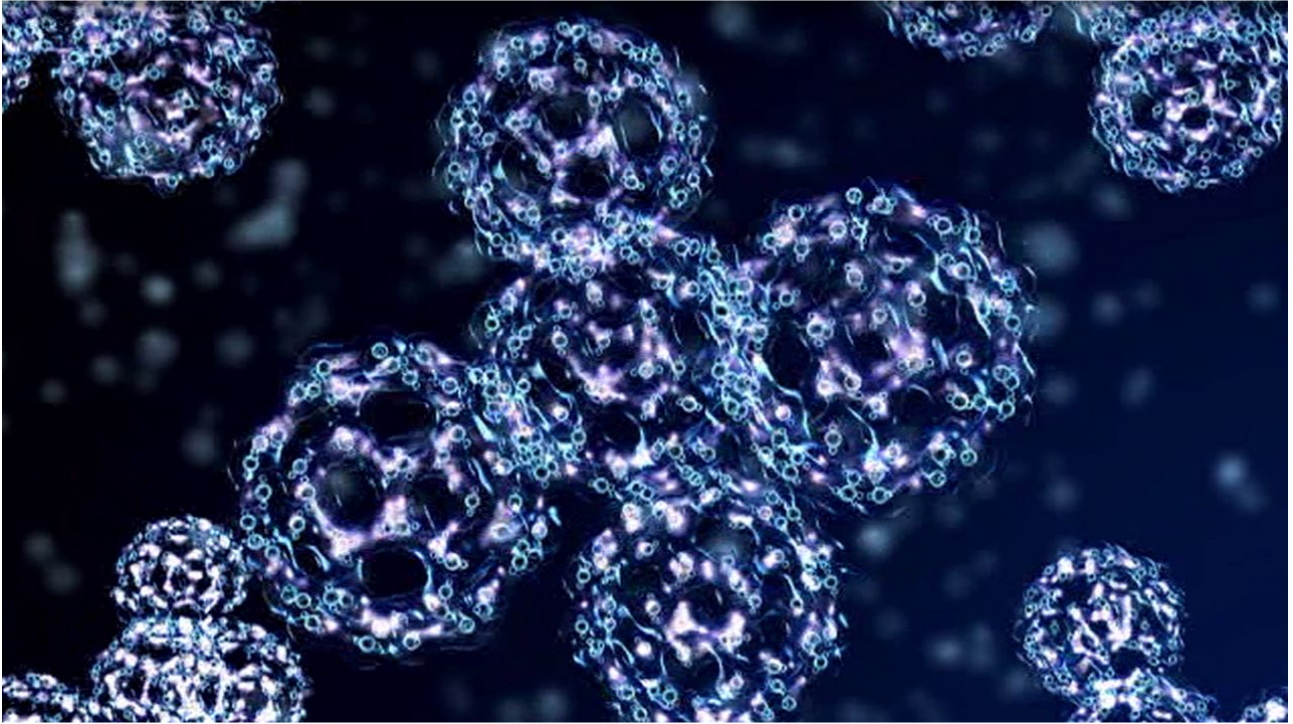


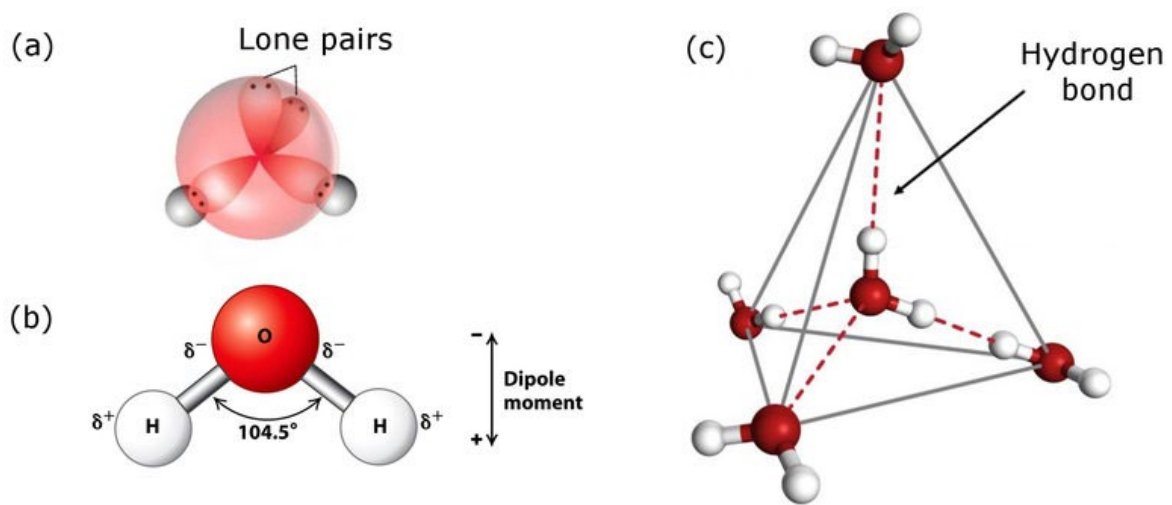
Complessità topologica dell'acqua allo stato liquido descritta nel nuovo modello colloidale

