 茨城県 <small>IBARAKI Prefectural Government</small>	MLF Experimental Report	提出日(Date of Report)
課題番号(Project No.) 2019AM0013 実験課題名(Title of experiment) セリア・ジルコニアの酸素放出による結晶構造変化の研究 実験責任者名(Name of principal investigator) 相原 啓吾 所属(Affiliation) 新日本電工株式会社 研究所	装置責任者(Name of responsible person) 石垣 徹 装置名(Name of Instrument : BL No.) iMATERIA(BL-20) 実施日(Date of Experiment) 2019/5/21	

実験目的、試料、実験方法、利用の結果得られた主なデータ、考察、及び結論を記述して下さい。

実験結果などの内容をわかりやすくするため、適宜図表添付して下さい。

Please report experimental aim, samples, experimental method, results, discussion and conclusions. Please add figures and tables for better explanation.

1. 実験目的(Objectives of experiment)
酸素放出（還元）前後のセリア・ジルコニアについて中性子回折測定を行い、その構造変化を解析する。

2. 試料及び実験方法 Sample(s), chemical compositions and experimental procedure
2.1 試料 (sample(s)) 試料 1 酸素放出（還元）前のセリア・ジルコニア 試料 2 酸素放出（還元）後のセリア・ジルコニア 2.2 実験方法(Experimental procedure) 各試料約 2g を直径Φ6 mm のバナジウム製サンプルホルダに封入した。中性子回折ビームライン iMATERIA (BL-20) において、室温、TOF 法にて中性子回折パターンを測定した。十分な強度を得るため、各サンプル当たり 2 時間かけて測定を行った。

3. 実験結果及び考察（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 results and discussion. If you failed to conduct experiment as planned, please describe reasons.

各サンプルの中性子回折パターンを図1に示した。これらの回折パターンから、セリア・ジルコニアの構造は、酸素放出（還元）前も酸素放出（還元）後も蛍石構造（立方晶）であった。また、これらの格子定数に関して、還元前は 5.245 \AA 、還元後は 5.276 \AA であり、酸素放出（還元）により格子定数が大きくなった。

この結果から、セリア・ジルコニアは酸素放出（還元）しても蛍石構造を維持することが分かった。酸素放出（還元）により結晶格子が拡大したのは、セリウムイオンの価数が4価から3価へ減少（還元）したことに伴ってそのイオン半径が増加したためと考える。

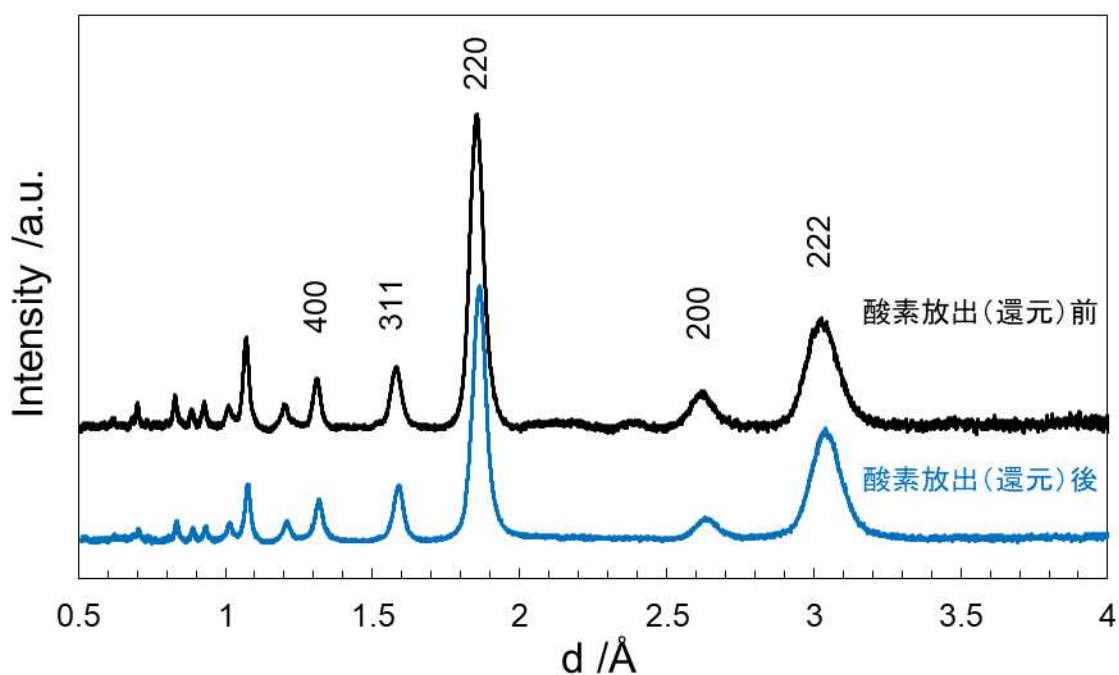


図1. 酸素放出（還元）前後の中性子回折パターン

4. 結論(Conclusions)

酸素放出（還元）前後のセリア・ジルコニアについて中性子回折測定を行い、酸素放出（還元）後も蛍石構造を維持するとわかった。また、酸素放出（還元）により結晶格子が拡大することが分かった。この格子拡大はセリウムイオンの価数減少（還元）に伴うイオン半径の増加のためと考えた。