

УДК 532.783; 539.22; 537.63
PACS 61.30.Cz; 64.70.mf; 64.70.pv

Молекулярно-статистическая модель жидкокристаллических суспензий ферромагнитных углеродных нанотрубок

Д. А. Петров[†], А. В. Манцуров

Пермский государственный национальный исследовательский университет, Пермь, Россия
[†]petrovda@bk.ru

Одним из главных инструментов описания температурных фазовых переходов в нематических жидкокристаллах является теория Майера–Заупе, в основе которой лежит метод среднего или самосогласованного поля. Несмотря на солидный возраст, эта теория не потеряла свою актуальность и составляет основу статистической термодинамики жидкокристаллов. Несомненным плюсом теории Майера–Заупе является то, что она относится к классу точно решаемых моделей статистической физики и позволяет вычислить температурные зависимости параметров порядка, согласующиеся с экспериментальными данными. Однако даже в самом простом случае одноосного нематического жидкого кристалла полученное в рамках теории Майера–Заупе уравнение самосогласования является нелинейным и интегральным, что требует его численного решения. Значительно упростить эту модель можно, если использовать известное в теории магнетизма сферическое приближение. Особенностью этого подхода является то, что встречающиеся в уравнении самосогласования интегралы сводятся к интегралу Пуассона, т.е. вычисляются точно, а само это уравнение в результате приобретает простой алгебраический вид. В настоящей работе рассматривается модификация теории Майера–Заупе на случай коллоидной суспензии ферромагнитных углеродных нанотрубок на основе нематического жидкого кристалла с использованием сферического приближения. Подробно описан способ получения уравнений ориентационного состояния суспензии. Обсуждаются преимущества и особенности предложенного подхода, а также проведено его сравнение с представленными ранее подходами, где использовалось сферическое приближение для описания жидкокристаллов и суспензий на их основе.

Ключевые слова: жидкокристаллическая суспензия; ферромагнитные углеродные нанотрубки; сферическое приближение

Поступила в редакцию 24.02.2025; после рецензии 28.02.2025; принята к опубликованию 28.02.2025

A molecular-statistical model of liquid crystalline suspensions of ferromagnetic carbon nanotubes

D. A. Petrov[†], A. V. Mantsurov

Perm State University, Perm, Russia

[†]petrovda@bk.ru

One of the primary tools for describing temperature phase transitions in nematic liquid crystals is the Maier-Saupe theory, which is based on the mean-field or self-consistent field method. Despite its long history, this theory remains relevant and forms the foundation of the statistical thermodynamics of liquid crystals. A significant advantage of the Maier-Saupe theory is that it belongs to the class of exactly solvable models in statistical physics and allows for the calculation of temperature-dependent order parameters that align with experimental data. However, even in the simplest case of a uniaxial nematic liquid crystal, the self-consistency equation derived within the Maier-Saupe

theory is nonlinear and integral, this necessitating numerical solutions. This model can be significantly simplified by employing the spherical approximation, a well-known method in the theory of magnetism. The key feature of this approach is that the integrals appearing in the self-consistency equation are reduced to Poisson integrals, which can be evaluated exactly, and the equation itself takes on a simple algebraic form. The present study uses the spherical approximation to consider a modification of the Maier-Saupe theory for the case of a colloidal suspension of ferromagnetic carbon nanotubes in a nematic liquid crystal. The method for deriving the orientational state equations for the suspension is described in detail. The advantages and features of the proposed approach are discussed, and a comparison is made with previously presented methods where the spherical approximation was used to describe liquid crystals and suspensions based on them.

Keywords: liquid crystalline suspension; ferromagnetic carbon nanotubes; spherical approximation

Received 24 February 2025; revised 28 February 2025; accepted 28 February 2025

doi: 10.17072/1994-3598-2025-1-29-38

1. Введение

Благодаря своим уникальным физическим свойствам жидкие кристаллы (ЖК) нашли широкое применение в качестве рабочих сред для дисплеев [1], световых клапанов, модуляторов в оптоэлектронных и телекоммуникационных устройствах [2–7]. По этой причине актуальным является запрос на создание новых ЖК-матриц с заданными физическими свойствами. Одним из способов модификации свойств уже имеющихся ЖК является допиривание их небольшим количеством различных наночастиц. Частицы могут влиять на ориентационный порядок нематической среды, что в зависимости от материала самих наночастиц позволяет усиливать электро- или магнитоориентационный отклик матрицы. Одним из популярных и перспективных примеров примесных частиц, добавляемых в ЖК, являются углеродные нанотрубки (УНТ) [8–11]. Благодаря значительной анизотропии формы такие нанотрубки обладают сильной ориентационной связью с ЖК-матрицей, а наличие аномально высокой диамагнитной анизотропии нанотрубок существенно понижает управляющую ориентационной структурой напряженность магнитного поля по сравнению с беспримесным ЖК. В свою очередь, внутрь нанотрубки могут быть помещены феррочастицы (инкапсулированные УНТ) [12–14], или же ферромагнитная примесь размещена на поверхности трубки (функционализированные УНТ) [15–19]. Следуя [12], такие композитные нанотрубки будем называть ферромагнитными углеродными нанотрубками (ФУНТ). В дальнейшем существенным будет являться лишь то, что такие ФУНТ обладают магнитным моментом; при этом нет различий в том, где располагаются феррочастицы – внутри или на поверхности нанотрубки.

Существенным отличием ФУНТ от обычных УНТ является то, что такие частицы обладают двумя механизмами взаимодействия с внешним магнитным полем – квадрупольным, благодаря диамагнитной анизотропии УНТ, и дипольным, за счет добавления магнитных частиц. Имеющиеся теоретические подходы к описанию ЖК-сuspensionей

ФУНТ ограничены лишь описанием индуцированных магнитным полем переходов Фредерикса в рамках континуальной теории [22, 21] и не касаются описания температурных переходов, в том числе во внешнем магнитном поле. Таким образом, в настоящей работе впервые предложена молекуллярно-статистическая модель супензий ФУНТ в нематическом ЖК. За основу модели берутся предложенные ранее теории среднего поля ферронематиков – высокодисперсных коллоидных супензий анизометрических магнитных частиц в ЖК [22–24] и статистическая теория супензий обычных УНТ в ЖК [25–27]. Особенностью рассматриваемой нами модели является использование известного в теории магнетизма сферического приближения [28, 29]. В этом случае условие единичности векторов, характеризующих направления длинных осей молекул и нанотрубок, не выполняется, т.е. компоненты этих векторов могут принимать любые действительные значения. Однако считается, что средние значения квадратов векторов ориентации молекул ЖК и частиц остаются равными единице – сферическая связь. Такой подход позволяет получить уравнения ориентационного состояния супензии в простом алгебраическом виде и точно вычислить выражение для свободной энергии. Ранее в статистической физике ЖК сферическое приближение использовалось для описания ориентационного упорядочения термотропных нематических [30], холестерических [31] и смектических [32] ЖК, а также смесей нематического ЖК и анизометрических частиц [23], в том числе и ферронематиков [24] в магнитном поле. Во всех представленных теориях результаты, полученные в рамках сферического приближения, качественно согласуются с обычной теорией среднего поля.

