

02,03,07,11,13

Критическая температура перехода легированного бором алмаза в сверхпроводящее состояние

© В.А. Кукушкин^{1,2}, Ю.В. Кукушкин²

¹ Федеральное государственное бюджетное научное учреждение „Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук“, Нижний Новгород, Россия

² Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования „Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского“, Нижний Новгород, Россия

E-mail: vakuk@ipfran.ru

Поступила в Редакцию 14 мая 2026 г.

В окончательной редакции 9 июня 2026 г.

Принята к публикации 16 июня 2026 г.

Рассмотрена задача о вычислении критической температуры фазового перехода легированного акцепторной примесью бора алмаза в сверхпроводящее состояние. При ее решении учтены два характерных для этого полупроводника, но ранее не принимавшиеся во внимание фактора: сильное затухание оптических фононов вследствие их взаимодействия с дырками и сильное рассеяние дырок на отрицательно заряженных ионах бора. В результате показано, что первый из них приводит к значительному снижению критической температуры по сравнению с величинами, вычисляемыми в отсутствие этого затухания. Второй же фактор не вызывает значимого изменения критической температуры. В итоге получена формула для зависимости критической температуры фазового перехода легированного бором алмаза в сверхпроводящее состояние от его параметров. Вычисляемые с помощью нее значения критической температуры согласуются с существующими экспериментальными данными. Поэтому она может использоваться для поиска путей повышения этой важнейшей характеристики сверхпроводимости в легированном бором алмазе.

Ключевые слова: критическая температура, сверхпроводящий легированный бором алмаз.

DOI: 10.61011/FTT.2026.06.63563.9858

1. Введение

Сверхпроводимость была открыта и традиционно исследовалась в металлах, на основе которых и было создано большинство используемых сегодня сверхпроводящих устройств. С металлами во многом схожи высоколегированные полупроводники, в которых вследствие большой концентрации легирующей примеси значительная часть примесных атомов ионизуется и происходит фазовый переход в состояние с металлическим типом проводимости, т.н. переход изолятор–металл [1]. В результате концентрация свободных носителей заряда остается высокой [2] даже при низких температурах, необходимых для наблюдения сверхпроводимости.

Возможность сверхпроводимости для высоколегированных полупроводников была теоретически предсказана в 1950–1960 годах [3–6]. Экспериментально она была открыта для самолегированных GeTe [7], SnTe [8] и легированного SrTiO₃ [9]. Они оказались сверхпроводниками второго рода [10] с температурой перехода между 50 и 500 мК. Однако сверхпроводящие полупроводники не продемонстрировали каких-либо практических преимуществ по сравнению с металлами, и поэтому дальнейшее исследование их свойств не вызывало большого интереса.

В 2004 г. сверхпроводимость была обнаружена в таком уникальном полупроводнике, как алмаз, сильнолеги-

рованный акцепторной примесью бора (до концентрации порядка и более 10^{21} см^{-3} , когда в нем происходит фазовый переход изолятор–металл) [11]. Он оказался сверхпроводником второго рода с критической температурой T_c порядка нескольких кельвинов. Вследствие уникальных, во многом рекордных по сравнению с другими полупроводниками свойств алмаза (высокой теплопроводности, механической, химической и радиационной стойкости и др.) [12] это открытие вызвало большой интерес с точки зрения возможных приложений и положило начало интенсивному исследованию сверхпроводящего легированного бором алмаза [13]. Согласно общепринятому мнению, куперовское спаривание дырок в нем происходит в перекрывающихся примесной и валентной зонах делокализованных состояний за счет их взаимодействия с фононами, а сверхпроводимость удовлетворительно описывается теорией Бардина–Купера–Шриффера [13].

В связи с этим актуальной является задача установления зависимости T_c от параметров легирования и других характеристик алмазного образца с целью поиска путей ее повышения. В [13] и цитированной там литературе для T_c используется широко известная формула, выведенная в [14] для сверхпроводящих металлов. Однако, в отличие от них, легированный бором алмаз обладает двумя особенностями.

Первая из них связана с сильным (более сильным, чем во многих металлах) взаимодействием его оптических

фононов с имеющимися в нем свободными носителями заряда (дырками). В результате затухание оптических фононов в алмазе оказывается значительно большим, чем в обычных металлах, и соответствующий декремент оказывается порядка дебаевской частоты, т.е. самих частот этих фононов [11,15]. Поэтому возникает вопрос о применимости к сверхпроводящему легированному бором алмазу выведенной в [14] формулы для T_c , в которой затухание фононов вообще не учитывается.

Вторая особенность легированного бором алмаза связана с тем, что он является „грязным“ сверхпроводником [16,17], т.е. сверхпроводником, в котором длина свободного пробега носителей заряда по отношению к их рассеянию на примесях меньше длины когерентности при нулевой температуре. Это объясняется тем, что необходимая для реализации сверхпроводимости большая концентрация носителей заряда — дырок — в нем может быть достигнута лишь при большой концентрации являющихся их источниками примесных атомов бора. Последние, заряжаясь отрицательно при отдаче дырок в валентную зону, становятся для этих дырок кулоновскими рассеивающими центрами. В то же время формула для T_c в [14] выведена для чистых сверхпроводников. В связи с этим возникает вопрос о применимости этой формулы к „грязному“ сверхпроводнику типа сильнолегированного бором алмаза.

Учет этих двух особенностей при вычислении T_c и является целью настоящей работы. Для этого в следующем разделе приводятся уравнения, из которых выводится формула для T_c в [14]. В разделе 3 проводится их модификация с учетом затухания фононов и на ее основе получается новая формула T_c . В разделе 4 проводится модификация уравнений раздела 2 с учетом рассеяния дырок на примесях и обсуждаются ее результаты. В заключении суммированы основные результаты работы.

