

На правах рукописи



Ельникова Лилия Вячеславовна

РЕШЕТОЧНЫЕ КАЛИБРОВОЧНЫЕ ПОЛЯ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ
ДЕФЕКТОВ ЛИОТРОПНЫХ ЖИДКИХ КРИСТАЛЛОВ И ПОЛИМЕРНЫХ
КОМПОЗИТОВ

Специальность 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Автореферат диссертации
на соискание учёной степени
доктора физико-математических наук

Курск – 2024 г.

Работа выполнена в Юго-Западном государственном университете

Научный консультант: доктор технических наук, профессор
Беляев Виктор Васильевич

Официальные оппоненты: **Аксенова Елена Валентиновна**
доктор физико-математических наук, Санкт-Петербургский государственный университет, физический факультет, профессор кафедры статистической физики

Ларионов Алексей Николаевич
доктор физико-математических наук, профессор, Воронежский государственный аграрный университет имени императора Петра I, профессор кафедры математики и физики

Кудрейко Алексей Альфредович
доктор физико-математических наук, доцент, Уфимский университет науки и технологий, профессор кафедры общей физики

Ведущая организация: Институт общей физики им. А.М. Прохорова
Российской академии наук

Защита диссертации состоится «23» января 2025 г. в 13:00 часов на заседании диссертационного совета 24.2.435.01, созданного на базе Юго-Западного государственного университета по адресу: 305040, г. Курск, ул. 50 лет Октября, 94, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на официальном сайте Юго-Западного государственного университета <https://www.swsu.ru>.

Автореферат разослан « » октября 2024 г.

Учёный секретарь
диссертационного совета 24.2.435.01
к.ф.-м.н., доцент



Кочура А. В.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИССЕРТАЦИИ

Диссертация посвящена изучению критических явлений в лиотропных жидких кристаллах и полимерных композитах, связанных с эволюцией их структурных дефектов. Полученные в работе экспериментальные результаты интерпретированы в рамках моделей теории калибровочных полей на решётке, параметры применяемых моделей установлены численно методом Монте-Карло.

Актуальность темы исследования

Топологические дефекты многокомпонентных систем «мягкой» материи играют существенную роль в фазовых переходах и пространственной агрегации частиц в объёме композитного материала, эволюция дефектов определяет настраиваемые электрические, оптические, механические, характеристики различных типов лиотропных жидких кристаллов (ЛЖК) и полимерных композитов и, следовательно, области их применений. Композитные ЖК и полимерные материалы используются в качестве высокопроизводительных элементов электроники, спинтроники, фотоники, сенсоров и исполнительных механизмов, в различных сферах промышленности и сельского хозяйства, в задачах контактного взаимодействия твёрдых тел (например, триботехники), медицины и др. Примерами таких перспективных материалов являются нематические неорганические золи, органические полупроводники, полимерные нанокомпозиты и смектические эластомеры, смазочные композиции в гексатических, смектических, нематических ЖК фазах и другие симметрично упорядоченные системы.

В большинстве случаев параметр порядка дефектов «мягкой» материи описывается некоммутативной топологией, в материале имеются скрытые симметрии, проявляются другие нетривиальные топологические свойства, поэтому дефектозависимый мезоморфизм в таких системах не может описываться исключительно в терминах феноменологических молекулярных теорий. Эти проблемы могут быть устранены применением решёточных приближений калибровочного поля.

Классическая теория дефектов в ЖК считается окончательно разработанной [ц1]. В трудах Клемана, Лаврентовича, Смалюха, Краля, Догича, Монастырского, Каца, Терентьева, Воловика, Минеева, Требина, Гесса, Нельсона, Радзиховского, Тонера и др. развиты классические и квантовые подходы к теории дефектов в ЖК [ц1-ц4]. Заннони, Берарди, Барберо и др. применили методы численного моделирования дефектных структур на решётке для различных типов ЖК и полимеров.

С середины прошлого века и на протяжении нескольких десятилетий с

помощью калибровочной теории дефектов устанавливались общие теоретические принципы, связывающие геометрические и упругие свойства материалов, начиная с классического описания Эшелби до работ Кадич и Эделена [ц5], Вл. Осипова и Кочетова, Катанаева [ц6] и др.

Принципы образования дефектов по механизму Киббла и теория струн применялись к мембранам с кривизной Хельфриха, что отражено в работах Полякова 1977 года, Уитера (Wheater) 1993 года, Бовика (Bowik) 1994 и др. В настоящее время эти подходы хорошо разработаны и распространены на различные типы структур конденсированных сред.

Недавно предложена классификация дефектозависимого мезоморфизма в различных классах квантовых систем, учитывающая поля с калибровочными дефектами [ц7], этот подход применим для отдельных классов нематических ЖК [ц8]. Класс задач построения калибровочных теорий для различных типов систем и агрегатов с топологическими дефектами расширяется в процессе создания новых композиционных материалов, которые отличаются от своих предшественников усложнением морфологии в наноразмерных масштабах и физико-химическими характеристиками.

В рамках решёточной калибровочной теории получены результаты, сопоставимые с измеряемыми термодинамическими величинами, что свидетельствует в пользу её достоверности. Открываются новые направления теоретических исследований ЖК систем. В частности, требуют развития и приложения теории Березинского-Костерлица-Таулесса (БКТ) в различных классах универсальности и типах систем, при переходах от двумерных систем к трёхмерным и системам с изменяющейся размерностью [ц4]. Основы флуктуационной теории и различные реализации механизмов БКТ для двумерных систем построены также Нельсоном [ц4], Виллейном и Юнгом.

Бозонные системы типа Су-Шриффера-Хигера для одномерных полимеров могут проявлять свойства, аналогичные топологическим изоляторам. Это современное открытое направление для поиска топологических фаз в полимерных нанокompозитах и ЖК.

Задачи о динамике систем «мягкой» материи изучались с 70-х годов прошлого века, около 20 лет назад появилось понятие «активных» систем, под которыми подразумеваются самодвижущиеся структурные единицы мягкой материи, проявляющие спонтанное коллективное движение (Ту, Тонер, Маркетти, Рыскин, Вителли, Солон, Арансон и др). Они изучаются методами уравнений движения, гидродинамики, нематодинамики и калибровочной теории, включающей теорию дефектных структур. Как показано Одором, Орослани, Солоном, Кейтсом и др., классы универсальности этих систем отличаются от классов «пассивных». Теория активных ЖК и подобных им полимерных материалов лавинообразно развивается в связи с перспективностью их применения в электронных устройствах. Из этого следует необходимость развивать теоретический аппарат, использующий гамильтонов подход к диссипативным системам.

Цели и задачи диссертационной работы

Цель работы – развитие подхода калибровочных полей к исследованию дефектозависимых критических явлений в отдельных классах лиотропных жидких кристаллов и полимерных нанокомпозитов.

Для осуществления поставленной цели решаются следующие **задачи**:

1. Построение модели коалесценции тактоидных частиц неорганических зольей V_2O_5/H_2O в фазе нематика в магнитном поле, происходящей в процессе эволюции точечных топологических эффектов. Точная классификация дефектных структур в этих золях.

2. Построение модели низкотемпературной релаксации в липидных смесях, проявляющих свойства самоорганизации по типу дефектов доменных стенок.

3. Построение модели каучукоподобной упругости в сшитых полисилоксановых эластомерах на основании данных рентгеновской и механической спектроскопии, характеристика дефектов, эволюционирующих в фазовых переходах плавления смектик А – нематик, объяснение механизма упорядочения в пиннинге, индуцированном введением сшивок.

4. Определение топологических механизмов переходов по последовательностям с гексатическими фазами в композитных материалах смазочных композиций с мезогенными присадками, построение фазовых диаграмм и достоверных моделей в соответствии с данными диэлектрической спектроскопии, в частности, апробация модели плавления Березинского-Костерлица-Таулесса (БКТ).

5. Построение моделей самоорганизованного поведения и агрегации наночастиц из аллотропов углерода (наночастиц графена, наногрифта, углеродных нанотрубок и пр.) в полимерах на основании данных структурных исследований по малоугловому рассеянию нейтронов (МУРН).

6. Моделирование поверхностных дисклинаций в самодвижущихся системах, в «активных» нематиках в коллоидных и пр. фазах с искривлёнными поверхностями.

7. Поиск и доказательство наличия топологических фаз в различных классах жидких кристаллов (например, порфиринов, фталоцианинов, активных НЖК и др.) и полимерных композитов.

Методы исследования.

В работе применяются методы классической и квантовой теории поля, калибровочной теории и топологии, статистические алгоритмы Монте-Карло на решётке.

Для подтверждения предлагаемых в работе теоретических построений приводятся результаты экспериментов по диэлектрической спектроскопии и малоугловому рассеянию нейтронов, поляризационной оптической спектроскопии, растровой и просвечивающей электронной микроскопии. Для анализа экспериментальных данных используются пакеты стандартных программ: SASfit, ATSAS 2.4. и его процедуры, ImageJ.

Положения, выносимые на защиту:

1. Коалесценция тактоидов нематической фазы V_2O_5/H_2O в магнитном поле в направлении длинной оси тактоида осуществляется по механизму Киббла-Журека аннигиляции топологических дефектов неабелевых вихрей, локализованных на полюсах тактоидов. В рамках предложенной модели найден геометрический критерий коалесценции тактоидов.

2. Эволюция топологических дефектов кинков в низкотемпературных фазах смесей липидов описывается механизмом Киббла-Журека, в рамках которого предложена модель эволюции кинков, сочетающая квантовую модель Изинга и модель Ландау-Зинера и позволяющая интерпретировать различные типы релаксационных процессов и вычислять термодинамические параметры системы и плотность кинков в решёточной версии модели Изинга со случайным поперечным полем.

3. Перколяционный переход из смектической А-фазы сшитых эластомеров в нематическую фазу подчиняется модели $3D XY$ спинового стекла, аналогичной модели Виллейна с $3D$ вихрями (дислокациями) модели БКТ и точечными дефектами.

4. Фазовый переход «гексатическая – изотропная фаза» в литиевых смазочных композициях происходит по механизму плавления дислокаций модели БКТ, при этом мезогенные присадки карбоксилаты меди(II) геометрически ассоциируются с положением решёточных дислокаций.

5. Агрегации углеродных нанотрубок в полимерных композитах интерпретирована в рамках модели, сочетающей в себе уравнения магнитной гидродинамики и формализм струн Дирака, состоящих из трубок монополярного тока.

6. Агрегация наночастиц графита и графена в полимерной матрице может осуществляться по механизму фракционной модели дисклинаций теории микрополяриной упругости. При использовании дуальной калибровочной теории с фракталами может быть вычислена общая плотность и энергия дефектов полимерного нанокомпозита.

7. Кластеризация молекул фуллерена C_{60} в полимерной матрице осуществляется согласно модели взаимодействий топологических дефектов дисклинаций и центрального монополя, построенной в двумерном сферическом пространстве Гёделя. Предложена решёточная версия модели монополярного газа и её численное решение методом Монте-Карло в абелевой проекции, позволяющая оценивать энергию монополярных токов при различных концентрациях монополей и характеризовать фрактальные свойства наночастиц фуллерена C_{60} в полимерном композите.

8. Модель эволюции поверхностных дисклинаций «активных», или самодвижущихся, нематических жидких кристаллов, в терминах лагранжиана теории струн, позволяющая связывать гидродинамические величины (числа Рейнольдса, Эриксона и коэффициенты Лесли) с величиной «силы дисклинаций», которая может быть преобразована в геометрическую связность. Модель позволяет вычислять энергию поверхностных дисклинаций в терминах различных нелинейных теорий упругости.

9. Модель Су-Шриффера-Хигера для анализа электрических свойств полимеров с гибридными наполнителями (углеродными нанотрубками и неупорядоченными массивами нанопроволок GaAs) и оценки вкладов наполнителей различных типов.

Положения соответствуют специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния (по пунктам паспорта 1,2,5,6):

1. Экспериментальное изучение физической природы и свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и, в том числе, материалов световодов как в твёрдом (кристаллы, поликристаллы), так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления.

2. Изучение экстремального состояния конденсированных веществ (сильное сжатие, ударные воздействия, изменение гравитационных полей, низкие и высокие температуры).

5. Разработка технологии и оборудования для получения наноструктурных металлических, диэлектрических, керамических, композиционных (на основе металлической, диэлектрической, минеральной и полимерной матриц) материалов, в том числе, с наноструктурами поверхностными функциональными слоями и покрытиями, обладающих широким спектром функциональных свойств.

6. Установление закономерностей влияния технологии получения и обработки материалов на их структуру, механические, химические и физические свойства, а также технологические свойства изделий, предназначенных для использования в различных областях промышленности и медицины.

Научная новизна результатов

1. Впервые поставлена и решена задача о коалесценции тактоидов зольей V_2O_5/H_2O в магнитном поле и уточнена классификация точечных поверхностных особенностей, в этой связи определён геометрический критерий коалесценции тактоидов.

2. Впервые предложено объяснение перколяционного перехода в смектических-А эластомерах в форме $3D XY$ модели БКТ – Виллейна и спинового стекла, дано количественное описание перколяции в неаффинном базисе.

3. Впервые методом диэлектрической спектроскопии охарактеризованы электрические свойства литиевых смазочных композиций (СК) и СК на основе синтетического солидола с мезогенными присадками карбоксилатами меди(II) и определены термодинамические параметры термотропных и лиотропных фазовых переходов в этих СК.

4. Впервые на основании полученных оригинальных результатов диэлектрической спектроскопии и поляризационной оптической микроскопии интерпретирован переход плавления гексатической фазы в смазочных композициях с помощью модели БКТ дислокаций на дуальной

решётке, которые ассоциированы с локализацией мезогенных присадок. В рамках разработанной модели численно оценивается оптимальная концентрация мезогенов.

5. Впервые на основе спектров МУРН для полимерных нанокомпозитов изотактического полипропилена с наночастицами аллотропов углерода интерпретирована морфология различных типов наночастиц в объёме полимерной матрицы: углеродных нанотрубок, фуллерена, наночастиц графена и наногрфита. Построены модели их агрегации и выполнен их численный анализ методом Монте-Карло на решётке.

Научно-практическая значимость

В последние десятилетия развивается производство различных композиционных материалов, расширяется сфера использования гибридных структур из полимерных и жидкокристаллических композитов, которыми являются как ЖК смеси с концентрационными фазовыми переходами, так и фазы, допированные наноразмерными частицами.

Среди областей применения гибридных материалов из семейства полимеров и лиотропных жидких кристаллов можно обозначить:

- машиностроение, энергетику, робототехнику, космонавтику, сельское хозяйство, техническую экологию,
- органическую электронику и спинтронику, топологические изоляторы, квантовые точки, наноэлектромеханические системы, солнечные батареи и пр.,
- оптические устройства (дисплеи, фотонные кристаллы и пр.), фотовольтаика, терафлюидика и пр.,
- триботехнические системы и смазочные материалы для нужд индустрии, транспорта, сельскохозяйственных машин и механизмов,
- промышленные и медицинские датчики, исполнительные механизмы (искусственные мышцы и суставы),
- фотодинамическую терапию, генную терапию.

Часто при внедрении таких материалов в различные сферы народного хозяйства на первый план выступают экономические аргументы, такие как сравнительная распространённость в природе, низкая стоимость и дешевизна их промышленного производства.

Во всех практических приложениях требуется достоверное теоретическое описание и предсказание физических свойств ЛЖК и полимерных композитных материалов: термодинамических параметров, коэффициентов вязкости, упругих, прочностных, реологических, электронных, оптических свойств и пр. Поэтому предложенное в работе моделирование имеет непосредственное отношение к характеристике свойств изучаемых систем для их совершенствования и использования.

Достоверность результатов диссертации

Достоверность результатов диссертации, полученных путём моделирования, подтверждается сравнением с экспериментальными результатами для измеряемых термодинамических параметров и

сопоставлением с литературными данными, полученными другими исследователями с использованием альтернативных методов моделирования (с помощью программного обеспечения типа молекулярной динамики LAMMPS, NAMD, различных версий алгоритмов *ab initio* и др.), а также при сравнении с общепринятыми выводами феноменологических теорий.

