

**ВІДГУК**  
офіційного опонента  
на дисертаційну роботу Горбатенко Юлії Вікторівни  
**«Теплопровідність молекулярних кристалів, утворених лабільними молекулами»,**  
яка подана до захисту на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних  
наук за спеціальністю 01.04.09-фізика низьких температур

Дисертаційна робота Ю. В. Горбатенко присвячена експериментальному дослідженню теплопровідності складних діелектричних молекулярних кристалів, які утворені лабільними молекулами. Вибраних для дослідження кристалах суттєвий внесок в теплопровідність можуть давати внутрішньомолекулярні збудження, на відміну від іонних кристалів, де основними теплоносіями є акустичні фонони. Проведені дослідження поглиблюють та розширюють знання щодо механізмів теплопровідності в упорядкованих твердих тілах. Це робить дисертацію Ю.В.Горбатенко **актуальною**.

Експериментальні дослідження, які лягли в основу дисертації, були виконані в рамках тематичного плану ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України за відомчими темами «Структура і низькотемпературні фізичні властивості молекулярних кристалів і вуглецевих наносистем» (термін виконання 2011–2016 рр.), «Низькотемпературні властивості насичуваних вуглецевих наносистем, домішкових молекулярних твердих тіл та кріокристалів» (термін виконання 2017–2018 рр.). Дослідження були підтримані грантом на проведення науково-дослідних робіт молодих учених НАН України, проект «Фононна взаємодія в наноматеріалах, молекулярних кристалах та квантових рідинах» (термін виконання 2019–2020 рр.).

В роботі основна увага приділяється дослідженню теплопровідності при низьких температурах, починаючи з 1,8 К. Це дозволяє з високою достовірністю встановити внески різних каналів теплопровідності. Таким чином, дисертація Ю. В. Горбатенко **повністю відповідає** спеціальності 01.04.09 – фізика низьких температур.

**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.

Дисертація робота складається з вступу, чотирьох розділів, висновків і списку використаних джерел. В **першому** розділі наведено огляд літератури стосовно теплопровідності атомарних кристалів та простих молекулярних кристалів і розглянуто моделі щодо опису теплопровідності у кристалічних і склоподібних матеріалах. В **другому** розділі надано опис експериментальних методів дослідження теплопровідності, та інформацію про установку для дослідження теплопровідності і про підготовку зразків для досліджень. В **третьому** розділі представлені експериментальні дослідження теплопровідності кристалів бензофенону і поліморфів 4-бромбензофенону. Показано, що величина дифузного внеску в теплопровідність обернено пропорційна кількості молекул в

елементарній комірці. Зафіксоване аномальне зростання теплопровідності вище 100 K в бензофеноні та двох поліморфах 4-бромбензофенону, що є нетиповим для орієнтаційно-впорядкованого діелектричного кристала. Показано, що спостережене зростання теплопровідності описується законом Арреніуса, що свідчить про суттєвий вплив внутрішньомолекулярних коливань лабільних молекул на фононний теплоперенос. В **четвертому** розділі отримано температурні залежності теплопровідності пара-хлорнітробензолу та пентахлорнітробензолу в орієнтаційно-розупорядкованих станах та пара-хлорнітробензолу в орієнтаційно-впорядкованому стані. Виявлено, що в цих кристалах зростання теплопровідності зі збільшенням температури не залежить від ступеня впорядкування. Аналогічний ефект спостережено в орієнтаційно-розупорядкованих фазах фреонів R-112 і R-113.

**Наукову новизну** дослідження визначають наступні результати.

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.

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.

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

Отримано температурні залежності теплопровідності пентахлор-нітробензолу 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.

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

**Наукова і практична значимість** результатів дисертаційної роботи полягає в тому, що одержані в ній результати розширюють існуючі уявлення про механізми перенесення тепла в молекулярних кристалах зі складною структурою. Отримані дані можуть бути використані для верифікації теорії переносу тепла в таких кристалах. Результати досліджень можуть бути корисними при створенні елементів для термоелектричних систем, а також при розробці стабільних форм фармпрепаратів.

Результати досліджень, що викладені в дисертації, є *обґрунтованими та достовірними*, оскільки вони базуються на сучасних експериментальних методах і на аналізі каналів переносу тепла на основі існуючих теоретичних уявлень щодо механізмів теплопровідності.

Результати дисертаційної роботи **опубліковані в 5 статтях у провідних наукових фахових журналах** з високим індексом цитування, а також апробовані на 11 вітчизняних та міжнародних конференцій.

Дисертація написана чіткою, ясною мовою та належним чином оформлена, текст автореферату повністю відповідає змісту дисертації.

До змісту дисертації є такі **зауваження**:

1. В розділі 2 відмічено, що дані отримані на двох установках, але в подальшому не наведено, на якій саме (яких самих) установках отримані дані для кожного із зразків і чи є систематична (чи інша) різниця в даних з різних установок.

2. Експериментальні дані на графіках надані без відображення похибок ("вусів").

Зазначені зауваження не ставлять під сумнів отримані результати, які сформульовані в пунктах наукової новизни, і тому не впливають на загальну позитивну оцінку роботи.

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, а її автор, Горбатенко Ю. В., заслуговує на присудження їй наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.09 – фізика низьких температур.

Офіційний опонент,  
доктор фізико-математичних наук,  
старший науковий співробітник,  
провідний науковий співробітник  
відділу теорії конденсованого стану речовини  
Інституту монокристалів НАН України

 Філь Дмитро Вячеславович

Підпис д.ф.-м.н. Д.В.Філя засвідчую,  
учений секретар  
Інституту монокристалів НАН України,  
кандидат фіз.-мат. наук



Кулик Костянтин Миколайович