2. Теоретическая модель

2.1. Параметры порядка

Рассмотрим супензию ФУНТ в нематическом ЖК, состоящую из N_n молекул и N_p нанотрубок. Каждая из компонент представляет собой систему

анизометрических палочкообразных частиц, способных к спонтанному ориентационному упорядочению. Ориентацию каждой молекулы и примесной нанотрубки будем описывать с помощью аналогичных симметрических бесследовых тензоров второго ранга

$$v_{ik}^{(\alpha)} = \sqrt{\frac{3}{2}} \left(v_{\alpha i} v_{\alpha k} - \frac{1}{3} \mathbf{v}_{\alpha}^2 \delta_{ik} \right), \quad (1)$$

$$e_{ik}^{(\beta)} = \sqrt{\frac{3}{2}} \left(e_{\beta i} e_{\beta k} - \frac{1}{3} \mathbf{e}_{\beta}^2 \delta_{ik} \right). \quad (2)$$

Здесь и далее по повторяющимся тензорным индексам подразумевается суммирование. Вектор \mathbf{v}_{α} направлен вдоль главной (длинной) оси α -й молекулы нематика ($\alpha = 1, \dots, N_n$), а вектор \mathbf{e}_{β} – вдоль главной (длинной) оси β -й нанотрубки ($\beta = 1, \dots, N_p$). В обычной модели среднего поля векторы \mathbf{v}_{α} и \mathbf{e}_{β} являются единичными. В рассматриваемой нами модели считаем, что эти векторы являются единичными лишь в среднем, т.е. подчиняются сферической связи [23, 24, 28, 29]:

$$\langle \mathbf{v}_{\alpha}^2 \rangle = \frac{1}{N_n} \sum_{\alpha=1}^{N_n} \mathbf{v}_{\alpha}^2 = 1,$$

$$\langle \mathbf{e}_{\beta}^2 \rangle = \frac{1}{N_p} \sum_{\beta=1}^{N_p} \mathbf{e}_{\beta}^2 = 1. \quad (3)$$

Далее для краткости опустим индексы α и β , отвечающие за номер молекулы ЖК и ФУНТ соответственно.

Будем рассматривать положительные анизотропии диамагнитной восприимчивости ЖК и УНТ χ_a^n и χ_a^p соответственно. Кроме этого, считаем, что каждая УНТ обладает постоянным магнитным моментом μ , жестко связанным с нанотрубкой и совпадающим по направлению с ее главной осью \mathbf{e} . Будем полагать, что молекулы и нанотрубки обладают ориентационной связью и в равновесии их главные оси нематического порядка совпадают и могут быть описаны одним единичным вектором – директором \mathbf{n} . Во внешнем магнитном поле $\mathbf{H} = (0, 0, H)$ длинные оси молекул и нанотрубок будут ориентироваться в направлении поля, которое можно связать с директором супензии $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$ как $\mathbf{H} = H\mathbf{n}$.

В результате статистического усреднения микроскопических тензоров ориентации (1) и (2) можно получить макроскопические тензоры ориентации компонентов супензии:

$$\langle v_{ik} \rangle \equiv \eta_{ik} = \sqrt{\frac{3}{2}} \eta \left(n_i n_k - \frac{1}{3} \delta_{ik} \right), \quad (4)$$

$$\langle e_{ik} \rangle \equiv S_{ik} = \sqrt{\frac{3}{2}} S \left(n_i n_k - \frac{1}{3} \delta_{ik} \right), \quad (5)$$

главные оси которых задаются макроскопически выделенным направлением – директором \mathbf{n} . В (4) и (5) введены скалярные (нематические) параметры порядка для ЖК и ФУНТ соответственно η и S . Для их определения вычислим свертки тензоров

$$\eta_{ik} \eta_{ik} = \eta^2, \quad \eta_{ik} v_{ik} = \eta \left[\frac{3}{2} (\mathbf{nv})^2 - \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 \right],$$

$$S_{ik} S_{ik} = S^2, \quad S_{ik} e_{ik} = S \left[\frac{3}{2} (\mathbf{ne})^2 - \frac{1}{2} \mathbf{e}^2 \right]$$

и воспользуемся выражениями (4) и (5), в результате получим

$$\eta = \left\langle \frac{3}{2} (\mathbf{nv})^2 - \frac{1}{2} \mathbf{v}^2 \right\rangle, \quad (6)$$

$$S = \left\langle \frac{3}{2} (\mathbf{ne})^2 - \frac{1}{2} \mathbf{e}^2 \right\rangle. \quad (7)$$

Здесь нужно отметить, что в теории Майера – Зайепе или обычной модели среднего поля [23, 24] скалярные параметры порядка определяются как статистическое среднее от вторых полиномов Лежандра $\eta = \langle P_2(\mathbf{nv}) \rangle$ и $S = \langle P_2(\mathbf{ne}) \rangle$. Выражения (6) и (7) сводятся к полиномам Лежандра, если выполняется условие $\mathbf{v}^2 = \mathbf{e}^2 = 1$, когда отсутствует сферическая связь.

Значения η и S могут меняться от $-1/2$ до 1 и зависят от температуры, внешнего магнитного поля, концентрации и геометрических размеров примесных ФУНТ. Положительным η и S отвечает нематическое упорядочение супензии, когда длинные оси ЖК и ФУНТ стремятся ориентироваться в направлении директора \mathbf{n} . В предельном случае $\eta = S = 1$ длинные оси молекул и частиц строго параллельны директору ($\mathbf{v} \parallel \mathbf{n}$ и $\mathbf{e} \parallel \mathbf{n}$). Антинематическому упорядочению отвечают отрицательные значения η и S , когда длинные оси молекул и нанотрубок ориентируются преимущественно в плоскости ортогональной вектору \mathbf{n} . В случае $\eta = S = -1/2$ получаем строго $\mathbf{v} \perp \mathbf{n}$ и $\mathbf{e} \perp \mathbf{n}$. Нуевые значения параметров порядка $\eta = S = 0$ отвечают изотропному состоянию, в котором отсутствует какое-либо упорядочение ЖК и нанотрубок. Нужно отметить, что антинематическое упорядочение наблюдалось только в смесях ЖК или ЖК и частиц [33–36], а также индуцировалось внешним полем [37]. Лишь относительно недавно были получены ЖК-системы с антинематическим упорядочением [38], что открывает перспективы для создания новых композитных материалов. Для описания таких систем требуется представить макроскопические тензоры ориентации (4) и (5) в более общей двусосной форме записи, как это было сделано, например, в работе [27].

