

EA を用いた TNT/RDX 混合系の爆轟反応過程シミュレーション Simulation for detonation process of TNT/RDX by an evolutionary algorithm

阪大基礎工¹, 物材機構², (株)ダイセル³

○草部 浩一¹, 石河 孝洋², 牧野 有都³, 西川 正浩³, 阪本 聡³

Osaka Univ.¹, NIMS², Daicel Corp.³

°Koichi Kusakabe¹, Takahiro Ishikawa², Yuto Makino³, Masahiro Nishikawa³, Satoshi Sakamoto³

E-mail: kabe@mp.es.osaka-u.ac.jp

TNT と RDX の混晶で発生する TNT 分解反応(爆轟反応)の解析は、ナノダイヤモンド等の爆轟合成等の産業応用上重要な知見を与えることが期待されてきており、我々は TNT/RDX の混晶で発生する化学反応過程を追跡してきた。効率的な評価のため、加圧条件下での物質構造探索や新物質予測で用いられる進化的アルゴリズム(EA)を、爆轟反応素過程の経時的追跡に用いることを提案した。[1] 今回は、混晶系特有の物質輸送を仮想的に高速評価するための方法を示す。

我々は既に、TNT 結晶中に発生する水素移動や生成した水分子の脱出を捉えうる EA シミュレーション法を実現した。そこで、RDX 結晶中での高速化学反応を、RDX 分子の水素脱離、結晶中の水内包効果、ヒドロキシラジカル効果について解析した。特に中性 OH が含まれると、活性障壁無しで RDX 中の水素が奪われ、ps オーダーでの水分子形成が 1 分子当たり 10 eV オーダーのエネルギー開放を伴って発生しうることが結論された。

RDX の不安定化は、水素ラジカルを TNT 相へ供給するトリガーとなる。ニトロ基に対して水素ラジカル供給が続くことは、高速に水や HO を発生させ、引き続いた RDX 分解を与える過程に繋がらう。この連鎖反応ループが TNT と RDX の混晶で起こる初期化学反応過程と推論したので、シミュレーション事例とともに報告する。

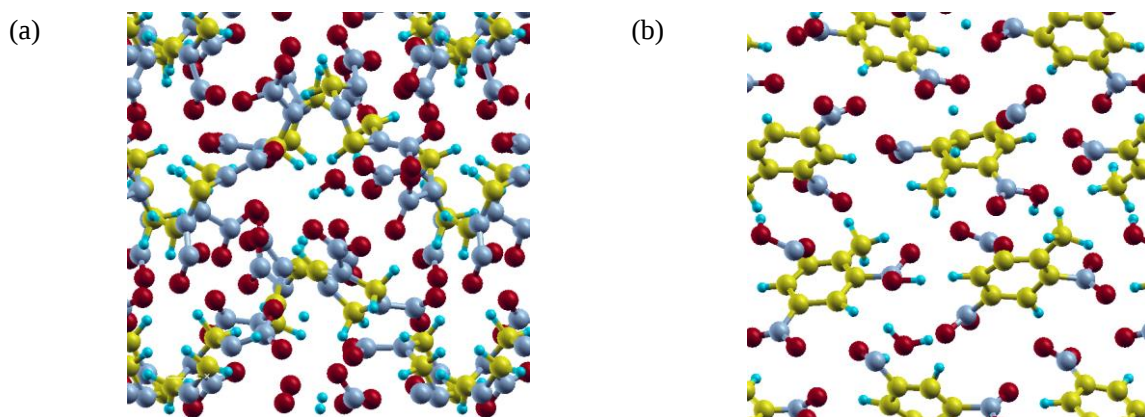


図 1 (a) RDX 結晶中に OH ラジカルから生じた分解反応と水分子形成及び、(b) TNT 結晶中に H ラジカルが導入されたことによる -NOOH 形成からニトロ基分解・水分子形成を生じた計算事例。

- [1] 「TNT 結晶爆轟反応過程への進化的アルゴリズムの応用」, 草部浩一, 石河孝洋, 牧野有都, 西川正弘, 阪本聡, 日本物理学会第 75 回年次大会 (名古屋大学)、16aK29-3.