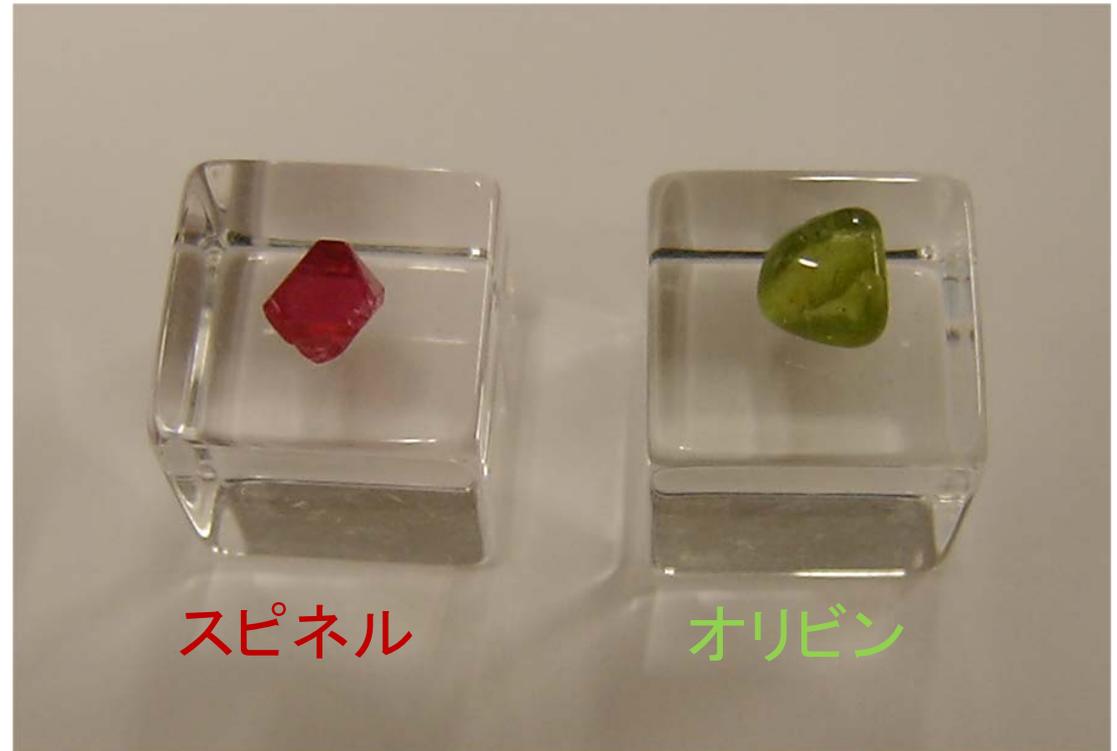
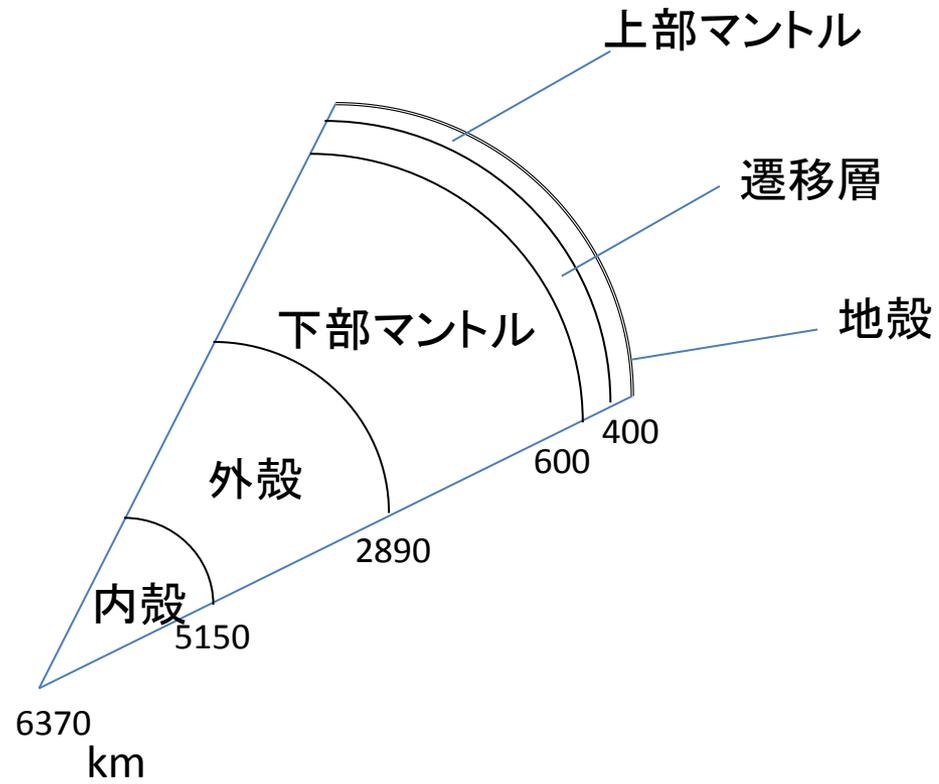


オリビンとスピネル

名古屋工業大学 川崎晋司





非揮発性元素の宇宙存在度

元素	存在度
Mg	1050000
Si	1000000
Fe	877000
Al	84000
Ca	70400
Na	59000
Ni	46700
Cr	12300
Mn	9200
P	8600
K	3810
Ti	2390

モデル		実際	
		水圏	0.024
MgO	27.4	地殻	0.4
SiO ₂	38.9	上部マントル	22.4
		下部マントル	44.8
酸化物の和	66.3	岩石圏の和	67.6
Fe+Ni	33.7	核	32.4

