

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BAZI Nb ZENGİNİ A15 TİPİ MATERYALLERİN
SÜPERİLETKENLİK MEKANİZMASININ TEORİK OLARAK
ARAŞTIRILMASI

DOKTORA TEZİ

Fatih KURTULUŞ

Fizik Anabilim Dalı

TEMMUZ 2024

T.C.
SAKARYA ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

BAZI Nb ZENGİNİ A15 TİPİ MATERYALLERİN
SÜPERİLETKENLİK MEKANİZMASININ TEORİK OLARAK
ARAŞTIRILMASI

DOKTORA TEZİ

Fatih KURTULUŞ

Fizik Anabilim Dalı

Tez Danışmanı: Doç. Dr. Sadık BAĞCI

TEMMUZ 2024

Fatih KURTULUŞ tarafından hazırlanan “Bazı Nb Zengini A15 Tipi Materyallerin Süperiletkenlik Mekanizmasının Teorik Olarak Araştırılması” adlı tez çalışması 29.07.2024 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda Doktora tezi olarak kabul edilmiştir.

Tez Jürisi

Jüri Başkanı :	Prof. Dr. Hüseyin Murat TÜTÜNCÜ Sakarya Üniversitesi	
Jüri Üyesi :	Doç. Dr. Sadık BAĞCI (Danışman) Sakarya Üniversitesi	
Jüri Üyesi :	Prof. Dr. Hüseyin ALTUNDAĞ Sakarya Üniversitesi	
Jüri Üyesi :	Doç. Dr. Halil ARSLAN Sakarya Uygulamalı Bilimler Üniversitesi	
Jüri Üyesi :	Doç. Dr. Güldem ÜRER ÖZBİLEN Sakarya Uygulamalı Bilimler Üniversitesi	



ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ

Sakarya Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Lisansüstü Eğitim-Öğretim Yönetmeliğine ve Yükseköğretim Kurumları Bilimsel Araştırma ve Yayın Etiği Yönergesine uygun olarak hazırlamış olduğum “Bazı A15 Tipi Materyallerin Süperiletkenlik Mekanizmasının Teorik Olarak Araştırılması” başlıklı tezin bana ait, özgün bir çalışma olduğunu; çalışmamın tüm aşamalarında yukarıda belirtilen yönetmelik ve yönergeye uygun davrandığımı, tezin içerdiği yenilik ve sonuçları başka bir yerden almadığımı, tezde kullandığım eserleri usulüne göre kaynak olarak gösterdiğimi, bu tezi başka bir bilim kuruluna akademik amaç ve unvan almak amacıyla vermediğimi ve 20.04.2016 tarihli Resmi Gazete’de yayımlanan Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliğinin 9/2 ve 22/2 maddeleri gereğince Sakarya Üniversitesi’nin abonesi olduğu intihal yazılım programı kullanılarak Enstitü tarafından belirlenmiş ölçütlere uygun rapor alındığını, çalışmamla ilgili yaptığım bu beyana aykırı bir durumun ortaya çıkması halinde doğabilecek her türlü hukuki sorumluluğu kabul ettiğimi beyan ederim.

29/07/2024

imza

Fatih KURTULUŞ





Eşime ve çocuklarıma ...



TEŞEKKÜR

Doktora eğitimim boyunca her an yanımda olan, tez konumu seçmekten bilimsel yeteneklerimi geliştirmeye kadar olan tüm süreçte bana her türlü destek ve imkanı sunan, değerli zamanını, bilgi ve önerilerini benimle paylaşan tez danışmanım sayın Doç. Dr. Sadık Bağcı'ya teşekkür ederim.

Doktora süresi boyunca bana her türlü yardımda bulunan kıymetli hocam Prof. Dr. Hüseyin Murat Tütüncü'ye ve bu süreçte birlikte çalıştığımız bilgi ve desteğini benden hiçbir zaman esirgemeyen değerli dostum Doç. Dr. Ertuğrul Karaca'ya ve yine yardımlarını bir an olsun esirgemeyen Doç. Dr. H. Yasin Uzunok'a ayrıca teşekkür ederim. Beni çalışmalarımda sürekli motive eden kıymetli dostlarım Prof. Dr. Özer Uygun ve Prof. Dr. Mustafa Can'a, ayrıca tüm bu zamanlarda gösterdikleri sabır ve anlayışları için çalışma arkadaşlarım Arifiye meslek yüksekokulu müdürü Doç. Dr. Emre Yılmaz'a, müdür yardımcısı Dr. Öğr. Üyesi Samet Çelebi'ye ve bilgi ve deneyimlerinden istifade ettiğim tüm hocalarıma ve arkadaşlarıma da içtenlikle teşekkür ederim.

Bu çalışma esnasında kullanmış olduğumuz Quantum Espresso Programını tasarlayan, geliştiren ve sürekli çeşitli yenilikler ekleyerek bizim bu çalışmaları yapabilmemize olanak sağlayan tüm araştırmacılara ve çalışmalarımız için bizlere nezih ve güvenilir bir çalışma ortamı sağladığı için BİMAYAM yetkililerine de sonsuz teşekkür ederim.

Maddi ve manevi desteklerini hiçbir zaman benden esirgemeyen sevgili anne ve babama, ayrıca tüm bu zaman boyunca bana olan desteklerini bir an bile benden esirgemeyen ve onların sevgi ve desteği olmadan bu başarıya asla ulaşamayacağım sevgili eşim Nagihan'a ve gözlerimin nuru kızlarım Kayra Betül ve Ayşe Dila'ya teşekkürü bir borç bilirim.

Fatih KURTULUŞ



İÇİNDEKİLER

Sayfa

ETİK İLKE VE KURALLARA UYGUNLUK BEYANNAMESİ	v
TEŞEKKÜR	ix
İÇİNDEKİLER	xi
KISALTMALAR	xiii
SİMGELER	xv
TABLO LİSTESİ	xvii
ŞEKİL LİSTESİ	xix
ÖZET	xxi
SUMMARY	xxv
1. GİRİŞ	1
2. TEORİ	11
2.1. Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT)	11
2.1.1. Giriş	11
2.1.2. Thomas-Fermi teorisi	11
2.1.3. Hohenberg ve Kohn teoremleri	12
2.1.4. Kohn-Sham teoremi	14
2.1.5. Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA)	16
2.1.6. Sözde (Pseudo) potansiyel metodu	16
2.2. Katıların Örgü Dinamiği	18
2.2.1. Örgü dinamiği ve kuvvet sabitleri	18
2.2.2. Örgü dinamiğinde lineer bağımlılık	21
2.3. Teorinin uygulanışı	23
2.3.1. Kristal toplam enerji hesaplaması	23
2.3.2. Kristal yapı parametresinin hesaplanması	24
2.3.3. Elektronik enerji band yapısı hesaplamaları	25
2.3.4. Elastik özelliklerin belirlenmesi	26
2.3.5. Ab initio örgü dinamiği teorisi	27
2.3.6. Süperiletkenlik özellikleri için kullanılan teori	28
3. ARAŞTIRMA SONUÇLARI	31
3.1. Giriş	31
3.2. Nb ₃ Os Bileşiği	32
3.2.1. Nb ₃ Os bileşiğinin yapısal özellikleri	32
3.2.2. Nb ₃ Os bileşiğinin elektronik özellikleri	33
3.2.3. Nb ₃ Os bileşiğinin elastik ve mekanik özellikleri	36
3.2.4. Nb ₃ Os bileşiğinin titreşim özellikleri	37
3.2.5. Nb ₃ Os bileşiğinin süperiletkenlik özellikleri	40
3.3. Nb ₃ Ge Bileşiği	43
3.3.1. Nb ₃ Ge bileşiğinin yapısal özellikleri	43
3.3.2. Nb ₃ Ge bileşiğinin elektronik özellikleri	43
3.3.3. Nb ₃ Ge bileşiğinin elastik ve mekanik özellikleri	46
3.3.4. Nb ₃ Ge bileşiğinin titreşim özellikleri	48

