

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Петрова Данила Александровича «Ориентационные фазовые переходы в жидкокристаллических суспензиях дипольных и квадрупольных наночастиц», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика

Диссертационная работа Д. А. Петрова посвящена теоретическому изучению магнитоориентационных явлений и фазовых переходов в суспензиях анизометричных наночастиц в нематическом жидком кристалле. В качестве примеси автор рассматривает три вида наночастиц с разными механизмами взаимодействия с внешним магнитным полем. К первым относятся дипольные частицы, которые обладают постоянным магнитным моментом. Вторыми рассматриваются квадрупольные частицы, такие как углеродные нанотрубки, которые не намагничены в отсутствие поля, но обладают аномально высокой диамагнитной анизотропией. Третьими рассматриваются дипольно-квадрупольные частицы, объединяющие свойства первых двух и наряду с постоянным магнитным моментом обладает выраженной анизотропией диамагнитной восприимчивости. Рассматриваемые в диссертации системы являются композитными материалами, в которых как несущая дисперсионная среда, так и примесные анизометричные наночастицы способны к спонтанному упорядочению и обладают собственной степенью ориентационного порядка, что значительно усложняет теоретическое описание жидкокристаллических суспензий по сравнению с обычными нематиками. Различные механизмы взаимодействия суспензий с внешним магнитным полем, связанные с жидкокристаллической матрицей и дисперсной фазой, могут взаимно усиливать магнитоориентационный отклик всего композита, что является привлекательным для различных технических приложений. Однако более интересным является случай конкуренции различных механизмов влияния поля, которые могут приводить к неожиданному фазовому поведению суспензии и новым ориентационным эффектам. По этой причине жидкокристаллические композиты наночастиц интересны не только с точки зрения фундаментального физического материаловедения, но и являются весьма перспективными материалами для различных приложений, работающих на основе жидких кристаллов. Рассматриваемые Д. А. Петровым системы являются типичными представителями мягких конденсированных сред и соответствуют одному из приоритетных направлений развития науки Российской Федерации, относящихся к индустрии наносистем. Таким образом проведенное Д. А. Петровым теоретическое исследование представляется весьма актуальным.

Структура диссертационной работы несколько отличается от традиционной и включает в себя введение, главу с описанием основных теоретических методов, развиваемых в диссертации, четыре оригинальные главы и список литературных источников. В диссертации отсутствует отдельная глава, посвященная обзору литературы. Вместо этого каждая глава, включая введение, содержит отдельный литературный обзор, что в целом сопровождается значительным списком литературы, состоящим из 346 наименований. В качестве основных теоретических методов описания ориентационных фазовых переходов в дисперсиях наночастиц на основе жидких кристаллов Д. А. Петров

