

【研究費区分】：上位科研費申請支援

【研究代表者所属】：分子物質化学専攻

【研究代表者氏名】：阿部穰里

【研究代表者氏名フリガナ】：アベミノリ

【研究代表者職】：助教

【研究分担者（所属,氏名,職）】

・該当なし

【研究課題名】：

同位体分別平衡に関する理論計算スキームの構築

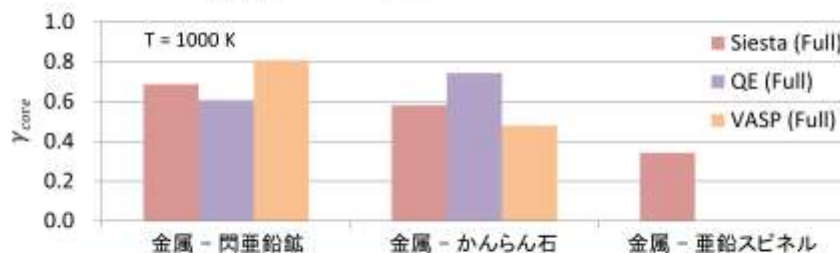
【研究実績の概要（200字程度で記入。図，グラフ等の使用も可。）】

鉍物等の固体における同位体分別は地球化学でよく議論されるが、固体の理論計算に基づく研究は発展途上である。本研究では地球コア-マントル間の亜鉛同位体分別について、下に示す *Siesta* 等の3つの異なるプログラムを用い、亜鉛元素のコアでの存在率を試算した。*Siesta* と *QE* の結果は類似し、局在基底を用いる *Siesta* の方が、計算コストが低く、有力な手法であることが分かった。また約6割の亜鉛元素がコアに存在するという結果が得られた。

γ_{コア}の概算

$$\gamma_{\text{コア}} = \frac{*\delta\text{Zn}_{\text{始原的隕石}} - \delta\text{Zn}_{\text{マントル}}}{\epsilon}$$

実験値の*δZn_{始原的隕石}=0.21, δZn_{マントル}=0.30, 計算値のεを代入しγ_{core}を計算



γ_{コア}

- ・ 閃亜鉛鉍モデル、かんらん石モデルで6割程度
- ・ 亜鉛スピネルモデルで3割程度

*δZn_{始原的隕石}: 0.2~0.45[‰], J.-M. Luck et al., *Geochim. Cosmochim. Acta.* (2005) 18

【科学研究費補助金への応募状況，採択状況】

H29年度科研費 若手A 「同位体分別を評価するための高精度相対論的電子状態理論開

発および地球化学への応用」(不採択)

【国等の提案公募型研究費，企業からの受託研究費・共同研究費の獲得状況】

・該当なし