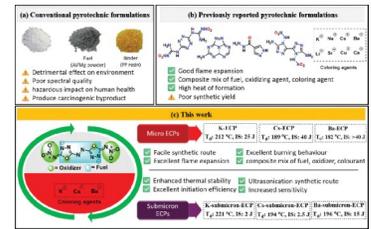


## 印度理工学院制备了三种绿色烟火剂和初级炸药

印度理工学院以5,5'-二硝胺-3,3'-偶氮-1,3,4-噁二唑( $H_2DNAO$ )为原料通过简单合成路线结合碱金属/碱土金属,获得了高密度( $1.98\sim 2.80\text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ )、高热稳定性(分解温度 $182\sim 212\text{ }^\circ\text{C}$ )且机械感度低(撞击感度 $25\sim 40\text{ J}$ )的微米级ECPs。通过超声法进一步制备亚微米级ECPs后,其热稳定性提升至 $194\sim 221\text{ }^\circ\text{C}$ ,但机械感度显著提高(撞击感度 $2\sim 15\text{ J}$ ),更适合作为主炸药。燃烧实验表明,含 $K_2DNAO$ 和 $Cs_2DNAO$ 的无氯配方可替代传统高氯酸盐体系,产生红/橙火焰且燃烧时间长。亚微米级 $K_2DNAO$ 成功引爆RDX,验证其起爆能力。该研究通过氮氧富集结构减少铝粉用量,并利用金属离子实现显色功能,为绿色烟火剂和低污染炸药提供了新思路。

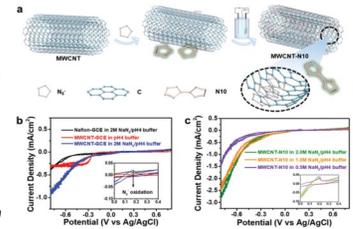
源自: Banik S, Rajak R, Shreeve J M, et al. Exploring Green Pyrotechnic Formulations and Primary Explosives with 1,3,4-Oxadiazole-Based Micro and Submicron Energetic Coordination Polymers[J]. Small, 2025, 2409255. <https://doi.org/10.1002/smll.202409255>.



## 南京理工大学实现在多壁碳纳米管上获取稳定的全氮化合物 $N_{10}$

全氮化合物的设计与合成是含能材料领域的核心挑战。南京理工大学团队采用电化学的方法,以多壁碳纳米管(MWCNTs)为基底,首次成功的将五唑阴离子( $N_5^-$ )耦联成全氮双五唑化合物 $N_{10}$ 。通过傅里叶变换红外光谱、拉曼光谱、X射线衍射、X射线光电子能谱分析、透射电子显微镜和密度泛函理论计算证实了 $N_{10}$ 在多壁碳纳米管侧壁中均匀分布(MWCNT- $N_{10}$ - $n_M$ )。该材料在电催化氧化还原反应(ORR)中展现出了优异的两电子选择性,合成过氧化氢的产率高达95%。

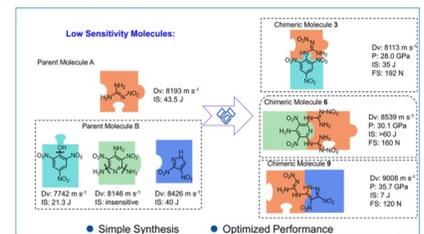
源自: Hou T Y, Lu M, Xu Y G, et al. High-Energy Polynitrogen  $N_{10}$  Stabilized on Multi-Walled Carbon Nanotubes[J]. Small, 2024, 20: 2403615. <https://doi.org/10.1002/smll.202403615>.



## 中国工程物理研究院提出嵌合策略平衡含能分子能量与感度

高能钝感含能分子的设计与合成是含能材料领域的核心挑战。中国工程物理研究院团队首次将“嵌合体”概念引入含能分子设计,提出了一种基于已知含能分子模块化拼接的高效策略。以经典钝感含能分子硝基胍(NQ)为母体,通过将硝基胍(NQ)与三硝基苯酚(PA)、3,5-二硝基吡啶三胺(TANPY)等钝感分子结合,高效合成了三类新型含能化合物。其中,化合物9(DNP-NQ嵌合体)爆速达 $9008\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ ,冲击感度 $7\text{ J}$ ,能量超越HMX;化合物6(TANPY-NQ嵌合体)保持低感( $IS>60\text{ J}$ )的同时爆速 $8539\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 。理论计算表明,分子内氢键与 $\pi$ - $\pi$ 堆积增强了稳定性,静电势分布差异解释了感度变化。该策略为高能低感含能材料的开发提供了高效途径。

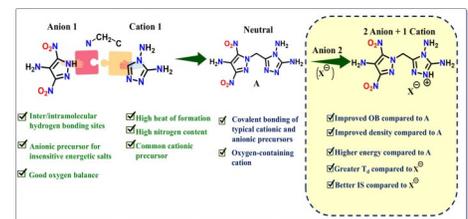
源自: Shan Y J, Huang S, Zhang W Q, et al. An effective strategy for balancing energy and sensitivity: design, synthesis, and properties of chimeric energetic molecules[J]. Journal of Materials Chemistry A, 2025, 13: 1164-1171. <https://doi.org/10.1039/D4TA06644H>.



