

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**Ta₃Ge BİLEŞİĞİNİN YAPISAL, ELEKTRONİK VE
SÜPERİLETKENLİK ÖZELLİKLERİNİN
İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Murat TEPEÇİNAR

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Tez Danışmanı : Doç. Dr. Sadık BAĞCI

Kasım 2021

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**Ta₃Ge BİLEŞİĞİNİN YAPISAL, ELEKTRONİK VE
SÜPERİLETKENLİK ÖZELLİKLERİNİN
İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Murat TEPEÇİNAR

Enstitü Anabilim Dalı : FİZİK

Bu tez .../.../2021 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oybirliği / oyçokluğu ile kabul edilmiştir.

Jüri Başkanı

Üye

Üye

BEYAN

Tez içindeki tüm verilerin akademik kurallar çerçevesinde tarafımdan elde edildiğini, görsel ve yazılı tüm bilgi ve sonuçların akademik ve etik kurallara uygun şekilde sunulduğunu, kullanılan verilerde herhangi bir tahrifat yapılmadığını, başkalarının eserlerinden yararlanılması durumunda bilimsel normlara uygun olarak atıfta bulunulduğunu, tezde yer alan verilerin bu üniversite veya başka bir üniversitede herhangi bir tez çalışmasında kullanılmadığını beyan ederim.

Murat TEPEÇİNAR

TEŐEKKÜR

Yüksek lisans eğitimim süresince bilgi ve kıymetli tecrübelerinden faydalandığım, tezimizin planlanmasından yazılmasına kadar tüm süreçlerinde yardımlarını esirgemeyen, değerli danışman hocam Doç. Dr. Sadık BAĞCI'ya teşekkür ederim. Yazılı ve sözlü olarak bilgi ve tecrübelerini paylaşmaktan kaçınmayan başta Prof. Dr. Murat TÖTÖNCÖ hocamıza ve Doç. Dr. Hüseyin Yasin UZUNOK hocamız ile Doç. Dr. Ertuğrul KARACA hocamıza da teşekkür ederim. Yüksek lisans eğitimi yapılması konusunda yönlendirmede bulunan ve motive eden Öğr. Gör. Yakup YİĞİT ve eğitim sürecinde bilgi ve deneyimlerinden istifade ettiğim tüm hocalarıma ve arkadaşlarıma da teşekkür ederim.

Ayrıca çalışmalarım boyunca göstermiş oldukları sabır ve maddi, manevi desteklerinden dolayı eşime, çocuklarıma ve işyeri çalışma arkadaşlarıma da teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

TEŞEKKÜR.....	i
İÇİNDEKİLER	ii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ.....	iv
ŞEKİLLER LİSTESİ	vi
TABLolar LİSTESİ	vii
ÖZET.....	viii
SUMMARY	ix
BÖLÜM 1.	
GİRİŞ	1
BÖLÜM 2.	
TEORİ.....	3
2.1. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi	3
2.1.1. Giriş.....	3
2.1.2. Temel değişken olarak yoğunluk	3
2.1.3. Enerji dönüşüm prensibi	4
2.1.4. Elektronik enerji fonksiyonu.....	5
2.1.5. Kendi kendini doğrulayabilen Kohn-Sham eşitlikleri	6
2.1.6. Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı.....	9
2.1.7. Yapay (Pseudo) potansiyel metodu	11
2.1.8. Kohn-Sham eşitliklerinin momentum uzayına taşınması	14
2.2. Katıların Örgü Dinamiği	16
2.2.1. Giriş.....	16
2.2.2. Örgü dinamiği ve kuvvet sabitleri.....	16
2.2.3. Örgü dinamiğinde lineer bağımlılık.....	19

2.3. Durum Yoğunluğu Hesaplama Metodu (root-sampling metod)	21
2.4. Süperiletkenlik Hesaplamaları Teorisi	22

BÖLÜM 3.

HESAPLAMA VE SONUÇLAR.....	26
3.1. Hesaplama Kriterleri.....	26
3.2. Ta ₃ Ge Malzemesinin Yapısal ve Elektronik Özellikleri.....	27
3.3. Ta ₃ Ge Malzemesinin Elastik ve Mekanik Özellikleri.....	32
3.4. Ta ₃ Ge Malzemesinin Fonon Özellikleri ve Elektron-Fonon Etkileşimi	37

BÖLÜM 4.

TARTIŞMA VE ÖNERİLER.....	43
KAYNAKÇA	45
ÖZGEÇMİŞ	51

SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

\hat{H}_{KS}	: Kohn-Sham hamiltoniyeni
\vec{a}_i (i=Bir tamsayı)	: Örgü öteleme vektörleri
\vec{b}_i (i= Bir tamsayı)	: Ters örgü için yer değiştirme vektörleri
$\Phi_{\alpha\beta}$: Atomik kuvvet sabiti
E_{dt}	: Değiş-tokuş potansiyeli
\vec{G}	: Ters örgü vektörü
N_o	: Kristaldeki birim hücre sayısı
\vec{R}	: Örgü vektörü
V_A	: Gerçek potansiyel
V_{KS}	: Kohn-Sham potansiyeli
V_R	: İtici potansiyel
V_{den}	: Deneme potansiyeli
V_{dt}	: Değiş-tokuş potansiyeli
$V_{dış}$: Bir elektronik sistemde elektronlardan kaynaklanan dış potansiyel
V_{ee}	: Elektron-elektron etkileşme potansiyeli
V_{ps}	: Pseudo potansiyel
\vec{q}	: Dalga vektörü
u_i	: i. atomun yer değiştirmesi
ω	: Frekans
A	: Örgü sabiti
B	: Hacim modülü
B'	: Hacim modülünün birinci türevi
ϵ	: Bir sistemi oluşturan parçalardan birinin enerjisi
E	: Toplam enerji

F	: Kuvvet
LA	: Boyuna akustik dalga
LO	: Boyuna optik dalga
$n(r)$: Herhangi bir durum için elektronik yük yoğunluğu
Φ	: Kristalin potansiyel enerjisi
TA	: Enine akustik dalga
TO	: Enine optik dalga
A	: Atomik kuvvet sabiti
$\rho(\omega)$: Durum yoğunluğu
$\rho(r)$: Taban durumu elektronik yük yoğunluğu
ϕ	: Pseudo dalga fonksiyonu
Ψ	: Gerçek dalga fonksiyonu
Ω	: Kristal hacmi
κ	: Parametrelere bağlı bir kuvvet

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 2.1. Doğrulama işlemi için kullanılan algoritma	8
Şekil 2.2. Çekirdek, öz (kor) elektronları ve değerlik elektronlarından oluşmuş bir atom olup, taralı bölge öz bölgesini göstermektedir.	12
Şekil 2.3. Şekil yapay potansiyel ve yapay dalga fonksiyonunu göstermektedir rc öz bölgesinin yarıçapıdır. V_R gerçek potansiyel ve gerçek dalga fonksiyonu da görülmektedir. Ve şekilde açık olarak görülmektedir ki öz bölgesi dışında iki potansiyel ve dalga fonksiyonu birbirinin aynıdır.	14
Şekil 3.1. (a) Ta_3Ge bileşiğinin kristal yapısı (b) Ters örgü uzayında basit kübik örgü	27
Şekil 3.2. Ta_3Ge bileşiğine ait enerji-örgü sabiti grafiği.....	28
Şekil 3.3. Ta_3Ge kristalinin hesaplanmış elektronik bant yapısı grafiği.....	30
Şekil 3.4. Ta_3Ge kristali için hesaplanan elektronik durum yoğunluğu grafiği	32
Şekil 3.5. Ta_3Ge bileşiğinin hesaplanmış (a) fonon dağılımı ve (b) fonon durum yoğunluğu grafikleri yer almaktadır.....	40
Şekil 3.6. Ta_3Ge bileşiği için hesaplanan Eliashberg spektral fonksiyonunun (kırmızı çizgi) ve elektron-fonon etkileşim parametresinin (mavi çizgi) frekansa bağlı değişim grafiği.....	41

TABLULAR LİSTESİ

Tablo 3.1. Ta ₃ Ge kristali için hesaplanan yapısal parametreler.....	29
Tablo 3.2. Ta ₃ Ge için hesaplanan elastik sabitler. Tüm sonuçlar GPa birimindedir.	33
Tablo 3.3. Ta ₃ Ge için hesaplanan hacim modülü (B_H)(GPa), kayma modülü (G_H) (GPa), Young modülü (E)(GPa), B_H/G_H oranı, Poisson oranı (σ) değerleri. Tabloda ayrıca V ₃ Ge ve Nb ₃ Ge için elde edilen sonuçlar da sunulmuştur	34
Tablo 3.4. Ta ₃ Ge için hesaplanan enine (V_T), boyuna (V_L) ve ortalama elastik dalga hızları (V_M) ile Debye sıcaklığı (θ_D) değerleri.....	36
Tablo 3.5. Kübik Ta ₃ Ge için Γ noktasında hesaplanan optik fonon modlarının frekansları (ν),.....	37
Tablo 3.6. Kübik Ta ₃ Ge için farklı Coulomb itme potansiyeli (μ^*) değerlerine karşılık gelen süperiletkenlik geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri ile elektron-fonon etkileşim parametresi (λ) ve logaritmik ortalama fonon frekansı (ω_{ln}).....	42

ÖZET

Anahtar Kelimeler: Ta₃Ge, A15 fazı, Yapısal özellikler, Elektronik özellikler, Dinamik özellikler, Süperiletkenlik özellikleri

Bu tez kapsamında A15 tipi Ta₃Ge'nin yapısal, elastik, elektronik, termodinamik, dinamik ve süperiletkenlik özellikleri yoğunluk fonksiyon teorisini temel alan Quantum Espresso programı kullanılarak incelenmiştir. Ta₃Ge bileşiğinin elastik ve elektronik özellikleri ile ilgili hesaplamalar, bu malzemenin esnek ve metalik karaktere sahip olduğunu göstermiştir. Elektronik özelliklerden ayrıca Ta₃Ge'nin Ta 5d orbitallerinin Fermi seviyesine çok yakın bölgelerde elektronik durum yoğunluğuna en önemli katkıyı yaptığı görülmüştür. Dinamik özellikler incelendiğinde, Ta ve Ge atomları arasında büyük bir kütle farkı olmasına rağmen Ta₃Ge için hesaplanan fonon dispersiyon grafiğinde bir boşluğa rastlanmamıştır. Ayrıca en yüksek enerjili optik fonon modunun oluşumunda da Ta atomlarının titreşimlerinin baskın bir rol oynaması oldukça ilginçtir. Ta₃Ge için ortalama elektron fonon etkileşme parametresi 1.083 olarak hesaplanmıştır ve bu değer kullanılarak süperiletkenlik geçiş sıcaklığı (T_c) 8.392 K olarak tahmin edilmiştir. Bu T_c değeri, daha önce ince film olarak hazırlanan Ta₃Ge için ölçülen 8 K sonucuyla çok iyi bir uyum içindedir.

INVESTIGATION OF THE STRUCTURAL, ELECTRONIC AND SUPERCONDUCTIVITY PROPERTIES OF Ta₃Ge COMPOUND

SUMMARY

Keywords: Ta₃Ge, A15 phase, Structural properties, Electronic properties, Dynamical properties, Superconducting properties

The structural, elastic, electronic, dynamical and superconducting properties of A15 type Ta₃Ge have been investigated by using the density functional theory as implemented in Quantum-Espresso simulation package in this thesis. The calculations related to elastic and electronic properties of Ta₃Ge predict that this compound is ductile in nature and shows metallic features. The electronic properties also show that the Ta 5d states of Ta₃Ge mainly contribute to the electronic density of states very close to the Fermi level. According to the dynamical properties, there is no gap in the calculated phonon dispersion graph for Ta₃Ge, although there is a large mass difference between Ta and Ge atoms. It is also interesting that the vibrations of Ta atoms play a dominant role in the formation of the highest optical phonon mode. The average electron-phonon coupling parameter is calculated as 1.083 and using this value, the superconducting transition temperature (T_c) is estimated to be 8.392 K for Ta₃Ge. This T_c value is in very good agreement with the experimental value of 8 K which is previously measured for Ta₃Ge prepared as thin film.

BÖLÜM 1. GİRİŞ

Metallerin bir araya gelmesiyle oluşan A15 fazı (genellikle β -W veya Cr_3Si olarak da bilinir), A bir geçiş metalini ve B de uygun herhangi bir elementi temsil etmek üzere A_3B kimyasal formülüyle ifade edilen bileşiklerin denge durumunda buldukları yapıdır. Çoğu A15 bileşiği 20 K gibi yüksek sıcaklıklarda ve onlarca tesla büyüklüğündeki yüksek manyetik alanlarda süperiletkenlik özelliği gösterebilirler. Yüksek sıcaklık ve yüksek manyetik alan süper iletkenliği, yoğun madde fiziğinde birçok önemli teknolojik uygulamaya sahip olup, merak uyandıran bir araştırma alanıdır. Örneğin, Vanadyum-galyum (V_3Ga) süperiletken özelliğe sahip bir bileşiktir ve çoğunlukla süperiletken elektromıknatıslarda yüksek manyetik alan oluşturmaya yarayan bobinlerin yapımında kullanılır. Süperiletken mıknatıslar, manyetik rezonans görüntüleme cihazlarında, parçacık hızlandırıcılarında ve çarpıştırıcılarında kullanılabilen bir teknolojidir. Üstelik süperiletken mıknatıslar, dirençli elektromıknatıslara göre bazı üstünlüklere sahiptir: Manyetik alan genellikle sabittir, deneysel ölçümlerde gürültü daha az olur ve mıknatıslar daha küçüktür. Örneğin, parçacık hızlandırıcılarında ve çarpıştırıcılarında sıvı azot sıcaklığında çalışan süper mıknatıslar kullanılmaktadır. Bu mıknatıslar normal mıknatıslara göre çok daha verimlidir. Süper mıknatısların bir başka kullanım alanı da “MR” manyetik rezonans görüntüleme cihazlarıdır. Bu cihazlar daha güvenli olan radyo frekansı kullanırlar. Süperiletkenler ısı yaymadığından daha düşük hacme yerleştirilmiş hızlı çalışan devreler yapılabilecek ve bu da bilgisayarların boyutlarının küçülüp hızlarının artmasını sağlayacaktır. Süperiletkenlerin bir özelliği olan Meissner olayı gereği süperiletken motorlar, manyetik alan çizgilerini iterek motor akım kaybını % 50 civarında azaltır. Süperiletken maddelerde görülen bu manyetik itme kuvveti gelişmiş ülkelerde halk arasında uçan trenler diye adlandırılan ve manyetik yastık üzerinde kayan hızlı trenlerin yapılması fikrini doğurmuştur. Bu sebeplerden dolayı süperiletkenlik özelliği gösteren A15 kristalleri literatürde geniş bir şekilde çalışılmış

ve halen çalışılmaya devam etmektedir. Son altmış yıldır A15 tipi bileşikler yüksek süperiletkenlik sıcaklıkları nedeni ile çok sayıda teorik ve deneysel çalışmaya konu olmuşlardır [1-12]. Özellikle Nb tabanlı A15 tipi süperiletken materyaller (Nb_3Ge (23,6 K), Nb_3Sn (18,9 K), Nb_3Al (18,8 K) yüksek süperiletkenlik geçiş sıcaklıkları nedeniyle teorik ya da deneysel çok sayıda çalışmanın konusu olmuşlardır [13-22]. Nb tabanlı A15 tipi üzerine artan ilgi üzerine diğer geçiş metalleri ile oluşturulan A15 tipi materyaller ile ilgili çalışmalar da popülerliğini artırmaya başlamışlardır [23-26].

Buna rağmen tüm geçiş metali tabanlı A15 yapıların süperiletkenlik özellikleri henüz incelenmemiştir ve halen literatürde önemli bir boşluk bulunmaktadır. Ta_3Ge ile ilgili literatürde çok az sayıda çalışma bulunmaktadır ve bunlarda da Ta_3Ge 'nin kübik kristal yapısı incelenmemiştir [27-30]. Bu çalışmada bu eksikliğin giderilmesine katkı sunmak adına kübik A15 kristal yapısına sahip Ta_3Ge materyalinin süperiletkenlik özellikleri üzerine ayrıntılı bir çalışma sunulmuştur. Ta_3Ge 'nin süperiletkenlik özelliklerinin incelenmesi için ilk olarak yapısal özellikleri belirlenmiştir. Daha sonra yapısal özelliklerinden faydalanarak elastik ve mekanik özellikleri incelenerek malzemenin sertliği hakkında bilgi sahibi olunmuştur. Süperiletkenlik özelliklerin belirlenmesinde bilindiği gibi BCS teoriye göre elektron-fonon etkileşimi önemli bir rol oynamaktadır. Bu nedenle Ta_3Ge materyalinin süperiletkenlik özelliklerinin belirlenebilmesi için elektronik ve dinamik özellikleri de tez kapsamında verilmiştir. Son olarak tüm bu veriler ışığında kübik A15 tipi Ta_3Ge 'nin Eliashberg spectral fonksiyonu, elektron-fonon etkileşim parametresi, logaritmik ortalama fonon frekansı ve süperiletkenlik geçiş sıcaklığı gibi süperiletkenlik özellikleri belirlenmiştir.

BÖLÜM 2. TEORİ

2.1. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi

2.1.1. Giriş

Ab initio teorilerinin temeli yoğunluk fonksiyon teorisidir. Ab initio teorileri kristallerin yapısal, elektronik ve dinamik özelliklerinin araştırılmasında kullanılan en popüler metottur. Bu metodun dünya çapında çok sayıda kullanıcı tarafından tercih edilmesinin nedeni hiçbir deneysel veriye ihtiyaç olmadan hesaplamaların yapılabilmesidir. Yoğunluk fonksiyon teorisi ile ilgili ilk çalışmalar 1960'lı yıllarda Hohenberg-Kohn [31] ve Kohn-Sham [32] tarafından yapılmıştır. Bu bölümde temel değişken olarak elektron yoğunluğu ve bundan yararlanılarak oluşturulan elektronik enerji fonksiyonu ele alınmıştır.