Достоверность экспериментальных результатов подтверждается соответствием общепринятым методикам измерений, описанных в литературных источниках, согласием с известными и вновь полученными результатами теории и численного моделирования.

Апробация работы

Результаты диссертации были доложены на международных и национальных конференциях, школах, симпозиумах, семинарах и совещаниях: 22,23 Международных конференциях «Радиационная физика твердого тела»: 9-14 июля 2012, г. Севастополь; 7-12 июля 2014, Севастополь; VII Международной научной конференции «Лиотропные жидкие кристаллы и наноматериалы» и совместном симпозиуме «Успехи в изучении термотропных жидких кристаллов» (V Чистяковские чтения), г. Иваново, 22-25 сентября 2009 г.; 1 Всероссийской конференции по жидким кристаллам, 17-21 сентября 2012 г., г. Иваново; 14 Европейской конференции по жидким кристаллам ECLC, 25-30 июня 2017 г., г. Москва; 16 Международной конференции по атомному слоевому осаждению (Atomic Layer Deposition, ALD 2016), 24-27 июля 2016 г., г. Дублин; 47–51-ой Школах ФГБУ «ПИЯФ» по Физике Конденсированного Состояния (ФКС-13–ФКС-17) 11-16 марта 2013 г., 16-21 марта 2014 г., 14-19 марта 2016 г., 11-16 марта 2017 г., г. Санкт-Петербург; 15-19 Международных конференциях по внутреннему трению и механической спектроскопии ICIFMS-15 – ICIFMS-19 в Италии, Швейцарии, КНР, Бразилии, России (20-25 июля 2008 г., г. Перуджа; 3-8 июля 2011 г., г. Лозанна; 21-26 сентября 2014 г., г. Хефэй; 12-15 сентября 2017 г., г. Игуасу-Фодс; 2020-2022 гг. Москва-Рим); XXI, XXII, XXIII, XXIV Международных конференциях «Релаксационные явления в твёрдых телах» в Российской Федерации, RPS-21: 5-7 октября 2004 г., RPS-22: 14-18 сентября 2010 г., RPS-23: 16-19 сентября 2015 г., RPS-24: 24-27 сентября 2019 г., г. Воронеж; XI Международной конференции «Imperfection interaction and anelastic phenomena in solids», IAPS XI 24-28 сентября 2007 г., г. Тула; XI Международной конференции «Эйлеровы чтения – МГОУ 2017» 14-18 ноября, «Власовские Чтения – МГОУ 2018» 4-8 декабря, г. Москва, Международных мультидисциплинарных конференциях «Физические свойства материалов и дисперсных сред для элементов информационных систем, наноэлектронных приборов и экологичных технологий», 17-18 апреля 2019 г. и «Перспективная элементная база микро- и наноэлектроники с использованием современных достижений теоретической физики», 12-13 декабря 2019 г., 16-18 сентября 2020 г., МГОУ, г. Москва; XIX, XXI Конференциях СКЭС 2022, 2024 «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления», ФИАН, г. Москва; I и II Международных научно-практических

конференциях «Альтернативная и интеллектуальная энергетика», 6-8 декабря 2018 г., 16-18 сентября 2020 г., г. Воронеж; Международной конференции по исследованию конденсированных сред на ИБР-2, 12-16 октября 2020 г., г. Дубна; VI Конференции по малоугловому рассеянию и рефлектометрии, 21-23 июня 2023 г., г. Гатчина, 14 Всероссийской научной конференции с международным участием «Химическая термодинамика и кинетика», 13 мая-17 мая 2024 г., г. Тверь; на семинарах и конференциях ИТЭФ.

Публикации

По теме диссертации опубликовано 29 статей в рецензируемых научных журналах [1–29], 1 статья в журнале «Аграрный вестник Верхневолжья» [30], 2 препринта ИТЭФ [31, 32] и электронный препринт Корнеллского университета [33].

Личный вклад автора состоит в постановке задач, в участии в экспериментальных исследованиях, в составлении компьютерных программ и адаптации алгоритмов, известных из других литературных источников, в анализе результатов, в создании новых теоретических моделей и критическом применении известных, в формулировке выводов, написании научных статей и докладов конференций при поддержке соавторов. Экспериментальные работы по диэлектрической спектроскопии выполнены с равным вкладом совместно с проф. А. Т. Пономаренко, проф. В. Г. Шевченко, эксперименты МУРН и анализ результатов осуществлялись совместно с коллективом проф. А. Н. Озёрина, А. И. Куклина, В. В. Скоя.

Объем и структура диссертации

Диссертация состоит из 8 глав, введения, заключения и 2 приложений общим объёмом 343 страницы, рукопись включает 3 таблицы, 83 рисунка и список цитированной литературы из 650 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение

В разделе «Введение» кратко даётся общая характеристика диссертации, формулируются цели и задачи, её актуальность, новизна и практическая значимость, перечисляются полученные результаты и защищаемые положения.

Глава 1 «Литературный обзор». В ней приводятся исторические сведения, касающиеся утверждения принципов топологических и калибровочных квантово-полевых подходов к изучению критических явлений в ЖК и высокомолекулярных композитах с топологическими дефектами, численные методы решения их решёточных версий [1–4, 7–10, 17, 19, 20, 28, 32, 33]. Описаны физические методы исследования таких материалов, связанные с необходимостью достижения высокой чувствительности к ангстремным и

наноразмерным эффектам: рентгеновские и нейтронные методы, электронная микроскопия и пр.

Кратко перечисляются новейшие достижения на пути создания ЖК и композитных материалов с топологическими свойствами, реализация топологических в технических устройствах и применение в народном хозяйстве.

Глава 2 «Точечные особенности в золях V_2O_5/H_2O » посвящена теоретическому исследованию нематической тактоидной фазы в системе «вода-пентаоксид ванадия» V_2O_5/H_2O , обладающей поверхностными точечными топологическими дефектами. Эти дефекты классифицированы в формализме калибровочного поля вихрей и объясняется эволюция зольной фазы в магнитном поле в режиме коалесценции тактоидов [4, 28].

$$\Phi_{el} =$$

$$\int_V dr^3 \left[\frac{K_1}{2} (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + \frac{K_2}{2} (\mathbf{n} \cdot \nabla \times \mathbf{n})^2 + \frac{K_3}{2} (\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}))^2 - K_{24} \nabla \cdot [\mathbf{n} \cdot \nabla \cdot \mathbf{n} + (\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n}))^2] \right]. \quad (1)$$

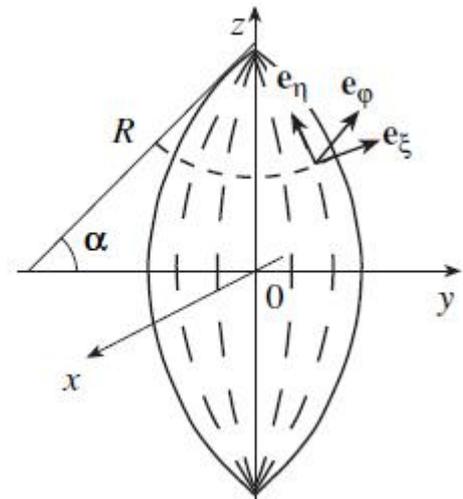
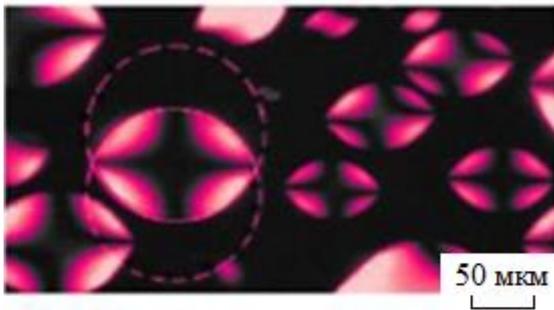


Рис. 1. Тактоидная фаза системы V_2O_5/H_2O с геометрическими параметрами α , R и бисферические координаты тактоида [ц9].

В континуальном представлении Ландау-де-Жена (1) тактоидные бужумы (точечные поверхностные дефекты) в золях V_2O_5/H_2O были охарактеризованы Казначеевым [ц9] и ван дер Шутом [ц10]. Окончательный результат в классификации тактоидных фаз и построения фазовой диаграммы – это постулирование четырёх типов возможной формы капель (тактоидов), которые зависят от локального сцепления директора с поверхностью тактоида и от полного объёма тактоида. Казначеев и соавторы определили равновесную форму тактоида, в пределе слабой связи $\gamma = (\text{tg}(\alpha_1/2)/\text{tg}(\alpha/2))^2 \rightarrow 0$ и в отсутствие магнитного поля $F_m = 0$ и энергии при коэффициенте упругости по Франку K_{24} свободная энергия является неаналитической функцией $f(\alpha, \gamma)$.

В диссертации изучен сценарий взаимодействия тактоидов в режиме коалесценции тактоидов в магнитном поле, приложенном параллельно оси тактоидов. Точечные поверхностные дефекты бужумы рассматриваются как

дефекты вортонны в системе глобальных координат. На возможность существования таких точечных дефектов в веществе на границах фаз указано в [ц11–ц13].

Согласно механизму КЖ образования дефектов применима струнная модель с бозонным лагранжианом:

$$L = \int dr^3 \left\{ -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} - \frac{1}{4} G_{\mu\nu} G^{\mu\nu} - D_\mu \varphi^+ \cdot D\varphi - V(\varphi) \right\}. \quad (2)$$

Здесь $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$ – силы абелева поля A , глобальная кривизна есть $G_{\mu\nu} = \partial_\mu \mathbf{H}_\nu - \partial_\nu \mathbf{H}_\mu + g \mathbf{H}_\mu \times \mathbf{H}_\nu$, g – метрический тензор Риччи, \mathbf{H} – магнитное поле, μ, ν – индексы калибровочного поля A , $D_\mu \varphi = D_\mu \varphi - ie A_\nu \varphi + g \mathbf{H}_\mu \times \varphi$ – калибровочно-ковариантные производные вакуума, $V(\varphi)$ – потенциал поля из (1).

$$\frac{a\gamma}{2} \int_0^{2\pi} \varphi_k \int_{-\infty}^{\infty} \eta_k \int_{\pi-a}^{\pi} \frac{4K_1 \sinh^2 \eta_k \sin \zeta + K_3 \sin^3 \zeta}{(\cosh \eta_k - \cos \zeta)^3} Dd\zeta. \quad (3)$$

Уравнения движения

$$\begin{aligned} \frac{1}{g} \partial_\mu \sqrt{g} F^{\mu\nu} &= j^a = ie [\varphi^+ \cdot D^\nu \varphi - \varphi \cdot (D^\nu \varphi)^+], \\ \frac{1}{g} \partial_\mu \sqrt{g} G^{\mu\nu} &= \mathbf{J}^a = ie [\varphi^+ \times D^\nu \varphi + \varphi \times (D^\nu \varphi)^+], \\ \frac{1}{g} D_\mu \sqrt{g} D^\mu \varphi &= \frac{\delta V}{\delta \varphi^+}. \end{aligned} \quad (4)$$

Для подтверждения существования вртонов, обозначенных вакуумами, и оценки их энергии применяются уравнения Богомольного 1-го порядка. В пределах σ -модели с лагранжианом типа (2) неабелевы вортонны с (1, 1), (1, 2) и другими парами чисел наматывания (winding numbers) в $SU(2)$ были найдены численно Раду и Волковым [ц12]. Генераторы группы $SU(2)$ обозначаются как $T_{i=1,2,3}$, где T_0 – генератор группы $U(1)$, $-iT_i(\varphi)_j = -\varepsilon_{ijk} \varphi_k$, $-iT_0(\varphi)_j = -i\varphi_j$. Выражение $Q = T_2 + T_0$ есть условие аннигиляции. Струнный генератор есть $T_S = T_3$, он не коммутирует с зарядовым генератором: $[T_S, Q] = [T_3, T_2] = -iT_1$ [ц13]. Здесь $\varphi(\alpha) = e^{-i\alpha T_3} \Phi_0$ также обозначают генераторы. Угловая зависимость между вакуумами есть $Q(\theta) = e^{-i\theta T_S} Q e^{i\theta T_S}$. Тактоидные вихри вращают группу $SU(2)$. В калибровке $U(1)$ могут содержаться стабильные вортонны, а в $SO(3)$ – нет.

Критерий стабильности вортонна включает радиус вихревой петли R , который может быть сравним с теоретическим анализом Казначеева и Ван-дер-Шута, а также с решёточными вычислениями Монте-Карло (МК), выполненными Бэйтсом.

Благодаря применению модели с лагранжианом (2) стало возможным определить равновесную форму тактоидов (Рис. 2).

Динамика вртонов даётся выражением Ландау-Лифшица, включающим диссипацию:

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = \mathbf{m} \times \mathbf{f} - \alpha_d \mathbf{m} \times (\mathbf{m} \times \mathbf{f}), \mathbf{f} \equiv \Delta \mathbf{f} - Q m_z \hat{e}_z, \quad (5)$$

где \mathbf{m} – вектор намагниченности, Q – свободный параметр.

Топологический инвариант, связанный с топологической плотностью n , есть

$$N = \frac{1}{4\pi} \int_V n \varepsilon_{\mu\nu} d\mathbf{r}^3, \quad (6)$$

где V – объём тактоида, \mathbf{r} – его пространство. Динамические характеристики выражаются как:

$$\frac{1}{(\chi H)^4} \left(\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} \right)^2 \sim \alpha_d \left(\frac{1 - \cosh \eta_k \cos \zeta}{\cosh \eta_k - \cos \zeta} \right)^2. \quad (7)$$

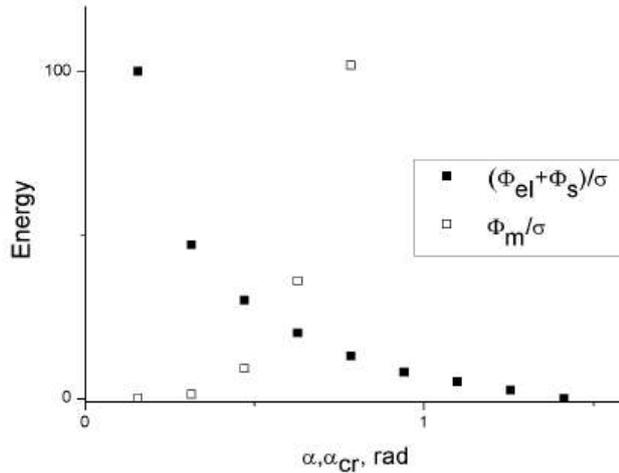


Рис. 2. Конкуренция между упругой и поверхностной энергией тактоида, отнесённая к удельному поверхностному натяжению $\sigma=10^{-3}$ эрг/см².

Результатом построения вортонной модели главы 2 является вычисление геометрии и размеров тактоида, при условии коалесценции в магнитном поле, оценен размер критический тактоида по направлению главной оси ~ 10 нм.

Глава 3 «Доменные стенки в низкотемпературных липидных смесях» посвящена развитию калибровочных решёточных моделей топологических дефектов типа доменных стенок и дислокаций на примере липидных смесей. Анализ фазовых переходов в этих системах проводится в рамках механизма образования топологических дефектов Киббла-Журека и теории Ландау-Зинера (ЛЗ) на решётке, расчёт термодинамических величин выполняется с помощью метода МК [5].