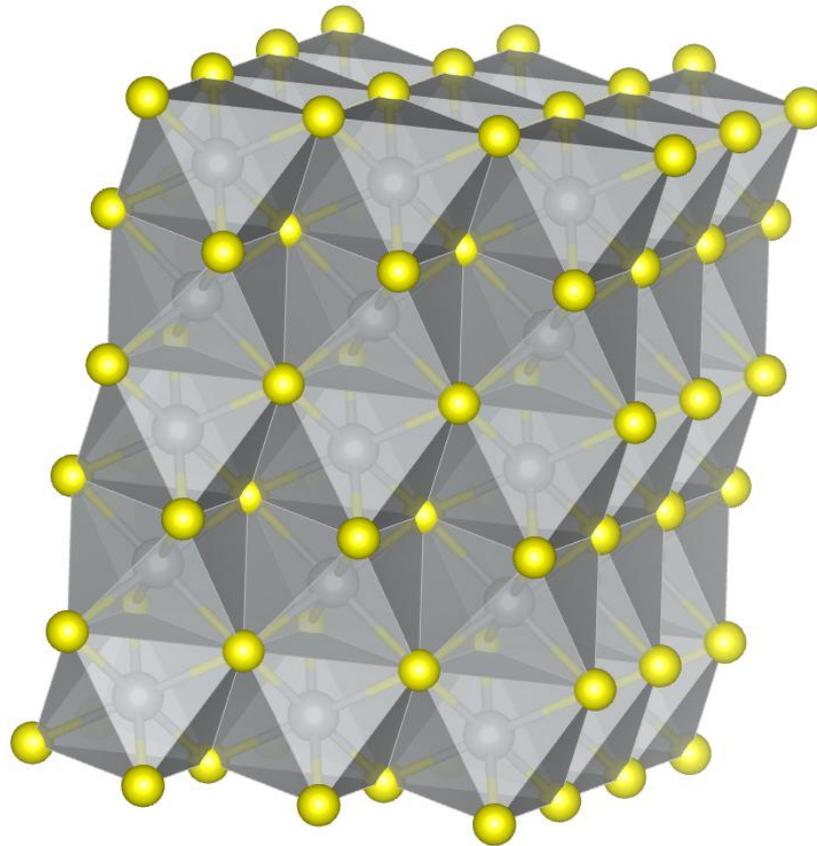
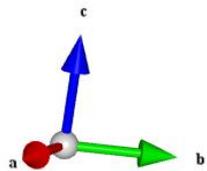
地球は Mg, Fe, Si, O だけで大半説明できる！

マントルのモデル構成物質の化学分析 データとそれに対応する鉱物組成

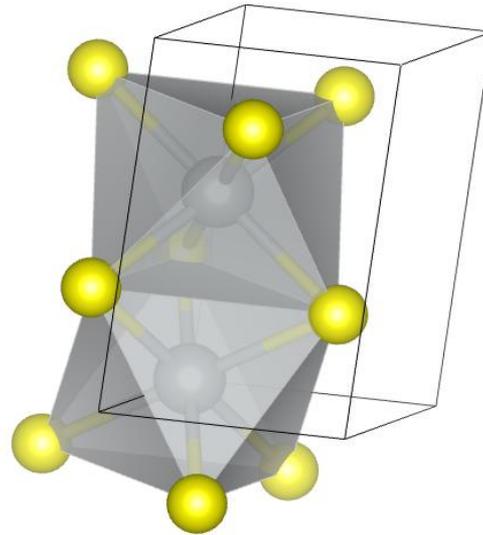
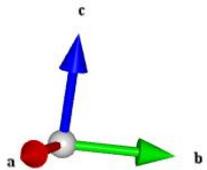
Chemical composition wt%		Mineral composition wt%	
SiO ₂	45.5	Olivine	57
Al ₂ O ₃	4.6	Orthopyroxene	17
FeO	8.0	Garnet	14
MgO	38.4	Clinopyroxene	12
CaO	3.1		
Na ₂ O	0.4		
Total	100.0	Total	100

ヒ化ニッケル構造

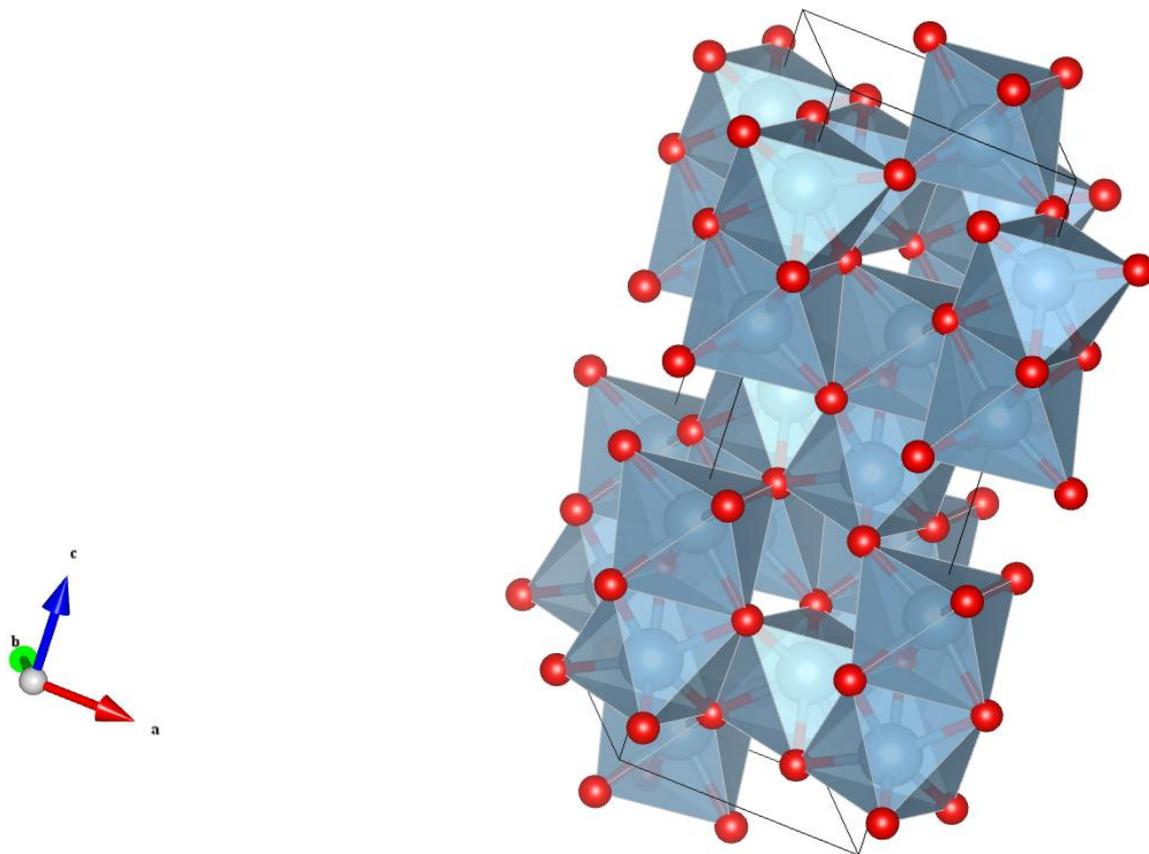
(陰イオンのhcp構造の八面体隙間をすべて陽イオンが充填した構造)



