

УДК 532.783:539.22

## ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ КОМПОЗИТЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В МАГНИТНОМ ПОЛЕ: ПЕРЕХОД ОТ МОЛЕКУЛЯРНО-СТАТИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ К ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ

© 2023 г. Д. А. Петров\*

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования  
“Пермский государственный национальный исследовательский университет”, Пермь, Россия

\*E-mail: petrovda@bk.ru

Поступила в редакцию 28.09.2022 г.

После доработки 27.10.2022 г.

Принята к публикации 25.11.2022 г.

На основе термодинамического потенциала молекулярно-статистической теории среднего поля жидкокристаллических композитов углеродных нанотрубок получено представление свободной энергии в форме разложения Ландау. Проведено сопоставление получившегося разложения с предложенными ранее феноменологическими теориями.

DOI: 10.31857/S0367676522700703, EDN: HGMOPE

### ВВЕДЕНИЕ

В последнее десятилетие композитные материалы на основе жидких кристаллов (ЖК) и углеродных нанотрубок (УНТ) стали актуальной темой в физике мягких конденсированных сред [1, 2]. Это в первую очередь связано с уникальными анизотропными физико-химическими свойствами УНТ: экстраординарная прочность на растяжение, а также тепловая и электрическая проводимость, аномально сильный диамагнетизм [3–5], что является привлекательными для широкого спектра применений, включая наноэлектронику и оптику [3, 6]. Одним из наиболее популярных и простых способов описания ЖК-композитов УНТ является феноменологическая теория Ландау, основанная на представлении свободной энергии суспензии вблизи точки фазового перехода изотропная – упорядоченная фаза в виде ряда по инвариантам параметров порядка [7]. Коэффициенты такого разложения определяются экспериментально и являются феноменологическими материальными параметрами. Преимуществом такого подхода является то, что полученные в рамках теории Ландау уравнения равновесия для параметров порядка имеют простой алгебраический вид. Однако остается открытым вопрос о том, как феноменологические коэффициенты разложения могут быть связаны с молекулярными параметрами системы. В настоящей работе дан ответ на этот вопрос с помощью молекулярно-статистической теории, в рамках которой

возможно построить соответствующий потенциал Ландау и связать коэффициенты разложения с параметрами молекулярно-статистической модели, что позволит существенно сократить число свободных параметров. В заключении проведено сравнение предложенных ранее феноменологических теорий Ландау ЖК композитов с полученным в настоящей работе разложением Ландау.

### МЕТОД ЭФФЕКТИВНОГО ПОЛЯ

Будем рассматривать монодисперсную суспензию УНТ в нематическом ЖК как бинарную смесь с объемными долями компонентов соответственно  $y_p$  и  $y_n = 1 - y_p$ . Дополнительно с межмолекулярным взаимодействием ЖК будем учитывать дисперсионное притяжение и стерическое отталкивание нанотрубок, а также диамагнетизм как ЖК, так и УНТ. Будем полагать, что анизотропии диамагнитной восприимчивости молекул ЖК и нанотрубок являются положительными  $\chi_a^n > 0$  и  $\chi_a^p > 0$ , тогда включение внешнего магнитного поля  $\vec{H}$  вызывает ориентацию как длинных осей палочкообразных молекул ЖК, так и цилиндрических нанотрубок, соответственно описываемых с помощью единичных векторов  $\vec{v}$  и  $\vec{e}$ , вдоль направления поля. Поэтому для описания направления главных осей нематического порядка (директоров) ЖК и УНТ, а также маг-

нитного поля можно использовать один вектор  $\vec{n}$  и  $\vec{H} = H\vec{n} = (0, 0, H)$ .

Согласно работе [8] в рамках модели среднего поля свободную энергию ЖК-суспензии УНТ, находящуюся во внешнем магнитном поле, можно представить в виде

$$\begin{aligned} \tilde{F} = \frac{FV_n}{\lambda V} = & -\frac{1}{2}y_n^2\eta_{ik}\eta_{ik} - y_n y_p \gamma \omega \eta_{ik} S_{ik} - \\ & -\frac{1}{2}y_p^2\gamma^2(\omega_p + \kappa\tau)S_{ik}S_{ik} - \\ & -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2}{3}}h^2 n_i n_k (y_n \eta_{ik} + y_p \gamma \xi S_{ik}) + \\ & + y_n \tau \langle \ln W_n \rangle + y_p \gamma \tau \langle \ln W_p \rangle. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь введены макроскопические тензоры ориентации соответственно для ЖК и примесной подсистемы

$$\eta_{ik} = \eta \sqrt{\frac{3}{2}} \left( n_i n_k - \frac{1}{3} \delta_{ik} \right), \quad S_{ik} = S \sqrt{\frac{3}{2}} \left( n_i n_k - \frac{1}{3} \delta_{ik} \right), \quad (2)$$

