

酸素分子の光解離における同位体効果と地球風仮説への応用

Isotope Effect of Photo-dissociation of O₂ and its Application to the Earth Wind Hypothesis

山田 明憲^{1*}, 南部伸孝², 笠井 康子³, 小嶋 稔¹

Akinori Yamada^{1*}, Shinkoh Nanbu², YASUKO KASAI³, Minoru Ozima¹

¹東京大学大学院地球惑星科学専攻, ²上智大学理工学部物質生命理工学科, ³情報通信研究機構

¹Earth and Planetary Sci., Univ of Tokyo, ²Sophia University, ³NICT

酸素には安定同位体が三種類あり,質量数はそれぞれ16, 17, 18である.安定同位体の存在比は物質のなかでは変化しないので,酸素同位体比分析から情報を得ることができる.同位体比は質量に依存した分別を示すことがよく知られている.質量に依存しない分別を示す酸素同位体比異常(MIF)が発見されて以来,これまでに新たなMIFの発見やMIFの起源についての研究が行われてきた.隕石中の酸素同位体比測定から,鉱物ごとに測定された酸素同位体比異常 $\delta^{17}\text{O}$ ($=\delta^{17}\text{O} - 0.52\delta^{18}\text{O}$, $\delta^{17}\text{O} = 10^3 [({}^{17}\text{O}/{}^{16}\text{O})_{\text{Sample}} / ({}^{17}\text{O}/{}^{16}\text{O})_{\text{SMOW}} - 1]$) は-40から90%を示し,隕石全岩測定では-5から1%を示すことが明らかとなっている.太陽系の平均的な酸素同位体比はいくらか, MIFを以下にして作るかが重要な問題である. CAI中と他の天体中の酸素同位体比の差を説明するためのモデルが二つある.一つ目はCO分子の光解離過程がMIFをつくるとするCOセルフシールドモデルである.このモデルでは, CAIが酸素同位体比は太陽系の酸素同位体比と等しいまま凝縮し,その後時間とともに同位体的に重くなる太陽系星雲の中で他の天体が形成されることになる.二つ目は三体反応における分子の対称性に起因した化学反応速度の変化による同位体効果である.固体表面で振動励起した二酸化物の寿命は左右対称であるもので短く,一旦解離して粒子の中に取り込まれる.対して,反対称な二酸化物は寿命が長く,蒸発してしまう.何れのモデルも検証が必要であるが,とくにCOセルフシールドモデルは物理量を用いずに提案されたモデルである.別の試みは太陽の同位体比の測定である.太陽は高温のため探査機が近づくこともサンプルを取得することもできないので,間接的な観測方法に頼らざるを得ない.一つ目はGenesisミッションと月表層の分析からの太陽風観測,二つ目は太陽の赤外線分光観測である.しかし,何れの手法も観測された値と太陽の平均的な値との差を埋めることは難しい.また,月表層の分析については,月試料中に埋め込まれた酸素は地球から運ばれていったものではないかという仮説(Earth Wind仮説)も提案されている.本研究の目的は,このEarth Wind仮説を検証することである.

私は酸素分子の光解離における同位体効果を見積もるために,第一原理計算に基づいて酸素分子の光解離吸収断面積を求めた.主量子数を15まで,方位量子数を6ごとに96まで足し合わせた.計算で求めた¹⁶O₂光解離吸収断面積は実験値とよくあっている.1000 Kのボルツマン分布を仮定すると,高度300 kmでは光解離によって $\Delta^{17}\text{O} = 16.3\%$ を得る.この酸素同位体異常は月表層中から発見された同位体異常と同程度である.得られた同位体比を三酸素同位体プロットに表示すると,傾き1の線上には載らない.これは¹⁷O¹⁶Oと¹⁸O¹⁶Oの吸収断面積が異なるからである.

キーワード:酸素同位体比,光解離,第一原理計算

Keywords: Oxygen isotopic ratio, Photo-dissociation, First principle calculation