2.1.2. Temel değişken olarak yoğunluk

Taban durumu elektronik yük yoğunluğu $n(r)$ 'nin bir fonksiyonu olmak üzere, dejenere olmamış temel hal dalga fonksiyonları N elektronlu bir sistem için

$$\Psi(r_1, r_2, r_3, \dots, r_N) \rightarrow \Psi[n(r)] \quad (2.1)$$

biçiminde yazılabilir [33]. Şu anda genel yoğunluk $n(r)$ 'yi bilmiyoruz. Bundan dolayı da genel dalga fonksiyonu $\Psi[n(r)]$ 'de belirlenemez. Bu durumu anlaşılabilir yapmak için Hohenberg ve Kohn tarafından aşağıdaki biçimde yeni bir $F[n]$ fonksiyonu belirlenmiştir [31, 34]:

$$F[n] = T + V_{e-e} \quad (2.2)$$

Burada T çok cisimli sistem için kinetik enerji, V_{e-e} de yine çok cisimli sistemde elektron-elektron etkileşme enerjisidir. $F[n]$ fonksiyonu tanımlanırken özel bir sistem ve dış

potansiyele sahip olmayan genel bir fonksiyon olarak tanımlanmıştır. Dış potansiyelin toplam enerjisini tanımlamak gerekirse Hohenberg ve Kohn dış potansiyel toplam enerjisi şöyle belirlemiştir [31]:

$$E_{el}[V_{dış}, n] = \int dr V_{dış}(r) \rho(r) + F[n] \quad (2.3)$$

2.1.3. Enerji dönüşüm prensibi

2.3 denklem eşitliğinde var olan $E_{el}[V_{dış}, n]$ fonksiyonu, yük yoğunluğu n 'ye bağlı bir dönüşüm ilkesine uyar. Başka bir şekilde ifade etmek gerekirse $E_{el}[V_{dış}, n]$ fonksiyonunun en az değeri yani temel hal enerjisi $n(r) = \rho(r)$ bu eşitliği sadece bir tek yoğunluk için sağlanmaktadır [34, 35]. Bunun anlamı diğer hiçbir $n(r)$ ifadesi bu eşitliği sağlamaz.

Bu teoremi ispatlamak çok kolaydır. Dejenere olmamış bir Ψ dalga fonksiyonunu ele alalım. 2.4 denklem eşitliğinden de görüleceği üzere Ψ dalga fonksiyonuna göre Ψ' dalga fonksiyonu daha düşük enerjili ve taban durumu dalga fonksiyonudur. Ψ ve Ψ' arasındaki birbirine karşılık gelen enerji,

$$E_{el}[\Psi'] \equiv (\Psi', H\Psi') \quad (2.4)$$

denklemleri ile yazılabilir [36]. Ψ ve Ψ' dalga fonksiyonlarının enerjilerini karşılaştırmak gerekirse Ψ' dalga fonksiyonlarının enerjileri belirlenirken $n(r)$ değerleri, Ψ dalga fonksiyonu enerjisi için de temel hal yoğunluğuna karşılık gelen $\rho(r)$ değerleri dikkate alınır ve karşılaştırma 2.5 denklemindeki eşitlik ile gerçekleştirilir.

$$\mathcal{E}_{el}[\Psi'] = \int dr V_{dış}(r) n(r) + F[n] > \mathcal{E}_{el}[\Psi] = \int dr V_{dış}(r) \rho(r) + F[\rho] \quad (2.5)$$

Bu ifadeden 2.6 denklemini açık olarak elde edilebilir.

$$E_{el}[V_{dış}, n] > E_{el}[V_{dış}, \rho] \quad (2.6)$$

Burada $E_{el}[V_{dış}, \rho]$ bir sistemin taban durumu enerjisi olup $V_{dış}(r)$ sahip olunan potansiyel, N sistemde bulunan elektron sayısına karşılık gelir [34,35].

2.1.4. Elektronik enerji fonksiyonu

Yoğunluk fonksiyon teorisinde bilmemiz gereken iki önemli noktanın açıklanmasının ardından $F[\rho]$ fonksiyonunu açık bir şekilde yazılabiliriz:

$$F[\rho] = \frac{e^2}{2} \iint dr dr' \cdot \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} + G[\rho] \quad (2.7)$$

2.7 denkleminde temel hal enerji dalga fonksiyonu 2.8 denklemini elde etmemizi sağlar.

$$E_{el}[V_{dış}, \rho] = \int dr V_{dış}(r)\rho(r) + \frac{e^2}{2} \iint dr dr' \cdot \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} + G[\rho] \quad (2.8)$$

2.8 denkleminde bulunan $G[\rho]$, Kohm ve Sham tarafından 1965 yılında 2.9 denklemindeki gibi iki kısımda tanımlanmış ve $F[\rho]$ tipinde bir fonksiyon olduğu anlaşılmıştır [32].

$$G[\rho] \equiv T_0[\rho] + E_{dt-e}[\rho] \quad (2.9)$$

Bu denklemindeki $E_{dt-e}[\rho]$ henüz tam olarak bilinmemekle birlikte, bağımsız elektron modeli için karşılıklı etkileşimi ve klasik olmayan çok cisim değiş-tokuşu ifade eder. $T_0[\rho]$, birbirleriyle etkileşmeyen $\rho(r)$ yoğunluklu elektronlardan oluşan bir sistemin kinetik enerjisidir. Denklem 2.8 ve denklem 2.9 birlikte yazılmak istenirse $V_{dış}$ potansiyel enerjisi aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$E_{el}[V_{dış}, \rho] = T_0[\rho] + \int dr V_{dış}(r) \rho(r) + \frac{e^2}{2} \iint dr dr' \frac{\rho(r) \rho(r')}{|r-r'|} + E_{dt-e}[\rho] \quad (2.10)$$

2.10 denklemindeki enerji değerlerini bulmak adına en önemli üç sorun vardır [34]:

1. $E_{dt-e}[\rho]$ fonksiyonu için bazı yaklaşımlarda bulunmak gerekir. Çünkü çok az sistem haricinde hiçbir bilgiye sahip değiliz.
2. $\rho(r)$ temel hal elektronik yük yoğunluğunu tanımlamak için yeni bir metot bulunması lazımdır. Ancak E_{el} değeri minimum olacak şekilde seçilmelidir.
3. $\rho(r)$ yoğunluğu ile $T_0[\rho]$ değerlerini tam olarak belirleyemeyiz. Çünkü dalga fonksiyonu ile ilgili bilgimiz yoktur.

2.1.5. Kendi kendini doğrulayabilen Kohn-Sham eşitlikleri

Yukarıdaki 2. ve 3. sorunun çözümü için 1965 yılında Kohn ve Sham'ın önerileriyle aşağıda gibi bir metot uygulanmıştır [32].

Bu durumda denklem 2.10 da verilen enerji ifadesini en az yapan değerini $n(r)$ elektronik yük yoğunluğu olduğunu kabul edeceğiz. Denklem aşağıdaki şekli alır.

$$E_{el}[V_{dış}, n] = T_0[n] + \int dr V_{dış}(r) n(r) + \frac{e^2}{2} \iint dr dr' \frac{n(r) n(r')}{|r-r'|} + E_{dt-e}[n]$$

(2.11)

V_{den} tek parçacık deneme potansiyeli olarak tanımlayalım. Tek parçacık deneme potansiyeli $n(r)$ elektron yoğunluğuna bağlı olarak ifade edilirse

$$n(r) = \sum_{j=1}^N |\phi_j(r)|^2 \quad (2.12)$$

$\phi_j(r)$ birbirleriyle etkileşmediğini kabul ettiğimiz elektron dalga fonksiyonu olup, toplam dolu durumları ($j=1,2,3,\dots,N$) şeklinde belirlenir. $\phi_j(r)$ Schrödinger eşitliğinde yazılırsa 2.13 denklemi elde edilir.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{den}(r) \right] \phi_j(r) \equiv \varepsilon_j \phi_j(r) \quad (2.13)$$

Eşitliğin bir çözümü de,

$$\sum_j \varepsilon_j = \sum_j \left[\phi_j, \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{den}(r) \right) \phi_j \right] = T_0[n] + \int dr V_{den}(r) n(r) \quad (2.14)$$

biçimde bulunur. Öyleyse 2.11 denklemi de aşağıdaki gibi elde edilir:

$$E_{el}[n] = \sum_j \varepsilon_j = \int dr V_{den}(r) n(r) + \int dr V_{dış}(r) n(r) + \frac{e^2}{2} \iint dr dr' \frac{n(r)n(r')}{|r-r'|} + E_{dt-e}[n] \quad (2.15)$$

2.15 denklemini $n(r)$ 'ye bağlı bir döngü yaparsak, $E_{el}[n]$ 'yi en az yapacak olan $V_{den}(r)$ 'yi aşağıdaki gibi yazarız. Ancak 2.15 denklemini $n(r)$ 'yi V_{den} 'in bir fonksiyonu kabul eder, V_{den} 'e bağımlı olarak; veya V_{den} 'i, $n(r)$ 'nin bir fonksiyonu kabul ederek, $n(r)$ 'ye bağlı olarak en basit hale getirebiliriz. Biz ikinci durumu tercih ettik.

$$V_{den}(r) = V_{dış}(r) + e^2 \int dr' \frac{n(r')}{|r-r'|} + \frac{\partial E_{dt-e}[n]}{\partial n(r)} + \text{sabit} = V_{KS}(r) + \text{sabit} \quad (2.16)$$

Bu denklemde bulunan V_{KS} etkin potansiyeli, Kohm-Sham potansiyeli olarak ta bilinir ve şöyle yazılabilir [32]:

$$V_{KS}(r) = V_{dış}(r) + e^2 \int dr' \frac{n(r')}{|r-r'|} + \frac{\partial E_{dt-e}[n]}{\partial n(r)} = V_{dış}(r) + V_H(r) + V_{dt-e}(r) \quad (2.17)$$

Denklemdaki V_H Coulomb potansiyeli olarak adlandırılır. Etkin bir tek elektron değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim potansiyelini bulmak istersek:

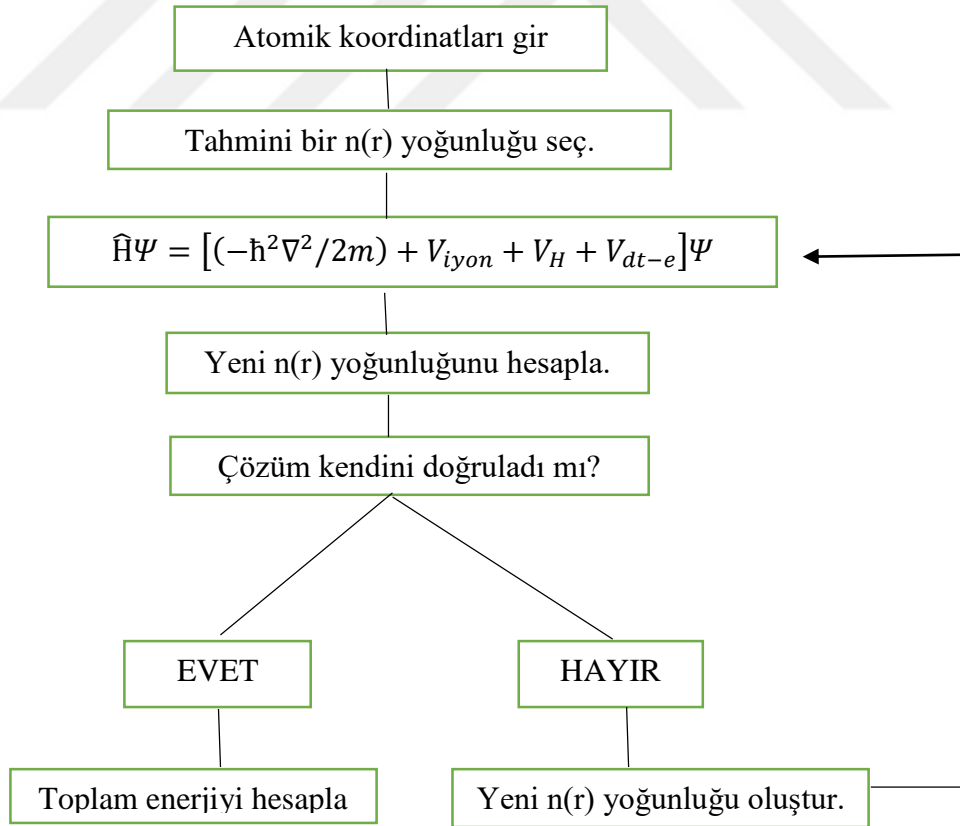
$$V_{dt-e}(r) = \frac{\partial E_{dt-e}[n]}{\partial n(r)} \quad (2.18)$$

formülünü kullanabiliriz. Denklem 2.12 ve denklem 2.13 temel hal durumlarını temsil edecek şekilde yazmak istersek sırasıyla aşağıdaki şekildeki gibi bulunur.

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{KS}(r) \right] \phi_j(r) = \epsilon_j \phi_j(r) \quad (2.19)$$

$$\rho(r) = \sum_{j=1}^N |\phi_j(r)|^2 \quad (2.20)$$

2.19 denklemini kendini doğrularak çözülebilen bir denklemdir. Denklem 2.19'daki köşeli parantezin içindeki ifade Kohm-Sham Hamiltonyeni (\hat{H}_{KS}) olarak adlandırılır. Kendini doğrularak çözülebilen eşitliklere Kohm-Sham eşitlikleri denir[32]. Doğrulama işlemini de eğer bir algoritma diyagramı ile ifade etmek gerekirse Şekil 2.1.'deki gibi belirtebiliriz [37,38].



Şekil 2.1. Doğrulama işlemi için kullanılan algoritma

2.1.6. Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı

2.1.4 bölümünde bahsettiğimiz sorunlardan birinci sorun, $E_{dt-e}[\rho]$ belirlenmesi yerel yoğunluk yaklaşımı (local density approximation)(LDA) ile çözülebilmektedir. Bu yaklaşımda, sistem homojen bir elektron gazı olarak düşünülürse elektronik yük yoğunluğu bu siteme göre belirlenir [34,35,39]. Bu sistem içinde $\rho(r)$ çok az değişir ve aşağıdaki yaklaşımlarda bulunmak uygun hale gelir:

$$E_{dt-e}[\rho] \cong \int dr \rho(r) \mathcal{E}_{dt-e}[\rho(r)] \cong \int dr \rho(r) \{ \mathcal{E}_{dt-e}[\rho(r)] + \mathcal{E}_e[\rho(r)] \} \quad (2.21)$$

2.21 denkleminde bulunan $\mathcal{E}_e[\rho(r)]$ karşılıklı etkileşmeleri, $\mathcal{E}_{dt}[\rho(r)]$ değiş-tokuş etkileşimlerini gösterirken $\mathcal{E}_{dt-e}[\rho(r)]$ elektron gazındaki her bir elektronun değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşim enerjisidir.

Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımının (generalized gradient approximation) (GGA) oluşmasına imkân sağlayan yerel yoğunluk yaklaşımıdır. Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı yerel yoğunluk yaklaşımına ilave olarak elektronik yük yoğunluğunun (ρ) yanı sıra bu yoğunluğun $|\nabla\rho|$ olarak ifade edilerek gradyanın da hesaplanmasını temel alır. Bu şekilde denklem 2.21 şeklinde yazılabilir [40].

$$E_{dt-e}^{GGA} + [\rho] \cong \int dr \rho(r) \mathcal{E}_{dt-e}^{GGA}[\rho(r), |\nabla\rho(r)|] \cong \int dr \rho(r) \mathcal{E}_{dt}[\rho(r)] F_{dt-e}[\rho(r), |\nabla\rho(r)|] \quad (2.22)$$

Yukarıdaki ifadede bulunan F_{dt-e} elektronik yük yoğunluğuyla birlikte gradyanını da içeren düzeltme fonksiyonudur. $\mathcal{E}_{dt}[\rho(r)]$ ise homojen bir sistemde sadece değiş-tokuş etkileşmelerini içeren enerjidir. $F_{dt}(\rho, \nabla\rho)$ ifadesini değiş-tokuş etkileşmelerini içeren düzeltme fonksiyonu biçiminde ifade edebiliriz. Bu ifadelerden yararlanarak düzeltme fonksiyonunu iki kısma ayırma imkânına sahip oluruz. Bu iki kısım değiş-tokuş etkileşimleri ve karşılıklı etkileşimler olarak kabul edilir. Eğer m . dereceden gradyanını tanımlarsak fonksiyonun anlaşılması için fayda sağlayacaktır.

$$S_m = \frac{|\nabla^m \rho|}{(2k_F)^m \rho} = \frac{|\nabla^m \rho|}{2^m (3\pi^2)^{m/3} (\rho)^{(1+\frac{m}{3})}} \quad (2.23)$$

Yukarıdaki denklemde k_F tanımlamak istersek ve $k_F = 3(2\pi/3)^{1/3}r_s^{-1}$ bu şekilde tanımlanırsa yoğunluğun m. dereceden değişimini ifade eden s_m , elektronların ortalama uzaklığı r_s ile orantılı olacaktır. s_m ifadesinin m=1 için birinci dereceden gradyanını aşağıdaki gibi tanımlarız.

$$s_1 \equiv s = \frac{|\nabla\rho|}{(2k_F)\rho} = \frac{|\nabla r_s|}{2\left(\frac{2\pi}{3}\right)^{1/3}r_s} \quad (2.24)$$

F_x 'in terimleri de aşağıdaki gibi analitik olarak hesaplanabilir [40,41].

$$F_x = 1 + \frac{10}{81}s_1^2 + \frac{146}{2025}s_2^2 + \dots \quad (2.25)$$

Bu yöntem ile geliştirilmiş gradyan yaklaşımının farklı şekilleri için düzeltme fonksiyonu sayısını daha da artırabiliriz [41-45]. Bizim çalışmamızda PBE kullanılmış olup, PBE Perdew, Burke ve Enzerhof birlikte geliştirdikleri bir formdur [44]. F_x 'i ifade etmek gerekirse,

$$F_x(s) = 1 + \kappa - \frac{\kappa}{1 + \left(\frac{\mu s^2}{\kappa}\right)} \quad (2.26)$$

şeklinde yazılabilir. Geliştirilmiş gradyan yaklaşımında değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşme enerjisini yazmak istersek

$$E_{dt-e}[\rho(r)] = \sum \int dr \left[\varepsilon_{dt-e}^{GGA} + \rho(r) \frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial \rho(r)} + \rho(r) \frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial \nabla \rho(r)} \nabla \right] \rho(r) \quad (2.27)$$

biçiminde yazarız. Köşeli parantez içindeki ifade oluşabilecek potansiyele karşılık gelir. Tanımlamak istersek aşağıdaki şekildeki gibi olur.

$$V_{dt-e}(r) = \left[\varepsilon_{dt-e}^{GGA} + \rho(r) \frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial \rho(r)} - \nabla \left(\rho(r) \frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial \nabla \rho(r)} \right) \right] \quad (2.28)$$

Yukarıdaki denklem çok sık kullanılmakta ancak bazı eksikleri vardır [46]. Bu eksiklikleri tamamlamak isteyen White ve Bird'in 1994 yılında yeni tanımladıkları enerji ve potansiyel ifadelerinde bu eksikleri telafi edebilecek ve doğru sonuçlara ulaştırabilecek bir denklem tasarlamışlardır [47]. White ve Bird yaklaşımına göre değiş-tokuş ve karşılıklı etkileşme enerjisini şu şekilde yazabiliriz.

$$E_{dt-e}[\rho(r)] = \sum \int dr \left[\varepsilon_{dt-e}^{GGA} + \rho(r) \frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial \rho(r)} \right] \rho(r) + \sum \iint dr dr' \rho(r) \left[\frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial \nabla \rho(r)} \right] \frac{\nabla \rho(r')}{\rho(r)} \rho(r) \quad (2.29)$$

Bu denklemde $\nabla \rho(r_m)$ 'yi tanımlamak gerekirse $\nabla \rho(r_m) = \sum_{m'} C_{m-m'} \rho(r_{m'})$ şeklinde tanımlanabilir. Potansiyel ifadesini yazmak istersek yeni tanımladığımız $\nabla \rho(r_m)$ ifadesinden faydalanabiliriz.