[Colloid Model Topology Water William Brown](#) 22 novembre 2022



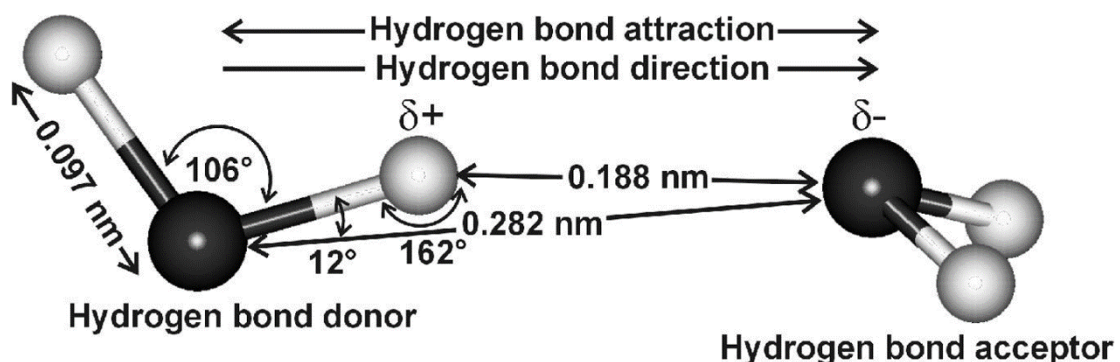
Di: [William Brown](#), scienziato presso la Resonance Science Foundation

L'acqua è una delle [molecole più abbondanti nell'universo](#), con una composizione chimica semplice di due atomi di idrogeno e un atomo di ossigeno. Tuttavia, questa molecola abbondante e apparentemente semplice è alla base di proprietà sorprendenti derivanti dalle specifiche configurazioni molecolari e intermolecolari dell'acqua. Partiamo dalla configurazione molecolare in cui le porzioni di idrogeno e le coppie di elettroni non legati dell'atomo di ossigeno formano una molecola tetraedrica: potremmo ingenuamente supporre che la disposizione del legame più semplice sia una molecola lineare, come l'anidride carbonica (che di conseguenza non esiste come liquido e passa direttamente da solido a gas tramite sublimazione); tuttavia, in una molecola d'acqua gli atomi di idrogeno si legano al singolo atomo di ossigeno con un angolo di legame specifico di $104,5^\circ$. Questa configurazione tetraedrica della molecola d'acqua produce un dipolo elettrico parziale, che rende l'acqua ionicamente interattiva e le conferisce proprietà uniche come quella di essere il solvente universale. È anche alla base di alcune delle anomalie termodinamiche dell'acqua allo stato liquido, come la minore densità a temperature più basse a causa della formazione di reti di legami a idrogeno coordinati tetraedricamente. L'acqua allo stato liquido forma reti intermolecolari strutturate tali per cui, a differenza di quasi tutti gli altri liquidi, questa si *espande* mentre si raffredda, e la sua fase solida (ghiaccio) ha una densità inferiore alla sua fase liquida.



(a) Distribuzione elettronica nella molecola d'acqua: viene mostrata la struttura tetraedrica degli orbitali molecolari, con gli elettroni coinvolti nei legami covalenti e le coppie solitarie, secondo la teoria VSEPR [43, 44]. (b) Struttura di una singola molecola d'acqua (gli atomi di idrogeno sono bianchi, l'atomo di ossigeno è rosso) [di Greg Stewart, graphic designer presso SLAC, Centro d'Accelerazione Lineare di Stanford, Stati Uniti], rappresentata secondo il modello ad asta e sfera. (c) Disposizione tetraedrica delle molecole d'acqua legate all'idrogeno [Molecular Cell Biology, Sixth Edition c 2008, W.H.Freeman and Company].

Tutte queste caratteristiche uniche e apparentemente anomale dell'acqua allo stato liquido ne fanno la molecola fondamentale della vita. Agisce anche da mezzo centrale di scambio di informazioni e coordina l'attività di un vasto numero di macromolecole complesse: determinando la forma e la funzione di proteine, DNA, RNA, lipidi e consentendo la biochimica che è alla base del sistema della vita.