3.3.5. Nb ₃ Ge bileşiğinin süperiletkenlik özellikleri	50
3.4. Nb ₃ Sb Bileşiği	52
3.4.1. Nb ₃ Sb bileşiğinin yapısal özellikleri	52
3.4.2. Nb ₃ Sb bileşiğinin elektronik özellikleri	53
3.4.3. Nb ₃ Sb bileşiğinin elastik ve mekanik özellikleri	55
3.4.4. Nb ₃ Sb bileşiğinin titreşim özellikleri	57
3.4.5. Nb ₃ Sb bileşiğinin süperiletkenlik özellikleri.....	60
3.5. Nb ₃ Rh Bileşiği.....	61
3.5.1. Nb ₃ Rh bileşiğinin yapısal özellikleri	61
3.5.2. Nb ₃ Rh bileşiğinin elektronik özellikleri.....	62
3.5.3. Nb ₃ Rh bileşiğinin elastik ve mekanik özellikleri.....	65
3.5.4. Nb ₃ Rh bileşiğinin titreşim özellikleri.....	67
3.5.5. Nb ₃ Rh bileşiğinin süperiletkenlik özellikleri	70
3.6. Nb ₃ Ir Bileşiği.....	71
3.6.1. Nb ₃ Ir bileşiğinin yapısal özellikleri.....	71
3.6.2. Nb ₃ Ir bileşiğinin elektronik özellikleri.....	72
3.6.3. Nb ₃ Ir bileşiğinin elastik ve mekanik özellikleri.....	74
3.6.4. Nb ₃ Ir bileşiğinin titreşim özellikleri.....	76
3.6.5. Nb ₃ Ir bileşiğinin süperiletkenlik özellikleri	79
3.7. Nb ₃ Pt Bileşiği	80
3.7.1. Nb ₃ Pt bileşiğinin yapısal özellikleri	80
3.7.2. Nb ₃ Pt bileşiğinin elektronik özellikleri	81
3.7.3. Nb ₃ Pt bileşiğinin elastik ve mekanik özellikleri	84
3.7.4. Nb ₃ Pt bileşiğinin titreşim özellikleri	86
3.7.5. Nb ₃ Pt bileşiğinin süperiletkenlik özellikleri	88
4. SONUÇ VE TARTIŞMA.....	91
KAYNAKLAR.....	95
ÖZGEÇMİŞ.....	105

KISALTMALAR

APW	: Geniřletilmiş Düzlem Dalga
$\alpha^2F(\omega)$	: Eliashberg spektral fonksiyonu
BCS	: Bardeen-Cooper-Schrieffer
B	: Bulk Modülü (GPa)
C_p	: Cauchy basıncı (GPa) ($C_p = C_{12} - C_{44}$)
C_{11}, C_{12}, C_{44}	: Kúbik yapı için elastik sabitler (GPa)
DFT	: Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
DOS	: Durum yoğunluğu
E	: Elastisite Modülü (GPa)
EC	: Titreřim modu öz karakterleri
FP-LAPW	: Tam potansiyel lineer geniřletilmiş düzlem dalga
G	: Kayma modülü (GPa)
GGA	: Genelleřtirilmiş Gradyan Yaklařımı
IBZ	: İndirgenmeyen Brillouin bölgesi
QE	: Quantum Espresso
LDA	: Yerel Yoğunluk Yaklařımı
LA	: Boyuna akustik mod
LO	: Boyuna optik mod
NMR	: Nükleer Manyetik Rezonans
$N(E_F)$	: Fermi seviyesi durum yoğunluğu (Durum/(eV.atom))
ν	: Poisson oranı
PBE	: Perdew-Burke-Ernzerhof
PhDOS	: Toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu
TA	: Enine akustik mod
TO	: Enine optik mod
XES	: X-ışını emisyon spektroskopisi
XPS	: X-ışını fotoemisyon spektrumu
VRH	: Voight-Reuss-Hill



SİMGELER

$\text{\AA}$	: Uzunluk birimi [10^{-10} m]
eV	: Elektron-Volt
ϕ	: Sözde dalga fonksiyonu
γ	: Elektronik özgül ısı katsayısı [mJ/mol.K^2]
$\hat{H}_{KS}$	: Kohn-Sham hamiltoniyeni
h	: Planck sabiti [6.62×10^{-34} j.s]
$\hbar$	: İndirgenmiş Planck Sabiti [$1.054571726 \times 10^{-34}$ j.s]
$\vec{q}$	: Dalga Vektörü
K	: Kelvin
k_B	: Boltzmann sabiti [1.38×10^{-23} J/K]
λ	: Elektron-fonon etkileşim parametresi
M	: Molekül ağırlığı
∇	: Nabla operatörü
n	: Atom sayısı
N_A	: Avagadro sayısı [6.02×10^{23}]
$\psi_o(\mathbf{r})$	: Temel durum dalga fonksiyonu
Ry	: Rydberg
$\rho(\mathbf{r})$	: Elektron yoğunluğu
$\rho_o(\mathbf{r})$	: Temel durum elektron yoğunluğu
T_c	: Süperiletken geçiş sıcaklıkları [K]
THz	: Terahertz [10^{12} s^{-1}]
Θ_D	: Debye sıcaklığı [K]
V_H	: Elektron-elektron Coulomb etkileşimi
V_{KS}	: Kohn-Sham potansiyeli
V_{PS}	: Sözde dalga potansiyeli
V_{XC}	: Tek elektron için değiş tokuş potansiyeli
V_M	: Elastik ses dalgası hızı
W_{ln}	: Ortalama logaritmik fonon frekansı [K]



TABLO LİSTESİ

Sayfa

Tablo 3.1. Kübik Nb ₃ Os bileşiği için elde edilen yapısal parametreler ve bu parametrelerin deneysel ve teorik veriler ile karşılaştırılması.	33
Tablo 3.2. Kübik Nb ₃ Os bileşiği için hesaplanan elastik sabitler, elastik modüller ve bu değerlerin teorik verilerle karşılaştırılması.	36
Tablo 3.3. Nb ₃ Os için Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν) ve her moda karşılık hesaplanan elektron fonon etkileşim parametreleri (λ).	38
Tablo 3.4. Nb ₃ Os malzemesi için Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri.	42
Tablo 3.5. Kübik Nb ₃ Ge bileşiği için elde edilen yapısal parametreler ve bu parametrelerin deneysel ve teorik veriler ile karşılaştırılması.	43
Tablo 3.6. Kübik Nb ₃ Ge bileşiği için hesaplanan elastik sabitler, elastik modüller ve bu değerlerin deneysel ve teorik verilerle karşılaştırılması.	46
Tablo 3.7. Nb ₃ Ge için hesaplanan ses elastik dalga hızları, Debye sıcaklığı değerleri ve bunların mevcut teorik ve deneysel verilerle karşılaştırılması.	48
Tablo 3.8. Nb ₃ Ge bileşiği için hesaplanan Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν), her biri için hesaplanan elektron fonon etkileşim parametreleri (λ) ve titreşim modu öz karakterleri (EC).	49
Tablo 3.9. Nb ₃ Ge malzemesi için Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri.	52
Tablo 3.10. Kübik Nb ₃ Sb bileşiği için elde edilen yapısal parametreler ve bu parametrelerin deneysel ve teorik veriler ile karşılaştırılması.	52
Tablo 3.11. Kübik Nb ₃ Sb bileşiği için hesaplanan elastik sabitler, elastik modüller ve bu değerlerin deneysel ve teorik verilerle karşılaştırılması.	56
Tablo 3.12. Nb ₃ Sb için hesaplanan ses elastik dalga hızları, Debye sıcaklığı değerleri ve bunların mevcut deneysel verilerle karşılaştırılması.	57
Tablo 3.13. Nb ₃ Sb bileşiği için hesaplanan Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν), her biri için hesaplanan elektron fonon etkileşim parametreleri (λ) ve titreşim modu öz karakterleri (EC).	58
Tablo 3.14. Nb ₃ Sb malzemesi için Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri.	61
Tablo 3.15. Kübik Nb ₃ Rh bileşiği için elde edilen yapısal parametreler ve bu parametrelerin deneysel ve teorik veriler ile karşılaştırılması.	62
Tablo 3.16. Kübik Nb ₃ Rh bileşiği için hesaplanan elastik sabitler, elastik modüller ve bu değerlerin deneysel ve teorik verilerle karşılaştırılması.	65
Tablo 3.17. Nb ₃ Rh için hesaplanan ses elastik dalga hızları, Debye sıcaklığı değerleri ve bunların mevcut deneysel verilerle karşılaştırılması.	67

Tablo 3.18. Nb ₃ Rh bileşigi için hesaplanan Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν), her biri için hesaplanan elektron fonon etkileşim parametreleri (λ) ve titreşim modu öz karakterleri (EC).	67
Tablo 3.19. Nb ₃ Rh malzemesi için Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri.	71
Tablo 3.20. Kübik Nb ₃ Ir bileşigi için elde edilen yapısal parametreler ve bu parametrelerin deneysel ve teorik veriler ile karşılaştırılması.	71
Tablo 3.21. Kübik Nb ₃ Ir bileşigi için hesaplanan elastik sabitler, elastik modüller ve bu değerlerin deneysel ve teorik verilerle karşılaştırılması.	75
Tablo 3.22. Nb ₃ Ir için hesaplanan ses elastik dalga hızları, Debye sıcaklığı değerleri ve bunların mevcut deneysel verilerle karşılaştırılması.	76
Tablo 3.23. Nb ₃ Ir bileşigi için hesaplanan Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν), her biri için hesaplanan elektron fonon etkileşim parametreleri (λ) ve titreşim modu öz karakterleri (EC).	77
Tablo 3.24. Nb ₃ Ir malzemesi için Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri	80
Tablo 3.25. Kübik Nb ₃ Pt bileşigi için elde edilen yapısal parametreler ve bu parametrelerin deneysel ve teorik veriler ile karşılaştırılması.	81
Tablo 3.26. Kübik Nb ₃ Pt bileşigi için hesaplanan elastik sabitler, elastik modüller ve bu değerlerin deneysel ve teorik verilerle karşılaştırılması.	84
Tablo 3.27. Nb ₃ Pt için hesaplanan ses elastik dalga hızları, Debye sıcaklığı değerleri ve bunların mevcut deneysel verilerle karşılaştırılması.	86
Tablo 3.28. Nb ₃ Pt bileşigi için hesaplanan Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν), her biri için hesaplanan elektron fonon etkileşim parametreleri (λ) ve titreşim modu öz karakterleri (EC).	86
Tablo 3.29. Nb ₃ Pt malzemesi için Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri	90