Так как мы полагаем, что нанотрубки являются ферромагнитными, т.е. обладают постоянными магнитными моментами, то для описания намагниченности ансамбля ФУНТ во внешнем магнитном поле воспользуемся векторным параметром порядка – приведенной намагниченностью

$$\mathbf{M} = M \mathbf{n}. \quad (8)$$

Здесь введена величина

$$M = \langle \mathbf{n} \mathbf{e} \rangle, \quad (9)$$

которая определяет дипольную часть намагченности суспензии – полярный параметр порядка. Величина M может меняться от 0 до 1, где $M = 0$ отвечает отсутствию намагченности при $\mathbf{H} = 0$, а $M = 1$ соответствует полностью намагнченному состоянию, когда все магнитные моменты ФУНТ ориентированы строго в направлении поля.

2.2. Свободная энергия

В рамках модели среднего поля общая функция распределения молекул и нанотрубок по ориентациям их длинных осей W может быть представлена в виде произведения одночастичных функций распределения молекул нематика W_n и примесных частиц W_p , т.е.

$$W = (W_n)^{N_n} (W_p)^{N_p}. \quad (10)$$

Воспользуемся результатами работ [22, 27] и запишем обезразмеренное выражение для плотности свободной энергии суспензии ФУНТ в НЖК в приближении среднего поля:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = \frac{F v_n}{\lambda V} = & -\frac{1}{2} y_n^2 \eta_{ik} \eta_{ik} - \\ & -\frac{1}{2} y_p^2 \gamma^2 (\omega_p + \kappa \tau) S_{ik} S_{ik} - y_n y_p \gamma \omega \eta_{ik} S_{ik} - \\ & -y_p \gamma (M_i h_i) - \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{3}} h_i h_k (y_n \xi_n \eta_{ik} + y_p \gamma \xi_p S_{ik}) + \\ & + y_n \tau \langle \ln W_n \rangle + y_p \gamma \tau \langle \ln W_p \rangle. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь F – размерная свободная энергия Гельмгольца; $y_p = v_p N_p / V$ и $y_n = v_p N_p / V = 1 - y_p$ – соответственно объемные доли нанотрубок и ЖК (v_n и $v_p = \pi D_p^2 L_p / 4$ – объем молекулы ЖК и цилиндрической нанотрубки соответственно, а D_p и L_p – соответственно диаметр и длина нанотрубки); V – объем системы; $h = H \mu_0 \mu / \lambda$ – безразмерное магнитное поле (μ_0 – магнитная проницаемость вакуума) и введены параметры $\gamma = v_n / v_p$, $\xi_n = \lambda \chi_a^n / (\mu_0 \mu^2)$ и $\xi_p = \lambda \chi_a^p / (\mu_0 \mu^2)$. Роль константы среднего поля Майера–Заупе здесь играет величина $\lambda = A_n / v_n$, где A_n – энергия взаимодействия молекул нематика. Безразмерный параметр $\omega = A / A_n$ характеризует относительную роль энергии ориентационного взаимодействия A между нанотрубками и молекулами ЖК, а параметр $\omega_p = A_p / A_n$ описывает относительную роль энергии взаимодействия A_p между УНТ, которая имеет ван-дер-ваальсовое происхождение. Параметр $\kappa = 5\pi D_p L_p^2 / (16 v_n)$

учитывает исключенный объем нанотрубок, т.е. их стерическое отталкивание в рамках теории Онзагера [39] в приближении, что $L_p \gg D_p$. Также здесь определена безразмерная температура $\tau = k_B T / \lambda$ (k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура).

В выражении (11) первое слагаемое учитывает взаимодействие между молекулами нематика. Следующие два слагаемых учитывают дисперсионное притяжение и стерическое отталкивание нанотрубок [25–27, 39, 40] соответственно. Четвертое слагаемое в (11) связано с перекрестным эффектом – взаимным влиянием ЖК и примесной подсистемы. При $\omega > 0$ отсутствие поля этот вклад минимизируется, когда тензоры макроскопической ориентации η_{ik} и S_{ik} характеризуются одним директором \mathbf{n} (см. определения (4) и (5)), что отвечает планарному сцеплению ФУНТ с ЖК-матрицей. Пятое слагаемое учитывает взаимодействие магнитных моментов ФУНТ с внешним магнитным полем. Шестое и седьмое слагаемые в (11) учитывают взаимодействия диамагнитного нематика и нанотрубок (без магнитных частиц) с внешним магнитным полем соответственно. Последние два слагаемых в (11) учитывают ориентационную энтропию молекул и примесных частиц соответственно.

После вычисления всех сверток тензоров (4) и (5) свободная энергия (11) в терминах скалярных и полярного параметров порядка примет вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = & -\frac{1}{2} y_n^2 \eta^2 - \frac{1}{2} y_p^2 \gamma^2 S^2 (\omega_p + \kappa \tau) - \\ & -y_n y_p \gamma \omega \eta S - \\ & -y_p \gamma h M - \frac{1}{3} h^2 (y_n \xi_n \eta + y_p \gamma \xi_p S) + \\ & + y_n \tau \langle \ln W_n \rangle + y_p \gamma \tau \langle \ln W_p \rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

2.3. Одночастичные функции распределения

Самосогласованные уравнения для одночастичных функций распределения W_n и W_p могут быть получены из условия, что плотность свободной энергии (12) имеет минимум для всех вариаций, удовлетворяющих условиям нормировки

$$\int W_n d\mathbf{v} = \int W_p d\mathbf{e} = 1 \quad (13)$$

и условиям сферической связи для молекул ЖК и ФУНТ (3), которые можно переписать в виде

$$\int \mathbf{v}^2 W_n d\mathbf{v} = \int \mathbf{e}^2 W_p d\mathbf{e} = 1. \quad (14)$$

Составим вспомогательный функционал

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{F}} = & \mathcal{F} + \Lambda_n \left[\int W_n d\mathbf{v} - 1 \right] + \\ & + y_n \chi_n \left[\int \mathbf{v}^2 W_n d\mathbf{v} - 1 \right] + \Lambda_p \left[\int W_p d\mathbf{e} - 1 \right] + \end{aligned}$$

$$+y_p\gamma\kappa_p \left[\int \mathbf{e}^2 W_p d\mathbf{e} - 1 \right] = 0, \quad (15)$$

