大连化物所揭示五唑阴离子盐的合成机理

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/8471.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！

近日，中国科学院大连化学物理研究所复杂分子体系反应动力学研究组研究员刘建勇、韩克利团队在含能
材料合成反应动力
学研究方面取得新进展，揭示了新型含能材料五唑阴离子（*cyclo*-N_5^-）盐的合成机理。

现代社会对新型高能量密度材料的需求不断增长，该研究团队一直致力于含能材料的合成和爆炸反应机理的研究。与传统的基于C、H、O、N元素合成的高能材料相比，多氮含能材料具有高放能、无污染等优点，有成
为新一代含能材料的巨大潜力。五唑阴离子（*cyclo*-N_5^-
）盐是一类新型高能全氮化合物，是含能材料领域的研究热点。2017年，科研人员首次以芳基五唑、甘氨酸亚铁、间氯过氧苯甲酸为原料，成功制备出五唑阴离子晶体盐。但其产率较低，反应机理仍然未知，制约了五唑含能材料的进一步发展。鉴于上述情况，该研究团队从理论上对五唑阴离子（*cyclo*-N_5^-）盐的合成机理进行了深入研究。

研究团队前期对五唑阴离子（*cyclo*-N_5^-）盐的前驱体-
芳
基五
唑的取代效应对合成过程中产率的影响规律、最佳前驱体结构与反应条件进行了研究（Chemical Communications）。在此基础上，本工作揭示了芳基五唑C-N键的选择性切断机理。研究表明，反应过程中高自旋的甘氨酸亚铁被间氯过氧苯甲酸氧化，形成高价态的铁氧配合物。该配合物可以在不
破环五唑环N-
N键的情况下，有效切断芳
基五唑C-N键。芳基五唑和间氯过氧酸的 π-π
堆积作用促进了反应物多聚体的形成，会阻碍铁氧配合物对芳基五唑的进攻。如何更高效地获得铁氧配合物是提高五唑阴离子盐反应产率的关键，上述研究为五唑阴离子盐的高效合成提供了重要的理论指导。

相关工作发表在《物理化学快报》（*The Journal of Physical Chemistry Letters*）上。该工作得到科学挑战计划项目和国家自然科学基金重点项目的资助。

大连化物所揭示五唑阴离子盐的合成机理

研究团队单位：大连化学物理研究所

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