где скалярные параметры порядка

$$\eta = \langle P_2(\vec{n} \cdot \vec{v}) \rangle, \quad S = \langle P_2(\vec{n} \cdot \vec{e}) \rangle \quad (3)$$

( $P_2(x) = 3x^2/2 - 1/2$  – второй полином Лежандра) меняются от  $-1/2$  до 1 и показывают степень упорядочения соответственно длинных осей молекул ЖК и УНТ относительно направлений преимущественной ориентации – директора  $\vec{n}$ . Угловые скобки в (3) обозначают статистическое усреднение по одночастичным функциям распределения  $W_n$  и  $W_p$  соответственно молекул ЖК и УНТ по ориентациям их длинных осей. В выражении (1) также введены обозначения:  $V$  – объем суспензии,  $\gamma = v_n/v_p$  – относительный размер УНТ, где  $v_p$  и  $v_n$  – соответственно объемы цилиндрической УНТ и молекулы ЖК,  $\lambda$  – константа среднего поля Майера–Заупе, безразмерные параметры  $\omega$  и  $\omega_p$  характеризуют относительную роль энергии ориентационного взаимодействия между соответственно нанотрубками и молекулами ЖК и только между УНТ,  $\tau = k_B T / \lambda$  – безразмерная температура ( $k_B$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура),  $\kappa = 5L_p / (4\gamma D_p)$  – безразмерный параметр, учитывающий исключенный объем УНТ во втором вириальном приближении для цилиндрических частиц ( $L_p$  – длина и  $D_p$  – диаметр УНТ),  $h = H \sqrt{\chi_a^n / \lambda}$  – безразмерная напряженность магнитного поля, а также параметр  $\xi = \chi_a^p / \chi_a^n$ .

Для определения равновесных значений функций распределения  $W_n$  и  $W_p$  нужно решить вариационную задачу о минимуме свободной энергии (1). Минимизация  $\tilde{F}$  должна проводиться

с дополнительными условиями нормировки для функций распределения, которые имеют вид

$$\int W_n d\vec{v} = 1, \quad \int W_p d\vec{e} = 1. \quad (4)$$

После вычисления всех сверток тензоров (2) выражение (1) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} \tilde{F} = & -\frac{1}{2}y_n^2\eta^2 - y_n y_p \gamma \omega \eta S - \\ & -\frac{1}{2}y_p^2\gamma^2(\omega_p + \kappa\tau)S^2 - \frac{1}{3}h^2(y_n\eta + y_p\gamma\xi S) + \\ & + y_n\tau \int W_n \ln W_n d\vec{v} + y_p\gamma\tau \int W_p \ln W_p d\vec{e} + \\ & + \Lambda_n \left( \int W_n d\vec{v} - 1 \right) + \Lambda_p \left( \int W_p d\vec{e} - 1 \right). \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь дополнительные условия (4) учтены с помощью метода множителей Лагранжа, где  $\Lambda_n$  и  $\Lambda_p$  – множители Лагранжа.

Вариация (5) по  $W_n$  и  $W_p$  позволяет получить нормированный результат для одночастичных функций распределения

$$\begin{aligned} W_n = Z_n^{-1} \exp\{\sigma_n P_2(\vec{n} \cdot \vec{v})\}, \\ W_p = Z_p^{-1} \exp\{\sigma_p P_2(\vec{n} \cdot \vec{e})\}, \end{aligned} \quad (6)$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} Z_n = \int \exp\{\sigma_n P_2(\vec{n} \cdot \vec{v})\} d\vec{v}, \\ Z_p = \int \exp\{\sigma_p P_2(\vec{n} \cdot \vec{e})\} d\vec{e}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \sigma_n = \frac{y_n\eta + y_p\gamma\omega S}{\tau} + \frac{h^2}{3\tau}, \\ \sigma_p = \frac{y_n\omega\eta + y_p\gamma(\omega_p + \kappa\tau)S}{\tau} + \frac{\xi h^2}{3\tau}. \end{aligned} \quad (8)$$

