 MLF Experimental Report	提出日 Date of Report 2015.11.25
課題番号 Project No. 2014BM0005 実験課題名 Title of experiment 中性子回折を用いた自動車排ガス浄化触媒の構造解析 2 実験責任者名 Name of principal investigator 池田知廣 所属 Affiliation 株式会社本田技術研究所 四輪 R&D センター 第3技術開発室	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 2014.12.11-12.13、2015.3.9-3.11

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.
Ce-ZrO ₂ 固溶体各種(以下は今回顕著な成果が出たもの) CeO ₂ : 試薬(以下 CeO ₂) CeO ₂ : 量産相当品(以下 量産相当 CeO ₂) Ce _x Zr _{1-x} O ₂ : 量産相当品(以下 量産相当 CZ _x (x=0.4, 0.3, 0.2, 0.1))

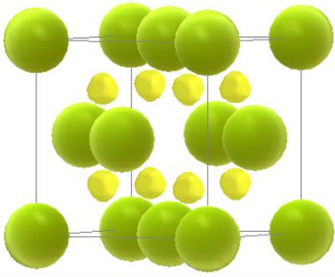
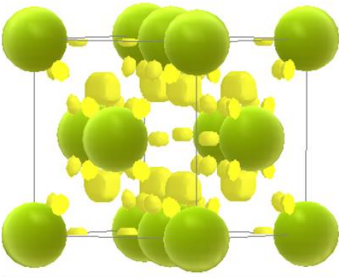
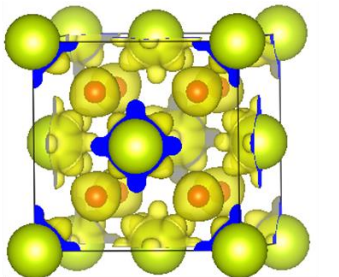
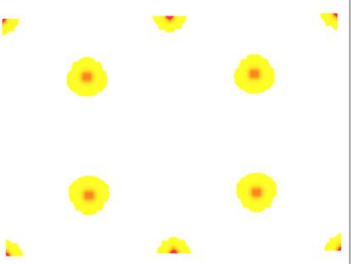
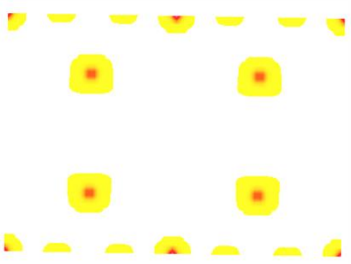
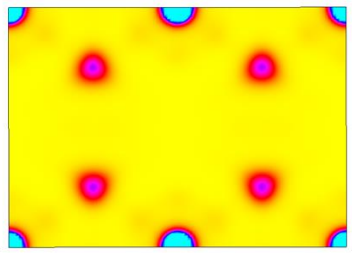
2. 実験方法及び結果 (実験がうまくいかなかった場合、その理由を記述してください。) Experimental method and results. If you failed to conduct experiment as planned, please describe reasons.
実験方法: BL20(iMATERIA)を用いた室温・大気圧下での TOF 型中性子回折 BS bank Single flame、300kW 運転 試薬 1 時間、量産相当品 3 時間 解析: Z-Rietveld Ver. 0.9.43.1 Z-MEM Ver. 0.8.3 Z-3D Ver. 0.2 にて実施 結果: CeO ₂ 、量産相当 CeO ₂ 、量産相当 CZ については良好なスペクトルが得られた。 CeO ₂ は Type2 型のプロファイル関数で解析できたが、量産相当 CeO ₂ ・量産相当 CZ は線幅が広い ため Type0m 型でなければ残差が大きくなり解析ができなかった。

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

量産相当 CZ は当初考えられていた空間群 Fm-3m とは異なり、P42/nmc であることが解析結果より明らかになった。

CeO₂・量産相当 CeO₂ の MEM 解析の結果を以下に示す。

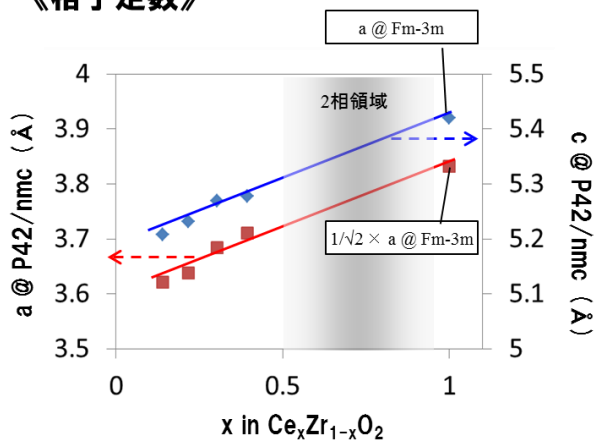
量産相当 CeO₂ は CeO₂ と概ね一致する核密度を示した。

	CeO ₂	量産相当CeO ₂	《参考》CeO ₂ ラボXRD RIETAN
全体図			
(110) 断面図			

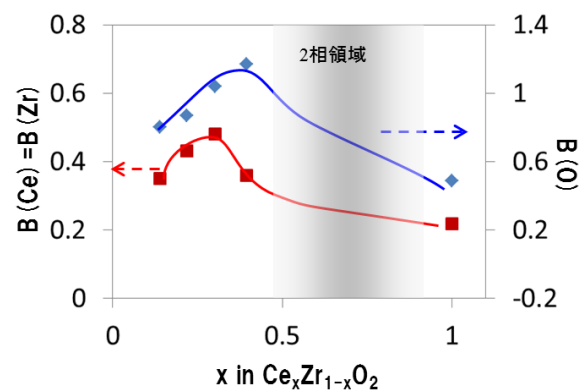
一方で、量産相当品にはゴーストと思われる核密度が存在する為、解析・測定方法を今後再検討する。

格子定数と温度因子の Ce 濃度依存性を以下に示す

《格子定数》



《温度因子》



Ce 濃度の減少に伴い、単調変化する格子定数と異なり、温度因子は極値を有することがわかった。これらの結果は、結晶構造に着目した OSC 機能の最適化にの可能性を示唆する重要な知見である。