

ОТЗЫВ

официального оппонента, доктора физико-математических наук
Аксеновой Елены Валентиновны
на диссертацию Ельниковой Лилии Вячеславовны,
**«Решеточные калибровочные поля топологических дефектов лиотропных
жидких кристаллов и полимерных композитов»**,
представленной на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук
по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

В настоящее время жидкокристаллические и полимерные материалы с гибридными структурами и наноразмерными наполнителями завоевывают все новые научно-технические ниши для передовых разработок и практического использования в сферах электроники, спинтроники, фотоники, триботехники, нанотехнологии, сенсорики, медицины и др.

Диссертация Л.В. Ельниковой посвящена изучению критических свойств композитов класса жидких кристаллов и полимеров и их зависимостей от дефектных структур с некоммутативным параметром порядка теоретическими и экспериментальными методами.

Актуальность работы. Лиотропные жидкие кристаллы (ЛЖК) и полимерные нанокompозиты содержат дефектные структуры, влияющие на их эксплуатационные свойства при изменении состава, при этом образуя новые фазы с неабелевыми симметриями. Поэтому актуальным является определение морфологии образующихся дефектных структур, достоверного описания и предсказания критических свойств материала, содержащего дефекты. Таким представлениям удовлетворяют решеточные калибровочные теории, характеризующие топологические свойства дефектов конденсированных сред с использованием аппарата квантовых полей.

Содержание работы: диссертация состоит из введения, восьми глав, 2-х приложений, заключения, впечатляющего списка цитированной литературы из 650 источников и списка работ автора по теме диссертации.

Первая глава посвящена обзору литературы, в ней дается хронологическое представление об имеющихся подходах к классическому и квантовому описанию ЖК фаз, описываются теории упругости, теория Ландау-де Жена и Озеена-Франка, оперирующие с симметриями параметра порядка ЖК, место и роль понятия топологических дефектов различных размерностей в общеизвестных подходах к мезоморфизму в жидких кристаллах и упорядоченных полимеров. Описываются методы исследования дефектов в ЖК и полимерах и возможные области их практического использования.

Во второй главе исследуются поверхностные точечные дефекты (бужумы) нематической фазы, которые локализованы на полюсах тактоидных частиц в двухфазной системе V_2O_5/H_2O . Решается задача о коалесценции нематических тактоидов, ориентированных в магнитном поле, в зависимости от поведения поверхностных дефектов на полюсах. Построения, проводимые автором во второй главе, основаны на данных оптических экспериментов Казначеева и соавторов, а также на теории нематических фаз типа Ландау-де Жена, построенной Казначеевым и независимо Принсеном и ван дер Шутом для морфологии коллоидов и имеющихся фазовых диаграммах для V_2O_5/H_2O . Однако в этих работах не ставилась теоретическая задача объяснения слияния тактоидов в магнитном поле, в диссертации Ельниковой задача поставлена впервые. Переходя в базис глобальных координат двухфазной системы V_2O_5/H_2O (тактоидный нематик–изотропная фаза), в работе выдвинута гипотеза о наличии

на полюсах тактоидов дефектов монополюсного типа вихортов. Динамика системы может быть описана струнным лагранжианом неабелевой группы $SO(3)$ с дефектами вихортонами в магнитном поле. Этот лагранжиан имеет универсальный характер и используется в описании механизма Киббла-Журека для эволюции дефектов. С помощью комбинирования линейризованного решения струнного лагранжиана и функционала свободной энергии нематика, в $SU(2)$ получен равновесный размер тактоида, соответствующий аннигиляции вихортов при коалесценции тактоидов. Используя полученные геометрические параметры тактоида (равновесный размер или угол α) при их коалесценции, можно вычислить время старения золь, что является практической задачей в различных технических отраслях.

В главе 3 решается задача эволюции доменных стенок в низкотемпературных липидных смесях, образующих нематические и смектические ЖК-фазы. Для доменных стенок, кинков, в диссертации впервые предложен подход, описывающий эволюцию доменных стенок модели Киббла-Журека и 3-й адиабатической стадии модели Ландау-Зинера. Энергия дефектов кинков в этой модели описывается одномерным гамильтонианом квантовой модели Изинга. Численно методом Монте-Карло на решетке найдена энергия и плотность кинков. Характер поведения таких дефектов в реальных липидных мембранах может учитываться в медицинских приложениях, например, в генной терапии.

Глава 4 посвящена дефектным структурам в системах двух типов: в сшитых эластомерах, образующих смектические-A и нематические фазы, и в смазочных композициях с мезогенными присадками, проявляющих обратимые переходы между дискотической и изотропной фазами. Общее для этих далеко структурно не родственных систем состоит в том, что в них идентифицированы фазовые переходы типа Березинского-Костерлица-Таулесса (БКТ), соответственно, они описаны в рамках этой модели.

