

氏名(国籍)	シュテッフェン ヴェーバー (ドイツ)		
学位の種類	博士(工学)		
学位記番号	博甲第1,697号		
学位授与年月日	平成9年3月24日		
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当		
審査研究科	工学研究科		
学位論文題目	Application of the five-dimensional MEM method to the structure refinement of decagonal Al-Mn-Pd quasicrystals (10方晶 Al-Mu-Pd 準結晶の構造精密化への5次元 MEM 法の応用)		
主査	筑波大学教授	理学博士	大嶋 建一
副査	筑波大学教授	農学博士	小川 泰
副査	筑波大学助教授	理学博士	常次 宏一
副査	無機材質研究所主任研究官	理学博士	山本 昭二

論文の内容の要旨

本論文は10方晶 Al-Mn-Pd 準結晶の構造を5次元クラスターにより、最小2乗法及び最大エントロピー法を用いて研究したものである。5次元クラスターは準結晶が原子クラスターを準周期的に配列したものであることに基づいて、クラスターの配列は固定してクラスター内の原子位置、温度因子、占有率等を精密化して構造を決定するものである。本研究ではクラスターの初期構造として平賀等によって与えられたものを採用し、X線単準結晶回折データに基づいて解析している。合金では同一のサイトを2つの原子が統計的に占めることがしばしばあるため、原子の分布を求めるのに5次元最大エントロピー法を適用し、電子密度のピークから原子種の分布を推定し、それに基づいて最小2乗法で占有率、原子位置などを精密化して、準結晶の構造精密化への最大エントロピー法の適用の有用性を示した。構造精密化では消滅則を説明する5次元空間群 $P 10_5/mmc$ と $P 10_5 mc$ を持つ2つのモデルを検討し、後者が正しいことを示した。これは10方晶準結晶を対称心のない空間群で解析した初めての例である。このモデルは217個のパラメータと1400個以上のX線回折強度を用い $R_w \approx 12\%$ を得ている。この構造は10回軸に垂直な10枚の層からなる層状構造と考えられるが、その4枚が大きくしわのよった層になっており、これを考慮することが精密化に重要であることを明らかにした。

審査の結果の要旨

本研究は準結晶のクラスター内の原子位置、占有率、温度因子を精密化した最初の本格的な研究で、構造精密化に最小2乗法と合わせて最大エントロピー法を適用することが有効であることを示した。また Al-Mn-Pd 準結晶の構造を従来の解析 ($R_w \approx 21\%$) より格段に精度良く決定した。したがって、結晶構造学的に意義のある重要な研究である。

よって、著者は博士(工学)の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。