

## $\beta$ -ヒドロキノン包接化合物中の双極性ゲスト分子の 配向秩序に関する平均場理論

今坂, 智子

<https://doi.org/10.15017/458516>

---

出版情報 : 九州大学, 2003, 博士 (工学), 論文博士  
バージョン :  
権利関係 :

# 目次

1	序論	4
1.1	研究の背景と目的	4
1.2	論文の構成	12
2	かご被占率 $x$ が 1 の場合の配向相転移: $\text{SO}_2\text{-Q}_\beta$	14
2.1	理論	14
2.1.1	低温相における結晶場	14
2.1.2	高温相における結晶場	19
2.1.3	平均場理論	19
2.2	計算結果	21
2.2.1	$\nu = 2$ の場合	21
2.2.2	$\nu = 3$ の場合	28
2.2.3	他の $\nu$ の場合	28
2.3	考察	33
2.4	要約と結論	34
3	かご被占率 $x$ が配向相転移に及ぼす効果: $\text{SO}_2\text{-Q}_\beta$ と $\text{D}_2\text{S-Q}_\beta$	36
3.1	理論	36
3.1.1	結晶場	36
3.1.2	希薄双極子系の平均場理論	38
3.2	結果と考察	42
3.2.1	$\text{SO}_2\text{-Q}_\beta$ の数値結果	42
3.2.2	$\text{D}_2\text{S-Q}_\beta$ の数値結果	42
3.2.3	古典力学計算と量子力学計算の比較	51
3.2.4	$T_C$ の $x$ 依存性の実験との比較	51
3.3	要約と結論	54
4	ホスト系の効果	57
4.1	ゲスト系とホスト系のカップリング	57
4.2	ホスト系の自由エネルギーの $T_C$ への効果	59

4.3 要約と結論 . . . . .	62
謝辞 . . . . .	63
Appendix: 量子統計力学の計算 . . . . .	64
参考文献 . . . . .	71
図目次 . . . . .	75
表目次 . . . . .	77