## 印度理工学院开发双阴离子型含能盐优化氧平衡策略

印度理工学院研究团队通过N-亚甲基桥联合成基于4-氨基-3,5-二硝基吡啶和3,4-二氨基三唑的富氧阳离子前驱体,进一步与含能阴离子反应制备了高性能含能离子盐。由于该前驱体中含有两个硝基,它比经常使用的环状和非环状富氧阳离子表现出更好的氧平衡。基于此,所形成的含能离子盐比其他3,4-二氨基三唑衍生物的含能离子盐表现出更高的氧平衡、生成焓、密度和爆轰性能。其中,含能离子盐8展现出高热稳定性( $T_d=219\text{ }^\circ\text{C}$ )与优异爆轰性能( $D=8519\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ ,  $P=29.7\text{ GPa}$ )。

源自: Bhatia P, Das P, Kumar D. Engaging Two Anions with Single Cation in Energetic Salts: Approach for Optimization of Oxygen Balance in Energetic Materials[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2024, 16: 64846-64857. <https://doi.org/10.1021/acsami.4c15237>.



## 南京理工大学报道高性能无金属起爆药

无金属起爆药是代替含铅起爆药最有效的途径。南京理工大学研究团队通过两步反应成功合成了一种基于稠合三唑并四嗪骨架的无金属起爆药1,8-二叠氮双[[1,2,4]三唑并[[4,3-b:3',4'-f][1,2,4,5]四嗪(DATTY)。该化合物氮含量高达80.3%,热分解起始温度为 $151.5\text{ }^\circ\text{C}$ ,生成焓为 $6.533\text{ kJ}\cdot\text{g}^{-1}$ ,显著优于传统起爆药。DATTY具有卓越的起爆能力,1 mg就能成功引爆670 mg黑索金(RDX),为无金属起爆药树立了一个新标杆。具有很高的军事价值,有望运用于高性能火炸药、微纳起爆装置等国防军事领域。

源自: Yu Q, Zheng Z Y, et al. Exploring the Maximum Potential of Initiating Ability in Metal-Free Primary Explosives[J]. Journal of the American Chemical Society, 2025, 147: 5125-5131. <https://doi.org/10.1021/jacs.4c14967>.



### 德国慕尼黑大学开发新型银硝基四唑胺起爆药以替代叠氮化铅

为应对叠氮化铅(LA)因环境毒性面临禁用的问题,德国慕尼黑大学研究团队通过改进5-硝基四唑银(AgNT)的结晶工艺,成功开发了一种新型低感起爆药 $\text{AgNT} \cdot \frac{1}{4}\text{NH}_3$ 。该化合物通过引入0.25当量氨优化晶体结构,显著提升了粉末流动性与安全性,同时保持了高起爆性能。单晶X射线衍射显示, $\text{AgNT} \cdot \frac{1}{4}\text{NH}_3$ 晶体呈四方晶系,表面光滑且粒径分布均匀(35~137  $\mu\text{m}$ ),避免了原AgNT的针状团聚问题。热稳定性测试表明, $\text{AgNT} \cdot \frac{1}{4}\text{NH}_3$ 在217  $^{\circ}\text{C}$ 以下无氨气逸出,分解温度高达285  $^{\circ}\text{C}$ 。真空安定性实验验证其长期储存可靠性。

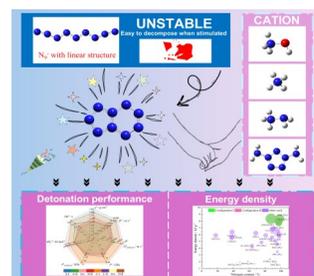
源自: Lommel M, Schirra R, Klapötke T M, et al. On the Further Development of Silver Nitrotetrazolate for Practical Use as a Primary Explosive[J]. *Propellants, Explosives, Pyrotechnics*, 2024; e12013. <https://doi.org/10.1002/prep.12013>.



### 南京理工大学报道新型5/6稠环全氮阴离子 $\text{N}_9^-$

南京理工大学研究团队,通过量子化学计算与分子动力学模拟,设计了一种新型的5/6稠环全氮阴离子 $\text{N}_9^-$ ,并在此基础上组装了4种新的富氮离子化合物。该阴离子由五元环和六元环非共面耦合而成,电荷分布呈现对称性,且具有明显的芳香性与反芳香性共存特性。通过键序分析来评估化学键的相对强度,并进一步辅以过渡态理论和从头算分子动力学,最终确定了 $\text{N}_9^-$ 的分解途径。与高能阳离子( $\text{N}_2\text{H}_4^+$ 、 $\text{NH}_3\text{OH}^+$ 等)结合后,表现出异常高的形成焓及优异的爆轰性能,为多氮及全氮化合物的合成提供了理论依据。

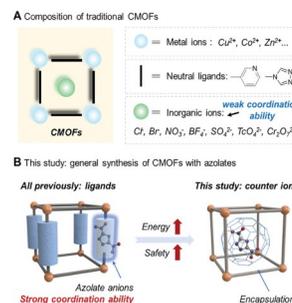
源自: Yuan X F, Xu Y G, Lu M, et al. Cyclo- $\text{N}_9^-$ : a Novel 5/6 Fused Polynitrogen Anion for High Energy Density Materials[J]. *Advanced Science*, 2025. <https://doi.org/10.1002/adv.202414394>.



