

Эффекты разупорядочения молекул в теплопроводности твердого тиафена

Г.А. Вдовиченко, А.И. Кривчиков, О.А. Королюк, О.О. Романцова

*Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины
пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: vdovichenko@ilt.kharkov.ua*

Статья поступила в редакцию 24 сентября 2014 г., опубликована онлайн 22 октября 2014 г.

Измерена температурная зависимость теплопроводности $\kappa(T)$ твердого тиафена в последовательности стабильных ориентационно разупорядоченных фаз с различной степенью ориентационного упорядочения молекул: в ориентационном стекле (V_g); в фазе V с большими угловыми либрационными молекулярными колебаниями; в несоразмерной фазе IV со статическим ориентационным беспорядком и в ориентационно разупорядоченной кристаллической фазе III с динамическим ориентационным беспорядком молекул. Измерения проведены при давлении насыщенного пара в температурном интервале 2–180 К. Установлено, что в фазах III и V с динамическим ориентационным беспорядком молекул теплопроводность тиафена практически не зависит от температуры. В состоянии ориентационного стекла и несоразмерной фазе температурная зависимость теплопроводности имеет вид, типичный для теплопроводности кристаллов с дальним ориентационным порядком. Обнаружен отчетливый гистерезис теплопроводности при температуре несколько более низкой, чем температура фазового перехода из фазы IV в фазу V.

Виміряно температурну залежність теплопровідності $\kappa(T)$ твердого тиафену в послідовності стабільних орієнтаційно розупорядкованих фаз з різним ступенем орієнтаційного упорядкування молекул: в орієнтаційному склі (V_g); у фазі V з великими кутовими лібраційними молекулярними коливаннями; у нерозмірній фазі IV зі статичним орієнтаційним безладдям і в орієнтаційно розупорядкованій кристалічній фазі III із динамічним орієнтаційним безладдям молекул. Вимірювання проведено при тиску насиченої пари в інтервалі температур 2–180 К. Встановлено, що у фазах III та V із динамічним орієнтаційним безладдям молекул теплопровідність тиафену практично не залежить від температури. У стані орієнтаційного скла і нерозмірній фазі температурна залежність теплопровідності має вигляд, типовий для теплопровідності кристалів із дальнім орієнтаційним порядком. Виявлено чіткий гистерезис теплопровідності при температурі дещо нижчій, ніж температура фазового переходу з фази IV в фазу V.

PACS: **65.60.+a** Тепловые свойства аморфных твердых тел и стекол: теплоемкость, тепловое расширение и пр.;
66.70.-f Неэлектронная теплопроводность и распространение тепловых импульсов в твердых телах; тепловые волны;
63.20.-e Фононы в кристаллических решетках.

Ключевые слова: теплопроводность, тиафен, полиморфизм, ориентационный беспорядок.

Введение

Интерес к изучению свойств различных некристаллических состояний твердых тел вызван сложными корреляциями между различными видами беспорядка, геометрии молекулы и их физическими свойствами. Известно, что стекла, независимо от типов связи, демонстрируют характерное поведение многих физиче-

ских свойств. Например, для стекол типичны линейный рост теплоемкости с температурой при $T < 2$ К и проявление «бозонного пика» на отношении теплоемкости к кубу температур. Типичными являются квадратичная зависимость теплопроводности $\kappa(T)$ в области низких температур при повышении температуры, наличие плато и последующий рост величины коэффициента $\kappa(T)$. Такое поведение тепловых свойств

объясняется присутствием в стеклах двухуровневых систем (ДУС) и низкочастотных локализованных колебательных мод, которые при взаимодействии с фононами приводят к появлению типичных для стекол аномалий. В работах [1,2] было показано, что для твердого протонированного и дейтерированного этанола решающим фактором, определяющим поведение теплопроводности, является наличие ориентационного беспорядка, даже в случае, когда центры масс молекул находятся в узлах кристаллической решетки. Однако в недавних исследованиях ультрастабильных стекол индометацина [3] низкотемпературные аномалии теплоемкости обнаружены не были. Авторами был сделан вывод о заметном уменьшении низкочастотных туннельных возбуждений в специально приготовленном анизотропном молекулярном стекле (the vapor-deposited glass). В исследовании низкотемпературных тепловых свойств кристаллических молекулярных веществ с несоизмеримой структурой [4–6] выявлено отклонение от поведения теплоемкости согласно модели Дебая и сделан вывод, что несоизмеримые структуры являются хорошей модельной системой для изучения тепловых свойств аморфных веществ.