ŞEKİL LİSTESİ

Sayfa

Şekil 2.1. Pseudo dalga fonksiyonu ve potansiyeli grafiği.	18
Şekil 3.1. a) Nb ₃ X bileşikleri için kristal yapının gösterimi. b) Basit kübik örgünün ilk Brillouin bölgesindeki yüksek simetri noktaları.	31
Şekil 3.2. Nb ₃ Os bileşiği için enerjinin örgü sabitine bağlı grafiği.	32
Şekil 3.3. Nb ₃ Os bileşiği için elektronik band yapısı grafiği.	34
Şekil 3.4. Nb ₃ Os bileşiği için toplam ve kısmi elektronik durum yoğunluğu.	35
Şekil 3.5. Nb ₃ Os bileşiği için hesaplanan fonon dispersiyon eğrileri.	38
Şekil 3.6. Nb ₃ Os bileşiği için elde edilen fonon durum yoğunluğu ve en yüksek yoğunluklu piki üreten fonon modlarının vurgulandığı fonon dispersiyon grafiği.	40
Şekil 3.7. Nb ₃ Os için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) (kırmızı çizgiler) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın (mavi çizgiler) frekans değişimleri.	41
Şekil 3.8. Nb ₃ Ge bileşiğinin elektronik band yapısı.	44
Şekil 3.9. Nb ₃ Ge bileşiği için toplam ve kısmi elektronik durum yoğunluğu.	45
Şekil 3.10. Nb ₃ Ge bileşiği için hesaplanan fonon dispersiyon eğrileri.	49
Şekil 3.11. Nb ₃ Ge bileşiğinin toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu.	50
Şekil 3.12. Nb ₃ Ge için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) (kırmızı çizgiler) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın (mavi çizgiler) frekans değişimleri.	51
Şekil 3.13. Nb ₃ Sb bileşiğinin elektronik band yapısı.	53
Şekil 3.14. Nb ₃ Sb bileşiğinin toplam ve kısmi elektronik durum yoğunluğu.	54
Şekil 3.15. Nb ₃ Sb bileşiği için hesaplanan fonon dispersiyon eğrileri. Mavi kareler deneysel sonuçlardır.	59
Şekil 3.16. Nb ₃ Sb bileşiği için hesaplanan toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu.	60
Şekil 3.17. Nb ₃ Sb için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) (kırmızı çizgiler) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın (mavi çizgiler) frekans değişimleri.	61
Şekil 3.18. Nb ₃ Rh bileşiğinin elektronik band yapısı.	63
Şekil 3.19. Nb ₃ Rh bileşiği için toplam ve kısmi elektronik durum yoğunluğu.	64
Şekil 3.20. Nb ₃ Rh bileşiği için hesaplanan fonon dispersiyon eğrileri.	68
Şekil 3.21. Nb ₃ Rh bileşiğinin toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu.	69
Şekil 3.22. Nb ₃ Rh için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) (kırmızı çizgiler) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın (mavi çizgiler) frekans değişimleri.	70
Şekil 3.23. Nb ₃ Ir bileşiğinin elektronik band yapısı.	72
Şekil 3.24. Nb ₃ Ir bileşiğinin toplam ve kısmi elektronik durum yoğunluğu.	74
Şekil 3.25. Nb ₃ Ir bileşiği için hesaplanan fonon dispersiyon eğrileri.	78
Şekil 3.26. Nb ₃ Ir bileşiğinin toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu.	79

Şekil 3.27. Nb ₃ Ir için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) (kırmızı çizgiler) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın (mavi çizgiler) frekans değişimleri.	80
Şekil 3.28. Nb ₃ Pt bileşiğinin elektronik band yapısı.	82
Şekil 3.29. Nb ₃ Pt bileşiğinin toplam ve kısmi elektronik durum yoğunluğu.	83
Şekil 3.30. Nb ₃ Pt bileşiği için hesaplanan fonon dispersiyon eğrileri.	87
Şekil 3.31. Nb ₃ Pt bileşiği için hesaplanan toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu.	88
Şekil 3.32. Nb ₃ Pt için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) (kırmızı çizgiler) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın (mavi çizgiler) frekans değişimleri.	89



BAZI Nb ZENGİNİ A15 TİPİ MATERYALLERİN SÜPERİLETKENLİK MEKANİZMASININ TEORİK OLARAK ARAŞTIRILMASI

ÖZET

Bilim ve teknolojinin gelişmesi için malzemelerin yapısal, elektronik, elastik ve titreşim özellikleri gibi fiziksel özelliklerin teorik olarak incelenmesi önem arz etmektedir. Bu özelliklerin detaylı olarak incelenmesi malzemelerin teknoloji ve endüstride daha doğru, sağlıklı ve verimli bir şekilde kullanılmasına fayda sağlayacaktır. İlk prensipler üzerine kurulmuş bir yöntem olması sebebiyle son zamanlarda birçok alanda sıklıkla kullanılan ve teorik bir metot olan yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT), malzemelerin temel özelliklerini detaylı şekilde inceleme imkanı veren etkili bir tekniktir. Bu yöntem, deneylerle tutarlı sonuçlar verdiği için araştırmacılar tarafından büyük ilgi görmektedir. Bu sayede, incelenen malzemelerin özellikleri hiçbir deneysel veriye ihtiyaç duyulmadan belirlenebilir. Bilgisayarların gelişmesi ve işlemlerin daha hızlı yapılabilmesi, bu yöntemin daha yaygın bir şekilde kullanılmasına olanak sağlamıştır. Günümüze kadar DFT ile elde edilen teorik hesaplamalar, deneysel verilerle karşılaştırıldığında mükemmel yakın sonuçlar vermektedir. Ayrıca, deneysel çalışmaların yapılamadığı durumlarda da bu yöntem sayesinde taban durum özellikleri belirlenebilir. DFT, günümüzde birçok bilim dalında kullanılan güçlü bir araştırma yöntemidir. Bu metot, araştırmacılara yeni malzemelerin özelliklerini belirleme ve bu malzemeleri kullanarak yeni teknolojiler geliştirme imkanı vermektedir.

Bu tezin amacı kübik A15 yapısına sahip niyobyum bazlı Nb_3X (X: Ge, Sb, Os, Ir, Pt, Rh) bileşiklerinin yapısal, elastik, elektronik, dinamik ve süperiletkenlik özelliklerinin araştırılmasıdır. Nb_3X bileşikleri için geometrik optimizasyon sonucu yapısal parametreler elde edilmiştir. Nb_3X bileşikleri için elde edilen örgü sabitleri sırasıyla Nb_3Ge için 5.169 Å, Nb_3Sb için 5.301 Å, Nb_3Os için 5.17 Å, Nb_3Ir için 5.173 Å, Nb_3Pt için 5.195 Å ve Nb_3Rh için 5.174 Å olarak bulunmuştur. Nb_3X bileşikleri için literatürde daha önce sunulan teorik ve deneysel değerler sırasıyla Nb_3Ge için 5.151 Å ve 5.152 Å, Nb_3Sb için 5.294 Å ve 5.262 Å, Nb_3Os için 5.16 Å ve 5.14 Å, Nb_3Ir için 5.158 Å ve 5.132 Å, Nb_3Pt için 5.189 Å ve 5.156 Å ve Nb_3Rh için 5.182 Å ve 5.115 Å olup elde ettiğimiz sonuçlar ile bu değerler arasında kusursuz bir uyum olduğu tespit edilmiştir. Bu sonuç, yöntemimiz ve yaptığımız hesaplamamızın ne kadar doğru olduğunu kanıtlamaktadır.

