

ることのできる Maximum Entropy 法 (MEM) を精密結晶構造解析に応用することを試みた。MEMは、一種の統計的推論法であり、現在得られるような精密な測定値を用いれば、詳細な電子密度分布を一義的に推定することができると思われる。実際にMEMを用いて、Si及びCsPbCl₃の解析を行ってみると、Siに対しては、禁制反射の測定値を用いながったにも関わらず、結合電子を含めた詳細な電子密度分布を、一義的に定められるということがわかった。そして、中性子回折の測定値から解析したCsPbCl₃では、MEMにより推定された核密度分布より、その原子配列を求めることができ、一義的に任意の原子変位モーメントを得ることができるということが明らかとなった。

以上の解析より、MEMは、精密結晶構造解析に対して、非常に有用な方法であると結論することができた。

10. 運転者の意識による交通流の変化の研究

下 広 大 治

総走行距離が、個々の自動車の運転法によって、どの様に変化するか調べるのが本研究の目的である。

従来交通流の研究は、交通流を流体と考え連続体で近似している。それに対して本研究では、個々の車の動きを直接調べている。

まず、片側一車線の道路に対して、それぞれの車の運転特性を数式で表す。式に制約条件を与える車間距離や急加減速の限界は現実的に定める。式中のパラメータは、総走行距離も考慮して最適値に定めた。

次に片側二車線の道路に対して、車線変更のルールを数式で表現する。個々の車の運転特性である自由速度と車線変更のしかたをいろいろ変化させたときの交通流の状態をモンテカルロシミュレーションで調べる。

シミュレーションの結果では、運転者が意識的に走行車線に戻ろうとしたり、不必要な車線変更をしない時に、渋滞が少なくなり、総走行距離が長くなった。その傾向は道路の混み具合によっても変化した。

11. ガラス中半導体超微粒子の励起子閉じ込め効果

立道英俊

半導体を含むガラスを熱処理することによって、ガラスマトリックス中に微粒子を析出させることができる。このようなガラスを光励起した場合、電子と正孔は水素原子的な励起子を形成し、その有効ボーア半径が微粒子サイズと同程度になると、量子サイズ効果が現れる。

本研究では、CdSeを含むガラスを溶融し、その再熱処理によって 10\AA から 102\AA 以上の半径を持つ微粒子を成長させた試料を作製した。これらの試料の吸収スペクトル及び発光スペクトルを測定して、励起子の3次元閉じ込め効果を、微粒子サイズと対応させて調べた。その結果、半径が 25\AA 以下の微粒子に対しては吸収スペクトルにおいてエネルギー準位の離散性を反映した吸収ピーク及びサイズ変化に伴うピークシフトが観測され、励起子をつくる電子と正孔が独立に閉じ込め効果を受けることがわかった。さらに半径が 102\AA を超えると低温において励起子吸収ピークとそのサイズに依存したシフトが観測され、励起子自身が閉じ込め効果を受けることがわかった。このような2つの量子サイズ効果を同一の半導体を用いて観測することができた。

12. ガス中蒸発法によるAl-rich-Fe準安定合金微粒子の作製とその電子顕微鏡観察

土森正昭

過去に急冷の効果が報告されているガス中蒸発法により準安定合金の微粒子を作製し、その結晶構造を電子顕微鏡及び粉末X線回折装置により観察した。

Xeガス約 3300Pa 中でAl-5.0~33.3at.%Fe合金を蒸発させ微