В последнее время вызывают интерес вещества, образованные циклическими молекулами, например такими, как тетрагидрофуран [7]. Многообразие фаз в твердом веществе обеспечивают именно пятичленные молекулы. Таким образом, особый интерес для исследований представляют кристаллические вещества, которые, с одной стороны, обладают сравнительно простой структурой и могут быть получены в различных твердотельных состояниях с различной степенью беспорядка, а с другой — относятся к классу веществ «glassy crystal».

Тиофен C_4H_4S обладает богатым и сложным полиморфизмом. В зависимости от условий охлаждения в этом веществе могут быть получены различные твердотельные фазы, как стабильные, так и метастабильные, включая несоизмеримые с различным типом ориентационного беспорядка. Твердый тиофен относится к классу веществ «glassy crystal». Молекула тиофена — плоская, жесткая, одна из самых простых пятичленных циклических структур [8]. Многочисленные калориметрические и структурные исследования [8–11] тиофена показывают, что в зависимости от условий охлаждения можно получить две последовательности (термодинамически стабильных и метастабильных) фазовых ориентационных состояний. Структурные исследования указывают на наличие динамического ориентационного беспорядка молекул тиофена в двух последовательностях фаз; было показано, что природа этого беспорядка связана с переориентациями молекулы в плоскости.

Фазовые переходы тиофена исследованы калориметрическим методом [10]. При охлаждении жидкости ниже температуры плавления $T_m = 235$ К образуется

фаза I — ориентационно разупорядоченный кристалл, который имеет орторомбическую решетку [8] ($Z = 4$, где Z — количество молекул в элементарной ячейке, молекулы в этой фазе упакованы «елочкой»).

При охлаждении ниже 175 К возникает несоизмеримая фаза II [8,12]. При медленном охлаждении из фазы II при $T = 170,7$ К образуется ориентационно разупорядоченная кристаллическая фаза III — соизмеримая орторомбическая структура ($Z = 4$, молекулы упакованы в структуру типа «елочки» [8]). Динамика молекул близка к динамике молекул в фазе I, молекулы испытывают переориентационное движение, в этой фазе в молекуле тиофена атом серы может быть делокализован между 10-ю позициями. При дальнейшем охлаждении при температуре 138,5 К образуется фаза IV, которая соответствует несоизмеримой суперструктуре фазы III [12,13]. Эта несоизмеримость, вероятно, является результатом прогрессирующего упорядочения молекул тиофена в плоскости кольца, которое с понижением температуры приводит к затормаживанию вращательного движения молекул [8]. При охлаждении ниже 112,35 К из фазы IV в результате перехода первого рода возникает фаза V — орторомбическая суперструктура фазы III, $Z = 8$ [12,13]. В этой фазе отсутствуют переориентации молекул, а имеются только большие угловые либрационные колебания [14]. При понижении температуры ниже ~ 42 К возникает состояние ориентационного стекла V_g кристалла тиофена, соответствующее замораживанию вращательного движения молекулы тиофена в плоскости кольца в узлах орторомбической решетки [9,15]. Похожее состояние ориентационного стекла наблюдалось в других молекулярных кристаллах, образованных циклическими молекулами, например в циклогексене [16], циклогексаноле $C_6H_{11}OH$ и его аналоге — цианоциклогексане $C_6H_{11}CN$ [17].