Параметры порядка системы  $\eta$  и  $S$  могут быть определены с помощью выражений (3) и функций распределений (6) через соотношения

$$\eta = \frac{\partial \ln Z_n}{\partial \sigma_n}, \quad S = \frac{\partial \ln Z_p}{\partial \sigma_p}. \quad (9)$$

С помощью определений (6)–(9) свободная энергия ЖК суспензии УНТ примет вид

$$\begin{aligned} \tilde{F} = & -\frac{1}{2}y_n^2\eta^2 - y_p y_n \gamma \omega \eta S - \frac{1}{2}y_p^2\gamma^2(\omega_p + \kappa\tau)S^2 - \\ & -\frac{1}{3}h^2(y_n\eta + y_p\gamma\xi S) + \\ & + y_n\tau(\sigma_n\eta - \ln Z_n) + y_p\gamma\tau(\sigma_p S - \ln Z_p), \end{aligned} \quad (10)$$

который будет использован для построения потенциала Ландау. Метод корректного получения разложения Ландау на основе термодинамического потенциала молекулярно-статистической теории среднего поля в физике ЖК и жидкокристаллических полимеров был использован в работах [9, 10] и далее уточнен в работе [11]. Обсудим

подробнее этот метод. Как известно, разложение Ландау описывает ориентационную часть неравновесной свободной энергии ЖК  $F_{LC}$ , условия минимума для которой  $\delta F_{LC} = 0$ ,  $\delta^2 F_{LC} > 0$  позволяют определить состояние термодинамического равновесия. Таким образом, задача сводится к получению выражения для свободной энергии, соответствующей неравновесному значению параметра порядка. Как было предложено М.А. Леонтовичем [12] неравновесную физическую величину (параметр порядка ЖК) можно рассматривать как равновесную в специально подобранном “эффективном” поле. Если допустить, что неравновесный параметр порядка ЖК остается одноосным, то эффективное поле, ориентирующее отдельную молекулу, будет иметь тот же вид, что и равновесное среднее поле модели Майера–Заупе нематического ЖК [7]. Применительно к суспензии УНТ в нематическом ЖК для неравновесного случая такими эффективными полями являются величины  $\sigma_n$  и  $\sigma_p$ , входящие в функции распределения (6), статистические интегралы (7) и свободную энергию (10). Теперь  $\sigma_n$  и  $\sigma_p$  не являются явными функциями параметров порядка (8), а их связь с  $\eta$  и  $S$  в неравновесном случае должна осуществляться через определения (3) и (9). Так как эффективные поля делают равновесным неравновесные без этих полей состояния, то выражение (10) совместно с условиями равновесия

$$\frac{\partial \tilde{F}}{\partial \eta} = \frac{\partial \tilde{F}}{\partial S} = 0 \quad (11)$$

в параметрической форме определяют зависимость  $\tilde{F}(\eta, S)$ . В состоянии термодинамического равновесия, которому отвечают уравнения (11), из выражения для свободной энергии (10) следует линейная связь между эффективными полями и параметрами порядка, которая позволяет найти уравнения ориентационного состояния ЖК и УНТ с учетом определений (9).

Приступим к построению свободной энергии в форме разложения Ландау на основе потенциала молекулярно-статической модели среднего поля (10). Для этого вначале нужно разложить статистические интегралы  $Z_n$  и  $Z_p$  (см. выражения (7)) соответственно по степеням  $\sigma_n$  и  $\sigma_p$ . Зависимости  $Z_n$  от  $\sigma_n$  и  $Z_p$  от  $\sigma_p$  являются аналогичными, поэтому запишем результат разложения для  $Z_n$ :

$$Z_n = \int_0^1 \exp\{\sigma_n P_2(x)\} dx = 1 + \frac{1}{2 \cdot 5} \sigma_n^2 + \frac{1}{3 \cdot 5 \cdot 7} \sigma_n^3 + \frac{1}{2 \cdot 4 \cdot 5 \cdot 7} \sigma_n^4 + \dots \quad (12)$$

