06

Влияние фононной фокусировки на анизотропию теплопроводности в сверхпроводящем монокристалле $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$

© Д.А. Чернодубов[1,2], А.В. Инюшкин[1]

[1] Национальный исследовательский центр „Курчатовский институт“, Москва, Россия,
[2] Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

E-mail: Chernodubov_DA@nrcki.ru

Поступила в Редакцию 6 марта 2026 г.
В окончательной редакции 9 марта 2026 г.
Принята к публикации 13 марта 2026 г.

Проведен расчет теплопроводности $\kappa(T)$ монокристаллов сверхпроводящей орторомбической фазы $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ при низких температурах с учетом эффекта фононной фокусировки на основе теории МакКарди, Мариса и Элбаума в приближении чисто диффузного граничного рассеяния фононов. Рассмотрены образцы материала в форме цилиндров круглого сечения с ориентацией теплового потока вдоль оси цилиндра. Найдено, что величина κ сильно зависит от кристаллографической ориентации оси и может различаться в несколько раз. Каустики в поверхности групповых скоростей фононных мод вблизи определённых направлений в кристаллической решетке приводят к увеличению теплопроводности до 60 % по сравнению с изотропной величиной, определенной в рамках теории Казимира. Соотношение величин теплопроводности κ_a, κ_b и κ_c вдоль главных кристаллографических осей a, b и c орторомбической решетки составило $\kappa_b/\kappa_a = 1.2$ и $\kappa_b/\kappa_c = 2$. Расчет с учетом геометрии образцов показывает достаточное согласие с имеющимися в литературе экспериментальными данными, что может свидетельствовать о значительном вкладе эффекта фононной фокусировки в анизотропию теплопроводности YBCO при низких температурах.

Ключевые слова: высокотемпературные сверхпроводники, теплопроводность, монокристалл, кристаллическая анизотропия, фононная фокусировка.

DOI: 10.61011/FTT.2026.07.63654.13HH

1. Введение

Высокотемпературный сверхпроводник $YBa_2Cu_3O_{7-\delta}$ (YBCO) обладает относительно высоким значением критической температуры T_c (93 K), которая позволяет применять его в различных технических устройствах при относительно высоких температурах, достижимых с гораздо меньшими затратами, чем в случае низкотемпературных сверхпроводников [1].

Знание тепловых свойств, особенно теплопроводности κ и ее температурной зависимости $\kappa(T)$, критически важны для управления поведением электронных устройств и увеличения их эффективности, оптимизации их работы. Показано, что с уменьшением температуры $\kappa(T)$ для монокристаллического YBCO резко увеличивается при достижении T_c [2–4]. $\kappa(T)$ достигает максимума около 40 K и затем начинает падать. В YBCO теплопроводность обусловлена двумя носителями тепла — фононами и электронами. Общую теплопроводность кристалла можно представить как сумму этих двух членов.

Существует два подхода для объяснения температурной зависимости теплопроводности [5]. Первый подход связывает ее с фононами, скорость рассеяния которых на электронах снижается при переходе металла в сверхпроводящее состояние из-за образования куперовских пар. Это ведет к росту фононной теплопроводности при переходе в сверхпроводящее состояние. Второй подход предполагает, что наблюдаемая $\kappa(T)$ определяется в большей степени электронной теплопроводностью в $Cu-O_2$ плоскостях, возрастающей при переходе в сверхпроводящее состояние из-за подавления электрон-электронного рассеяния. Второй подход, в частности, использовался для объяснения анизотропии теплопроводности YBCO в плоскости ab [6,7], компонента κ_b которой вдоль оси b больше, чем κ_a вдоль оси a. Более высокая величина κ_b была связана авторами [6] с добавочным вкладом носителей заряда в квази-одномерных цепочках Cu–O, которые ориентированы вдоль оси b. Обе компоненты показали резкий рост при переходе через $T_c = 93.8$ K при уменьшении T, но их разность $\kappa_b - \kappa_a$ слабо меняется с температурой в диапазоне от 150 K до 55 K и не продемонстрировала аномалии в точке перехода [6]. Однако $\kappa_b - \kappa_a$ начинает быстро увеличиваться с уменьшением температуры ниже 55 K, достигая максимума при 15 K, который примерно в 2.8 раза больше „высокотемпературного“ плато. Такое поведение может быть обусловлено резким ростом сверхтекучей плотности в цепочках при температурах ниже 55 K [6]. Тем не менее, этот подход ставит несколько вопросов. Так, одним из аргументов против фононной природы максимума теплопроводности в [6]

служит то, что κ диэлектрика $YBa_2Cu_3O_6$, обедненного по кислороду, значительно ниже, чем в случае YBCO. Напротив, в [2] показано, что низкотемпературные величины теплопроводности кристаллов $YBa_2Cu_3O_{6.92}$ и $YBa_2Cu_3O_{6.05}$ почти идентичных размеров близки друг к другу.