где Λ_n , Λ_p , κ_n и κ_p – неопределенные множители Лагранжа. При варьировании нужно учитывать, что (12) и вместе с этим, и в (15) входят выражения для параметров порядка (6), (7) и (9), которые зависят от функций распределения:

$$\eta = \int \left[\frac{3}{2}(\mathbf{n}\mathbf{v})^2 - \frac{1}{2}\mathbf{v}^2 \right] W_n d\mathbf{v}, \quad (16)$$

$$S = \int \left[\frac{3}{2}(\mathbf{n}\mathbf{e})^2 - \frac{1}{2}\mathbf{e}^2 \right] W_p d\mathbf{e}, \quad (17)$$

$$M = \int (\mathbf{n}\mathbf{e}) W_p d\mathbf{e}. \quad (18)$$

В результате варьирования получим самосогласованные уравнения:

$$\begin{aligned} \ln W_n &= \frac{\sigma_n}{\tau} \left[\frac{3}{2}(\mathbf{n}\mathbf{v})^2 - \frac{1}{2}\mathbf{v}^2 \right] - \\ &- \frac{\kappa_n}{\tau} \mathbf{v}^2 - \frac{(\Lambda_n + 1)}{y_n \tau}, \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \ln W_p &= \frac{\sigma_p}{\tau} \left[\frac{3}{2}(\mathbf{n}\mathbf{e})^2 - \frac{1}{2}\mathbf{e}^2 \right] + \\ &+ \frac{h}{\tau}(\mathbf{n}\mathbf{e}) - \frac{\kappa_p}{\tau} \mathbf{e}^2 - \frac{(\Lambda_p + 1)}{y_p \gamma \tau}, \end{aligned} \quad (20)$$

где введены обозначения:

$$\sigma_n = \left[y_n \eta + y_p \gamma \omega S + \frac{1}{3} \xi_n h^2 \right], \quad (21)$$

$$\sigma_p = \left[y_p \gamma (\omega_p + \kappa \tau) S + y_n \omega \eta + \frac{1}{3} \xi_p h^2 \right]. \quad (22)$$

Множители Лагранжа в (19) и (20) могут быть исключены с помощью условий нормировки (13). В результате уравнения (19) и (20) позволяют записать нормированные одночастичные функции распределения молекул ЖК и ФУНТ по ориентациям их длинных осей в рамках сферического приближения:

$$W_n(\mathbf{v}) = \frac{\exp \left\{ \frac{3\sigma_n}{2\tau}(\mathbf{n}\mathbf{v})^2 - \left(\frac{\sigma_n + 2\kappa_n}{2\tau} \right) \mathbf{v}^2 \right\}}{Z_n}, \quad (23)$$

$$\begin{aligned} W_p(\mathbf{e}) &= \\ &= \frac{\exp \left\{ \frac{3\sigma_p}{2\tau}(\mathbf{n}\mathbf{e})^2 + \frac{h}{\tau}(\mathbf{n}\mathbf{e}) - \left(\frac{\sigma_p + 2\kappa_p}{2\tau} \right) \mathbf{e}^2 \right\}}{Z_p}. \end{aligned} \quad (24)$$

Здесь введены обозначения для интегралов:

$$Z_n = \int \exp \left\{ \frac{3\sigma_n}{2\tau}(\mathbf{n}\mathbf{v})^2 - \left(\frac{\sigma_n + 2\kappa_n}{2\tau} \right) \mathbf{v}^2 \right\} d\mathbf{v}, \quad (25)$$

$$\begin{aligned} Z_p &= \int \exp \left\{ \frac{3\sigma_p}{2\tau}(\mathbf{n}\mathbf{e})^2 + \frac{h}{\tau}(\mathbf{n}\mathbf{e}) - \left(\frac{\sigma_p + 2\kappa_p}{2\tau} \right) \mathbf{e}^2 \right\} d\mathbf{e}. \end{aligned} \quad (26)$$

2.4. Получение уравнения ориентационного состояния. Первый способ

Как уже отмечалось, в сферическом приближении нет ограничений на длину векторов ориентации выделенных осей ЖК и ФУНТ, поэтому в декартовой системе координат все компоненты векторов \mathbf{v} и \mathbf{e} могут принимать любые действительные значения. Таким образом, возникающие в (25) и (26) интегралы вычисляются по двум формулам:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-ax^2\} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad (27)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\{-ax^2 + bx\} dx = \exp\left\{\frac{b^2}{4a}\right\} \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad (28)$$

где $a > 0$.

В результате интегрирования (25) и (26) получим

$$Z_n = \frac{2\pi\tau}{2\kappa_n + \sigma_n} \sqrt{\frac{\pi\tau}{\kappa_n - \sigma_n}}, \quad (29)$$

$$Z_p = \frac{2\pi\tau}{2\kappa_p + \sigma_p} \sqrt{\frac{\pi\tau}{\kappa_p - \sigma_p}} \exp\left\{\frac{h^2}{4\tau(\kappa_p - \sigma_p)}\right\}. \quad (30)$$

Перейдем к нахождению уравнений для параметров порядка системы (16)–(18). Встречающиеся в этих выражениях интегралы также легко вычисляются по формулам:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp\{-ax^2\} dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad (31)$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} x \exp\{-ax^2 + bx\} dx &= \\ &= \frac{b}{a} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left\{\frac{b^2}{4a}\right\}, \end{aligned} \quad (32)$$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \exp\{-ax^2 + bx\} dx &= \\ &= \frac{(b^2 + 2a)}{4a^2} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \exp\left\{\frac{b^2}{4a}\right\}, \end{aligned} \quad (33)$$

где $a > 0$.

После интегрирования (16)–(18), используя вычисленные выражения (29) и (30), можно записать:

$$\eta = \frac{3}{2} \frac{\tau}{(\kappa_n - \sigma_n)} - \frac{1}{2}, \quad (34)$$

$$\frac{1}{3}(2S + 1) = \frac{1}{4} \frac{h^2}{(\kappa_p - \sigma_p)^2} + \frac{1}{2} \frac{\tau}{(\kappa_p - \sigma_p)}, \quad (35)$$

$$M = \frac{1}{2} \frac{h}{(\kappa_p - \sigma_p)}. \quad (36)$$

Воспользуемся теперь условиями сферической связи (14) и найдем дополнительную пару уравнений для множителей Лагранжа κ_n и κ_p :

$$\frac{1}{2} \frac{\tau}{(\kappa_n - \sigma_n)} + 2 \frac{\tau}{(2\kappa_n + \sigma_n)} = 1, \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \frac{h^2}{4(\kappa_p - \sigma_p)^2} + \frac{1}{2} \frac{\tau}{(\kappa_p - \sigma_p)} + \\ + 2 \frac{\tau}{(2\kappa_p + \sigma_p)} = 1. \end{aligned} \quad (38)$$

