

究極の爆弾を求めて

芝浦工業大学 数理科学研究会

～資料～

2014年10月31日

※何か不明な点や計算ミス等がありましたら加筆修正しますので指摘をお願いします

制作：加藤康介

目次

1	爆薬	2
1.1	エンタルピー	2
1.2	エントロピー	3
1.3	Gibbs energy	4
2	核燃料	4
2.1	核分裂反応	4
3	反物質	5

1 爆薬

1.1 エンタルピー

エンタルピーの定義 化学において、たいいてい問題とする系 (system) は一定圧力下 (大気) にさらされているため、たとえば系に熱 (エネルギー) を加えて系内の物質を変化させることを考えたとき、エネルギーすべてが物質の変化に使われず、一部は系の体積変化に使われる、すなわち仕事をする。エンタルピー (enthalpy) はこの仕事分をまとめて考えることができる性質であり、以下のように定義される。

$$H = U + pV \quad (1)$$

H は系のエンタルピー、 U は内部エネルギー (internal energy)、 p は圧力、 V は系の体積である。この式はどんな系、どんな物質にも適用することができる。これを物質質量 n で割れば、モルあたりのエンタルピーとなる。

$$\frac{H}{n} = H_m = U_m + pV_m \quad (2)$$

系内の物質が完全気体であれば、 $pV_m = RT$ だから、

$$\frac{H}{n} = H_m = U_m + RT \quad (3)$$

となる。

一定圧力のとき、エンタルピー変化 ΔH は、

$$\Delta H = \Delta U + \Delta(pV) = \Delta U + p\Delta V \quad (4)$$

となる。

標準反応エンタルピー 物質の主な反応の 1 つは燃焼反応である。燃焼エンタルピーは気体が燃焼したときのエンタルピーであり、そのときのエンタルピー変化 $\Delta_c H$ は次のようになる。

$$\Delta_c H = \Delta_c + \Delta_{\nu_{\text{gas}}} RT$$

R は気体定数、 T は温度 (単位 : K) である。だが、先にも述べたように燃焼も反応の 1 つであるから、燃焼エンタルピーを次のように一般化した式で表すことにする。

$$\Delta_r H = \sum \nu H_m(\text{products}) - \sum \nu H_m(\text{reactants}) \quad (5)$$

$\Delta_r H$ は反応エンタルピー、 ν は化学量論係数である。標準反応エンタルピー $\Delta_r H^\ominus$ は、すべての products, reactants が標準状態 (厳密に 1 atm 下でその物質だけが存在する状態) にあるときの反応エンタルピーである。

$$\Delta_r H^\ominus = \sum \nu H_m^\ominus(\text{products}) - \sum \nu H_m^\ominus(\text{reactants}) \quad (6)$$

標準生成エンタルピー 先に挙げた反応エンタルピーは、物質の絶対的なエンタルピーの値から算出しているが、このエンタルピーの絶対値は知ることができない。そこで、標準生成エンタルピーを考える。基準状態 (普通の条件下で、元素が最も安定に存在できる状態) において、ある物質の標準反応エンタルピーを求めたいとき、まずは反応物を元素まで分解してから生成物を作る間接的な経路を想定し、そこから目的の反応を考える。反応式ができれば、標準生成エンタルピーから標準反応エンタルピーが計算できる。

$$\Delta_r H^\ominus = \sum \nu H_f^\ominus(\text{products}) - \sum \nu H_f^\ominus(\text{reactants}) \quad (7)$$

1.2 エントロピー

エントロピー エントロピー (entropy) とは, 簡単に言うと系の「乱雑さ」のことである. エントロピー変化 ΔS は次のように定義される.

$$\Delta S = \frac{Q}{T} \quad (8)$$

Q は系に可逆的に出入りした熱, T はそのときの温度である.

気体の等温可逆変化を考えてみよう. 等温可逆変化のとき, 系に出入りする熱量 Q は

$$Q = nRT \ln \frac{V_2}{V_1}$$

で表されるから, これをエントロピー変化の式に代入すると,

$$\Delta S = \frac{Q}{T} = \frac{nRT \ln \frac{V_2}{V_1}}{T} = nR \ln \frac{V_2}{V_1} \quad (9)$$

となる.