六方最密充填構造では八面体は面共有でつながる



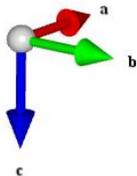
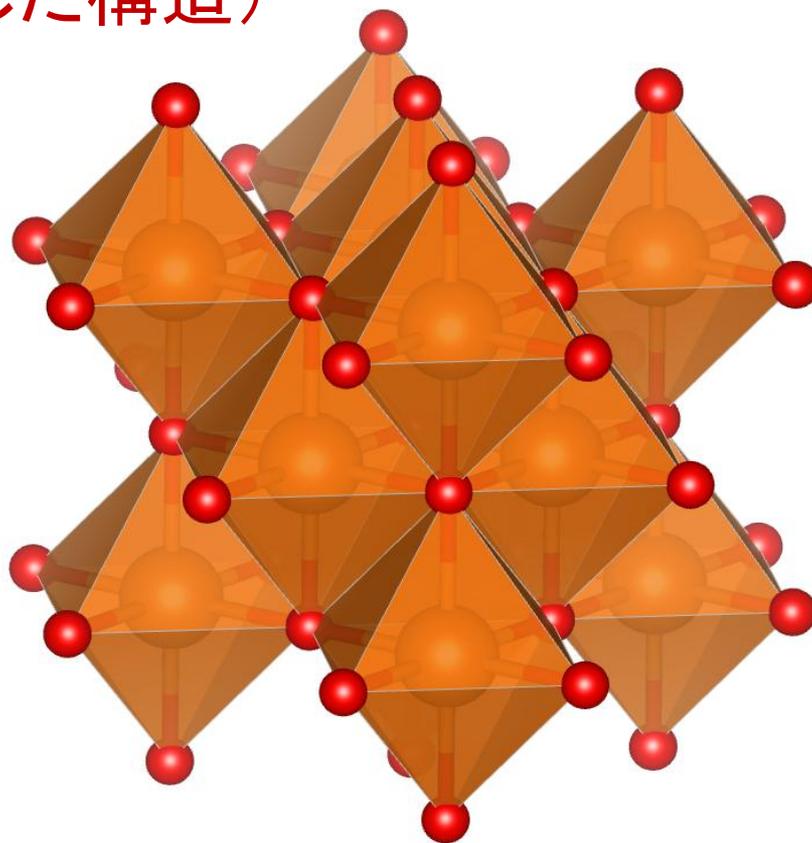
コランダム構造 (Al_2O_3)



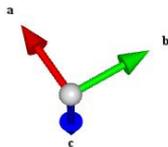
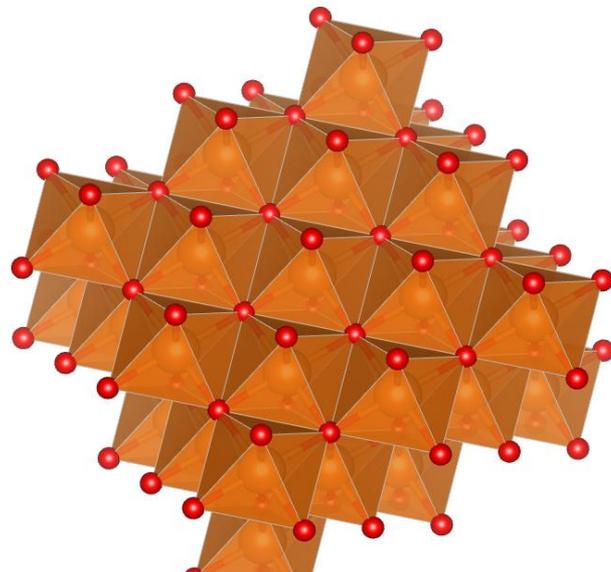
六方最密充填構造の八面体隙間の1/3が空席
(これにより構造緩和する)

岩塩構造

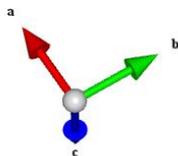
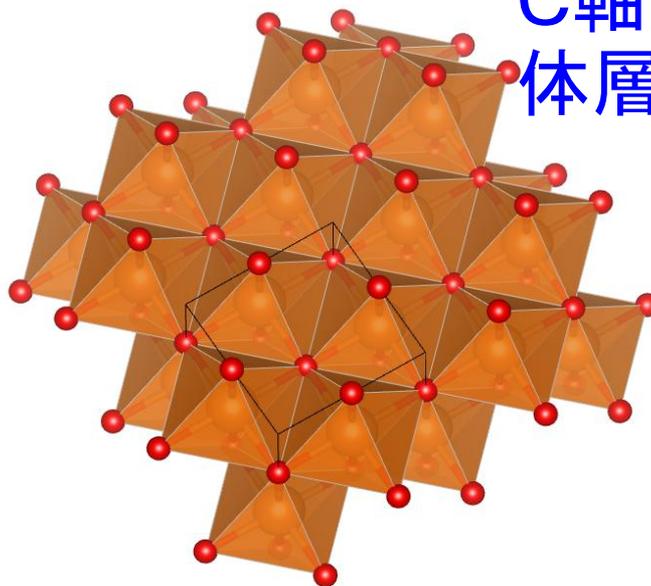
(陰イオンのccp構造の八面体隙間をすべて陽イオンが充填した構造)