На следующем этапе найдем разложение для  $\ln Z_n(\sigma_n)$  по степеням  $\sigma_n$ , используя (12), получим

$$\ln Z_n(\sigma_n) = \frac{1}{2 \cdot 5} \sigma_n^2 + \frac{1}{3 \cdot 5 \cdot 7} \sigma_n^3 - \frac{1}{4 \cdot 5 \cdot 5 \cdot 7} \sigma_n^4 + \dots \quad (13)$$

Результат разложения для  $\ln Z_p(\sigma_p)$  полностью совпадает с (13), если заменить индекс  $n$  на  $p$ . Из выражения (10) с учетом (13) видно, что получающееся выражение для безразмерной неравновесной энтропии  $y_n(\ln Z_n - \sigma_n \eta) + y_p \gamma (\ln Z_p - \sigma_p S)$ , уменьшение которой связанной с упорядочением длинных осей молекул и нанотрубок, не зависит от вида ориентационной части внутренней энергии и вкладов, учитывающих взаимодействие компонентов композита с внешним магнитным полем, а полностью определяется симметрией используемых параметров порядка.

Выражения (9) с помощью разложения (13) позволяют определить связь параметров порядка системы  $\eta$  и  $S$  с эффективными полями  $\sigma_n$  и  $\sigma_p$  соответственно

$$\begin{aligned} \eta &= \frac{\partial \ln Z_n}{\partial \sigma_n} = \frac{1}{5} \sigma_n + \frac{1}{5 \cdot 7} \sigma_n^2 - \frac{1}{5 \cdot 5 \cdot 7} \sigma_n^3 + \dots, \\ S &= \frac{\partial \ln Z_p}{\partial \sigma_p} = \frac{1}{5} \sigma_p + \frac{1}{5 \cdot 7} \sigma_p^2 - \frac{1}{5 \cdot 5 \cdot 7} \sigma_p^3 + \dots. \end{aligned} \quad (14)$$

Методом неопределенных коэффициентов обращаем ряды (14) и находим

$$\begin{aligned} \sigma_n(\eta) &= 5\eta - \frac{5 \cdot 5}{7} \eta^2 + \frac{5 \cdot 5 \cdot 17}{7 \cdot 7} \eta^3 + \dots, \\ \sigma_p(S) &= 5S - \frac{5 \cdot 5}{7} S^2 + \frac{5 \cdot 5 \cdot 17}{7 \cdot 7} S^3 + \dots. \end{aligned} \quad (15)$$

Подставляя (13) и (15) в (10), окончательно получим выражение для свободной энергии ЖК композитов УНТ в магнитном поле в форме разложения Ландау

$$\begin{aligned} \tilde{F} &= \frac{5}{2} y_n \left( \tau - \frac{y_n}{5} \right) \eta^2 + \frac{1}{2} y_p \gamma^2 \times \\ &\times (\omega_p + \kappa \tau) \left( \frac{5\tau}{\gamma(\omega_p + \kappa \tau)} - y_p \right) S^2 - \\ &- y_n \tau \left( \frac{5 \cdot 5}{3 \cdot 7} \eta^3 - \frac{5 \cdot 5 \cdot 17}{2 \cdot 2 \cdot 7 \cdot 7} \eta^4 \right) - \\ &- y_p \gamma \tau \left( \frac{5 \cdot 5}{3 \cdot 7} S^3 - \frac{5 \cdot 5 \cdot 17}{2 \cdot 2 \cdot 7 \cdot 7} S^4 \right) - \\ &- y_n y_p \gamma \omega \eta S - \frac{1}{3} h^2 (y_n \eta + y_p \gamma \xi S) + \dots. \end{aligned} \quad (16)$$

В предельном случае чистого нематика ( $y_p = 0$ ) в отсутствие магнитного поля ( $h = 0$ ) выражение (16) совпадает с ранее полученным в работе [10].