2. Уравнения для энергетической щели и перенормировочного параметра

В фононной модели сверхпроводимости Элиашберга уравнения для энергетической щели $\Delta(\omega)$ в спектре элементарных возбуждений и перенормировочного параметра $Z(\omega)$ при конечной температуре T имеют вид [18] (пользуемся системой единиц с постоянной Планка $\hbar$ и постоянной Больцмана k_B равными 1)

$$\begin{aligned} \Delta(\omega) = & \frac{1}{Z(\omega)} \int_0^{+\infty} d\omega' \operatorname{Re} \left[\frac{\Delta(\omega')}{\sqrt{\omega'^2 - \Delta^2(\omega')}} \right] \int_0^{+\infty} d\Omega \alpha^2(\Omega) F(\Omega) \\ & \times \left[\frac{f_F(-\omega') + f_B(\Omega)}{\omega' + \omega + \Omega - i0} + \frac{f_F(-\omega') + f_B(\Omega)}{\omega' - \omega + \Omega - i0} \right. \\ & \left. - \frac{f_F(\omega') + f_B(\Omega)}{-\omega' + \omega + \Omega + i0} - \frac{f_F(\omega') + f_B(\Omega)}{-\omega' - \omega + \Omega + i0} \right] \\ & - \frac{\tilde{\mu}}{Z(\omega)} \int_0^{\omega_c} d\omega' \operatorname{Re} \left[\frac{\Delta(\omega')}{\sqrt{\omega'^2 - \Delta^2(\omega')}} \right] \operatorname{th} \left(\frac{\omega'}{2T} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} [1 - Z(\omega)]\omega = & \int_0^{+\infty} d\omega' \operatorname{Re} \left[\frac{\omega'}{\sqrt{\omega'^2 - \Delta^2(\omega')}} \right] \\ & \times \int_0^{+\infty} d\Omega \alpha^2(\Omega) F(\Omega) \left[\frac{f_F(-\omega') + f_B(\Omega)}{\omega' + \omega + \Omega - i0} \right. \\ & - \frac{f_F(-\omega') + f_B(\Omega)}{\omega' - \omega + \Omega - i0} + \frac{f_F(\omega') + f_B(\Omega)}{-\omega' + \omega + \Omega + i0} \\ & \left. - \frac{f_F(\omega') + f_B(\Omega)}{-\omega' - \omega + \Omega + i0} \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $\omega_c \approx 10\omega_D$, где $\omega_D \approx 2.9 \cdot 10^{14}$ rad/s — дебаевская частота для алмаза [19], $f_F(\omega) = 1/[\exp(\omega/T) + 1]$ и $f_B(\Omega) = 1/[\exp(\Omega/T) - 1]$ — функции распределения Ферми–Дирака и Бозе–Эйнштейна с нулевыми химическими потенциалами соответственно, $\alpha^2(\Omega)$ — функция, описывающая дырочно-фононное взаимодействие, $F(\Omega)$ — плотность фононных состояний, при $\Omega > 0$ (интегрирование в (1) и (2) выполняется по положительным Ω) произведение $\alpha^2(\Omega)F(\Omega)$ этих функций дается формулой

$$\begin{aligned} \alpha^2(\Omega)F(\Omega) = & \int d^2p \int \frac{V d^2p'}{(2\pi)^3 v_F} \sum_j |\bar{g}_{pp'j}|^2 \\ & \times \delta(\Omega - \Omega_{p-p'j}) / \int d^2p, \end{aligned} \quad (3)$$

где двумерные интегралы по квазиимпульсам $\mathbf{p}$ и $\mathbf{p}'$ берутся по ферми-поверхности, v_F — скорость Ферми при квазиимпульсе $\mathbf{p}'$, V — объем системы, индекс j нумерует как фононные ветви (акустическую и оптическую), так и 3 возможные поляризации в каждой из этих ветвей, $\Omega_{p-p'j}$ — частота j -го фонона с квазиволновым вектором $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$, $\bar{g}_{pp'j} = i w_a |\mathbf{p} - \mathbf{p}'| / \sqrt{2V\rho\Omega_{p-p'j}}$ для акустических фононов и $\bar{g}_{pp'j} = w_o / \sqrt{2V\rho\Omega_{p-p'j}}$ для оптических фононов, $w_a = 8/3$ eV и $w_o = 7 \cdot 10^9/3$ eV/cm — константы, определяющие энергию дырочно-фононного взаимодействия для акустических и оптических фононов соответственно [20]¹, $\rho = 3.5$ g/cm³ — плотность алмаза [19].

Кулоновский псевдопотенциал

$$\tilde{\mu} \approx \frac{N(p_F)\langle U \rangle}{1 + N(p_F)\langle U \rangle \ln(E_F/\omega_c)}. \quad (4)$$

Здесь

$$\langle U \rangle = \int \frac{V_C(\mathbf{p}, \mathbf{p}')}{\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{p}')} \frac{d^2p'}{4\pi p_F^2} = \frac{\pi e^2}{p_F^2} \ln \left(\frac{4p_F^2 + p_s^2}{p_s^2} \right), \quad (5)$$

$\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = 1 + p_s^2(\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2$ — статическая диэлектрическая проницаемость дырок в приближении Томаса–

¹ Деление на 3 = $\sqrt{9}$ найденных в [20] констант связано с тем, что в этой работе их квадраты определялись по частотам рассеяния дырок на фононах соответствующих типов, т.е. в этих квадратах появлялся лишний множитель 9, связанный с произведением 3-х возможных поляризаций этих фононов на 3 возможные подзоны для конечных состояний дырки.

