

新型高能量密度炸药分子问世

成果在《自然·通讯》上在线发表

本刊编委张庆华老师带领的化工材料研究所含能分子创制团队采用两步法合成了新型高能量密度炸药分子二硝胺联噁二唑。

该成果在《自然》子刊——《自然·通讯》(《Nature Communications》)上在线发表,这是我国炸药领域科学家在《自然·通讯》上发表的首篇研究论文。

传统由碳、氢、氮、氧四种元素组成的有机炸药分子存在着一个堆积密度上限,以致于目前室温晶体密度超过 $2.0 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 的单质炸药分子寥寥无几。因此,通过分子设计合成一种综合性能更为优异的新型高能量密度炸药,是目前国内外含能材料领域科学家们面临的科学挑战之一。

含能分子创制团队创新性地采用材料基因组方法自主设计,以高度对称性的连1,3,4-噁二唑结构为母体,定向引入硝胺基团提高能量,采用分子氢键及 π - π 堆积等策略提高密度,通过这两步反应进行高效合成,制备出实测密度达到 $2.3 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 的新型高能量密度炸药分子二硝胺联噁二唑。

“该新型炸药分子具有与经典高能炸药 CL-20 相当的能量水平,无转晶现象,制备方法简单,生产成本低,具有一定的实际应用潜力。”《含能材料》编委,含能分子创制团队负责人、国家千人计划专家张庆华说。该研究成果受到了《自然·通讯》审稿人的高度评价,称是“探索合成高能炸药 CL-20 替代物的重要进展”。