Минимизация (16) по  $\eta$  и  $S$  дает уравнения ориентационного и магнитного равновесия суспензии УНТ в нематическом ЖК

$$\begin{aligned} & \left[ y_n - 5\tau \left( 1 - \frac{5}{7}\eta + \frac{85}{49}\eta^2 \right) \right] \eta + y_p \gamma \omega S + \frac{1}{3} h^2 = 0, \\ & \left[ y_p \gamma (\omega_p + \kappa \tau) - 5\tau \left( 1 - \frac{5}{7}S + \frac{85}{49}S^2 \right) \right] S + \\ & + y_n \omega \eta + \frac{1}{3} \xi h^2 = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Эти уравнения определяют зависимости параметров ориентационного порядка  $\eta$  и  $S$  от температуры  $\tau$  и магнитного поля  $h$ . Здесь нужно отметить, что согласно анализу, проведенному в работе [10], радиус сходимости разложений (15) близок к  $R \cong 0.49 \pm 0.01$ , поэтому полученное разложение Ландау (16) применимо лишь в окрестности точки фазового перехода первого рода упорядоченная – изотропная фаза, где значение параметра порядка ЖК  $\eta \approx 0.4$ . Кроме этого, параметр порядка нанотрубок  $S$  также не должен отвечать сильно упорядоченному состоянию, т.е. должен быть меньше или принимать близкие к  $\eta$  значения. Таким образом, полученная система уравнений (17) будет некорректно описывать поведение суспензии при сильной ориентационной связи молекул ЖК и УНТ ( $\omega \gg 1$ ), при сильном стерическом и дисперсионном взаимодействии нанотрубок ( $\kappa \gg 1$ ,  $\omega_p \gg 1$ ), высокой концентрации примеси и больших значениях магнитного поля  $h$ .

В отсутствие магнитного поля ( $h = 0$ ) уравнения ориентационного равновесия (17) допускают решение  $\eta = S = 0$ , отвечающее изотропной фазе. Уравнения (17) позволяют найти температуру Кюри–Вейсса, ниже которой изотропная фаза становится абсолютно неустойчивой

$$\tau_* = \frac{y_n + y_p \gamma \omega_p}{10} \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{4y_p y_n \gamma (\omega^2 - \omega_p)}{(y_n + y_p \gamma \omega_p)^2}} \right). \quad (18)$$

При высоких температурах, когда суспензия находится в изотропной фазе, с ростом концентрации УНТ в системе сильно вытянутых частиц, к которым относятся УНТ, одни только стерические взаимодействия приводят к нематическому упорядочению примеси. Вследствие ориентационной связи между компонентами суспензии упорядочение УНТ передается матрице, чему отвечает слабо упорядоченная паранематическая фаза. Система (17) позволяет определить критическую концентрацию нанотрубок  $y_p^*$ , выше которой в отсутствие магнитного поля высокотемпературная изо-

тропная фаза является абсолютно неустойчивой по отношению к паранематической фазе

$$y_p^* = \frac{5\tau - \gamma \omega^2 - \gamma(5\tau - 1)(\omega_p + \kappa \tau)}{2\gamma(\omega_p + \kappa \tau - \omega^2)} \times \left[ 1 - \sqrt{1 + \frac{20\tau \gamma (5\tau - 1)(\omega_p + \kappa \tau - \omega^2)}{(5\tau - 5\gamma \tau (\omega_p + \kappa \tau) + \gamma(\omega_p + \kappa \tau - \omega^2))^2}} \right]. \quad (19)$$

Анализ и обсуждение различных предельных случаев для выражений (18) и (19) представлены в работе [8].

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Нами получено представление свободной энергии суспензии УНТ в нематическом ЖК в форме разложения Ландау (16). Коэффициенты этого разложения выражены через параметры молекулярно-статистической модели среднего поля [8]: энергию сцепления УНТ с ЖК-матрицей  $\omega$ , параметры  $\omega_p$  и  $\kappa$ , соответственно учитывающие дисперсионное притяжение и интенсивность стерического отталкивания УНТ, отношение объемов молекул и нанотрубок  $\gamma$  и объемные доли компонентов суспензии  $y_n$  и  $y_p$ .