Elastik üzerine yapılan hesaplamalar Nb_3X bileşiklerinin sünek, elektronik hesaplamalar ise metalik olduğunu göstermektedir. Ayrıca elektronik özellikler Nb_3X 'in Nb 4d durumlarının Fermi seviyesine yakın durumların elektronik yoğunluğunda önemli bir rol oynadığını göstermektedir. Fermi seviyesi durum yoğunluğu ($N(E_F)$) sırasıyla Nb_3Ge için 1.609 durum/eV.atom, Nb_3Sb için 0.441 durum/eV.atom, Nb_3Os için 0.664 durum/eV.atom, Nb_3Ir için 0.758 durum/eV.atom, Nb_3Pt için 1.032 durum/eV.atom ve Nb_3Rh için 0.709 durum/eV.atom olarak bulunmuştur. Nb_3Ge ve Nb_3Pt 'nin süperiletkenliğe geçiş sıcaklığının incelenen diğer

bileşiklere kıyasla daha büyük olmasının bir nedeni de bu bileşiklerin diğerlerine göre daha büyük $N(E_F)$ değerine sahip olmasıdır.

Elektronik özellikler incelendikten sonra Nb_3X bileşiklerinin elastik sabitleri ve mekanik özellikleri stres-strain yöntemi ve Voight-Reuss-Hill (VRH) yaklaşımı kullanılarak belirlenmiştir. Hesaplanan elastik sabitler incelendiğinde kübik A15 kristal yapısındaki Nb_3X bileşiklerinin Born kriterlerine göre mekanik olarak kararlı olduğu bulunmuştur. Ayrıca elde edilen elastik sabitler aracılığıyla Cauchy basıncı, Poisson oranları ve B_H/G_H oranları kullanılarak Nb_3X bileşiklerinin esneklik ve kırılgenlikleri incelenmiş ve bileşiklerin sünek karakterde olduğu tespit edilmiştir. Nb_3X bileşiklerinin B_H/G_H ve Poisson oranları sıralaması Nb_3Ge bileşiğinin en sünek karakterde olduğunu göstermiştir.

Nb_3X bileşiklerinin yapısal, elektronik ve elastik özelliklerinin araştırılmasına ilaveten titreşim özelliklerinin de detaylı bir şekilde incelenmesi bu tezi yapmamızın amacı olan süperiletkenliğinin kaynağını teorik olarak ortaya koyabilmemiz açısından önemlidir. Nb_3X bileşiklerinin fonon dağılım grafikleri incelendiğinde negatif bir fonon modunun olmaması bileşiklerin A15 kristal yapısının dinamik olarak kararlı olduğunu göstermektedir. Dinamik özellikler, Nb_3X bileşikleri için hesaplanan fonon dağılım grafiğinin, Nb ve X atomları arasındaki önemli kütle farklılıklarına rağmen herhangi bir boşluk içermediğini göstermektedir. Nb_3X için Nb atomlarının titreşimlerinin en yüksek optik fonon modunun oluşumunda önemli bir rol oynadığını gözlemlemek de ilginçtir. Nb_3X için elde edilen fonon modları deneysel sonuçlarla iyi bir uyum içindedir ve hesaplamalarımızın doğruluğunu kanıtlar niteliktedir. Ayrıca düşük frekanslı fonon modlarının, elektron-fonon etkileşim parametresine daha büyük bir katkı sağladığı tespit edilmiştir. Fonon durum yoğunluğu grafikleri incelendiğinde ise Nb_3Ge 'nin çok küçük bir frekans aralığı dışında kalan bölgede ve Nb_3Os 'nin 4.2 THz, Nb_3Pt 'nin 3THz üstündeki bölgede tüm bileşikler için fonon modlarına en büyük katkının Nb atomlarından geldiği sonucuna varılmıştır. Bu sonuç Nb atomlarının süperiletkenlik oluşumunda baskın bir rol oynadığının göstergesidir.

Daha sonra da elektronik ve fonon özellikleri kullanılarak süperiletkenlikle ilgili parametreler elde edilmiştir. Nb_3X bileşikleri için elektron-fonon etkileşim parametreleri sırasıyla Nb_3Ge için 2.056, Nb_3Sb için 0.387, Nb_3Os için 0.41, Nb_3Ir için 0.51, Nb_3Pt için 1.253 ve Nb_3Rh için 0.571 olarak belirlenmiştir. Bu değerler büyükten küçüğe sıralandığında en büyük elektron-fonon etkileşim parametresine ilk olarak Nb_3Ge 'nin daha sonra Nb_3Pt 'nin sahip olduğu ve diğer bileşiklerin bu ikisine kıyasla çok daha küçük değerler aldıkları görülmektedir. Bu değerler arasındaki bu dramatik fark, elektron-fonon etkileşim parametresinin $N(E_F)$ 'den sonra Nb_3Ge ve Nb_3Pt ile diğer bileşikler arasındaki süperiletkenlik sıcaklıklarının neden çok farklı olduğunu anlamaya yardımcı olan başka bir faktördür. Ayrıca Nb_3X bileşiklerinin logaritmik ortalama fonon frekansları (ω_{ln}) sırasıyla Nb_3Ge için 170.58 K, Nb_3Sb için 219.73 K, Nb_3Os için 222.97 K, Nb_3Ir için 222.05K, Nb_3Pt için 128.49 K ve Nb_3Rh için 201.93 K olarak belirlenmiştir. Bu değerler kullanılarak, tahmini süperiletken geçiş sıcaklıkları (T_c) Nb_3Ge için 23.37 K, Nb_3Sb için 0.31 K, Nb_3Os için 1.05 K, Nb_3Ir için 1.8 K, Nb_3Pt için 10.82 K ve Nb_3Rh için 2.68 K olarak bulunmuştur. Nb_3X bileşikleri için literatürdeki T_c değerleri sırasıyla Nb_3Ge için 23.2 K, Nb_3Sb için 0.20 K, Nb_3Os için 1.05 K ve 0.943 K, Nb_3Ir için 1.7 K, Nb_3Pt için 10.9 K ve Nb_3Rh için 2.64 K olup ölçülen bu deneysel değerler elde ettiğimiz sonuçlarla mükemmel bir uyum göstermektedir.

Bazı nb zengini A15 tipi materyallerin süperiletkenlik mekanizmasının teorik olarak araştırılması adlı çalışmanın sonucunda hesaplanan bu parametreler ile kübik A15 yapısındaki niyobyum bazlı bu bileşiklerin süperiletkenlik mekanizmasının anlaşılması hedeflenmiştir. Yapısal parametreler önceki deneysel değerlerle uyumludur. Elektronik yapı parametreleri, bu malzemeler için 3 boyutlu bir metalik karakter önermektedir. Nb_3X bileşikleri için hesaplanan elastik sabitler ve Born kriterleri kullanılarak, Nb_3X bileşiklerinin kübik A15 kristal yapısında mekanik olarak kararlı olduğu bulunmuştur. B_H/G_H ve Poisson oranları sıralaması $Nb_3Ge > Nb_3Os > Nb_3Pt > Nb_3Rh > Nb_3Ir > Nb_3Sb$ şeklindedir. İncelenen bileşiklerin fonon dağılım grafiklerinde negatif bir fonon modunun olmaması, bileşiklerin A15 kristal yapısının dinamik olarak kararlı olduğunu göstermiştir. Ayrıca, Nb_3X bileşikleri için hesaplanan fonon modları, önceki deneysel sonuçlarla yüksek uyum göstermiş ve hesaplamalarımızın doğruluğunu kanıtlamıştır. Düşük frekanslı fonon modlarının elektron-fonon etkileşim parametresine daha fazla katkı sağladığı ve Nb_3X bileşiklerinin tamamı için Nb atomlarının süperiletkenlik oluşumunda baskın bir rol oynadığı tespit edilmiştir. En büyük elektron-fonon etkileşim parametresine ilk olarak Nb_3Ge 'nin daha sonra Nb_3Pt 'nin sahip olduğu ve diğer bileşiklerin bu ikisine kıyasla çok daha küçük değerler aldıkları görülmüştür. Elektron-fonon etkileşim parametresi ve $N(E_F)$ değerleri arasındaki fark Nb_3Ge ve Nb_3Pt ile diğer bileşikler arasındaki süperiletkenlik sıcaklıklarının neden çok farklı olduğunu ortaya koymaktadır. Nb_3X bileşiklerinin T_c değerleri elde edilmiş ve deneysel değerlerle mükemmel bir uyum içinde olduğu görülmüştür.