выбирает молекулярно-статистический и термодинамический подходы, обсуждение которых представлено в главе 1. Первый подход основывается на классических теориях Майера – Заупе и Онзагера для термотропных и лиотропных нематических жидких кристаллов соответственно. В главах 2 и 3 диссертации Д. А. Петров последовательно развивает эти теории и обобщает их на случай жидкокристаллических суспензий наночастиц. В главе 2 автор рассматривает суспензию как бинарную смесь мезогенных молекул и магнито жестких анизометричных частиц, а в третьей главе – смесь молекул нематика и углеродных нанотрубок. Во всех задачах, решаемых в рамках молекулярно-статистической теории, используется приближение среднего поля и рассматриваются индуцируемые магнитным полем и температурой ориентационные фазовые переходы, а также анализируется влияние примеси на смещение температуры перехода упорядоченная – изотропная фаза по сравнению с обычным нематиком. Несомненным преимуществом развиваемых Д. А. Петров подходов является использование наиболее общей тензорной формы записи гамильтониана среднего поля суспензии и свободной энергии жидкокристаллических дисперсий наночастиц. Это позволяет в зависимости от симметрии упорядоченной фазы рассматривать тензоры ориентации жидкокристаллической и примесной подсистем в одноосной и двуосной форме записи. Такой подход дает возможность описывать ориентационные состояния суспензий с конкурирующими полевыми ориентационными механизмами, когда под действием внешнего магнитного поля главные оси нематического порядка жидкого кристалла и примесных частиц могут менять взаимную ориентацию. Именно этот случай рассмотрен в главе 3 диссертации. Второй метод, используемый в работе, связан с анализом свободной энергии суспензии и нахождении состояний, отвечающих ее минимальным значениям. Реализация этого метода представлена в главах 4 и 5, а также частично в главе 3 диссертации. В задачах 4 и 5 глав рассматривались плоские ячейки с жидкокристаллическими суспензиями углеродных нанотрубок и гетитовых наностержней соответственно. Во всех случаях исследовались магнитные переходы Фредерикса в наиболее часто встречающейся в эксперименте геометрии поперечного изгиба. Автор рассматривал наиболее общий случай, когда в объемной плотности свободной энергии учитывались следующие вклады: потенциал ориентационно-упругих деформаций поля директора жидкого кристалла, взаимодействие нематика с магнитным полем, ориентационное взаимодействие директоров жидкого кристалла и примесных частиц, сегрегация примеси и взаимодействие частиц с внешним магнитным полем, обусловленные как наличием постоянных магнитных моментов, так и их диамагнитной анизотропией. Путем минимизации свободной энергии были получены системы сложных интегро-дифференциальных уравнений для полей директоров жидкого кристалла и примесных частиц, а также для пространственного распределения концентрации примеси. Во всех задачах Д. А. Петрову удалось подобрать интегрирующий множитель и довести решаемые задачи до квадратур, что также является несомненным плюсом разработанных теорий.

В диссертации Д. А. Петровым проведено комплексное теоретическое исследование сложных физических объектов, состоящих из различных анизометричных наночастиц, диспергированных в анизотропной жидкой матрице. Диссертация содержит много новых

результатов, важных для развития физики мягких конденсированных сред, в частности жидких кристаллов и физики фазовых переходов. Из основных и, на наш взгляд, наиболее ценных результатов работы стоит отметить следующие.

1. Реализация метода среднего поля для описания ориентационных фазовых переходов в жидкокристаллических суспензиях магнитных частиц позволяет получить итоговую систему уравнений ориентационного и магнитного состояния в виде квадратур, т.е. рассматриваемая задача относится к классу точно решаемых. В свою очередь Д. А. Петров предложил модифицировать обычный метод среднего поля с помощью дополнительного так называемого сферического приближения, известного из теории магнетизма. Такой подход позволил точно вычислить статистический интеграл суспензии, найти выражение для свободной энергии и получить уравнения ориентационного состояния системы в простом алгебраическом виде. Предложенный автором подход выглядит весьма интересным и перспективным, так как относится к точно решаемым моделям классической статистической механики. Этот подход может быть использован для теоретического описания более сложных жидкокристаллических систем, включая, например, суспензии магнитных наночастиц на основе спирально-анизотропных матриц. Молекулярно-статистическая теория для такого рода систем на сегодняшний день отсутствует в научной периодике.
2. В диссертации Д. А. Петрову впервые удалось учесть влияние температуры на магнитные переходы типа Фредерикса в жидкокристаллических суспензиях углеродных нанотрубок. Автор связал плотность энергии сцепления молекул жидкого кристалла с поверхностью нанотрубок, которая является феноменологическим параметром в континуальной теории, с параметрами ориентационного порядка примесной и жидкокристаллической подсистем молекулярно-статистической теории и тем самым определить ее зависимость от температуры. Это является существенно новым элементом в теории жидких кристаллов и суспензий на их основе.
3. Автором впервые изучены процессы концентрационного расслоения диамагнитных частиц, к которым относятся углеродные нанотрубки, в жидкокристаллической матрице под действием внешнего однородного магнитного поля. Показано, что эти процессы приводят к трикритическому поведению, когда магнитный переход Фредерикса может происходить не только непрерывно, но и скачком, чему отвечает фазовый переход первого рода. Кроме этого установлено, что в суспензиях углеродных нанотрубок на основе жидких кристаллов все ориентационные переходы происходят в полях, не превышающих поле перехода Фредерикса обычного нематика. Эти результаты имеют непосредственное практическое значение для разработки новых оптических устройств на основе жидкокристаллических нанокомпозитов.
4. Из литературного обзора видно, что Д. А. Петров за последние десять лет активно развивал континуальную теорию жидкокристаллических суспензий анизометричных частиц, чему посвящено 20 публикаций из общего числа работ по теме диссертации, включающего 31 статью. Наиболее важным и обращающим на себя внимание результатом и итогом этого исследования можно считать предложенный автором подход, позволивший дать теоретическое описание экспериментальным данным по диэлектрическому отклику на