Решая совместно пары уравнений (34) и (35), а также (37) и (38), находим лагранжевые множители:

$$\kappa_n = \sigma_n + \frac{3\tau}{2(2\eta + 1)}, \quad (39)$$

$$\kappa_p = \frac{3\tau}{2(1 - S)} - \frac{1}{2}\sigma_p. \quad (40)$$

Исключив найденные множители из (34)–(36), в результате переходим к следующей системе уравнений ориентационного состояния супензии ФУНТ в ЖК в рамках сферического приближения

$$3\eta\tau - \sigma_n(1 - \eta)(2\eta + 1) = 0, \quad (41)$$

$$3S\tau - \sigma_p(1 - S)(2S + 1) = Mh(1 - S), \quad (42)$$

$$M = \frac{1}{3} \frac{h(1 - S)}{\tau - \sigma_p(1 - S)}. \quad (43)$$

Эта система уравнений имеет простой алгебраический вид и позволяет определить температурные, концентрационные и полевые зависимости параметров порядка системы, а также намагниченность ансамбля ФУНТ. В пределе низких температур эти уравнения дают правильные асимптотические значения для параметров порядка. При $\tau = 0$, $h = 0$ и положительных ω (планарное сцепление ФУНТ и молекул ЖК) получаем $\eta = S = 1$ или $\eta = S = -1/2$. В беспримесном ЖК, когда объемная доля УНТ $y_p = 0$, получаем уравнение

$$3\eta\tau - \sigma_n(1 - \eta)(2\eta + 1) = 0, \quad (44)$$

которое совпадает с тем, что получено в работе [30].

2.5. Получение уравнения ориентационного состояния. Второй способ

Уравнения ориентационного равновесия и множители Лагранжа можно также определить из условий минимума свободной энергии (12):

$$\frac{\partial F}{\partial \eta} = \frac{\partial F}{\partial S} = \frac{\partial F}{\partial \kappa_n} = \frac{\partial F}{\partial \kappa_p} = 0. \quad (45)$$

Для этого вычислим энтропийные вклады в свободной энергии (12) с помощью найденных функций распределения (23) и (24):

$$\langle \ln W_n \rangle = \int W_n \ln W_n d\mathbf{v} = \frac{\sigma_n}{\tau} \eta - \frac{\kappa_n}{\tau} - \ln Z_n, \quad (46)$$

$$\begin{aligned} \langle \ln W_p \rangle = \int W_p \ln W_p d\mathbf{e} = \frac{\sigma_p}{\tau} S + \frac{h}{\tau} M - \\ - \frac{\kappa_p}{\tau} - \ln Z_p, \end{aligned} \quad (47)$$

где интегралы Z_n и Z_p уже вычислены (см. выражения (29) и (30)). После подстановки (46) и (47) в (12) запишем

$$\begin{aligned} \mathcal{F} = \frac{1}{2} y_n^2 \eta^2 + \frac{1}{2} y_p^2 \gamma^2 S^2 (\omega_p + \kappa\tau) + \\ + y_n y_p \gamma \omega \eta S - y_n \kappa_n - \\ - y_p \gamma \kappa_p - y_n \tau \ln Z_n - y_p \gamma \tau \ln Z_p. \end{aligned} \quad (48)$$

Условия минимума свободной энергии (48) позволяют получить те же выражения для множителей Лагранжа (39) и (40), а также уравнения для скалярных параметров порядка (41) и (42). Дипольная часть приведенной намагниченности супензии M (полярный параметр порядка) должна быть получена путем усреднения величины (ne) (см. выражение (18)) с найденной функцией распределения (24). Намагниченность всей супензии может быть найдена с помощью термодинамического соотношения

$$\mathcal{M} = \frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial H}. \quad (49)$$

3. Обсуждение

Предложенный нами первый способ получения уравнений ориентационного состояния, основывающийся на нахождении одиночественных функций распределения, с помощью которых далее вычисляются все необходимые средние, является более простым и менее трудоемким, чем второй способ, где нужно минимизировать свободную энергию (48). Действительно, уравнения (34) и (37) сразу позволяют определить множитель Лагранжа κ_n и первое уравнение для параметра порядка ЖК (41). Вторая пара уравнений (35) и (38) без труда позволяет выразить второй множитель Лагранжа и после его исключения получить уравнения для параметров порядка ФУНТ (42) и (43). При минимизации свободной энергии (45) получаются более громоздкие уравнения, которые гораздо сложнее для преобразований, нахождения и исключения множителей Лагранжа.

Ранее для беспримесных нематических [30], холестерических [31] и смектических [32] ЖК, а также ЖК-супензий анизометрических частиц [23], в том числе и магнитных [24], использовался третий способ получения уравнений ориентационного состояния. Этот способ основан на записи гамильтониана системы в приближении среднего поля. С

помощью этого гамильтониана вычисляется статистический интеграл, записывается выражение для свободной энергии, которое далее минимизируется по параметрам порядка и множителям Лагранжа. В этом смысле такой подход похож на рассмотренный нами второй способ получения уравнений ориентационного состояния и обладает теми же недостатками. Значительного упрощения в этом способе можно добиться, если с помощью гамильтониана среднего поля записать одночастичные псевдопотенциалы молекулы ЖК и частиц. Это позволит найти функции распределения, с помощью которых можно вычислить все необходимые средние, как в рассматриваемом нами первом способе получения уравнений ориентационного состояния.

4. Заключение

В работе предложена молекулярно-статистическая модель суспензии ФУНТ в нематическом ЖК. Использовано известное в теории магнетизма сферическое приближение, позволяющее получить систему уравнений самосогласования в простой алгебраической форме в отличие от обычной модели среднего поля, где уравнения самосогласования являются нелинейными и интегральными. Это, несомненно, является преимуществом предложенного нами подхода. Рассматриваемая модель среднего поля может быть обобщена на случай двусного ориентационного упорядочения ЖК-суспензий на частицах [27], что позволит описать ориентационные состояния системы, минуя решение системы нелинейных интегральных уравнений.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект № FSNF-2024-0001).