Перепишем разложение (16) в размерном виде

$$\begin{aligned} \frac{F V_n}{V} = & \frac{5}{2} y_n k_B \left( T - \frac{y_n \lambda}{5 k_B} \right) \eta^2 + \frac{1}{2} y_p \gamma^2 \left( \frac{\omega_p}{\lambda} + \kappa k_B T \right) \times \\ & \times \left( \frac{5 k_B T}{\gamma (\omega_p / \lambda + \kappa k_B T)} - y_p \right) S^2 - \\ & - y_n k_B T \left( \frac{5 \cdot 5}{3 \cdot 7} \eta^3 - \frac{5 \cdot 5 \cdot 17}{2 \cdot 2 \cdot 7 \cdot 7} \eta^4 \right) - \\ & - y_p \gamma k_B T \left( \frac{5 \cdot 5}{3 \cdot 7} S^3 - \frac{5 \cdot 5 \cdot 17}{2 \cdot 2 \cdot 7 \cdot 7} S^4 \right) - \frac{y_n y_p \gamma \omega}{\lambda} \eta S - \\ & - \frac{1}{3} H^2 (y_n \chi_a^n \eta + y_p \gamma \chi_a^p S) + \dots, \end{aligned} \quad (20)$$

из которого видно, что слагаемые  $\sim \eta^3$ ,  $\sim \eta^4$ ,  $\sim S^3$  и  $\sim S^4$  не зависят от констант среднего поля ( $\lambda$ ,  $\omega/\lambda$  и  $\omega_p/\lambda$ ), а значит имеют исключительно энтропийное происхождение.

Ранее в работах [13–15] была предложена феноменологическая теория суспензий УНТ в нематическом ЖК, где рассматривалось слабое [13] и сильное [14, 15] сцепление молекул ЖК и нанотрубок. В отличие от разложения (20), где ориентационная связь компонентов суспензии учитывается с помощью слагаемого  $\sim \eta S$ , в работах [13–15] предложены модифицированные формы энергии сцепления, содержащие вклады с более высокими степенями параметров порядка  $\sim \eta S(1 - S/2)$  для слабого и  $\sim \eta^2 S(1 - S/2)$  для сильного сцепле-

ний ЖК и нанотрубок. Такого рода вклады в свободную энергию (1) возможно ввести, используя слагаемые вида  $\sim \eta_{ik} \eta_{kj} S_{ji}$ ,  $\sim \eta_{ik} S_{kj} S_{ji}$  и  $\sim \eta_{ik} \eta_{kj} S_{jl} S_{li}$ , каждое из которых должно иметь в качестве множителя дополнительный параметр сцепления — некоторое среднее поле. В еще одной работе, посвященной феноменологической теории смеси двух лиотропных ЖК [16], для описания ориентационной связи компонентов смеси, в отличие от (1), использовались два инварианта вида  $\sim \eta_{ik} S_{ik}$  и  $\sim \eta_{ik} \eta_{kj} S_{jl} S_{ji}$ . В работе [17] рассматривалась феноменологическая теория суспензии УНТ в ЖК с молекулами палочкообразной или дискообразной формы. В одноосном случае представленный в [17] термодинамический потенциал имеет аналогичный (20) вид. Также нужно отметить работы по феноменологической теории сегнетоэлектрических частиц в нематическом ЖК [18, 19], где сцепление частиц с матрицей учитывалось с помощью слагаемого вида  $\sim \eta S$ . Однако, в отличие от рассматриваемого в настоящей статье случая дисперсионного взаимодействия молекул ЖК и УНТ, в работах [18, 19] сцепление примесных частиц с матрицей обусловлено электрической поляризацией молекул нематика, которую индуцируют электрические дипольные моменты частиц. В заключении обсудим результаты недавней работы [20], где был предложен альтернативный способ построения разложения свободной энергии в форме Ландау, исходя из теории среднего поля Майера—Заупе для двухкомпонентной смеси ЖК. В отличие от реализованного в настоящей статье подхода, основанного на методе эффективного поля, авторы работы [20] представили одночастичные ориентационные функции распределения молекул ЖК в виде разложения по полиномам Лежандра и далее разложили энтропию по степеням параметров порядка. Итоговое выражение для свободной энергии [20] имеет схожий с (20) вид с той разницей, что числовые коэффициенты при содержащих температуру слагаемых получились другими. Здесь нужно отметить, что полученные в настоящей работе выражения для температуры Кюри—Вейсса (18) и критической концентрации (19) согласуются с молекулярно-статистической теорией [8] и в предельном случае однокомпонентного нематика ( $y_p = 0$ ) для точки Кюри получается известный результат  $\tau_* = \tau_*^{LC} = 0.2$  [8, 10] в отличие от работы [20].