Для решения задачи о перколяции выбрана модель Виллейна и ее аналог, решеточная версия модели спинового стекла, модель $3D XY$ в $U(1)$. В переменных дуальной решетки построены термодинамические и концентрационные зависимости для конфейнмента $3D$ вихрей, свидетельствующие о пороге перколяции для 10 % концентрации сшивок, что совпадает с экспериментальными данными.

В работе приводятся подробные микрофотографии смазочных композиций при разных температурах, обнаруживающих наличие дискотической фазы, что соответствует известным результатам для смазочных композиций с другим структурно родственным карбоксилатом меди(II), ундецилатом. Определены оптимальные концентрации присадок, соответствующие смазочным композициям с дискотическими фазами.

Предложено объяснение фазовых переходов посредством эволюции дислокаций модели БКТ. Теория раздела опирается на модели Каца, Клемана и Монастырского дискотических фаз для разных симметрий C_2 , C_4 , C_6 . Однако в работе используется версия Юнга модели БКТ, в которой обоснован способ построения гамильтониана дислокаций, используемого вместо гамильтониана всей смазочной композиции, для численного моделирования осуществлен переход из гексагональной в дуальную решетку. Вычислены термодинамические зависимости гамильтониана дислокаций, проанализированы тенденции смещения перехода при изменении температуры.

В главе 5 исследуются полимерные нанокомпозиты на основе изотактического полипропилена (ИПП) с различными углеродными наполнителями, синтезированные при различных концентрациях: одностенные и многостенные углеродные нанотрубки (УНТ), частицы графена в форме пластин (ГНП), графит, фуллерен, комбинация наполнителей многостенные УНТ/ГНП, для эксперимента применялся метод малоуглового рассеяния нейтронов. Спектры МУРН обработаны автором и ее соавторами с помощью специального пакета программ ATASAS 2.4, определены размеры частиц,

распределение по размерам в объеме образца и по толщине, т.е. обнаружена полидисперсность систем, восстановлена форма частиц, что геометрически отличается от заложенных при синтезе. Из этих фактов автор поставил задачи объяснения наблюдаемой морфологии наночастиц путем формулировки различных моделей.

В главе 6 исследуется другой класс систем, активные нематики, это диссипативные системы, демонстрирующие эффекты коллективного движения, индуцируемые внешним электрическим или магнитным полем, химическими реакциями и пр.

В одной задаче рассматриваются динамические дисклинации на искривленных поверхностях (например, нематических коллоидов) с использованием метода калибровочного поля. Решеточное спиновое представление исходит из базовых гидродинамических моделей для одноосного нематика (гидродинамики Навье-Стокса и нематодинамики). Применяется понятие силы дисклинаций в калибровочном приближении Кадич и Эделена, где она выражается в виде геометрической связности.

Другой задачей является применение модели Су-Шриффера-Хигера для топологических дефектов солитонного типа, которые возникают в том числе в топологических фазовых переходах, которые, могут наблюдаться в некоторых классах активных нематиков в виде связанных резонаторов. Для коллоидных нематиков построена зависимость полной энергии в активном и пассивном режиме с помощью численного метода Монте-Карло на решетке.

В главе 7 исследуются металлофталоцианины, потенциальные кандидаты на роль топологических изоляторов среди органических полупроводников. Рассматривается медный фталоцианин с краевыми экситонами Френкеля, молекулы металлофталоцианина наклонены под разными углами в плоскости XY, поэтому они рассматриваются в виде 2-х подрешеток, различающимися конфигурациями и дипольными взаимодействиями. В магнитном поле наблюдается эффект Зеемана, строятся фермионные гамильтонианы расщепленных уровней. Аккумулируются фазы Берри, калибровочные преобразования вводятся для вычисления взаимодействия ближайших соседей. В данной главе обсуждаются многочисленные реализации топологических эффектов, используемых в спинтронике и фотонике, а также использование металлофталоцианинов в фотодинамической терапии.

В главе 8 анализируются фазовые переходы между двуосными и одноосными нематическими фазами, сопровождающиеся трансформацией топологических дефектов разных размерностей. Глава носит чисто фундаментальный характер, демонстрируя калибровочный подход на методе максимальной абелевой проекции, так как переход «двуосный-одноосный» нематик встречается во многих типах жидких кристаллов, как лиотропных, так и термотропных, и хорошо изучен на эксперименте. Новым подходом, использованным в диссертации, является представление дисклинации двуосного нематика в терминах струнной модели, эта дисклинация при переходе в одноосный нематик преобразуется в бужум (монополь). Для преодоления трудности вычислений неабелевых членов свободной энергии записывается максимальная абелева проекция на решетке. Численно методом Монте-Карло продемонстрирован разрыв струны и образование монополя, что соответствует условиям описываемого фазового перехода с понижением размерности.

