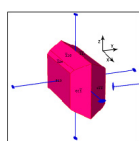


## **Studio teorico e sperimentale di forme di equilibrio e di crescita dei cristalli di $\alpha$ -alanina, al fine di evidenziarne i cambiamenti in soluzioni contenenti impurezze di carbonato di calcio.**

Gli esseri viventi mostrano una capacità formidabile nel controllo dei processi di cristallizzazione, abilità che se fosse riproducibile dall'uomo porterebbe alla realizzazione di materiali con proprietà straordinarie: basti pensare che le conchiglie, formate dalle stesse sostanze che compongono i carbonati di origine geologica, possiedono una resistenza 3000 volte superiore!

Il campo di studi che si occupa di questi fenomeni è la crescita cristallina e l'insieme dei processi tramite i quali gli esseri viventi modificano le proprietà di materiali inorganici è detto biomineralizzazione. Il controllo operato sulle modalità di crescita cristallina si estende su innumerevoli aspetti, tra cui la taglia dei cristalli, la loro morfologia, la loro orientazione nello spazio e rispetto ad altri individui cristallini e la fase: su quest'ultimo aspetto in particolare si è concentrato il mio lavoro.

È noto in letteratura come la presenza di L-alanina, uno degli amminoacidi più semplici, sia in grado di indurre la cristallizzazione del meno stabile dei carbonati di calcio, la vaterite. Esiste dunque un'interazione tra questo polimorfo e la molecola organica in questione: la presenza di  $\text{CaCO}_3$  può allo stesso modo avere effetti sulla formazione di cristalli di alanina.



Forma di crescita dell'alanina.

Per osservare variazioni morfologiche sui cristalli di alanina, è stato necessario innanzitutto determinare quale sia la forma cristallina di questa sostanza, immutata da agenti esterni. Per fare ciò sono state ricercate, tra tutte le possibili superfici, quelle a minor energia, e dunque più stabili. Tramite questo calcolo energetico, per cui è stato necessario costruire una serie di funzioni che descrivessero le forze interagenti tra le molecole, è stato possibile disegnare la forma di equilibrio, ossia quella assunta dai nuclei cristallini appena formati, e la forma di crescita, cioè quella finale dei cristalli, dell'alanina. I calcoli sono stati realizzati escludendo l'effetto del solvente, effetto che è stato in seguito introdotto grazie a misure sperimentali dell'interazione tra acqua e superficie del cristallo.

I risultati ottenuti sono stati confrontati con le forme dei cristalli reali, da me personalmente

sintetizzati, e l'accordo tra teoria ed esperimento è risultato decisamente buono.

Nota la forma dei cristalli cresciuti in ambiente puro, mi sono dedicato a prepararne altri in soluzioni di carbonato di calcio: i cristalli così realizzati sono più schiacciati in una particolare direzione ed alcune facce sono maggiormente estese rispetto a quelli ottenuti in ambiente puro.



Cristallo di alanina in ambiente puro.

Le superfici modificate dalla presenza di carbonato di calcio in soluzione presentano una struttura bidimensionale commensurabile con un preciso gruppo di superfici presenti nella vaterite, polimorfo stabilizzato dall'alanina; in altre parole è possibile sovrapporre le strutture superficiali delle due sostanze, ottenendo una coincidenza sistematica di alcuni dei nodi reticolari. Quando questo fenomeno si verifica, è possibile che si realizzi un epitassia, cioè una crescita coerente di strati di una sostanza sopra un'altra.

Il fenomeno epitattico, per ora solamente ipotizzato teoricamente, è in grado di rendere più stabili le superfici che in esso siano coinvolte: per questo motivo le facce corrispondenti nel cristallo di alanina mostrerebbero una maggior estensione; inoltre, la deposizione di strati di alanina sulle superfici della vaterite potrebbe essere responsabile della mancata trasformazione dei cristalli di questo polimorfo in fasi più stabili, quali la calcite, e quindi del fenomeno di selettività di fase descritto in letteratura.

La comprensione completa dei meccanismi di biomineralizzazione è ancora molto distante e complessa poiché i fenomeni alla base sono molteplici e molto spesso si realizzano in modo combinato e coordinato: la conoscenza approfondita dei singoli fenomeni è però imprescindibile se si vuole afferrare il quadro completo e tentare di emulare i processi che avvengono in natura.

**Elementi di innovazione introdotti dallo studio.** È stato elaborato un potenziale empirico per le forze intermolecolari nel cristallo di alanina. Dello stesso cristallo sono state previste forme di equilibrio e di crescita ed è stato valutato l'effetto del solvente. Sono state esaminate le morfologie superficiali dei cristalli di alanina. Sono stati osservati cambiamenti d'abito in soluzioni acquose di  $\text{CaCO}_3$  ed è stata proposta una spiegazione comune a questo fenomeno ed alla selettività di fase operata dall'alanina sui polimorfi del carbonato di calcio.

**Francesco Massimino**

## **Tesi di Laurea Specialistica**

Autore: Francesco Massimino

Email: [ubbagumma@gmail.com](mailto:ubbagumma@gmail.com)

Relatore: Marco Rubbo

Università: Università degli Studi di Torino

Facoltà: Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali

Corso: Laurea Spec. in Scienza dei Materiali

Data di Discussione: 08/10/2010

Voto: 110 cum laude

Disciplina: Crescita Cristallina

Tipo di Tesi: di Ricerca

Altri Relatori: Marco Bruno

Lingua: Italiano

Grande Area: Area Scientifica

Dignità di Stampa: Sì

In collaborazione con:

Settori Interessati: Biomineralizzazione, Biologia, Chimica delle superfici, Catalisi, Crescita Cristallina, Mineralogia, Cristallografia, Chimica Computazionale, Fisica dello Stato Solido

**Pubblicata in:** [www.pubblitesi.it](http://www.pubblitesi.it)