

Влияние фононной фокусировки на анизотропию теплопроводности в сверхпроводящем монокристалле $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$

© Д.А. Чернодубов^{1,2}, А.В. Инюшкин¹

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 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ 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 определенных 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.2026.07.63654.13NN

1. Введение

Высокотемпературный сверхпроводник $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ (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 $\text{Cu}-\text{O}_2$ 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 $\text{Cu}-\text{O}$, 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 $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$, обедненного по кислороду, значительно ниже, чем в случае YBCO . Напротив, в [2] показано, что низкотемпературные величины теплопроводности кристаллов $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.92}$ и $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.05}$ 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 фоновую 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 $M_{ij} = \sum_n k_n C_{inmj} k_m$, где вектор k — волновой вектор. Групповые скорости v и их направления затем определены как [10]

$$\mathbf{v} = \nabla_{\mathbf{k}} s.$$

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 $a = 3.82 \text{ \AA}$, $b = 3.89 \text{ \AA}$, $c = 11.68 \text{ \AA}$, а число атомов в ячейке равно 13. Для вычислений использованы упругие постоянные $C_{11} = 231 \text{ GPa}$, $C_{22} = 268 \text{ GPa}$, $C_{33} = 186 \text{ GPa}$, $C_{44} = 49 \text{ GPa}$, $C_{55} = 37 \text{ GPa}$, $C_{66} = 95 \text{ GPa}$, $C_{12} = 132 \text{ GPa}$, $C_{13} = 71 \text{ GPa}$ и $C_{23} = 95 \text{ GPa}$ [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

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

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

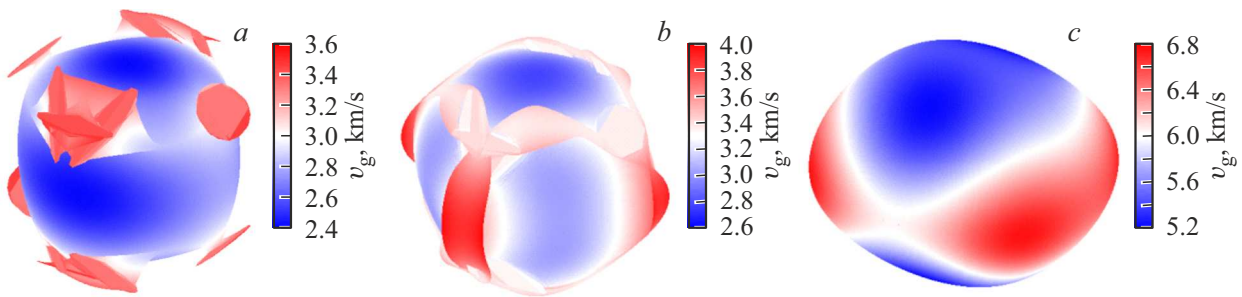


Рис. 1. Поверхности групповых скоростей фононных мод в YBCO: моды $T1$ (a), моды $T2$ (b) и моды L (c).