THE THEORETICAL INVESTIGATION OF THE SUPERCONDUCTIVITY MECHANISM OF SOME Nb RICH A15 TYPE MATERIALS

SUMMARY

The theoretical study of materials' structural, electronic, elastic, and vibrational properties is essential for the progress of science and technology. Detailed examination of these properties will benefit the more accurate, healthy, and efficient use of materials in technology and industry. In recent years, a theoretical method known as Density Functional Theory (DFT) has found extensive application in various fields, including physics, chemistry, geology, materials science. DFT is an effective method that allows for a detailed examination of the fundamental properties of materials. This method has garnered significant interest from researchers due to its ability to produce results consistent with experimental findings. The reason for DFT's popularity lies in its basis on first principles. As a result, the properties of the materials under investigation can be determined without the need for any experimental data. The progress in computing capabilities and computational prowess more quickly have facilitated the more widespread use of this method. To date, theoretical calculations obtained with DFT have provided results that are nearly perfect when compared with experimental data. Additionally, in situations where experimental studies cannot be conducted, this method allows for the determination of ground-state properties. Today, DFT is a powerful research method used in many scientific disciplines. This method enables researchers to determine the properties of new materials and to develop new technologies.

The objective of this thesis is to examine the superconducting characteristics of niobium-based Nb_3X (X : Ge, Sb, Os, Ir, Pt, Rh) compounds with a cubic A15 structure. The lattice constant was found for Nb_3X compounds by geometrical optimisation. The lattice constants for the Nb_3X compounds were found to be 5.169 Å for Nb_3Ge , 5.301 Å for Nb_3Sb , 5.17 Å for Nb_3Os , 5.173 Å for Nb_3Ir , 5.195 Å for Nb_3Pt , and 5.174 Å for Nb_3Rh . The previously reported theoretical and experimental values for Nb_3X compounds in the literature are as follows: 5.151 Å and 5.152 Å for Nb_3Ge , 5.294 Å and 5.262 Å for Nb_3Sb , 5.16 Å and 5.14 Å for Nb_3Os , 5.158 Å and 5.132 Å for Nb_3Ir , 5.189 Å and 5.156 Å for Nb_3Pt , and 5.182 Å and 5.115 Å for Nb_3Rh . Comparing these values with our results, we found an excellent agreement. This demonstrates the validity of the selected theoretical approach and the computations conducted for the structural parameters.

Calculations on elasticity show that Nb_3X compounds are ductile, while electronic calculations show that they are metallic. Also the electronic properties show that the Nb 4d states play an essential role in the electronic near the Fermi level density of states. At the Fermi level ($N(E_F)$) the density of states detected as 1.609 states/eV.atom for Nb_3Ge , 0.441 states/eV.atom for Nb_3Sb , 0.664 states/eV.atom for Nb_3Os , 0.758 states/eV.atom for Nb_3Ir , 1.032 states/eV.atom for Nb_3Pt , and 0.709 states/eV.atom for Nb_3Rh . The higher superconducting transition temperatures of Nb_3Ge and Nb_3Pt compared to the other compounds can be attributed to their higher $N(E_F)$ values.

Following the evaluation of electronic properties, the stress-strain method and the Voight-Reuss-Hill (VRH) approach were utilized to ascertain the elastic constants and mechanical characteristics of the Nb₃X compounds. The calculated elastic constants indicate that the Nb₃X compounds with a cubic A15 crystal structure are mechanically stable according to the Born criteria. Additionally, using the obtained elastic constants, the flexibility and brittleness of the Nb₃X compounds were examined through Cauchy pressure, Poisson's ratios, and B_H/G_H ratios. It was determined that the compounds exhibit a ductile nature. The B_H/G_H and Poisson's ratios for the Nb₃X compounds indicate that the Nb₃Ge compound has the most ductile character.

Alongside investigating the structural, elastic and electronic features of Nb₃X compounds, it is crucial to study their vibrational properties in detail to theoretically elucidate the source of superconductivity, which is the aim of this thesis. When the phonon dispersion graphs of Nb₃X compounds are examined, the absence of a negative phonon mode indicates that the A15 crystal structure of the compounds is dynamically stable. The dynamic properties reveal that the phonon dispersion curves calculated for Nb₃X compounds do not contain any gaps despite the significant mass differences between Nb and X atoms. It is noteworthy the way in which the vibrations of Nb atoms are crucial in shaping the peak optical phonon mode in Nb₃X compounds. The calculated phonon modes for Nb₃X closely match the experimental results, further proving the accuracy for our calculations. Additionally, it was determined that the low-frequency phonon modes significantly influence the electron phonon coupling parameter. Phonon density of state plots of Nb₃X were analyzed and it was concluded that the largest contribution phonon modes for all compounds come from Nb atoms in the region outside a very small frequency range for Nb₃Ge and in the region above 4.2 THz and 3THz for Nb₃Os and Nb₃Pt, respectively. This result demonstrates that Nb atoms appear to play a predominant role in the superconductivity of these compounds.

Subsequently, parameters related to superconductivity were obtained utilizing electronic and phonon features. Electron phonon coupling parameters for Nb₃X compounds were determined as follows: 2.056 for Nb₃Ge, 0.387 for Nb₃Sb, 0.41 for Nb₃Os, 0.51 for Nb₃Ir, 1.253 for Nb₃Pt, and 0.571 for Nb₃Rh. When these values are ordered from largest to smallest, it is evident that Nb₃Ge has the highest electron-phonon interaction parameter, followed by Nb₃Pt, with the other compounds having significantly lower values. This dramatic difference helps explain why the superconducting temperatures of Nb₃Ge and Nb₃Pt differ so much from those of the other compounds, in addition to the N(E_F) factor. Furthermore, the logarithmic average phonon frequencies (ω_{ln}) for the Nb₃X compounds were determined to be 170.58 K for Nb₃Ge, 219.73 K for Nb₃Sb, 222.97 K for Nb₃Os, 222.05 K for Nb₃Ir, 128.49 K for Nb₃Pt, and 201.93 K for Nb₃Rh. Using these values, the estimated superconducting transition temperatures (T_c) were found to be 23.37 K for Nb₃Ge, 0.31 K for Nb₃Sb, 1.05 K for Nb₃Os, 1.8 K for Nb₃Ir, 10.82 K for Nb₃Pt, and 2.68 K for Nb₃Rh. The T_c values reported in the literature for Nb₃X compounds are 23.2 K for Nb₃Ge, 0.20 K for Nb₃Sb, 1.05 K and 0.943 K for Nb₃Os, 1.7 K for Nb₃Ir, 10.9 K for Nb₃Pt, and 2.64 K for Nb₃Rh. These experimental values show excellent agreement with our results.

The theoretical investigation of the superconductivity mechanism of some nb-rich A15 type materials is aimed to understand the superconductivity mechanism of these niobium-based compounds in the cubic A15 structure with these parameters calculated as a result of the study. The structural parameters are in agreement with previous experimental values. The electronic structure parameters suggest a 3D metallic character for these materials. Using the calculated elastic constants and Born criteria

for Nb₃X compounds, it is found that Nb₃X compounds are mechanically stable in the cubic A15 crystal structure. The order of B_H/G_H and Poisson ratios is Nb₃Ge>Nb₃Os>Nb₃Pt>Nb₃Rh>Nb₃Ir>Nb₃Sb. The absence of a negative phonon mode in the phonon dispersion graphs of the studied compounds showed that the A15 crystal structure of the compounds is dynamically stable. Moreover, the calculated phonon modes for Nb₃X compounds showed high agreement with the previous experimental results and proved the accuracy of our calculations. It is found that low-frequency phonon modes contribute more to the electron-phonon interaction parameter and Nb atoms play a dominant role in the superconductivity formation for all Nb₃X compounds. The largest electron-phonon interaction parameter was found to be first for Nb₃Ge and then for Nb₃Pt, with the other compounds taking much smaller values compared to these two. The difference between the electron-phonon interaction parameter and N(EF) values reveals why the superconductivity temperatures between Nb₃Ge and Nb₃Pt and other compounds are very different. The T_c values of Nb₃X compounds were obtained and found to be in excellent agreement with the experimental values.



1. GİRİŞ

Belirli bir sıcaklık altına düřüldüğünde bazı malzemelerin direncinin tamamen sıfır olması sonucunda elektrik akımını mükemmel bir şekilde iletmesi olarak tanımlanan süperiletkenlik fenomeni, 1911 yılında Hollandalı fizikçi Heike Kamerlingh Onnes'in sıvı helyumu bulması ve yaklaşık 4 K gibi çok düşük sıcaklıklarda cıvanın direncini tamamen kaybettiğini keřfetmesi ile ortaya çıkmıştır (Onnes, 1911). Bu durum bilim ve teknoloji dünyasında çok önemli gelişmelerin olmasına sebep olmuştur. Süperiletkenlik, kuantum mekaniğı ile açıklanabilen bir olgudur ve sıradan iletkenlerden farklı olarak, süperiletken malzemeler genellikle belirli bir sıcaklığın altına soğutularak süperiletken hale getirilir ve elektrik akımını hiçbir kaynaktan güç almadan iletirler. Bu sürecin gerçekteşmesi için genellikle sıvı azot ve sıvı helyum kullanılır.