В [7] проанализирована разница величин теплопроводности вдоль кристаллографических осей a и b в предположении, что анизотропию теплопроводности можно приписать исключительно поведению носителей заряда, а фононную компоненту теплопроводности можно считать изотропной. Тем не менее, все кристаллы являются в той или иной мере упруго анизотропными. Даже кубические кристаллы, например, кремний и алмаз, демонстрируют анизотропию упругих свойств. При низких температурах, когда скорость рассеяния фононов в значительной мере определяется взаимодействием фононов с границами образца, теплопроводность кремния и алмаза становится анизотропной из-за эффекта фононной фокусировки [8]. Этот эффект заключается в том, что анизотропия упругих постоянных кристалла приводит к анизотропии групповых скоростей фононов и, соответственно, анизотропии теплопроводности. Кажется разумным, что YBCO, являющийся кристаллом с орторомбической пространственной группой и, соответственно, более сложным, нежели у кубической решетки, видом тензора упругих постоянных, может явно проявлять эффект фононной фокусировки.

В настоящей работе рассчитана фононная теплопроводность монокристалла YBCO в режиме чисто диффузного граничного рассеяния фононов при низких температурах. Расчетная теплопроводность сильно зависит от кристаллографической ориентации образца. Расчеты проведены для теплопроводности вдоль разных кристаллографических осей кристаллов YBCO, соответствующих геометрии измеренных образцов, и получено хорошее согласие между измеренными и расчетными величинами относительной теплопроводности.

2. Образцы и методы

Фазовые и групповые скорости фононов определены численно с помощью ПО Christoffel [9]. Фазовые скорости s продольной моды L и поперечных $T1$ и $T2$ определены как собственные значения матрицы Кристоффеля M, связанной с упругими постоянными кристалла C как $M_{ij} = \Sigma_{nm} k_n C_{inmj} k_m$, где вектор k — волной вектор. Групповые скорости v и их направления затем определены как [10]

$$\mathbf{v} = \nabla_n s.$$

Угловая зависимость фазовой скорости позволяет в рамках модели Дебая рассчитать скорость Казимира v_C, скорость Дебая v_D, и, помимо этого, в рамках модели Дебая определить удельную теплоемкость кристалла C_v и температуру Дебая T_D^{el} как [8,11]:

$$v_C = \frac{\langle s^{-2}\rangle}{\langle s^{-3}\rangle},$$

$$v_D = (\langle s^{-3}\rangle)^{-1/3},$$

$$C_v = k_B \frac{2\pi^2}{5}\left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3 v_D^{-3},$$

$$T_D^{el} = v_D\left(\frac{6\pi^2}{V_0}\right)^{1/3}\frac{\hbar}{k_B},$$

где V_0 — атомный объем, а $\langle s^{-2}\rangle$ и $\langle s^{-3}\rangle$ — средние значения обратных квадратов и обратных кубов фазовых скоростей всех фононных мод по полному телесному углу ($d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$, $0 < \theta < \pi$, $0 < \varphi < 2\pi$):

$$\langle s^{-n}\rangle = \frac{1}{3}\frac{1}{4\pi}\sum_j \int_\Omega \frac{d\Omega}{s^n(\mathbf{k}j)}.$$

Атомный объем V_0 в случае кристалла с орторомбической симметрией определяется как $V_0 = abc/n$, где в случае YBCO параметры решетки $a = 3.82$ Å, $b = 3.89$ Å, $c = 11.68$ Å, а число атомов в ячейке равно 13. Для вычислений использованы упругие постоянные $C_{11} = 231$ GPa, $C_{22} = 268$ GPa, $C_{33} = 186$ GPa, $C_{44} = 49$ GPa, $C_{55} = 37$ GPa, $C_{66} = 95$ GPa, $C_{12} = 132$ GPa, $C_{13} = 71$ GPa и $C_{23} = 95$ GPa [12]. Несмотря на то, что этот набор C_{inmj} измерен при комнатной температуре, мы пренебрегли их температурной зависимостью, поскольку упругие постоянные YBCO отличаются менее чем на 5 % при высоких и низких температурах [13].