Измерение температурной зависимости теплопроводности — чувствительный инструмент для исследования фаз и фазовых переходов, а также влияния различных видов беспорядка на перенос тепла в молекулярном кристалле. Тиофен — превосходная модельная система для изучения такого сложного явления, как стеклование [14]. Настоящая работа посвящена исследованию теплопроводности тиофена в последовательности термодинамически стабильных фаз.

Результаты эксперимента и их обсуждение

Эксперимент проводился на установке по измерению теплопроводности стационарным методом плоского теплового потока при равновесной упругости пара в области температур 2–180 К. Конструкция установки позволяет автоматически контролировать нагрев/охлаждение образца, обеспечивая требуемые условия для получения необходимого фазового состояния исследуемых образцов, а также проводить автоматизиро-

ванные измерения коэффициента теплопроводности [18]. Образец заливали в измерительный контейнер при комнатной температуре, обдувая потоком газа ^4He . Газ использовали для улучшения теплообмена между образцом и контейнером, а также для исключения влияния влаги и кислорода из воздуха. Для эксперимента применялся тиофен фирмы Sigma-Aldrich, его чистота составляла выше 99%. Проведено пять серий экспериментов с соблюдением условий получения последовательности стабильных фаз [9]. Теплопроводность образца измеряли при понижении температуры вплоть до самых низких температур эксперимента, а затем при повышении температуры.

На рис. 1 представлена температурная зависимость теплопроводности тиофена в области температур 2–170 К, измеренная в последовательности стабильных фаз V_g –III. Хорошо видно, что поведение теплопроводности в зависимости от температуры отличается в различных фазах. Теплопроводность $\kappa(T)$ в состоянии V_g имеет форму колокола и ведет себя подобно теплопроводности ориентационно упорядоченных кристаллов: с повышением температуры наблюдается рост $\kappa(T) \sim T^2$ и ярко выраженный фоновый максимум при температуре $T_{\max} \approx 10$ К. При повышении $T > T_{\max}$ $\kappa(T)$ убывает обратно пропорционально температуре (закон Эйкена): $\kappa(T) \sim 25/T$, что свидетельствует о высокой степени влияния на теплопро-

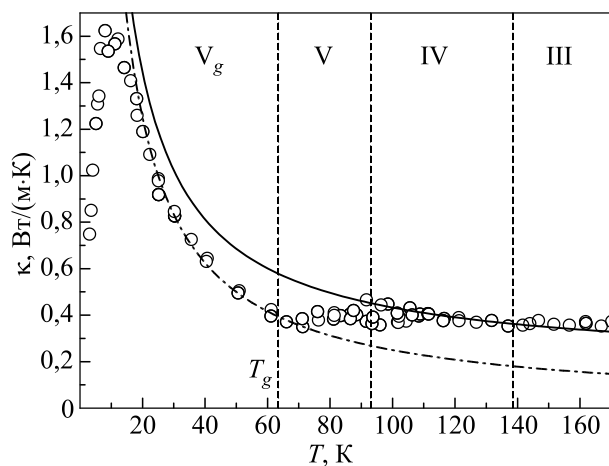


Рис. 1. Температурная зависимость теплопроводности тиофена в последовательности термодинамически стабильных фаз III– V_g . Вертикальные пунктирные линии — температуры фазовых переходов, T_g — температура стеклования. Сплошная линия — зависимость $\kappa(T) = 25,3/T + 0,18$. Штрихпунктир — зависимость $\kappa(T) = 25/T$; V_g — ориентационное стекло, V — кристаллическая фаза с большими угловыми либрационными колебаниями молекул; IV — несоразмерная фаза со статическим ориентационным беспорядком молекул; III — кристаллическая фаза с динамическим ориентационным беспорядком молекул.

водность резистивных процессов фонон-фононного рассеяния, характерных для полностью упорядоченных кристаллов в области $T > T_{\max}$.

