

 <b>MLF Experimental Report</b>	提出日 Date of Report 2014.10.2
課題番号 Project No. 2013BM00016 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 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 2014.2.24~2.26、2014.3.5~3.7

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.  Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> 、ZrO <sub>2</sub>  Ce-ZrO <sub>2</sub> 固溶体各種(以下 3 種は今回顕著な成果が出たもの) CeO <sub>2</sub> : 試薬(以下 CeO <sub>2</sub> ) CeO <sub>2</sub> : 量産相当品(以下 量産相当 CeO <sub>2</sub> ) Ce <sub>0.4</sub> Zr <sub>0.6</sub> O <sub>2</sub> : 量産相当品(以下 量産相当 CZ)
--

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 試薬 1 時間、量産相当品 3 時間  解析: Z-Rietveld Ver. 0.9.42 beta 1.4 にて実施  結果: CeO <sub>2</sub> 、量産相当 CeO <sub>2</sub> 、量産相当 CZ については良好なスペクトルが得られた。 CeO <sub>2</sub> は Type2 型のプロファイル関数で解析できたが、量産相当 CeO <sub>2</sub> ・量産相当 CZ は線幅が広い Type0m 型でなければ残差が大きく解析ができなかった。 CeO <sub>2</sub> を Type2 型・Type0m 型で解析した結果と量産相当 CeO <sub>2</sub> を Type0m 型で解析した結果は一致した。
--

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。

CeO<sub>2</sub>(量産相当 CeO<sub>2</sub>)と量産相当 CeO<sub>2</sub> の酸素温度因子は当方的解析において約 3 倍異なり、Zr を添加した場合に OSC 性能が向上することと定性的に一致していた。

CeO <sub>2</sub>		Fm-3m		量産相当 CeO <sub>2</sub>		Fm-3m		量産相当 P42/nmc	
a Å	5.41165(5)			a Å	5.4200(8)			a Å	3.7129(7)
B(Ce)	0.263(1)			B(Ce)	0.220(8)			c Å	5.273(1)
B(O)	0.451(1)			B(O)	0.491(8)			O(Ce)	0.356(8)
Rwp	4.6			Rwp	1.6			O(Zr)	0.644(8)
Rp	3.7			Rp	1.3			B(Ce),B(Zr)	0.44(1)
								B(O)	1.17(1)
								Rwp	2.7
								Rp	2.3