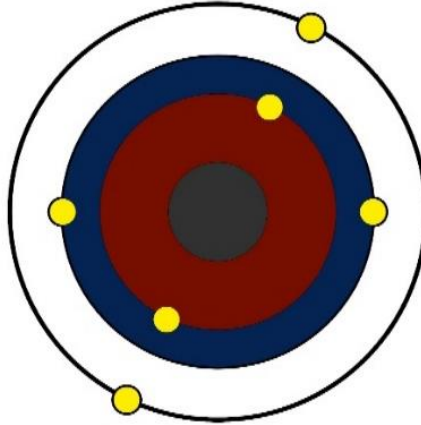
$$V_{dt-e}(r_m) = \left[\varepsilon_{dt-e}^{GGA} + \rho \frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial \rho} \right] + \sum_{m'} \left[\rho \frac{\partial \varepsilon_{dt-e}^{GGA}}{\partial |\nabla \rho|} \frac{\nabla \rho}{|\nabla \rho|} \right] C_{m'-m} \quad (2.30)$$

Bu denklem hesaplamalarda doğru sonuçlara ulaşmamızı sağlar [46].

2.1.7. Yapay (Pseudo) potansiyel metodu

Yapay potansiyel metodu için 1966'da Harrison tarafından yazılmış bir kitapta [48] ve 1970'de Cohen ve Heine'nin birlikte ele aldıkları [49] bir araştırma makalesinde temel unsurlar belirlenmiştir. Bu belirlenen metodu açıklamak gerekirse bazı önemli noktalara değinmek gerekir.

Bir atom modeli belirleyelim ve atom; çekirdek, kor elektronları ve değerlik elektronları olarak bölümlerden oluşan bir sistem olsun [34]. Kor elektronları ifadesiyle dolu orbitalleri kast ettiğimiz anlaşılmalıdır. Bu durumu örneklendirmek istersek bir karbon atomunun elektron dizilimine bakalım ($1s^2 2s^2 2p^2$). Bu karbon elementinde kor elektronları ifade etmek gerekirse $1s^2 2s^2$ dir. Çünkü tam doludur. İyon koru ifadesini açıklarsak çekirdek ve kor elektronlarının oluşturduğu sisteme verilen bir isimdir.



Şekil 2.2. Çekirdek, öz (kor) elektronları ve değerlik elektronlarından oluşmuş bir atom olup, taralı bölge öz bölgesini göstermektedir.

Şekil 2.2.'deki şekle uygun bir yapı ele alalım. Bu yapıdaki değerlik elektronlarının dalga fonksiyonları ile kor elektronlarının dalga fonksiyonlarını ortogonal olarak kabul edelim. Böyle bir sistemin elektronik özelliklerini belirlemek için Schrödinger denkleminde faydalanmamız gerekir. Çünkü yapay potansiyel yaklaşımına göre bir kristalin elektronik özelliklerinin belirlenmesinde sadece değerlik elektronları etkili olup, iyon korlarının herhangi bir etkisi olmadığı düşünülür. Bu da bize yeterince netlik sağlamaz. Bundan dolayı da Schrödinger denkleminde faydalanmak gerekir.

$$H\Psi = \varepsilon\Psi \quad (2.31)$$

Denklem 2.31'in daha anlaşılır olması için bazı sembolleri açıklamak denklemi daha rahat yorumlamamızı sağlar. Öyleyse H Hamiltoniyeni, T kinetik enerjisi ile kor elektronlarından kaynaklanan V_A etkin potansiyelin toplamıdır. Ψ dalga fonksiyonu ise, değerlik elektronlarından gelen ve etkisi az olan ϕ fonksiyonu ile iyon korlarından kaynaklanan ϕ_c fonksiyonların toplamı şeklindedir. Öyleyse

$$\Psi = \phi + \sum_c b_c \phi_c \quad (2.32)$$

Şeklinde yazılabilir [34]. 2.32 denkleminde bulunan b_c katsayıları normalizasyon sabitleridir. Çünkü ilgili ifadelerin ortogonal olmalarını sağlamaktadır.

$$\langle \Psi | \hat{\rho}_c \rangle = 0 \quad (2.33)$$

Buradan denklem (2.22), (2.23) ve (2.24) birlikte ele alınırsa, aşağıdaki denkleme ulaşılabilir.

$$H\hat{\rho} + \sum_c (\mathcal{E} - E_c) \hat{\rho}_c \langle \hat{\rho}_c | \hat{\rho} \rangle = \mathcal{E}\hat{\rho} \quad (2.34)$$

Yukarıdaki denklemde bulunan E_c terimi, kor bölgesindeki özdeğerlerden birini ifade eder. Bu ifadeden de 2.35 ve 2.36 denklemleri elde edilebilir [34]:

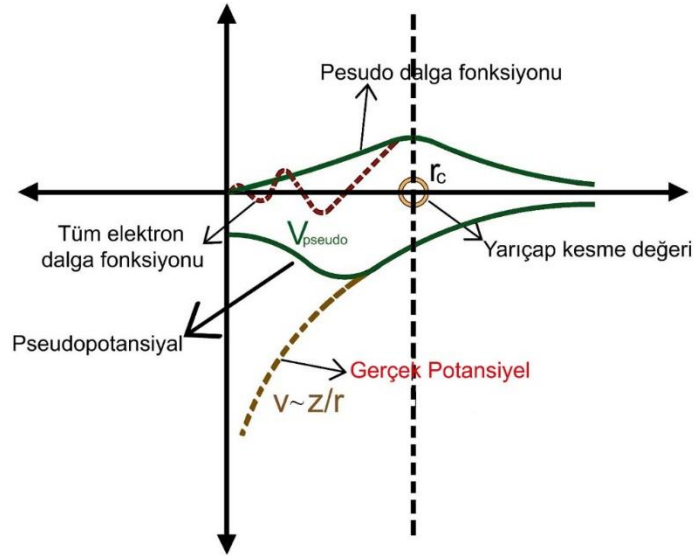
$$(H + V_R)\hat{\rho} = \mathcal{E}\hat{\rho} \quad (2.35)$$

$$(T + V_{ps})\hat{\rho} = \mathcal{E}\hat{\rho} \quad (2.36)$$

Bu denklemlerin içerisinde bulunan V_R ve V_{ps} ifadelerini açıklamak gerekmektedir. V_R ifadesi, itici potansiyel operatörüdür. V_{ps} ifadesinin ise, 1959 yılında Phillips ve Kleinman'ın birlikte yaptıkları araştırmalar [50] ve bu ikisinden ayrı olarak Antoncik tarafından yapılan çalışmalar [51] (2.28) deki gibi bir potansiyel operatörü olduğunu göstermiştir [34]:

$$V_{ps} = V_A + V_R \quad (2.37)$$

İtici bir potansiyel olan V_R ile etkin bir potansiyel olan V_A 'nın etkileşmesinden oluşabilecek potansiyel zayıf etkili bir potansiyel olacaktır. Öyleyse V_{ps} potansiyeline yapay potansiyel, $\hat{\rho}$ 'ye yapay dalga fonksiyonu diyebiliriz. Bu yapay potansiyel ile yapay dalga fonksiyonunu Şekil 2.3.'te grafikte görüldüğü gibi oluşmaktadır. Şekle dikkat edilirse gerçek potansiyel sonsuzda yakınsarken, yapay potansiyel daha çabuk yakınsamakta olduğu görülmektedir. Dalga hesaplamalarında özellikle bu durumdan dolayı yapay potansiyel kullanılmaktadır.



Şekil 2.3. Şekil yapay potansiyel ve yapay dalga fonksiyonunu göstermektedir. r_c öz bölgesinin yarıçapıdır. Gerçek potansiyel ve gerçek dalga fonksiyonu da görülmektedir. Ve şekilde açık olarak görülmektedir ki öz bölgesi dışında iki potansiyel ve dalga fonksiyonu birbirinin aynıdır.

2.1.8. Kohn-Sham eşitliklerinin momentum uzayına taşınması

Momentum uzayına göre değerlendirmek gerekirse $(T+V_{ps})\phi = \epsilon\phi$ ifadesi aşağıdaki şekle dönüşebilir.

$$(T + V_{ps})\phi_{q,n}(r) = \epsilon_{q,n}\phi_{q,n}(r) \quad (2.38)$$

Denklem 2.38 deki bilmemiz gereken sembollerin anlamına bakılırsa, r , elektronların pozisyonunu; q , 1. Brillouin bölgesindeki elektronların dalga vektörlerini ve n ise enerji bantlarını temsil etmektedir. Kristal bir katı için Fourier serisine açmak istersek buradaki yapay potansiyeli yerel bir potansiyel olarak düşünmeliyiz. Bunu da başarabilmemiz için $V_{ps} = V_{ps}(r)$ biçiminde dönüştürmemiz gerekir [39,52]:

$$V_{ps}(r) = \sum_G V(\vec{G})e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \quad (2.39)$$

Bu denklemde \vec{G} 'ye ters örgü vektörünü, $V(\vec{G})$ 'de V_{ps} 'nin Fourier katsayılarını göstermektedir. Kohn-Sham eşitliklerini çözmek için standart bir yaklaşımda bulunabiliriz. Yani eşitlikleri çözerken elektron dalga fonksiyonlarını bulmak için eşitliği

zahiri potansiyellerle çözümleriz. Bu zahiri potansiyelleri yakınsamak istersek, düzlem dalgaların miktarını düzenli bir şekilde artırmamız gerekir. Eğer \vec{q} dalga vektörü olmak üzere N bandındaki bir elektron için düzlem dalga fonksiyonunu yazmak istersek aşağıdaki gibi buluruz:

$$\emptyset_{q,n}(r) = \frac{1}{N_0\Omega} \sum_G A_{q,n}(\vec{q} + \vec{G}) e^{i(\vec{q} + \vec{G})\cdot\vec{r}} \quad (2.40)$$

2.40 denkleminde $N_0\Omega$ ifadesi kristalin hacmini göstermektedir. Dikkat edilmesi gereken bir hususta seçmemiz gereken düzlem dalga sayısının kinetik enerjiden daha fazla ancak durdurma enerjisinin oluşmasını sağlayacak şekilde seçilmesidir. Öyleyse $\frac{\hbar^2}{2m}(\vec{q} + \vec{G})^2 \leq E_{kesme} \cdot A_{q,n}(\vec{q} + \vec{G})$ eşitliğindeki $\emptyset_{q,n}$ 'nin Fourier uzayındaki gösterimi olduğunu bilmeliyiz. Buradan eşitliklerimiz 2.39 ile 2.40 denklemleri 2.38 denkleminde yazılırsa,

$$\sum_c A_{q,n}(\vec{q} + \vec{G}) \left\{ \frac{\hbar^2(\vec{q} + \vec{G})^2}{2m} + \sum_{G'} V(\vec{G}') e^{i(\vec{G}')\cdot\vec{r}} - \varepsilon_{q,n} \right\} e^{i(\vec{q} + \vec{G})\cdot\vec{r}} = 0 \quad (2.41)$$

denklemini elde ederiz. Bu denklem, biraz değişimle birlikte aşağıdaki gibi de yazılabilir.

$$\sum_c A_q(\vec{q} + \vec{G}) \left[\left\{ \frac{\hbar^2(\vec{q} + \vec{G})^2}{2m} - \varepsilon_{q,n} \right\} \delta_{G,G'} + V_{ps}(\vec{G}' - \vec{G}) \right] = 0 \quad (2.42)$$

Bu ifadenin neleri karşıladığını bilmek ve bulmak için aşağıdaki determinant eşitliğinin çözülmesi gerekir.

$$\left| \left\{ \frac{\hbar^2(\vec{q} + \vec{G})^2}{2m} - \varepsilon_{q,n} \right\} \delta_{G,G'} + V_{ps}(\vec{G}' - \vec{G}) \right| = 0 \quad (2.43)$$

2.2. Katıların Örgü Dinamiği

2.2.1. Giriş

Örgü titreşimlerinin hesaplanması, ısı sığası, elastik sabitlerinin bulunması ve katıların ısı ile genişmesi gibi fiziksel özelliklerin anlaşılmasında çok önem taşımaktadır. Yıllarca bu özelliklerin anlaşılabilmesi için örgü titreşimleri üzerine çalışmalar yapılmıştır. Daha sonra süperiletkenliğin tespitinden sonra ise bu özelliklerle ilgili çalışmalar daha da hızlanmıştır. Ab-initio metodu bulunana kadar katıların örgü dinamiğinin hesaplanmasında kuantum mekaniksel metotlar kullanılırdı. Bu arada ab-initio metodunun deneysel bir parametre istememesi bu metodun daha fazla tercih edilmesini sağlamıştır.

Bu metot bulunmadan önce yıllarca kristallerle ilgi deneysel veri bulunmadığından titreşim özellikleri tam olarak incelenememiştir. Bu deneysel veriye olan ihtiyacın giderilmesiyle birlikte yani ab-initio metodunun uygulanmasıyla kristallerin titreşimleriyle ilgili bilgiler hızla tespit edilmeye başlamıştır. Şimdi bu metot aracılığıyla katıların örgü dinamiğini inceleyeceğiz.

2.2.2. Örgü dinamiği ve kuvvet sabitleri

Bir örgünün özelliklerinin belirlenmesinde öncelikle $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ örgü geçiş vektörlerinin belirlenmesi gerekir. Ardından;

$$\vec{x}_l = \ell_1 \vec{a}_1 + \ell_2 \vec{a}_2 + \ell_3 \vec{a}_3 \quad (2.44)$$

denkleminde de gösterildiği gibi genel bir geçiş vektörü belirlenebilir [19]. Bu denklemde ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3 katsayıları tamsayı değerleri olabilir. Yine birim hücrede bir atom var ise atomik pozisyonu da denklemden öğrenebiliriz. Ama birim hücre p atomlu ise her atomun konumunu belirlemek için $\vec{x}(b)$ vektörleri belirlenmelidir. Eğer birim hücrede farklı cins atomların varlığı söz konusu ise b farklı cins atomların sayısını göstermek üzere bu atomlar 1, 2, ...p şeklinde ifade edilebilir. Bu durumda

ℓ . birim hücredeki b . atomun pozisyonu aşağıdaki 2.45 denklem eşitliğindeki gibi belirlenir.

$$X(b) = x(\ell) + x(b) \quad (2.36)$$

Kristalin potansiyel enerjilerini belirlemek istediğimizde eğer atomun denge konumundan $\vec{u}(\ell b)$ kadar titreştiğinin kabul edilmesi halinde kristalin potansiyel enerjisi

$$\Phi = \Phi_0 + \sum_{\ell b\alpha} \Phi_{\alpha}(\ell b) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\ell b\alpha \\ \ell' b'\beta}} \Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell' b') u_{\alpha}(\ell b) u_{\beta}(\ell' b') \quad (2.46)$$

olarak bulunabilir [34]. Bu denklemde Φ_0 sembolü kristalin potansiyel enerjisini ifade eder. Ancak bu potansiyel enerji atomların hepsinin denge durumundaki halini göstermektedir. Φ_0 örgü dinamiği için değersizdir. Denge durumunda kuvvetin sıfır olduğunu söyler. Potansiyelin konuma göre türevi kuvvete eşittir. Bunun da sıfır olması değersizliğini göstermiş olur. $\Phi_{\alpha}(\ell b)$ ve $\Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell' b')$ sembollerinin eşitlikleri yazılmak istenirse aşağıdaki şekilde elde edilir [34].

$$\Phi_{\alpha}(\ell b) = \frac{\partial \Phi}{\partial u_{\alpha}(\ell b)} I \quad \Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell' b') = \frac{\partial^2 \Phi}{\partial u_{\alpha}(\ell b) \partial u_{\beta}(\ell' b')} I \quad (2.47)$$