Теория 3 главы построена на анализе экспериментов по неупругой механической спектроскопии [ц14] динамических процессов на нейтральных липидах DMPC (димиристоил фосфатидилхолин), DOPE (ди-олеоил фосфатидилэтаноламин), катионных липидах DDAB (диметилдиооктадециламмоний), DOTAP (ди-олеоил триметиламмоний) и их смесях, DOTAP/DOPE и DOTAP/DMPC в диапазоне частот $10^2 - 10^4$ Гц на подложке. Измерения [ц14] проводились в широком диапазоне температур, начиная с переохлажденного состояния. Данные смеси образуют смектические и нематические фазы, демонстрируют короткие времена релаксации. При криогенных температурах наблюдались слабые частотно-зависимые сдвиги модуля упругости в сторону нагрева, в низкодинамическом режиме пики

кривых релаксации «заслоняются» кривыми типичной гладкой релаксации. В сумме эксперименты свидетельствуют о коллективных короткодействующих движениях липидов. Авторы [ц14] приняли гипотезы о существовании новых неоднородностей микро- и наноразмерной структуры в липидных мембранах, схожих с доменными стенками, или даже новых фаз.

В подобных случаях фазовые переходы непрерывны. Для описания динамики этих переходов предложен механизм Киббла-Журека (КЖ) образования дефектов типа доменных стенок в адиабатическом режиме.

С другой стороны, в контексте изучения эволюции доменных стенок рассматривается ещё одна идейно близкая модель для описания их динамики: модель ЛЗ.

Изначально гамильтониан ЛЗ двухуровневой системы сформулирован для динамических процессов в классических фазовых переходах. Позже он был обобщён на квантовые фазовые переходы.

Тогда можно применить формализм адиабатических квантовых вычислений, или квантовый отжиг (quantum annealing, AQC-QA) с приближением КЖ в отсутствие фрустраций.

Численное моделирование, выполненное в диссертации, позволяет оценить плотность кинков и остаточную энергию, соответствующую 1- d квантовой системе Изинга с временизависимым членом поперечного поля (Рис. 3,4), гамильтониан которой есть [ц15]:

$$H(t) = -\sum_i J_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \Gamma(t) \sum_i h_i \sigma_i^x, \quad (8)$$

где σ_i^x , σ_i^z , – матрицы Паули i -го спина в цепочке. Коэффициенты J_i означают случайные связи между соседними спинами и h_i – случайное поперечное поле.

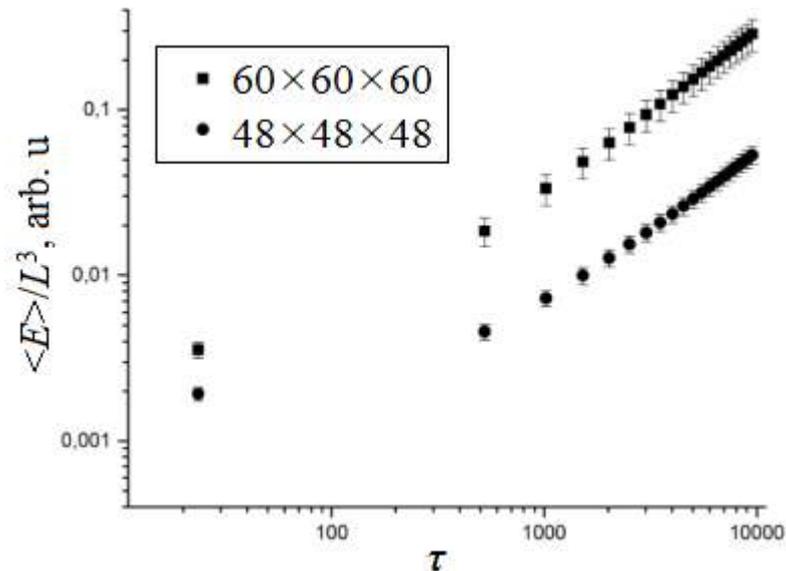


Рис. 3. Средняя остаточная энергия на узле решётки в зависимости от скорости нормализации τ для 2-х решёток, вычисленная методом МК.

Функция времени $\Gamma(t)$ служит для изменения масштаба поперечного поля

при скорости нормализации τ^{-1} :

$$\Gamma(t) = -\frac{t}{\tau}, \tau \in (-\infty, 0]. \quad (9)$$

$$\tilde{H} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} t/\tau_0 & 1 \\ 1 & -t/\tau_0 \end{pmatrix} \quad (10)$$

есть гамильтониан ЛЗ, описывающий эволюцию системы за время t .

В адиабатическом импульсном приближении с эволюцией системы в интервале времени от $-\infty$ до 0 после завершения перехода плотность кинков

$$n = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left\langle \frac{1}{2N} \sum_{n=1}^{n=N-1} (1 - \sigma_n^z \sigma_n^{z+1}) \right\rangle.$$

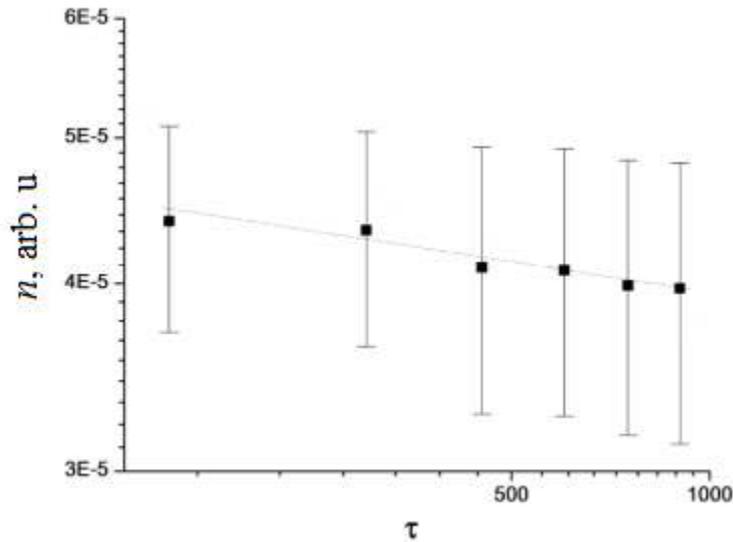


Рис. 4. Плотность кинков n как функция скорости нормализации τ .

Глава 4. «Переходы типа БКТ в различных классах ЛЖК»

В главе 4 исследуются переходы класса БКТ с дислокациями в сшитых эластомерах со смектических фазами и в смазочных композициях с металломезогенами, образующими гексатические фазы. Анализ фазовых переходов в этих системах проводится в рамках модели БКТ и калибровочной теории на решётке, расчёт термодинамических величин выполняется с помощью метода МК.

Раздел 4.1. «Смектические эластомеры с доменными стенками» [9].

Теория раздела 4.1. основана на данных рентгеновской и механической спектроскопии отдельных смектических-А ЖКЭ полисилоксанов с гибкими сшивками. Авторами измерений [ц16] был определён концентрационный фазовый переход из смектической-А в нематическую фазу при увеличении плотности сшивок вплоть до 10 мас.%, а также их перколяционные свойства.

Под воздействием деформаций модуль упругости $E_x = 1,4 \times 10^{-1} \text{ Н} \cdot \text{мм}^{-2}$ в направлении, параллельном слоям, соответствует модулю нематических сетей при одной и той же плотности сшивок. Это обусловлено только энтропией упругости, индуцированной сшивками. Подобный линейный модуль упругости E_z , параллельный нормали к слою (т. е. директору), примерно в 75 раз больше,

чем E_x . Авторами [ц16] предложена модель ЖК эластомера, в которой геометрически вытянутые полимерные сетки вплетаются перпендикулярно, а сжатая сетка – параллельно слоям (Рис. 5). Сшивки предпочтительно ориентируются в направлениях директора.

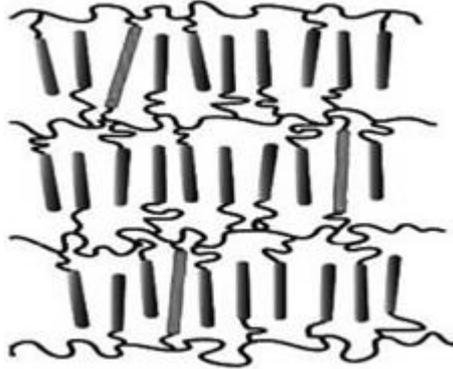


Рис. 5. Схематическое представление 1Т3D-упорядоченной системы эластомер-SmA-сшивки [ц16].

С топологической точки зрения в эластомерах неупорядочение пиннинга и закалки проявляется в виде линейных нетривиальных дисклинациях (3D вихрях или петлях дислокаций), а также в точечных дефектах монопольного типа. Перколяция ассоциируется с конденсацией вихрей в высокотемпературной фазе деконфайнмента [ц17], домены фрактальной размерности этой фазы будут существовать на нецелой решётке, а линия Полякова будет играть роль параметра порядка.

Для перехода плавления 2 рода между фазами SmA–N Дасгупта предложил петлевой инверсный аналог сверхпроводящей модели ХУ. Действие этой модели эквивалентно действию Виллейна, если в анизотропной ХУ модели коэффициент де Жена K_1 равен нулю; Дасгупта вывел отображение статсуммы модели де Жена на модель петли дислокации. Вихрь, как и дислокация с аналогичными свойствами, выражает нетривиальный классический минимум действия теории скалярного поля с нарушенной глобальной симметрией $U(1)$, а модель ХУ является её квантованной версией. В классе универсальности 3D ХУ перколяционные переходы могут описываться через калибровочное поле \mathbf{A} в $U(1)$ на дуальной кубической решётке при критической температуре $\beta_c \sim 0,4542$ во фрактальной размерности D_f .

Для выяснения перколяционных свойств фазового перехода в системе сшитого эластомера SmA, представим переход SmA→N в терминах модели Виллейна и её решёточной версии спинового стекла.

Гамильтониан модели ХУ спинового стекла на кубической решётке есть

$$H_{fXY} = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} [1 - \cos(\theta_i - \theta_j - \mathbf{A}_{ij})]. \quad (11)$$

Эта модель поддерживает вихри, развязывающиеся при высокой температуре через переход Березинского-Костерлица-Таулесса.

На связях решётки, где $A_{ij} \sim -A_{ji}$, магнитные токи связывают центры

решёточных ячеек и подчиняются отношению $A_{ij} = \frac{2\pi}{\phi_0} \int_r^{r_j} d\mathbf{r} \mathbf{A}(\mathbf{r})$.

Замена $\exp(C \cos \varphi_{ij}) \rightarrow \sum_{-\infty}^{+\infty} \exp\{C(\cos \varphi_{ij} - 2\pi n)^2 / 2\}$, проделанная Березинским и Виллейном, позволяет записать статистическую сумму спинового стекла в (11) на оригинальной решётке таким образом

$$Z = \int d\Theta \sum_{p_{ij}=-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\frac{J_{ij}}{2} (\theta_j - \theta_i - 2\pi p_{ij})^2\right\}. \quad (12)$$

Здесь p_{ij} – числа наматывания, θ_i , – фазы на узлах решётки.

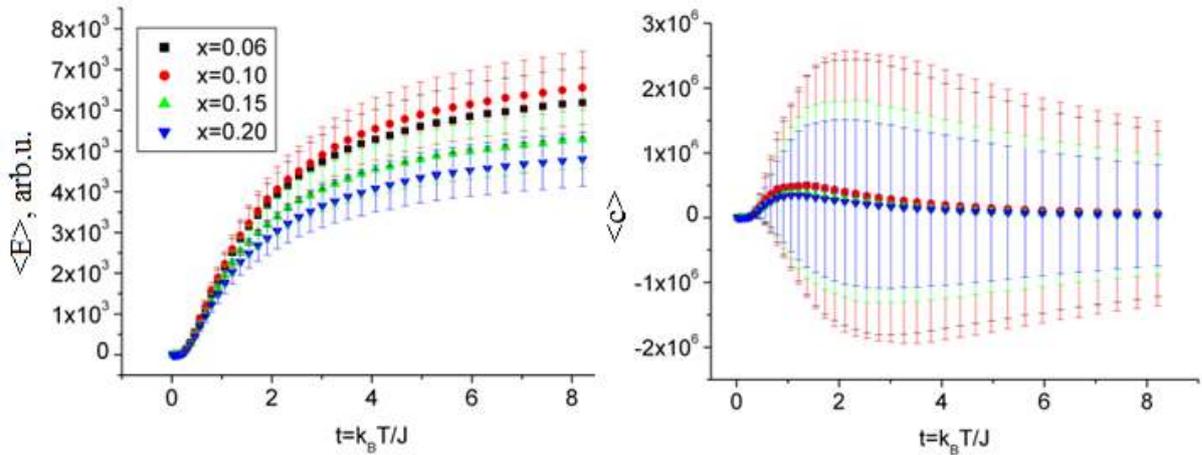


Рис. 6. Температурные зависимости средней энергии (слева) и средней теплоёмкости (справа) при различных концентрациях сшивок x .

Используя технику дифференциальных форм на решётке, можем записать статсумму на дуальной решётке в виде

$$Z^{dual} = \sum_{k \in Z(C^0)} \sum_{l \in Z(C^1)} \hat{J} \exp\{-\lambda' \|dk + l\|^2 - \beta' \|l\|^2\}. \quad (13)$$

Поле токов l привязано к связям, эти «токи» текут вдоль контура C^1 , а «монопольное» поле k привязано к узлам и поддерживает токи вдоль C^0 . Выражение (13) имеет такой же смысл, как $Z_{compact} = Z_{defect} \cdot Z_{noncompact}$.

Для численного моделирования использована решётка размером 48^3 и три типа целых спиновых переменных, соответствующим молекулам смектика (0), полимерной сетке (1) и сшивкам (-1), занимающим узлы кубической решётки.

В системе возникают замкнутые и открытые петли Вильсона. Используются стандартные хорошо известные петлевые алгоритмы. Выражение для теплоёмкости было усовершенствовано с учётом свойств действия Виллейна. Рисунки (6,7) демонстрируют температурные зависимости термодинамических характеристик, полученные численно методом МК.

Для 4-мерной $4N$ калибровочной теории преобразование, связывающее параметры β' , λ' и μ' дуальной решётки с таковыми на исходной, оригинальной, было получено в [ц17].

В случае $3D$ (μ' , μ равны нулю), обратное преобразование этих коэффициентов выполняется применением равенства $\beta' = 1/4 \lambda'$ и наоборот.

На Рис. 6 изображены экстремумы средней теплоёмкости, возникающие при концентрации сшивок $>10\%$. Рис. 7-9 иллюстрируют концентрационные и температурные зависимости термодинамических величин и корреляционных функций на дуальной решётке.

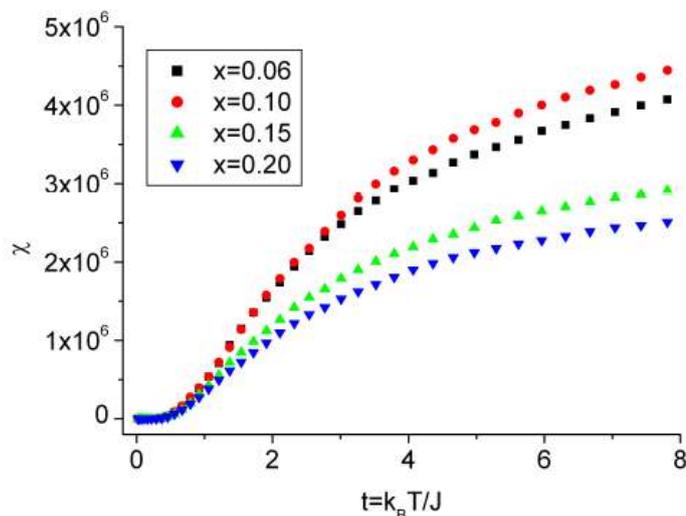


Рис. 7. Зависимость средней магнитной восприимчивости от температуры.