Ферми, $p_s^2 = 12me^2 p_F / \pi$ — квадрат волнового вектора Томаса–Ферми с учетом наличия в валентной зоне алмаза трех двукратно вырожденных по проекции спина подзон тяжелых, легких и отщепленных за счет спин-орбитального взаимодействия дырок (энергия спин-орбитального отщепления 6 meV [19] и при рассматриваемых высоких концентрациях дырок N/V порядка и более 10^{21} cm^{-3} много меньше энергии Ферми и поэтому в дальнейшем не учитывается), m — эффективная масса дырки (для простоты считающаяся изотропной и одинаковой для всех трех дырочных подзон и принимаемая равной 0.75 от массы свободного электрона [19]), e — заряд дырки, равный элементарному заряду, $p_F = (\pi^2 N/V)^{1/3}$ — квазиимпульс Ферми с учетом наличия трех двукратно вырожденных по проекции спина дырочных подзон в валентной зоне алмаза, двумерное интегрирование по квазиимпульсам выполняется по ферми-поверхности и полагается, что на этой же поверхности лежит вектор $\mathbf{p}$, т.е. $p = p_F$, $V_C(\mathbf{p}, \mathbf{p}') = 4\pi e^2 / (\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2$ — фурье-образ кулоновского потенциала, $E_F = (p_F^2 / (2m))$ — энергия Ферми, $N(p_F) = mp_F / (2\pi^2)$ — плотность состояний на поверхности Ферми (в расчете на одну подзону и одну проекцию спина дырки).

Как было сказано во Введении, уравнения (1) и (2) для сверхпроводящего легированного бором алмаза должны быть модифицированы с целью учета двух эффектов, отличающих его от обычных чистых сверхпроводящих металлов: сильного затухания фононов и сильного кулоновского рассеяния дырок на ионизованных примесных атомах, являющихся источником этих дырок. Начнем с учета первого эффекта.

3. Учет затухания фононов

Вследствие имеющего место в алмазе сильного взаимодействия дырок с оптическими фононами считается, что именно эти фононы дают основной вклад в образование куперовских дырочных пар [13]. Поэтому в дальнейшем будем учитывать только оптическую фононную ветвь, т.е. при суммировании по j во всех дальнейших формулах будем подразумевать лишь оптические фононы с тремя возможными поляризациями. Аппроксимируем закон их дисперсии формулой $\Omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} \approx \Omega_{0j} - u_j |\mathbf{p} - \mathbf{p}'|$ с некоторыми постоянными Ω_{0j} и u_j . Величины Ω_{0j} определены ниже, а u_j в окончательную формулу (11) для критической температуры не войдут, поэтому их конкретные значения неважны.

Для учета затухания фононов в (1) и (2) необходимо модифицировать вывод (3) в [18] путем использования в нем температурной функции Грина фононов $\mathcal{D}_j(\mathbf{q}, i2\pi nT)$ (где $\mathbf{q}$ — квазиволновой вектор фонона, n — любое целое число) с учетом их затухания. Последнюю можно приближенно представить в феноменологической форме $\mathcal{D}_j(\mathbf{q}, i2\pi nT) \approx 2\Omega_{\mathbf{q}j} / [(i2\pi nT + i\Gamma_{\mathbf{q}j})^2 - \Omega_{\mathbf{q}j}^2]$ при $n > 0$, $2\Omega_{\mathbf{q}j} / [(i2\pi nT - i\Gamma_{\mathbf{q}j})^2 - \Omega_{\mathbf{q}j}^2]$ при $n < 0$ и

$2\Omega_{\mathbf{q}j} / [(i\Gamma_{\mathbf{q}j})^2 - \Omega_{\mathbf{q}j}^2]$ при $n = 0$, где $\Gamma_{\mathbf{q}j} > 0$ — декремент затухания j -го фонона с квазиволновым вектором $\mathbf{q}$. Такая функция при $\Gamma_{\mathbf{q}j} = 0$ совпадает с температурной функцией Грина незатухающих фононов. В то же время, будучи аналитически продолженной с дискретных точек $i2\pi nT$ положительной мнимой полуоси комплексных частот Ω на всю их верхнюю полуплоскость, она имеет вид $2\Omega_{\mathbf{q}j} / [(\Omega + i\Gamma_{\mathbf{q}j})^2 - \Omega_{\mathbf{q}j}^2]$, т.е., как и должно быть, качественно правильно представляет запаздывающую функцию Грина затухающих фононов, аналитическую в верхней полуплоскости Ω и имеющую в нижней полуплоскости полюсы в точках $\pm\Omega_{\mathbf{q}j} - i\Gamma_{\mathbf{q}j}$, отвечающих частотам затухающих фононов. Будучи же аналитически продолженной с дискретных точек $i2\pi nT$ отрицательной мнимой полуоси комплексных частот Ω на всю их нижнюю полуплоскость, она имеет вид $2\Omega_{\mathbf{q}j} / [(\Omega - i\Gamma_{\mathbf{q}j})^2 - \Omega_{\mathbf{q}j}^2]$, т.е., как и должно быть, качественно правильно представляет опережающую функцию Грина затухающих фононов, аналитическую в нижней полуплоскости Ω и имеющую в верхней полуплоскости полюсы в точках $\pm\Omega_{\mathbf{q}j} + i\Gamma_{\mathbf{q}j}$, отвечающих частотам затухающих фононов.

