

平成 19 年 2 月 28 日

氏名 後藤 直之 (印)

21世紀COEプログラム

拠点：大学院工学系研究科
応用化学専攻、化学システム工学専攻、
化学生命工学専攻、マテリアル工学専攻

“化学を基盤とするヒューマンマテリアル創成”

平成18年度リサーチ・アシスタント報告書

ふりがな 氏名	ごとう なおゆき	生 年 月 日
	後藤 直之	
所属機関名	東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻	
所在地	東京都文京区本郷 7-3-1 東京大学工学部 8 号館 706 号室	
申請時点での 学 年	博士課程 3 年	
研究題目	高エネルギー物質の静的圧力応答	
指導教員の所属・氏名	東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専攻 越 光男 教授	

I 研究の成果 (1000字程度)

緒言

HMX (octahydro-1,3,5,7-tetranitro-1,3,5,7-tetrazocine)には常圧・常温で4つの相 α , β , γ , δ が存在することが知られている。打撃起爆感度は $\beta < \alpha < \gamma < \delta$ とされており、また結晶としての安定性はこれと逆に $\beta > \alpha > \gamma > \delta$ とされている。分子構造は2通りあり、 β 相はchair型8員環 $\cdot C_1$ 点群、他はboat型8員環 $\cdot C_{2v}$ 点群に属す。Czerskiらは第二高調波の選択律を用いて、 β -HMXが起爆時に起爆感度の高い δ 相へ転移してから爆発に至っている可能性を実験的に示唆した。

目的及び方法

本研究では、 β -HMXにダイヤモンドアンビルセルを用いて高圧力を印加し、粉末X線回折測定とその結果を用いてRietveld解析を行うことによってHMXの高圧下における結晶構造を解明する。また、高圧下でフーリエ変換赤外吸収スペクトル(FT-IR)を測定し、分子構造転移の有無を確認する。

結果及び考察

測定された粉末X線回折パターンは、加圧による静水圧性の減少に伴い、回折強度は低下するものの、相転移と認められる変化は現れなかった(20°のピークはガasket材に由来し、HMXではない)。従って、Rietveld解析によって得られた結晶構造も常圧と同一の空間群 $P2_1/n$ 、分子構造により最適化された。分子間距離の減少が見られた。

格子定数の圧力変化はFig. 1のようになった。12 GPaを境に c 軸が増加傾向に転じることが分かる。また、 b 軸の減少傾向が若干急になっている。

FT-IRスペクトルは、強度が著しく減少するものの、分子構造の転移を示唆するスペクトル形の変化は見られなかった。ピークシフトは総じて大きくないが、 $1100\text{ cm}^{-1} \sim 1600\text{ cm}^{-1}$ の主に8員環 $\cdot \text{NO}_2$ に由来する振動にブルーシフトが認められた。これは分子間距離の減少によって斥力が働いた結果であると言える。

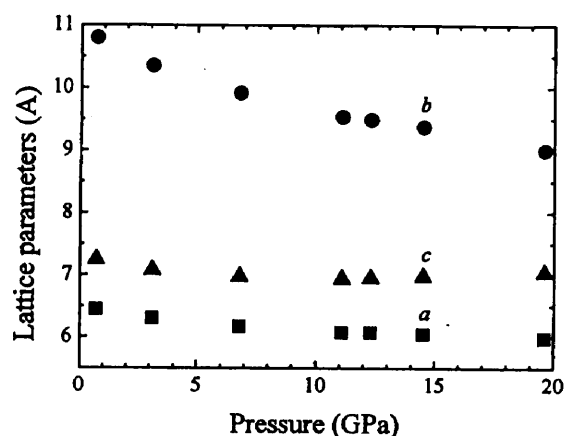


Fig. 1. HMXの格子定数の圧力変化.

II (1) 学術雑誌等に発表した論文A (掲載を決定されたものを含む.)

共著の場合、申請者の役割を記載すること。

(著者、題名、掲載誌名、年月、巻号、頁を記入)

N. Goto, H. Fujihisa, H. Yamawaki, K. Wakabayashi, Y. Nakayama, M. Yoshida, and M. Koshi,
“Crystal Structure of the High-Pressure Phase of Hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine (γ -RDX)”,
J. Phys. Chem. B, 2006 Sep., 110 23655-23659.

申請者の役割: 発案・実験・解析・理論計算・論文執筆

N. Goto, H. Fujihisa, H. Yamawaki, K. Wakabayashi, Y. Nakayama, M. Yoshida, and M. Koshi,
“High Pressure Phase of RDX”,

Proceedings of the 13th International Detonation Symposium, 出版待ち

申請者の役割: 発案・実験・解析・理論計算・論文執筆

II (2) 学会において申請者が口頭発表もしくはポスター発表した論文
(共同研究者 (全員の氏名)、題名、発表した学会名、場所、年月を記載)

口頭発表

1. 後藤 直之, 篠田 涉, 本田 一匡, 三上 益弘, 越 光男
「RDX の高圧下における MD シミュレーション」
火薬学会 2006 年度春季, 東京, 2006 年 5 月.
2. N. Goto, H. Fujihisa, H. Yamawaki, K. Wakabayashi, Y. Nakayama, M. Yoshida, and M. Koshi,
“High Pressure Phase of RDX”,
13th International Detonation Symposium, Norfolk, Virginia, USA, Jul. 2006.
3. 後藤 直之, 藤久 裕司, 山脇 浩, 若林 邦彦, 中山 良男, 越 光男
「HMX の高圧構造」
火薬学会 2006 年度秋季, 北九州, 2006 年 11 月.
4. N. Goto, H. Fujihisa, H. Yamawaki, K. Wakabayashi, Y. Nakayama and M. Koshi,
“High-pressure structures of energetic materials”
COE-BK21 Joint Seminar, Seoul, Korea, Dec. 2006.

ポスター発表

1. N. Goto, H. Fujihisa, H. Yamawaki, K. Wakabayashi, Y. Nakayama, M. Yoshida, M. Koshi,
“Crystal structure of HMX at high pressure (ϵ -HMX?)”
21 世紀 COE 第 4 回国際シンポジウム, 東京, 2006 年 10 月