Исследованные в предыдущих работах температурные зависимости теплопроводности циклических веществ циклогексанола и цианоциклогексана [17] в состоянии ориентационного стекла показывают наличие плато в области температур 5–10 К, характерное для теплопроводности аморфных веществ. Плато также наблюдалось и на кривых теплопроводности ориентационных стекол простых молекулярных спиртов [1,2]. Кристаллическая решетка перечисленных выше веществ в состоянии ориентационного стекла имеет кубическую структуру. Циклическое вещество циклогексен C_6H_{10} [16] в состоянии ориентационного стекла I_g тоже имеет кубическую структуру кристаллической решетки, однако на кривой зависимости $\kappa(T)$ отсутствует плато. Зависимость $\kappa(T)$ тиофена в состоянии V_g аналогична зависимости $\kappa(T)$ циклогексена в состоянии ориентационного стекла. Отсутствие плато на кривой зависимости $\kappa(T)$ в ориентационных стеклах тиофена и циклогексена может быть вызвано особенностями упорядочения молекул. Молекулы тиофена упорядочены в плоскостях, а разупорядочение возникает только по положению атома серы в молекуле, т.е. молекулы располагаются слоями, в которых вращательное движение замораживается в случайном положении. Циклогексен же в состоянии I_g имеет пространственную симметрию $Pa3$ [19]. Молекулы циклогексена в этом состоянии располагаются объемными слоями, в которых молекулы выстраиваются «елочкой» (шевронный мотив). Состояние ориентационного стекла циклогексанола представлено кубической фазой с симметрией $Fm3m$ [20,21], что соответствует более равномерному объемному расположению молекул. Причиной этого может служить присутствие группы –ОН, которая приводит к возникновению сильных водородных связей и препятствует упаковке молекул слоями. Структурная симметрия ориентационного стекла цианоциклогексана не изучена, но наличие группы –CN и похожее с циклогексанолом поведение $\kappa(T)$ свидетельствуют в пользу равномерного объемного расположения молекул.

Таким образом, в кристаллической структуре ориентационных стекол тиофена и циклогексена возникает выделенное направление. Подобная анизотропия в ультрастабильных стеклах [3] возникает при конденсации пара на холодную подложку. В результате конденсации образуются слои плоских молекул, хаотично расположенных друг относительно друга, но каждый последующий слой имеет упорядочение относительно предыдущего слоя. Ослабление аморфного и усиление кристаллоподобного поведения $\kappa(T)$ веществ с подобной структурой может быть вызвано именно возникновением ориентационных корреляций между молекулами.

При переходе через температуру стеклования из состояния V_g в фазу V теплопроводность практически не зависит от температуры и $\kappa = 0,385$ Вт/(м·К) (рис. 1). Это поведение теплопроводности связано с активным ориентационным движением молекул в плоскости кольца. Изменения характера температурной зависимости теплопроводности в различных состояниях наиболее отчетливо наблюдаются в функциональной зависимости от температуры (рис. 2). Отметим, что в области температур 92–105 К, незначительно ниже температуры фазового превращения первого рода между фазами V и IV, наблюдается небольшой, но отчетливый гистерезис теплопроводности, связанный с переохлаждением фазы IV. Это явление может быть обусловлено незначительным количеством примеси в образце [22]. Незначительное количество примеси в образце также может влиять на температуру стеклования и фазовых переходов. При дальнейшем нагреве и переходе в несоизмеримую фазу IV теплопроводность снова зависит от температуры: $\kappa(T) = 25,3/T + 0,18$ [Вт/(м·К)]. Интересно, что несоизмеримая структура фазы IV не приводит к появлению каких-либо аномалий зависимости теплопроводности. При переходе в соизмеримую фазу III теплопроводность от температуры не зависит: $\kappa(T) = 0,373$ Вт/(м·К).

Отметим, что изменения в поведении $\kappa(T)$ непосредственно связаны с изменением характера ориентационного движения молекул тиофена в процессе охлаждения при изменении различных ориентационных состояний от фазы III до V_g .

