

 MLF Experimental Report	提出日 Date of Report
課題番号 Project No. 2008G0010 実験課題名 Title of experiment ガス漏れ警報器用センサに用いる導電性材料の結晶構造解析 実験責任者名 Name of principal investigator 前川 亨 所属 Affiliation 新コスモス電機株式会社	装置責任者 Name of responsible person 石垣徹 装置名 Name of Instrument/(BL No.) iMATERIA (BL20) 実施日 Date of Experiment 2009. 10. 18 ~ 2009. 10. 19

試料、実験方法、利用の結果得られた主なデータ、考察、結論等を、記述して下さい。(適宜、図表添付のこと)
 Please report your samples, experimental method and results, discussion and conclusions. Please add figures and tables for better explanation.

1. 試料 Name of sample(s) and chemical formula, or compositions including physical form. (1) 酸化スズ(SnO_2) (2) 1mol%アンチモンドープ酸化スズ((1mol%)Sb- SnO_2) (3) 1mol%セリウムドープ酸化スズ((1mol%)Ce- SnO_2)

2. 実験方法及び結果 (実験がうまくいかなかった場合、その理由を記述してください。) Experimental method and results. If you failed to conduct experiment as planned, please describe reasons. 3組成の酸化スズ系試料について、高能率汎用中性子回折装置(iMATERIA)(BL20)で粉末回折実験を行った。測定は、バナジウムセルにそれぞれの粉末試料を入れ、室温で行った。得られた粉末回折データをリートベルト法(コンピュータプログラムZ-Code)により解析した。解析に際して、酸化スズ系試料の結晶系(空間群)は正方晶系($P4_2/mnm$ (NO. 136))であり、ドーパントのセリウム、アンチモンは、スズの占有サイト($2a$ サイト)に置換固溶すると仮定した。 図1に代表的な試料である SnO_2 の解析図形を示した。また、表1に測定した全試料のリートベルト解析結果をまとめた。酸化スズに1mol%のセリウムをドープした場合は格子定数が大きくなるが、同量のアンチモンをドープした場合はわずかに大きくなる程度である、という違いが認められた。また、同じ調製方法にも関わらず、セリウムドープの場合は結晶性に大きく影響しているが、アンチモンドープの場合は結晶性への影響が小さいことがわかった。このことから、ドープしたセリウムには酸化スズ結晶の結晶粒成長を大きく阻害する働きがあると考えられる。なお、これらの実験結果は他の手法による結果[1-5]と一致し、今後予定しているさらに詳細な解析の結果とともに相互補完を行う予定である。

2. 実験方法及び結果(つづき) Experimental method and results (continued)

アンチモンは酸化スズの結晶性への影響が小さいものの、酸化スズの導電性へ大きく影響があることがわかっている。今後は、酸化スズへセリウムおよびアンチモンが同時にドーパされた場合の、それぞれのドーパントの挙動について詳細な検討を行う予定である。

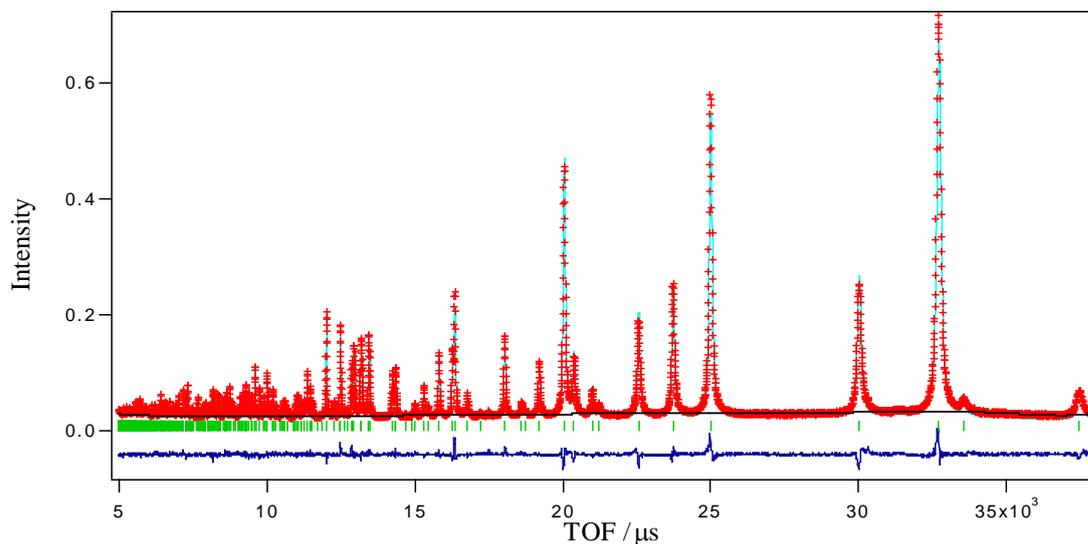


図1 SnO₂のリートベルト解析により得られたリートベルト解析図形

表1 リートベルト解析結果

No	Sample	<i>R</i> _{wp}	<i>R</i> _e	<i>a</i>	<i>b</i>	<i>c</i>
1	SnO ₂	5.20	1.98	4.73915(3)	4.73915(3)	3.18706(2)
2	(1mol%)Ce-SnO ₂	7.06	1.82	4.74866(4)	4.74866(4)	3.19144(4)
3	(1mol%)Sb-SnO ₂	4.97	1.73	4.73971(3)	4.73971(3)	3.18774(2)

(参考論文)

- [1] T. Maekawa, C. Minagoshi, and S. Nakamura, *Chemical Sensors*, 23, Supplement A, pp. 97–99 (2007).
- [2] T. Maekawa, C. Minagoshi, S. Nakamura, K. Nomura, and H. Kageyama, *Chemical Sensors*, 24, Supplement A, pp. 19–21 (2008).
- [3] 皆越知世, 前川 亨, 鈴木健吾, 野村勝裕, 蔭山博之, *マテリアル・インテグレーション*, 21(5–6), pp.37–42 (2008).
- [4] 前川亨, 皆越知世, 平成 20 年度 SPring-8 重点産業利用課題成果報告書 2008B, pp. 107–109 (2008B).
- [5] K. Nomura, H. Kageyama, T. Maekawa, C. Minagoshi, S. Nakamura, and T. Ito, *Activity Report on Neutron Scattering Research: Experimental Reports* 15 (2008) Report Number: 483.