合肥研究院在高能量密度材料聚合氮研究方面获进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/29813.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！

合肥研究院在高能量密度材料聚合氮研究方面获进展。

中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所研究员王贤龙团队以第一性原理计算为理论依据，以叠氮化钾为前驱体，基于自主研建的等离子体增强化学气相沉积装置，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，为立方聚合氮的宏量制备提供了简单高效的方法。相关研究成果发表在《科学进展》（*Science Advances*）上。

高能量密度材料是在短时间内能够产生极大能量的物质，通常应用于矿业和建筑等领域。由于氮的N-N单键与氮气分子的N≡N
三键存在能量差且释放能量后的产物是氮气，具有绿色环保的特点，因此立方偏转聚合氮是新型高能量密度材料之一。

2004年以来，虽然已有高压下合成立方偏转聚合氮
的相关研究，但无法将高压合成的立方偏转聚
合氮
截获到常压，且降压过程的分解机制尚不明
确。2017年，有研究采用等离子增强化学气相沉积
方法，
以剧毒和高感
度的叠氮化钠为前驱体，在
常压下合成出痕量级的立方偏转聚合氮。
然而，这需要通过碳纳米管限域效应提升转换率。而碳纳米管包裹和有效成分少等问题，制约了立方偏转聚合氮
的热稳定性、热分解和爆轰
性质的研究。因此，阐明立方偏转聚合氮
降压时的失稳机制以及发展更安全高效并可应用于宏量制备的合成方法是重要的科学问题。

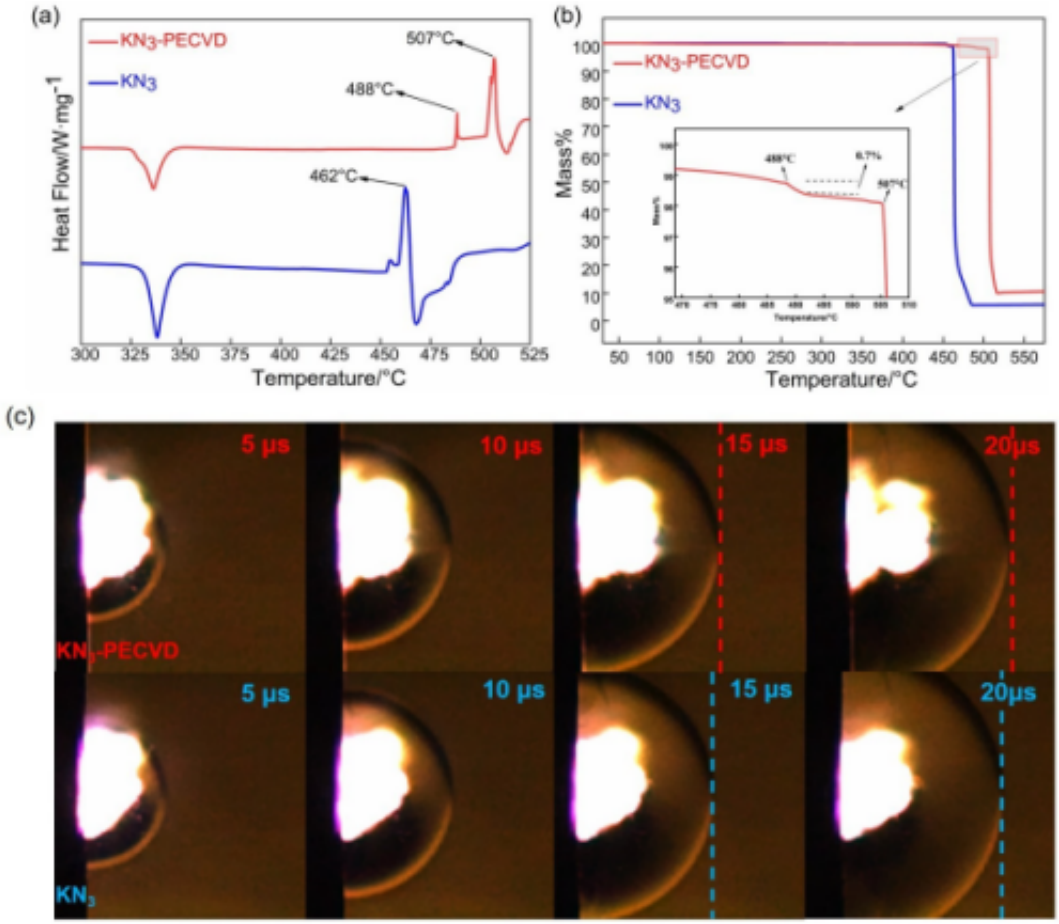
该团队自2020年起针对上述问题开展了研究。科研人员采用第一性原理方法模拟了立方偏转聚合氮
表面在不
同饱和状态、不同
压力及温度下的稳定性，发现了降低

压力时立方偏转聚合氮
的分解机制是表面失稳，提出了能够将立方偏转聚合氮在常压下稳定在477°C的饱和表面悬挂键并转移电荷的方法。

基于钾的电负性比钠更弱这一原因，该研究采用比叠氮化钠更安全、经济的叠氮化钾作为前驱体来合成立方偏转聚合氮。研究发现
，钾吸附在增强立方偏转聚合氮
表面的稳定性优于钠
吸附。该团队基于自主研建的等离子增强
化学气相沉积装置，在常压下合成了立方偏转聚合氮
。研究显示，样品可以保存2个月以上。
由于不需要高压或碳纳米管束缚且前驱体更安全、经济，因而这一合成方法具备宏量制备和工程应用的技术优势。

研究工作得到国家自然科学基金、合肥研究院院长基金的支持。

论文链接



同步热分析与微爆测试结果

研究团队单位：合肥物质科学研究院

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