

ЗАТВЕРДЖУЮ  
Директор ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна  
НАН України  
чл.-кор. НАН України,  
д.ф.-м.н., проф.  
Юрій Найдюк

(Власне ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

(підпис)

М.П.



**АНОТОВАНИЙ ЗВІТ**  
**про виконану роботу у 2021 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: «Підтримка досліджень провідних та молодих учених»

Реєстраційний номер Проєкту: 2020.02/0094

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

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих учених» (назва конкурсу) протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21, протокол № 35 від 6 листопада 2020 року, рішення наукової ради Грантонадавача про продовження надання грантової підтримки (протокол № 41 від 23 грудня 2020 року) та про надання гранту у 2021 році (протокол № 15 від 13 травня та протокол № 40 від 15 вересня 2021 року).

## 1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Загальна тривалість виконання проєкту: 2020 рік – 2022 рік

Тривалість виконання Проєкту у 2021 році:

Початок – 17 травня 2021

(дата укладання Договору про виконання наукового дослідження і розробки)

Закінчення – 15 грудня 2021

Загальна вартість Проєкту, грн. 9281,418 тис грн.

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік 670,485 тис. грн.

2-й рік 4362,033 тис. грн.

3-й рік 4248,900 тис. грн.

## 2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проєкту залучено 8 виконавців, з них:

доктори наук 1;

кандидати наук 6;

інші працівники 1.

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.Є. – ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України, аспірант першого року навчання.

### **3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(І) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ**

Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна

Національної академії наук України

61103, м. Харків, Проспект Науки, 47

p/p UA648201720313281002301008790

у ДКСУ, м. Київ,

МФО 820172,

ЄДРПОУ 03534601 (банківські реквізити)

### **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, оснований на експериментальній перевірці передбачень квантово-польової теорії у випадку ізобарної та ізохорної теплопровідностей.

#### **4.3. Детальний зміст Проєкту:**

- **Сучасний стан проблеми** (до 400 знаків) У 2019 році поява квантово-польової теорії Simoncelli-Marzari-Mauri теплопровідності  $\kappa(T)$  намітила істотний прорив в вирішенні проблеми точного прогнозування теплових властивостей кристалів з ультра низькою  $\kappa(T)$ , що потребує комплексної перевірки. Створений у ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України 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, оснований на емпіричній перевірці положень та передбачень квантово-польової теорії теплопровідності. Експериментальні методи разом з порівняльним аналізом наукових 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 теплопровідностей неупорядкованих молекулярних кристалів, аморфних матеріалів і композитів та порівняльний аналіз і систематизація з подальшою комп'ютерною обробкою наукових 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 Проекту, зокрема:**

### **5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проекту (із зазначенням їхніх якісних та кількісних (технічних) характеристик)**

У рамках розробленого універсального підходу до опису теплопровідності твердих тіл та в межах існуючих науково-літературних теоретичних даних було проведено аналіз низки аморфних та кристалічних речовин та встановлено, що температурна залежність теплопровідності як кристалічного, так і аморфного твердого тіла узгоджується з представленням їх теплопровідності як адитивної суми 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, відповідає квантовому тунелюванню між спареними енергетичними станами коливальних збуджень. За запропонованою нами робочою формулою для опису температурної залежності дифузійного внеску в теплопровідність, яка має вигляд  $\kappa_{diff}(T) = \kappa_0 e^{-E/T}$ , де  $\kappa_0$  і  $E$  є характерними параметрами термоактиваційного процесу, розраховані енергії активації, із використанням експериментальних результатів досліджень температурних залежностей ізобарної та ізохорної теплопровідностей молекулярних аморфних і кристалічних матеріалів.