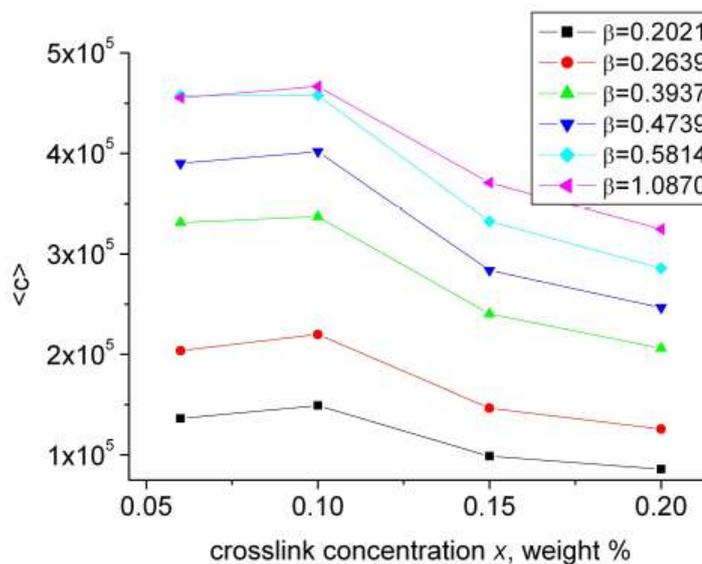


Рис. 8. Зависимость средней теплоёмкости от концентрации сшивок на дуальной решётке при различных температурах в единицах $\beta=1/t$.

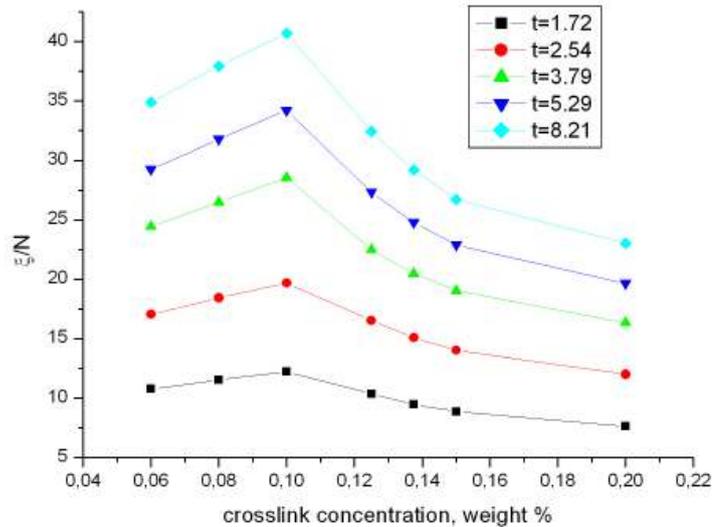


Рис. 9. Зависимость корреляционной длины от концентрации сшивок на дуальной решётке при различных температурах.

Таким образом, для решения задачи о перколяционных свойствах и подтверждения неаффинной природы конфигураций ЖК эластомеров на масштабе волокон мы применили технику решёточных дифференциальных форм, которая была построена на гамильтониане модели спинового стекла $3D$ XY. Основное преимущество этой модели – это понижение размерности системы и появление возможности оценок их термодинамических величин без привлечения громоздких вычислений.

Этот метод надёжно обоснован и является альтернативой приближению реплик.

Раздел 4.2. «Дислокации в смазочных композициях с дискотическими мезогенами» [15, 16, 18, 23, 25, 30, 31].

На основании экспериментальных результатов по диэлектрической спектроскопии и поляризационной оптической микроскопии (Рис. 10-12) проведено теоретическое моделирование фазовых переходов с изменением типа проводимости смазочных композиций на основе Литола-24 и солидола, в состав которых включены мезогенные присадки карбоксилатов меди (II) валерата и изовалерата. Для этих целей адаптируется спиновая модель фазового перехода типа XY БКТ и выясняется корреляция дефектной и электронной структуры смазочных композиций.

Сформулирована модель, отвечающая наличию лиотропного перехода системы в колончатую фазу (или гексатическую фазу, располагающуюся между твёрдой и изотропной фазами), возникновение которой вызывается введением присадок с концентрациями 1,5, 10 и 20 мас.% в базовую смазку.

Несовпадения кривых удельной электропроводности смазочных композиций с валератом и изовалератом меди позволяет принять за основу моделирования термодинамики этих систем гипотезу, что геометрическое положение дислокаций ассоциируется с локализацией присадок, а обнаружение двух типов релаксационных процессов – с протеканием перехода плавления

БКТ из гексатической фазы при повышении температуры. Экспериментально наблюдаемое изменение характера электропроводности указывает на возможность фазового перехода.

Главный результат Костерлица и Таулесса – вывод самосогласованного уравнения для масштабно-зависимой постоянной упругости

$$\varepsilon(r) = 1 + 4\pi^2 y_0^2 K_0 \int_a^r \left(\frac{r'}{a_0} \right)^{4-2\pi U(r')} \frac{dr'}{r'}. \quad (14)$$

Модули упругости для треугольной решётки в отсутствие дислокаций есть $K_0^r = K_0^\theta = K_0 = \frac{1}{2\pi} \frac{\mu_0 B_0}{\mu_0 + B_0} \frac{a_0^2}{k_B T}$.

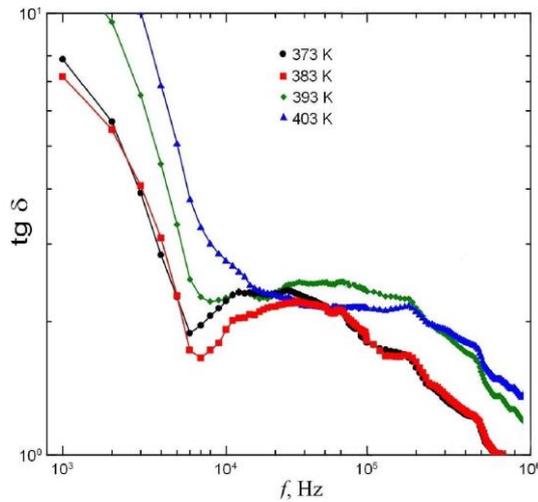


Рис. 10. Тангенс угла потерь системы Литол-24 - валерата Cu(II) 10 мас.% вблизи температуры перехода плавления из гексатической в изотропную фазу.

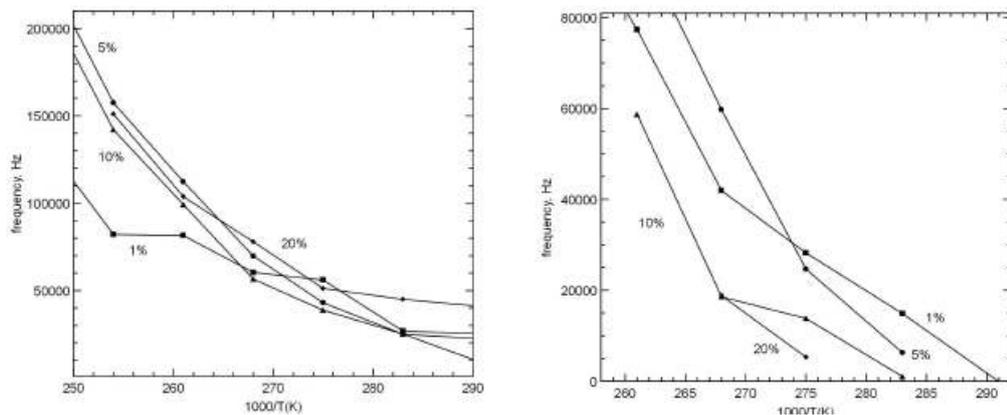


Рис. 11. Функции Аррениуса для смазочной композиции Литол-24/валерат Cu(II) (слева) и Литол-24/изовалерат Cu(II) (справа).

Треугольная решётка, на которой и формируются дислокации, является дуальной к гексагональной решётке (Рис. 13), т.е. решётке исследуемой дискотической фазы [ц18].

Гамильтониан дислокаций модели БКТ, включающий векторы Бюргерса \mathbf{b}_i на треугольной решётке, есть

$$H_D = 2\pi \left\{ \sum_{\langle ij \rangle} K_0^n \mathbf{b}^i \cdot \mathbf{b}^j \ln \left(\frac{r^{ij}}{a_0} \right) - K_0^\theta \left[\frac{(\mathbf{b}^i \cdot \mathbf{r}^{ij})(\mathbf{b}^j \cdot \mathbf{r}^{ij})}{(r^{ij})^2} - \frac{1}{2} \mathbf{b}^i \cdot \mathbf{b}^j \right] \right\} + \ln y_0 \sum_i (b^i)^2. \quad (15)$$

Для вычислений МК в терминах решёточных переменных призматической решётки он преобразован к виду

$$H(\{n\}) = 2\pi \sum_{\langle ij \rangle} b_\mu^i \varepsilon_{\mu\alpha} b_\nu^j \varepsilon_{\nu\beta} M_{\alpha\beta}(\mathbf{r}^{ij}). \quad (16)$$

Его статсумма равна $Z = \sum_{\{n_\alpha\}} \prod_{n=1}^6 \left(\frac{1}{n_\alpha!} \right) \int \prod_{i=1}^N d^2 r^i \left(\frac{y}{a_0^2} \right)^N e^{H(\{n\})}$.

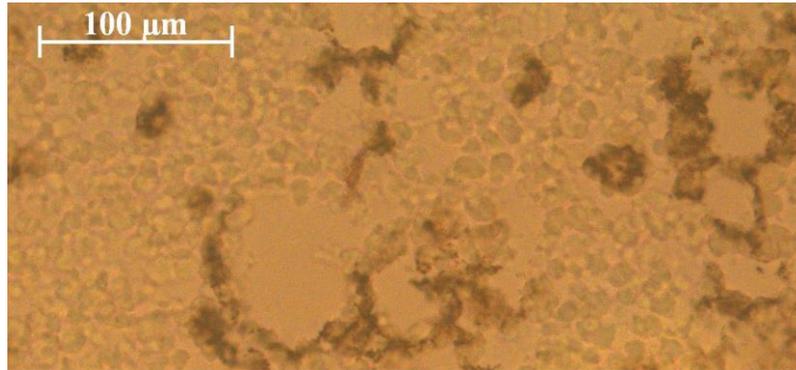


Рис. 12. Микрофотография системы Литол-24/изовалерат Cu(II) 10 мас.%, $T = 305 \text{ K}$ [23].

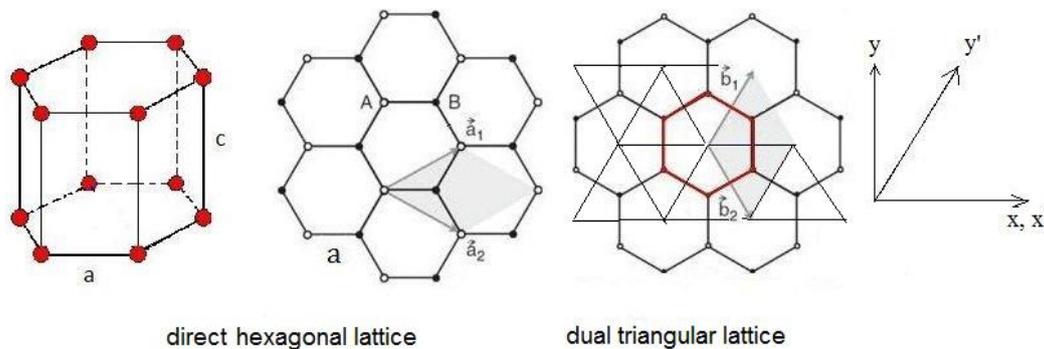


Рис. 13. Конфигурация оригинальной гексагональной решётки графена и дуальной треугольной решётки дислокаций.

На Рис. 14 показаны результаты моделирования МК на дуальной решётке для термодинамических величин, обнаружили температурные переходы. Увеличение абсолютных значений дефектных составляющих (два первых слагаемых гамильтониана (15)) приводит к сдвигу переходов в направлении повышения температуры и делает пики более резкими.

В согласии с экспериментальным данным и теорией БКТ дислокации препятствуют температурному плавлению гексатической фазы.

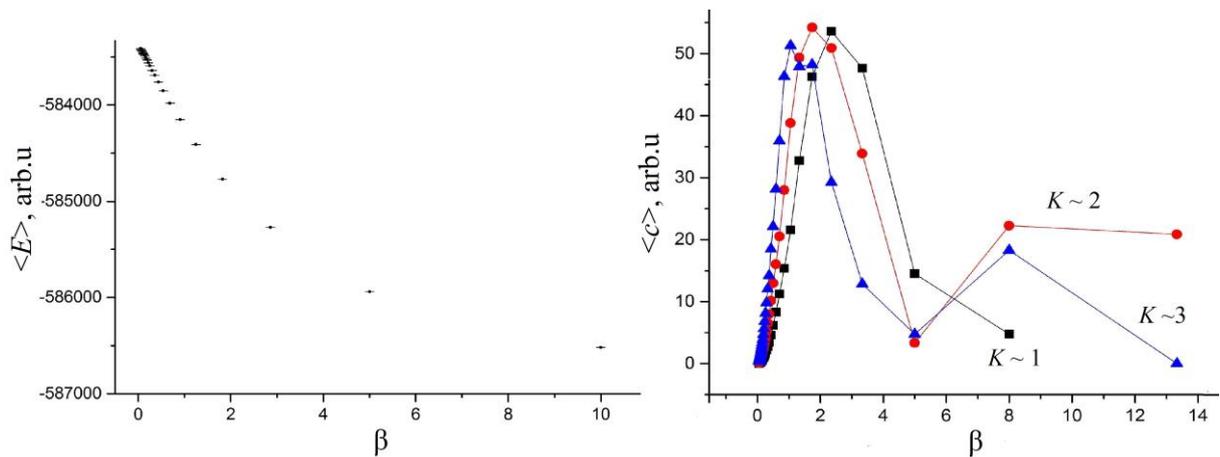


Рис. 14. Температурные зависимости средней энергии на дуальной решётке при $K \sim 1$ в одноконстантном приближении (слева) и удельной теплоёмкости на дуальной решётке при различных значениях коэффициентов Франка K (справа). Погрешность вычислений МК не показана.

Глава 5 «Полимерные нанокompозиты с дефектными структурами»

посвящена топологическим особенностям в проводящих полимерных нанокompозитах с различным структурным и химическим составом наполнителей. Исследуется влияние морфологии нанокompозитов на их электрические и механические свойства, предлагаются следующие интерпретации агрегации наночастиц: модель образования узлов для полимерного нанокompозита на основе изотактического полипропилена (ИПП) с углеродными нанотрубками, модель микрополярной упругости для систем ИПП-нанографен, модель дисклинаций и центрального монополя в неевклидовом пространстве для систем ИПП-фуллерен C_{60} и модель Су-Шриффера-Хигера (СШХ) для полимера, допированного углеродными наночастицами и нанопроволоками из неорганических полупроводников.

Раздел 5.1. «Экспериментальные результаты МУРН» описывает процедуры измерений и обработки данных МУРН, выполненных на спектрометре ЮМО на реакторе ИБР2 ЛНФ им. И.М. Франка, ОИЯИ, в г. Дубна Российской Федерации на образцах ИПП с углеродными наполнителями различных типов. Описание эксперимента МУРН и результаты обработки данных изложены в [21, 22, 28, 33].

Раздел 5.2. «Узлы в изотактическом полипропилене, допированном одностенными углеродными нанотрубками (ОУНТ)».

Таблица 1. показывает размерные параметры наночастиц ОУНТ, полученные на основании измерений МУРН образцов ИПП с ОУНТ в различных концентрациях 1,2, 2,6 и 8 мас.%, изначально диаметр ОУНТ составлял 1,4 нм, а длина – более 5 мкм.

Таблица 1. Размерные параметры наночастиц и агрегатов ОУНТ

Образец с содержанием ОУНТ, мас.%	R_c ОУНТ, нм	R_c агрегатов ОУНТ, нм
1,2	5,6	12,3
2,6	5,1	17,2
8	5,8	18,2

После реконструкции формы агрегатов нанонаполнителей обнаружена полидисперсность систем; ОУНТ объединяются в объёме ИПП в виде фрактальных плотных агрегатов с неровной поверхностью, размеры которых в несколько раз превышают исходные размеры ОУНТ (Рис. 15). Рассчитанное значение доли объёмного содержания ОУНТ в форме частиц и в форме агрегатов для всех образцов оказалось равным друг другу.