Это представление для $\mathcal{D}_j(\mathbf{q}, i2\pi nT)$ можно также записать как

$$\mathcal{D}_j(\mathbf{q}, i2\pi nT) \approx \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2\Omega_{\mathbf{q}j}}{(x + i\Gamma_{\mathbf{q}j})^2 - \Omega_{\mathbf{q}j}^2} \frac{1}{x - i2\pi nT} dx - \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{2\Omega_{\mathbf{q}j}}{(x - i\Gamma_{\mathbf{q}j})^2 - \Omega_{\mathbf{q}j}^2} \frac{1}{x - i2\pi nT} dx.$$

Используя его при выводе (3), можно показать, что с учетом затухания фононов (3) модифицируется следующим образом:

$$\alpha^2(\Omega)F(\Omega) = \int d^2 p \int \frac{V d^2 p'}{(2\pi)^3 v_F} \times \sum_j |\bar{g}_{\mathbf{p}\mathbf{p}'}| \text{Im} \frac{2\Omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} j}{\pi(\Omega^2 - \Gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}^2 - \Omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'}^2 - 2i\Omega\Gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} j)} \int d^2 p. \quad (6)$$

При $\Omega > 0$ эта формула переходит в (3) при $\Gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} j \rightarrow 0$ (точнее, при $\Gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} j \ll 2p_F u_j$). Согласно же [11,15] $\Gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} j \approx \Omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'} j^2$, поэтому в силу выполняющегося в

² Декременты затухания оптических фононов оценены по экспериментальным ширинам по половине высоты линий рамановского рассеяния света в сильнолегированном бором (до концентрации более 10^{21} cm^{-3} , когда при низких температурах порядка нескольких кельвинов в нем наблюдается сверхпроводимость) алмазе, где они, как правило, велики [11,15], порядка частот оптических фононов. В работе [21] они меньше, возможно, это связано с тем, что использованные там пленки высоколегированного бором осажденного из газовой фазы алмаза были тонкими (вплоть до 300 nm) и присутствовал дополнительный сигнал от нелегированных подложки и буферного слоя. В работе [22] они больше, чем в [21], и близки к полученным в [11,15]. Таким образом, использованные оценки декремента затухания оптических фононов качественно согласуются с шириной по половине высоты линий рамановского рассеяния света для сверхпроводящих высоколегированных бором алмазных образцов, выращенных с помощью ряда определенных технологий.

сверхпроводящем легированном бором алмазе неравенства $\Omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'j} > 2p_{Fij}$ формула (6) существенно отличается от (3).

Выполняя в (6) интегрирования по квазиимпульсам, будем иметь

$$\alpha^2(\Omega)F(\Omega) \approx \frac{mw_0^2 p_F}{4\pi^3 \rho} \times \sum_j \frac{\Gamma_j}{\Omega_{0j}} \left[\frac{1}{(\Omega - \Omega_{0j})^2 + \Gamma_j^2} - \frac{1}{(\Omega + \Omega_{0j})^2 + \Gamma_j^2} \right], \quad (6a)$$

где для простоты считается, что $\Gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'j}$ не зависит от $\mathbf{p} - \mathbf{p}'$, т.е. положено $\Gamma_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'j} \approx \Gamma_j$, и также предполагается, что $2p_{Fij} \ll \Omega_{0j}$, Γ_j .

Для сравнения проведем интегрирование по квазиимпульсам в (3), где фононы считаются незатухающими. Для выбранного выше закона их дисперсии $\Omega_{\mathbf{p}-\mathbf{p}'j} \approx \Omega_{0j} - u_j |\mathbf{p} - \mathbf{p}'|$ при $\Omega > 0$ это дает формулу

$$\alpha^2(\Omega)F(\Omega) = \begin{cases} \frac{mp_F}{(2\pi)^2} \frac{w_0^2}{2\rho\Omega} \sum_j \frac{\Omega_{0j} - \Omega}{u_j^2 p_F^2}, & \Omega_{0j} - 2p_{Fij} < \Omega < \Omega_{0j}, \\ 0, & \Omega_{0j} - 2p_{Fij} > \Omega \text{ или } \Omega > \Omega_{0j}, \end{cases} \quad (3a)$$

которая существенно отличается от (6a).

Для нахождения критической температуры перехода легированного бором алмаза в сверхпроводящее состояние замечаем, что при этой температуре $\Delta(\omega) = 0$, поэтому в (1) и (2) можно пренебречь $\Delta^2(\omega')$ под знаками корней в знаменателях. Тогда (2) не будет вовсе содержать $\Delta(\omega')$ и превратится в формулу для вычисления перенормировочного параметра $Z(\omega)$. При этом при низких температурах порядка нескольких кельвинов, при которых наблюдается сверхпроводимость в легированном бором алмазе, в этой формуле можно не учитывать тепловые фононы, т.е. положить $f_B(\Omega) = 0$, а также считать, что $f_F(\omega') = 0$, а $f_F(-\omega') = 1$. Тогда интегрирование по ω' в (2) легко выполняется:

$$\begin{aligned} & \int_0^{+\infty} d\omega' \left(\frac{1}{\omega' + \omega + \Omega - i0} - \frac{1}{\omega' - \omega + \Omega - i0} \right) \\ &= \ln \left(\frac{-\omega + \Omega - i0}{\omega + \Omega - i0} \right) \\ &= \begin{cases} \ln \left(\frac{-\omega + \Omega}{\omega + \Omega} \right) \approx -\frac{2\omega}{\Omega}, & \omega < \Omega, \\ \ln \left(\frac{\omega - \Omega}{\omega + \Omega} \right) - i\pi \approx -\frac{2\Omega}{\omega} - i\pi, & \omega > \Omega, \end{cases} \end{aligned}$$

где считается, что $\ln 1 = 0$ и $\ln(-1) = -i\pi$. Проводя теперь интегрирование по Ω с использованием (6a),

будем иметь

$$Z(\omega) \approx \begin{cases} 1 + \frac{mw_0^2 p_F}{2\pi^2 \rho} \sum_j \frac{1}{\Gamma_j^2 + \Omega_{0j}^2} \equiv Z(0), & \omega < \Omega_0 \\ 1 \equiv Z(\infty), & \omega > \Omega_0, \end{cases} \quad (7)$$

где, поскольку все Ω_{0j} близки друг к другу, под $\Omega_0 \approx 2.5 \cdot 10^{14}$ rad/s ($\sim \omega_D$) подразумевается некоторая средняя Ω_{0j} [19]. Для численной оценки $Z(0)$ считаем, что все Ω_{0j} равны Ω_0 и, согласно [11,15], $\Gamma_j \approx 0.5\Omega_0$. Тогда $Z(0) \approx 1.1$.