В общем виде при $T > 20$ К экспериментальные данные $\kappa(T)$ тиофена в последовательности стабильных фаз можно описать зависимостью $A/T + B$. Первое слагаемое — вклад в теплопроводность резистивных процессов фонон-фононного рассеяния, в которых средняя длина свободного пробега фононов больше половины длины волны фонона. Второе, не зависящее от температуры, слагаемое описывает дополнительный механизм переноса тепла локализованными коротковолновыми «диффузными» колебательными модами, средняя длина свободного пробега которых сравнима с половиной длины волны фонона, вклад которых может быть описан высокотемпературным пределом теплопроводности по модели Кахилла–Поля [24–26]. Зависимость $A/T + B$ хорошо описывает теплопроводность твердых спиртов в ориентационно упорядочен-

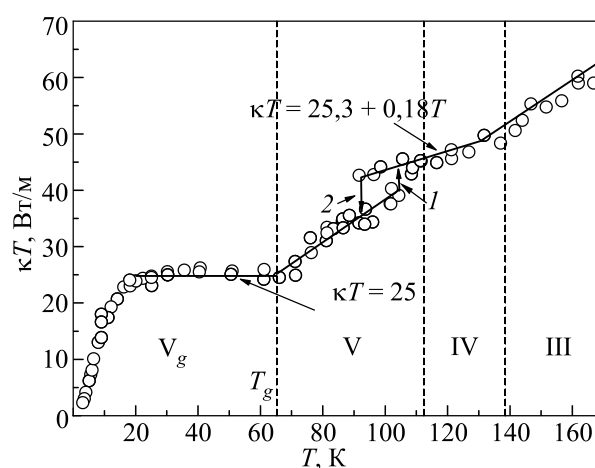


Рис. 2. Температурная зависимость теплопроводности тиофена в последовательности стабильных фаз V_g –III. Вертикальные пунктирные линии соответствуют температурам фазовых переходов, T_g — температура стеклования. Сплошные прямые линии — зависимость $\kappa(T) \cdot T = A + BT$, параметры A и B приведены в табл. 1. Стрелками 1 и 2 указаны скачки теплопроводности при нагреве и охлаждении образца соответственно.

ной фазе в высокотемпературной области: метилового, протонированного этилового и 1-пропилового [27], дейтерированного этилового [2] и 1-бутилового [28]. В этих кристаллических веществах, образованных молекулами с водородной связью, процессы фонон-фононного рассеяния являются очень сильными и зависящими от массы молекулы. В табл. 1 приведены параметры A и B , полученные путем линейной аппроксимации экспериментальных данных по теплопроводности тиофена при $T > 20$ К для различных состояний. Параметр A , найденный для тиофена в состояниях V_g и IV, по величине близок к значению для 1-бутилового спирта и хорошо согласуется с зависимостью, предложенной в работе [28].

Отметим, что величина параметра A , характеризующего интенсивность фонон-фононных процессов рассеяния, почти одинакова в состояниях V_g и IV и равна нулю в фазах V и III. Величина параметра B почти одинакова для фаз V и III. Таким образом, в фазах V и III, где молекулы имеют сильный ангармонический тип движения — либрации на большие углы и переориентации, — теплопроводность не зависит от температуры ($A = 0$). В состоянии V_g при $T > 10$ К и

Таблица 1. Параметры A и B , количество молекул Z в элементарной ячейке для различных состояний тиофена

Состояние	Тип ориентационного беспорядка	Z	A , Вт/м	B , Вт/(м·К)
V_g , соизмеримое	Статический	8	$25,0 \pm 0,3$	0
V, соизмеримое	Динамический	8	0	$0,385 \pm 0,005$
IV, несоизмеримое	Динамический	4	$25,3 \pm 0,3$	$0,180 \pm 0,005$
III, соизмеримое	Динамический	4	0	$0,373 \pm 0,005$

в фазе IV, когда молекулярное движение замораживается и движение молекул характеризуется малоугловыми либрациями, теплопроводность показывает обратно пропорциональную зависимость от температуры.