Теплопроводность в режиме диффузного граничного рассеяния в рамках модели МакКарди определяется как [14]:

$$\kappa = \frac{C_v v_D^3}{24\pi A}\sum_j \int_\Omega \frac{I(\mathbf{k}j)}{s^3(\mathbf{k}j)}\, d\Omega,$$

где A — площадь поперечного сечения образца, I — интеграл, зависящий от геометрии образца, например, в случае образца с круглым поперечным сечением он равен

$$I_o(\mathbf{k}j) = \frac{16R^3}{3}\frac{v_3^2(\mathbf{k}j)}{v_1(\mathbf{k}j)},$$

где R — радиус круглого образца, $v_3(\mathbf{k}j)$ — компонента групповой скорости вдоль оси образца, $v_1(\mathbf{k}j)$ — компонента групповой скорости в плоскости поперечного сечения образца. В случае же образца с прямоугольным поперечным сечением этот интеграл вычисляется как

$$I_{\blacksquare}(\mathbf{k}j) = \begin{cases} \dfrac{D^3}{3}\dfrac{v_3^2(\mathbf{k}j)}{v_1(\mathbf{k}j)}\dfrac{3n\sin\phi - \cos\phi}{\sin^2\phi} & \text{при } \tan\phi > \dfrac{1}{n} \\ \dfrac{D^3}{3}\dfrac{v_3^2(\mathbf{k}j)}{v_1(\mathbf{k}j)}\dfrac{3n^2\cos\phi - n^3\sin\phi}{\cos^2\phi} & \text{при } \tan\phi < \dfrac{1}{n}, \end{cases}$$

где D и nD — размеры сторон поперечного сечения, ϕ — угол между $v_1(\mathbf{k}j)$ и стороной с размером nD.

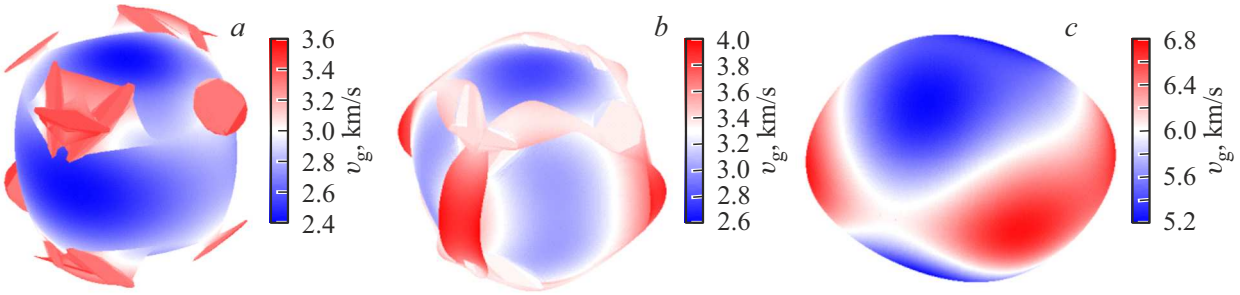


Рис. 1. Поверхности групповых скоростей фононных мод в YBCO: моды $T1$ (a), моды $T2$ (b) и моды L (c).

