研究实现常压下合成高能量密度材料聚合氮

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/29759.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

研究实现常压下合成高能量密度材料聚合氮。中国科学院合肥物质科学研究院固体所研究员王贤龙团队以第一性原理计算为理论依据，采用叠氮化钾为前驱体，基于自主研建的等离子体增强化学气相沉积装置，成功在常压下合成了具有类金刚石结构的高含能立方偏转聚合氮，为立方偏转聚合氮的宏量制备提供了一种简单高效的方法。相关成果日前发表于《科学进展》。

高能量密度材料是一类能够短时间内产生极大能量的物质，被广泛用于矿业和建筑等领域。由于氮的氮氮单键与氮气分子的氮氮三键有巨大的能量差，并且其释放能量之后的产物是氮气，兼具绿色环保的特点，所以立方偏转聚合氮是新型高能量密度材料的典型代表之一。但阐明立方偏转聚合氮降压时的失稳机制和发展更安全高效并适用于宏量制备的合成方法是当前面临的两个关键科学问题。

2020年起，王贤龙研究团队就针对上述两个关键科学问题开展攻关研究。团队采用第一性原理方法，系统模拟了立方偏转聚合氮表面在不同饱和状态下和不同压力及温度下的稳定性，发现降低压力时，立方偏转聚合氮的分解机制是表面失稳。于是，他们提出饱和表面悬挂键并转移电荷的方法，能将立方偏转聚合氮在常压下稳定到477°C。

在此基础上，基于钾的电负性比钠更弱，团队提出了采用更安全和更便宜的叠氮化钾来替代叠氮化钠作为前驱体来合成立方偏转聚合氮的方法。第一性原理计算结果表明，钾吸附在增强立方偏转聚合氮表面稳定性上要远优于钠吸附。最终，基于自主研建的等离子体增强化学气相沉积装置，不借助纳米限域效应，团队成功在常压下合成了立方偏转聚合氮，样品可以保存2个月以上。

同步热分析测量结果表明，立方偏转聚合氮具有488°C的热分解温度，与理论预测的477°C分解温度相符合，尖锐的分解放热峰表明其具有典型的高能量密度材料热分解行为；激光等离子驱动微爆法测试表明样品的爆速有显著提升。

研究人员认为，由于不需要高压或碳纳米管束缚且前驱体更安全和便宜，因而该合成方法具备宏量制备和工程应用的技术优势。（来源：中国科学报 王敏）

相关论文信息：https://www.science.org/doi/10.1126/sciadv.adq5299

作者：王贤龙等 来源：《科学进展》

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发