Вычисления показывают, что при неучете затухания фононов, т.е. при использовании для $\alpha^2(\Omega)F(\Omega)$ формулы (3a) вместо (6a), для $Z(\omega)$ получится формула, аналогичная (7), но с $\Gamma_j = 0$. Тогда численная оценка для $Z(0)$ дает 1.13. Отсюда видно, что учет затухания фононов дает лишь относительно малую поправку к $Z(\omega)$.

После нахождения $Z(\omega)$ уравнение (1) в пределе $\Delta(\omega) \rightarrow 0$ превращается в однородное линейное интегральное уравнение для $\Delta(\omega)$. Условие существования у него ненулевого решения и определяет критическую температуру перехода легированного бором алмаза в сверхпроводящее состояние.

Для нахождения его решения выполним в нем интегрирование по Ω , используя (6a). Соответствующие интегралы даются формулами

$$\begin{aligned} & \int_0^{+\infty} \alpha^2(\Omega)F(\Omega) \frac{d\Omega}{\pm\omega' \pm \omega \pm \Omega \pm i0} \\ & \approx \begin{cases} \frac{mw_0^2 p_F}{2\pi^3 \rho} \sum_j \frac{\pi/2}{\Gamma_j^2 + \Omega_{0j}^2}, & |\pm\omega' \pm \omega| < \Omega_0, \\ \frac{mw_0^2 p_F}{2\pi^3 \rho} \sum_j \frac{\arctg \frac{\Omega_{0j}}{\Gamma_j}}{\Omega_{0j}(\pm\omega' \pm \omega)}, & |\pm\omega' \pm \omega| > \Omega_0 \end{cases} \quad (8) \end{aligned}$$

Вслед за [14] аппроксимируем $\Delta(\omega)$ кусочно-постоянной функцией, т.е. положим, что

$$\Delta(\omega) = \begin{cases} \Delta(0), & \omega < \Omega_0, \\ \Delta(\infty), & \omega > \Omega_0. \end{cases} \quad (9)$$

Далее, как и в (2), при низких температурах порядка нескольких кельвинов, при которых наблюдается сверхпроводимость в легированном бором алмазе, можно не учитывать тепловые фононы, т.е. положить $f_B(\Omega) = 0$. Однако, в отличие от (2), в (1) нельзя считать, что $f_F(\omega') = 0$, а $f_F(-\omega') = 1$, т.к. тогда интеграл по ω' логарифмически разойдется при $\omega' = 0$. Поэтому интегрирование по ω' надо разбить на два интервала: от 0 до величины порядка T и от T до $+\infty$. На первом интервале нужно использовать точные выражения для $f_F(\omega')$ и $f_F(-\omega')$, а на втором — уже положить $f_F(\omega') = 0$ и $f_F(-\omega') = 1$. Легко видеть, что тогда интеграл по подынтервалу $T < \omega' < \Omega_0$ второго интервала будет в $\ln(\Omega_0/T)$ раз больше интеграла по первому интервалу.

Поскольку при параметрах легированного бором сверхпроводящего алмаза этот логарифм много больше 1, то интегралом по первому интервалу можно пренебречь по сравнению с интегралом по подынтервалу $T < \omega' < \Omega_0$ второго интервала.

Тогда из (1) будем иметь следующую систему алгебраических линейных однородных уравнений для $\Delta(0)$ и $\Delta(\infty)$:

$$\Delta(0) \approx \frac{mw_0^2 p_F}{\pi^3 \pi Z(0)} \times \sum_j \left[\Delta(0) \frac{\ln(\Omega_{0j}/T)}{\Gamma_j^2 + \Omega_{0j}^2} \frac{\pi}{2} + \Delta(\infty) \frac{1}{\Omega_{0j}^2} \operatorname{arctg} \frac{\Omega_{0j}}{\Gamma_j} \right] - \frac{\tilde{\mu}}{Z(0)} \left[\Delta(0) \ln\left(\frac{\Omega_0}{T}\right) + \Delta(\infty) \ln\left(\frac{\omega_c}{\Omega_0}\right) \right], \quad (10a)$$

$$\Delta(\infty) \approx -\frac{\tilde{\mu}}{Z(\infty)} \left[\Delta(0) \ln\left(\frac{\Omega_0}{T}\right) + \Delta(\infty) \ln\left(\frac{\omega_c}{\Omega_0}\right) \right]. \quad (10b)$$

Вычисления показывают, что при неучете затухания фононов, когда для $\alpha^2(\Omega)F(\Omega)$ используется формула (3a) вместо (6a), для $\Delta(0)$ и $\Delta(\infty)$ получится система, аналогичная (10a)–(10b), но с $\Gamma_j = 0$.

Условие существования ненулевого решения системы (10a)–(10b) приводит к формуле для критической температуры

$$T_c = \Omega_0 \exp \left(-Z(0) / \left\{ \frac{3mw_0^2 p_F}{\pi^3 \rho} \times \left[\frac{\pi}{2(\Gamma^2 + \Omega_0^2)} - \frac{\mu \operatorname{arctg}(\Omega_0/\Gamma)}{\Omega_0^2} \right] - \mu \right\} \right), \quad (11)$$

где введена безразмерная переменная $\mu = \tilde{\mu} / [1 + \tilde{\mu} \ln(\omega_c/\Omega_0)]$ и считается, что все Γ_j и Ω_{0j} одинаковы и равны Γ и Ω_0 соответственно. При $\Gamma = 0$ эта формула переходит в формулу для критической температуры, выведенную в [14].