Список литературы

1. Kobayashi S., Miyama T., Akiyama H. et al. Development of liquid crystal displays and related improvements to their performances // Proceedings of the Japan Academy, Series B. 2022. Vol. 98. N. 9. P. 493–516. DOI: 10.2183/pjab.98.025
2. Tran A., Boott C. E., MacLachlan M. J. Understanding the self-assembly of cellulose nanocrystals – toward chiral photonic materials // Advanced Materials. 2020. Vol. 32. N. 41, 1905876. DOI: 10.1002/adma.201905876
3. Ma L.-L., Li C.-Y., Pan J.-T. et al. Self-assembled liquid crystal architectures for soft matter photonics // Light: Science & Applications. 2022. Vol. 11. N. 1, 270. DOI: 10.1038/s41377-022-00930-5
4. Yang Y., Forbes A., Cao L. A review of liquid crystal spatial light modulators: devices and applications // Opto-Electronic Science. 2023. Vol. 2. N. 8, 230026. DOI: 10.29026/oes.2023.230026
5. Prakash J., Varshney D., Chauhan S. et al. Progress in radiations induced engineering of liquid crystals properties for high-performance applications // Physics Reports. 2023. Vol. 1015. P. 1–23. DOI: 10.1016/j.physrep.2023.03.003
6. Shen W., Zhang H., Miao Z., Ye Z. Recent progress in functional dye-doped liquid crystal devices // Advanced Functional Materials. 2023. Vol. 33. N. 6, 2210664. DOI: 10.1002/adfm.202210664
7. Zhang K., Yu H. Chiroptical studies on nanoparticle-liquid crystal composites // Liquid Crystals. 2023. Vol. 50. N. 4. P. 572–583. DOI: 10.1080/02678292.2023.2188617
8. Yadav S. P., Singh S. Carbon nanotube dispersion in nematic liquid crystals: an overview // Progress in Materials Science. 2016. Vol. 80. P. 38–76. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2015.12.002
9. Chang C., Zhao Y., Liu Y., An L. Liquid crystallinity of carbon nanotubes // RSC Advances. 2018. Vol. 8. N. 28. P. 15780–15795. DOI: 10.1039/C8RA00879E
10. Kumar A., Singh D. P., Singh G. Recent progress and future perspectives on carbon-nanomaterial-dispersed liquid crystal composites // Journal of Physics D. 2021. Vol. 55. N. 8, 083002. DOI: 10.1088/1361-6463/ac2ced
11. Draude A. P., Dierking I. Thermotropic liquid crystals with low-dimensional carbon allotropes // Nano Express. 2021. Vol. 2. N. 1, 012002. DOI: 10.1088/2632-959X/abdf2d
12. Buluy O., Nepijko S., Reshetnyak V. et al. Magnetic sensitivity of a dispersion of aggregated ferromagnetic carbon nanotubes in liquid crystals // Soft Matter. 2011. Vol. 7. N. 2. P. 644–649. DOI: 10.1039/C0SM00131G
13. Jeong H. S., Youn S. C., Kim Y. H., Jung H. T. Orientation control of liquid crystals using carbon-nanotube–magnetic particle hybrid materials // Physical Chemistry Chemical Physics. 2013. Vol. 15. N. 24. P. 9493–9497. DOI: 10.1039/C3CP00052D
14. Комогорцев С. В., Исхаков Р. С., Балаев А. Д. и др. Магнитные свойства ферромагнитных наночастиц Fe_3C , капсулированных в углеродных нанотрубках // Физика твердого тела. 2007. Т. 49. Вып. 4. С. 700–703.
15. Mitróová Z., Koneracká M., Tomašovičová N. et al. Structural transitions in nematic liquid crystals doped with magnetite functionalized single walled carbon nanotubes // Physics Procedia. 2010. Vol. 9. P. 41–44. DOI: 10.1016/j.phpro.2010.11.011
16. Yoo H. J., Lee S. Y., You N. H. et al. Dispersion and magnetic field-induced alignment of functionalized carbon nanotubes in liquid crystals // Synthetic Metals. 2013. Vol. 181. P. 10–17. DOI: 10.1016/j.synthmet.2013.07.023

17. Tomašovičová N., Timko M., Mitróová Z. et al. Capacitance changes in ferroelectric liquid crystals induced by low magnetic fields // Physical Review E. 2013. Vol. 87. N. 1. 014501. DOI: 10.1103/PhysRevE.87.014501
18. Bury P., Veveričk M., Kopčanský P. et al. Structural changes in liquid crystals doped with functionalized carbon nanotubes // Physica E. 2018. Vol. 103. P. 53–59. DOI: 10.1016/j.physe.2018.05.008
19. Dalar N., Javadian S. Synergistic effect of non-covalent interaction in colloidal nematic liquid crystal doped with magnetic functionalized single-walled carbon nanotubes // Journal of Applied Physics. 2018. Vol. 123. N. 11. 115103 DOI: 10.1063/1.5016388
20. Захлевных А. Н., Петров Д. А., Скоков П. К. Влияние ферромагнитных углеродных нанотрубок на магнитные переходы в жидкокристаллах // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2018. Т. 154. Вып. 4 (10). С. 897–908. DOI: 10.1134/S004445101800188
21. Чупеев И. А., Петров Д. А. Ориентационные переходы в магнитокомпенсированных жидкокристаллических суспензиях ферромагнитных углеродных нанотрубок // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии. 2023. Т. 13. Вып. 3. С. 182–198. DOI: 10.21869/2223-1528-2023-13-3-182-198
22. Raikher Y. L., Stepanov V. I., Zakhlevnykh A. N. Mean-field description of the order-disorder phase transition in ferromematics // Soft Matter. 2013. Vol. 9. N. 1. P. 177–184. DOI: 10.1039/C2SM26423D
23. Захлевных А. Н., Лубнин М. С., Петров Д. А. Об одной простой молекулярно-статистической модели жидкокристаллической суспензии анизометрических частиц // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2016. Т. 150. Вып. 5 (11). С. 1041–1051. DOI: 10.7868/S0044451016110249
24. Zakhlevnykh A. N., Lubnin M. S., Petrov D. A. A simple model of liquid-crystalline magnetic suspension of anisometric particles // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2017. Vol. 431. P. 62–65. DOI: 10.1016/j.jmmm.2016.09.044
25. Matsuyama A. Theory of binary mixtures of a rod-like polymer and a liquid crystal // The Journal of Chemical Physics. 2010. Vol. 132. N. 21. 214902. DOI: 10.1063/1.3447892
26. Matsuyama A., Ueda T. Phase diagrams of binary mixtures of liquid crystals and rodlike polymers in the presence of an external field // The Journal of Chemical Physics. 2012. Vol. 136. N. 22. 224904. DOI: 10.1063/1.4728337
27. Petrov D. A. Liquid-crystal composites of carbon nanotubes in a magnetic field: Bridging continuum theory and a molecular-statistical approach // Physical Review E. 2023. Vol. 107. N. 5. 054701. DOI: 10.1103/PhysRevE.107.054701
28. Berlin T. H., Kac M. The spherical model of a ferromagnet // Physical Review. 1952. Vol. 86. N. 6. P. 821–835. DOI: 10.1103/PhysRev.86.821
29. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике. М.: Мир, 1985. 488 с.
30. Vertogen G., van der Meer B. W. A simple molecular statistical treatment of nematics // Physica A. 1979. Vol. 99. N. 1–2. P. 237–250. DOI: 10.1016/0378-4371(79)90132-8
31. Scholte P., Vertogen G. A simple molecular statistical treatment of a model for cholesterics // Physica A. 1982. Vol. 113. N. 3. P. 587–595. DOI: 10.1016/0378-4371(82)90158-3
32. Vertogen G., De Jeu W. H. Thermotropic Liquid Crystals, Fundamentals. Berlin: Springer, 2012. 324 p. DOI: 10.1007/978-3-642-83133-1
33. Liu Q., Senyuk B., Tang J. et al. Plasmonic complex fluids of nematiclike and helicoidal self-assemblies of gold nanorods with a negative order parameter // Physical Review Letters. 2012. Vol. 109. N. 8, 088301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.088301
34. Wensink H. H. Frank elasticity of composite colloidal nematics with anti-nematic order // Soft Matter. 2018. Vol. 14. N. 44. P. 8935–8944. DOI: 10.1039/C8SM01442F
35. Poulin P. How to achieve a successful biaxial marriage // Science. 2018. Vol. 360. N. 6390. P. 712–713. DOI: 10.1126/science.aat7399
36. Senyuk B., Mundoor H., Smalyukh I. I., Wensink H. H. Nematic elasticity of hybrid molecular-colloidal liquid crystals // Physical Review E. 2021. Vol. 104. N. 1, 014703. DOI: 10.1103/PhysRevE.104.014703
37. Dozov I., Paineau E., Davidson P. et al. Electric-field-induced perfect anti-nematic order in isotropic aqueous suspensions of a natural beidellite clay // The Journal of Physical Chemistry B. 2011. Vol. 115. N. 24. P. 7751–7765. DOI: 10.1021/jp201201x
38. Jampani V. S. R., Volpe R. H., Reguengo de Sousa K. et al. Liquid crystal elastomer shell actuators with negative order parameter // Science Advances. 2019. Vol. 5. N. 4, eaaw2476. DOI: 10.1126/sciadv.aaw2476
39. Onsager L. The effects of shape on the interaction of colloidal particles // Annals of the New York Academy of Sciences. 1949. Vol. 51. N. 4. P. 627–659. DOI: 10.1111/j.1749-6632.1949.tb27296.x
40. Петров Д. А., Захлевных А. Н., Манцуров А. В. Ориентационное упорядочение жидкокристаллической суспензии углеродных нанотрубок в магнитном поле // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2018. Т. 154. Вып. 2 (8). С. 415–428. DOI: 10.1134/S0044451018080205