Новизна работы состоит в экспериментальной характеристике электрических свойств и мезоморфизма в пластичных смазочных композициях с карбоксилатами меди(II) методом диэлектрической спектроскопии и поляризационной оптической микроскопии, в определении морфологии углеродных наночастиц из нанотрубок, нанографита, графена, фуллерена и смешанных типов частиц в матрице изотактического полипропилена методом малоуглового рассеяния нейтронов: для углеродных нанотрубок, нанопластин графена и нанографита и фуллерена в ИПП по экспериментальным спектрам МУРН.

В теоретической части – все модели построены впервые, многие из них имеют решения, полученные численным методом Монте-Карло на решетке, с использованием авторских алгоритмов.

Практическая значимость результатов работы проявляется в ряде известных технических реализаций: смазочные композиции на основе Литола-24 и синтетического солидола, для которых в диссертации определены диапазоны рабочих температур и оптимальный состав для образования дискотических фаз, используются в режущих аппаратах зерноуборочных комбайнов, СК-5М, «Нива», из литературы известно о разработке солнечных батарей, для которых в диссертации приводится характеристика их морфологии в полимере и расчеты электрических свойств композита. Композиты ИПП с аллотропами углерода используются в электронных устройствах, фотонике и многих других областях.

Достоверность полученных экспериментальных результатов подтверждается тем, что они получены на современном сертифицированном оборудовании, в рамках общепринятых методик измерений, воспроизводимы, сравниваются с данными из литературных источников. Результаты компьютерного моделирования достоверны, так как достигались с помощью современных вычислительных ресурсов, с использованием стандартных пакетов программ или лицензированных алгоритмов, а также сопоставляются с экспериментальными измеряемыми значениями.

Диссертация соответствует паспорту специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния в пп. 1,2,5,6.

Результаты диссертации апробированы в выступлениях автора в десятках международных и российских конференций, результаты работы опубликованы в 29 научных статьях, из них 19 входят в перечень ВАК, 10 – в перечень изданий, индексируемых в базах WoS и Scopus, а также в препринтах и других изданиях.

Обсуждаемая работа не свободна от недостатков. Часть из этих недостатков относятся к области оформления. Текст диссертации и автореферата написан достаточно хорошим и понятным языком. Каждая глава хорошо скомпонована: содержит постановку задачи, основные результаты и выводы, что помогает разобраться в проведенных автором исследованиях. Но, на мой, взгляд, автореферат слишком подробно описывает содержание диссертации. Также в тексте диссертации попадаются досадные опечатки и несогласованные предложения. Система обозначений несколько перегружена, однако, это оправдывается сложностью рассматриваемых систем. Было бы нелишним в каждой главе указать в каких именно публикациях автора изложены результаты данной главы.

Есть и замечания, касающиеся содержания. В Главе 2 показано, что фазовым переходом является слияние, или коалесценция, тактоидов в магнитном поле при посредстве дефектов вортонов. Само наличие дефектов является необходимым, но недостаточным условием перехода. Следовало было подробно описать характер поведения полученных ранее ван дер Шутом термодинамических функций, доказывающих возможность протекания таких фазовых переходов в системе пятиокси ванадия и воды V_2O_5/H_2O .

В диссертации рассмотрены различные классы систем, к ним применяются различные методы исследования: теоретические, численные, экспериментальные. Все это указывает на высокую квалификацию автора и ее хорошую «оснащенность». Однако мне, как оппоненту, немного не хватило некоего единства методов и подходов в данной работе.

Хорошо было бы уделить больше внимания исследованию влияния хиральности на топологические дефекты в жидких кристаллах. Такого рода топологические солитоны хорошо известны, например, по работам группы Смалюха. Подходы, развиваемые

автором диссертации могут быть применимы к таким системам. Возможно, это может стать направлениями дальнейших исследований.

Вместе с тем совершенно ясно, что отмеченные недостатки **не являются принципиальными** и поэтому они не меняют **общую положительную оценку** диссертации. Представленная диссертация является цельным квалифицированным исследованием, соответствует всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 № 842, и его последующих редакций, а её автор Ельникова Лилия Вячеславовна, несомненно, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Аксенова Елена Валентиновна
доктор физико-математических наук
по специальности 01.04.02 Теоретическая физика
профессор кафедры статистической физики,
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
Санкт-Петербургский государственный университет

198504, Санкт-Петербург, Петродворец, ул. Ульяновская, д. 3
Рабочий телефон +7 (921) 310 77 63
e-mail: e.aksenova@spbu.ru
27 декабря 2024 года

Личную подпись
Е. В. Аксенова
заверяю
И.О. начальника отдела кадров И.И. Константинова
И.И. Константинова



27.12.2024

Документ подготовлен
в порядке исполнения
трудовых обязанностей

Текст документа размещен
в открытом доступе
на сайте СПбГУ по адресу
<http://spbu.ru/science/expert.html>