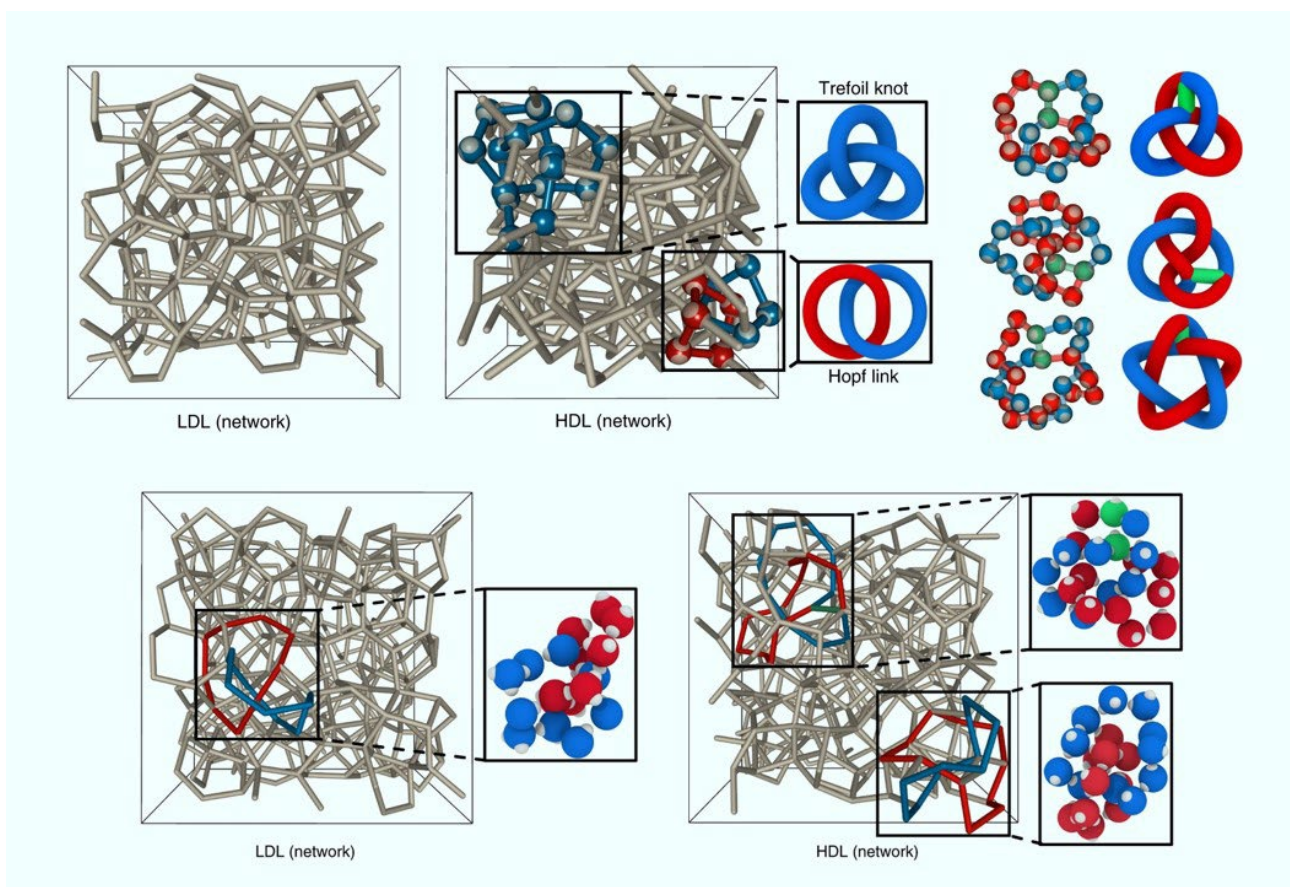


L'acqua è necessaria sia per l'evoluzione della vita che per la sua continuazione. Possiede proprietà particolari che non si trovano in altri materiali e che sono necessarie per i processi vitali. Queste proprietà sono determinate dall'ambiente legato all'idrogeno, particolarmente evidente nell'acqua allo stato liquido. Ogni molecola di acqua allo stato liquido è coinvolta in circa quattro legami a idrogeno con forze considerevolmente inferiori rispetto ai legami covalenti, ma notevolmente superiori dell'energia termica naturale. Questi legami a idrogeno sono disposti

approssimativamente in modo tetraedrico in modo tale che, quando sono fortemente formati, il raggruppamento locale si espande, riducendo la densità. Tale strutturazione a bassa densità si verifica naturalmente a temperature basse e di sopraffusione, e dà origine a molte proprietà fisiche e chimiche che evidenziano la particolare unicità dell'acqua allo stato liquido. Se i legami a idrogeno in acqua fossero in realtà un po' più forti, l'acqua si comporterebbe in modo simile a un vetro, mentre se fossero più deboli, l'acqua sarebbe un gas ed esisterebbe come liquido solo a temperature sotto lo zero. - Martin Chaplin, [Water's Hydrogen Bond Strength](#)