Поскольку расчет из экспериментальных данных константы w_0 взаимодействия дырок с оптическими фононами в алмазе в [20] является приближенным, то ее реальная величина может несколько отличаться от найденного в этой работе и приведенного выше значения $7 \cdot 10^9 / 3 \text{ eV/cm}$. Так, при концентрации дырок $N/V = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$, начиная с которой в легированном бором алмазе наблюдается сверхпроводимость, формула (11) приводит к $T_c \approx 1 \text{ K}$ [13,23], т.е. согласуется с экспериментальными данными, при w_0 примерно на 70 % большей, чем это значение³.

³ В недавней работе [25] исследуется сверхпроводимость в алмазе, одновременно легированном бором и, с меньшей в несколько раз концентрацией, азотом (донором). В результате утверждается, что за счет экситонного механизма куперовского спаривания дырок критические температуры в несколько кельвин достигаются при концентрации атомов бора в несколько раз меньшей, чем значение 10^{21} cm^{-3} , необходимое для достижения таких критических температур при легировании только бором. В нашей работе формула (11) для критической температуры получена для случая только одной легирующей примеси — бора — и фононного механизма куперовского спаривания дырок. Поэтому для моделирования результатов [25] она не применима.

При применении формулы (11) для вычисления критической температуры для более высоких, чем 10^{21} cm^{-3} , концентраций дырок (а следовательно, и атомов бора), конкретно 5 и 10 % от концентрации атомов углерода в алмазной кристаллической решетке (что отвечает $8.5 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ и $1.7 \cdot 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ в абсолютных единицах соответственно) результаты оказываются в несколько раз выше, чем вычисленные в работе [24] значения. По-видимому, это связано с возможной зависимостью константы дырочно-фононного взаимодействия w_0 от концентрации дырок: в данной работе эта зависимость не учитывается, согласно же вычислениям в [24] эта константа снижается с ростом концентрации дырок. Поэтому при применении формулы (11) для более высоких, чем 10^{21} cm^{-3} , концентраций дырок эту зависимость необходимо принимать во внимание.

Если же положить в (11) $\Gamma = 0$, т.е. не учитывать затухание оптических фононов, то при той же w_0 (т.е. примерно на 70 % большей, чем $7 \cdot 10^9 / 3 \text{ eV/cm}$) формула (11) даст $T_c \approx 9 \text{ K}$, т.е. величину, в 9 раз большую, чем экспериментально измеренное значение. Таким образом, учет затухания оптических фононов является существенным при вычислении критической температуры перехода легированного бором алмаза в сверхпроводящее состояние. Вследствие резкой (экспоненциальной) зависимости от декремента этого затухания, этот учет приводит к ее значительному снижению по сравнению с результатами вычислений в модели без затухания.

4. Учет рассеяния дырок на примесях

Учет кулоновского рассеяния дырок на ионизованных примесных атомах (которыми в данном случае являются атомы бора) выполнен в [16] и приводит к появлению в правой части (1) дополнительного слагаемого

$$-\frac{i\pi}{Z(\omega)} \frac{N}{V} \int \frac{d^2 p'}{(2\pi)^3 v_F} \left| \frac{V_C(\mathbf{p}, \mathbf{p}')}{\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{p}')} \right|^2 \frac{\Delta(\omega)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}}, \quad (12)$$

а в правой части (2) — дополнительного слагаемого

$$i\pi \frac{N}{V} \int \frac{d^2 p'}{(2\pi)^3 v_F} \left| \frac{V_C(\mathbf{p}, \mathbf{p}')}{\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{p}')} \right|^2, \quad (13)$$

где N/V — концентрация ионизованных (отрицательно заряженных) примесных атомов (в силу зарядовой нейтральности равная концентрации дырок), двумерное интегрирование по квазимпульсам выполняется по ферми-поверхности и полагается, что на этой же поверхности лежит вектор $\mathbf{p}$, т.е. $p = p_F$. В приближении Томаса–Ферми для $\varepsilon(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ (автоматически статическом, т.к. при рассеянии дырок на тяжелых примесных ионах можно пренебречь обменом энергией между ними) это интегрирование дает

$$-\frac{i2\pi e^4 m N}{p_F Z(\omega) V} \left(\frac{1}{p_s^2} - \frac{1}{4p_F^2 + p_s^2} \right) \frac{\Delta(\omega)}{\sqrt{\omega^2 - \Delta^2(\omega)}}, \quad (12a)$$

$$\frac{i2\pi e^4 m N}{p_F} \left(\frac{1}{p_s^2} - \frac{1}{4p_F^2 + p_s^2} \right) \quad (13a)$$

для (12) и (13) соответственно.

Для нахождения критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние, как и в предыдущем разделе, считаем, что $\Delta(\omega) \rightarrow 0$, и поэтому пренебрегаем в (1) и (2) $\Delta^2(\omega')$ под знаками корней в знаменателях. В результате, как и выше, (2) из уравнения превращается в формулу для вычисления $Z(\omega)$, которая теперь даст

$$Z(\omega) \approx \begin{cases} 1 + \frac{m\omega_0^2 p_F}{2\pi^2 \rho} \sum_j \frac{1}{\Gamma_j^2 + \Omega_{0j}^2} - i \frac{1}{\omega\tau}, & \omega < \Omega_0 \approx \frac{1}{\tau} \\ 1 \equiv Z(\infty), & \omega > \Omega_0 \sim \frac{1}{\tau}, \end{cases} \quad (7a)$$

где введена частота столкновений дырок с ионизованными атомами примеси

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi e^4 m N}{p_F} \left(\frac{1}{p_s^2} - \frac{1}{4p_F^2 + p_s^2} \right).$$

Для характерной для сверхпроводящего легированного бором алмаза концентрации отрицательно заряженных примесных атомов бора $N/V = 10^{21} \text{ см}^{-3}$ она составляет около 10^{14} с^{-1} , что по порядку величины согласуется с оценкой, получаемой из характерной подвижности дырок $3.6 \text{ см}^2/(\text{В} \cdot \text{с})$ в сильнолегированном бором алмазе [26].