Bu ifadeler kristalin denge durumu için geçerlidir. $\Phi_{\alpha}(\ell b)$ ifadesi denge durumunda sıfır olması için kristalin kararlı olması halinde sağlanır. Şimdi kristallerin Hamiltonyenini yazmak için harmononik yaklaşımı kullanırsak,

$$H = \Phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{\ell b\alpha} M_b \dot{u}_{\alpha}^2(\ell b) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\ell b\alpha \\ \ell' b'\beta}} \Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell' b') u_{\alpha}(\ell b) u_{\beta}(\ell' b') \quad (2.48)$$

denklemini elde edilir. Şimdi ℓ . birim hücredeki b . atomun hareket denklemini yazmak istersek

$$M_b \ddot{u}_\alpha(\ell b) = -\frac{\partial \Phi}{\partial u_\alpha(\ell b)} = -\sum_{\ell' b' \beta} \Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell' b') u_\beta(\ell' b') \quad (2.49)$$

olarak buluruz. $\Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell' b')$ ifadesine atomik kuvvet sabiti denir. Atomik kuvvet sabiti için $(\ell' b')$ atomunun β yönünde yer değiştirdiğini kabul etmemiz halinde, (ℓb) atomuna etkiye bulunan α yönündeki etki eden kuvvetin negatif değerlerini buluruz. Geçiş simetrisinden kaynaklanan iki önemli simetri koşulumuzu kuvvet sabiti matrisinin sağladığını biliyoruz [34].

$$\Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell' b') = \Phi_{\alpha\beta}(0b, (\ell' - \ell)b') \quad (2.50)$$

Herhangi bir atomdaki kuvvetin sıfır olmasını istersek, her bir atomun eşit miktarda yer değiştirmesi gerekir [34,52].

$$\left. \begin{aligned} \sum \Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell' b') &= 0 \\ \sum_{\ell' b' \neq \ell b} \Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell' b') + \Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell b) &= 0 \\ \Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell b) &= -\sum_{\ell' b' \neq \ell b} \Phi_{\alpha\beta}(\ell b, \ell' b') \end{aligned} \right\} \quad (2.51)$$

2.51 denkleminde bulunan $\Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell b)$ ifadesinin kuvvet sabiti olduğunu ve adının öz-terim olduğunu belirtmek gerekir. Bir de hareket denklemini yazmak istersek örgü geçiş simetrisinden faydalanarak aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$M_\alpha \ddot{u}_\alpha(\ell b) = -\sum_{\ell' b' \beta} \Phi_{\alpha\beta}(0b, \ell' b') u_\beta(\ell' b') \quad (2.52)$$

Şimdi 2.52 denkleminde de bir çözüm önermek gerekirse aşağıdaki 2.53 denklemini elde edilir.

$$u_\alpha(\ell b, q) = \frac{1}{(M_b)^{1/2}} \sum_q u_\alpha(b, q) e^{i[qx(\ell) - \omega t]} \quad (2.53)$$

Hareket denkleminde $u_\alpha(b, q)$ terimini yazarsak 2.54 denklemini elde edilir. Bu denklemin elde ederken $u_\alpha(b, q)$ teriminin içinde ℓ 'nin olmadığı açıkça görülmektedir. \vec{q} 'nin de dalga vektörü olduğunu hatırlamak gerekir [34].

$$\omega^2 u_\alpha(q, b) = \sum D_{\alpha\beta}(bb', q) u_\beta(q, b') \quad (2.54)$$

Bu denklemde bulunan $D_{\alpha\beta}(bb', q)$ terimine ‘D-tipi dinamik matris denir [34]. Bu matris 3x3 boyutunda bir matris olup düzenlenirse aşağıdaki 2.55 denklemini elde ederiz.

$$D_{\alpha\beta}(bb', q) = \frac{1}{(M_b)^{1/2}} \sum_{l'} \Phi_{\alpha\beta}(0b, l'b') e^{i[q \cdot x(l')]} \quad (2.55)$$

Fonon modlarını elde etmek istersek en kolay yolu elimizdeki determinanti çözmek olacaktır.

$$|D_{\alpha\beta}(bb', q) - \omega^2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{bb'}| = 0 \quad (2.56)$$

Bazen de farklı bir yoldan elde etmek istersek hareket denkleminde mantıklı bir çözüm önerirsek 2.57 denklemini elde edebiliriz [34].

$$u_\alpha(\ell b, q) = \frac{1}{(M_b)^{1/2}} \dot{u}_\alpha(b, q) e^{i[q \cdot x(\ell b) - \omega t]} \quad (2.57)$$

Bu elde edilen denklem 2.52’de yerine yazılırsa aşağıdaki çözüme ulaşılabilir.

$$\omega^2 \dot{u}_\alpha(q, b) = \sum_{b'\beta} C_{\alpha\beta}(bb', q) \dot{u}_\beta(b', q) \quad (2.58)$$

2.58 denkleminde bulunan $C_{\alpha\beta}(bb', q)$ terimine de ‘C-tipi’ dinamik matris denir. Bu C-tipi matrisin eşitliğini yazmak istersek aşağıdaki gibi yazılabilir [34].

$$C_{\alpha\beta}(bb', q) = \frac{1}{(M_b M_{b'})^{1/2}} \sum_{\ell'} \Phi_{\alpha\beta}(0b, \ell'b') e^{-iq \cdot [x(0b) - x(\ell'b')]} \quad (2.59)$$

2.2.3. Örgü dinamiğinde lineer bağımlılık

Kristal yapılar içinde bulunan elektronlara etki edebilecek dış potansiyel parametrelerinin bir fonksiyonunu düşünmek gerekirse ve parametrelere bağlı bir

kuvvet belirlemek istersek $V_\kappa(r)$ dış potansiyel olmak üzere kuvveti aşağıdaki gibi yazabiliriz [35,39,53].

$$\frac{\partial E_\kappa}{\partial \kappa_i} = \int n_\kappa(r) \frac{\partial V_\kappa(r)}{\partial \kappa_i} dr \quad (2.60)$$

Bu denklemde bulunan bazı terimleri kısaca açıklamak gerekirse E_κ terimi elektronların temel hal enerjisini ve n_κ da elektron yoğunluk dağılımını temsil etmektedir. Bir de 2.60 denklemini Taylor serisine açmak gerekirse 2.61 denklemini elde edilir.

$$\frac{\partial E_\kappa}{\partial \kappa_i} = \int \left[n_0(r) \frac{\partial V_\kappa(r)}{\partial \kappa_i} + \sum_j \kappa_j \frac{\partial n_\kappa(r) \partial V_\kappa(r)}{\partial \kappa_j \partial \kappa_i} + n_0(r) \sum_j \kappa_j \frac{\partial^2 V_\kappa(r)}{\partial \kappa_j \partial \kappa_i} \right] dr + Q(\kappa^2) \quad (2.61)$$

Biz enerji ifadesine ulaşmak istersek Taylor serisinde $\kappa=0$ çevresinde türev hesaplaması yaparız. Sonuç olarak denklem 2.62 enerji denklemini elde ederiz.

$$E_\kappa = E_0 + \sum_i \kappa_i \int n_0(r) \frac{\partial V_\kappa(r)}{\partial \kappa_i} dr + \frac{1}{2} \sum_{ij} \kappa_i \kappa_j \int \left(\frac{\partial n_\kappa(r) V_\kappa(r)}{\partial \kappa_i \partial \kappa_j} + n_0(r) \frac{\partial^2 V_\kappa(r)}{\partial \kappa_i \partial \kappa_j} \right) dr \quad (2.62)$$

Denklemde bulunan κ parametrelerinin anlamını söylemek gerekirse, $u_{\alpha i}(R)$ şeklinde tanımlanan iyon yer değiştirmelerini temsil eder. Şöyle bir tespitte bulunursak enerjinin ikinci derecen türevi, kuvvet sabitleri matrisleri ile bağlantılıdır. Bu bağlantıları göstermek istersek denklem 2.63 ve denklem 2.64 ile gösterebiliriz.

$$\frac{\partial^2 E}{\partial u_{\alpha i}(R) \partial u_{\beta j}(R)} = \Phi_{\alpha i, \beta j}(R - R') = \Phi_{\alpha i, \beta j}^{iyon}(R - R') + \Phi_{\alpha i, \beta j}^{elektron}(R - R') \quad (2.63)$$

$$\Phi_{\alpha i, \beta j}^{iyon}(R - R') = \frac{\partial^2 E_{iyon-iyon}}{\partial u_{\alpha i}(R) \partial u_{\beta j}(R)} \quad (2.64)$$

Bu ifadede bulunan $E_{iyon-iyon}$ ifadesini biraz açık yazmak gerekirse 2.65 denklemini yazılabilir.

$$E_{iyon-iyon} = \sum \sum \frac{e^2 Z_i Z_j}{|R + \tau_i - R' - \tau_j|} \quad (2.65)$$

2.65 denklemi incelendiğinde eşitlikte bulunan toplam herhangi bir kristalde yakınsamaz. Yakınsamanın olabilmesi için toplama işlemi ters örgü uzayında uygulanmıştır. Şimdi elektronik kuvvet sabitini yazmak gerekirse aşağıdaki 2.66 denklemi de olduğu gibi yazabiliriz.

$$\Phi_{\alpha i, \beta j}^{elektron}(R - R') = \int \left(\frac{\partial n(r)}{\partial u_{\alpha i}(R)} \frac{\partial V_{iyon}}{\partial u_{\beta j}(R)} + n_0(r) \frac{\partial^2 V_{iyon}(r)}{\partial u_{\alpha i}(R) \partial u_{\beta j}(R)} \right) dr \quad (2.66)$$

Titreşim enerjilerini hesaplamak istersek yapacağımız işlemler sırasıyla şöyle olmalıdır. Denklem 2.64 ile denklem 2.66 de bulunan iyonik ve elektronik kuvvet sabitleri denklem 2.54'e yerleştirilmesi halinde dinamik matrisler bulunur ve son olarak denklem 2.56'nin çözülmesinin ardından titreşim enerjileri hesaplanabilir.

2.3. Durum Yoğunluğu Hesaplama Metodu (root-sampling metod)

Durum yoğunluğunun hesaplanmasında aşağıdaki 2.67 denklemi kullanılmaktadır.

$$\rho(\omega) = \frac{N_0 \Omega}{8\pi^3} \sum_q \delta(\omega - \omega(q)) \quad (2.67)$$

Durum yoğunluğu bize kısaca dalga vektörlerinin hangi frekans değerlerinde ve yoğunluğunun ne olduğunu söyler. Bunu da kristal yapılarda birinci Brillouin bölgesi içinde bulunan \mathbf{q} dalga vektörlerine göre belirleyebiliriz. İşlemlerde başarılı olabilmek için çok fazla miktarda fonon frekansı seçilmesi gerekir.

Durum yoğunluğu 2.67 denklemi ile bulunabilir [34]. Bu denklemde $\rho(\omega)$ durum yoğunluğunu, N_0 kristaldeki birim hücre sayısını ve Ω birim hücre hacmini temsil etmektedirler. Şimdi bu frekanslarda durum yoğunluğunu bulmak için Dirac delta fonksiyonu yerine Kroniker delta fonksiyonu yazılırsa 2.68 denklem eşitliği elde edilir.

$$\rho(\omega) = \text{sabit} \times \sum_q^{IBB} \Theta(\omega - \omega(q)) \quad (2.68)$$

İndirgenmiş Brillouin bölgesini İBB şeklinde kısaca gösterebiliriz. Frekans farkını denklem olarak belirtmek istersek $\Theta = 1$ almak suretiyle $|\omega - \omega(q)| \leq \frac{\Delta\omega}{2}$ eşitliği bulunur. Bu eşitlik diğerleri için sıfır olur. Ve $\Delta\omega \approx 0.005 \text{ THz}$ olarak alınmıştır. Bulunan bu durum yoğunluğunun sonucunu daha kesin olarak belirlemek için İndirgenmiş Brillouin bölgesinde \mathbf{q} dalga vektörü sayısını fazlaca almak gerekir. Bu dalga vektörü sayısının fazlalığı 2000 ve 2000'den fazla olmasını kast ediyoruz. Şimdi her bir frekans değeri için ayrı ayrı işlem yapıldığından çok zaman almaktadır. Bu hesaplamalar sonunda görülmüştür ki frekans farkının sabit olduğu noktalar pikler oluşturur.

2.4. Süperiletkenlik Hesaplamaları Teorisi

Öncelikle fonon durum yoğunluğunu belirleyen 2.69 denklemini yazalım.

$$F(\omega) = \sum_{\vec{q}j} \delta(\omega - \omega_{\vec{q}j}) \quad (2.69)$$

Bu denklemde bulunan bazı sembollerin neyi temsil ettiklerini açıklamak gerekirse, $\vec{q}j$, j. fonon modunu göstermek üzere, $\omega_{\vec{q}j}$ bu fonon modunun titreşim frekansıdır. Elektron-fonon etkileşmelerini matris elemanları ifadesiyle birlikte vermek gerekirse 2.70 denklemini yazabiliriz [53,54].

$$g_{(\vec{k}+\vec{q})m;kn}^{\vec{q}j} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}j}}} \langle \Phi_{(\vec{k}+\vec{q})m} | \vec{e}_{\vec{q}j} \vec{\nabla} V^{SCF}(\vec{q}) | \Phi_{\vec{k}n} \rangle \quad (2.70)$$

Şimdi 2.70 denkleminde bulunan sembollerin anlamına bir bakarsak, M atomik kütleyi temsil ederken, $\vec{\nabla} V^{SCF}(\vec{q})$, kararlı etkin potansiyelin türevini ifade eder. Ancak kararlı etkin potansiyelin türevini belirlerken \vec{q} dalga vektörüne sahip bir fonondan oluşan atomik yer değiştirme kullanılabilir. Fonon çizgi genişliğini bulmak istediğimizde, $\gamma_{\vec{q}j}$ fonon çizgi genişliğini göstermek üzere denklem 2.71 ile elektron-fonon matris elemanları dikkate alınarak hesaplama yapılır.

$$\gamma_{\vec{q}j} = 2\pi\omega_{\vec{q}j} \sum_{\vec{k}nm} \left| g_{(\vec{k}+\vec{q})m;\vec{k}n}^{\vec{q}j} \right|^2 \delta(\varepsilon_{\vec{k}n} - \varepsilon_F) \delta(\varepsilon_{(\vec{k}+\vec{q})m} - \varepsilon_F) \quad (2.71)$$

Fonon çizgi genişliğini fonon bağımlı olarak daha ince ve ayrıntılı hesaplama yapmak istediğimizde, ilk önce elektron-fonon ikilisinin çok hassas olmasını sağlamak için $24 \times 24 \times 24$ \vec{k} ağını ve 0.03 Ryd Gaussian genişliğini seçmek gerekir. Öyleyse elektron-fonon ikilisini 2.72 denklemleri olarak yazabiliriz.

$$\lambda_{\vec{q}j} = \frac{\gamma_{\vec{q}j}}{\pi N(E_F) \omega_{\vec{q}j}^2} \quad (2.72)$$

Bu denklemde temsil anlamında $N(E_F)$ sembolü Fermi seviyesinde elektronik durum yoğunluğunu göstermektedir. Şimdi hesaplama işlemlerinde bir problem karşımıza çıkmaktadır. O problem fonon genişliği ve elektron-fonon parametresi hesaplamalarında fonon spektrumlarında umulmadık öngörülmeyen bir durum oluşmaktadır. Bu durumla ilgili öncelikle elektron-fonon etkileşim parametresini elde edelim. Bunun için de elektron-fonon spektral fonksiyonu ile fonon çizgi genişliğini kullanmak üzere elektron-fonon etkileşim parametresini (2.64) denklemden bulabiliriz [53,54].

