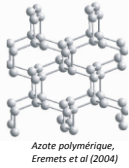


## Résumé

- Dans le cadre de la recherche d'un nouveau propergol, le mélange binaire Li-N<sub>2</sub> a été étudié jusqu'à 82.5 GPa et 2500 K.
- Un premier nouveau composé, soit le métal de stoechiométrie LiN<sub>2</sub> prévu par la théorie, a été synthétisé à 20 GPa et ≈1200 K.
- Chauffer LiN<sub>2</sub> à plus de 2500 K et 55 GPa a permis la synthèse d'un second nouveau composé de stoechiométrie LiN<sub>5</sub>.
- Les mesures de spectroscopie Raman indiquent que des pentazolates, anneaux N<sub>5</sub><sup>-</sup> hautement énergétiques, constituent le LiN<sub>5</sub> qui s'avère métastable jusqu'aux conditions ambiantes.

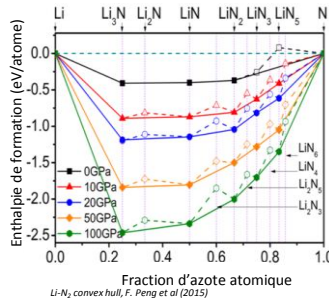
## Motivation : Synthèse d'un nouveau propergol



- Synthèse d'un nouveau propergol métastable aux conditions ambiantes au moyen de haute pression.
- Matériau type azote polymérique, polymère formé uniquement d'azotes simplement liés, produit à 110 GPa et 2000 K et métastable jusqu'à 40 GPa.

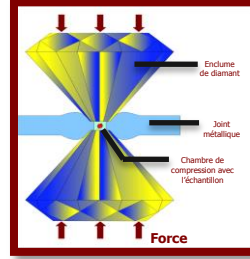
## Li-N<sub>2</sub> : Une riche chimie

- En raison de sa réactivité, le lithium peut aisément briser la forte liaison triple N≡N.
- Le convex hull de Li-N<sub>2</sub> prédit plusieurs nouveaux composés métastables aux conditions ambiantes. [2]
- LiN<sub>5</sub> est calculé très énergétique (2,72 kJ/g) grâce à la formation d'anneaux N<sub>5</sub><sup>-</sup>.

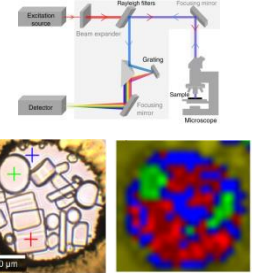


## Outils et méthodes de caractérisation

### Cellule à enclumes de diamant



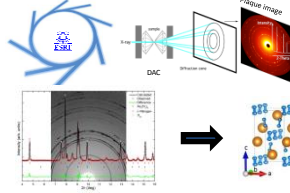
- La dureté et la transparence du diamant font de lui le matériau idéal pour une enclume.



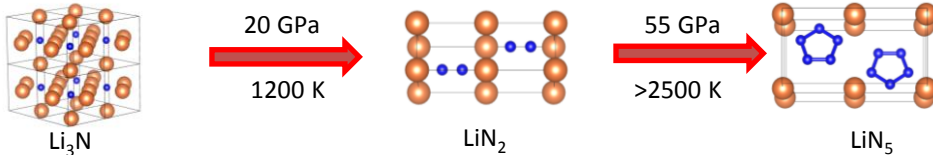
### Spectroscopie Raman

- Ces méthodes de caractérisation *in-situ* sont non-destructives.
- Ces méthodes permettent de déterminer la structure cristalline et la nature des liaisons interatomiques.

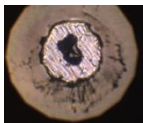
### Diffraction de rayons X



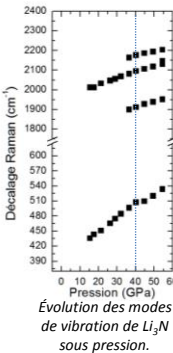
## Vers des composés de plus en plus azoté...



Structure de LiN<sub>5</sub> telle qu'obtenue par simulation numérique. [5] Les distances N-N correspondent à une liaison d'ordre 1,5 donc très énergétique.



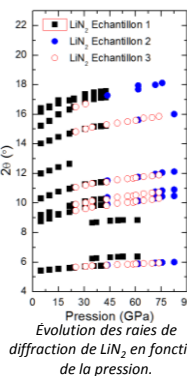
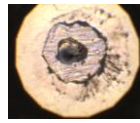
Li<sub>3</sub>N se forme spontanément sous quelques bars de N<sub>2</sub>.



Précédemment étudié par diffraction, Li<sub>3</sub>N est stable jusqu'à plus de 200 GPa. [3]

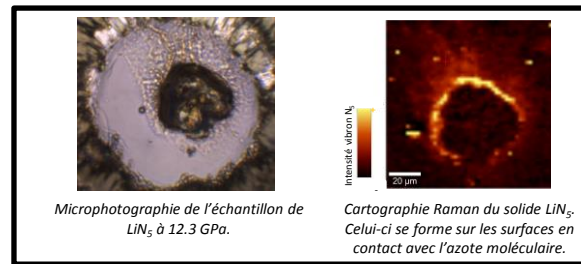
La discontinuité à 40 GPa confirme la transition de phase précédemment observée par diffraction.

LiN<sub>2</sub> est synthétisé à 20 GPa à partir de Li<sub>3</sub>N chauffé à 1200 K.

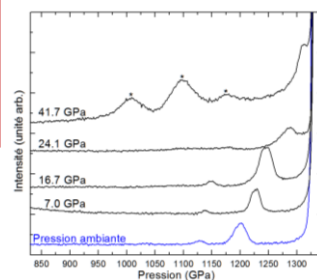


La structure affinée correspond à celle du composé moléculaire prédit par les calculs. [4]

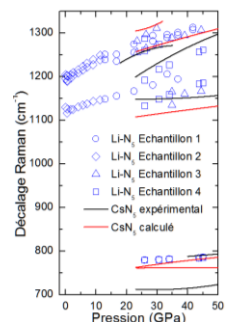
La phase polymérique de LiN<sub>2</sub> prédite par les calculs à 58 GPa n'est pas observée.



## Les anneaux N<sub>5</sub><sup>-</sup> sont métastables aux conditions ambiantes !



Évolution des modes de vibrations du LiN<sub>5</sub>. Les modes observés correspondent très bien à ceux calculés et observés dans CsN<sub>5</sub>. [5]



## Références

- [1] M. I. Eremets et al. *Nature Mater.* **3**, 558 (2004).
- [2] F. Peng et al. *J. Phys. Chem. Lett.* **6**, 2363 (2015).
- [3] A. Lazicki et al. *PRL* **95**, 165503 (2005).
- [4] Y. Shen et al. *Scien. Rep.* **5**, 14204 (2015).
- [5] B. Steele et al. *Chem. Mat.* **29**, 2 (2017).