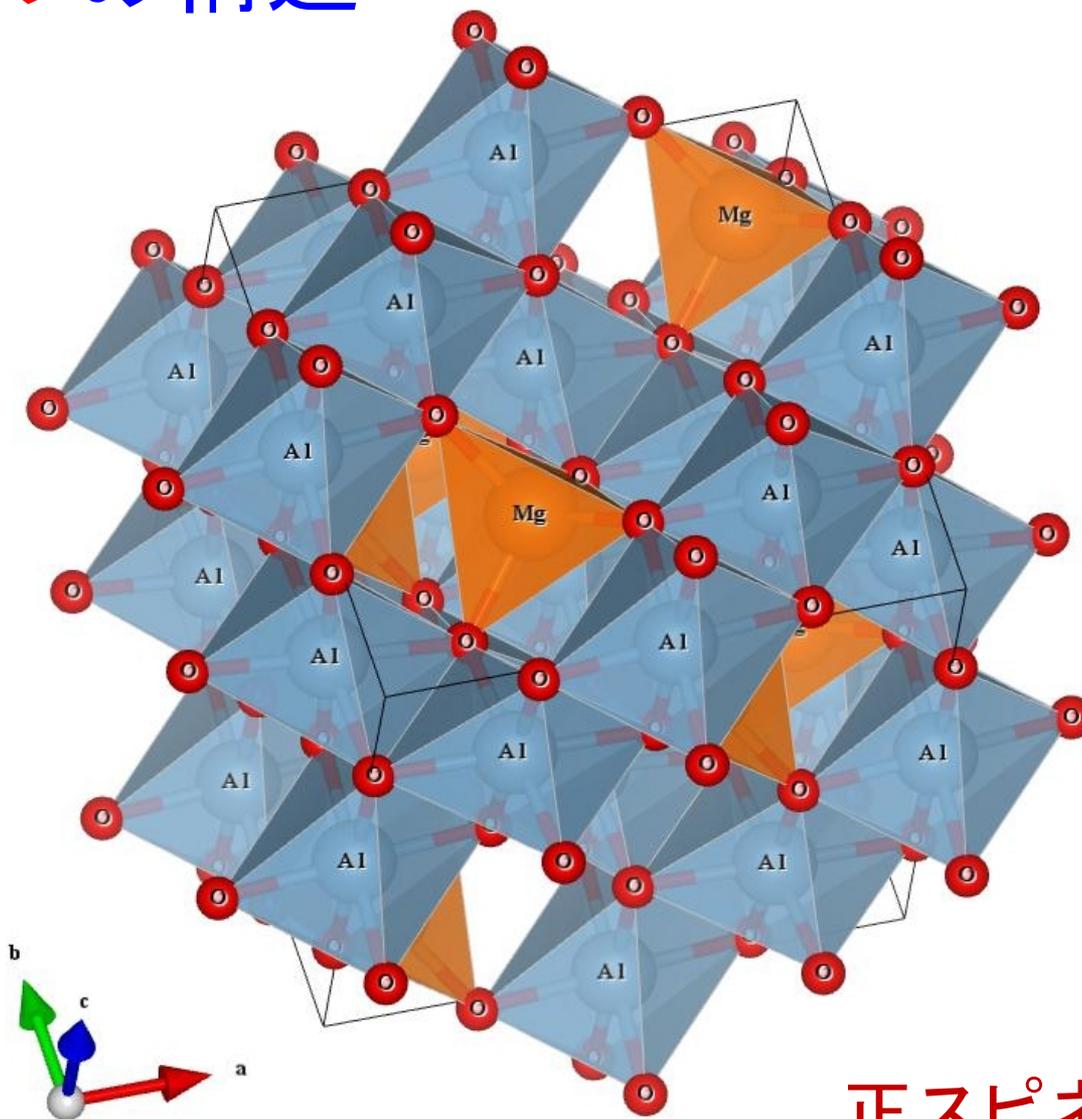
立方最密充填構造では八面体は稜共有でつながる



C軸方向に一層八面体層を剥ぎ取る

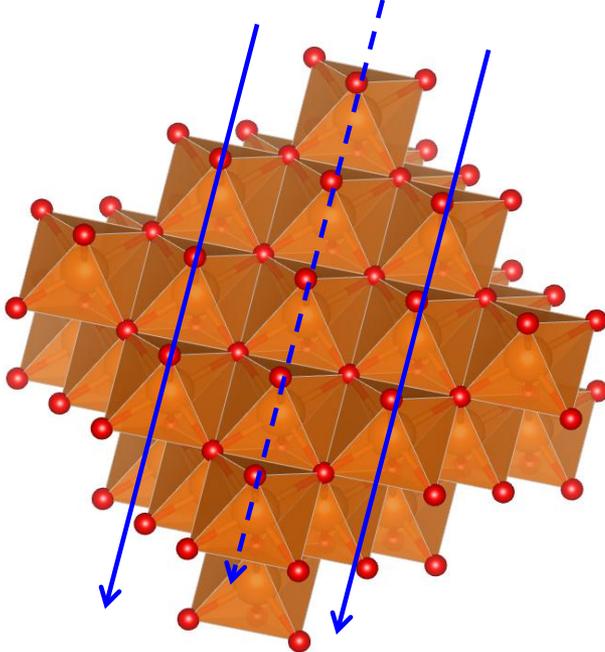
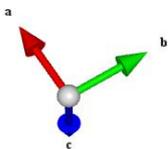


スピネルの構造

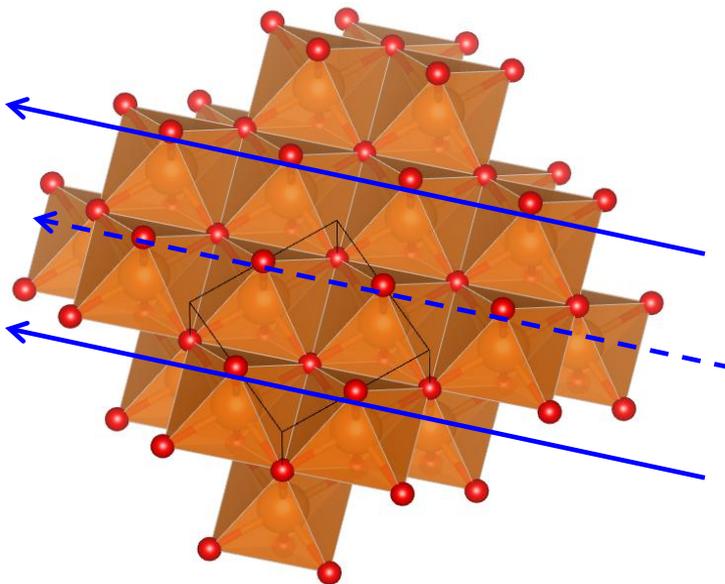
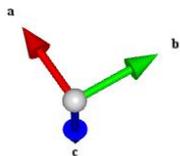


