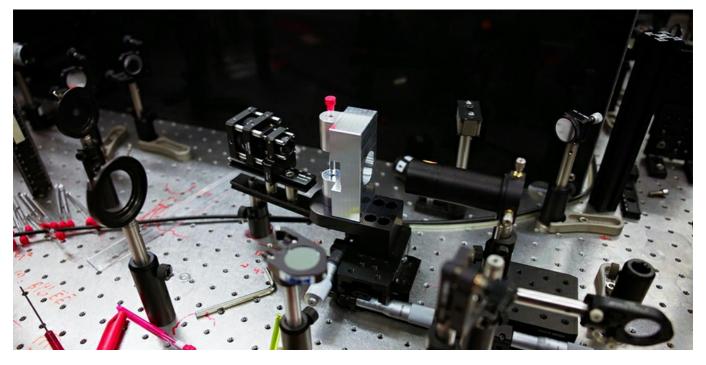
Scoprire i segreti dell'acqua

L'acqua, essenziale per la vita e onnipresente sulla Terra, nasconde ancora molti misteri. Nonostante questa molecola sia uno dei sistemi materiali più studiati e comuni, non tutti sanno che la vita è potuta proseguire sulla Terra, anche durante le ere glaciali, grazie a un delicato legame intermolecolare: il legame a idrogeno. Sebbene se ne studi la chimica fin dai tempi della scuola, l'intricato reticolo di legami a idrogeno che collega le sue molecole ha rivelato solo ora alcuni dei suoi segreti più profondi. Un team di ricerca internazionale, coordinato dall'École Polytechnique Fédérale di Losanna (EPFL) e al quale ha partecipato anche l'Istituto per i Processi Chimico-Fisici (CNR_IPCF) del Consiglio Nazionale delle Ricerche e l'International Centre for Theoretical Physics (ICTP) di Trieste, ha sviluppato un innovativo metodo di spettroscopia, la spettroscopia vibrazionale correlata (CVS), capace di osservare direttamente e misurare queste interazioni a livello molecolare.

I legami a idrogeno, responsabili delle proprietà uniche dell'acqua, si formano quando le molecole condividono carica elettronica in una struttura tridimensionale. Fino a oggi, questi complessi legami erano stati studiati soltanto attraverso simulazioni al calcolatore. Con la CVS, invece, è ora possibile distinguere tra molecole di acqua attivamente coinvolte nei legami e molecole non interagenti, superando i limiti delle tecniche spettroscopiche tradizionali che mescolavano i due tipi di molecole.



Apparato di spettroscopia vibrazionale correlata (CVS). (Foto di Jamani Caillet 2024, Creative Commons BY-SA)

Il processo sfrutta impulsi laser brevissimi, dell'ordine dei femtosecondi (un quadrilionesimo di secondo), per generare minuscole oscillazioni nelle molecole d'acqua. Queste oscillazioni creano un'emissione di luce visibile che rivela dettagli sull'organizzazione spaziale e le caratteristiche quantistiche dei legami a idrogeno. Grazie alla CVS è possibile misurare direttamente quanto gli elettroni siano condivisi e la forza del legame stesso, e questa scoperta apre la strada a nuove possibilità, come la misurazione degli effetti quantistici elettronici e nucleari dei legami. Per esempio, il gruppo di ricerca ha modificato il pH dell'acqua, scoprendo che gli ioni idrossido (OH⁻) donano ai legami a idrogeno una carica extra pari all'8%, mentre i protoni (H⁺) ne accettano solo il 4%. Questi risultati, ottenuti per la prima volta sperimentalmente, sono stati poi validati tramite simulazioni avanzate condotte anche grazie al supporto di supercomputer e algoritmi di machine learning sviluppati in collaborazione con il CNR-IPCF di Messina, l'ICTP di Trieste e altre istituzioni scientifiche.

Il nuovo metodo, applicabile a qualsiasi materiale, sta già mostrando il suo potenziale in studi su altre soluzioni, dai liquidi biologici come il sangue a soluzioni contenenti elettroliti o molecole complesse come DNA e proteine. In conclusione, la CVS fornisce dettagli a livello molecolare che potrebbero rivoluzionare la nostra comprensione di molti processi chimici e biologici.

Con la spettroscopia vibrazionale correlata, l'acqua non è più solo una molecola familiare e indispensabile: è una porta d'accesso a una dimensione quantistica nascosta, che svela dinamiche invisibili e con ripercussioni potenzialmente vaste per la scienza dei materiali e la biofisica.



Giuseppe Cassone – PhD in Fisica della Materia ottenuto alla Sorbona di Parigi, è ricercatore presso il CNR-IPCF di Messina e docente di Chimica Computazionale all'Università di Messina. Avvalendosi di tecniche di supercomputing, ha investigato il comportamento dell'acqua e di altre sostanze, pubblicando oltre 65 articoli su riviste quali Science, Nature Communications, e molte altre.



Luciano Celi - Con un PhD in Ingegneria Energetica conseguito all'Università di Trento nel 2019 e un master in Comunicazione della Scienza alla SISSA di Trieste, si dedica alla comunicazione della scienza da oltre 20 anni. Lavora presso il CNR di Pisa, dove ha coordinato iniziative divulgative come "Areaperta" e co-ideato la trasmissione radio "Aula 40". Collabora con testate come "Sapere" e "Almanacco della Scienza", approfondendo temi come il picco del petrolio, ecologia ed epistemologia.