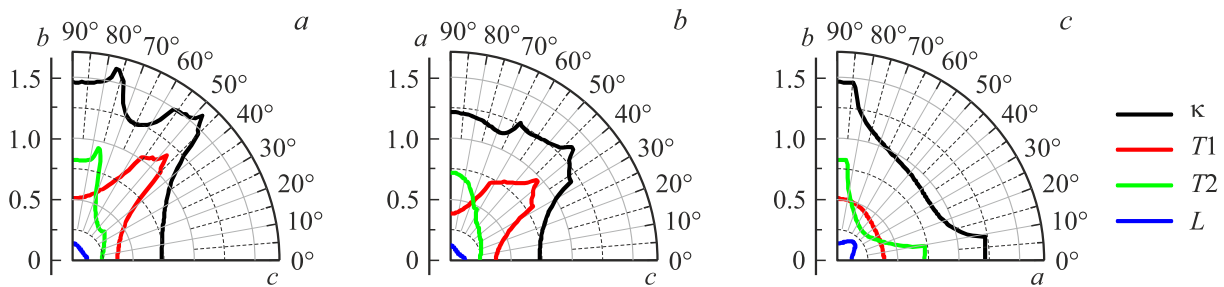


Рис. 2. Нормированная теплопроводность κ/κ_c цилиндрического образца YBCO диаметром 3 mm бесконечной длины при низких температурах с учетом фононной фокусировки в зависимости от ориентации образца в плоскостях bc (a), ac (b) и ab (c). Данные для суммарной теплопроводности показаны черными линиями, вклады 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 $T2$. Моде $T1$ дефокусирована в направлении главных кристаллографических осей (a , b и c), но сфокусирована под углом $\sim 45^\circ$ к оси c . Моде $T2$ дефокусирована в направлении кристаллографической оси c , но сфокусирована вдоль осей a и b . Еще одно дополнительное направление фокусировки этой моды расположено под углом $\sim 10^\circ$ 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 $\kappa_a/T^3 = 0.0495 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-4}$ и $\kappa_b/T^3 = 0.077 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-4}$. Эти значения в сравнении с экспериментальными данными показаны на рис. 3. Видно, что при температурах ниже 5 К 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 анизотропии 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 $0.6 \times 0.6 \times 0.025 \text{ mm}^3$, оси a и b были параллельны длинным ребрам кристалла. Полученные значения теплопроводности составили $\kappa_a/T^3 = 0.0189 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-4}$ и $\kappa_b/T^3 = 0.0271 \text{ W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-4}$, соответственно величина анизотропии κ_b/κ_a составляет 1.43, что всего лишь на 6% отличается от результата эксперимента при температурах ниже 20 К. 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 $T > 6 \text{ K}$ 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 К 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

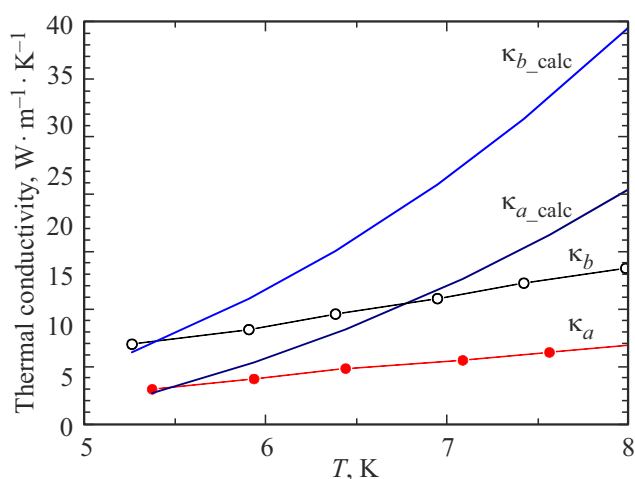


Рис. 3. Температурная зависимость теплопроводности кристаллов YBCO вдоль кристаллографических осей a и b в области температур от 5 до 8 К. Данные расчетов показаны сплошными линиями; экспериментальные данные, полученные в работе [7], показаны символами, соединенными прямыми линиями для наглядности.

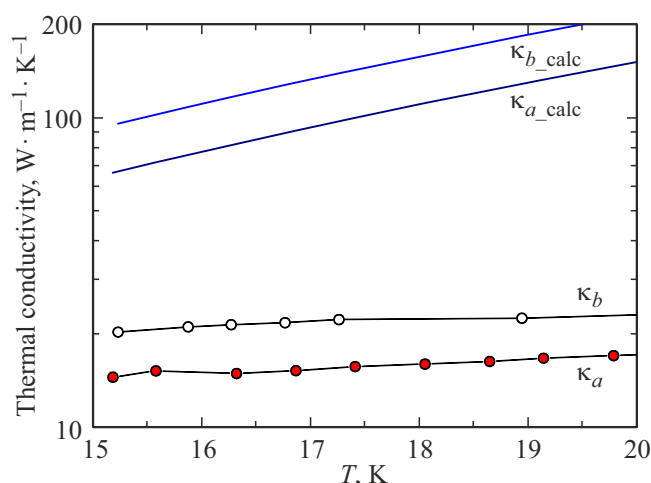


Рис. 4. Теплопроводность кристаллов YBCO вдоль кристаллографических осей a и b как функция температуры в диапазоне от 15 до 20 К. Данные расчетов показаны сплошными линиями; экспериментальные данные, полученные в работе [6], показаны символами, соединенными прямыми линиями для наглядности.

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. Chernodubov, 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. Кутаев