

酸素の非質量依存同位体分別・理論—地球風 (Earth Wind) 中の酸素同位体存在度

Mass Independent Isotopic Fractionation of Oxygen; Calculations in relevance to the O isotopic abundances in Earth Wind (EW)

山田 明憲 [1]; 南部 伸孝 [2]; 平木 康隆 [3]; 瀬田 孝将 [4]; 笠井 康子 [4]; 小嶋 稔 [5]

Akinori Yamada[1]; Shinkoh Nanbu[2]; Yasutaka Hiraki[3]; Takamasa Seta[4]; YASUKO KASAI[4]; Minoru Ozima[5]

[1] 東大・理・地惑; [2] 九大・情基セ; [3] 名大; [4] NICT; [5] 無所属

[1] Earth and Planetary Sci., Univ. of Tokyo; [2] RIIT, Kyushu Univ.; [3] Nagoya Univ.; [4] NICT; [5] NONE

アポロサンプルと月隕石の分析から、地球と月の酸素同位体比はほぼ完全に一致することが明らかになっている。しかし、月の表層にある金属粒子の表面から数百ナノメートルのところに埋め込まれた酸素は、 ^{17}O が -20% [Hashizume & Chaussidon, 2005] から $+25\%$ [Ireland et al., 2006] という大きな同位体比異常を示すと報告された。Ozima ら [2008] は、この同位体比異常は酸素が地球の上層大気 (高度 300 km から 400 km) から月まで運ばれて、月の表層に埋め込まれたことによるという仮説を発表した。地球の上層大気では、同位体比に影響を与え得る同位体交換反応や紫外線による分子の解離、イオン化が起こっている。我々は昨年、同位体交換反応の反応速度を理論的に計算し、その反応速度を用いて地球の上層大気で光化学計算を行い、月表層で観測された大きな同位体比異常は説明できないことを報告した。本発表では紫外線による分子解離の吸収断面積を第一原理に基づいて求め、月表層で観測された同位体比異常の説明を試みる。

Navon & Wasserburg [1985] は酸素分子の光解離と同位体交換反応を調べ、酸素の光解離によって同位体比異常が生じるが、同位体交換反応の反応速度が速いので同位体効果は消えてしまうだろうと結論した。彼らの計算では $^{17}\text{O}^{16}\text{O}$, $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$ に対して同じ光解離吸収断面積を仮定している。我々はゼロ点エネルギー (ZPE) モデル [Yung & Miller, 1997] を用い同位体を含む分子の吸収断面積を見積った。この結果吸収波長、吸収断面積の値ともに同位体によって異なる事が分かった。光解離の吸収断面積を求めるために、まずは O_2 の基底状態、励起状態のポテンシャルエネルギーカーブを計算した。計算手法は MRCI 法、計算には MOLPRO 2006.1 プログラムパッケージを用いた。同位体ごとの ZPE エネルギーの差がそれぞれの吸収波長の差になる。励起状態のポテンシャルエネルギーカーブの形から吸収断面積の値も変わる。 O_2 の光吸収断面積の実験値のうち、176 nm から 201 nm を用いた [Ackerman et al., 1970]。例えば、 $^{16}\text{O}^{16}\text{O}$ の一つの吸収線 185.21 nm の吸収断面積は $0.16000 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$ 。これから ZPE モデルを用いて見積もった $^{17}\text{O}^{16}\text{O}$, $^{18}\text{O}^{16}\text{O}$ の吸収線はそれぞれ 185.16 nm, 185.11 nm、吸収断面積はそれぞれ $0.15993 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$, $0.15987 \times 10^{-18} \text{ cm}^2$ 。

このように求めた同位体ごとに異なる吸収断面積を用いて、我々は地球の上層大気の酸素同位体比を計算した。計算には熱圏一次元光化学モデル [Hiraki et al., 2008] を使った。結果は高度 300km で $^{17}\text{O}^+ = -1.30\%$ 、高度 400km で $^{17}\text{O}^+ = -1.08\%$ の同位体比異常が得られた。しかし、この同位体比異常は、月の金属粒子中で観測された同位体比異常に比べて小さい。我々が計算に用いた波長帯は 7.5 nm から 100 nm (Hiraki et al. が光分解に効果的と仮定した。すべての同位体に対して同じ吸収断面積を用いている。) と 176 nm から 201 nm (上で計算した同位体ごとに異なる吸収断面積。) に限られている。太陽光は連続光なので吸収断面積も連続的に求めなければならない。また、ZPE モデルは近似モデルなので、現在我々は第一原理計算に基づいてより正確な吸収断面積を求めることに取り組んでいる。そしてこの結果に基づき EW 仮説の検証を行いたい。