Süperiletkenlerin keřfedilmesinin sonucunda birçok bilimsel ve teknolojik çalışma başlamış ve hem artan bilgisayar kabiliyeti ile birlikte yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak teorik alt yapının oluşturulması sağlanmış hem de bu malzemelerin etkin şekilde kullanılabilmesi için süperiletkenlerin temel özelliklerinin araştırılması gerekmiştir. A15 fazı, genellikle A_3B kimyasal formülüne sahip olan intermetalik bileşikler için denge fazıdır; A geçiř, B ise hem geçiř hem de geçiř olmayan elementi temsil edebilir. Bu bileşikler genellikle, yaklaşık 20 K civarındaki nispeten yüksek sıcaklıklarda ve güçlü manyetik alanlarda süperiletkenlik özelliğı sergiler (Hardy ve Hulm, 1953). Yüksek manyetik alan ve yüksek sıcaklık süperiletkenliğı bir dizi önemli teknolojik uygulamaya sahiptir ve yoğun madde fiziğinde zorlu bir temel araştırma alanıdır. 1986'da yüksek sıcaklıklarda süperiletkenlik gösteren bileşikler keřfedilene kadar, 23.2 K ile en yüksek T_c değerine sahip süperiletken, A-15 yapısal sınıfından Nb_3Ge idi (Testardi ve ark., 1974; Bednorz ve Müller, 1986). Sahip olduğı bu yüksek T_c değeri nedeniyle Nb_3Ge bileşiğıne benzer yapıdaki Nb bazlı bileşikler günümüze kadar kapsamlı bir şekilde araştırılmıştır.

Nb_3Ge yaklaşık 50 yıldır birçok çalışmaya konu olmuş ve hala en yüksek T_c 'ye sahip A_3B tipi A15 malzemesidir. Matthias ve arkadaşları 1965 yılında yayınladıkları

makalede stokiyometrik düzene sahip Nb₃Ge bileşiğinin süperiletkenlik geçiş sıcaklığının en az 18 K olması gerektiğini belirtmişlerdir (Matthias ve ark., 1965). Bu çalışmadan sekiz yıl sonra Gavalier tarafından, yüksek basınçlı dc püskürtme işlemi ile üretilen Nb-Ge filmlerinde 22.3 K geçiş sıcaklığı elde edilmiştir (Gavalier, 1973). Aynı deneysel tekniği kullanan Gavalier ve arkadaşları ile Testardi ve arkadaşları 1974 yılında Nb-Ge filmleri için yeni geçiş sıcaklıklarını sırasıyla 22.9 K ve 23.2 K olarak rapor etmişlerdir (Gavalier ve ark., 1974; Testardi ve ark., 1974). Bu çalışmalarda elde edilen daha yüksek geçiş sıcaklığının nedeni olarak daha mükemmele yakın stokiyometrik Nb₃Ge bileşiğinin oluşumu gösterilmiştir. Tek A-15 fazı ve stokiyometrik Nb₃Ge'nin geçiş sıcaklığı G. R. Stewart ve arkadaşları tarafından 21.8 K olarak ölçülmüştür (Stewart ve ark., 1978). Kihlstrom ve çalışma arkadaşları farklı Nb₃Ge film örnekleri sentezlemiş ve Nb₃Ge bulk yapısında ısı kapasitesi ölçümleri yapmışlardır. Bu örneklerden birini kullanarak, tam olarak 3:1 oranını sağlamasa da, süperiletkenlik özellikleriyle ilgili fiziksel büyüklükleri $\gamma = 34 \pm 1.5$ mJ/mol.K², $N(0) = 1.5 \pm 0.1$ Durum/(eV.atom), $\lambda = 1.4$ ve $T_c = 21.0$ K olarak elde etmişlerdir (Kihlstrom ve ark., 1984). Nb₃Ge ile ilgili diğer bir deneysel çalışmada stokiyometrik olmayan Nb₃Ge'nin fonon dağılım eğrileri inelastik nötron saçılması ile incelenmiştir (Smith ve ark., 1985). C. Paduani, Nb₃Ge'nin band yapısını ve Fermi yüzeylerini tam potansiyel lineer genişletilmiş düzlem dalga (FP-LAPW) yöntemini kullanarak hesaplamış ve deneysel verileri kullanarak T_c değerini 23.2 K olarak elde etmiştir (Paduani, 2009). Yoğunluk fonksiyonel teorisine dayanan ilk prensip sözde-potansiyel (pseudopotential) düzlem dalga yöntemini kullanan diğer teorik çalışmada, Nb₃Ge'nin elastik, mekanik ve termodinamik özellikleri 2015 yılında hesaplanmıştır. Bu çalışmada da Nb₃Ge'nin fonon durum yoğunluğu analiz edilerek dinamik açıdan kararlı olduğu anlaşılmıştır (Papadimitriou ve ark., 2015a). Aynı yıl, Nb₃Ge'nin elektronik durum yoğunluğu teorik olarak hesaplanmıştır ve bu çalışmada Fermi seviyesindeki durum yoğunluğuna ($N(E_F)$) ana katkı Nb atomlarının d durumlarından gelmektedir (Papadimitriou ve ark., 2015b). Nb₃Ge'nin elektronik yapısı 2016 yılında yoğunluk fonksiyonel teorisi hesaplamaları kullanılarak hem ortam koşullarında hem de sıkıştırma altında çalışılmıştır. Bu çalışmada, $N(E_F)$ oluşumunun esas olarak Nb atomlarının d durumlarından kaynaklanırken, Ge p durumlarının da $N(E_F)$ 'ye küçük bir katkı yaptığı bulunmuştur (Sreenivasa ve ark. 2016). Diğer teorik hesaplamada, Nb₃Ge'nin yapısal, elektronik, elastik ve termal özellikleri ilk prensip (A first principles) hesaplamaları kullanılarak araştırılmıştır (Wu ve ark., 2020).

A15 ailesinin üyelerinden biri olan Nb₃Sb'nin süperiletkenliğe geçiş sıcaklığının 0.2 K olduğu 1976 yılında keşfedilmiştir (Knapp ve ark., 1976). Bundan sonra Nb₃Sb son 45 yılda birçok kez teorik ve deneysel olarak çalışılmıştır. Klein ve çalışma arkadaşları Nb₃Sb'nin elektronik özelliklerini elde etmek için rölativistik, kendi içinde genişletilmiş düzlem dalga (Augmented-plane-wave (APW)) hesaplamaları yapmışlardır (Klein ve ark., 1980). E_g ve T_{2g} fonon modlarının ölçümleri 1983 yılında Dierker ve arkadaşları tarafından rapor edilmiştir (Dierker ve ark., 1983). Aynı yıl, elastik olmayan nötron saçılması kullanılarak fonon dağılım eğrileri ölçülmüş ve tüm fonon dalları Brillouin bölgesinin ana simetri yönlerinde sunulmuştur (Pintschovius ve ark., 1983). Nb₃Sb'nin fonon dağılım özellikleri üzerine ilk teorik çalışma 1987 yılında açılma kuvvet modeli yaklaşımı kullanılarak yapılmıştır (Gupta ve ark., 1987). Nb₃Sb 1999 ve 2006 yıllarında iki çalışmada tekrar sentezlenmiş ve her iki çalışmada da örgü sabiti değeri 5.268 Å olarak bulunmuştur (Melnik ve ark., 1999; Lomnytska ve ark., 2006). Sundeswari ve arkadaşları 2010 yılında yaptıkları çalışmada ilk defa Nb₃X(X=Al, Ga, In, Sn ve Sb) malzemelerinin elastik, mekanik ve termodinamik özelliklerini FP-LAPW yöntemi ile teorik olarak incelemişlerdir. Bu çalışmada Nb₃Sb'nin diğer bileşiklere göre daha güçlü, daha sert ve daha kırılğan olduğunu bulmuşlardır (Sundareswari ve ark., 2010). 2021 yılında A15 yapısına sahip Nb₃Sb tek kristalleri kimyasal buhar taşıma yöntemi ile büyütülmüş ve boylamsal özdirençleri, Hall özdirençleri ve mıknatıslanmadaki kuantum salınımları ölçülmüştür (Chen ve ark., 2021). Son olarak 2024 yılında Nb₃Ge ve Nb₃Sb'nin elektronik, topolojik ve süperiletkenlik özellikleri incelenmiştir (Sattigeri ve ark., 2024). Görüldüğü gibi hala Nb tabanlı bileşiklere olan ilgi artarak devam etmektedir.

