

ЗАТВЕРДЖУЮ
В. о. директора
ФТІНТ ім. Б.Г. Веркіна НАН України
Глушук Микола Іванович



АНОТОВАНИЙ ЗВІТ
про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проєкту
із виконання наукових досліджень і розробок
“Квантове тунелювання коливальних збуджень в теплопровідності кристалічних та аморфних матеріалів і композитів”

(назва Проєкту)

Назва конкурсу: Конкурс НФДУ «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»
Реєстраційний номер Проєкту: 2020.02/0094 та Номер договору: 197/02.2020

Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок “Квантове тунелювання коливальних збуджень в теплопровідності кристалічних та аморфних матеріалів і композитів”(реєстраційний номер 2020.02/0094).

Рішення Наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу “Підтримка досліджень провідних та молодих учених”
протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21 та протокол від 6.11.2020 року №35

1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Тривалість виконання Проєкту

Початок: листопад 2020 р. дата укладання договору про виконання наукових досліджень і розробок (далі – Договір)

Закінчення: 15 грудня 2022 рік

Загальна вартість Проєкту, грн.

9847,885 тис. грн.

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік 670,485 тис. грн.

2-й рік 4928,500 тис. грн.

3-й рік 4248,900 тис. грн.

2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проєкту буде залучено 8 виконавців, з них:

доктори наук 1;

кандидати наук 6;

інші працівники 1.

Інформація про виконавців (авторів) Проєкту (в тому числі особи, які залучені до виконання Проєкту за трудовим договором або угодою цивільно-правового характеру: ППБ, основне місце роботи, посада, науковий ступінь).

Кривчіков О.І. – ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України, провідний науковий співробітник, доктор фізико-математичних наук, професор;

Саган В.В. – ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України, старший науковий співробітник, кандидат фізико-математичних наук;

Вінніков М.А. – ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України, старший науковий співробітник, кандидат фізико-математичних наук;

Карачевцева А.В. - ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України, науковий співробітник, кандидат фізико-математичних наук;

Барабашко М.С. – ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України, науковий співробітник, кандидат фізико-математичних наук;

Баснукаєва Р.М. – ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України, науковий співробітник, кандидат фізико-математичних наук;

Горбатенко Ю.В. – ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України, молодший науковий співробітник, кандидат фізико-математичних наук;

Гурова Д.С. – ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України, інженер. На даний час успішно здані іспити до аспірантури, початок якої заплановано з 1 листопада 2020р., під керівництвом Кривчікова О.І.

3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(Ї) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ

Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна Національної академії наук України (найменування юридичної особи, Грантоотримувач)
61103, м. Харків, Проспект Науки, 47 (місцезнаходження)
р/р UA378201720313271002201008790
у ДКСУ, м. Київ,
МФО 820172,
ЄДРПОУ 03534601 (банківські реквізити)

Організацій субвиконавців проєкту - немає. Не передбачено умовами договору.

4. ОПИС ПРОЄКТУ

4.1. Мета Проєкту (до 200 знаків) Створення комплексного теоретично-емпіричного універсального підходу опису теплопровідності твердих тіл та експериментальна перевірка передбачень квантово-польової теорії теплопровідності.

4.2. Основні завдання Проєкту (до 400 знаків) Розробити універсальний підхід до опису теплопровідності твердих тіл, заснований на експериментальній перевірці передбачень квантово-польової теорії у випадку ізобарної та ізохорної теплопровідностей.

4.3. Детальний зміст Проєкту:

- **Сучасний стан проблеми** (до 400 знаків) В 2019 році поява квантово-польової теорії Simoncelli-Marzari-Mauri теплопровідності $\kappa(T)$ намітила істотний прорив в вирішенні проблеми точного прогнозування теплових властивостей кристалів з ультранизькою $\kappa(T)$, що потребує комплексної перевірки. Створений у ФТІНТ комплекс експериментального обладнання разом з експериментальними даними, отриманими протягом багатьох років, дозволяють виконати таку експериментальну перевірку положень цієї теорії.

- **Новизна Проєкту** (до 400 знаків) У проєкті пропонується універсальний підхід заснований на емпіричній перевірці положень та передбачень квантово-польової теорії теплопровідності. Експериментальні методи разом з порівняльним аналізом літературних даних дозволяють отримати знання про теплопровідність речовин, є важливими для використання термоелектричної енергії, твердотілого охолодження і теплоізоляційних матеріалів.

- **Методологія дослідження** (до 400 знаків) Методологія дослідження проявів квантового тунелювання в теплопровідності включає дослідження ізохорної та ізобарної теплопровідності розупорядкованих молекулярних кристалів, аморфних матеріалів і композитів та порівняльний аналіз і систематизація, з подальшою комп'ютерною обробкою літературних даних про температурні залежності теплопровідності складних кристалів і аморфних матеріалів.