正スピネル

岩塩構造から点線の部分のイオンを抜いていく



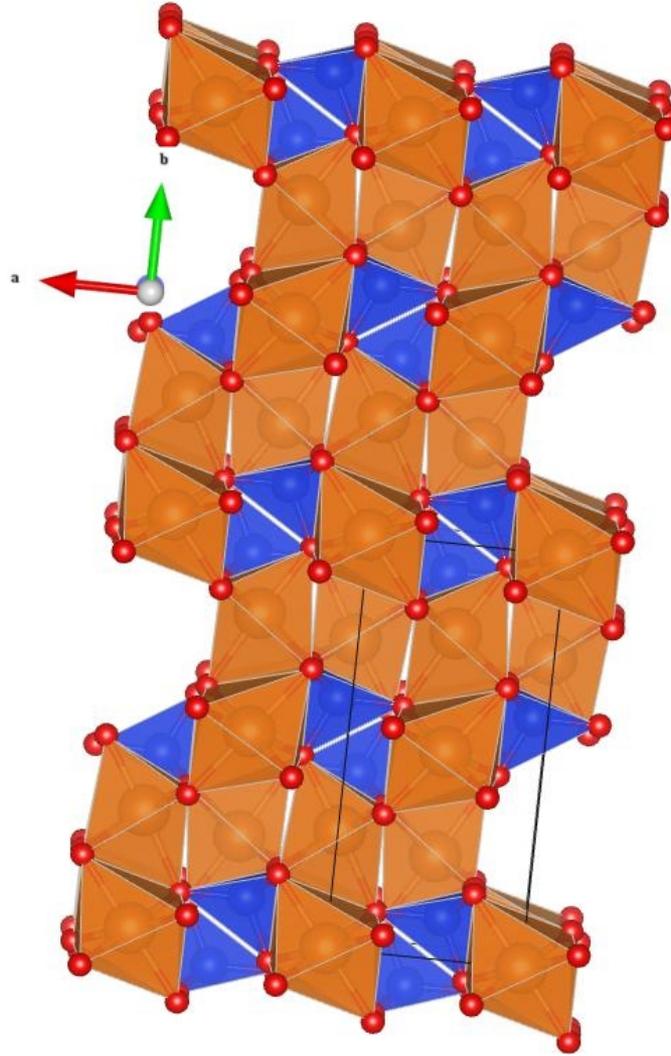
3層目は実線と点線を入れ替える



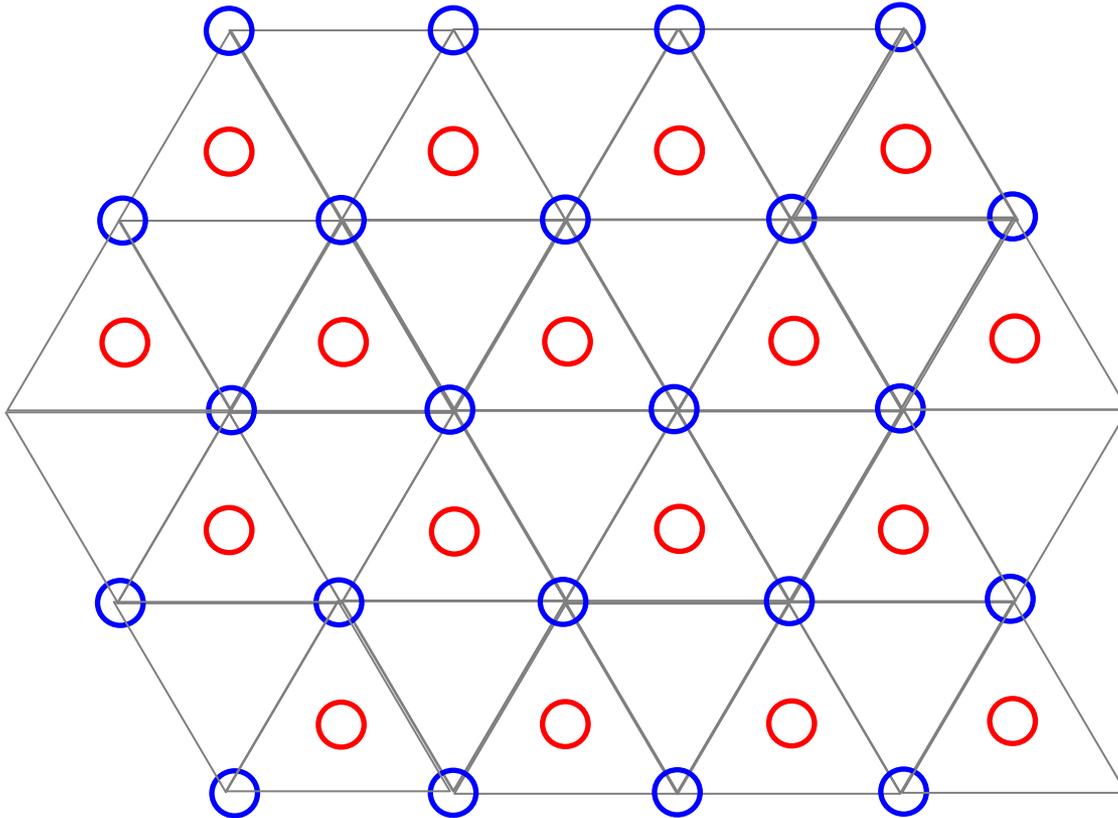
スピネルの構造データ

_pd_phase_name										'MgAl ₂ O ₄ '
_cell_length_a										8.0942(6)
_cell_length_b										8.0942(6)
_cell_length_c										8.0942(6)
_cell_angle_alpha										90
_cell_angle_beta										90
_cell_angle_gamma										90
_symmetry_space_group_name_H-M										'F d -3 m'
_symmetry_Int_Tables_number										227
MA	1	0.125	0.125	0.125	Biso	0.39	Mg			
AM	1	0.5	0.5	0.5	Biso	0.32	Al			
O	1	0.26342(7)	0.26342(7)	0.26342(7)	Biso	0.39	O			