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{1}{2\pi N(E_F)} \sum_{\vec{q}j} \frac{\gamma_{\vec{q}j}}{\hbar\omega_{\vec{q}j}} \delta(\omega - \omega_{\vec{q}j}) \quad (2.73)$$

Şimdi ortalama elektron-fonon etkileşim parametresini denklem 2.74 eşitliğinden bulabiliriz [53,54].

$$\lambda = 2 \int \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega \quad (2.74)$$

Elektron-fonon etkileşim parametre kuvvetlerini derecelendirmek istersek zayıf, orta ve yüksek olarak belirleyebiliriz. Bu sınıflandırmada 0-0,5 zayıf, 0,5-1 orta ve 1'den büyük ise yüksek elektron-fonon etkileşimi olarak değerlendirilir. Süperiletkenlik ile elektron-fonon etkileşimi arasında sıkı bir bağ vardır. Bu bağ sayesinde elektron-fonon etkileşim parametresi belirlendikten sonra süperiletkenliğin geçiş sıcaklığını

hesaplamak suretiyle süperiletkenliğe geçiş yapabiliriz. Bu geçiş sıcaklığını denklem 2.75 ile hesaplayabiliriz.

$$T_c = \frac{\omega_{ln}}{1,2} \exp\left(-\frac{1,04(1+\lambda)}{\lambda-\mu^*(1+0,62\lambda)}\right) \quad (2.75)$$

Denklem 2.75 de bulunan ω_{ln} ve μ^* sembollerinin anlamını ve hesaplanmasını belirleyelim. ω_{ln} logaritmik ortalama fonon frekansını, μ^* Coulomb itme sabitini temsil ettiklerinden anlamlarını belirlemiş olduk. Şimdi hesaplama kısmına bakarsak, denklem 2.76 ve denklem 2.77 ile hesaplama yapabiliriz.

$$\omega_{ln} = \exp\left[2\lambda^{-1} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2 F(\omega) \ln\omega\right] \quad (2.76)$$

$$\mu^* = \frac{0,20N(E_F)}{(1+N(E_F))} \quad (2.77)$$

Şimdi ortalama fonon frekansının hesaplanması da aşağıdaki 2.78 denkleminde yapılabilir.

$$\langle \omega \rangle = \frac{\int_0^\infty \omega^n \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega}{\int_0^\infty \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega} \quad (2.78)$$

$\langle \omega^2 \rangle$ değerinin sonucu bizim için oldukça önemlidir. Çünkü bu değer büyük olması bize elektron-fonon etkileşiminin zayıf olduğunu gösterir. Ortalama elektron-fonon etkileşim parametresinin 2.79 denklemiyle sağlanması yapılabilir.

$$\lambda = \frac{\eta}{M\langle \omega^2 \rangle} \quad (2.79)$$

Bu denklemden sonra eğer Debye sıcaklığını hesaplamak istersek ω^2 'nin ortalama değeri bize lazımdır. Bu ortalama değerini de yukarıdaki denklemden bulabiliriz. Şimdi Debye sıcaklığının denklemini yazmak gerekirse aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\theta_D^2 = 2,0 \langle \omega^2 \rangle \quad (2.80)$$

Elektron ikililerinin arasındaki çekici etkileşim potansiyellerini de aşağıdaki denklem aracılığıyla bulabiliriz.

$$N(E_F)V_P = \left(\ln \left(\frac{1,14\theta_D}{T_C} \right) \right)^{-1} \quad (2.81)$$

Cooper çiftlerinin ayrılması için gerekli boşluk enerjisinin 2Δ , T_C 'nin de süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı olduğunu daha önce görmüştük, şimdi bu ikisi arasındaki ilişkiyi veren denklemi yazalım.

$$2\Delta = 3.53k_B T_C \quad (2.82)$$

Yukarıdaki denklemde yeni olarak k_B olarak sembolize edilen Boltzman sabiti ilave edilmiştir. Son olarak elektronik ısı sığası katsayısını veren formülü yazmak gerekirse aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\gamma = \frac{1}{3} \pi^2 k_B^2 N(E_F) (1 + \lambda + \mu^*) \quad (2.83)$$

BÖLÜM 3. HESAPLAMA VE SONUÇLAR

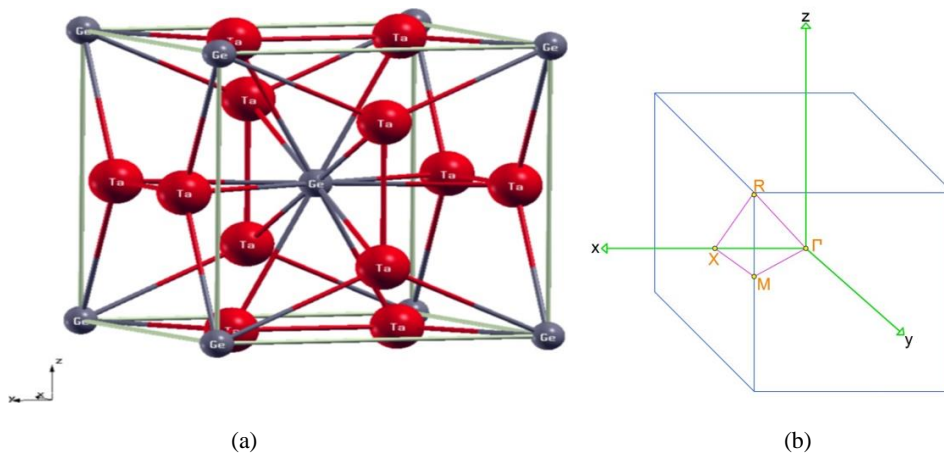
3.1. Hesaplama Kriterleri

Öncelikle tezin tamamında sayısal sonuçları elde etmek için yoğunluk fonksiyonel teorisini esas alan QUANTUM ESPRESSO [55;56] paket programı kullanılmıştır. Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı ile Perdew-Burke-Ernzerhof [43] tarafından oluşturulmuş norm-korunmalı sözde potansiyeller kullanılarak Kohn-Sham denklem çözümleri yapılmıştır. Düzlem dalga sayısını belirlemek için 60 Ry şiddetinde düzlem-dalga kesme enerjisinden faydalanılmıştır. Toplam enerji hesaplamaları (8x8x8) değerinde alan-merkezi bir kafes kullanılarak elde edilmiştir.

Fonon hesaplamalarında lineer tepki metodunun başarısı daha önce yapılan çalışmalarda ispatlandığı için, tez kapsamında da bu metottan faydalanılmıştır [55;56]. Fonon modlarının hesaplanmasında (8x8x8) değerinde alan-merkezi bir kafes kullanılmıştır. Ta₃Ge için için 4x4x4 $q^{\vec{}}$ -noktası ağında toplam olarak 10 adet dinamik matris elde edilmiştir. Kısmi fonon durum yoğunluğu ile fonon spektrumunu belirlemek içinde Fourier dönüşümünde dinamik matrisler kullanılmıştır. Ta₃Ge'nin süperiletkenlik özelliklerinin belirlenmesinde BCS teorisinin temel aldığı elektron-fonon etkileşiminden faydalanılmıştır. Elektron-fonon etkileşimi hesaplamalarında Lineer Tepki metodu [55;56] ve Migdal-Eliashberg [57;58] teoremi birlikte kullanılmıştır. Bu hesaplamalar için (24x24x24) değerinde \vec{k} noktası ağı kullanımı tercih edilmiştir.

3.2. Ta₃Ge Malzemesinin Yapısal ve Elektronik Özellikleri

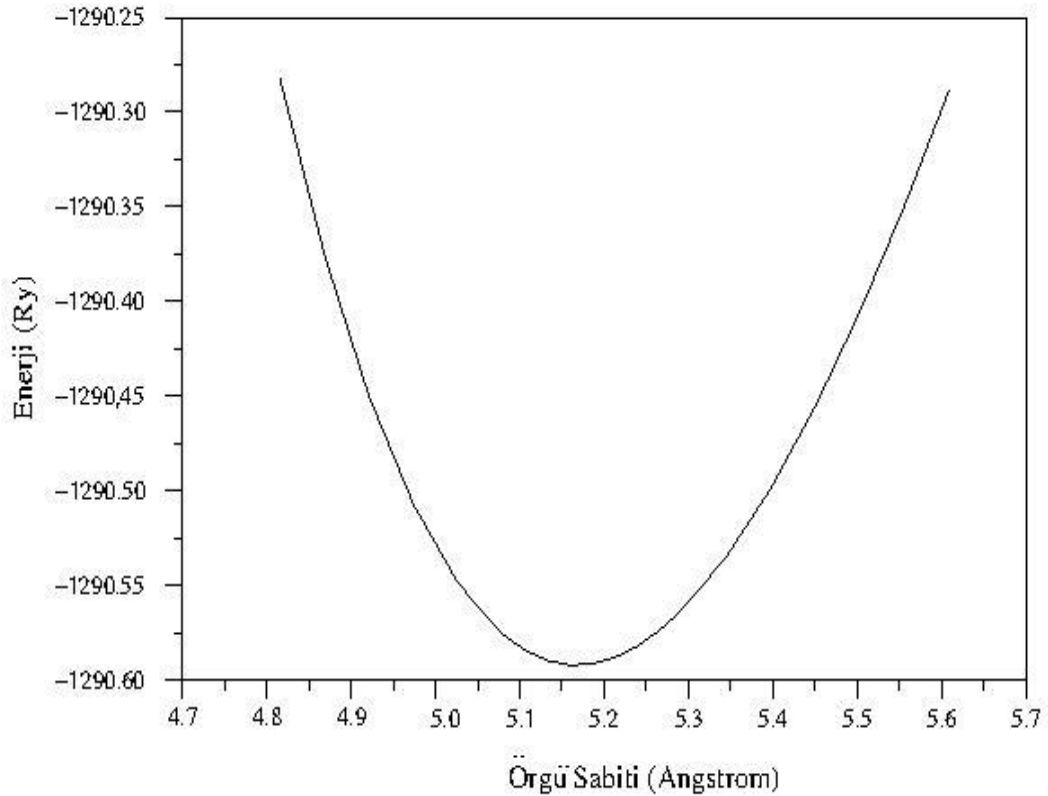
Bu tez kapsamında Ta₃Ge bileşiğinin A15 tipi kristal yapısı incelenmiştir. Bilindiği gibi bu kristal yapının uzay grubu $Pm\bar{3}n$ (No:223) olup, örgüsü basit kübik örgüdür. Bu kristal yapının ilkel birim hücrelerinde 6 Ta ve 2 Ge atomu olmak üzere toplam 8 adet atom bulunmaktadır. Buna göre Ta atomları 6c Wyckoff pozisyonları olan $(1/4,0,1/2)$, $(1/2,1/4,0)$, $(0,1/2,1/4)$, $(3/4,0,1/2)$, $(1/2,3/4,0)$, $(0,1/2,3/4)$ koordinatlarında yer alırken; Ge atomları 2a Wyckoff pozisyonları olan $(0,0,0)$ ve $(1/2,1/2,1/2)$ koordinatlarında bulunurlar. Ta₃Ge bileşiği için tanımlanan kristal yapısı Şekil 3.1.'de sunulmuştur. Şekil incelendiğinde Ta ve Ge atomlarının yaptıkları bağlar da açıkça görülebilmektedir. Şekildeki atomlar arası bağ uzunlukları XCRYSDEN programı kullanılarak hesaplanmıştır [59]. Kübik yapıdan ötürü Ta atomları arasındaki bağlar eşit ve 2.5842 \AA olarak bulunmuştur. Daha önce yapılan bir çalışmada ise Ta kristalinin hacim merkezli kübik yapısı için bağ uzunluğu 2.786 \AA ve yüzey merkezli kübik yapısı için ise 2.905 \AA olarak elde edilmiştir [60]. Bu sonuçlardan açık bir şekilde görülmektedir ki Ta₃Ge kristali içinde Ta-Ta bağ uzunluğu kısalmıştır ve bu da Ta-Ta bağının Ta₃Ge kristalinde daha güçlü olduğunu gösterir. Şekil 3.1.'de görülen Ta ve Ge atomları arasındaki bağlar da birbirine eşit uzunlukta olup 2.8892 \AA olarak hesaplanmıştır.



Şekil 3.1. (a) Ta₃Ge bileşiğinin kristal yapısı, (b) Basit kübik örgü için yüksek simetri noktaları görülmektedir.

Şekil 3.1.'deki kristal yapıya sahip Ta₃Ge bileşiğinin örgü sabitini teorik olarak hesaplayabilmek için öncelikle farklı örgü sabiti değerleri için bu kristal yapı

oluşturulmuştur. Seçilen her bir örgü sabitine karşılık, oluşturulan kristalin toplam enerjisi hesaplanmıştır. Böylece hesaplamalardan farklı örgü sabitlerine karşılık gelen enerji değerleri elde edilmiştir. Bu verilerden yararlanılarak Ta_3Ge için enerji-örgü sabiti grafiği Şekil 3.2.'deki gibi çizdirilmiştir. Bu grafikte sunulan parabolün bir minimum değeri olduğu görülmektedir. Bu minimum değer aynı zamanda minimum enerjinin de olduğu noktadır. Bu noktaya karşılık gelen yani, minimum enerjiye karşılık gelen örgü sabiti değeri; Ta_3Ge için aranan ve bu bileşiği A15 kristal yapısında kararlı yapan sonuçtur. Sonuç olarak Ta_3Ge için hesaplanan örgü sabiti değeri 5.172 \AA olarak elde edilmiştir. Burada Γ (000), X (100), M (110), ve R ise (111) noktalarını göstermektedir.



Şekil 3.2. Ta_3Ge bileşiğine ait enerji-örgü sabiti grafiği

Ta_3Ge kristali için farklı örgü sabitlerine karşılık gelen enerji değerleri ve aşağıdaki gibi verilen Murnaghan durum denklemleri [61]

$$P = \frac{B_0}{B_{0'}} \left[\left(\frac{\Omega_0}{\Omega} \right)^{B_{0'}} - 1 \right] \quad (3.1)$$

$$E = \frac{\Omega_0 B_0}{B_{0'}} \left[\frac{1}{B_{0'} - 1} \left(\frac{\Omega}{\Omega_0} \right)^{B_{0'} - 1} + \frac{\Omega}{\Omega_0} \right] - \frac{\Omega_0 B_0}{B_{0'} - 1} + E(\Omega_0) \quad (3.2)$$

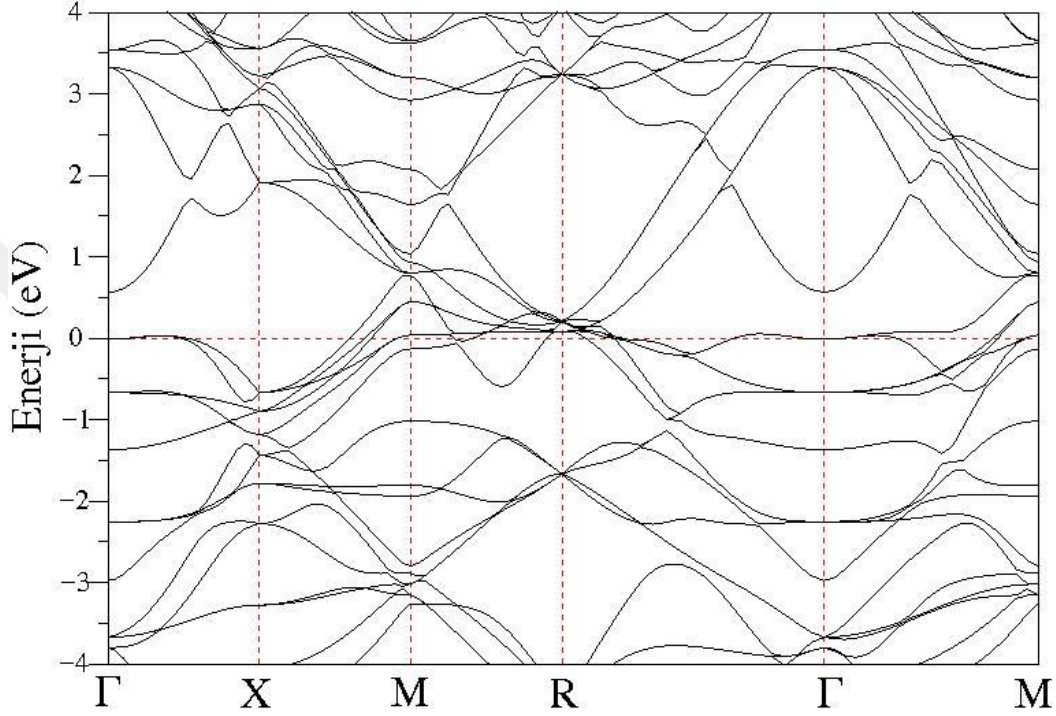
kullanılarak hacim modülü (B_0) ve hacim modülünün basınca göre birinci türevi B_0' değerleri hesaplanmıştır. Hesaplanan bu veriler Tablo 3.1.'de sunulmuştur. Ta_3Ge bileşiğinin kübik kristal yapısı ilk olarak bu tez kapsamında incelendiği için hesaplanan verilerin karşılaştırılabileceği bir çalışma bulunmamaktadır. Bununla birlikte Ta_3Ge bileşiğinin örgü sabitini V_3Ge ile karşılaştırmak doğru bir yaklaşım olabilir. Periyodik cetvelde aynı sütunda bulunan Ta ve V atomları karşılaştırıldığında hem kütle olarak hem de atomik yarıçap olarak Ta atomunun V atomundan daha ayırt edilebilecek düzeyde büyük değerlere sahip olduğu görülebilir. Bu nedenle Ge atomuyla aynı kristal yapıda oluşturdukları bileşiklerin örgü sabitleri kıyaslandığında Ta_3Ge 'nin örgü sabitinin V_3Ge 'den daha büyük olması beklenir. Bizim yaptığımız hesaplamalar sonucunda Tablo 3.1.'den de görülebileceği gibi bu sonuç doğrulanmaktadır.

Tablo 3.1. Ta_3Ge kristali için hesaplanan yapısal parametreler

	a (Å)	B(GPa)	B'
Ta_3Ge	5.172	183.8	3.72
V_3Ge (Teori) [62]	4.767	-	-
V_3Ge (Deney) [63]	4.760	-	-

Ta_3Ge 'nin örgü sabitini belirledikten sonra, bu örgü sabit ve onunla oluşturulan kristal yapı kullanılarak, elektronik yapı hesaplamalarına geçilmiştir. Bu hesaplamalar sonucunda kübik örgünün yüksek simetri yönleri boyunca elde edilen Ta_3Ge 'nin elektronik bant yapısı grafiği Şekil 3.3.'de görülmektedir. Bu grafikte Fermi enerji seviyesi yatay kesikli çizgi ile gösterilmiş olup, 0 eV değerine yerleştirilmiştir. Grafik incelendiğinde elektronik enerji bantlarının, Fermi enerji seviyesini her bölgede kestiği göze çarpmaktadır. Bu sonuç Ta_3Ge kristalinin metalik bir yapıya sahip olduğunun bir göstergesidir. Kübik yapıda kristalleşen Ta_3Ge için daha önce herhangi bir elektronik yapı hesaplaması olmadığı için daha önce yaptığımız gibi Ta_3Ge 'nin elektronik bant yapısı grafiğini, V_3Ge için GGA metodu

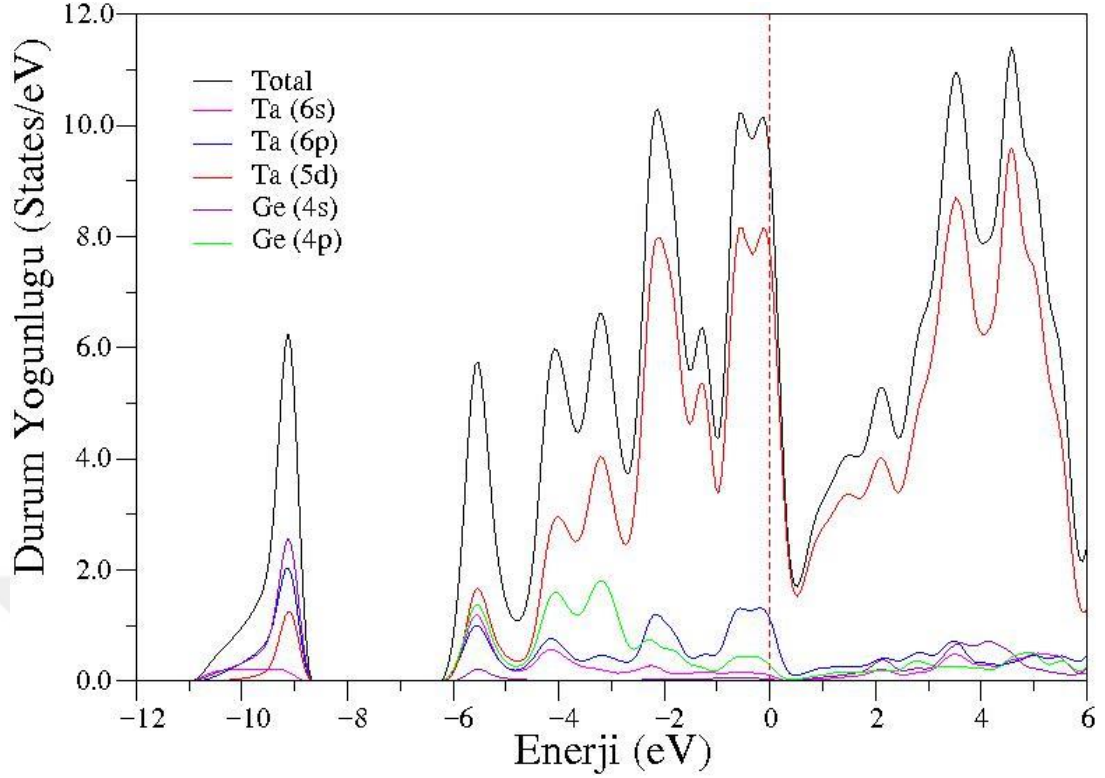
ve VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) paket programı ile hesaplanan elektronik bant yapısı grafiği ile karşılaştırabiliriz. Bu karşılaştırma sonucunda iki elektronik bant yapısı grafiğinin birbirine oldukça benzer yapıda olduğu görülmektedir [64]. Bu da A15 kristal yapıdaki Ta₃Ge için literatürde ilk defa hesaplanan elektronik bant yapısı grafiğinin doğruluğu için umut vericidir.



