

ВІДГУК

офіційного опонента

на дисертаційну роботу Горбатенко Юлії Вікторівни

«Теплопровідність молекулярних кристалів,

утворених лабільними молекулами»,

подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.09 – фізика низьких температур

Дисертаційна робота Горбатенко Ю.В. присвячена експериментальному дослідженню теплопровідності молекулярних кристалів зі складною кристалічною структурою при низьких температурах, а саме: двох поліморфних фаз 4-бромбензофенону, бензофенону, пара- та пентахлорнітробензолу, фреону-112 та фреону-113. Ці складні кристали утворені лабільними молекулами – в своєму спектрі вони мають низькоенергетичні внутрішньомолекулярні моди, що пов'язані з обертовими і внутрішньомолекулярними збудженнями.

Метою роботи є виявлення особливостей температурної залежності теплопровідності молекулярних кристалів, які утворені лабільними молекулами, та встановлення впливу лабільності на механізми переносу тепла в таких кристалах. Експериментальне дослідження теплопровідності таких кристалів дає змогу встановити відповідні механізми теплопереносу як в упорядкованому, так і розупорядкованому станах, а також необхідне для створення або вдосконалення існуючих теорій, що, на мою думку, визначає **актуальність** даної роботи.

Експериментальні дослідження теплопровідності, які ввійшли в зміст дисертації, були проведені у відділі теплових властивостей і структури твердих тіл та наносистем Фізико-технічного інституту низьких температур імені Б. І. Веркіна НАН України у відповідності з відомчими тематиками «Структура і низькотемпературні фізичні властивості молекулярних кристалів і вуглецевих наносистем» (номер державної реєстрації 0112U002634, термін виконання 2011–2016 рр.), «Низькотемпературні властивості насичуваних вуглецевих наносистем, домішкових молекулярних твердих тіл та кріо кристалів» (номер державної реєстрації 0117U002293, термін виконання 2017–2018 рр.). Також дослідження були підтримані в межах проекту науково-дослідних робіт молодих учених НАН України у 2019 р. «Фононна взаємодія в наноматеріалах, молекулярних кристалах та квантових рідинах» (номер державної реєстрації 0119U102391, термін виконання 2019–2020 рр.). Це засвідчує, що має місце зв'язок дисертаційної роботи Горбатенко Ю.В. з науковими програмами, планами і темами.

Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів та висновків. В **першому** розділі наведено огляд літератури щодо теплопровідності атомарних кристалів та простих молекулярних кристалів; розглянуто різні моделі для опису теплопровідності у випадку впорядкованих та розупорядкованих твердих тіл, а також дано означення лабільних молекул. Наприкінці розділу формулюється мотивація та мета дисертаційної роботи.

В **другому** розділі наведена інформація про методи дослідження теплопровідності, описано метод плоского стаціонарного теплового потоку, експериментальне устаткування, зокрема, описана установка для дослідження ізобарної теплопровідності, яка дозволяє проводити вимірювання при температурах від 1,8 до 320 К.

В **третьому** розділі, представлені експериментальні дослідження теплопровідності молекулярних кристалів бензофенонового ряду – 4-бром-бензофенону, який демонструє явище поліморфізму, та бензофенону в орієнтаційно-впорядкованих фазах. В цих кристалах було зафіксоване аномальне зростання теплопровідності зі збільшенням температури вище 100 К, що є нетиповим для орієнтаційно-впорядкованого діелектричного кристала.

В **четвертому** розділі експериментально досліджені температурні залежності теплопровідності пара- та пентахлорнітробензолу у впорядкованому та розупорядкованому станах – показано, що в цих кристалах незалежно від ступеню впорядкування спостерігається зростання теплопровідності зі збільшенням температури. Такий же ефект було виявлено для фреонів R-112 і R-113, дослідження яких проводилося в орієнтаційно-розупорядкованих фазах.

Кожен розділ закінчується висновками, які ґрунтуються на отриманих результатах. Список літературних джерел охоплює широке коло питань, пов'язаних з низькотемпературним теплопереносом в молекулярних твердих тілах з різними типами впорядкування.