5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 2 сторінок) в поточному році/ в рамках реалізації Проєкту, зокрема:

5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проєкту (із зазначенням їх якісних та кількісних (технічних) характеристик)

На сьогоднішній день є поширеною думка, що численні дослідження теплопровідності твердих тіл, що проведені більш ніж за 150 років, дозволили отримати повну картину механізмів переносу тепла в кристалах, яка базується на газокінетичному уявленні колективних збуджень кристалічної решітки - фононів, як системі квазічастинок (дивись, наприклад, Y. Luo et al., Nature Communications (2020) <https://doi.org/10.1038/s41467-020-16371-w>). Але в 2019 році, в фізиці теплопровідності намітився істотний прорив після появи квантово-польової теорії теплопровідності Simoncelli-Marzari-Mauri, Nature Physics (2019) <https://doi.org/10.1038/s41567-019-0520-x>, яка може не тільки якісно, але й кількісно описати та передбачити теплопровідність будь-якої твердої речовини, використовуючи єдиний універсальний підхід. Ключовим компонентом нової теорії є положення, що коливальні збудження можуть поширюватися не тільки як квазічастинки, але і квантово тунелювати між спареними енергетичними станами. У складних кристалах і аморфних речовинах внесок такого тунелювання в теплопровідність з підвищенням температури зростає, стає істотним, а в ряді випадків і домінуючим. Ця нова теорія перенесення тепла може бути поширена на будь-які матеріали, як з кристалічною, так і з аморфною структурами і розглядає новий канал теплопровідності як універсальний, незалежний від кристалічної структури та природи матеріалу. У нашому проєкті пропонується розробити комплексний експериментально-теоретичний універсальний підхід для опису теплопровідності твердих тіл, заснований на експериментальній багатосторонній перевірці положень і передбачень нової теорії теплопровідності.

На першому етапі були отримані початкові результати необхідні на шляху розроблення універсального підходу до опису теплопровідності твердих тіл. В межах існуючих літературних теоретичних даних було встановлено, що температурна залежність як кристалічного, так і аморфного твердого тіла є адитивною сумою двох внесків: $\kappa(T) = \kappa_{ph}(T) + \kappa_{diff}(T)$, де перший фононний внесок пов'язаний з коливальними збудженнями, які поширюються як квазічастинки, а другий — дифузійний внесок, якій відповідає квантовому тунелюванню між спареними енергетичними станами коливальних збуджень. Нами запропонована робоча формула для опису температурної залежності дифузійного внеску, яка має вид $\kappa_{diff}(T) = k_0 e^{-E/T}$, де k_0 і E є характерними параметрами термоактиваційного процесу. Вперше встановлено, що зазначена робоча формула добре описує дифузійний внесок як результат складних теоретичних розрахунків, які отримані за допомогою комп'ютерного обчислення, так результат експериментальних температурних залежностей ізобарної та ізохорної теплопровідності молекулярних аморфних і кристалічних матеріалів.

Експериментально досліджено ізохорну теплопровідність молекулярного кристала 1,1-дифторетана (фреону F-152a) для трьох зразків з різними молярними об'ємами ($V_m = 49.2, 50.25$ та $51.5 \text{ см}^3/\text{моль}$) в динамічно орієнтаційно розупорядкованій фазі. Виявлено, що вона зростає з температурою, подібно до того, як це має місце в аморфних і склоподібних речовинах вище області плато в теплопровідності. Виявлено, що така поведінка може бути описана термоактиваційним механізмом, зі сталою енергією активації E , і може залежати від фактору κ_ρ . Коефіцієнт Бриджмена дорівнює 6.0 ± 0.5 . Вперше встановлено, що подібним чином може бути описана теплопровідність ряду інших молекулярних кристалів з динамічним орієнтаційним безладом.

Отримані результати є першими кроками пошуку ефектів, які зумовлені квантовим тунелюванням коливальних збуджень в теплопровідності кристалічних і аморфних матеріалів та композитів.

5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами

Наша власна оцінка науково-технічного рівня продукції - немає аналогів в Україні.

5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства (стосується проєктів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)

Очікується, що отримані теоретико - емпіричні знання про теплопровідність речовин будуть застосовані у фізиці квантових явищ, при розробці пристроїв наноелектроніки, створенні новітніх композитних функціональних матеріалів та ін. Зокрема, в сфері створення пристроїв термоелектричної генерації необхідно мати речовини з низькою теплопровідністю.

5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.

Результати Проєкту передбачається в подальшому використовувати в суспільній практиці, зокрема, при викладанні спецкурсів фізики та при розробці пристроїв наноелектроніки, а також створенні новітніх композитних функціональних матеріалів з низькою теплопровідністю.

Примітка: Анотований звіт не повинен містити відомостей, заборонених до відкритого опублікування

Науковий керівник Проєкту

провідний науковий співробітник, д.ф.-м.н., проф.
(посада)

Кривчіков Олександр Іванович

ПІБ

(підпис)