

受入年度 平成30年

課題名 CaTiO<sub>3</sub>-CaAlO<sub>2.5</sub>系固溶体中の Al<sup>3+</sup>の配位環境について

共同研究員氏名 永井 隆哉

所属・職名 北海道大学大学院理学研究院地球惑星科学部門・教授

受入教員 薛 献宇 教授

CaTiO<sub>3</sub> (鉱物名：ペロブスカイト) には、Al が CaAlO<sub>2.5</sub> 成分として大気圧下では約 20 mol%まで固溶するのに対し(Imlach & Glasser, 1968), 5~20 GPa の高圧下では約 10 mol%まで固溶量が減少する(松本洋輔, 2016) ことがわかってきた。この Al を含む CaTiO<sub>3</sub> は平均構造としては直方晶系のペロブスカイト構造であるが、固溶した Al の局所構造としては、6 配位, 5 配位, 4 配位が存在すると考えられる。そして、その存在割合は、化学組成, あるいは合成した温度圧力条件で変化することが予想されるが詳細は明らかでない。

物質中の Al の局所構造を調べるツールとしては <sup>27</sup>Al NMR が有用である。そこで、この系における NMR 測定の可能性を調べるために、CaAlO<sub>2.5</sub> 成分が 5, 10, 15, 20 mol%と固溶量が異なる CaTiO<sub>3</sub>-CaAlO<sub>2.5</sub> 系固溶体を 4 種類、大気圧下 1300 °C で合成準備し、<sup>27</sup>Al MAS NMR 測定をブルカー-400 MHz NEO AVANCE NMR 分光器を用いて 30 kHz の回転速度で実施した。その結果 Al は主に 6 配位であるが、一部 5 配位と 4 配位 Al も存在し、後者の割合は CaAlO<sub>2.5</sub> 成分の多い方が高いことが分かった。