Şekil 3.3. Ta₃Ge kristalinin hesaplanmış elektronik bant yapısı grafiği. 0 eV değeri Fermi seviyesine karşılık gelmektedir.

Elektronik bant yapısı grafiğinde elde edilen enerji bantlarının daha detaylı bir analizini yapabilmek için Şekil 3.4.'de sunulan elektronik durum yoğunluğu grafiği çok faydalı olmaktadır. Bu grafik enerji bantlarının, kristali oluşturan atomların hangi orbitallerinden kaynaklandığı ile ilgili bilgi sahibimiz olmamıza yardımcı olur. Grafikte görülen ve yaklaşık -11.0 eV ile -8.6 eV enerji aralığında kalan bölgede yaklaşık -9.0 eV değerindeki pikin oluşumuna en büyük katkının Ge atomlarının 4s orbitallerinden geldiği görülmektedir. Bu katkıya ek olarak Ta atomlarının sırasıyla 6p ve 5d orbitalleri de bu pikin oluşmasına etkili bir şekilde katkı yapmaktadırlar. Son olarak bu pikin oluşumuna en küçük katkının ise Ta atomlarının 6s orbitallerinden geldiği söylenebilir. Şekilden görüldüğü gibi -11.0 eV ile -8.6 eV enerji aralığındaki bölgeden hemen sonra yaklaşık 2.4 eV büyüklüğünde bir boşluk

bölgesi bulunmaktadır. Bu boşluk bölgesinin hemen sonrasında gelen ve yaklaşık -5.5 eV değerinde bulunan pik en büyük katkıyı Ta atomlarının 5d orbitallerinden almaktadır. Bu pike ikinci en büyük katkıyı ise Ge atomlarının 4p orbitalleri yapmaktadır. Son olarak bu pikin oluşumunda Ta atomlarının 6s ve 6p orbitallerinin de etkili olduğu görülmektedir. Bu pikten sonra -4.2 eV ile -3.0 eV enerji aralığında ikili bir pik yapısı görülmektedir. Bu piklerin oluşmasında Ta atomlarının 5d orbitallerinin en baskın şekilde etki yaptıkları Şekil 3.4.'den görülebilir. Bu piklere gelen ikinci en büyük katkı ise Ge atomlarının 4p orbitallerindedir. Ayrıca bu piklerin oluşumunda Ta atomlarının 6p ve 6s orbitallerinin de katkı yaptıkları söylenebilir. Bu piklerden sonra -2.1 eV enerji değerinde Fermi enerji seviyesinin altındaki en yüksek durum yoğunluğuna sahip pik yer almaktadır. Bu pike en büyük katkı yine Ta atomlarının 5d orbitallerinden gelmektedir. Bu pike diğer katkılar ise sırasıyla Ta atomlarının 6p, Ge atomlarının 4p ve Ta atomlarının 6s orbitallerinden gelmektedir. Şekil 3.4. incelendiğinde, Fermi enerji seviyesinin hemen altında yer alan ve -0.6 eV enerji değerinden başlayan ikili piklere gelen katkılar, -2.1 eV enerji değerindeki pik ile aynı olduğu görülmektedir. Fermi enerji seviyesinin üzerindeki piklerin oluşumunda çok baskın bir şekilde Ta atomlarının 5d orbitallerinin rol oynadığı açıktır. Şekil 3.4.'ün daha detaylı bir analizinden, bu katkının yanı sıra bu pikler için Ta atomlarının diğer orbitallerinden ve Ge atomlarından çok az bir katkı geldiği sonucu çıkarılabilir. Bu tezin ana konusu olan Ta₃Ge kristalinin süperiletkenlik özelliklerinin araştırılmasında, bilindiği gibi BCS teoriye göre Fermi enerjisi civarındaki durum yoğunluğu $N(E_F)$ 'nin çok büyük bir önemi vardır. Bu nedenle $N(E_F)$ ile ilgili çok daha detaylı bir analiz yapmak faydalı olacaktır. Fermi enerjisi civarında hesaplanan $N(E_F)$ değeri yaklaşık olarak 9.32 States/eV olarak elde edilmiştir. Bu durum yoğunluğuna en büyük katkı yaklaşık % 82 ile Ta atomlarının 5d orbitallerinden gelmektedir. $N(E_F)$ için ikinci en büyük katkı ise yaklaşık % 12 ile yine Ta atomlarının 6p orbitallerinden kaynaklanmaktadır. Son olarak Şekil 3.4. incelendiğinde, $N(E_F)$ değerinin oluşmasında yaklaşık % 3 ile Ge atomlarının 4p orbitallerinin de etkili olduğu görülmektedir.



Şekil 3.4. Ta₃Ge kristali için hesaplanan elektronik durum yoğunluğu grafiği. 0 eV değeri Fermi seviyesine karşılık gelmektedir.

3.3. Ta₃Ge Malzemesinin Elastik ve Mekanik Özellikleri

Süperiletken malzemelerin elastik özelliklerinin incelenmesi, malzemenin süperiletkenlik özelliklerinin teorik olarak anlaşılmasında önemli bir role sahip olduğu gibi, kullanım alanlarının belirlenmesinde de faydalı veriler sunar. BCS teoriye göre süperiletkenlik özelliklerinin belirlenmesinde elektron-fonon etkileşmesi büyük önem taşımaktadır. Fonon spektrumu ile elastik özellikler arasındaki ilişki düşünüldüğünde, süperiletkenlik özelliklerin elastik özellikler ile de ilişkili olduğu sonucuna ulaşılabılır. Bu nedenle süperiletken malzemelerin elastik özelliklerinin araştırılması da oldukça önemlidir. Tezin bu kısmında ilk olarak Ta₃Ge malzemesinin elastik sabitleri gerilme-gerinim (stress-strain) metodu kullanılarak hesaplanıp, Tablo 3.2.'de sunulmuştur. A15 kristal yapıdaki Ta₃Ge'nin elastik özellikleri ile ilgili daha önce yapılmış teorik ya da deneysel çalışma bulunmamaktadır. Bu nedenle burada sunulan verilerin, bundan sonra Ta₃Ge'nin A15 kristal yapısı için yapılacak çalışmalar için önemi daha da artmaktadır.

Tablo 3.2. Ta₃Ge için hesaplanan elastik sabitler. Tüm sonuçlar GPa birimindedir.

Kaynak	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄	C ₁₂ - C ₄₄
Ta ₃ Ge	322.30	121.15	53.94	67.21

Tablo 3.2.'den de görüldüğü gibi Ta₃Ge için C₁₁=322.30, C₁₂=121.15 ve C₄₄=53.94 GPa olarak elde edilmiştir. Kübik kristallerde bir malzemenin aşağıdaki Born kriterlerini sağlaması halinde, mekanik olarak kararlı olduğu sonucuna ulaşılabilir [65].

$$C_{11} > 0; C_{44} > 0; C_{11} - C_{12} > 0; C_{11} + 2C_{12} > 0 \quad (3.3)$$

Tablo 3.2. incelendiğinde kübik kristal yapıdaki Ta₃Ge'nin bu şartları sağladığı ve mekanik olarak kararlı olduğu görülmektedir. Tabloda ayrıca (C₁₂-C₄₄) [66] olarak gösterilen Cauchy basıncı da hesaplanmıştır. Bu değer, kübik kristallerin esnek/kırılgan yapısını ortaya koymada etkilidir. Pettifor'un çalışmasına göre daha pozitif bir Cauchy basıncı, bileşikte daha iyi esnekliği simgelemektedir [67]. Bu açıdan bakıldığında V₃Ge için daha önceki hesaplamalarda elde edilen 132.32 GPa değerindeki Cauchy basıncı [62], Ta₃Ge için hesaplanan 67.21 GPa değerinden daha büyük olduğu için V₃Ge materyalinin Ta₃Ge'ye göre daha esnek bir yapıda olduğu söylenebilir. Bununla birlikte daha önce Nb₃Ge için yapılan çalışmada elde edilen 40.1 GPa sonucu da Nb₃Ge'nin esneklik özelliğinin Ta₃Ge'ye göre daha az olduğunu göstermektedir [14].

Elastik sabitler elde edildikten sonra, hacim (bulk) modülü (B) ve kayma (shear) modülü (G) Voigt-Reuss-Hill (VRH) yöntemi [68-70] aracılığıyla hesaplanabilir. Hacim modülü hem Voigt hemde Reuss tarafından aynı şekilde belirlenmiştir. Kayma modülünün ise Voigt ve Reuss tarafından belirlenen iki farklı hesabı mümkündür. Voigt ve Reuss tarafından belirlenen hacim ve kayma modülü denklemleri [68-70]:

$$B_V = B_R = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (3.4)$$

$$G_V = \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (3.5)$$

$$G_R = \frac{5.(C_{11}-C_{12})C_{44}}{4C_{44}+3(C_{11}-C_{12})} \quad (3.6)$$

olarak verilir. Voigt ve Reuss tarafından belirlenen bu değerlerin ortalamaları;

$$B_H = (B_V + B_R)/2 \quad (3.7)$$

$$G_H = (G_V + G_R)/2 \quad (3.8)$$

olarak verilir. Aynı zamanda Voigt ve Reuss tarafından belirlenen bu değerlerin ortalaması Hacim modülü (B) ve kayma modülü (G) olarak da kabul edilir. Elastik modüller elde edildikten sonra ikinci adımda Young modülü (E) ve Poisson oranı (σ) hesaplanmalıdır. Young modülü ve Poisson oranı aşağıdaki bağıntılardan hesaplanabilir [68-70]:

$$E = \frac{9BG}{3B+G} \quad (3.9)$$

$$\sigma = \frac{3B-2G}{2(3B+G)} \quad (3.10)$$

Kübik kristal yapıdaki Ta₃Ge için hesaplanan hacim modülü (B_H), kayma modülü (G_H), Young modülü (E) ve Poisson oranı (σ) değerleri Tablo 3.3.'de sunulmuştur.

Tablo 3.3. Ta₃Ge için hesaplanan hacim modülü (B_H)(GPa), kayma modülü (G_H) (GPa), Young modülü (E)(GPa), B_H/G_H oranı, Poisson oranı (σ) değerleri. Tabloda ayrıca V₃Ge ve Nb₃Ge için elde edilen sonuçlar da sunulmuştur.

Kaynak	B_V	B_R	B_H	G_V	G_R	G_H	E	B_H/G_H	σ
Ta ₃ Ge	188.2	188.2	188.2	72.6	66.2	69.4	185.4	2.71	0.33
V ₃ Ge [62]	-	-	175.9	-	-	26.1	94.5	3.41	0.41
Nb ₃ Ge [14]	172.8	172.8	172.8	79.6	75.9	77.8	202.9	2.22	0.33

Tablo 3.3. incelendiğinde elastik sabitler yardımıyla hesaplanan 188.2 GPa değerindeki hacim modülünün, daha önce Murnaghan denklemlerinden hesaplanan 183.8 GPa değerindeki hacim modülü ile tutarlı olması, hesaplamalarımızın doğruluğunu kanıtlar niteliktedir. Hacim modülü bilindiği gibi dışarıdan uygulanan basınca karşılık kimyasal bağların direncini tanımlar. Bu yönüyle bakıldığında bulduğumuz hacim modülü değeri, daha önce literatürde hesaplanan diğer A15 tipi

kristallerle benzerdir [62, 14]. Kayma (Shear) modülü malzemenin dışarıdan gelen bir etkiye karşı uğrayacağı deformasyonun bir ölçüsüdür. Yani kayma modülü ne kadar yüksek ise, malzemenin deformasyona uğraması o kadar zordur ve malzeme daha rijittir ve ilk halini korumaya daha yatkındır. Bu durumda malzeme sünek bir davranış sergilemez ve malzemede ani kırılmalar meydana gelebilir. Ta₃Ge için elde edilen kayma modülü V₃Ge ve Nb₃Ge ile karşılaştırıldığında arada bir değer aldığı görülmektedir. Tablo 3.3.'de yer alan bir diğer parametre E, Young modülüdür. Young modülü birim uzama başına gerilme olarak tanımlanabilir. Bir malzemenin Young modülü büyükse, malzemenin sert bir malzeme olduğu ve şeklinin değiştirilmesinin zor olduğu sonuçları çıkarılabilir. Bu açıdan bakıldığında Ta₃Ge'nin Nb₃Ge'ye oranla daha rahat şekillendirilebilir bir malzeme olduğu söylenebilir. Tablo 3.3.'de yer alan bir başka parametre de Poisson oranıdır. Bu oran, tek eksen üzerinden uygulanan bir kuvvet durumunda enine gerilmenin aksel gerilmeye oranıdır. Poisson oranı kayma gerilimi durumunda malzemenin lineer esneklik gösteren bir malzemenin kararlılığı için bir yorum yapılmasını sağlar. Kararlı malzemeler için Poisson oranı -1.0 ile 0.5 arasında değerler almaktadır. Bu durumda, Tablo 3.3.'de yer alan tüm A15 materyalleri kayma gerilimi durumunda kararlı yapıda bulunurlar.

Tablo 3.3.'de yer alan σ Poisson oranı ve B_H/G_H oranı değerlerini kullanarak, aynı tabloda listelenen kübik kristal yapıların esnekliği ya da kırılabilirliği ile ilgili bir yorum yapılabilir. Eğer $\sigma < 0.26$ ve B_H/G_H > 1.75 ise malzeme kırılabilir, diğer durumlarda ise esnektir [14]. Bu kriterler göz önünde bulundurulduğunda, Tablo 3.3.'de yer alan tüm A15 tipi malzemelerin esnek yapıda oldukları görülmektedir. Tablodan en esnek malzemenin de V₃Ge olduğu sonucuna ulaşılabilir. Malzemelerin esnek yapıda olmaları şekillendirilebilmelerini kolaylaştıracağı için kullanım alanlarını da artıracaktır. Bu açıdan bakıldığında Ta₃Ge materyalinin esnek özellik göstermesi endüstriyel alanda kullanımı için uygun bir malzeme olduğunun bir göstergesidir.

Debye sıcaklığı ve ses hızı değerleri, malzemelerin önemli termal özelliklerindedir. Debye sıcaklığı malzemelerin sertliği, özısı ve erime noktası gibi önemli fiziksel

özellikleri ile ilgili bir fikir vermesi yönüyle hesaplanmasının faydalı olacağı bir malzemedir. Yüksek Debye sıcaklığı, malzemelerin sertliğinin ve erime sıcaklığının da yüksek olduğuna bir işarettir. Debye sıcaklığı ve ses hızı değerleri elastic modüller yardımıyla aşağıdaki denklemler kullanılarak hesaplanabilir [14].

$$\theta_D = \frac{h}{k_B} \left(\frac{3n N_A \rho}{4\pi M} \right)^{1/3} V_M \quad (3.11)$$

$$V_T = \left(\frac{G_H}{\rho} \right)^{1/2}, V_L = \left(\frac{3B_H + 4G_H}{3\rho} \right)^{1/2}, V_M = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{V_T^3} + \frac{1}{V_L^3} \right) \right]^{-1/3} \quad (3.12)$$

Bu denklemlerde, h , k_B ve N_A sırasıyla Planck sabiti, Boltzmann sabiti ve Avagadro sayısıdır. M , moleküler ağırlığı; n , Ta_3Ge içindeki toplam Ta ve Ge atomları sayısını ve ρ ise kütle yoğunluğunu ifade eder. V_T , V_L ve V_M ise sırasıyla enine, boyuna ve ortalama ses hızlarına karşılık gelmektedir. Ta_3Ge için yukarıdaki denklemler yardımıyla hesaplanan V_T , V_L , V_M ve θ_D değerleri Tablo 3.4.'de sunulmuştur.

Tablo 3.4. Ta_3Ge için hesaplanan enine (V_T), boyuna (V_L) ve ortalama elastik dalga hızları (V_M) ile Debye sıcaklığı (θ_D) değerleri

	$V_T(m/s)$	$V_L(m/s)$	$V_M(m/s)$	$\theta_D(K)$
Ta_3Ge	2165.31	4354.73	3565.43	277.74

Ayrıca Ta_3Ge için ampirik (deneyime dayalı) bir formül olan [71]

$$T_m = (533 + 5.91C_{11}) \mp 300 \quad (3.13)$$

kullanılarak erime sıcaklığı 2457.79 ± 300 K olarak hesaplanmıştır.