References

1. Kobayashi S., Miyama T., Akiyama H. et al. Development of liquid crystal displays and related improvements to their performances. *Proceedings of the Japan Academy, Series B*, 2022, vol. 98, no. 9, pp. 493–516. DOI: 10.2183/pjab.98.025
2. Tran A., Boott C. E., MacLachlan M. J. Understanding the self-assembly of cellulose nanocrystals – toward chiral photonic materials. *Advanced Materials*, 2020, vol. 32, no. 41, 1905876. DOI: 10.1002/adma.201905876
3. Ma L.-L., Li C.-Y., Pan J.-T. et al. Self-assembled liquid crystal architectures for soft matter photonics. *Light: Science & Applications*, 2022, vol. 11, no. 1, 270. DOI: 10.1038/s41377-022-00930-5
4. Yang Y., Forbes A., Cao L. A review of liquid crystal spatial light modulators: devices and applications. *Opto-Electronic Science*, 2023, vol. 2, no. 8, 230026. DOI: 10.29026/oes.2023.230026
5. Prakash J., Varshney D., Chauhan S. et al. Progress in radiations induced engineering of liquid crystals properties for high-performance applications. *Physics Reports*, 2023, vol. 1015, pp. 1–23. DOI: 10.1016/j.physrep.2023.03.003
6. Shen W., Zhang H., Miao Z., Ye Z. Recent progress in functional dye-doped liquid crystal devices. *Advanced Functional Materials*, 2023, vol. 33, no. 6, 2210664. DOI: 10.1002/adfm.202210664
7. Zhang K., Yu H. Chiroptical studies on nanoparticle-liquid crystal composites. *Liquid Crystals*, 2023, vol. 50, no. 4, pp. 572–583. DOI: 10.1080/02678292.2023.2188617
8. Yadav S. P., Singh S. Carbon nanotube dispersion in nematic liquid crystals: an overview. *Progress in Materials Science*, 2016, vol. 80, pp. 38–76. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2015.12.002
9. Chang C., Zhao Y., Liu Y., An L. Liquid crystallinity of carbon nanotubes. *RSC Advances*, 2018, vol. 8, no. 28, pp. 15780–15795. DOI: 10.1039/C8RA00879E
10. Kumar A., Singh D. P., Singh G. Recent progress and future perspectives on carbon-nanomaterial-dispersed liquid crystal composites. *Journal of Physics D*, 2021, vol. 55, no. 8, 083002. DOI: 10.1088/1361-6463/ac2ced
11. Draude A. P., Dierking I. Thermotropic liquid crystals with low-dimensional carbon allotropes. *Nano Express*, 2021, vol. 2, no. 1, 012002. DOI: 10.1088/2632-959X/abdf2d
12. Buluy O., Nepijko S., Reshetnyak V. et al. Magnetic sensitivity of a dispersion of aggregated ferromagnetic carbon nanotubes in liquid crystals. *Soft Matter*, 2011, vol. 7, no. 2, pp. 644–649. DOI: 10.1039/C0SM00131G
13. Jeong H. S., Youn S. C., Kim Y. H., Jung H. T. Orientation control of liquid crystals using carbon-nanotube–magnetic particle hybrid materials. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2013, vol. 15, no. 24, pp. 9493–9497. DOI: 10.1039/C3CP00052D
14. Komogortsev S. V., Iskhakov R. S., Balaev A. D. et al. Magnetic properties of Fe3C ferromagnetic nanoparticles encapsulated in carbon nanotubes. *Physics of the Solid State*, 2007, no. 49, pp. 734–738. DOI: 10.1134/S1063783407040233
15. Mitróová Z., Koneracká M., Tomašovičová N. et al. Structural transitions in nematic liquid crystals doped with magnetite functionalized single walled carbon nanotubes. *Physics Procedia*, 2010, vol. 9, pp. 41–44. DOI: 10.1016/j.phpro.2010.11.011
16. Yoo H. J., Lee S. Y., You N. H. et al. Dispersion and magnetic field-induced alignment of functionalized carbon nanotubes in liquid crystals. *Synthetic Metals*, 2013, vol. 181, pp. 10–17. DOI: 10.1016/j.synthmet.2013.07.023
17. Tomašovičová N., Timko M., Mitróová Z. et al. Capacitance changes in ferronematic liquid crystals induced by low magnetic fields. *Physical Review E*, 2013, vol. 87, no. 1, 014501. DOI: 10.1103/PhysRevE.87.014501
18. Bury P., Veveričík M., Kopčanský P. et al. Structural changes in liquid crystals doped with functionalized carbon nanotubes. *Physica E*, 2018, vol. 103, pp. 53–59. DOI: 10.1016/j.physe.2018.05.008
19. Dalir N., Javadian S. Synergistic effect of non-covalent interaction in colloidal nematic liquid crystal doped with magnetic functionalized single-walled carbon nanotubes. *Journal of Applied Physics*, 2018, vol. 123, no. 11, 115103 DOI: 10.1063/1.5016388
20. Zakhlevnykh A. N., Petrov D. A., Skokov P. K. Influence of ferromagnetic carbon nanotubes on magnetic transitions in liquid crystals. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2018, vol. 127, pp. 767–777. DOI: 10.1134/S1063776118090236
21. Chupeev I.A., Petrov D.A. Orientational transitions in magnetically compensated liquid-crystal suspensions of ferromagnetic carbon nanotubes. *Proceedings of the Southwest State University. Series: Engineering and Technology*, 2023, vol. 13 (3), pp. 182–198. DOI: 10.21869/2223-1528-2023-13-3-182-198 (In Russian)
22. Raikher Y. L., Stepanov V. I., Zakhlevnykh A. N. Mean-field description of the order–disorder phase transition in ferronematics. *Soft Matter*, 2013, vol. 9, no. 1, pp. 177–184. DOI: 10.1039/C2SM26423D
23. Zakhlevnykh A. N., Lubnin M. S., Petrov D. A. On a simple molecular-statistical model of a liquid-crystal suspension of anisometric particles. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2016, vol. 123, pp. 908–917. DOI: 10.1134/S1063776116100101
24. Zakhlevnykh A. N., Lubnin M. S., Petrov D. A. A simple model of liquid-crystalline magnetic suspension of anisometric particles. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2017, vol. 431, pp. 62–65. DOI: 10.1016/j.jmmm.2016.09.044
25. Matsuyama A. Theory of binary mixtures of a rod-like polymer and a liquid crystal. *The Journal of Chemical Physics*, 2010, vol. 132, no. 21, 214902. DOI: 10.1063/1.3447892