Data l'importanza di questa piccola molecola che ha così tante funzioni, gli scienziati sono ansiosi di rivelare e comprendere ancora di più dei suoi segreti nascosti nelle sue reti molecolari. Uno di questi studi ha fatto un grande passo avanti in questo senso, dimostrando che esiste una chiara distinzione topologica tra le sue due reti liquide sopraffuse, ciascuna di diversa densità, una scoperta che potrebbe avere implicazioni di vasta portata per la comprensione delle transizioni di fase liquido-liquido in liquidi tetraedrici come l'acqua.

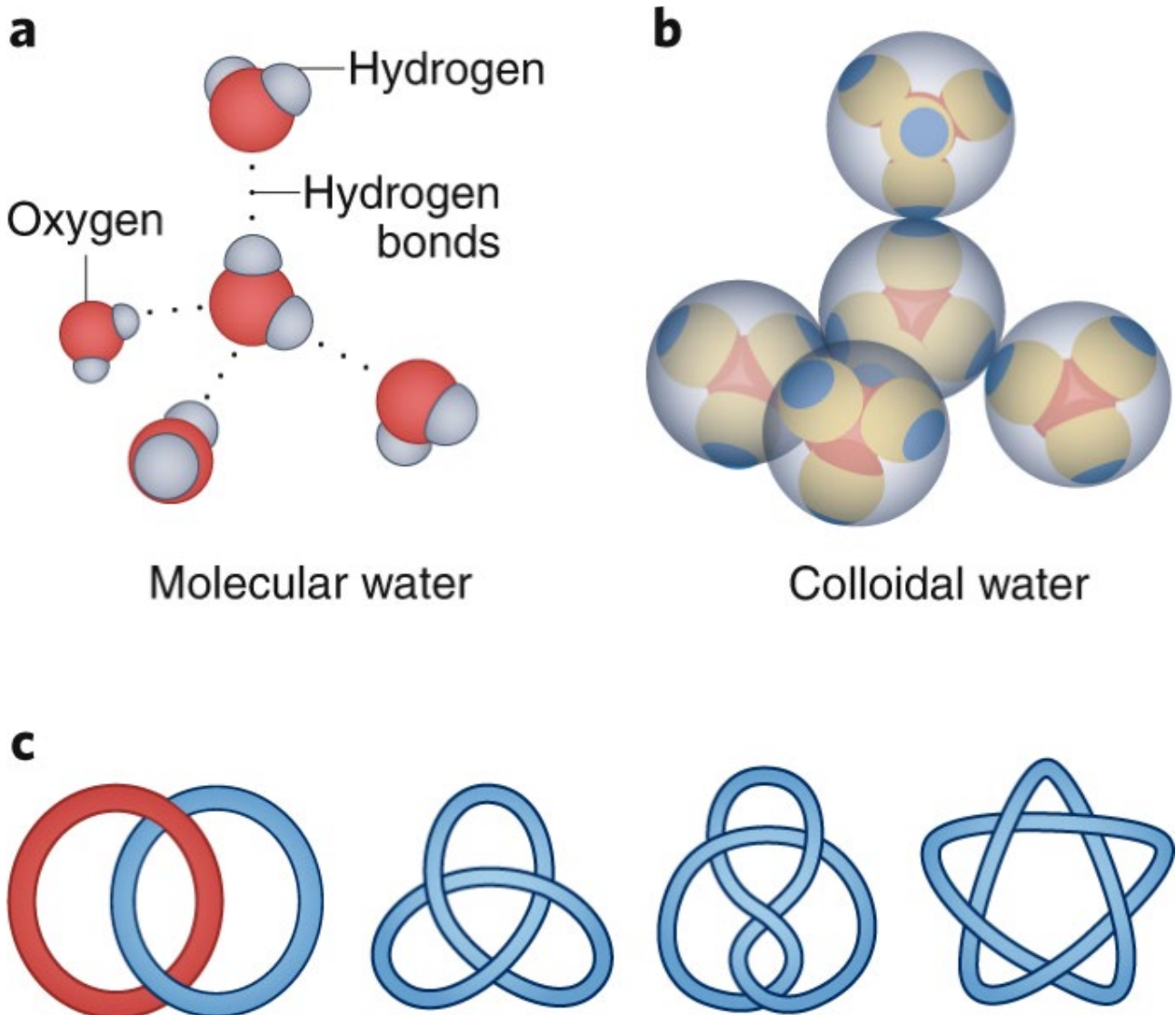
Lo studio, pubblicato sulla rivista [Nature Physics](#) [1], dimostra che nell'acqua profondamente sopraffusa si verifica una transizione di fase liquido-liquido in cui una rete intermolecolare, a bassa densità e non intricata, passa a un liquido intricato ad alta densità contenente topologicamente motivi complessi come i nodi trifoglio e il collegamento Hopf (vedere immagine sotto).