внешнее магнитное поле магнитокомпенсированных и намагниченных жидкокристаллических суспензий гетитовых наностержней.

В диссертационной работе автор продемонстрировал глубокие знания в исследуемой области, уверенное владение как аналитическими, так и численными методами решения сложных нелинейных интегральных уравнений, умение грамотно и понятно излагать полученные результаты и делать обоснованные выводы. В качестве итога можно утверждать, что представленные в диссертации результаты исследования отвечают критериям новизны, достоверности, а также теоретической и практической значимости. Несмотря на вышесказанное в работе имеются и недостатки, к которым можно отнести следующие.

1. В качестве общего замечания нужно отметить, что развиваемые автором подходы в главах 2, 3 и 4 диссертации не содержат прямого сравнения с экспериментом. В них лишь дано качественное сравнение с представленными в научной периодике экспериментальными данными. Несомненным улучшением работы было бы сравнение результатов разработанной Д. А. Петровым теории с данными натурального или компьютерного экспериментов.
2. В главе 2 диссертации представлены температурные зависимости приведенной намагниченности жидкокристаллической суспензии магнитных частиц. Стоило бы дополнить эти расчеты зависимостями приведенной намагниченности от напряженности магнитного поля.
3. В диссертации представлен большой объем численных расчетов, который является результатом решения довольно сложных и громоздких систем интегральных уравнений ориентационного состояния. Однако автором нигде не упоминается про используемые численные алгоритмы решения. Лишь в вводной части диссертации в разделе **Методология и методы исследования** кратко указано, что решение систем уравнений осуществлялось методом многомерных секущих. Стоило бы больше внимания уделить используемым численным методам и их описанию.
4. В главе 5 представлено сравнения результатов теоретических расчетов и экспериментальных данных. В подписи к рис. 5.6 указаны 6 фитинговых параметров, используемых в расчетах, но нет подробного объяснения из каких соображений они подбирались.
5. К сожалению, в пятой главе экспериментально определялся только диэлектрический отклик жидкокристаллических суспензий. Отдельный интерес вызывает поведение намагниченности или восприимчивости таких систем, для которых также можно было провести расчеты.

Указанные замечания не снижают научной ценности результатов и носят больше рекомендательный характер. Диссертационная работа хорошо апробирована в периодических изданиях, а ее результаты неоднократно представлялись на научных конференциях и семинарах, в том числе проводимых в УрФУ. Автореферат соответствует содержанию диссертации и отражает все ее основные выводы. Считаю, что диссертационная работа Петрова Данил Александровича «Ориентационные фазовые

переходы в жидкокристаллических суспензиях дипольных и квадрупольных наночастиц» соответствует как требованиям п. 9 «Положения о присуждении учетных степеней УрФУ», так и паспорту специальности 1.3.3. Теоретическая физика, а ее автор Д. А. Петров заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

**Официальный оппонент:**

главный научный сотрудник лаборатории математического моделирования физико-химических процессов в многофазных средах ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», доктор физико-математических наук, профессор

Зубарев Андрей Юрьевич

Дата: 29 мая 2024 г.

Контактная информация:

Тел.: +7 (343) 375-44-44

E-mail: [a.j.zubarev@urfu.ru](mailto:a.j.zubarev@urfu.ru)

Почтовый адрес: 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