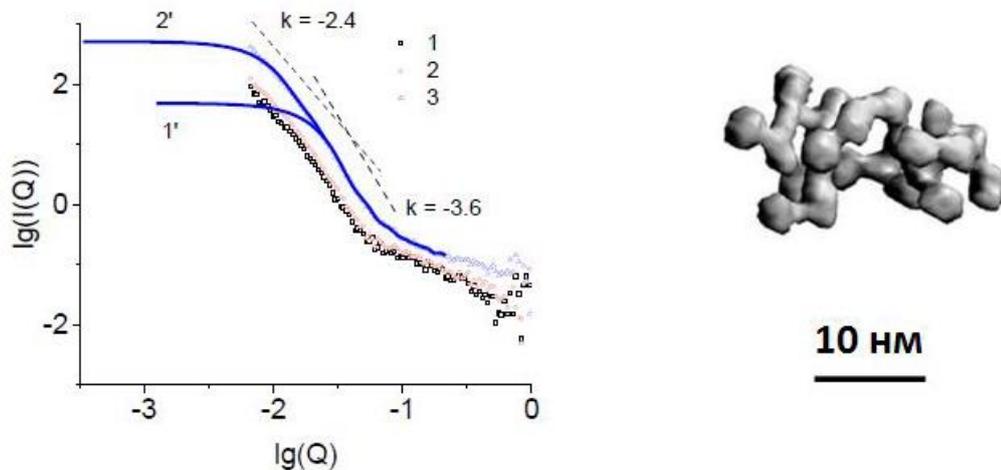


Рис.15. Экспериментальные кривые МУРН и реконструированная форма рассеивающих частиц ОУНТ в ИПП [21].

В объёме ИПП нанотрубки скручиваются в клубки и узлы и становятся более упакованными (Рис.15), форму рассеивающих частиц (агрегатов) проще всего интерпретировать как «переплетения» соседних ОУНТ по аналогии с «переплетениями» макромолекул полимера при более высоких концентрациях, чем концентрация кроссовера.

Узлы и зацепления как топологические дефекты обуславливают мезоморфизм, подчиняющийся законам сохранения трёх топологических инвариантов: инварианту Гаусса, полиномам Александра и асимптотическому инварианту Хопфа. Последний аналогичен действующему в магнитной гидродинамике (МГД) [ц19], описываемой уравнением движения

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = \nabla \times (\vec{v} \times \vec{H}) - \nabla \times v(\nabla \times \vec{H}). \quad (17)$$

В МГД инвариант Хопфа записывается как

$$h = \int_{\Omega} \vec{A} \cdot \vec{H} dV, \quad (18)$$

где Ω – полный объём системы, \vec{A} – вектор-потенциал магнитного поля \vec{H} ($\vec{H} = \nabla \times \vec{A}$).

Используя универсальное определение фрактала $f(R) = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i,j} \theta(R - |x_i - x_j|)$, где N – общее число точек, x_i – их координаты, θ –

ступенчатая функция, можно сформулировать топологию агрегации в терминах калибровочного монопольного газа со связью фрактала с механизмом конфайнмента [ц17]. Трубка монопольного тока играет роль струны Дирака, а фрактальная размерность $D_f = N_l/N_s$ служит параметром порядка (N_l – число рёбер, N_s – число узлов, принадлежащих кластерам).

Гамильтониан, связанный с потенциалом A формулы (18), в котором магнитное поле аппроксимируется системой магнитных силовых трубок с внутренним скручиванием, с характеристиками пере замыкания и склеивания, можно записать в виде

$$\tilde{H} = \sum_1^{N-1} (r_{i+1} - r_i)^2 + J \sum_1^N (r_i^2 - b^2)^2 + \mu_1. \quad (19)$$

Здесь r_i – позиция линка на решётке размера N , включающее ориентацию, первое слагаемое имеет смысл взаимодействия ближайших соседей, а второе включает локальные взаимодействия на углах связи, J , b – параметры, хипотенциал μ_i несёт смысл среды ИПП. Выражение (19) сформулировано в духе теории Флори. Монопольные токи в трубке имеют тот же физический смысл, что и в МГД, и текут по плакетам, натянутым на трилистник (полином Александра 3_1), он выбран в моделировании как ожидаемый в подобных задачах (Рис. 16). Статсумма монопольных токов есть $Z = e^{-H/\beta}$. Здесь $\beta = 1/k_B T$, β – обратная температура, k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура.

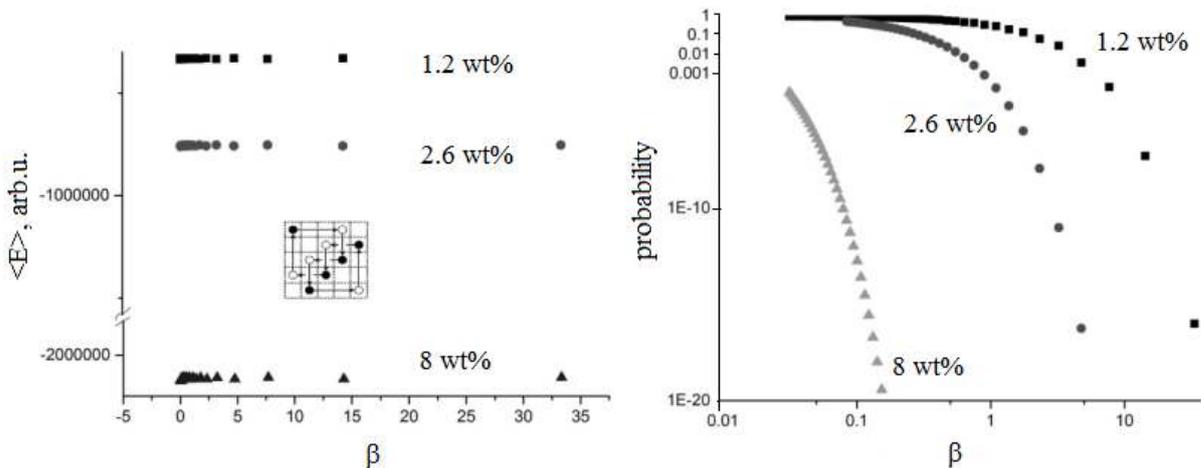


Рис. 16. Зависимости энергии конфигураций для монопольных токов по трилистнику и зависимости вероятности образования узлов типа трилистника от обратной температуры β при различных концентрациях ОУНТ, вычисленные методом МК с погрешностью 10^{-5} .

Известно, что концентрация ОУНТ порядка 1,68 мас.% соответствует порогу перколяции системы ИПП/ОУНТ. В самом деле, при концентрациях ОУНТ, 1,2 и 2,6 мас.% наблюдается высокая вероятность скручивания в упорядоченные структуры, узлы, во всем диапазоне температур, композит с 1,2 мас.% ОУНТ уже существует в области конфайнмента. А образец с концентрацией 8 мас.%

ОУНТ может демонстрировать скручивание нанотрубок в более сложные узлы.

Таким образом, адаптированная модель МГД и решёточный метод МК для определения свойств перколяции адекватно отображают картину самоорганизации системы ИПП/ОУНТ. Они могут быть распространены на подобные задачи и использованы для предсказания необходимых концентраций наноразмерных наполнителей при синтезе новых полимерных композитов.

Раздел 5.3. «Дисклинации в системах ИПП/ГНП и ИПП/нанографит». В разделе в рамках теории микрополярной упругости (или теории Коссеров) с фрактонным механизмом первого типа проводится построение модели эволюции линейных дефектов дисклинаций в полимерных нанокompозитах на основе ИПП в присутствии наполнителей ГНП с концентрациями 0.7 и 1.8 мас.% и наногрaфита с концентрациями 1.5 и 3.6 мас.% [33].

Действие теории на языке плотностей фрактонного заряда ρ , плотности фрактонных токов J_{ij} и тензора обратного модуля упругости C_{ijkl}^{-1} записывается как [ц20]:

$$S = \int d^2 x dt \left[\frac{1}{2} \tilde{C}^{-ijkl} E_{\sigma}^{ij} E_{\sigma}^{kl} - \frac{1}{2} B_i B^j - \rho \phi - J^{ij} A_{ij} \right], \quad (20)$$

где компоненты электрического и магнитного поля есть $E_{\sigma}^{ij} = -\partial_i A^{ij} - \partial^i \partial^j \phi$ и $B_i = \varepsilon_{jk} \partial^j A^{ki}$.

Выполнены численные оценки температурных и концентрационных зависимостей характеристик упругости и термодинамики в рамках решёточного алгоритма МК в базисе дефектов дуальной решётки (Рис. 17).

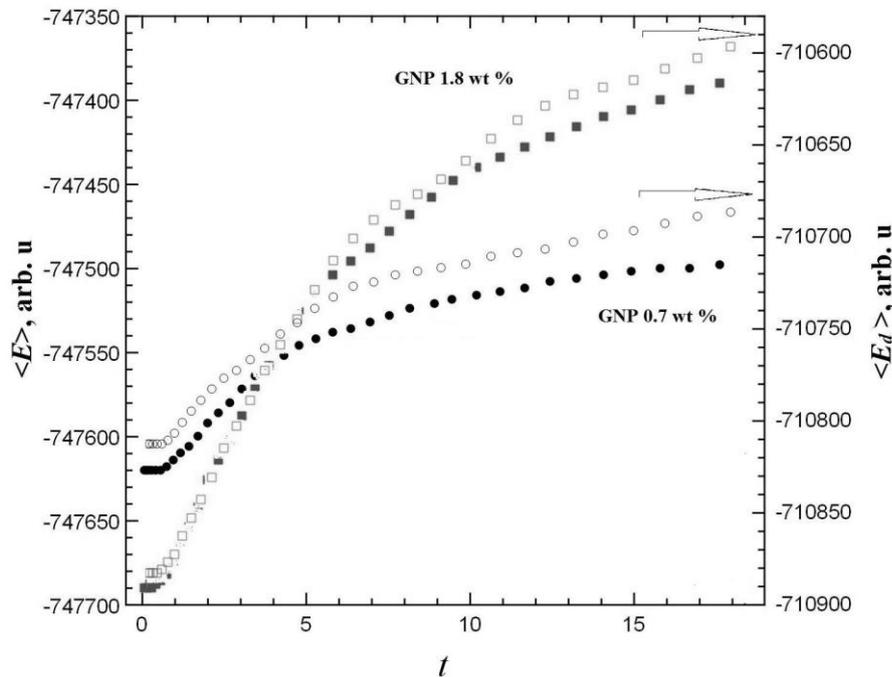


Рис.17. Температурные зависимости средней энергии наночастиц (заштрихованные символы, левая ось ординат) и дисклинаций (пустые символы, правая ось) при концентрациях ГНП 0.7 мас.% (кружки), 1.8 мас.% (квадратики), полученные в моделировании методом МК на дуальной решётке с точностью 0.1%, $N = 941192$ с учётом многослойной структуры частиц.

Раздел 5.4. «Дисклинации и монополи в кластеризации фуллерена C_{60} в матрице ИПП» [28].

В терминах двумерной «гравитационной» модели, построенной на метрике Гёделя, даётся интерпретация наблюдаемой в эксперименте МУРН [21] агрегации наночастиц фуллерена C_{60} системы ИПП/фуллерен C_{60} . Фуллерен C_{60} может быть представлен свёрнутым из листа графена сфероидом с 12-ю поверхностными дисклинациями и центральным монополем, поле которого играет роль гравитации при свёртывании листа графена [ц21], в то же время известны модели линейных дефектов, в которых упругое поле может быть описано как в терминах монополя Дирака, так и в терминах монополя т'Хоофта-Полякова.

Представляемая модель основана на связи механических характеристик образца композита ИПП/фуллерен с дисклинациями, в данном случае, объекта с искривлённой поверхностью, с его электрическими свойствами [ц22].

В задачах исследования геометрических свойств фуллерена известны точные решения уравнения Дирака в пространстве Гёделя (Минковского) [ц23], и в пространстве Римана [ц24]. Большинство задач об электронных состояниях молекулы фуллерена решается в пределе сильной связи, который зачастую слабо чувствителен к виду симметрии, эти возможности калибровочных теорий дают адекватные результаты при сравнении с измеряемыми спектров.

Уравнение Дирака в пространстве Гёделя есть [ц21, ц23]:

$$-i\hbar v_f \sigma^a e_a^\mu (\nabla_\mu - iA_\mu) \psi = 0, \quad a = 0, 1, 2, \quad \mu = t, \theta, \phi. \quad (21)$$

где обозначено v_f – скорость Ферми, σ^a – матрицы Паули, e_a^μ – базисные тетрады пространства-времени. $\nabla_\mu = \partial_\mu - \Gamma_\mu$.

Для линейный элемент упругого пространства-времени есть [ц23]

$$ds^2 = - \left[cdt + \frac{\alpha \Omega \sinh^2(lr)}{c l^2} d\phi \right]^2 + \frac{\alpha^2 \sinh^2(2lr)}{4l^2} d\phi^2 + dr^2 + dz^2. \quad (22)$$

Здесь α относится к угловому сектору, вырезанного или вставленного из 2-х конических дефектов на сфероиде (см. схему в [ц24]), $\alpha = 1 \pm \lambda/2\pi$, $\lambda = \pm N\pi/3$, N – целые в интервале (0,6), $0 \leq r < \infty$, азимутальный угол $0 \leq \phi \leq 2\pi$, $-\infty < (z, t) < \infty$, Ω – член спиновой связности [ц24]. Условие $0 < \alpha < 1$ означает удаление секции сферы для образования двух топологических дефектов в противоположной точке [ц23]. Когда $l^2 = \Omega^2/2$ и $\alpha=1$, получается решение из оригинальной работы Гёделя 1949 г.

Вблизи Ферми-точки в размерности (2+1) метрика Гёделя в сферических координатах (r, ϕ, z, t) в условиях низких энергий и вращения вокруг оси z представлена как [ц23]:

$$ds^2 = - \left[v_f dt + \frac{4\alpha \Omega R^2}{v_f} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) d\phi \right]^2 + R^2 (d\theta^2 + \alpha^2 \sin^2 \theta d\phi^2), \quad (23)$$

где R – радиус фуллерена, полярный угол на сфере $0 \leq \theta \leq \pi$. Если $\Omega = 0$ и $\alpha = 1$, из (3) получается метрика Минковского.

Метрика (23) описывает упругий континуум сферической геометрии с дисклинацией, т.е. дисклинация ассоциируются с кривизной пространства-времени Гёделя. Проекцией неабелева центрального монополя являются дисклинации на поверхности сфероида-фуллерена.

Вычисление в локальном базисе спиновой (на группе $SU(2)$) и спинорной связности и редукция матриц Дирака в матрицы Паули дают возможность написать ковариантное уравнение Дирака (21) в псевдоспиновых компонентах с фиктивным центральным монополем. В континууме его неабелево калибровочное поле есть $\oint A_\mu dx^\mu = \frac{\pi}{2} \tau^2$, где τ_2 – вторая матрица Паули. Незатухающие монопольные токи соответствуют киральным магнитным струнам, пронизывающим фуллерен.

Задача сводится к вычислению токов фиктивных монополей, взаимодействующих через струны в фазе конфайнмента в $D=2$. В решёточных переменных с учётом метрики гамильтониан калибровочного поля на рёбрах решётки L записывается в виде:

$$H = \frac{1}{2\beta_0} \sum_{x,l} E_{x,l}^2 + \beta_1 \sum_{x,l,k} \{1 - \cos(A_{x,l} + A_{x+l,k} - A_{x+k,l} - A_{x,k})\} - \sum_{x,l} \phi_x(E_{x,l} - E_{x-l,l}). \quad (24)$$

Здесь $x = \cos^2(\theta/2)$, под l здесь обозначены значения $1 \dots (D-1)$, ϕ_x – вектор-потенциал (6), коэффициент β_1 соответствует величине натяжению струны, фигурирующей в действии, из которого получена формула для гамильтониана (24). Аргументом функции \cos является величина фазы, соответствующая каждому плакету решётки, пропорциональная тензору напряженности.

