岡山大学 惑星物質研究所 共同利用・共同研究 成果報告書

受入年度：2019 年度 前期・後期・随時

提出日：2020 年　３月３１日

共同利用の種類：　国際共同利用・一般共同利用・設備共同利用・ワークショップ

課題名：　$CaTiO_3$-$CaAlO_{2.5}$系ペロブスカイト中の Al の局所構造の研究

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

分担者氏名：　高倉　直樹

分担者所属・職名：　北海道大学大学院理学院自然史専攻・M2

分担者氏名：　Xianyu Xue

分担者所属・職名：　惑星物質研究所・教授

研究報告・ワークショップ実施報告：

$CaTiO_3$ (鉱物名：ペロブスカイト) には、Al が $CaAlO_{2.5}$ 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 $CaTiO_3$ 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 配位が存在する考えられ、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 ^{27}Al NMR が有効である。そこで、$CaAlO_{2.5}$ 成分が 10 mol%固溶した試料を温度 1300 °C、圧力 3 GPa、5 GPa、10 GPa の

条件で合成し、1D ^{27}Al MAS NMR 測定を行った。試料の高圧合成は愛媛大学 GRC の PURIUS 共同研究で実施し、本共同研究ではブルカー400 MHz NEO AVANCE NMR 分光器を用いて 30 kHz の回転速度で回収試料の 1D ^{27}Al MAS NMR 測定を行った。

その結果、図 1 のスペクトルを得た。詳細な解析を進行中であるが、大気圧で合成した試料を含め、すべての試料のデータは、予想通り Al が 6 配位だけではなく、4 配位にも 5 配位にも存在することを示した。また、3 GPa で合成した試料のスペクトルは大気圧で合成した試料のそれとではあまり変化は見られないが、5 GPa と 10 GPa で合成した試料のスペクトルには顕著なピーク幅の増加が見られた。

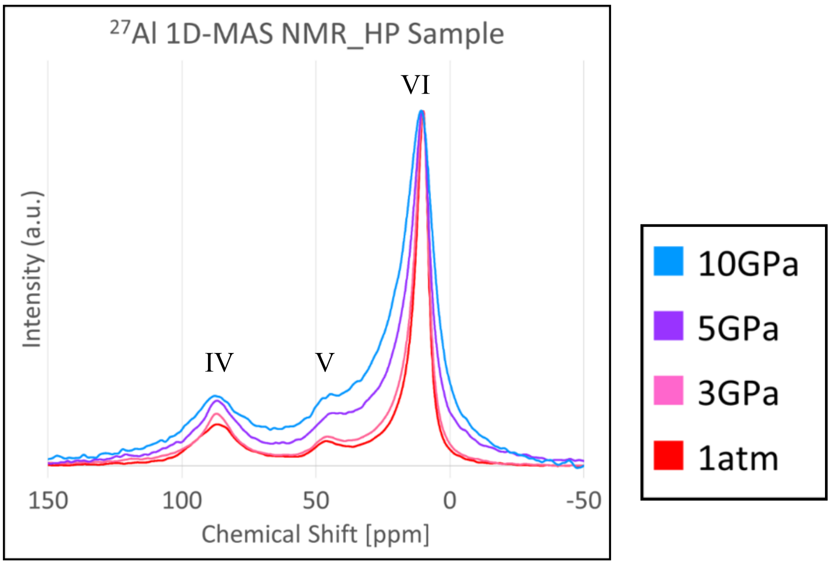

図 1　^{27}Al MAS NMR spectra of Al-bearing $CaTiO_3$. Variation with synthesized pressure. Roman numerals show the coordination number of Al of corresponding peaks.