

Titolo della tesi: *Modificazioni strutturali e reattività dell'ossido di grafene con molecole semplici ad alta pressione*- Structural modifications and reactivity of graphene oxide and simple molecules at high pressure

Candidato: Arianna Baldi

Relatore: Prof. Roberto Bini, roberto.bini@unifi.it

Correlatore: Dr. Matteo Ceppatelli, ceppa@lens.unifi.it

Una delle applicazioni più interessanti delle tecniche di alta pressione riguarda la sintesi di nuovi materiali, in particolare nell'ottica della *Green Chemistry*: questi processi reattivi possono infatti essere innescati con metodi fisici evitando così l'uso e il conseguente smaltimento di reagenti chimici, solventi e catalizzatori. Questo lavoro di tesi è incentrato sullo studio del comportamento ad alta pressione, sia da un punto di vista strutturale che di reattività, dell'ossido di grafene (GO) in presenza di sistemi atomici e molecolari semplici nella prospettiva della sintesi di materiali nanocompositi a matrice polimerica. Il GO, grazie alla sua struttura stratificata costituita da piani di spaziatura compresa tra 0.5 e 1.5 nm, si presenta come un sistema ideale per l'intercalazione di molecole semplici e può costituire un vero e proprio reattore su scala nanometrica all'interno del quale indurre reattività chimica in condizioni di elevato confinamento. Preliminarmente, sono stati eseguiti studi sull'ossido di grafene in presenza di sistemi inerti, sia atomici che molecolari, quali Ar e N₂ dalla cui analisi strutturale si è potuto dimostrarne l'inserimento tra gli strati di GO. In seguito, è stata presa in considerazione l'ammoniaca al fine di studiarne il confinamento in previsione della possibilità di indurre l'N-doping dei piani dell'ossido di grafene. I risultati ottenuti da diffrazione X in questo esperimento sono ancora più indicativi e mostrano chiaramente come il sistema GO/NH₃ manifesti un comportamento *auxetico* con compressibilità negativa fino al punto di solidificazione dell'ammoniaca. Infine, è stata studiata la possibilità di indurre la polimerizzazione dell'etilene, la cui reattività ad alta pressione è nota in letteratura, tra gli strati del GO. Questa reazione è stata tentata sia per mezzo dell'azione combinata di pressione e irraggiamento che per sola pressione ed è stata studiata mediante spettroscopia ottica (FTIR e Raman). Dagli spettri sono state ottenute alcune evidenze correlabili alla presenza sia di monomero che di polimero confinato tra gli strati. Questi risultati sono molto incoraggianti nella prospettiva della sintesi di un materiale nanocomposito a base di GO e polietilene costituito da catene polimeriche che isolano i singoli strati pseudo-grafenici fornendo la possibilità di modularne le proprietà elettriche. Saranno necessari ulteriori studi strutturali per confermare l'inserimento e caratterizzare il sistema. Si prevede inoltre l'estensione di questa sintesi a grandi volumi come già avvenuto nel caso del polietilene puro.