Для вычисления силы монопольного тока, натяжения струны, энергии дисклинаций фуллерена C_{60} (или монополей т'Хоофта-Полякова) использовался метод максимальной абелевой проекции (МАП) $SU(2) \rightarrow U(1)$, определяемой как $(\partial_\mu \pm igA_\mu^3)A_\mu^\pm = 0$ и анзацем т'Хоофта $A_\mu^a = \frac{1}{g_c} \bar{\eta}_{\mu,\nu}^a \partial_\nu f(x)$, где g_c – константа связи, $\bar{\eta}_{\mu,\nu}^a$ – символ т'Хоофта, а функция $f(x)$ для конфигурации N -монополей есть

$$f(x) = f^{N-1}(x) = \ln \left[1 + \sum_{i=1}^N \frac{\rho_i^2}{(x-x_i)^2} \right], \quad (25)$$

ρ – размер монополя, r – пространственный радиус, где x_i – позиция центра i -монополя.

Оценивалась фрактальная размерность на решётке и линия Полякова как параметр порядка, фазе конфайнмента он характеризует кластеризацию монополей.

Вычисления гамильтониана (24) с использованием решёточного метода Монте-Карло проводилось на дуальной к простой кубической решётке 96^3 размером $a = 0,7$ нм, абсолютное значение которого происходит из геометрии молекулы фуллерена (максимальное расстояние между центрами двух соседних фуллеренов). Величинам β присваивались значения фиксированных коэффициентов. Получена температурная зависимость средней энергии монопольных токов при различных концентрациях монополей. Поведение этой

величины характерно для конденсации мономеров в заданном объёме, также наблюдается ее зависимость от концентрации фуллерена C_{60} в матрице ИПП, в согласии с экспериментально наблюдаемыми и расчетными значениями.

Раздел 5.5. «Модели проводящих состояний в полимерных нанокompозитах с неупорядоченными массивами неорганических полупроводников».

В работе [19] выполнено численное моделирование методом МК на решётке проводящих свойств полимерных композитов, составленных допированием полимерной матрицы углеродными нанотрубками (УНТ) и нанопроволоками из III-IV GaAs. Здесь применяется модель Су-Шриффера-Хигера (СШХ), которая может быть принята универсальной для всех компонентов этой тройной системы. Эксплуатационные параметры задаются в зависимости от назначения в последующих расчётах. Моделирование проводящих характеристик мотивировано требованиями оптимизации геометрии и структуры новационных фотовольтаических устройств.

Модель СШХ для простейших полимеров и УНТ основывается на уравнении Шрёдингера для проводящих состояний, которые обеспечивает единственный π -электрон углеродной связи.

Вычисляем гамильтониан модели СШХ в виде

$$H_{SSH} = \sum_i \frac{1}{2} M_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 + \sum_{ij} \frac{K}{2} \left[b_{ij} - b_{ij}^0 - \frac{4\sqrt{\gamma}\alpha}{\pi K} \right] - \sum_{ij} [\gamma t_0 - \sqrt{\gamma} a (b_{ij} - b_{ij}^0)] (C_i^+ C_j + C_j^+ C_i) - \varepsilon \sum_i C_i^+ C_i \quad (26)$$

Здесь M_i и \mathbf{r}_i – масса и положение вектора на i -м атомном узле, $b_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ – длина связи между атомными узлами; b_{ij}^0 – фиктивная переменная, K – упругая постоянная, t_0 – пробный прыжковый интеграл, α – линейная электрон-фононная константа связи между узлами i и j , C_i^+ и C_i операторы рождения и уничтожения π -электрона на i -м узле соответственно.

Решёточные параметры, такие как элементарная ячейка полимера и нанопополнителей, т. е. одностенных УНТ, и прыжковые интегралы взяты из литературных источников. Первая сумма в (26), выраженная как кинетическая энергия электронов, играет ключевую роль в проводимости.

С помощью метода МК с алгоритмом Метрополиса вычислены значения гамильтониана (26) в спиновых переменных, используются нормализованные параметры, постоянная Планка, масса электрона m_e , постоянная Больцмана $k_B = 1$, где $\beta = 1/T$ обозначает обратную температуру, а T есть абсолютная температура, относящаяся к некоторому коэффициенту при энергии. Используется простая кубическая решётка размером $98 \times 98 \times 98$. Точность вычислений МК равна 0,001 %.

Вычисления энергии и других термодинамических параметров выполняются при концентрациях УНТ 1, 2 и 3 мас.%, нанопроводов 0,5 мас.% (типичные пороги перколяции для композитов систем «полимер/УНТ» ожидаются при 2 мас.% нанотрубок).

На Рис. 18 показаны результаты, основанные на зависимостях энергии от проводимости и температуры. Верхние кривые изображают полную энергию

системы полимер/нанопроволоки/УНТ, а нижние почти горизонтальные кривые, вычислены только с учётом потенциальной энергии, которая соответствует системе полимер/УНТ.

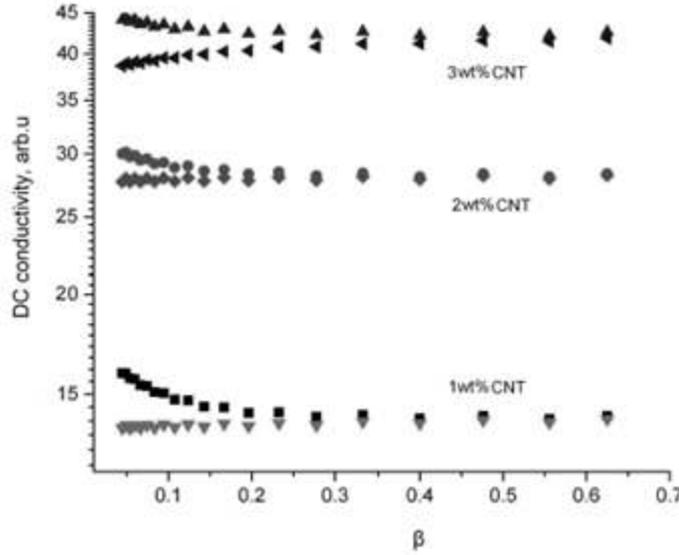


Рис. 18. Температурная зависимость проводимости при различных концентрациях углеродных нанотрубок.

Глава 6. «Самодвижущиеся агрегаты» посвящена изучению диссипативных самодвижущихся агрегатов нематиков в присутствии топологических дефектов дисклинаций на искривлённых поверхностях [14, 23].

Раздел 6.1. «Теория упругости и калибровочная теория с линейными дефектами».

Представлен общий геометрический подход калибровочной теории на примере активных нематиков с линейными дефектами.

Согласно теории Эриксона-Лесли, гидродинамическая модель нематика в режиме тока включает уравнения Навье-Стокса и уравнения нематодинамики соответственно (27)

$$\rho_0 \frac{\partial v_k}{\partial t} = -\partial_k P + \eta \nabla^2 v_k + \alpha \partial_j (n_j n_k) + \partial_j \left(\lambda_{ijk} \frac{\delta F}{\delta n_i} \right), \quad (27a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0, \quad (27b)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} = \lambda_{ijk} \partial_j v_k - \frac{1}{\gamma_1} \left[\frac{\delta F}{\delta n_i} - \left(\frac{\delta F}{\delta \hat{n}} \cdot \hat{n} \right) n_i \right]. \quad (27b)$$

Материальные производные векторных полей директора и поля скоростей задаются выражениями

$$\frac{Dv_k}{Dt} = \frac{\partial v_k}{\partial t} + v \cdot \nabla v_k, \quad \frac{Dn_k}{Dt} = \frac{\partial n_k}{\partial t} + v \cdot \nabla n_k, \quad (28)$$

где $\lambda_{ijk} = \left(\frac{\lambda+1}{2} \right) n_j \delta_{ik} + \left(\frac{\lambda-1}{2} \right) n_k \delta_{ij} - \lambda n_i n_j n_k$.

Упругая энергия Озеена-Франка одноосного нематика есть:

$$F = \frac{1}{2} \int_V [K_1 (\nabla \cdot \mathbf{n})^2 + K_2 (\mathbf{n} \cdot (\nabla \times \mathbf{n}))^2 + K_3 |\mathbf{n} \times (\nabla \times \mathbf{n})|^2] dV . \quad (29)$$

она включает упругие константы K_i , связанные с растяжением, кручением и изгибом. V – объём области, занятой активным нематиком. Для простоты используем одноконстантное приближение $K_1 = K_2 = K_3 = K$. Понятие динамических дисклинаций в калибровочном приближении Кадич и Эделена (КЭ) позволяет также изучать упругие свойства материала с нелинейными дефектами. Цель калибровочной теории – преобразовать концепцию силы посредством геометрического подхода связности. Этого преобразования будет вполне достаточно, если требуется обнаружить наличие потока, индуцированного эволюцией дефектных конфигураций в самоорганизующихся нематических коллоидах.

В динамике дефектов и согласно теории КЭ матрица градиента деформации должна быть заменена тензором искажения. Осиповым [ц25] было найдено аналитическое решение монополярного типа для дисклинаций, ассоциированное с лагранжианом в $SO(3)$.

Для директора нематика неабелева группа вращений $SO(3)$ лагранжиана локально изоморфна группе $SU(2)$.

В абелевой проекции $3D$ на $U(1)$ получаем лагранжиан

$$L = \frac{1}{g^2} G_{\mu\nu}^2 + |D_\mu \Phi|^2 + \lambda_2 (|\Phi|^2 - 1)^2 \quad (30)$$

с монополярным полем Φ и затравочным зарядом g , $D_\mu = \partial_\mu + iB_\mu$. $G_{\mu\nu} = \partial_\mu B_\nu - \partial_\nu B_\mu$, где B_μ – дуальное калибровочное поле, аналогичное электромагнитному полю $G_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu\alpha\beta} (\partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha)$, где $\epsilon_{\mu\alpha\beta\nu}$ – символ Леви-Чивиты, A_i – обычное калибровочное поле, λ_2 – коэффициент при самодействии этого скалярного поля. Поле $G_{\mu\nu}$ соответствует диссипативной и полной кинетической энергии.

Это поле, как и число Эриксона, могут быть введены в (20) как параметры. Все монополи взаимодействуют трубкой тока через кулоновский потенциал идентично дисклинации с ядром. Статсумма для монополярных токов, протекающих между двумя бужумами в отдельной капле нематика, сформулирована в терминах дифференциальных операторов (Приложение 1.).

$$Z = const \sum_{\substack{*j \in Z(C_{k+2}) \\ \partial_j=0}} \exp\{-4\pi^2 \beta(j, \Delta^{-1} j)\} \quad (31)$$

Дуальные токи, вычисленные по модулю 2π , равны

$*j = \frac{1}{2}\pi (|\varphi_1 - \varphi_2|_{2\pi} + |\varphi_2 - \varphi_3|_{2\pi} + |\varphi_3 - \varphi_4|_{2\pi} + |\varphi_4 - \varphi_1|_{2\pi})$. На Рис. 19 изображена одна из наблюдаемых термодинамических величин, теплоёмкость, вычисленная на дуальной решётке с самодуальными условиями, как и калибровочное поле A_i , отражённое в гидродинамическом параметре, числе Эриксона $Er = \gamma_1 \nu r_0 / K$, где γ_1 есть вращательная вязкость поля директора жидкого кристалла, задаваемая выражением $\gamma_1 = \alpha_3 - \alpha_2$, где α_2 и α_3 – коэффициенты Лесли. Величина ν есть скорость в положении вращения r_0 в (27). Второй стандартный параметр модели – химический потенциал.

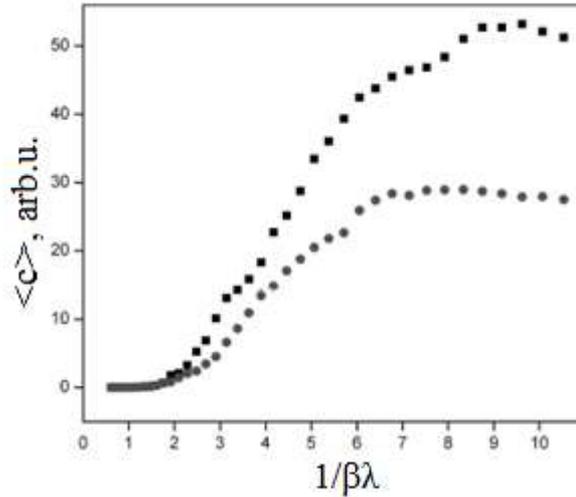


Рис. 19. Температурная зависимость теплоёмкости для двух кубических решёток размерами 48^3 (квадратики) и 60^3 (кружки), ошибки вычислений не показаны. Число Эриксона Er произвольно выбрано равным 10, а химический потенциал $\mu=0,1$.

В терминах теории струн это означает, что ожидаемый переход из нематической в изотропную фазу ($N \rightarrow I$) соответствует переходу «конфайнмент-деконфайнмент». По сравнению с «пассивными» нематиками этот переход сдвинут к более высоким температурам (Рис. 19) демонстрирует гладкий экстремум и некий пороговый характер при повышении температуры.

Раздел 6.2. «Решёточный гамильтониан активных нематиков с дисклинациями на ориентированных поверхностях» [20].

Исходя из действия на флуктуирующих поверхностях $S=S_{el}+S_{gauge}+S_{fl}$ был построен гамильтониан дисклинаций

$$H_d = \frac{1}{2} J_1 D_{ab}^i k^{ac} k^{bd} D_{cd}^i + \frac{1}{2} J_2 F_{ab} g^{ac} g^{bd} F_{cd}, \quad (32)$$

S_{fl} – действие типа Хельфриха для свободно флуктуирующих поверхностей (Поляков, 1977).

В вычислениях методом МК токи дефектов связаны с динамическими калибровочными полями и продемонстрирована возможность наблюдать ряд фазовых переходов типа БКТ в любом типе активных систем: на подложке, на сферических поверхностях, мембранах и др. искривлённых поверхностях в группе симметрии дисклинаций $SO(2)$, Рис. 20.

В исключительном случае тактоидных поверхностей активных нематиков требуется вводить дополнительное калибровочное поле, связанное с бужумами на полюсах тактоидов.

Таким образом, было продемонстрировано, что топологические дефекты запускают механизмы активного течения, которые могут влиять на электрические, механические и др. свойства активных ЖК материалов.

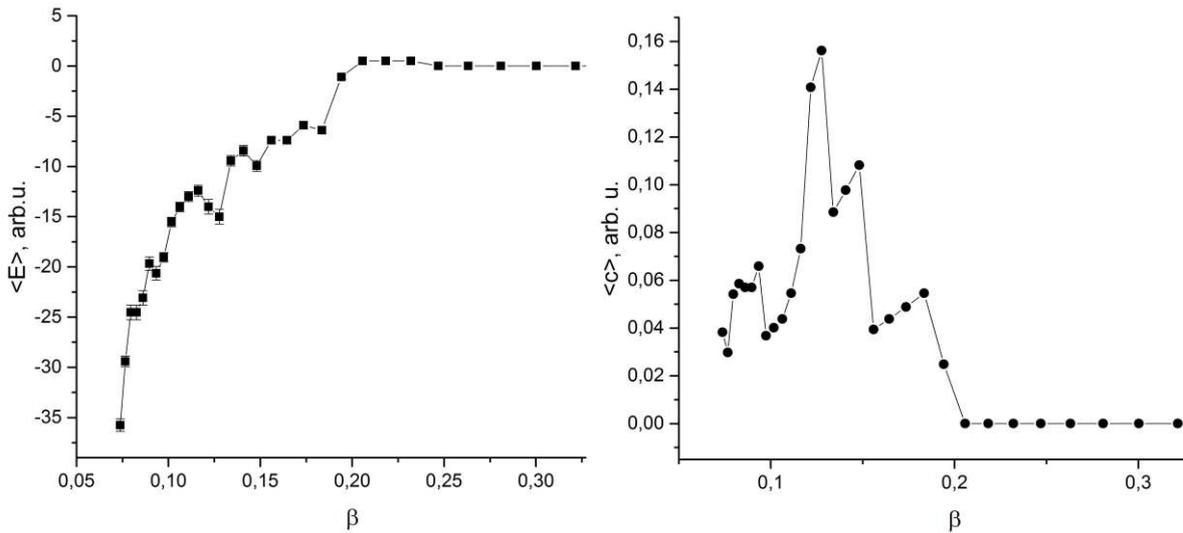


Рис. 20. Температурная зависимость средней энергии (слева) и теплоёмкости системы коллоидных активных нематиков с дисклинациями, эволюционирующих на их сферических поверхностях.