次に加熱によるエントロピー変化を考えてみよう. 加熱により温度 T が一定でなくなるから, ここでは無限小量の熱 $d'Q$ を加えた場合を考える. このとき, エントロピーも微小変化 dS となるから,

$$dS = \frac{d'Q}{T}$$

となる. さて, ここで熱容量 C を導入すると,

$$Q = C \Delta T$$

だから, 微量のときは

$$d'Q = C dT$$

となるから, したがって

$$dS = \frac{C dT}{T}$$

を得る. エントロピー変化 ΔS はこれの無限小量の総和だから, 温度が T_1 から T_2 に変化したとすれば

$$\Delta S = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C dT}{T}. \quad (10)$$

温度変化が狭いとき, たいていは C が一定と見なせるから,

$$\Delta S = \int_{T_1}^{T_2} \frac{C dT}{T} = C \int_{T_1}^{T_2} \frac{dT}{T} = C \ln \frac{T_2}{T_1} \quad (11)$$

となる.

標準反応エントロピー 標準状態における reactants と products のモルあたりのエントロピー S_m^\ominus がわかっているならば, その差から標準反応エントロピーを求めることができる.

$$\Delta_r S^\ominus = \sum \nu S_m^\ominus(\text{products}) - \sum \nu S_m^\ominus(\text{reactants}) \quad (12)$$

1.3 Gibbs energy

先の項目では特に述べなかったが、化学反応の前後において、 $\Delta_r S^\ominus$ は必ずしも正にはならない。それは、系のみを考えているからであって、系の外界を考慮していない。系のエントロピー変化 $\Delta_r S_{\text{sur}}$ は、

$$\Delta_r S_{\text{sur}} = -\frac{\Delta H}{T}$$

だから、これも含めた全エントロピー変化 ΔS_{total} は

$$\Delta S_{\text{total}} = \Delta S + \Delta_r S_{\text{sur}} = \Delta S - \frac{\Delta H}{T}$$

となる。ただし、これは定圧、定温という制約のもとでの変化という制約が存在する。

Gibbs energy 外界のエントロピー変化も考えるのは手間がかかるため、ここで Gibbs energy G を導入する。

$$G = H - TS \quad (13)$$

これを用いれば、定温のとき、Gibbs energy 変化 ΔG は

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S, \quad (14)$$

定温、定圧下であれば、

$$\Delta G = -T\Delta S_{\text{total}} \quad (15)$$

となる。

標準反応 Gibbs energy 標準反応 Gibbs energy $\Delta_r G^\ominus$ は次のように表される。

$$\Delta_r G^\ominus = \sum \nu G_m^\ominus(\text{products}) - \sum \nu G_m^\ominus(\text{reactants}) \quad (16)$$

また、Gibbs energy の定義から、温度 T での標準反応 Gibbs energy は次のようになる。

$$\Delta_r G^\ominus = \Delta_r H^\ominus - T\Delta_r S^\ominus \quad (17)$$

2 核燃料

2.1 核分裂反応

大きい核種 ${}^N_A\text{A}$ が別の 2 つの核種 ${}^N_B\text{B}$, ${}^N_C\text{C}$ といくつかの中性子に分裂するとする。



それぞれの核種と中性子の質量を m_A , m_B , m_C , m_n とすれば、この核分裂により質量欠損 Δm :

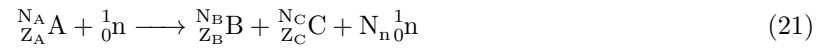
$$\Delta m = m_A - (m_B + m_C + N_n m_n) \quad (19)$$

が生じ、その質量欠損に応じたエネルギー ΔE が発生する。

$$\Delta E = \Delta m c^2 \quad (20)$$

c は光速である.

核分裂反応は, 主に大きな核種が中性子を吸収したときに起こる. 中性子を吸収した核種は不安定となり, 崩壊する.



この反応式からわかるように, 崩壊した核からは別の核種とは別に中性子が放出されている. この中性子がまた別の核に吸収されることがあり, これを繰り返すことを連鎖反応という. 連鎖反応が発生している状態を臨界状態といい, また, 連鎖反応に至るための核燃料の集積量の最小値を臨界量という.

3 反物質

反物質とは, 物質に対し質量等の性質は同じだが, 互いに電荷が逆の物質のことである. 物質と反物質は接触することで対消滅を起こし, エネルギーを放出する.

$$E = 2mc^2 \quad (22)$$

参考文献

- [1] Peter Atkins , Julio de Paula 著, 千原秀昭・稲葉章訳 : アトキンス 物理化学要論 , 1994.04.01 , 東京化学同人
- [2] G. Audi, A.H. Wapstra, C. Thibault, J. Blachot and O. Bersillon : Nuclear Physics A 729 , 2003