Nb₃Os bileşiğinin süperiletken geçiş sıcaklığı deneysel olarak 1963 yılında 1.05 K ve 1969 yılında 0.943 K olarak belirlenmiştir (Mattheis ve ark., 1963; Blaugher ve ark., 1969). Nb₃Os'un süperiletken olduğunun belirlenmesinden sonra bu bileşiğin yapısal özellikleri ve süperiletkenliği üzerine birçok deneysel çalışma yapılmıştır (Reddy ve Suryanarayana, 1984; Reddy ve Suryanarayana, 1983; Dew-Hughes, 1975;). Bu deneysel çalışmaların yanı sıra 1999 ve 2007 yıllarında Nb₃Os'un yapısal ve elektronik özelliklerinin FP-LAPW yöntemi ile incelendiği iki teorik makale bulunmaktadır (Haas, 1999; Paduani, 2007a). Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT) ile yapılan bir başka teorik çalışmada ise Nb₃Os'un yapısal, elastik ve elektronik özellikleri incelenmiştir (Naher ve ark., 2018). Yaptığımız araştırmaya göre, Nb₃Os'un yapısal,

elastik ve elektronik özellikleri kapsamlı bir şekilde teorik olarak incelendiği ancak fonon ve süperiletkenlik özellikleri üzerine teorik bir çalışma henüz yapılmadığı tespit edilmiştir. Buradaki amacımız yeni bir süperiletken keşfetmek değil, Nb₃Os bileşiğinin süperiletkenlik kaynağını belirlemektir. Bunun için elektron fonon etkileşimini inceleyerek Eliashberg spektral fonksiyonunu ($\alpha^2F(\omega)$) tespit etmek gerekir (Baroni ve ark., 2001; Bağcı ve ark., 2010; Liu ve Quong, 1996; Bauer ve ark., 1998; Tütüncü ve ark., 2012; Tütüncü ve ark., 2010; Weber ve ark., 2012). Nb₃Os bileşiği için bu fonksiyon şu ana kadar incelenmemiştir. Bu çalışmada, Nb₃Os'un yapısal, elastik, elektronik, titreşim ve süperiletkenlik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak ayrıntılı olarak araştırılmıştır.

Nb₃Rh bileşiğinin süperiletken olduğu keşfedilmesiyle birlikte Nb₃Rh'nin süperiletkenlik özellikleri üzerine birçok deneysel çalışma yapılmıştır. 1956 yılında Nb₃Rh bileşiğinin süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı deneysel olarak 2.5 K olarak belirlenmiştir (Mattheis ve ark., 1956). Nb₃Rh'nin yapısal özellikleri Greenfield ve Beck (1956) tarafından deneysel olarak incelenmiş ve örgü parametreleri elde edilmiştir. 1965 yılında Cr₃Si tipi yapıda kristalleşen ikili ve üçlü bileşiklerin süperiletkenlik özellikleri geniş çapta tartışılmış ve Nb₃Rh için diğer araştırmacılar tarafından bildirilen değerlerle oldukça uyumlu şekilde örgü parametresi 5.1317 Å ve süperiletkenlik geçiş sıcaklığı 2.64 K olarak elde edilmiştir (Zegler, 1965). Ayrıca bu çalışmada Nb₃Rh'de Rh yerine ikame edilen tüm metallerin hücre hacmi ve T_c üzerindeki etkisinin incelenmesine odaklanılmıştır. Nb₃Rh_{1-x}B_x genel bileşimine sahip ve B'nin Co, Ru, Pd, Os, Ir, Pt veya Au olduğu üçlü Nb₃(Rh, B) alaşımlar 1.7 K'e kadar süperiletkenlik açısından incelenmiştir. Bu metallerin Pt ve Au hariç tümünün hücre hacmini arttırdıkları ve süperiletken geçiş sıcaklığını düşürdükleri bulunmuştur. 1971 yılında düşük sıcaklık özgül ısı ve süperiletken geçiş sıcaklığı ölçülmüş ve elektronik özgül ısının değişimi atomik düzen derecesi açısından tartışılmıştır (Spitzli, 1971). 1974 yılında Mo₃Os, Mo₃Ir ve Zr₃Rh gibi nispeten yüksek T_c'lere sahip süperiletkenler ile Nb₃Rh, V₃Au, V₃Sn gibi nispeten düşük T_c'lere sahip olanların süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı ile bilinen tüm süperiletken elementler için doğal olarak oluşan izotop sayısı N arasında deneysel bir korelasyon elde edilmiş ve mevcut teorilerin bu korelasyonu açıklayamaması sebebiyle teorilerin yeniden incelenmesi gerektiği anlaşılmıştır. Burada izotopların sayısının süperiletkenliğin nedeni olduğundan ziyade süperiletkenlik mekanizmasını geliştirebilecek (veya engelleyebilecek) bir faktör

olduğu vurgulamaya çalışılmıştır (Wang ve ark., 1974). Machlin ve Whang (1978) tarafından yapısal özellikler üzerine çalışmalar yapılmış ve Nb₃Rh'nin örgü parametreleri elde edilmiştir. 2007 yılında Nb₃Rh'nin yapısal ve elektronik özellikleri göreceli (relativistic) tam potansiyel lineer genişletilmiş düzlem dalga (FP-LAPW) hesaplamaları yoluyla incelenmiştir (Paduani, 2007b). Ayrıca aynı çalışmada Nb₃Rh'nin elastik özellikleri üzerine çalışmalar yapılmış ve elastik sabitler elde edilmiştir. Yine bu çalışmada Nb₃Rh için elektron-fonon etkileşim parametresi (λ) ve elektronik özgül ısı katsayısı (γ) elde edilmiş ve bunun sonucunda da $T_c < 10$ K ile düşük sıcaklıklı bir süper iletken olduğunu doğrulanmıştır. Elektronlar ile fononlar arasındaki etkileşimden kaynaklanan katkıyı içeren Eliashberg spektral fonksiyonunu ($\alpha^2F(\omega)$) ortaya çıkarmak Elektron fonon etkileşimini belirlemenin en verimli yöntemidir. Henüz Nb₃Rh bileşiği için bu fonksiyon incelemesi yapılmamıştır. Bu araştırma kapsamında, Nb₃Rh'nin yapısal, elastik, elektronik, titreşim ve süperiletkenlik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak ayrıntılı bir şekilde incelenmiştir.

Yüksek geçiş sıcaklıklarına sahip süperiletkenlerin araştırılması sırasında Nb₃Ir bileşiğinin süperiletken olduğu keşfedilmiş ve süperiletkenlik özellikleri deneysel olarak incelenerek süperiletkenlik geçiş sıcaklığı 1.7 K, örgü sabiti ise 5.131 ± 0.001 Å olarak bulunmuştur (Geller ve ark., 1955). Bir yıl sonra Nb₃Ir'nin süperiletkenlik geçiş sıcaklığı tekrardan 1.7 K olarak elde edilmiştir (Matthias ve ark., 1956). Daha sonra da Nb₃Ir üzerine deneysel ve teorik birçok çalışma yapılmaya devam etmiş ve bu çalışmalardan birinde süperiletkenlik geçiş sıcaklığı 1.7 K den küçük (< 1.7 K) ve örgü sabiti değeri 5.1356 Å olarak bulunmuştur (Zegler, 1965). Bu değerlerle uyumlu olan diğer bir çalışma da Blaughner ve arkadaşları (1969) tarafından 1.76 K olarak elde edilen T_c değeridir. Nb₃Ir bileşiğinin termal ve süperiletkenlik özellikleri incelenmiş ve düşük sıcaklık özgül ısı ölçümlerinden durumların band yapısı yoğunluğu ve elektron-fonon etkileşim parametresi belirlenmiştir. (Spitzli ve ark., 1969). Elektronik yapı hakkında daha fazla ayrıntı elde etmek için Nb₃X (X=Os, Ir, Pt, Pt—Au, Au) bileşiklerinin NMR ve manyetik duyarlılıkları oda sıcaklığı ile 15 K arasında ölçülmüştür (Bernasson ve ark., 1970). Aynı yıl Nb₃X (X=Al, Sn, Au, Ir) bileşiklerindeki Nb, NMR ve spin-echo tekniği kullanılarak Bernasson ve arkadaşları (1970) tarafından bildirilen Nb rezonanslarının Nb₃X (X=Os, Ir, Pt, Pt—Au, Au) bileşiklerindeki Nb çekirdeklerinden kaynaklanmadığı gösterilmiştir (Ehrenfreund ve

