

2024年度岡山大学 惑星物質研究所 共同利用・共同研究 成果報告書

提出日：2025年 5月21日

共同利用研究の種類：☐国際共同研究 ☒一般共同研究 ☐設備共同利用 ☐ワークショップ

課題名：CaTiO₃-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・教授

分担者氏名：Xianyu Xue

分担者所属・職名：岡山大学惑星物質研究所・教授

研究報告・ワークショップ実施報告：

本共同研究を通じて、CaTiO₃（鉱物名：ペロブスカイト）には、Alが大気圧下では約25 mol%までCaAlO_{2.5}成分として固溶し、固溶量の増加とともに直方晶系から正方晶系を経て立方晶系へとモルフォトロピックな構造変化をすることがわかってきた。しかしながら、このAlを含むCaTiO₃は、XRDで見る平均構造としてはペロブスカイト構造であることが示唆されるものの、3価のAlと4価がTiの置換メカニズムであるため、電荷補償ために酸素欠損が生成し、Alの局所構造としては、6配位だけでなく、5配位、4配位が存在することが予想される。

物質中のAlの局所構造を調べるツールとしては²⁷Al NMRが有効である。そこで、2018～2022年度にかけての共同研究で、CaAlO_{2.5}成分が1、5、10、15、20、25 mol%の固溶量が異なる含Al-CaTiO₃を、CaCO₃、Al₂O₃、TiO₂の試薬を用いて、大気圧下1300℃の条件下で固相反応により合成し、生成相のXRDとSEM-EDS分析をした後、貴研究所において²⁷Al MAS NMR測定を実施してきた。

2023年度の共同研究においては、測定データの解析を進め、2D 3QMAS NMRスペクトルの変化から、1Dスペクトルで観察される4配位のAlの存在を示すシグナルには、Alの固溶量が少ない試料においては特に、XRDやSEM-EDS分析からは検出できていない別相の寄与が明らかになった。ここまでの結果を2023年9月に大阪公立大学で開催された日本鉱物科学会年会において、「含Al-CaTiO₃ペロブスカイトにおけるAlの局所構造のNMRによる研究」という題目で永井と薛の共著として発表し、2024年度内の論文化を目指してきた。しかし、XRDやSEM-EDS分析に再測定が必要な試料があったため、当初思ったより論文化に時間がかかっている。追加の合成実験とXRDやSEM-EDS分析の再測定はほぼ完了したので、今年度の研究成果の論文化を進めることにしたい。