До найбільш яскравих результатів треба віднести наступні:

1. Встановлено, що в процесі перенесення тепла в молекулярних кристалах, утворених лабільними молекулами, в області переважання фонон-фононних процесів розсіяння, дають внесок три механізми: фононний, дифузний та термоактиваційний.
2. В двох поліморфних фазах 4-бромбензофенону виявлено аномальне зростання теплопровідності при збільшенні температури в області переважання фонон-фононних процесів розсіяння. Встановлено, що цей

ефект описується рівнянням Арреніуса і є проявом термоактиваційного механізму перенесення тепла внутрішньомолекулярними збудженнями лабільних молекул.

3. Встановлено, що величина дифузного внеску в теплопровідність поліморфного кристалу, яка визначається кількістю оптичних мод, залежить обернено пропорційно від кількості молекул в елементарній комірці.

4. Отримано температурні залежності теплопровідності пентахлорнітробензолу в орієнтаційно-розупорядкованій фазі та пара-хлорнітробензолу в орієнтаційно-впорядкованій та орієнтаційно-розупорядкованій фазах. Показано, що в цих кристалах реалізується термоактиваційний механізм теплопереносу, який визначається лабільністю молекул і не залежить від ступеня впорядкування.

5. Встановлено, що величина термоактиваційного внеску в теплопровідність як молекулярних кристалів, утворених лабільними молекулами, так і квазікристалів, лінійно залежить від енергії активації молекул.

Оскільки кожен пункт містить принципові результати, які були отримані вперше, то цей список є доказом **наукової новизни результатів дисертації**.

Всі результати дисертації **повністю і своєчасно опубліковані в 5 статтях у провідних наукових фахових журналах** з високим індексом цитування, а їх апробація була проведена на великій кількості міжнародних конференцій, а тези доповідей опубліковані у відповідних збірниках.

Враховуючи вищесказане, а також надійність, сучасний рівень експериментальної бази та сучасний методологічний рівень роботи можна сказати, що **отримані результати є достовірними і достатньо обґрунтованими**.

Дисертація написана чіткою, ясною мовою та належним чином оформлена. Текст автореферату повністю відображає зміст дисертації.

До змісту дисертації та її оформлення є такі зауваження:

1. В дисертаційній роботі був запропонований термоактиваційний механізм теплопереносу. Чи можна пояснити його виникнення, використовуючи критерій Іоффе-Регеля?

2. В дисертації у підрозділі 1.2.1. є така фраза «Наступним недоліком МФГ є використання некоректного закону дисперсії, отриманого з моделі Дебая» Я вважаю, що це зауваження стосується тільки простіших випадків використання моделі фононного газу.

3. В розділі 3.3. є така фраза: «...спостережене зростання теплопровідності можна описати за допомогою експоненціальної функції:

$$\kappa_{TA} = \kappa_0 \exp(-E / kT) \quad (3.3)$$

де κ_0 – передекспоненціальний (нормуючий) множник, E – енергія активації, k – стала Больцмана. Експоненціальну залежність такого виду зазвичай називають рівнянням Арреніуса – воно описує термоактиваційний процес.»

Мені здається, що коефіцієнт κ_0 не можна називати нормуючим множником. Скоріше, це – фізична величина, наприклад, кількість термоактиваційних центрів, кількість зародків нової фази тощо, яка потребує окремого теоретичного та експериментального розгляду. Більш того, нижче в дисертації дослідженню цієї величини було присвячено окремий підрозділ 4.3.

Але, при цьому, я маю відзначити, що наведені зауваження не змінюють загальну високу оцінку роботи і не впливають на сутність проведених досліджень.

Виходячи з усього викладеного вище, вважаю, що за актуальністю теми, обсягом виконаних досліджень, рівнем наукових публікацій, новизною та практичною цінністю отриманих результатів, дисертаційна робота Горбатенко Юлії Вікторівни «Теплопровідність молекулярних кристалів, утворених лабільними молекулами» задовольняє всім вимогам МОН України, зокрема пунктам 9, 11, 12 Порядку присудження наукових ступенів, її автор, Горбатенко Юлія Вікторівна, заслуговує присудження їй наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.09 – фізика низьких температур.

Офіційний опонент,
доктор фізико-математичних наук, професор
завідувач кафедри комп'ютерної фізики
Навчально-наукового інституту комп'ютерної
фізики та енергетики Харківського національного
університету імені В.Н. Каразіна МОН України

К.Е. Немченко



Підпис засвідчую
Начальник служби управління
персоналом