Раздел 6.3. «Модель Су-Шриффера-Хигера и анализ топологических состояний в лиотропных системах с диссипацией» [32].

В этом разделе исследуются активные ЖК системы, для подобных систем динамику можно моделировать как диффузионный процесс, подчиняющийся уравнению Шрёдингера с неэрмитовым гамильтонианом и токовой теореме Кирхгофа электрической цепи. В связи с наличием нелинейных параметров модельной цепи применима теория осцилляторов Ван-дер-Поля.

При определённой настройке параметров электрической цепи механизм Ван-дер-Поля (ВдП) в активных ЖК системах может запускать топологические моды, он допускает нелинейные, бифуркационные режимы, обеспечивающие необратимую динамику. И тогда коэффициенты Лесли и времена релаксации, действительные для консервативных («пассивных») систем, меняют свои зависимости при появлении активной силы в поле скоростей, связанным с вектором директором нематика. Для кинетических коэффициентов активных НЖК вместо соотношений Эриксона-Лесли действительны формулы Грина-Кубо.

Мы построили преобразованный к 2-мерному решёточному виду гамильтониан модели СШХ связанных резонаторов ВдП и провели численное моделирование МК на решётке, в результате чего получили существенное уменьшение полной энергии нематика при действии активной силы при повышении температуры.

К обоснованию применимости подобного моделирования СШХ и Ван-дер-Поля относится матричная формулировка теоремы Кирхгофа для димеров и полимеров, аналогия механических и электрических величин в диссипативных системах и много других теоретических и экспериментальных аргументов. Область применимости модели охватывает также задачи для активных гелей и эластомеров, полимерных композитов, ДНК, биологических систем.

Глава 7 «Топологические фазы комплексов металлофталоцианинов» содержит моделирование граничных топологических состояний в порфиринах и металлофталоцианинах, аналогов топологических изоляторов [12,13].

Каждая молекула металлофталоцианина (МФц) имеет пространственную группу симметрии D_{4h} , которая поддерживает плоскостность благодаря её металлическому центру. Молекулы МФц наклонены в плоскости XY под разными углами, т. е. двумя различными конфигурациями, и различаются дипольными взаимодействиями, что требует для построения их гамильтониана введения двух подрешёток «А» и «В» (Рис. 21).

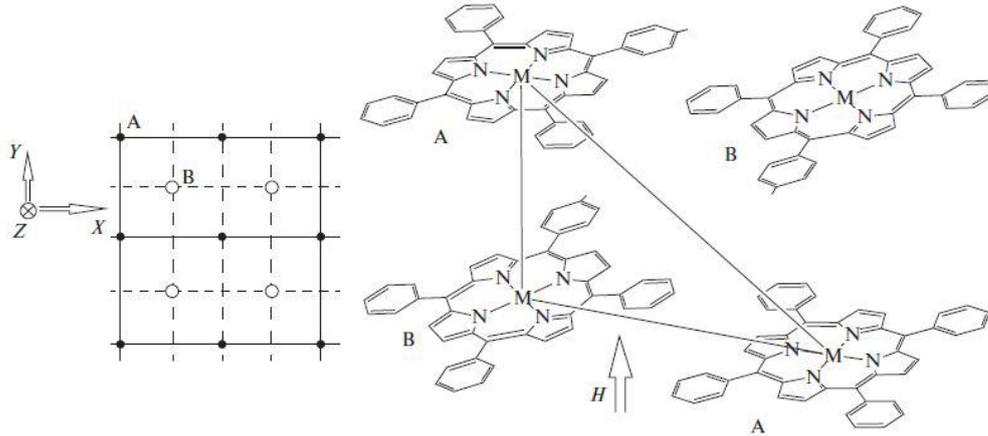


Рис. 21. Подрешётки А и В молекул МФц в однородном магнитном поле (слева). Анизотропный характер дипольных взаимодействий и магнитное поле создают перескоки экситонов вдоль направления между тремя соседними МФц.

Проводится решёточное моделирование экситонных краевых токов в рамках модели с гамильтонианом вида [ц25]

$$H = 2\rho \cos \frac{k_x}{2} \sin \frac{k_y}{2} \mathbf{I}_\tau \sigma_x - 2\rho \cos \frac{k_y}{2} \sin \frac{k_x}{2} \mathbf{I}_\tau \sigma_y + [t_m - t_\perp (\cos k_x + \cos k_y)] \tau_z \sigma_z. \quad (33)$$

В частности, построен спектр поглощения на краю образца МФц в направлении оси X для нижнего возбуждённого уровня Ω_L . Гамильтониан для экситонов Френкеля для целой решётки складывается из гамильтонианов нижнего и верхнего возбуждённых состояний $H=H_L+H_U$ и строится методом вторичного квантования как двухуровневая система для ближайших соседей и соседей, следующих за ближайшими, которые являются чисто действительными числами и, следовательно, наблюдаемыми.

Глава 8 «Задачи об изменении размерности на примере двуосных фаз нематиков. Максимальная абелева проекция» демонстрирует вычислительные процедуры с применением квантово-полевой теории, развитой Муччи с соавторами [ц27], встречающихся в задачах с понижением размерности типа переходов «двуосный-одноосный нематик» $N_b \rightarrow N_u$, наблюдаемых как в лиотропных, так и термотропных ЖК (5ЦБ, 7Ц, Ц12, А131, Е7, в органических силоксановых тетраподах и др.). Теория Ландау-де Жена (ЛдЖ) неприменима, в частности, при возникновении в поле директора фазы N_b (состоящего из главного $\mathbf{n} = -\mathbf{n}$ и вторичных $\mathbf{m} = -\mathbf{m}$, $\mathbf{l} = -\mathbf{l}$ взаимно ортогональных векторов)

особенностей неабелевой группы симметрии $SO(3)$. В главе 8 проанализированы различные калибровочные версии теорий ЛдЖ и Озеена-Франка (ОФ). Теория ОФ для N_u и N_b нематиков оперирует с параметром порядка, который выражается в терминах магнитной восприимчивости \mathbf{Q} . Это двусный симметричный бесследовый тензор \mathbf{Q} , имеющий различные постоянные средние значения $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ неабелевой группы кватернионов из 8 элементов, при этом скалярные параметры порядка подчиняются соотношениям: $S_1 = \lambda_1 - \lambda_3 = 2\lambda_1 + \lambda_2$, $S_2 = \lambda_2 - \lambda_3 = \lambda_1 + 2\lambda_2$.

При переходе $N_b \rightarrow N_u$ возможно превращение дисклинации в бужум (монополь) с деформацией нетривиальной орбиты $SO(3)/Z_2 \times Z_2$ в $SO(3)/Z_2$ (Рис. 22).

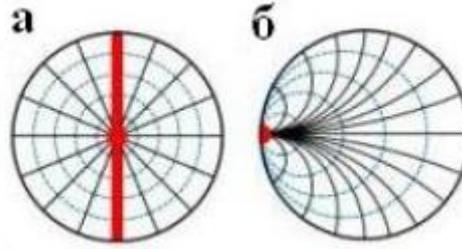


Рис. 22. Конфигурация директора при ортогональном сеплении:
а) фаза N_b с объёмной дисклинацией, б) фаза с бужумом.

Свободная энергия двусного нематика в формулировке ОФ есть

$$w(\mathbf{r}, \nabla \mathbf{r}) = K_1 (\text{div} \mathbf{r})^2 + K_2 (\mathbf{r} \cdot \text{curl} \mathbf{r})^2 + K_3 |\mathbf{r} \times \text{curl} \mathbf{r}|^2 + (K_2 + K_4) [\text{Tr}[(\nabla \mathbf{r})^2] - (\text{div} \mathbf{r})^2]. \quad (34)$$

После выполнения процедуры максимальной абелевой калибровки, или максимальной абелевой проекции (МАП), с преобразованием величин λ_i из $SO(2)$ в пространство абелевой калибровочной группы $SU(2)$, [ц17, ц28], получаем с точностью до материальных констант действие для N_b , аналогичное описанию абелева скалярного компактного поля θ , взаимодействующего со скалярным компактным полем типа Хиггса ϕ [ц17] (Приложение 1.):

$$e^{-S(\theta, \phi)} = \sum_{n, l} \exp \left\{ -\beta \|d\theta + 2\pi n\|^2 - \lambda \|d\phi + \theta + 2\pi l\|^2 - i\mu ((d\phi + \theta + 2\pi l) \cdot (d\theta + 2\pi n)) \right\}, \quad (35)$$

Здесь β, λ, μ – переменные дуальной решётки, связанные соотношением $\xi = \sqrt{4\lambda\beta} + i\mu$. Решёточные связи обозначены l .

По результатам решёточных вычислений (Рис. 23) можно судить о фазовом переходе, отражающем распад струны на монополь (или дисклинации фазы N_b в бужум фазы N_u).

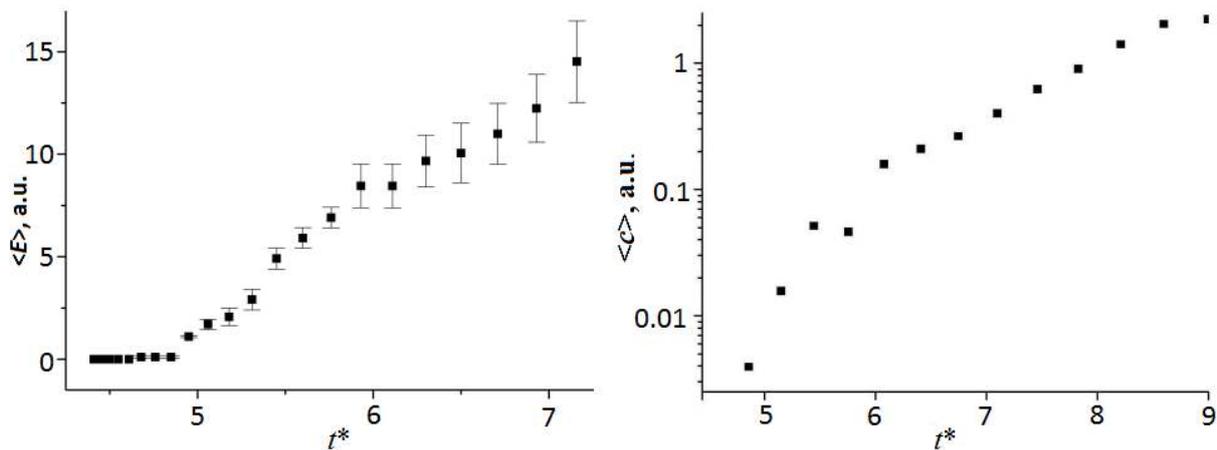


Рис. 23. Температурные зависимости средней энергии (слева) и средней теплоёмкости (справа), вычисленные методом МК на дуальной решётке $48 \times 48 \times 48$ (погрешность вычислений 5%).

Приложение 1: «Дифференциальные формы на решётке и преобразования дуальности». В Приложении 1 приводятся элементы дифференциальной геометрии, описаны используемые дифференциальные формы на решётках и пр. вспомогательные математические операции, лежащие в основе моделирования, относится к Гл. 3-8.

Приложение 2: «Вычислительные алгоритмы». В приложении приводятся описания алгоритмов, задействованных в расчётах диссертации [1,4-6].

В заключении перечислены результаты, выводы работы, излагаются рекомендации по дальнейшему развитию теоретических моделей и применению рассмотренных систем в народном хозяйстве, а также выражаются благодарности лицам, помогавшим автору в работе над диссертацией.

В конце текста приводятся список цитируемой литературы и список работ автора.

Выводы по результатам диссертации

В диссертационной работе представлено моделирование мезоморфизма в ЛЖК и полимерных композитах, определяемое эволюцией топологических дефектов разных типов, что подтверждено в эксперименте для структур мягкой материи с изменяющимся составом. В моделях использовались методы калибровочных полей с вычислением бозонных гамильтонианов на решётке, и соответственно, с описанием и предсказанием их физических свойств.

1. На основе механизма БКТ разработана калибровочная $3D$ модель Виллейна и спинового стекла для сшитых эластомеров с дефектами типа доменных стенок. Модель служит характеристики функциональных свойств эластомеров, в частности, определён порог перколяции полисилоксанового эластомера в зависимости от концентрации сшивок.

2. Для анализа коллоидных золь ванадия пентаоксида в воде V_2O_5/H_2O в магнитном поле, а также низкотемпературных смесей липидов использован механизм Киббла-Журека, описывающий аннигиляцию топологических дефектов. Этот подход позволяет выполнить численное

моделирование концентрационных зависимостей термодинамических величин и характеристик дефектов. Для нематической фазы V_2O_5/H_2O определены критические размеры тактоидов порядка 10 нм, условия их коалесценции и время старения зольей, учитываемое как один из параметров загрязнения среды в задачах экологии.

3. Для анализа структуры и термодинамических свойств полимерных композитов с наноразмерными наполнителями (углеродными нанотрубками, графитом, ГНП, фуллереном и нанобъектами из неорганических полупроводников) разработаны и адаптированы различные модели:

- комбинированная модель в терминах теории магнитной гидродинамики и нематодинамики, включающая характеристики точечных дефектов монополей (для наполнителей типа УНТ),

- фракционная модель дисклинаций (графит и ГНП в матрице ИПП),

- модель дисклинаций и фиктивного монополя в метрике Гёделя (на примере кластеризации наночастиц фуллерена C_{60})

- модель Су-Шриффера-Хигера для полимерных нанокомпозитов с гибридными наполнителями.

В рамках указанных моделей вычислены критические концентрации наполнителей, описаны перколяционные и электрические свойства нанокомпозитов.

4. В терминах струнного лагранжиана для самодвижущихся систем изучены поверхностные дисклинации нематиков. Концепция «силы дисклинаций» в предложенной модели сформулирована на языке гидродинамических величин (числа Рейнольдса, Эриксона и коэффициенты Лесли), показано, что она может быть преобразована в геометрическую связность, предложенный подход позволяет оценивать дефектозависимые упругие свойства материала.

5. Впервые показано, что для анализа топологически нетривиальных фаз применима модель СШХ, которая обладает универсальными свойствами при описании взаимодействий наноразмерных наполнителей в композитных материалах. В рамках представленного в работе подхода при задании требуемых параметров может быть оценена конкуренция вкладов различных типов наполнителей в электрические свойства систем, а также влияние на механические и упругие свойства композитных материалов.

6. В рамках модели БКТ впервые охарактеризованы гексатические фазы и обратимые переходы в изотропную фазу в смазочных композициях на основе Литола-24 и солидола с мезогенными присадками карбоксилатами меди(II). Структура и свойства гексатических фаз определяются дислокациями, ассоциированными с геометрией, конформацией и локализацией присадок. Для улучшения трибологических показателей смазочных композиций определены оптимальные концентрации присадок.

7. На примере систем коллоидных нематиков доказана применимость метода максимальной абелевой проекции при эволюции линейных и точечных дефектов в фазовом переходе из двуосной в одноосную фазу $N_b \rightarrow N_u$. Метод позволяет исследовать различные классы ЖК (как лиотропные, так и

термотропные), в которых фазовые переходы сопровождаются понижением размерности параметра порядка, вычислять термодинамические характеристики – температурные или концентрационные зависимости фазовых переходов.