Перейдем теперь к решению (1). Рассмотрим случай $\omega < \Omega_{0j} \approx 1/\tau$. Разложим коэффициенты этого уравнения для $\Delta(\omega)$ по степеням ω и ограничимся в этих разложениях нулевыми и линейными членами. Для этого учтем, что при таких ω имеет место неравенство $|\text{Im} Z(\omega)| \gg |\text{Re} Z(\omega)|$ (поскольку при таких ω согласно (7a) $\text{Re} Z(\omega) \approx 1.1$ и совпадает с $Z(\omega)$ (7) при отсутствии рассеяния и $|\text{Im} Z(\omega)| \approx 1/(\omega\tau) > 1$) и поэтому с точностью до $\text{Re} Z(\omega)$ включительно

$$\frac{1}{Z(\omega)} \approx \frac{1}{i \text{Im} Z(\omega)} + \frac{\text{Re} Z(\omega)}{[\text{Im} Z(\omega)]^2}.$$

Используем это в добавочном члене в (1), возникающем за счет рассеяния на примесях, а в остальных членах в (1) положим $1/Z(\omega) \approx 1/[i \text{Im} Z(\omega)]$. Тогда для $\Delta(\omega)$ получится точно такое же уравнение, как и в отсутствие рассеяния на примесях.

При $\omega > \Omega_{0j} \approx 1/\tau$ имеем $Z(\omega) = 1 \equiv Z(\infty)$ и в уравнении (1) для $\Delta(\omega)$ можно пренебречь по сравнению с его левой частью дополнительным слагаемым (12a), возникающим в его правой части из-за рассеяния на примесях, т.е. (1) тоже будет точно таким же, как и в отсутствие рассеяния на примесях.

Таким образом, прямой учет рассеяния дырок на примесях в сверхпроводящем легированном бором алмазе фактически не меняет уравнения (1) для $\Delta(\omega)$, а следовательно, и получающейся из него критической

температуры. Этот вывод находится в согласии с общим утверждением теории сверхпроводящих сплавов [17] (иногда называемым теоремой Андерсона), согласно которому наличие примесей практически не влияет на критическую температуру, пока их концентрация (в данном случае равная 10^{21} см^{-3}) значительно ниже концентрации основного вещества (в данном случае равной концентрации $1.75 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$ атомов углерода в алмазе)⁴. Однако, согласно разделу 3, на критическую температуру перехода легированного бором алмаза в сверхпроводящее состояние существенно влияет декремент затухания оптических фононов. Последний же обусловлен их взаимодействием с дырками, т.е. зависит от характеристик последних, в частности от их рассеяния на примесях. Поэтому рассеяние дырок на примесях опосредовано, через декремент затухания оптических фононов, влияет на критическую температуру. Таким образом, для легированного бором алмаза теорема Андерсона, строго говоря, неверна.

5. Заключение

Таким образом, показано, что для критической температуры перехода высоколегированного бором алмаза в сверхпроводящее состояние нельзя использовать обычную формулу, применяемую для сверхпроводящих металлов. Это связано с учетом в ней характерного для высоколегированного алмаза сильного затухания оптических фононов, играющих основную роль в механизме куперовского спаривания дырок. В данной работе выведена новая формула для критической температуры перехода высоколегированного бором алмаза в сверхпроводящее состояние, в которой учтено затухание оптических фононов. Показано, что она согласуется с существующими экспериментальными данными.

Следует отметить, что при выводе этой формулы были сделаны те же приближения и допущения, что и при выводе аналогичной формулы без учета этого затухания. В обычных сверхпроводниках с относительно слабым электрон-фононным взаимодействием декремент затухания фононов много меньше их частот. Поэтому его учет приводит к поправке к критической температуре, которая лежит в пределах точности используемых приближений и допущений и, следовательно, несущественна. В противоположность этому в легированном

⁴ Таким образом, в рассматриваемой модели рассеяние дырок на примесных отрицательно заряженных атомах бора фактически привело лишь к появлению в перенормировочном параметре $Z(\omega)$ (7a) добавочного слагаемого $-i \frac{1}{\omega\tau}$ при $\omega < \Omega_0 \approx \frac{1}{\tau}$. Однако согласно работам [27,28] при конечной величине произведения $k_F l$ (где $k_F \equiv p_F/\hbar$ — квазиволновое число Ферми дырки, $l = \tau p_F/m$ — длина ее свободного пробега) учет рассеяния дырок на примесях не сводится лишь только к такой добавке. Тем не менее, в нашей работе $k_F \approx 4.4 \cdot 10^7 \text{ см}^{-1}$ и при оцененном $\tau \approx 10 \text{ fs}$ величина $l = \tau p_F/m \approx 6.8 \text{ nm}$, так что произведение $k_F l \approx 30 \gg 1$ и можно считать, что рассеяние дырок на примесных отрицательно заряженных атомах бора примерно правильно учитывается появлением только данного добавочного слагаемого в $Z(\omega)$.