Выводы

В данной работе впервые измерена температурная зависимость теплопроводности твердого тиофена при равновесной упругости пара при $2\text{ K} < T < 180\text{ K}$ в последовательности стабильных ориентационно-разупорядоченных фаз с различной степенью ориентационного упорядочения молекул: V_g (ориентационное стекло с замороженным вращательным движением молекулы тиофена в плоскости кольца), V (с большими угловыми либрационными колебаниями молекул и орторомбической суперструктурой), IV (с несоразмерной суперструктурой и статическим ориентационным беспорядком молекул) и III (кристаллическая фаза с динамическим ориентационным беспорядком молекул). Установлено, что в фазах III и V с динамическим ориентационным беспорядком молекул теплопроводность тиофена практически не зависит от температуры. В состоянии ориентационного стекла и несоразмерной фазе температурная зависимость теплопроводности аналогична теплопроводности кристаллов с дальним ориентационным порядком, что, по-видимому, обусловлено уменьшением количества ДУС (по аналогии с ультрастабильными стеклами индометацина) в результате возникновения ориентационных корреляций между молекулами. В этом состоянии с понижением температуры от T_g до 10 К теплопроводность растет, как $\kappa(T) \sim 1/T$. Обнаружен отчетливый гистерезис теплопроводности ниже температуры фазового перехода первого рода из фазы IV в фазу V, связанный, по-видимому, с переохлаждением фазы IV.

Работа поддержана совместным проектом НАН Украины и Российского фонда фундаментальных исследований «Метастабильные состояния простых конденсированных систем» (договор № 7/Н-2013).

1. A.I. Krivchikov, A.N. Yushchenko, V.G. Manzhelii, O.A. Korolyuk, F.J. Bermejo, R. Fernandez-Perea, C. Cabrillo, and M.A. Gonzalez, *Phys. Rev. B* **74**, 060201(R) (2006).
2. A.I. Krivchikov, F.J. Bermejo, I.V. Sharapova, O.A. Korolyuk, and O.O. Romantsova, *Fiz. Nizk. Temp.* **37**, 651 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 517 (2011)].
3. T.P. Castañeda, C.R. Tinoco, J.R. Viejo, and M.A. Ramos, *PNAS* **111**, 11275 (2014).
4. G. Remenyi, S. Sahling, K. Biljakovic, D. Staresinic, J.-C. Lasjaunias, J.E. Lorenzo, P. Monceau, and A. Cano, *Archives-Ouvertes.fr*, 01003785 (2014).