### 北京理工大学报道阳离子金属有机框架封装唑类阴离子实现高能量密度材料新突破

北京理工大学团队利用配位能力强的偶氮酸盐作为反阴离子,合成了一系列新的阳离子金属有机框架(CMOFs),这些反阴离子专门用作与金属配位的配体。该研究首次将具有强配位能力的唑类阴离子如3,4,5-三硝基吡唑、3,5-二硝基三唑、5-硝基四唑等引入CMOFs骨架,突破了传统CMOFs中使用无机阴离子的限制。值得注意的是,CMOF( $\text{CuTNPO}$ )具有异常高的爆热,为7375  $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ ,甚至超过了CL-20(6536  $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ )。通过X射线数据和量子化学计算表明,发现其优异的性能来源于骨架内的强氢键以及 $\pi$ - $\pi$ 相互作用。该研究为扩大含能框架材料的结构多样性和挖掘其潜在应用的可能性提供了新思路。

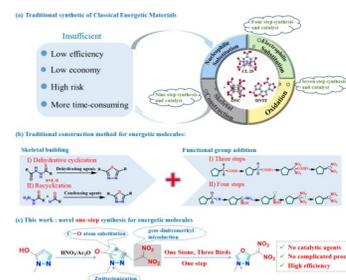
源自: Ding N, Zhao C F, Pang S P, et al. Encapsulating Azolates Within Cationic Metal - Organic Frameworks for High-Energy-Density Materials[J]. *Advanced Science*, 2025, 12: 2409093. <https://doi.org/10.1002/adv.202409093>.



### 西北工业大学实现骨架编辑一步合成激光敏感含能分子

传统含能分子合成需多步骤骨架构建与基团修饰,存在效率低、风险高等缺点。西北工业大学团队单原子骨架编辑技术,以1-甲基-5-羟基吡唑为原料,在硝酸/乙酸酐体系中一步实现1,3,4-噁二唑骨架构建、偕二硝基甲基功能化及两性离子化,合成新型含能分子NPX-04。该化合物密度1.78  $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ,热分解温度170.7  $^{\circ}\text{C}$ ,爆速8483  $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ ,爆压31.3 GPa,撞击感度1 J,摩擦感度72 N。在近红外激光点火显示NPX-04的点火延迟时间为1452、1408和788毫秒。点火后,在不同功率设置下,在8.5、7.5和5.5毫秒处发生快速爆燃。随后,火焰迅速减弱并完全熄灭,没有留下任何残留物质,显然优于RDX和HMX。该研究为高效合成激光敏感含能材料提供了新策略。

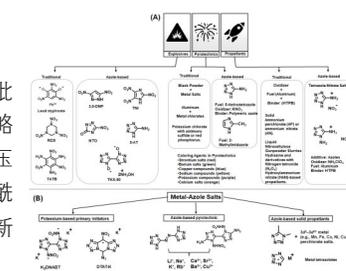
源自: Fan M R, Jiang X, Zhang Q H, et al. One-Step Realization of Skeleton Editing, gem-Dinitromethyl Functionalization, and Zwitterionization in a Laser-Sensitive 1,3,4-Oxadiazole Energetic Molecule[J]. *Organic Letters*, 2025, 27: 840-845. <https://doi.org/10.1021/acs.orglett.4c04504>.



### 美国爱达荷大学开发协调驱动的更安全 and 可持续的高能材料

传统高能材料常伴有毒性副产物及环境风险。爱达荷大学研究团队以3,6-双(3,5-二甲基-1H-吡唑-1-基)-1,2,4,5-四嗪和 $N,N'$ -(1,2,4,5-四嗪-3,6-二基)二硝酰胺为前体,通过配位驱动策略合成系列配位聚合物框架(CPEs)。其中,化合物4的密度为2.22  $\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$ ,爆速9017  $\text{m} \cdot \text{s}^{-1}$ ,爆压44.8 GPa,性能显然优于RDX。通过温度调控反应路径, $N,N'$ -(1,2,4,5-四嗪-3,6-二基)二硝酰胺与碱反应可选择性生成不对称盐,实现结构精准控制。该研究为绿色高能材料设计提供了新思路。

源自: Singh J, Staples R J, Shreeve J M. Coordination-driven safer and sustainable energetic materials[J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2025. <https://doi.org/10.1039/D5TA01130B>.



(南京理工大学 许元刚 许泽 编译)