

Reattività indotta dalla pressione nel cristallo di triazina

Candidato: Lorenzo Tesi (tesi.loren@gmail.com)

Relatore: Prof. Roberto Bini (roberto.bini@unifi.it)

Negli ultimi anni hanno destato particolare interesse studi di reattività indotta dalla pressione di composti aromatici ed eteroaromatici, grazie alla possibilità di sintetizzare nuovi materiali amorfi con particolari ed inusuali proprietà quali elevata durezza e resistenza meccanica, grande ripresa elastica ed un aumento della conduttività. In questo lavoro di tesi abbiamo studiato la stabilità ad alta pressione della triazina, un sistema aromatico $C_3N_3H_3$. Questo composto rappresenta un materiale di partenza potenzialmente interessante per l'alto contenuto di azoto. Infatti i composti poliazotati sono estremamente interessanti per la sintesi di materiali energetici grazie alla loro capacità di immagazzinare energia. Nel nostro studio abbiamo valutato il comportamento della triazina in funzione della pressione attraverso misure di assorbimento infrarosso e di fluorescenza a due fotoni. L'aumento della pressione in modo statico è stato ottenuto mediante l'uso della Cella ad Incudine di Diamante (DAC). Nel campione appena compresso avviene una transizione di fase con il passaggio dalla struttura romboedrica ($R\bar{3}c$) ad una monoclinica ($C2/c$), identificata tramite lo spettro infrarosso e l'ausilio della Teoria dei Gruppi. La transizione è stata osservata a 0.6 GPa. In seguito, aumentando la pressione abbiamo notato un cambiamento nello spettro infrarosso dovuto alla trasformazione chimica della triazina. Il prodotto, ottenuto dopo aver compresso il campione a 20 GPa e decompresso fino a pressione ambiente, è un carbone idrogenato amorfo con alto contenuto in azoto. Sono stati effettuati anche studi di fluorescenza a due fotoni, grazie al quale abbiamo registrato i profili di eccitazione e gli spettri di fluorescenza. Dal punto di vista elettronico abbiamo osservato una destabilizzazione con la pressione dell'orbitale molecolare π che, salendo in energia, si avvicina all'orbitale molecolare di non legame n ed a quello di antilegame π^* . La destabilizzazione dell'orbitale π porta alla perdita di aromaticità e può essere alla base della reattività. Infine, poichè la reazione innescata nel cristallo di triazina dalla pressione avviene in maniera quantitativa e riproducibile a 7 GPa, possiamo dire che la reattività non è dovuta a difetti strutturali ma alla struttura stessa della triazina.