Caratterizzazione della transizione di fase liquido-liquido in acqua colloidale (in alto) e molecolare (in basso) mediante identificazione di collegamenti e nodi. LDL: liquido a bassa densità; HDL: liquido ad alta densità. Crediti di immagine: Neophytou et al., doi: 10.1038/s41567-022-01698-6.

Come descritto in un post dell'Università degli Studi di Roma "La Sapienza", dove la ricerca è stata in parte svolta:

L'autore principale, Andreas Neophytou, dottorando presso l'Università di Birmingham, afferma che "questa intuizione ci ha fornito una visione completamente nuova di quello che è un problema di ricerca che persiste da oltre 30 anni, e speriamo che sia solo un nuovo inizio." Utilizzando simulazioni computerizzate, il team di ricercatori ha prima scoperto la distinzione topologica dei due liquidi in un modello colloidale dell'acqua, e poi in due modelli molecolari dell'acqua ampiamente utilizzati. I colloidi sono particelle che possono essere mille volte più grandi di una singola molecola d'acqua. In virtù delle loro dimensioni relativamente maggiori, e quindi di movimenti più lenti, i colloidi sono spesso indicati come "grandi atomi" e usati per osservare e comprendere fenomeni fisici che si verificano anche su scale di lunghezza atomica e molecolare molto più piccole.



(a) modello molecolare dell'acqua: le molecole formano reti di legami a idrogeno coordinati tetraedricamente. (b) Questi raggruppamenti possono essere pensati come "grandi atomi" nel modello colloidale dell'acqua. (c) Nella fase ad alta densità, queste reti sono intricate e topologicamente complesse, formando motivi come il nodo trifoglio e il collegamento Hopf.

Inoltre diversi esperti hanno discusso l'importanza di questo notevole studio:

Pablo Debenedetti, docente di ingegneria chimica e biologica presso l'Università di Princeton negli Stati Uniti e uno dei massimi esperti mondiali in quest'area di ricerca, osserva: "Questo bellissimo lavoro computazionale rivela le basi topologiche alla base dell'esistenza di diverse fasi liquide nella stessa rete -sostanza formante." E aggiunge: "Inoltre arricchisce e approfondisce sostanzialmente la nostra comprensione di un fenomeno che abbondanti prove sperimentali e computazionali suggeriscono sempre più come centrale per la fisica del più importante dei liquidi: l'acqua". Christian Micheletti, docente presso la Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati di Trieste, il cui attuale interesse di ricerca è comprendere l'impatto dell'entanglement, in particolare dei nodi e dei collegamenti nel campo della statica, della cinetica e della funzionalità dei biopolimeri, osserva: "Con questo singolo paper, Neophytou et al. hanno fatto diverse scoperte che avranno un impatto in diverse aree scientifiche. In primo luogo, il loro modello colloidale per l'acqua, elegante e sperimentale, apre prospettive completamente nuove per gli studi su larga scala dei liquidi. Oltre a ciò, forniscono una prova molto forte che le transizioni di fase che possono sfuggire all'analisi tradizionale della struttura locale dei liquidi, vengono invece prontamente rilevate tracciando i nodi e i collegamenti nella rete di legami del liquido. L'idea di cercare tali complessità nello spazio in qualche modo astratto di percorsi che corrono lungo legami molecolari transitori è molto potente, e penso che verrà ampiamente adottata per studiare sistemi molecolari complessi." (<https://www.phys.uniroma1.it/fisica/archivionotizie/topological-nature-liquid-liquid-phase-transition-tetrahedral-liquids>)

Paper di riferimento:

[1] Neophytou, A., Chakrabarti, D. & Sciortino, F. Topological nature of the liquid–liquid phase transition in tetrahedral liquids. *Nat. Phys.* 18, 1248–1253 (2022). <https://doi.org/10.1038/s41567-022-01698-6>