26. Matsuyama A., Ueda T. Phase diagrams of binary mixtures of liquid crystals and rodlike polymers in the presence of an external field. *The Journal of Chemical Physics*, 2012, vol. 136, no. 22, 224904. DOI: 10.1063/1.4728337
27. Petrov D. A. Liquid-crystal composites of carbon nanotubes in a magnetic field: Bridging continuum theory and a molecular-statistical approach. *Physical Review E*, 2023, vol. 107, no. 5, 054701. DOI: 10.1103/PhysRevE.107.054701
28. Berlin T. H., Kac M. The spherical model of a ferromagnet. *Physical Review*, 1952, vol. 86, no. 6, pp. 821–835. DOI: 10.1103/PhysRev.86.821
29. Baxter R. J. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Amsterdam: Elsevier, 1989. 486 p.
30. Vertogen G., van der Meer B. W. A simple molecular statistical treatment of nematics. *Physica A*, 1979, vol. 99, no. 1–2, pp. 237–250. DOI: 10.1016/0378-4371(79)90132-8
31. Scholte P., Vertogen G. A simple molecular statistical treatment of a model for cholesterics. *Physica A*, 1982, vol. 113, no. 3, pp. 587–595. DOI: 10.1016/0378-4371(82)90158-3
32. Vertogen G., De Jeu W. H. *Thermotropic Liquid Crystals, Fundamentals*. Berlin: Springer, 2012. 324 p. DOI: 10.1007/978-3-642-83133-1
33. Liu Q., Senyuk B., Tang J. et al. Plasmonic complex fluids of nematiclike and helicoidal self-assemblies of gold nanorods with a negative order parameter. *Physical Review Letters*, 2012, vol. 109, no. 8, 088301. DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.088301
34. Wensink H. H. Frank elasticity of composite colloidal nematics with anti-nematic order. *Soft Matter*, 2018, vol. 14, no. 44, pp. 8935–8944. DOI: 10.1039/C8SM01442F
35. Poulin P. How to achieve a successful biaxial marriage. *Science*, 2018, vol. 360, no. 6390, pp. 712–713. DOI: 10.1126/science.aat7399
36. Senyuk B., Mundoor H., Smalyukh I. I., Wensink H. H. Nematic elasticity of hybrid molecular-colloidal liquid crystals. *Physical Review E*, 2021, vol. 104, no. 1, 014703. DOI: 10.1103/PhysRevE.104.014703
37. Dozov I., Paineau E., Davidson P. et al. Electric-field-induced perfect anti-nematic order in isotropic aqueous suspensions of a natural beidellite clay. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2011, vol. 115, no. 24, pp. 7751–7765. DOI: 10.1021/jp201201x
38. Jampani V. S. R., Volpe R. H., Reguengo de Sousa K. et al. Liquid crystal elastomer shell actuators with negative order parameter. *Science Advances*, 2019, vol. 5, no. 4, eaaw2476. DOI: 10.1126/sciadv.aaw2476
39. Onsager L. The effects of shape on the interaction of colloidal particles. *Annals of the New York Academy of Sciences*, 1949, vol. 51, no. 4, pp. 627–659. DOI: 10.1111/j.1749-6632.1949.tb27296.x
40. Petrov D. A., Zakhlevnykh A. N., Mantsurov A. V. Orientational ordering of a liquid-crystal suspension of carbon nanotubes in a magnetic field. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2018, vol. 127, pp. 357–369. DOI: 10.1134/S106377611808023X

Просьба ссылаться на эту статью в русскоязычных источниках следующим образом:

Петров Д. А., Манцуров А. В. Молекулярно-статистическая модель жидкокристаллических суспензий ферромагнитных углеродных нанотрубок // Вестник Пермского университета. Физика. 2025. № 1. С. 29–38. doi: 10.17072/1994-3598-2025-1-29-38

Please cite this article in English as:

Petrov D. A., Mantsurov A. V. A molecular-statistical model of liquid crystalline suspensions of ferromagnetic carbon nanotubes. *Bulletin of Perm University. Physics*, 2025, no. 1, pp. 29–38. doi: 10.17072/1994-3598-2025-1-29-38

Сведения об авторах

1. *Данил Александрович Петров*, д-р. физ.-мат. наук, доцент, профессор кафедры физики фазовых переходов, Пермский государственный национальный исследовательский университет, ул. Букирева, 15, Пермь, 614068.
2. *Алексей Валерьевич Манцуров*, старший преподаватель Физико-математического института, Пермский государственный национальный исследовательский университет, ул. Букирева, 15, Пермь, 614068.

Author information

1. *Danil A. Petrov*, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Department of Physics of Phase Transitions, Perm State University; 15, Bukireva st., Perm, 614068, Russia.
2. *Alexey V. Mantsurov*, Senior Lecturer, Institute of Physics and Mathematics, Perm State University; 15, Bu-kireva st., Perm, 614068, Russia.