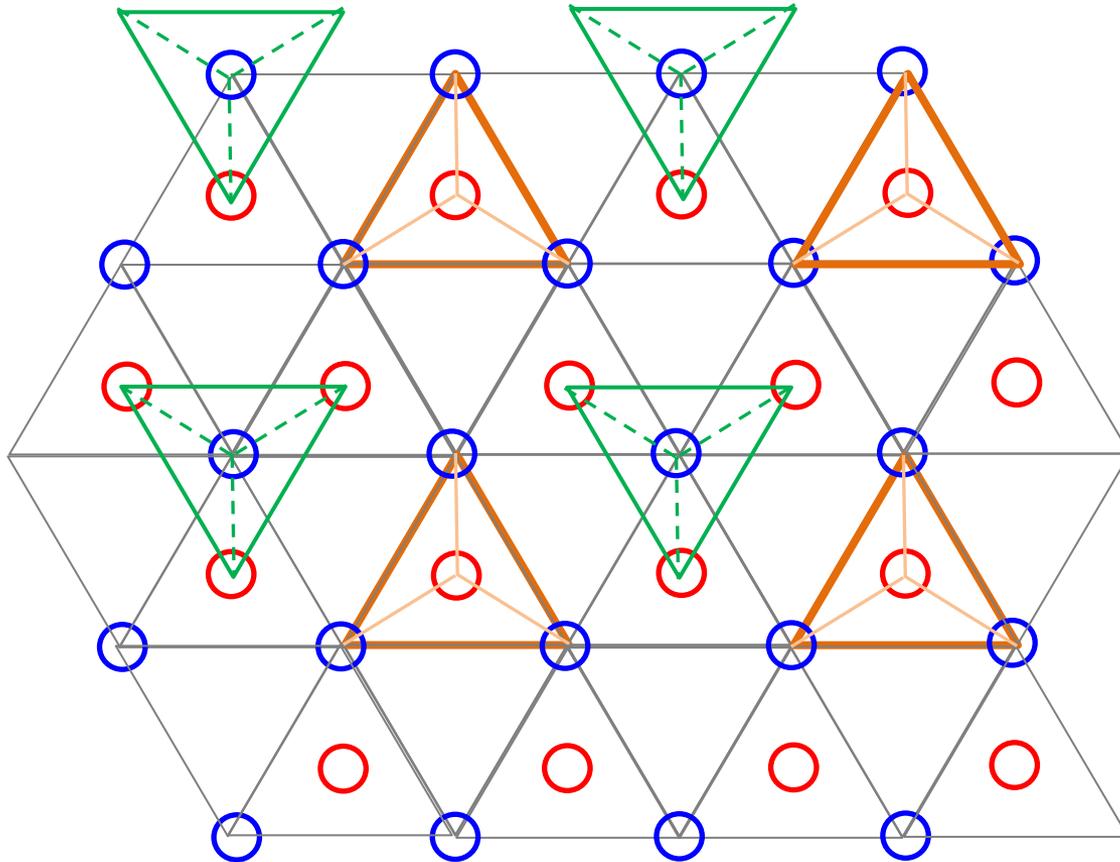
オリビンの構造



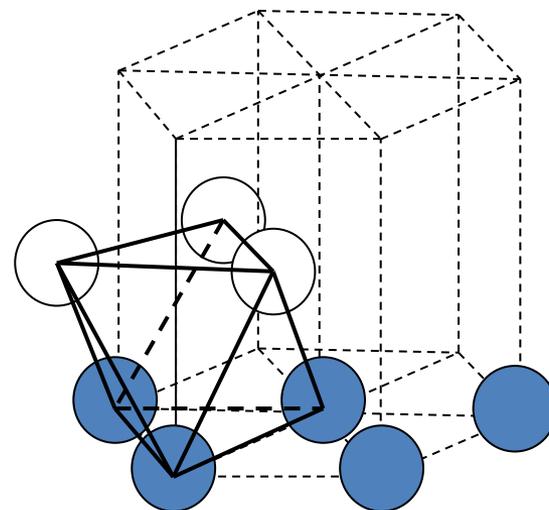
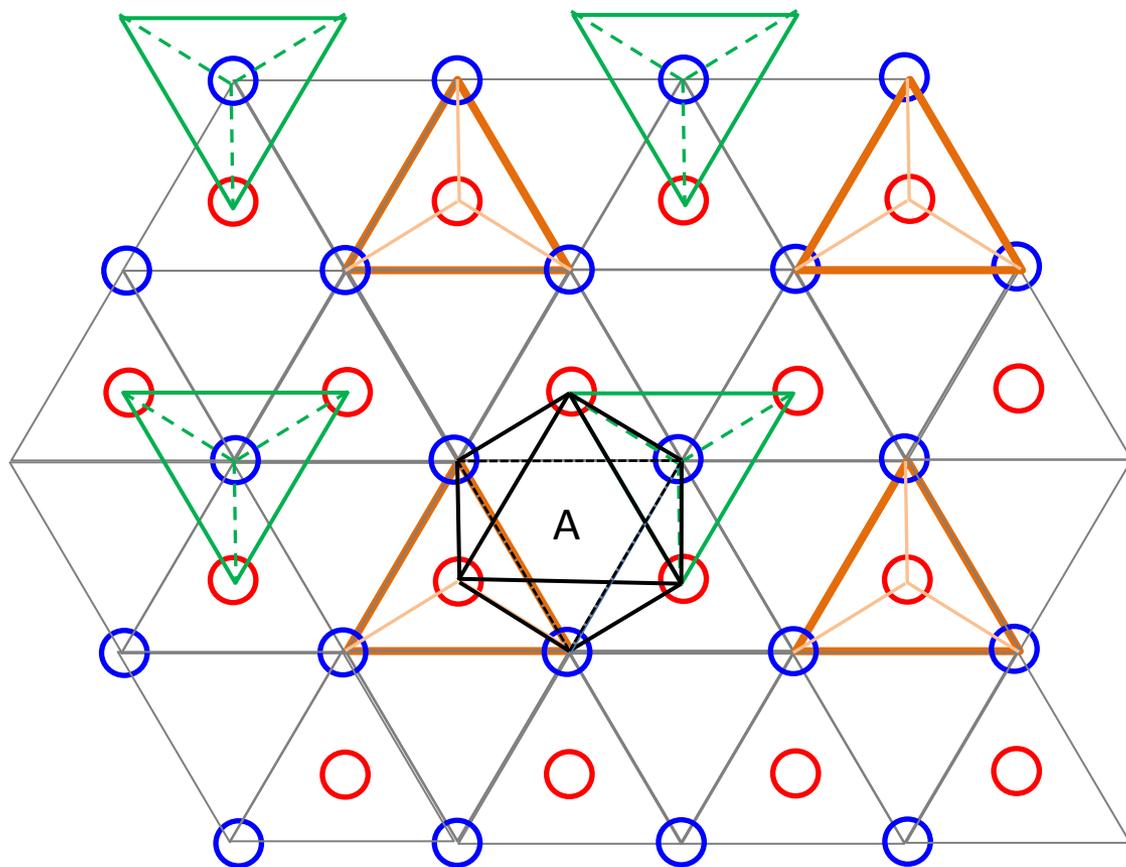
六方最密充填構造を SiO_4 の組み合わせで考える