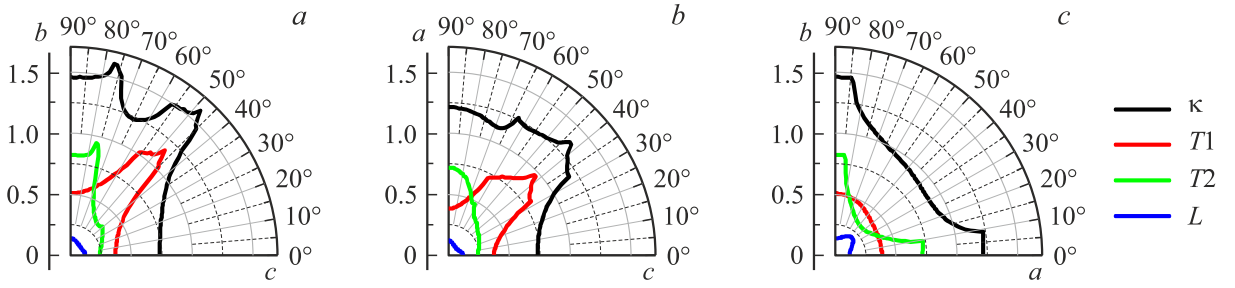


Рис. 2. Нормированная теплопроводность κ/κ_C цилиндрического образца YBCO диаметром 3 mm бесконечной длины при низких температурах с учетом фононной фокусировки в зависимости от ориентации образца в плоскостях bc (a), ac (b) и ab (c). Данные для суммарной теплопроводности показаны черными линиями, вклады медленной поперечной $T1$, быстрой поперечной $T2$ и продольной L мод показаны красной, зеленой и синей линиями соответственно.

Для вычисления теплопроводности в случае стержня конечного размера также важно ввести поправку на длину. Была использована та же поправка, что приведена в [14]. Значения фазовых скоростей фононов рассчитаны в полном телесном угле с шагом 0.25° по полярному и азимутальному углам. Теплопроводность была рассчитана во всех направлениях ориентации оси образца с шагом 1° по полярному и азимутальному углам.

3. Результаты и их обсуждение

На рис. 1 показаны поверхности групповых скоростей монокристалла YBCO. В то время как продольная мода L ведет себя достаточно гладко, в поверхностях групповых скоростей поперечных мод $T1$ и $T2$ наблюдается ряд каустик, которые позволяют предположить наличие сильной анизотропии теплопроводности.

На рис. 2 показаны расчетные данные по теплопроводности монокристалла YBCO в форме цилиндра диаметром 3 mm бесконечной длины и вклады в теплопроводность всех фононных мод. Для того, чтобы проиллюстрировать эффект ориентации кристалла, значения теплопроводности нормированы на изотропное значение теплопроводности по Казимиру $\kappa_C = \frac{1}{3} C_v v_C l_C$, где l_C — длина Казимира (в случае цилиндра бесконечной длины она равна его диаметру).

Вклад быстрой моды L относительно мал по сравнению с вкладом более медленных мод $T1$ и $T2$. Мода $T1$ дефокусирована в направлении главных кристаллографических осей $(a, b$ и $c)$, но сфокусирована под углом $\sim 45°$ к оси c. Мода $T2$ дефокусирована в направлении кристаллографической оси c, но сфокусирована вдоль осей a и b. Еще одно дополнительное направление фокусировки этой моды расположено под углом $\sim 10°$ к оси b в плоскости ab. Совокупность этих особенностей приводит к сильной угловой зависимости величины теплопроводности.

Эффект фононной фокусировки приводит к сильной анизотропии теплопроводности. Так, значение теплопроводности вдоль кристаллографической оси b на почти 21 % выше, чем вдоль кристаллографической оси a в случае выбранной геометрии. Для того, чтобы определить, может ли этот эффект служить причиной ранее измеренной анизотропии теплопроводности YBCO, был проведен расчет для геометрий кристаллов, использованных в опубликованных экспериментальных исследованиях.

В работе [7] анизотропия теплопроводности измерялась на двух различных образцах. Кристалл, ориентированный вдоль оси a, имел размеры $0.086 \times 0.74 \times 1.31\,\text{mm}^3$, а ориентированный вдоль оси b — $0.081 \times 1.29 \times 1.43\,\text{mm}^3$. Эти значения использованы для расчета их фононной теплопроводности в соответствии методикой,

изложенной выше в разделе „Образцы и методы“. Полученные расчетные значения теплопроводности составили $\kappa_a/T^3 = 0.0495\,\mathrm{W}\cdot\mathrm{m}^{-1}\cdot\mathrm{K}^{-4}$ и $\kappa_b/T^3 = 0.077\,\mathrm{W}\cdot\mathrm{m}^{-1}\cdot\mathrm{K}^{-4}$. Эти значения в сравнении с экспериментальными данными показаны на рис. 3. Видно, что при температурах ниже 5 K расчетные данные лежат ниже экспериментальных, но при более высоких температурах значительно их превышают. Это соответствует тому, что расчет учитывает исключительно рассеяние фононов на границе образца и игнорирует электронный теплоперенос. Из-за этого при высоких температурах расчетные данные лишь описывают максимально возможную величину фононной теплопроводности в отсутствие иных процессов фононного рассеяния, а при низких температурах, наоборот, не учтен дополнительный достаточно значимый вклад электронов в теплоперенос. Тем не менее, значение азотропии теплопроводности κ_b/κ_a составляет 1.56 и совпадает с найденным в эксперименте в пределах 5 %.