бором сверхпроводящем алмазе с сильным взаимодействием дырок с оптическими фононами, приводящим к декременту затухания последних порядка их частот, учет затухания этих фононов при прочих равных параметрах понижает критическую температуру в 9 раз, т.е. почти на порядок. Такая поправка является значимой и не может считаться лежащей в пределах точности используемых приближений и допущений. Поэтому для исследования зависимости критической температуры перехода высоколегированного бором алмаза в сверхпроводящее состояние от степени легирования и других параметров с целью поиска путей ее повышения предпочтительно пользоваться выведенной в данной работе формулой с учетом затухания оптических фононов. Такое повышение является особенно важным для практических применений сверхпроводимости этого уникального материала.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках государственного задания Федерального исследовательского центра Институт прикладной физики им. А.В. Гапонова-Грехова Российской академии наук, проект FFUF-2024-0032.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura. *Rev. Mod. Phys.* **70**, 4, 1039 (1998).
- [2] P.P. Edwards, M.J. Sienko. *Phys. Rev. B* **17**, 6, 2575 (1978).
- [3] D. Pines. *Phys. Rev.* **109**, 2, 280 (1958).
- [4] M.L. Cohen. *Phys. Rev.* **134**, 2A, A511 (1964).
- [5] M.L. Cohen. *Rev. Mod. Phys.* **37**, 1, 240 (1964).
- [6] M.L. Cohen. In: *Superconductivity* / Ed. by R.D. Parks. Marcel Dekker, New York (1964). Vol. 1, p. 615.
- [7] R.A. Hein, J.W. Gibson, R. Mazelsky, R.C. Miller, J.K. Hulm. *Phys. Rev. Lett.* **12**, 12, 320 (1964).
- [8] R.A. Hein, J.W. Gibson, R.S. Allgaier. In: *Low Temperature Physics* / Ed. by J.G. Daunt, D.O. Edwards, F.J. Milford, M. Yuakub. Plenum Press, New York (1965). LT9, p. 604.
- [9] J.F. Schooley, W.R. Hosler, M.L. Cohen. *Phys. Rev. Lett.* **12**, 17, 474 (1964).
- [10] А.А. Абрикосов. Основы теории металлов. Наука, М. (1987). 520 с.
- [11] E.A. Ekimov, V.A. Sidorov, E.D. Bauer, N.N. Mel'nik, N.J. Curro, J.D. Thompson, S.M. Stishov. *Nature* **428**, 542 (2004).
- [12] A. Marshall Stoneham. In: *Physics and Applications of CVD Diamond* / Ed. by S. Koizumi, C. Nebel, and M. Nesladek, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim (2008). P. 1.
- [13] E. Bustarret. In: *Physics and Applications of CVD Diamond* / Ed. by S. Koizumi, C. Nebel, and M. Nesladek, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim (2008). P. 329.
- [14] W.L. McMillan. *Phys. Rev.* **167**, 2, 331 (1968).
- [15] R.J. Zhang, S.T. Lee, Y.W. Lam. *Diamond and Related Materials* **5**, 1288 (1996).
- [16] А.А. Абрикосов, Л.П. Горьков. *ЖЭТФ* **35**, 1558 (1958).
- [17] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Теоретическая физика. Том. IX. Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния. Физматлит, М. (2002). 498 с.
- [18] D.J. Scalapino. In: *Superconductivity*, v. 1 / Ed. by R.D. Parks. Marcel Dekker, INC, New York (1969). P. 449.
- [19] O. Madelung. *Semiconductors: Data Handbook*. Springer, Berlin (2004).
- [20] J. Pernot, P.N. Volpe, F. Omnès, P. Muret, V. Mortet, K. Haenen, T. Teraji. *Phys. Rev. B* **81**, 20, 205203 (2010).
- [21] E. Bourgeois, E. Bustarret, P. Achatz, F. Omnès, X. Blasé. *Phys. Rev. B* **74**, 9, 094509 (2006).
- [22] D. Kumar, M. Chandran, M.S. Ramachandra Rao. *Appl. Phys. Lett.* **110**, 19, 191602 (2017).
- [23] G. Zhang, S. Turner, E.A. Ekimov, J. Vanacken, M. Timmermans, T. Samuely, V.A. Sidorov, S.M. Stishov, Y. Lu, B. Deloof, B. Goderis, G. Van Tendeloo, J. Van de Vondel, V.V. Moshchalkov. *Adv. Mater.* **26**, 2034 (2014).
- [24] F.J.R. Costa, J.S. de Almeida. *J. Appl. Phys.* **130**, 043903 (2021).
- [25] S. Lin, X. Yu, M.i Yang, H. Zhong, J. Guo, X. Chen. *Advanced Functional Materials* **34**, 2410876 (2024).
- [26] G. Chicot, A. Fiori, P.N. Volpe T.N. Tran Thi, J.C. Gerbedoen, J. Bousquet, M.P. Alegre, J.C. Piñero, D. Araújo, F. Jomard, A. Soltani, J.C. De Jaeger, J. Morse, J. Härtwig, N. Tranchant, C. Mer-Calfati, J.C. Arnault, J. Delahaye, T. Grenet, D. Eon, F. Omnès, J. Pernot, E. Bustarret. *J. Appl. Phys.* **116**, 8, 083702 (2014).
- [27] I.S. Burmistrov, I.V. Gornyi, A.D. Mirlin. *Ann. Phys.* **435**, 168499 (2021).
- [28] E.S. Andriyakhina, P.A. Nosov, S. Raghu, I.S. Burmistrov. *J. Low Temp. Phys.* **217**, 187 (2024).
- [29] C. Chen, X. Zhong, L. Shen, C. Lu. *Phys. Rev. B* **113**, 13, 134512 (2026).

Редактор Ю.Э.Кутаев