5. J. Etrillard, J.C. Lasjaunias, B. Toudic, and H. Cailleau, *Europhys. Lett.* **38**, 347 (1997).
6. J. Etrillard, J.C. Lasjaunias, K. Biljaković, B. Toudic, and G. Coddens, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2334 (1996).
7. V.A. Konstantinov, V.V. Sagan, V.P. Revyakin, A.V. Zvonaryova, and O.I. Pursky, *Fiz. Nizk. Temp.* **39**, 606 (2013) [*Low Temp. Phys.* **39**, 473 (2013)].
8. D. Andre and H. Szwarc, *Phase Transitions* **31**, 59 (1991).
9. G. Waddington, J.W. Knowlton, D.W. Scott, G.D. Oliver, S.S. Tood, W.N. Hubbard, J.C. Smith, and H.M. Huffman, *J. Am. Chem. Soc.* **71**, 797 (1949).
10. P. Figuiere, H. Szwarc, M. Oguni, and S. Suga, *J. Chem. Thermodyn.* **17**, 949 (1985).
11. D. Andre and H. Szwarc, *J. Phys.* **47**, 61 (1986).
12. F. Dunstetter, D. Andre, A. Gonthier-Vassal, H. Szwarc, N. Ratovelomanana, and M. Lautie, *Chem. Phys.* **175**, 475 (1993).
13. F. Damay, J. Rodriguez-Carvajal, D. Andre, F. Dunstetter, and H. Szwarc, *Acta Cryst. B* **64**, 589 (2008).
14. C. Bessada, A.H. Fuchs, J. Gallier, and B. Rousseau, *J. Phys. (France)* **50**, 855 (1989).
15. H. Szwarc, *Thermochim. Acta* **109**, 91 (1986).
16. V.A. Konstantinov, A.I. Krivchikov, O.A. Korolyuk, V.P. Revyakin, V.V. Sagan, G.A. Vdovichenko, and A.V. Zvonaryova, *Physica B: Condens. Matter* **424**, 54 (2013).
17. A.I. Krivchikov, O.A. Korolyuk, I.V. Sharapova, J.L. Tamarit, F.J. Bermejo, L.C. Pardo, M. Rovira-Esteva, M.D. Ruiz-Martin, A. Jezowski, J. Baran, and N.A. Davydova, *Phys. Rev. B* **85**, 014206 (2012).
18. А.И. Кривчиков, Б.Я. Городилов, О.А. Королюк, *ИТЭ* **48**, № 3, 153 (2005).
19. R.M. Ibberson, M.T.F. Telling, and S. Parsons, *Crystal Growth & Design* **8**, No. 2, 512 (2008).
20. D. André, D. Ceccaldi, and H. Szwarc, *J. Phys. (France)* **45**, 731 (1984).
21. D. Ceccaldi, *Phys. Rev. B* **31**, 8221 (1985).
22. R.M. Ibberson, S. Parsons, D.R. Allan, and A.M.T. Bell, *Acta Cryst. B* **64**, 573 (2008).
23. N. Okamoto, M. Oguni, and H. Suga, *J. Phys. Chem. Solids* **50**, 1285 (1989).
24. D.G. Cahill and R.O. Pohl, *Ann. Rev. Phys. Chem.* **39**, 93 (1988).
25. D.G. Cahill and R.O. Pohl, *Phys. Rev. B* **35**, 4067 (1987).
26. D.G. Cahill, S.K. Watson, and R.O. Pohl, *Phys. Rev. B* **46**, 6131 (1992).
27. A.I. Krivchikov, F.J. Bermejo, I.V. Sharapova, O.A. Korolyuk, and O.O. Romantsova, *Fiz. Nizk. Temp.* **35**, 1143 (2009) [*Low Temp. Phys.* **35**, 891 (2009)].
28. O.A. Korolyuk, *Fiz. Nizk. Temp.* **37**, 526 (2011) [*Low Temp. Phys.* **37**, 416 (2011)].

Effects of molecular disorder in thermal conductivity of solid thiophene

G.A. Vdovichenko, A.I. Krivchikov, O.A. Korolyuk, and O.O. Romantsova

The temperature dependence of the thermal conductivity $\kappa(T)$ of solid thiophene in the sequence of stable orientationally disordered phases with different degrees of orientational ordering of molecules has been measured: in the orientational glass (V_g); in phase V, which has large angular libration molecular vibrations; in incommensurate phase IV with a static orientational disorder, and in orientationally disordered crystalline phase III with a dynamic orientational disorder of the molecules. The measurements were carried out at saturated vapor pressure in the temperature range 2–180 K. It has been found that the thermal conductivity is practically

independent of temperature in phases III and V with the dynamic orientational disorder of the molecules. The temperature dependence of the thermal conductivity of the orientational glass state and the incommensurate phase has the form typical for the thermal conductivity of crystals with long-range orientational order. A distinct hysteresis of thermal conductivity is found slightly below the temperature of the IV \rightarrow V phase transition.

PACS: **65.60 +a** Thermal properties of amorphous solids and glasses: heat capacity, thermal expansion, etc.;

66.70.-f Nonelectronic thermal conduction and heat-pulse propagation in solids; thermal waves;

63.20.-e Phonons in crystal lattices.

Keywords: thermal conductivity, thiophene, polymorphism, orientational disorder.