Эксперимент [6] проводился при более высоких температурах, поэтому результат вычислений может служить только в качестве верхнего предела фононной теплопроводности. Результаты расчета и сравнение с экспериментальными данными показаны на рис. 4. Образец имел размеры $0.6 \times 0.6 \times 0.025\,\mathrm{mm}^3$, оси a и b были параллельны длинным ребрам кристалла. Полученные значения теплопроводности составили $\kappa_a/T^3 = 0.0189\,\mathrm{W}\cdot\mathrm{m}^{-1}\cdot\mathrm{K}^{-4}$ и $\kappa_b/T^3 = 0.0271\,\mathrm{W}\cdot\mathrm{m}^{-1}\cdot\mathrm{K}^{-4}$, соответственно величина анизотропии κ_b/κ_a составляет 1.43, что всего лишь на 6 % отличается от результата эксперимента при температурах ниже 20 K. Как показано в эксперименте, величина анизотропии уменьшается с увеличением температуры. Это соответствует тому, что фононная фокусировка при высоких температурах подавляется, поскольку граничное рассеяние перестает быть доминирующим процессом фононного рассеяния [15].

Следует отметить, что абсолютная величина теплопроводности в эксперименте демонстрирует температурную зависимость, заметно отличающуюся от T^3, что указывает на выход из режима Казимира при $T > 6$ K из-за роста вклада других процессов рассеяния фононов и наличия электронного вклада. Соответственно и абсолютные расчетные значения κ сильно отличаются от экспериментальных, в первую очередь из-за отсутствия учета других процессов фононного рассеяния кроме диффузного граничного и электронного теплопереноса, хотя при самых низких температурах вблизи 5 K результаты расчета близки к экспериментальным. Однако, несмотря на отличие абсолютных значений, в обоих случаях расчет достаточно точно воспроизводит измеренную величину анизотропии κ_b/κ_a. Это можно объяснить тем, что, хотя абсолютное значение теплопроводности сильно зависит от конкретных механизмов рассеяния и времен релаксации фононов в них, отношение теплопроводностей вдоль разных осей определяется в основном фононным спектром и слабо

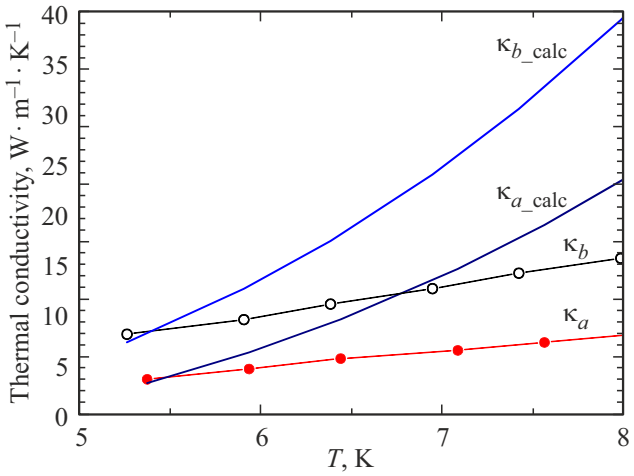


Рис. 3. Температурная зависимость теплопроводности кристаллов YBCO вдоль кристаллографических осей a и b в области температур от 5 до 8 K. Данные расчетов показаны сплошными линиями; экспериментальные данные, полученные в работе [7], показаны символами, соединенными прямыми линиями для наглядности.