3.4. Ta₃Ge Malzemesinin Fonon Özellikleri ve Elektron-Fonon Etkileşimi

Kübik yapıda kristalleşen Ta₃Ge'nin Γ noktasındaki optik fonon modları O_h nokta grup simetrisine göre aşağıdaki şekilde ifade edilebilir.

$$\Gamma(O_h) = T_{1g} + T_{2g} + 2T_{1u} + 2T_{2u} + E_g + A_{2g} \quad (3.14)$$

Burada A, E ve T sırasıyla tek katlı, çift katlı ve üç katlı fonon modlarına karşılık gelirler. T_{2g} ve E_g fonon modları Raman aktif, T_{1u} fonon modu kızılötesi (infrared) aktif ve diğer modlar ise aktif olmayan modlar olarak sınıflandırılır. Hesaplanan bölge merkezi fonon modlarının frekansları (ν), elektron fonon etkileşim parametreleri (λ) ve modun oluşumuna katkı yapan atom titreşimlerinin öz karakterleri Tablo 3.5.'de verilmiştir.

Tablo 3.5. Kübik Ta₃Ge için Γ noktasında hesaplanan optik fonon modlarının frekansları (ν), elektron-fonon etkileşim parametreleri (λ) ve öz karakterleri.

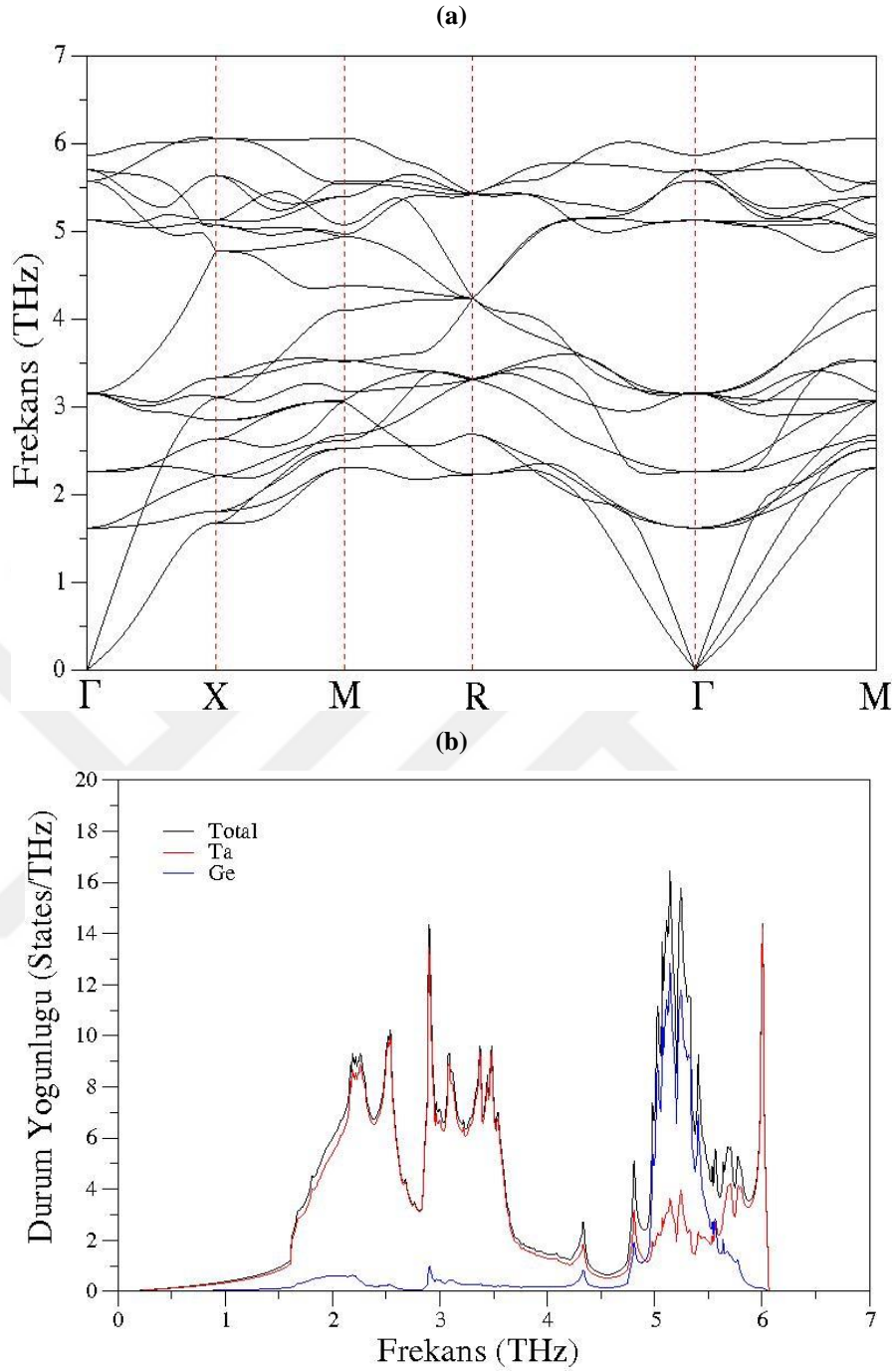
Fonon modu	ν (THz)	λ	Öz karakter
T_{1g}	1.62	0.435	Ta
T_{2g}	2.26	0.234	Ta
T_{1u}	3.15	0.016	Ta + Ge
T_{2u}	3.16	0.024	Ta + Ge
T_{1u}	5.19	0.009	Ta + Ge
E_g	5.57	0.050	Ta
T_{2u}	5.69	0.013	Ta + Ge
A_{2g}	5.86	0.039	Ta

Tablo 3.5. incelendiğinde Γ noktasındaki optik fonon modlarının oluşumunda Ta atomlarının çok baskın bir şekilde rol oynadığı görülmektedir. Özellikle T_{1g} , T_{2g} , E_g ve A_{2g} modlarının oluşumunda sadece Ta atomlarının titreşimlerinin etkili olduğu sonucuna ulaşılmıştır. Bunun yanı sıra T_{1u} ve T_{2u} modlarının oluşumunda ise Ta ve Ge atomlarının birlikte bir katkı sundukları sonucu elde edilmiştir. Tabloda bölge merkezi fonon modları için hesaplanan elektron-fonon etkileşim parametrelerinin toplam katkısının $\lambda_{\Gamma} = 0.82$ olduğu bulunmuştur. Bölge merkezi fonon modlarından gelen bu değer hesaplanmasında en büyük katkının da 0.435 ile T_{1g} fonon modundan geldiği görülmektedir. λ_{Γ} değerine gelen ikinci en büyük katkı ise 0.234 ile T_{2g} fonon modundan kaynaklanmaktadır.

A15 tipi kübik kristal yapıya sahip Ta₃Ge için yüksek simetri yönleri boyunca elde edilen fonon spektrumu Şekil 3.5.'de görülmektedir. Ta₃Ge'nin ilkel birim hücresinde 6 Ta ve 2 Ge olmak üzere toplam 8 atom mevcuttur. Bu nedenle fonon spektrumunda, 3 adet akustik ve 21 adet optik mod olmak üzere toplam 24 adet fonon modu bulunmaktadır. Fonon spektrumunun bazı bölgelerinde simetriden dolayı fonon modlarının çakışması sonucu bu sayı azalmaktadır. Ta₃Ge kristal yapısının oluşmasında Ta atomları sayısal olarak daha fazla oldukları için, fonon spektrumunun oluşumunda da etkin bir rol üstlenmişlerdir. Bu nedenle, Ta ve Ge atomları arasında büyük kütle farkı olmasına rağmen fonon spektrumunda bir boşluk bölgesi bulunmamaktadır. Ta₃Ge kristalinin Şekil 3.5.'de görülen fonon dispersiyon grafiğinde dikkat çeken diğer bir önemli nokta ise sadece pozitif frekanslara sahip olmasıdır. Grafikte sadece pozitif frekans değerlerinin yer alması Ta₃Ge kristalinin dinamik olarak kararlı olduğunun bir kanıtıdır. Fonon dispersiyon grafiğinde göze çarpan bir diğer husus da X – M ve M – R simetri yönlerinde bulunan yumuşak (soft) akustik fonon modlarıdır. Çünkü bu fonon modlarının varlığı, BCS teoriye göre süperiletkenliğin bir nedeni olan elektron – fonon etkileşiminin bir göstergesi olabilir. Fonon spektrumunun daha ayrıntılı bir incelemesinin yapılabilmesi için Şekil 3.5.'de bulunan fonon durum yoğunluğu grafiği ile birlikte ele alınmalıdır. Bu grafikte toplam fonon durum yoğunluğunun yanı sıra Ta ve Ge atomlarının katkılarını gösteren kısmi fonon durum yoğunluğu grafikleri de yer almaktadır. Fonon durum yoğunluğu grafiği fonon dispersiyon grafiğindeki fonon modlarının hangi atomların titreşiminden kaynaklandığı konusunda fikir sahibi olunmasında önemli bir göstergedir. Bu açıdan bakıldığında açık bir şekilde 0 – 4.2 THz arasındaki fonon modlarının oluşumunda Ta atomlarının önemli bir rol oynadığı görülmektedir. 4.2 THz ile yaklaşık 5.0 THz arasındaki fonon modlarının meydana gelmesinde ise Ta atomlarının yanı sıra Ge atomlarının da katkı verdiği sonucuna ulaşılmıştır. Şekil daha ayrıntılı bir şekilde incelendiğinde 5.0 – 5.6 THz aralığında ise Ge atomlarının titreşimlerinin baskın olduğu açıktır. 5.6 THz değerinin üzerindeki optik fonon modlarının oluşumunda ise Ta atomlarının titreşimleri etkili olmaktadır. Genelde en yüksek frekanslı optik fonon modlarının oluşumunda kütlesi düşük olan atomların etkili olması beklenir. Ancak Ta₃Ge kristal yapısında her ne kadar Ta ve Ge atomları arasında büyük bir kütle farkı olsa da bu durum

gözenmemektedir. Bunun nedeni, tezin 3.2 kısmında bahsedildiği gibi Ta atomlarının arasındaki bağın çok güçlü olmasıdır. Ta atomları arasındaki bu güçlü bağ yapısı, yüksek frekanslarda bile Ta atomlarının etkin bir rol oynamasına sebep olmaktadır. Fonon durum yoğunluğu grafiklerindeki piklerin oluşmasının nedeni ise fonon dispersiyon grafiğinde yüksek simetri yönlerinde gidildikçe fonon frekanslarının değişmemesidir. Örneğin 6.0 THz civarında oluşan pikin kaynağı olarak, fonon dispersiyon grafiğindeki en yüksek enerjili pikin $\Gamma - X$, $X - M$ ve $\Gamma - M$ yönlerinde 6.0 THz civarında neredeyse düz bir çizgi şeklinde hep aynı frekans değerinde olması gösterilebilir.

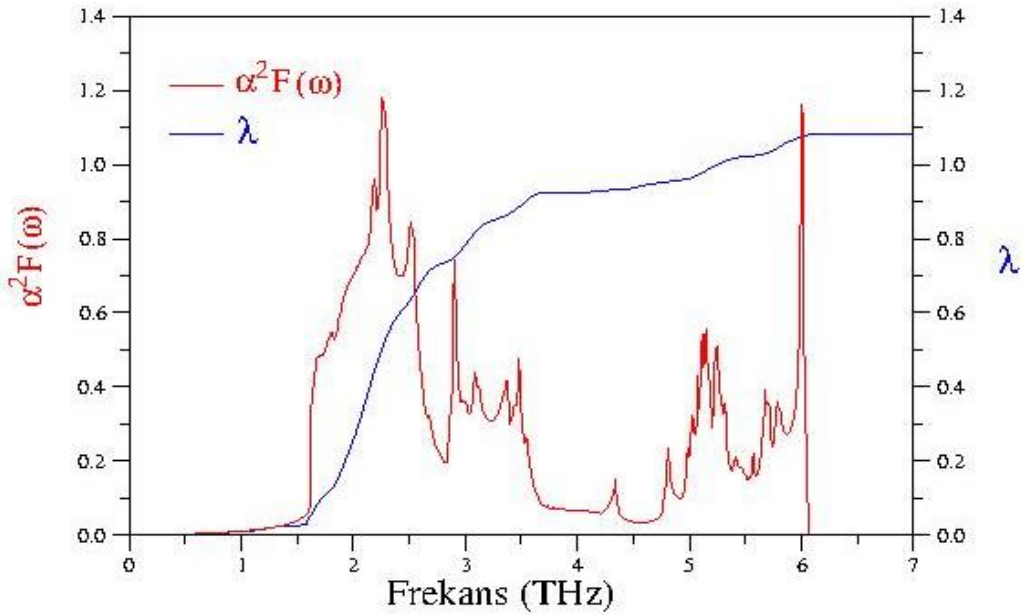




Şekil 3.5. Ta_3Ge bileşiğinin hesaplanmış (a) fonon dağılımı ve (b) fonon durum yoğunluğu grafikleri yer almaktadır.

Kübik yapıda kristalleşen Ta_3Ge 'nin süperiletkenlik özelliklerine elektron-fonon etkileşiminin etkisini incelemek için Şekil 3.6.'da Eliashberg spectral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) ve elektron-fonon etkileşim parametresinin (λ) frekansla değişimi sunulmuştur. Şekilden görülebileceği gibi elektron-fonon etkileşim parametresi 1.083 olarak hesaplanmıştır. Bu değer, daha çok fononlardan kaynaklanan güçlü bir

elektron-fonon etkileşiminin olduğunun bir işaretidir. Bu parametreye en büyük katkı ise 1.5 THz ile 3.6 THz arasındaki fonon modlarından gelmektedir. Şekilden de görülebileceği gibi bu frekans aralığında λ değeri hızlı bir şekilde artmaktadır. Daha sonra ise artış azalmakta ve yüksek frekanslarda ise neredeyse λ değerine hiçbir katkı gelmemektedir. Bu sonuç bize göstermektedir ki elektron-fonon etkileşim parametresine en büyük katkı düşük frekanslı fonon modlarından gelmektedir. Şekil 3.5.'de bulunan fonon durum yoğunluğu grafiği incelenirse, λ değerine en büyük katkının geldiği 1.5 THz ile 3.6 THz arasındaki fonon modlarının Ta atomlarından kaynaklandığı görülebilir. Sonuç olarak Ta₃Ge'nin elektronik özellikleri ile burada bulduğumuz sonuçlar birlikte yorumlandığında, Ta₃Ge'nin süperiletkenliğinin kaynağının Ta atomlarının d orbitallerini oluşturan elektronlarla, yine Ta atomlarının düşük frekanslarda oluşturdukları fononların etkileşmesi olduğu söylenebilir. Eliashberg spektral fonksiyonunun frekansla değişimi incelendiğinde ise yüksek pik değerlerinin, λ değerine en büyük katkının geldiği 1.5 THz ile 3.6 THz aralığında yer aldığı görülmektedir. Bu sonuç da bu bölgede elektron-fonon etkileşiminin güçlü olduğunun bir diğer kanıtıdır. Ayrıca 6 THz civarında oluşan pik de, Ta atomlarının titreşimlerinden kaynaklanan en yüksek enerjili optik fonon modunun da elektron-fonon etkileşimine katkı yaptığını gösterir.



Şekil 3.6. Ta₃Ge bileşiği için hesaplanan Eliashberg spektral fonksiyonunun (kırmızı çizgi) ve elektron-fonon etkileşim parametresinin (mavi çizgi) frekansa bağlı değişim grafiği.

Ta₃Ge'nin süperiletkenlik özellikleri ile ilgili bazı parametrelerin sunulduğu Tablo 3.6.'da Eliashberg spectral fonksiyonunu kullanarak hesaplanan λ değeri 1.083 olarak bulunmuştur. Logaritmik ortalama fonon frekansı ise $\omega_{ln} = 123.05$ K olarak hesaplanmıştır. Ta₃Ge için süperiletkenlik geçiş sıcaklığı değerleri (T_c), elde ettiğimiz λ ve ω_{ln} değerleri kullanılarak Allen-Dynes modifiyeli McMillan [72,73] denklemlerinden elde edilmiştir. Tablodan da görüleceği gibi T_c değerlerinin hesaplanmasında Coulomb itme potansiyeli μ^* , 0,10 ile 0.16 değerleri arasında seçilmiştir. Bulunan sonuçların ortalaması alındığında $\mu^*=0.13$ değeri ile hemen hemen aynı sonucu verdiği görülebilir. Böylece Ta₃Ge için T_c süperiletkenlik geçiş sıcaklığının yaklaşık olarak $\mu^*=0.13$ değeri için hesaplanan 8.392 K olduğu söylenebilir. Bu sonuç da Ta₃Ge için ölçülen deneysel süperiletkenlik sıcaklığı değeri 8.0 K ile uyum içindedir [74].

Tablo 3.6. Kübik Ta₃Ge için farklı Coulomb itme potansiyeli (μ^*) değerlerine karşılık gelen süperiletkenlik geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri ile elektron-fonon etkileşim parametresi (λ) ve logaritmik ortalama fonon frekansı (ω_{ln}).

