

TNT 結晶爆轟反応過程への進化的アルゴリズムの応用

大阪大学大学院基礎工学研究科 草部浩一

元素戦略磁性材料研究拠点 物質・材料研究機構 石河孝洋

株式会社ダイセル 牧野有都、西川正浩、阪本聡

An evolutionary algorithm in detonation process of a TNT crystal

K. Kusakabe

Grad. Sch. Engineering Science, Osaka University

T. Ishikawa

ESICMM, NIMS

Y. Makino, M. Nishikawa, S. Sakamoto

Daicel Corporation

2,4,6-trinitrotoluene (TNT) と hexahydro-1,3,5-trinitro-1,3,5-triazine (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た。TNT/RDX の気相反応では、TNT 中のニトロ基が水素化され続く脱水反応がトリガーとなるとの説[1]が有力であるが、TNT のメチル基からニトロ基への水素移動反応[2]は、安定固相にある TNT 結晶中では発生し難い。むしろ、TNT/RDX の固相爆轟反応では RDX と TNT の分解が平行して進行し、RDX 分解で余剰となる水素が TNT 相中に移動し、急速な反応が継続されるものと予想される。この推論を検証するために、下記のシミュレーションを行った。

我々はまず、結晶相にある TNT の反応過程を追跡するため、仮想的な RDX 結晶中の水素と TNT 結晶中の空隙が置換する突然変異生成過程が発生すると考える進化的アルゴリズムの動作解析をすることにした。単純化のため、今回は TNT 結晶中に想定される水素導入位置への移動と生成される水や窒素酸化物分子の気相への脱出を確率的に生み出す計算ステップと、構造最適化計算又は有限温度分子動力学計算を併用することで、反応系中に一時的に発生する準安定構造の経時変化を追跡した。この方法は、局所平衡に近い状態の構成がサブナノ秒程度の時間スケールで発生し、水素移動や生成分子脱出が経時的にレアイベントとして起こるとする近似的な動力学計算法に相当する。水素移動で TNT 1 分子当たり 1 つの $\cdot\text{NOOH}$ が形成される場合には、瞬間的に 800K 以上に温度が上昇し得る。この温度効果による結晶中の安定サイト間での水素連続移動が捉えられた。これにより、水素移動過程の存在は保証できたと考える。構造最適化法を用いて世代進化を進めた進化的アルゴリズムによるシミュレーションからは、 $\cdot\text{NOOH}$ 構造発生とニトロ基間の水素結合形成や、局所 NO 形成が見いだされ、その後の脱離分子が合成されていく過程が確認された。この方法は分子動力学支援カイネティック・モンテカルロ法[3]を複数動作させる発展形とも見做すことができ、爆轟ナノダイヤモンド合成等の固相化学反応、ダイヤモンド CVD 合成等の表面・界面反応を通じた物質合成反応の追跡にも応用可能である。

[1] E.C. Meurer, et al., Chem. Commun. 40 (2004). [2] B. Wang, J. Phys. Chem. A, **115**, 8142 (2011). [3] K. Mae, Surf. Sci., **482-485**, 860 (2001).