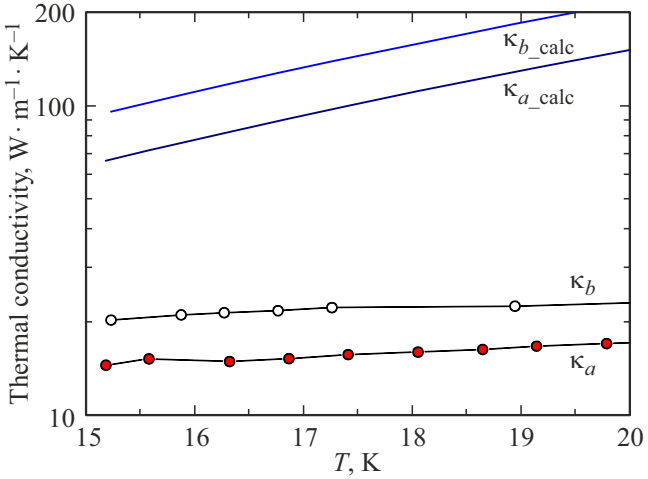


Рис. 4. Теплопроводность кристаллов YBCO вдоль кристаллографических осей a и b как функция температуры в диапазоне от 15 до 20 K. Данные расчетов показаны сплошными линиями; экспериментальные данные, полученные в работе [6], показаны символами, соединенными прямыми линиями для наглядности.

меняется при изменении температуры в данной области. Отметим, что учет наличия конечной величины зеркальности рассеяния увеличит величину теплопроводности при низких температурах, причем в предельном случае чисто зеркального отражения фононов от поверхности кристалла решеточная теплопроводность следует линейной температурной зависимости. Таким образом, результаты выполненных расчетов указывают на заметный вклад эффекта фононной фокусировки в анизотропию теплопроводности YBCO при низких температурах.

4. Заключение

Рассчитаны групповые скорости фононов и фононная теплопроводность в монокристаллическом YBCO в режиме граничного диффузного рассеяния с учетом фононной фокусировки. Найдено, что фононная теплопроводность этого материала обладает сильной анизотропией. Самые высокие и низкие значения теплопроводности среди всех направлений отличаются более чем в два раза в случае образца с круглым сечением. Вычисления также выполнены для геометрий образцов, использованных в экспериментах, и полученные значения анизотропии хорошо воспроизводят эксперимент даже с учетом исключительно граничного рассеяния фононов. Это может быть аргументом в пользу фононной природы анизотропии теплопроводности YBCO.

Благодарности

При исследованиях использовалось оборудование Ресурсного центра электрофизических методов Национального исследовательского центра „Курчатовский институт“.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Национального исследовательского центра „Курчатовский институт“.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] C.W. Chu, L.Z. Deng, B. Lv. Phys. C: Supercond. Appl. **514**, 290 (2015).
[2] A.V. Inyushkin, A.N. Taldenkov, T.G. Uvarova. Phys. Rev. B **54**, 13261 (1996).
[3] В.В. Флорентьев, А.В. Инюшкин, А.Н. Талденков. Сверхпроводимость: Физика, Химия, Техника *3*, 2301 (1990).
[4] V. Florent'ev, A. Inyushkin, A. Taldenkov, O. Melnikov, A. Bykov. In: *Proceedings of the ICTPS '90 International Conference on Transport Properties of Superconductors*. World Scientific, Rio de Janeiro. (1990). P. 462.
[5] C. Uher, Y. Liu, J.F. Whitaker. J. Supercond. **7**, 323 (1994).
[6] R.C. Yu, M.B. Salamon, J.P. Lu, W.C. Lee. Phys. Rev. Lett. **69**, 1431 (1992).
[7] R. Gagnon, S. Pu, B. Ellman, L. Taillefer. Phys. Rev. Lett. **78**, 1976 (1997).
[8] A.K. McCurdy, H.J. Maris, C. Elbaum. Phys. Rev. B **2**, 4077 (1970).
[9] J.W. Jaeken, S. Cottenier. Comp. Phys. Commun. **207**, 445 (2016).
[10] Ф.И. Федоров. Теория упругих волн в кристаллах. Наука, М. (1965). 386 с.
[11] C. Kittel. Introduction to Solid State Physics, 8th ed. Wiley, NY. (2004). 700 p.
[12] M. Lei, J.L. Sarrao, W.M. Visscher, T.M. Bell, J.D. Thompson, A. Migliori, U.W. Welp, B.W. Veal. Phys. Rev. B **47**, 6154 (1993).
[13] H.M. Ledbetter, S.A. Kim. Phys. Rev. B **38**, 11857 (1988).
[14] D.A. Chernodoubov, A.V. Inyushkin. Phys. Lett. A **384**, 126120 (2020).
[15] A.V. Inyushkin, A.N. Taldenkov, J.W. Ager III, E.E. Haller, H. Riemann, N.V. Abrosimov, H.-J. Pohl, P. Becker. J. Appl. Phys. **123**, 095112 (2018).

Редактор Ю.Э. Китаев