μ^*	ω_{ln} (K)	λ	T_c (K)
0.10	123.05	1.083	9.625
0.11	123.05	1.083	9.211
0.12	123.05	1.083	8.800
0.13	123.05	1.083	8.392
0.14	123.05	1.083	7.989
0.15	123.05	1.083	7.589
0.16	123.05	1.083	7.195

BÖLÜM 4. TARTIŞMA VE ÖNERİLER

Ta₃Ge bileşiğinin kübik kristal yapısı literatürde ilk defa bu tez kapsamında teorik olarak incelenmiştir. Ta₃Ge'nin yapısal özellikleri incelendiğinde örgü sabiti 5.172 Å ve hacim modülü ise 183,8 GPa olarak hesaplanmıştır. Ta₃Ge için elektronik özelliklerin incelenmesi sonucunda, diğer A15 tipi malzemelere benzer şekilde metalik bir yapıya sahip olduğu bulunmuştur. Elektronik durum yoğunluğu grafiğinden Fermi seviyesine yakın bölgelerde baskın bir şekilde Ta atomlarının 5d orbitallerinin etkili olduğu sonucuna ulaşılmıştır. Ayrıca yine aynı orbitallerin Ta₃Ge'nin iletkenlik bantlarının oluşumunda da önemli bir rol oynadığı görülmüştür. Kübik kristal yapıya sahip Ta₃Ge'nin elastik özellikleri üzerine yapılan çalışmalar sonucunda, bu yapının mekanik olarak kararlı olduğu bulunmuştur. Hesaplanan elastik sabitler kullanılarak elde edilen mekanik sabitler kayma modülü ve Young modülü sırasıyla 69.4 GPa ve 185.4 GPa olarak hesaplanmıştır. Bunun yanı sıra malzemelerin kırılma ya da esnek bir yapıya sahip olup olmadıklarını belirleyebilmek için bir fikir verebilen Cauchy basıncı, Poisson oranı ve B_H/G_H oranları da hesaplanmış ve her üç parametreye göre de kübik Ta₃Ge'nin esnek bir yapıya sahip olduğu sonucuna ulaşılmıştır. Bu sonuç kübik yapıya sahip Ta₃Ge'nin endüstriyel uygulamalar için kullanışlı olabileceği fikrini vermiştir. Ta₃Ge için elastik özellikler kullanılarak Debye sıcaklığı ve erime sıcaklığı da sırasıyla, 277.74 K ve 2457.79 ± 300 K olarak hesaplanmıştır. Kübik kristal yapıya sahip Ta₃Ge için fonon dispersiyon grafiği incelendiğinde, Ta ve Ge atomlarının arasında büyük bir kütle farkı olmasına rağmen bir boşluk bölgesi olmadığı görülmüştür. Ayrıca en yüksek enerjili optik fonon modunun oluşumunda da büyük kütleli olmasına rağmen Ta atomlarının çok baskın bir şekilde rol oynadıkları sonucuna ulaşılmıştır. Ta₃Ge'nin fonon özelliklerinde elde edilen bu sonuçlar, Ta atomlarının kristal yapı içindeki sayısal fazlalığı ve güçlü bağ yapısıyla açıklanmaya çalışılmıştır. Tez kapsamında incelenen kübik Ta₃Ge'nin son olarak süperiletkenlik özellikleri

araştırılmıştır. Bu kapsamda logaritmik ortalama fonon frekansı 123.05 K ve elektron-fonon etkileşim parametresi 1.083 olarak hesaplanmıştır. Ayrıca elektron-fonon etkileşim parametresine en büyük katkının 1.5 THz ile 3.6 THz arasındaki fonon modlarından geldiği görülmüştür. Bu frekans bölgesinde Ta atomlarının titreşimlerinin etkili olması ve Fermi seviyesi civarındaki elektronik durum yoğunluğunun oluşumunda yine Ta atomlarının 5d orbitallerinin önemli bir rol oynaması nedeniyle Ta₃Ge'nin süperiletkenlik özelliklerinin daha çok Ta atomlarından kaynaklandığı sonucuna ulaşılmıştır. Ta₃Ge için T_c süperiletkenlik geçiş sıcaklığının yaklaşık olarak $\mu^*=0.13$ değeri için hesaplanan 8.392 K olduğu söylenebilir. Bu sonuç da Ta₃Ge için ölçülen deneysel süperiletkenlik sıcaklığı değeri 8.0 K ile uyum içindedir. Bu veriler ışığında Ta₃Ge bileşiğinin sentezlenmesi halinde süperiletkenlik özelliği gösterebileceği sonucuna ulaşılmıştır. Son olarak Ta₃Ge bileşiğinin deneysel olarak çalışılmasının faydalı olacağı ve bu tez kapsamında elde edilen verilerin yapılacak olan çalışmalara ışık tutacağı umulmaktadır.

KAYNAKÇA

- [1] J. Michel, Leger, Pressure and temperature formation of A_3B compounds, *J. Less-Common Met.* 32 (1973) 181–187.
- [2] G.R. Stewart, Superconductivity in the A15 structure, *Physica. C.* 514 (2015) 28–35.
- [3] D. Dew-Hughes, Superconducting A-15 compounds: a review, *Cryogenics* 15 (1975) 435–454.
- [4] G.F. Hardy, J.K. Hulm, The superconductivity of some transition metal compounds, *Phys. Rev.* 89 (1954) 1004–1016.
- [5] Paul S. Swartz, Evidence for the negative surface energy models of superconductivity in Nb_3Sn , Nb_3Al , V_3Ga , and V_3Si , *Phys. Rev. Lett.* 9 (1962) 448–451.
- [6] L.R. Testardi, Structural instability and superconductivity in A-15 compounds, *Rev. Mod. Phys.* 47 (1975) 637–648.
- [7] L.F. Mattheiss, APW-LCAO band model for A15 compounds, *Phys. Rev. B* 12 (1975) 2161–2180.
- [8] G.S. Knapp, S.D. Bader, Z. Fisk, Phonon properties of A15 superconductors obtained from heat-capacity measurements, *Phys. Rev. B* 13 (1976) 3783–3789.
- [9] A.J. Arko, D.H. Lowndes, F.A. Muller, L.W. Roeland, J. Wolfrat, A.T. van Kessel, H.W. Myron, F.M. Mueller, G.W. Webb, de Haas-van Alphen Effect in the High-Tc A15 Superconductors Nb_3Sn and V_3Si , *Phys. Rev. Lett.* 40 (1978) 1590–1593.
- [10] B.M. Klein, L.L. Boyer, D.A. Papaconstantopoulos, L.F. Mattheiss, Self-consistent augmented-plane-wave electronic-structure calculations for the A15 compounds V_3X and Nb_3X , $X=Al, Ga, Si, Ge, and Sn$, *Phys. Rev. B* 18 (1978) 6411–6438.
- [11] B.M. Klein, L.L. Boyer, D.A. Papaconstantopoulos, Superconducting properties of A15 compounds derived from band-structure results, *Phys. Rev. Lett.* 42 (1979) 530–533.

- [12] A. Junod, T. Jarlborg, J. Muller, Electronic structure, superconductivity, and spin fluctuations in the A15 compounds A_3B : $a=V, Nb$; $B=Ir, Pt, Au$, *Phys. Rev. B* 27 (1983) 1558–1567.
- [13] M. Sundareswari, S. Ramasubramanian, M. Rajagopalan, Elastic and thermodynamical properties of A15 Nb_3X ($X = Al, Ga, In, Sn$ and Sb) compounds – First principles DFT study, *Solid State Commun.* 150 (2010) 2057–2060.
- [14] Wu, Y., Bao, L., Wang, X., Wang, Y., Peng, M., Duan, Y., Insight into structural, electronic, elastic and thermal properties of A15-type Nb_3X ($X=Si, Ge, Sn$ and Pb) compounds. *Materials Today Communications*, 25, 101410, 2020.
- [15] C. Zhang, L. Zhou, Andre Sulpice, J.L. Soubeyrou, X. Tang, C. Verwaerde, G.K. Hoang, Representation of A15 composition and TC in internal-Sn Nb_3Sn superconducting strands, *Sci. China Tech. Sci.* 53 (2010) 3020–3026.
- [16] J. Muller, A15-type superconductors, *Rep. Prog. Phys.* 43 (1980) 641–687.
- [17] C. Paduani, Electronic structure of the A_3B compounds: $A = Nb$; $B = Al, Ga, Ge, Sn$ and In , *Rev. Bras. Fisioter.* 37 (2007) 1073–1076.
- [18] P.V.S. Reddy, V. Kanchana, G. Vaitheeswaran, P. Modak, A.K. Verma, Electronic topological transitions in Nb_3X ($X = Al, Ga, In, Ge$ and Sn) under compression investigated by first principles calculation, *J. Appl. Phys.* 119 (2016).
- [19] R. Zhang, P. Gao, X. Wang, Y. Zhou, First-principles study on elastic and superconducting properties of Nb_3Sn and Nb_3Al under hydrostatic pressure, *AIP Adv.* 5 (2015) 1–9.
- [20] I. Papadimitriou, C. Utton, Ab initio investigation of the intermetallics in the Nb-Sn binary system, *Acta Mater.* 86 (2015) 23–33.
- [21] H.M. Tütüncü, G.P. Srivastava, S. Bağcı, S. Duman, Theoretical examination of whether phonon dispersion in Nb_3Sn is anomalous, *Phys. Rev. B*, 74, 212506, 2006.
- [22] B. Wan, F. Xiao, Y. Zhang, Y. Zhao, L. Wu, J. Zhang, H. Gou, Theoretical study of structural characteristics, mechanical properties and electronic structure of metal ($TM = V, Nb$ and Ta) silicides, *Journal of Alloys and Compounds* 681, 412, 2016.
- [23] R. Murao, M. Kikuchi, T. Atou, K. Kusaba, K. Fukuoka, K. Sugiyama, Y. Syono, T. Kikegawa, Superconducting phase prepared from Ta_3Si under high pressure, *J. Phys. Conf. Ser.* 215 (2010) 012139.

- [24] H.M. Tütüncü, S. Bağcı, G.P. Srivastava, Electronic structure, phonons, and electron-phonon interaction in Mo_3Si , *Phys. Rev. B*, 82, 214510, 2010.
- [25] H.M. Tütüncü, H.Y. Uzunok, G.P. Srivastava, V. Özdemir, G. Uğur, The effect of martensitic phase transition from cubic to tetragonal on the physical properties of V_3Si superconductor, *Intermetallics*, 96, 25, 2018.
- [26] J.O. Willerstrom, The phase transformation in Ta_3Ge 1, *J. of the Less Common Metals*, 86, 85, 1982.
- [27] J.O. Willerstrom, The phase transformation in Ta_3Ge 2, *J. of the Less Common Metals*, 86, 105, 1982.
- [28] Y. Iba, F. Kumasaka, M. Yamabe, Pattern fabrication technique for Ta-Ge amorphous X-ray absorber on a SiC membrane by inductively coupled plasma, *Japanese Journal Of Applied Physics Part 1-Regular Papers Short Notes & Review Papers*, 38, 2164, 1999.
- [29] J.O. Willerstrom, Coordination and bonding in $\text{Fe}_3\text{P-Ti}_3\text{P-V}_3\text{S-Ta}_3\text{As}$ -type compounds-the crystal structures of Hf_3Sb and $\text{h-Ta}_3\text{Ge}$, *J of Solid State Chem.*, 39, 128, 1981.
- [30] A.A.A.P. da Silva, G.C. Coelho, C.A. Nunes, P.A. Suzuki, J.M. Fiorani, N. David, M. Vilasi, *J. of Alloys and Compounds*, 576, 38, 2013.
- [31] Hohenberg, P., Kohn, W., *Phys. Rev. B* 136 864, 1964.
- [32] Kohn, W., Sham, L.J., *Phys. Rev. A* 140 1133, 1965.
- [33] Srivastava G.P., Theoretical modelling of semiconductor surface, microscopic studies of electrons and phonons. World Scientific: Singapore, 1999.
- [34] Srivastava G.P., The physics of phonons. Adam Hilger: Bristol, 1990.
- [35] Baroni S., De Gironcoli, S., Dal Ccarso, A., Giannozzi, P., *Rev. Mod. Phys.* 73 515, 2001.
- [36] Kohn, W., Sham, L.J., Self-consistent equations including Exchange and correlation effects. *Phys. Rev.*, 140, A1133, 1965.
- [37] Ming -Fu, L., Modern semiconductor quantum physics. Chih-Tang S (ed); World Scientific: New York, 1995.
- [38] Payne, M.C., Teter, M.P., Allan, D.C., Arias, T.A., Joannopoulos, J.D., *Rev. of Mod. Phys.*, 64 1045, 1992.
- [39] Giannozzi, P., De Gironcoli, S., Pavone, P., Baroni, S., *Phys. Rev. B* 43 7231, 1991.

- [40] Perdew, J.P., Burke, K., *Int. J. Quant. Chem.* 57 309, 1996.
- [41] Becke, A.D., *Phys. Rev. A* 38 3098, 1988.
- [42] Perdew, J.P., Wang, Y., *Phys. Rev. B* 45 13224 1992.
- [43] Perdew, J.P., Burke, K., Ernzerhof, M., *Phys. Rev. Lett.* 77 3865, 1996.
- [44] Ma, S.K., Brueckner, K.A., *Phys. Rev.* 165 18, 1968.
- [45] Martin, R.M., *Electronic Structure*. Cambridge University Pres: Cambridge, pp. 150-160, 2004.
- [46] White, J.A., Bird, D.M., *Phys. Rev. B*; 50 4954, 1994.
- [47] Harrison, W.A., *Pseudopotentials in the theory of metals*, Benjamin Press.: New York, pp. 336, 1966.
- [48] Cohen, M.L., Heine, V., *Solid state physics*. Seitz F, Turnbull D (ed); Vol: 24 Academic Press: New York, 1970.
- [49] Phillips J. C., Kleinman L., *Phys. Rev.* 116 287, 1959.
- [50] Antoncik, E., *J. Phys. Chem. Solids*, 10 314, 1959.
- [51] Tütüncü, H.M., *Lattice dynamics of semiconductors and their surfaces.*, PhD. Thesis, University of Exeter, 1998.
- [52] Baroni, S., Giannozzi, P., Testa, A., *Phys. Rev. Lett.* 58 1861, 1987.
- [53] McMillan, W., *Transition temperature of strong-coupled superconductors*. *Physical Review*, 167, 331, 1968.
- [54] Allen, P.B., *Neutron spectroscopy of superconductors*. *Physical Review B*, 6, 2577, 1972.
- [55] Giannozzi, P., Baroni, S. Bonini, N., Calandra, M., car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G.L., Cococcioni, M., Dabo, I., *QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software Project for quantum simulations of materials*. *Journal of phys.: Condensed matter* , 21, 395502, 2009
- [56] Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O., Nardelli, M.B., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Cococcioni, M., *Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO*. *Journal of Phys.: Condensed Matter*, 29, 465901, 2017.

- [57] Migdal, A., Interactions between electrons and lattice vibrations in a normal metal. *Sov. Phys. JETP*, 7, 996-1001, 1958.
- [58] Eliashberg, G., Interactions between electrons and lattice vibrations in a superconductor. *Sov. Phys. JETP (Engl. Transl.); (United States)*, 11, 1960.
- [59] Kokalj A., XCrySDen a new program for displaying crystalline structures and electron densities, *J. Mol. Graph. Model.*, 17, 176e179, 1999.
- [60] Chihi, T., Fatmi, M., Guemmaz, M., Parlebas, J.C., Structural and Electronic Properties of Pure Ta, TaNO, and TaZrNO with Ab Initio Calculations. *ISRN Metallurgy*, 2012, 456762, 2012.
- [61] Murnaghan, F., The compressibility of media under extreme pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 30, 244-247, 1944.
- [62] Chihi T., Fatmi M., Ghebouli M.A., Ab initio study of some fundamental properties of the M_3X ($M=Cr, V$; $X=Si, Ge$) compounds, *Physica B*, 407, 3591–3595, 2012.
- [63] Wallbaum H.J., Über intermetallische Germaniumverbindungen, *Naturwissenschaften*, 32, 76, 1944. Narlikar, A.V., Ekbote, S.N., *Superconductivity and Superconducting Materials*. South Asian Publishers, Delhi 1983.
- [64] Jain A., Ong S.P., Hautier G., Chen W., Richards W.D., Dacek S., Cholia S., Gunter D., Skinner D., Ceder G., Persson K.A., The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation *APL Materials*, 1(1), 011002, 2013 (<https://materialsproject.org/materials/mp-1221/#electronic-structure>)
- [65] Born, M., Huang, K., *Dynamical Theory of Crystal Lattices*. Oxford University Press, Oxford, 1998.
- [66] He, D.G.; Lin, Y.C.; Jiang, X.Y.; Yin, L.X.; Wang, L.H.; Wu, Q. Dissolution mechanisms and kinetics of phase in an aged Ni-based superalloy in hot deformation process. *Mater. Des.*, 156, 262–271. 2018,
- [67] Pettifor, D.G. Theoretical predictions of structure and related properties of intermetallics. *Mater. Sci. Technol.* 8, 345–349, 1992.
- [68] Voigt, W., *Lehrbuch der kristallphysik*. Vol. 962. Teubner Leipzig, 1928.
- [69] Reuss, A., Calculation of the flow limits of mixed crystals on the basis of the plasticity of monocrystals. *Z. Angew. Math. Mech.*, 9, 49–58, 1929.
- [70] Hill, R., The elastic behaviour of a crystalline aggregate. *Proc. Phys. Soc.*, A65,349, 1952.

- [71] Fine, M.E., Brown, L.D., Marcus, H.L., Elastic constants versus melting temperature in Metals. *Scr. Metall. Mater.*, 18, 951–956, 1984.
- [72] Allen, P.B., Dynes, R., Transition temperature of strong-coupled superconductors reanalyzed. *Phys. Rev. B*, 12, 905, 1975.
- [73] Allen, P., Dynes, R., Superconductivity at very strong coupling. *Journal of Phys. C: Solid State Phys.*, 8, L158, 1975.
- [74] Narlikar A. V., *Superconductors*, Oxford University Press, United Kingdom, p. 128,129 (2014).



ÖZGEÇMİŞ

Adı Soyadı : Murat TEPEÇINAR

ÖĞRENİM DURUMU

Derece	Eğitim Birimi	Mezuniyet Yılı
Yüksek Lisans	Sakarya Üniversitesi / Fen Bilimleri Enstitüsü / Fizik Bölümü	Devam ediyor
Lisans	Sakarya Üniversitesi / Fen-Edebiyat Fakültesi / Fizik Bölümü	2004
Lise	Akyazı Lisesi	1995

İŞ DENEYİMİ

Yıl	Yer	Görev
2020-Halen	Sakarya Büyükşehir Belediyesi	Kamu Görevlisi
2009-2020	Akyazı Belediyesi	Kamu Görevlisi
2005-2009	Özel Akyazı Başarı Dershanesi	Fizik Öğretmeni

YABANCI DİL

İngilizce

HOBİLER

Kitap Okumak, Gezmek, Spor yapmak.