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом эффективного поля построено разложение Ландау свободной энергии ЖК-суспензии УНТ, находящейся в магнитном поле, в виде ряда по степеням параметров порядка на основе термодинамического потенциала молекулярно-

статистической теории. Проведено сопоставление полученного разложения с феноменологическими теориями Ландау, которые были предложены для ЖК композитов УНТ, сегнетоэлектрических частиц, а также для бинарных смесей ЖК.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Фонда развития теоретической физики и математики “БАЗИС” и Минобрнауки России (проект № FSNF-2023-0004).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Yadav S.P., Singh S.* // Prog. Mater. Sci. 2016. V. 80. P. 38.
2. *Draude A.P., Dierking I.* // Nano Express. 2021. V. 2. Art. No. 012002.
3. *Елецкий А.В.* // УФН. 1997. Т. 167. № 9. С. 945; *Eletskii A.V.* // Phys. Usp. 1997. V. 40. No. 9. P. 899.
4. *Белоненко М.Б., Глазов С.Ю., Мещерякова Н.Е.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2009. Т. 73. № 12. С. 1709; *Belonenko M.B., Glazov S.Yu., Meshcheryakova N.E.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2009. V. 73. No. 12. P. 1601.
5. *Бабаяев А.А., Алиев А.М., Теруков Е.И. и др.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2017. Т. 81. № 5. С. 684; *Babaeva A.A., Alieva A.M., Terukov E.I. et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2017. V. 81. No. 5. P. 623.
6. *Кононенко О.В., Матвеев В.Н., Касумов Ю.А. и др.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2010. Т. 74. № 7. С. 1032; *Kononenko O.V., Matveeva V.N., Kasumov Yu.A. et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2010. V. 74. No. 7. P. 991.
7. *de Gennes P.G., Prost J.* The physics of liquid crystals. Oxford: Clarendon Press, 1993. 598 p.
8. *Петров Д.А., Захлевных А.Н., Манцуоров А.В.* // ЖЭТФ. 2018. Т. 154. № 2(8). С. 415; *Petrov D.A., Zakhlevnykh A.N., Mantsurov A.V.* // J. Exp. Theor. Phys. 2018. V. 127. No. 2. P. 357.
9. *Rusakov V.V., Shliomis M.I.* // J. Physique Lett. 1985. V. 46. Art. No. L935.
10. *Katriel J., Kvetsel G.F., Luckhurst G.R. et al.* // Liq. Cryst. 1986. V. 1. P. 337.
11. *Luckhurst G.R., Naemura S., Sluckin T.J. et al.* // Phys. Rev. E. 2012. V. 5. Art. No. 031705.
12. *Леонтович М.А.* // ЖЭТФ. 1938. Т. 8. № 7. С. 844.
13. *van der Schoot P., Popa-Nita V., Kralj S.* // J. Phys. Chem. B. 2008. V. 112. Art. No. 4512.
14. *Popa-Nita V., Kralj S.* // J. Chem. Phys. 2010. V. 132. Art. No. 024902.
15. *Lahiri T., Pushkar S.K., Poddar P.* // Physica B. 2020. V. 588. Art. No. 412177.
16. *Mukherjee P.K.* // J. Mol. Liq. 2016. V. 220. P. 742.
17. *Солдатов Л.А., Кладенок Л.А., Ларин Е.С. и др.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2014. Т. 78. № 8. С. 953; *Soldatov L.A., Kladenok L.A., Larin E.S. et al.* // Bull. Russ. Acad. Sci. Phys. 2014. V. 78. No. 8. P. 726.
18. *Lopatina L.M., Selinger J.V.* // Phys. Rev. Lett. 2009. V. 102. Art. No. 197802.
19. *Mukherjee P.K.* // Soft Mater. 2020. V. 19. P. 113.
20. *Hölbl A., Pal K., Slavinec M., Kralj S.* // Physica B. 2022. V. 642. Art. No. 414142.

**Liquid-crystal composites of carbon nanotubes in a magnetic field:  
bridging from the molecular-statistical model to phenomenological theory****D. A. Petrov\****Perm State University, Perm, 614990 Russia**\*e-mail: petrovda@bk.ru*

Based on the thermodynamic potential of the molecular-statistical mean-field theory of liquid-crystal composites of carbon nanotubes, a representation of the free energy in the form of the Landau expansion is obtained. The resulting expansion is compared with the previously proposed phenomenological theories.