六方最密充填構造を SiO_4 の組み合わせで考える

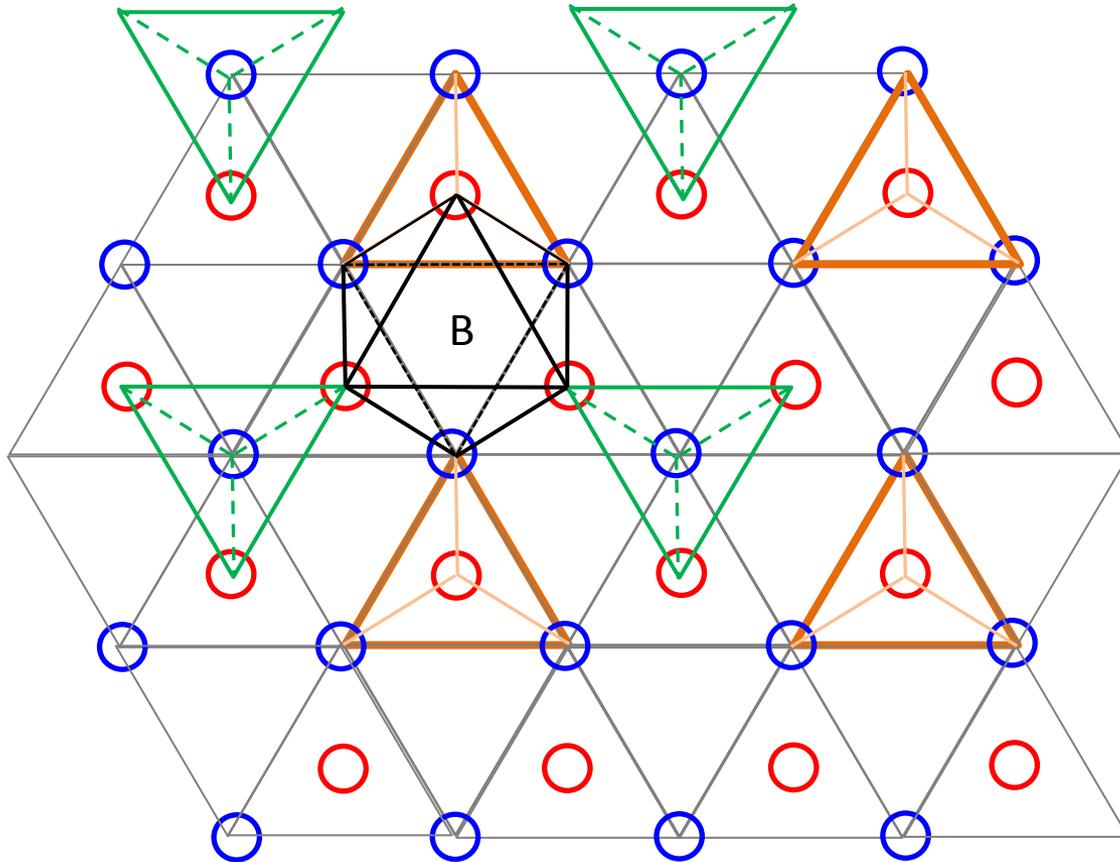


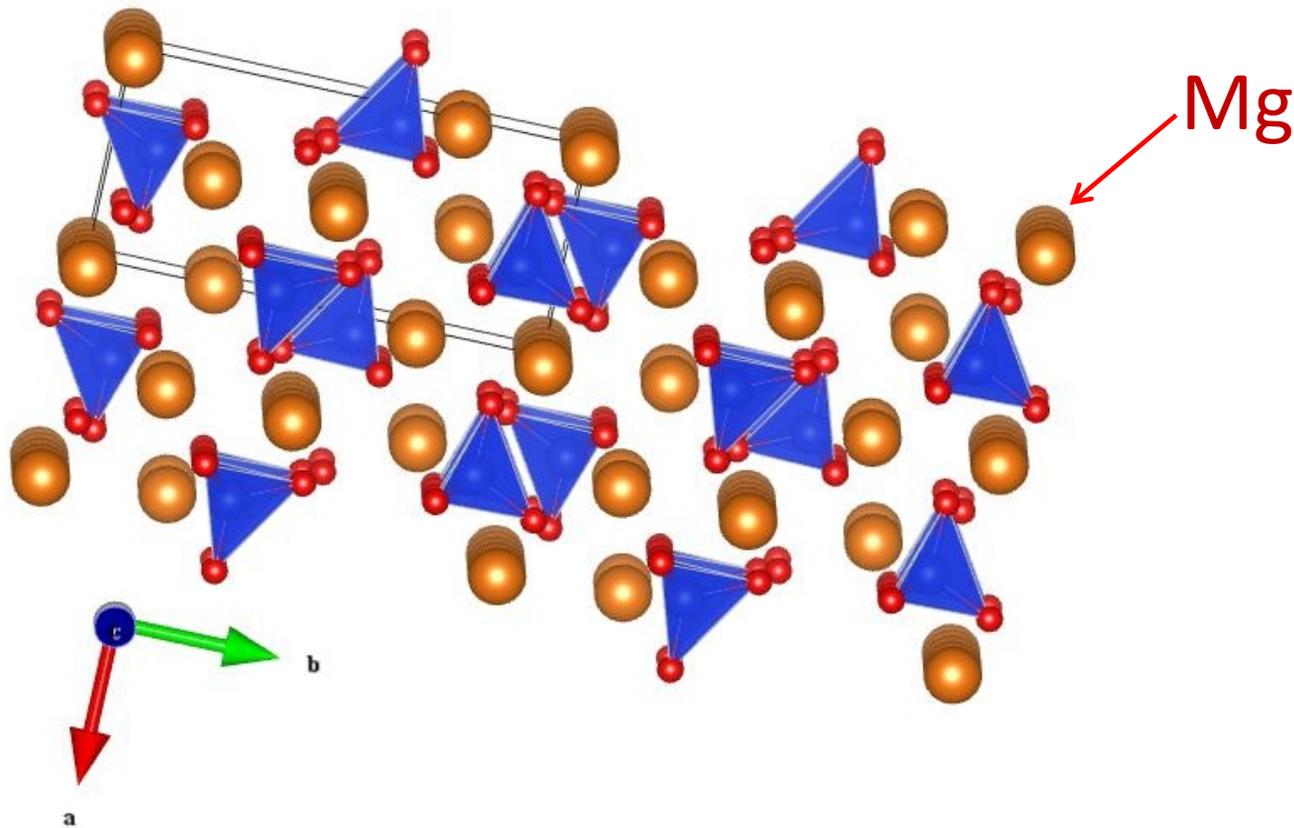
六方最密充填構造を SiO_4 の組み合わせで考える

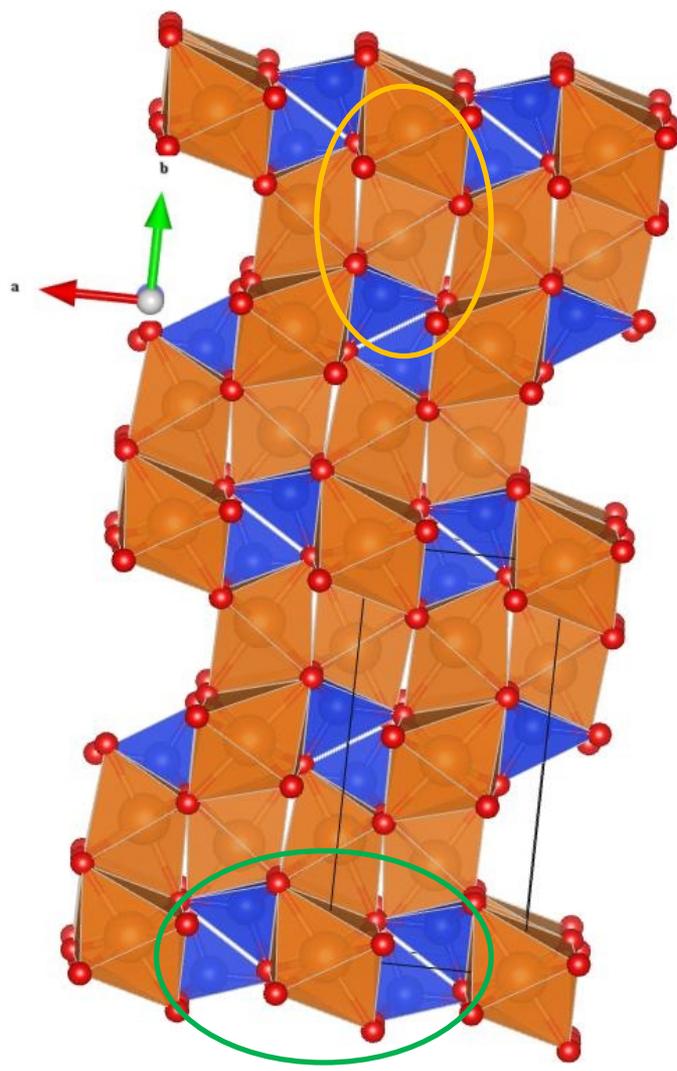


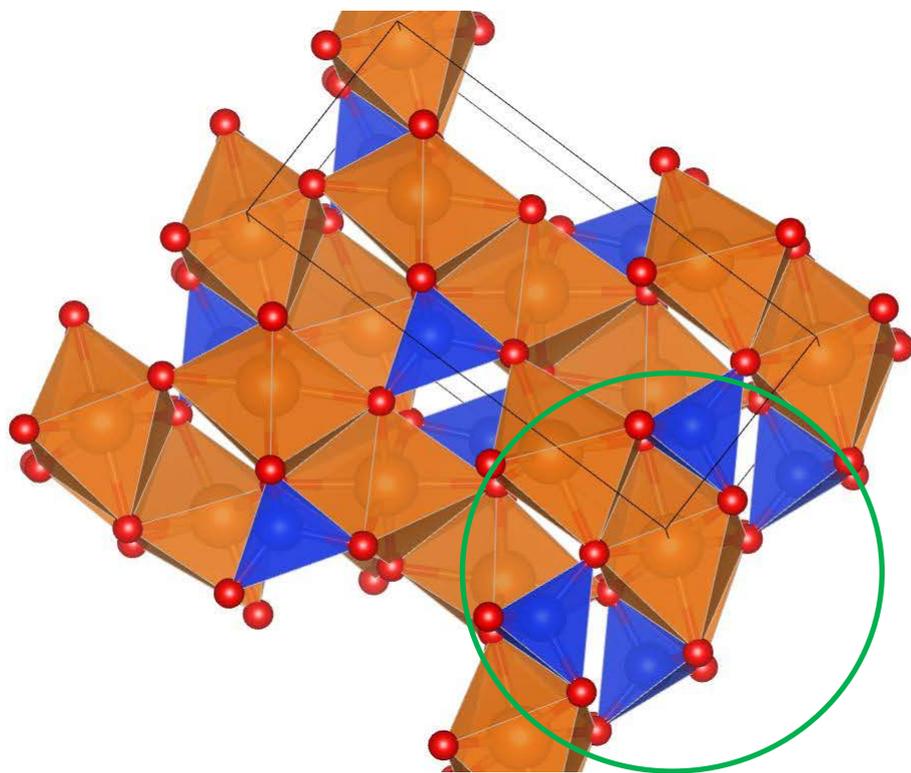
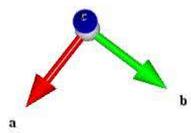
オリビンではAのサイトにはイオンが入らない

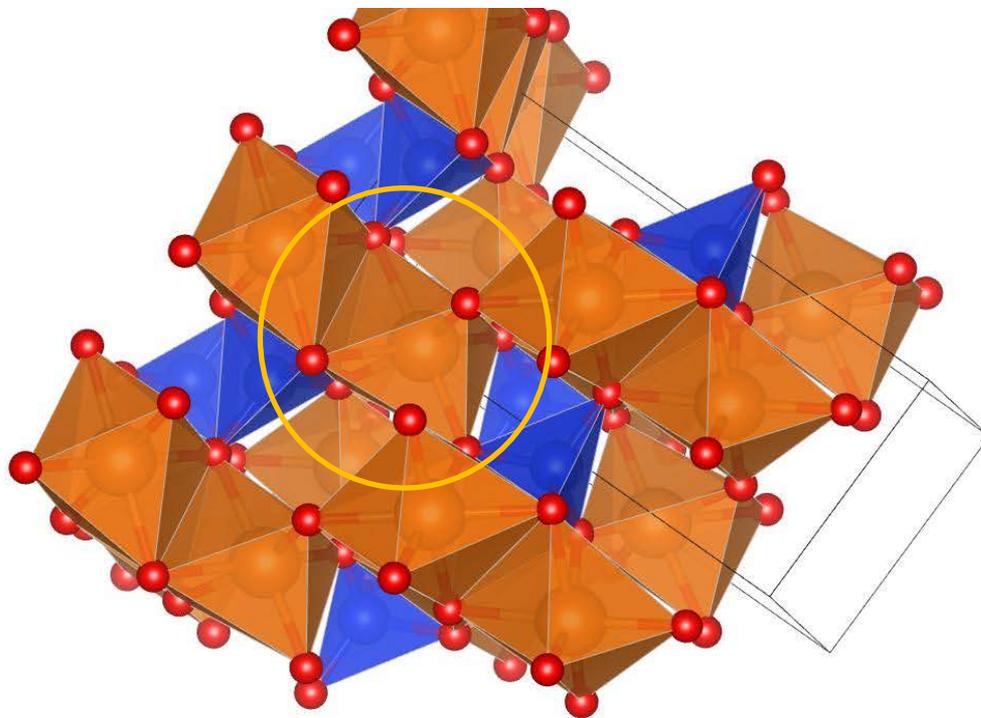
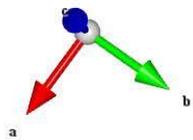
六方最密充填構造を SiO_4 の組み合わせで考える











オリビンの構造データ

_pd_phase_name	'(Mg _{0.9} Fe _{0.1}) ₂ SiO ₄ '					
_cell_length_a	4.762					
_cell_length_b	10.225					
_cell_length_c	5.994					
_cell_angle_alpha	90					
_cell_angle_beta	90					
_cell_angle_gamma	90					
_symmetry_space_group_name_H-M	'P b n m'					
MF1	1	0	0	0	Biso 0.33	Mg
MF2	1	0.98975(29)	0.27743(16)	0.25	Biso 0.36	Mg
Si	1	0.42693(27)	0.09434(13)	0.25	Biso 0.20	Si
O1	1	0.76580(72)	0.09186(36)	0.25	Biso 0.35	O
O2	1	0.22012(72)	0.44779(36)	0.25	Biso 0.42	O
O3	1	0.27810(50)	0.16346(25)	0.03431(46)	Biso 0.41	O