**Зокрема, за два етапи проєкту в 2021 році** встановлено температурну залежність теплопровідності внеску квантового тунелювання у випадку сильно анізотропного молекулярного кристалу парахлорнітробензолу (завдання 1 ЕВП 2 заявки). Проведено роботи з модернізації установки для вимірювання ізохорної теплопровідності, що включають розробку технічного завдання (плану) проведення модернізації установки (завдання 1 ЕВП 3 заявки). Виготовлено вимірювальну комірку високого тиску та виконано її монтаж (завдання 2 ЕВП 3 заявки). Проведено автоматизацію установки для вимірювання ізохорної теплопровідності (завдання 3 ЕВП 3 заявки). Виконано тестування вимірювальної установки й успішне вимірювання температурної залежності ізохорної теплопровідності для стандартного зразка у інтервалі температур від 100 до 300 К (Завдання 4 ЕВП 3 заявки). Експериментально досліджено температурні залежності аморфного гліцерину (Завдання 1 ЕВП 5 заявки). Виконано аналіз температурних залежностей теплоємності низки кристалічних, аморфних та наноструктурних речовин та проаналізовано причини виникнення так званого бозонного піку. Отримані результати є важливими для подальшого дослідження теплопровідності та виявлення універсальних особливостей та перевірки емпіричного універсального підходу до опису теплопровідності кристалічних, аморфних та наноструктурних тіл. Використовуючи отримані експериментальні та теоретичні дані, ми здійснили розрахунок і проаналізували внесок квантового тунелювання в ізохорну теплопровідність полімерів, скутерудитів, клатратних гідратів, парахлорнітробензолу, гліцерину, аморфних вуглецевих матеріалів та низки інших кристалічних та аморфних речовин. На основі виконаного порівняльного аналізу про дифузійні внески в теплопровідність різноманітних кристалічних і аморфних матеріалів отримано функціональні залежності внеску квантового тунелювання в теплопровідність та розраховано енергії активації. (Завдання 1 ЕВП 6 заявки). Отримана інформація про температурну залежність теплопровідності дослідженої низки кристалічних та аморфних матеріалів і вплив внеску квантового тунелювання в теплопровідність є загальною і важливою для виявлення впливу особливостей структури та передбачення теплофізичних особливостей наноматеріалів та композитів. Результати досліджень були представлені в 32 доповідях на 10 міжнародних і вітчизняних конференціях та 5 публікаціях у високореєтингових журналах, зокрема:

1. Konstantinov V.A., Krivchikov A.I., Karachevtseva A.V., and Sagan V.V. Thermal transport in dynamically disordered phases of molecular crystals: A thermo activation mechanism. *Solid State Communications*. 2021. Vol. 329. P. 114241, [doi.org/10.1016/j.ssc.2021.114241](https://doi.org/10.1016/j.ssc.2021.114241) (Q2).
2. Miyazaki Y., Nakano M., Krivchikov A.I., Korolyuk O.A., Gebbia J.F., Cazorla C., and Tamarit J.L. Low-Temperature Heat Capacity Anomalies in Ordered and Disordered Phases of Normal and Deuterated Thiophen. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 2021. Vol. 12, No 8. P. 2112, [doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c00289](https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c00289) (Q1)
3. Szewczyk D., Gebbia J.F., Jeżowski A., Krivchikov A.I., Guidi T., Cazorla C. and Tamarit J.L. Heat capacity anomalies of the molecular crystal 1-fluoro-adamantane at low temperatures. *Scientific Reports*. 2021. Vol. 11, No 1. P. 1–8 (2021), [doi.org/10.1038/s41598-021-97973-2](https://doi.org/10.1038/s41598-021-97973-2) (Q1)
4. Bagatskii M.I., Jeżowski A., Szewczyk D., Sumarokov V.V., Barabashko M.S., Kuznetsov V.L., Moseenkov S.I., Ponomarev A.N. Size effects in the heat capacity of modified MWCNTs. *Thermal Science and Engineering Progress*. 2021. Vol. 26. P. 101097, [doi.org/10.1016/j.tsep.2021.101097](https://doi.org/10.1016/j.tsep.2021.101097) (Q1).
5. Alekseeva L.A., Syrkin E.S., Hurova D.E., Aksenova N.A., Galtsov N.N., Feodosyev S.B. Translational vibrations in  $\alpha$ -N<sub>2</sub> from x-ray data. *Fizika Nizkikh Temperatur* (прийнято до друку, орієнтовна дата друку-2022- Vol. 48, N 2) (Q4).

Для обговорення та популяризації знань за темою «Теплопровідність твердих тіл» у 2021 було проведено воркшоп/семінар «**Thermal Conductivity of solid states at low temperature**» під час міжнародної конференції з фізики конденсованих речовин і низьких температур при ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України(Харків), секція “**Динаміка та теплові властивості неупорядкованих систем**” під час Всеукраїнської конференції наукових дослідників(Львів), а також цикл лекцій для аспірантів ФТІНТ ім. Б.І. Веркіна НАН України. (завдання 1 ЕВП 4 заявки).

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

Наша оцінка рівня науково-технічної 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)

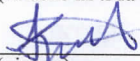
Очікується, що отримані теоретико - емпіричні знання про теплопровідність речовин будуть застосовані у фізиці квантових явищ, при розробці пристроїв наноелектроніки, створенні новітніх композитних функціональних матеріалів та ін. Зокрема, у сфері створення пристроїв термоелектричної генерації необхідно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

**Науковий керівник Проєкту**  
провідний науковий співробітник,  
д.ф.-м.н., проф. \_\_\_\_\_  
(посада)

**Олександр Кривчіков**  
(Власне ім'я та ПІРІЗВИЩЕ)

  
\_\_\_\_\_  
(підпис)