8. На примере комплексов металлофталоцианинов меди в численном эксперименте показана возможность оценок физических свойств их топологических фаз (состояний с топологически защищёнными экситонами Френкеля). В качестве органических полупроводников, аналогов топологических изоляторов, металлофталоцианины имеют широкие перспективы использования в квантовых вычислениях, молекулярной спинтронике, фотонике, фотодинамической терапии.

Список цитированной литературы

- [ц1] Курик М. В., Лаврентович О. Д. Дефекты в жидких кристаллах: гомотопическая теория и экспериментальные исследования // Успехи физических наук. – 1988. – Т. 154. – С. 381–431.
- [ц2] Kralj S., Zumer S., and Allender D. W. Nematic-isotropic phase transition in a liquid-crystal droplet. // *Phys. Rev. A.* – 1991. – V. 43. – P. 2943–2952.
- [ц3] Кац Е. И., Монастырский М. И. Фазовые превращения в дискотических жидких кристаллах // Письма в ЖЭТФ. – 1981. – Т. 34. – №. 1. – С. 534–546.
- [ц4] Nelson D. R. *Defects and geometry in condensed matter physics.* Cambridge.: Cambridge University Press. – 2002. – 377 p.
- [ц5] Кадич А., Эделен Д. Калибровочная теория дислокаций и дисклинаций. – М.: Мир. – 1987. – 166 с.
- [ц6] Катанаев М. О. Геометрическая теория дефектов // Успехи физических наук. – 2005. – Т. 175. – № 7. – С. 705–733.
- [ц7] Nissinen J., Liu K., Nussinov Z., Slager R.-J., Wu K., and Zaanen J. Classification of point-group-symmetric orientational ordering tensors // *Phys. Rev. E.* – 2016. – V. 94. – P. 022701-1 – 022701-13.
- [ц8] Beekman A. J., Nissinen J., Wu K., *et.al.* Dual gauge field theory of quantum liquid crystals in two dimensions // *Phys. Rep.* – 2017. – V. 683. – P. 1–110.
- [ц9] Казначеев А. В., Богданов М. М., Тараскин С. А. О природе вытянутой формы тактоидов в лиотропных неорганических жидких кристаллах // ЖЭТФ. – 2002. – Т. 12. – С. 68–75.
- [ц10] Prinsen P., van der Schoot P. Shape and director-field transformation of tactoids // *Phys. Rev. E.* – 2003. – V. 68. – P. 021701-1– 021701-11.
- [ц11] Blaha S. Quantization Rules for Point Singularities in Superfluid ^3He and Liquid Crystals // *Phys. Rev. Lett.* – 1976. – V. 36. – Iss. 15. – P. 874–876.
- [ц12] Radu E., Volkov M.S. Stationary ring solitons in field theory – Knots and vortons // *Phys. Rep.* – 2008. – V. 468. – P. 101–151.
- [ц13] Kibble T. W. B., Lozano G., Yates A. J. Topology of cosmic domains and strings // *Phys. Rev. D.* – 1997. – V. 56. – P. 1204–1214.
- [ц14] Castellano C., Generosi J., Pozzi D. and Cantelli R. Anelastic spectroscopy as a probe of dynamic properties in lipid membranes // *Mater. Sci. and Eng. A.* – 2006. – V. 442. – P. 375–378.

- [ц15] Caneva T., Fazio R. and Santoro G. E. Adiabatic quantum dynamics of a random Ising chain across its quantum critical point // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V. 76. – P. 144427-1–144427-9.
- [ц16] Lambrea D.M., Ostrovskii B.I., Finkelmann H., de Jeu W.H. Disorder by Random Crosslinking in Smectic Elastomers // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – V. 93. – P. 185702–185705.
- [ц17] Ivanenko T.L., Polikarpov M.I. Symmetries of Abelian lattice theories with Chern-Simon interactions. // Preprint ITEP-49. Moscow. – 1991.
- [ц18] Young A.P. Melting and the vector Coulomb gas in two dimensions. // *Phys. Rev. B.* – 1979. – V. 19. – P. 1855–1866.
- [ц19] Monastyrsky M. I. and Sasorov P. V. Topology of the lattice of vortices in neutron stars // *Modern Phys. Lett.A.* – 2011. – V. 26 – Iss. 4. – P. 267–277.
- [ц20] Pretko M., Zhai Z. and Radzihovsky L. Crystal-to-fracton tensor gauge theory dualities // *Phys. Rev. B.* – 2019. – V. 100. – P. 134113.
- [ц21] Garcia G. Q., Cavalcante E., de M. Carvalho A. M. and Furtado C. The geometric theory of defects description for C_{60} fullerenes in a rotating frame // *Eur. Phys. J. Plus.* – 2017. – V. 132. – P. 183-1–183-9.
- [ц22] Gonzalez J., Guinea F. and Vozmediano M. A. H. The electronic spectrum of fullerenes from the Dirac equation // *Nucl. Phys. B.* – 1993. – V. 406. – P. 771–794.
- [ц23] Cavalcante E., Carvalho J., Furtado C. Description for rotating C_{60} fullerenes via an analogue of Gödel-type metric // *Eur. Phys. J. Plus.* – 2016. – V. 131. – P. 288-1–288-8.
- [ц24] Kolesnikov D.V. and Osipov V.A. The continuum gauge field-theory model for low-energy electronic states of icosahedral fullerenes // *European Physical Journal B.* – 2006. – V. 49. – P. 465–470.
- [ц25] Yuen-Zhou J., Saikin S. K., Yao N., and Aspuru-Guzik A. Topologically protected excitons in porphyrin thin films // *Nature Materials.* – 2014. – V. 13. – P. 1026–1032.
- [ц26] Osipov V. A. Monopole-like solution for static disclinations in continuum media // *Phys. Lett. A.* – 1990. – V. 46. – P. 67–70.
- [ц27] Giaquinta M., Mariano P. M., Modica G., and Mucci D. / *Nonlinear Partial Differential Equations and Related Topics.* – 2010. DOI: 10.1090/trans2/229/07.
- [ц28] Губарев Ф.В., Поликарпов М.И., Чернодуб М.Н. Трёхмерная абелева модель Хиггса: невылетание и эффект Ааронова-Бома // *Письма в ЖЭТФ.* – 1996. – Т. 63. – № 7. – С. 492–495.

Основные публикации автора по теме диссертации
Публикации в изданиях, индексируемых РИНЦ, Scopus и WoS

1. Ельникова, Л. В. Модель Изинга на дуальной решётке и лиотропный мезоморфизм растворов неионных суфрактантов / **Л. В. Ельникова** // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования.* – 2006. – Т. 12. – С. 93–97.
2. Ельникова, Л. В. Анализ везикуляции в липидных системах методом случайных поверхностей / **Л. В. Ельникова** // *Поверхность.*

- Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2007. – Т. 10. – С. 106–108.
3. Elnikova, L. V. Model for nanoscopic domain formation in dipalmitoyl-*pc*/dilauroyl-*pc*/ cholesterol mixture / **L. V. Elnikova** // *J. of Superconductivity and Novel Magnetism*. – 2007. – V. 20. – P. 197–199.
 4. El'nikova, L. V. Elastic Properties of Vanadium Pentoxide Aggregates and Topological Defects / **L. V. Elnikova** // *J. of Superconductivity and Novel Magnetism*. – 2008. – V. 21. – P. 473–478.
 5. El'nikova, L. V. Phase heterogeneities of lipidic aggregates / **L. V. Elnikova** // *Solid State Phenomena*. – 2008. – V. 137. – P. 209–214.
 6. Ельникова, Л. В. Методы комбинированного облучения в фотодинамической терапии / **Л. В. Ельникова** // *Жидк. крист. и их практич. использование*. – 2010. – Т. 2. – № 32. – С. 75–84.
 7. El'nikova, L. V. Lattice Model Calculations on Aqueous Solutions of Acetone and Tetramethylurea / **L. V. Elnikova** // *Revue Roumaine de Chimie*. – 2011. – V. 56. – № 10-11. – P. 1081–1087.
 8. Ельникова, Л. В. Термодинамика лиотропного мезоморфизма в водных растворах апротонных растворителей и схемы смешивания Коги / **Л. В. Ельникова** // *Жидк. крист. и их практич. использ.* – 2011. – Т. 1. – № 35. – С. 71–79.
 9. Elnikova, L. V. Non-affine deformations at a concentration transition in crosslinked elastomers in the light of the 3D XY spin glass model / **L. V. Elnikova** // *Solid State Phenomena*. – 2012. – V. 184. – P. 387–392.
 10. Ельникова, Л. В. Моделирование переходов из двуосной фазы нематических жидких кристаллов с топологическими дефектами / **Л. В. Ельникова** // *Жидк. крист. и их практич. использ.* – 2015. – Т. 15. – № 1. – С. 12–16.
 11. Ельникова, Л. В. Применение позитронной аннигиляционной спектроскопии для исследования фотодеструкции биологических мембран / **Л. В. Ельникова** // *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*. – 2015. – № 3. – С. 49–54.
 12. Ельникова, Л. В. Топологические фазы комплексов металлофталоцианинов / **Л. В. Ельникова** // *Изв. РАН. Сер. Физич.* – 2016. – Т. 80. – № 9. – С. 1279–1281.
 13. Ельникова, Л. В. Экситонные токи в комплексах металлофталоцианинов и их топологические свойства / **Л. В. Ельникова** // *Жидк. крист. и их практич. использ.* – 2017. – Т. 17. – № 1. – С. 69–73.
 14. Elnikova, L. Review Article: Recommended reading list of early publications on atomic layer deposition – Outcome of the "Virtual Project on the History of ALD" / E. Ahvenniemi, A. R. Akbashev, S. Ali, M. Bechelany, M. Berdova, S. Boyadjiev, D. C. Cameron, R. Chen, M. Chubarov, V. Cremers, A. Devi, V. Drozd, **L. Elnikova**, *et al.* // *J. Vac. Sci. Technol. A*. – 2017. – V. 35. – P. 010801-1–010801-14.
 15. Ельникова, Л. В. Диэлектрические характеристики растворов карбоксилатов меди в толуоле / **Л. В. Ельникова**, А. Т. Пономаренко, В.

- Г. Шевченко // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. – 2017. – № 4. – С. 95–102.
16. Ельникова, Л. В. Релаксационные и диэлектрические свойства смазочных композиций на основе Литола-24 с мезогенными присадками / **Л. В. Ельникова**, А. Т. Пономаренко, В. Г. Шевченко // Межд. научн. журнал «Альтернативная энергетика и экология». – 2018. – № 10-12 (258-260). – С. 60–69.
17. Ельникова, Л. В. Активный режим лиотропных нематиков и калибровочное поле дефектов / **Л. В. Ельникова** // Вестник Московского государственного областного университета. Серия: Физика-Математика. – 2018. – № 4. – С. 84–91.
18. Ельникова, Л. В. Диэлектрические свойства смазочных композиций на основе солидола с присадками мезогенных карбоксилатов меди / **Л. В. Ельникова**, А. Т. Пономаренко, В. Г. Шевченко, В. В. Терентьев, О. Б. Аكوпова // Жидк. крист. и их практич. использ. – 2019. – Т. 19. – № 1. – С. 70–78.
19. Elnikova, L. V. Modeling of conductive states in polymer nanocomposites with disordered GaAs nanowire array / **L. V. Elnikova**, A. T. Ponomarenko, V. G. Shevchenko // J. of Physics: Conf. Series. – 2019. – V. 1309. – P. 012012-1–012012-4.
20. Elnikova, L. V., Belyaev V. V. The lattice Hamiltonian modeling for active nematics with disclinations and oriented surfaces / **L. V. Elnikova**, V. V. Belyaev // J. of Physics: Conf. Series. – 2020. – V. 1560. – P. 012008-1–012008-4.
21. Elnikova, L. V. Spatial structure and aggregation of carbon allotrope nanofillers in isotactic polypropylene composites studied by small-angle neutron scattering / **L. V. Elnikova**, A. N. Ozerin, V. G. Shevchenko P. M. Nedorezova, A. T. Ponomarenko, V. V. Skoi, A. I. Kuklin // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. – 2021. – V. 29. – Iss. 10. – P. 783–792.
22. Ельникова, Л. В. Образование узлов из углеродных нанотрубок в матрице изотактического полипропилена по результатам малоуглового рассеяния нейтронов и численного моделирования на решётке / **Л. В. Ельникова**, А. Н. Озерин, В. Г. Шевченко, П. М. Недорезова, О. М. Палазник, А. Т. Пономаренко, В. В. Ской, А. И. Куклин // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2021. – Т. 9. – С. 3–8.
23. Elnikova, L. V. Melting dislocation transition in composite lithium greases with copper(II) carboxylate mesogenic additives / **L. V. Elnikova**, A. T. Ponomarenko, V. G. Shevchenko // Molecular Crystals and Liquid Crystals. – 2022. – V. 741. – Iss. 1. – P. 1–16.
24. Ельникова, Л. В. Топологические особенности в тактоидной нематической фазе / **Л. В. Ельникова**, В. В. Беляев // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия Техника и технологии. – 2024. – Т. 14. – № 1. – С. 104–114.

25. Ельникова, Л. В. Мезоморфизм и триботехнические характеристики смазочных композиций с мезогенными присадками карбоксилатами меди(II) / **Л. В. Ельникова**, А. Т. Пономаренко, В. Г. Шевченко // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия Техника и технологии. – 2024. – Т. 14. – № 1. – С. 150–160.
26. Ельникова, Л. В. Эффекты упорядочения в антифрикционных материалах с углеродосодержащими покрытиями (обзор) / **Л. В. Ельникова**, А. П. Кузьменко, В. В. Беляев // Вестник государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. – 2024. – № 2. – С. 45–59.
27. Ельникова, Л. В. О диффузионной модели кластеризации фуллерена C₆₀ в жидкостях / **Л. В. Ельникова**, В. Г. Шевченко, А. П. Кузьменко // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия Техника и технологии. – 2024. – Т. 14. – № 2. – С. 156–167.
28. Elnikova, L. V. Topological Defects in the Aggregation of C₆₀ Fullerene in an Isotactic Polypropylene Matrix / **L. V. Elnikova**, A. N. Ozerin, V. G. Shevchenko, P. M. Nedorezova, O. M. Palaznik, A. T. Ponomarenko, V. V. Skoi, and A. I. Kuklin // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2024. – V. 18. – № 4. – P. 936–943.
29. Ельникова, Л. В. Методы активного управления трением в присутствии смазочных композиций с мезогенными присадками / **Л. В. Ельникова**, В. В. Беляев // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия Техника и технологии. – 2024. – Т. 14. – № 3. – С. 165–177.

Публикации в других изданиях

30. Ельникова, Л. В. Спектральные свойства карбоксилатов меди и опыт их применения в узлах трения сельскохозяйственной техники. / Терентьев В. В., Аكوпова О. Б., Телегин И. А., **Ельникова Л. В.**, Парунова Ю. М. // Аграрный вестник Верхневолжья. – 2019. – № 1 (26). – С. 79–84.
31. Ельникова, Л. В. Инфракрасные спектры поглощения карбоксилатов меди(II) гомологов 4...21 / **Л. В. Ельникова** // Москва, Препринт ИТЭФ. 2016. № 5–16.
32. Ельникова, Л. В. Модель Су-Шриффера-Хигера и анализ топологических состояний в лиотропных системах с диссипацией / **Л. В. Ельникова** // Москва, Препринт ИТЭФ. – 2020. – № 2–20.
33. Elnikova L. V. Electrical, elastic properties and defect structures of isotactic polypropylene composites doped with nanographite and graphene nanoparticles / **L. V. Elnikova**, A. N. Ozerin, V. G. Shevchenko, P. M. Nedorezova, A. T. Ponomarenko, V. V. Skoi, A. I. Kuklin // Cornell University Library. ArXiv:2205.15392v1.