ark., 1970). Nb-Ir fazlı alaşımlar için süperiletkenlik özellikleri incelenmiş süperiletkenlik geçiş sıcaklığı ve düşük sıcaklıkta özgül ısı kapasitesi (γ) ölçülmüş, elektron fonon etkileşim sabiti (λ) ve T_c arasında iyi bir korelasyon elde edilmiştir (Koch ve Scarbrough, 1971). Aynı yıl Nb₃Ir ile birlikte yaklaşık elli A15 tipi alaşımın düşük sıcaklık özgül ısı ve süperiletkenlik geçiş sıcaklıkları ölçülmüştür (Spitzli, 1971). Va₃Au, Nb₃Os, Nb₃Ir, Nb₃Pt ve Nb₃Au'nun X-ışını emisyon spektroskopisi (XES), X-ışını fotoemisyon spektrumları (XPS) incelenmiş, iç seviyedeki bağlanma enerjileri ve değerlik elektron dağılımı ölçülmüş, Nb₃X bileşiklerinin Nb4d ve X5d enerji bandları, X bileşeninin atom numarasının artmasıyla birlikte giderek daha da ayrıldığı ve elde edilen bu veriler neticesinde bileşiklerin elektronik yapılarının benzerliği sonucuna varılmıştır, bu çalışmada Nb₃Ir'nin süperiletkenlik geçiş sıcaklığı 1.66 K olarak hesaplanmıştır (Kurmaev ve ark., 1977). 1983 yılında da Nb₃Ir bileşiğinin elektronik ve süperiletkenlik özellikleri ile spin dalgalanmaları üzerine incelemeler yapılmıştır (Jarlborg ve ark., 1983). 1985 yılında Nb₃Ir ve Cr₃Si bileşiklerinin süperiletkenliğinde fermi yüzeyinin rolü araştırılmıştır (Hoffmann ve ark. 1985). Radyasyonun neden olduğu düzensizliğin Nb₃Ir filmlerinin süper iletken geçiş sıcaklığı üzerindeki etkisi incelenmiştir (Gray ve ark. 1987; Schneider ve ark., 1987). Aynı yıl Nb₃Ir'nin elastik özellikleri Grimsditch ve arkadaşları (1987) tarafından incelenmiş kayma elastik sabitindeki azalmanın nedenleri araştırılmıştır. A15 yapısına sahip Nb₃Me bileşiklerindeki (Me=Au, Pt, Ir, Os) katı hidrojen çözeltilerinin süperiletkenliği araştırılmış, bileşim ve kristal yapı incelenerek 325 °C'de hazırlanan Nb₃Me-H fazlarının 70 kbar'a kadar moleküler hidrojen basınçları için süperiletken geçiş sıcaklıkları T_c belirlenmiş ve bileşiklerin kristal yapı tiplerini korudukları süper iletken kaldıkları bulunmuştur (Antanov ve ark., 1989). Nb₃Ir bileşiğinin özdirencinin sıcaklığa ve manyetik alana bağlı olarak nasıl değiştiği araştırılmıştır (Ghosh ve ark., 1997). 2000 yılında bor ilavesinin Nb₃Ir bileşiklerinin mekanik özellikleri üzerindeki etkileri araştırılmıştır (Tan ve ark., 2000). 2007 yılında Nb₃Ir intermetalik bileşiğinin yapısal ve elektronik özelliklerini araştırmak için genelleştirilmiş gradyan düzeltmeleriyle tamamen relativistik, tam potansiyel lineer genişletilmiş düzlem dalga (FP-LAPW) hesaplamaları yapılmıştır (Paduani, 2007b). Nb₃Ir'nin yapısal, elastik ve elektronik özellikleri üzerindeki basınca bağlı tepkileri, yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) ve genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA) yöntemleri çerçevesinde yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı ilk prensip hesaplamaları ile araştırılmıştır (Li ve ark., 2017). 2019 yılında Refrakter metallerin Nb₃Ir'nin fiziksel ve termodinamik

özellikleri üzerindeki etkileri, yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı ilk prensip hesaplamaları kapsamında yerel yoğunluk yaklaşımı ve genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı yöntemleri uygulanarak araştırılmıştır (Chen ve ark., 2019). Aynı yıl Nb₃Ir bileşiği ile ilgili literatürdeki en kapsamlı araştırmalardan biri Pan ve arkadaşları tarafından yapılmıştır. Nb-Ir bileşikleri, yüksek erime noktası, orta yoğunluk ve mükemmel termal kararlılık nedeniyle umut verici yüksek sıcaklık yapısal malzemeleri olmasına rağmen, Nb-Ir bileşiklerinin yapısal kararlılığı ve mekanik özellikleri belirsizdir. Bu çalışmada Ir konsantrasyonunun Nb-Ir bazlı bileşiklerin yapısı, elastik modülü, elastik anizotropisi ve kırılma veya sünek davranışı üzerindeki etkisinin ilk prensip hesaplamalarından elde edilmesi amaçlanmıştır. Diğer Nb-Ir bileşikleriyle karşılaştırıldığında, Nb₃Ir ve NbIr₃ sıkıştırılabilirlikte en küçük yüzde anizotropisine sahiptir. Son olarak, yapılan bu çalışma NbIr₃'ün gelişmiş havacılık ve otomotiv uygulamalarında kullanıma potansiyeli olan umut verici bir yüksek sıcaklık yapısal malzemesi olduğunu göstermektedir (Pan ve ark., 2019).

Geller ve arkadaşları (1955) tarafından yapılan çalışmada A15 yapısına sahip birçok intermetalik yeni bileşik keşfedilmiştir. Bu çalışmada Nb₃Pt bileşiğinin yapısal ve süperiletkenlik özellikleri deneysel olarak incelenerek süperiletkenlik geçiş sıcaklığı 9.2 K, örgü sabiti ise 5.153±0.003 Å olarak bulunmuştur (Geller ve ark., 1955). Bir yıl sonra Nb₃Pt'nin süperiletkenlik geçiş sıcaklığı tekrardan 9.2K olarak elde edilmiştir (Matthias ve ark., 1956). Aynı yıl Nb₃Pt'nin yapısal özellikleri incelenmiş ve örgü sabiti 5.11 Å olarak elde edilmiştir (Greenfield ve Beck, 1956). Daha sonraki yıllarda Nb₃Pt üzerine deneysel ve teorik birçok çalışma yapılmaya devam etmiş ve bu çalışmalardan birinde süperiletkenlik geçiş sıcaklığı 10.9 K ve örgü sabiti değeri 5.1547 Å olarak bulunmuştur (Zegler, 1965). Bu çalışmaların devamında Nb₃Pt bileşiğinin süperiletken geçiş sıcaklığı deneysel olarak 1969 yılında 8.18 K ve 1977 yılında 9.20 K olarak daha önceki değerler ile çok iyi bir uyum içinde elde edilmiştir (Blaugher ve ark., 1969; Kurmaev ve ark., 1977). 1984 yılında X ışını yöntemiyle Nb₃Pt'nin fiziksel özellikleri incelenmiş debye sıcaklığına ilişkin sonuçlar açıklanmıştır (Reddy ve Suryanarayana, 1984). 2007 yılında Nb₃Pt'nin yapısal ve elektronik özellikleri genelleştirilmiş gradyan düzeltmeleriyle tamamen göreceli, tam potansiyel doğrusal genişletilmiş düzlem dalga (FP-LAPW) hesaplamaları yapılarak incelenmiştir (Paduani, 2007a). 2017 ve 2018 yıllarında Nb₃Pt intermetalik bileşiğinin yapısal, elastik ve elektronik özellikleri üzerine yoğunluk fonksiyonel teorisine dayalı

ilk prensip hesaplamaları ile iki önemli araştırma yapılmıştır (Li ve ark., 2017; Naher ve ark., 2018). Son olarak 2019 yılında Nb-Pt sisteminin iki aşaması, yani Nb₃Pt ve NbPt₃, ilk prensip yaklaşımı kullanılarak incelenmiş ve söz konusu ikili alaşımların yapısal, elastik ve elektronik özellikleri belirlenerek birbirlerine karşı incelenmiştir.

Bu tezin amacı A15 yapısına sahip niyobyum bazlı bileşiklerin, ilginç fiziksel ve kimyasal özellikleri birçok teorik ve deneysel çalışmayı motive etmesi ve teknolojik alanlarda yaygın olarak uygulanması sebebiyle Nb₃X (X: Ge, Sb, Os, Ir, Pt, Rh) süperiletkenlerinin yapısal, elastik, elektronik, titreşim, elektron fonon etkileşimi ve süperiletkenlik özellikleri genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı ile gerçekleştirilen yoğunluk fonksiyonel teorisini kullanarak detaylı bir şekilde incelenmiş ve elde edilen sonuçlar literatürdeki sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Hesaplarımızın başında incelenen bileşiklerin toplam enerji değerleri hesaplanarak bileşiğin en kararlı olduğu denge değeri civarındaki örgü sabitleri belirlenerek yapısal parametreler elde edilmiştir. Yapısal parametreler kullanılarak elektronik enerji band yapıları hesaplanmış ve band yapısı incelendiğinde Fermi seviyesini kesen band olmasına bağlı olarak bileşiklerin metalik yapıda olup olmadıkları belirlenmiştir. Ayrıca Cooper çiftlerini Fermi enerji seviyesi civarındaki elektronların oluşturmalarından dolayı süperiletkenlik açısından önemli bir özellik olan Fermi seviyesi ile çakışan düz bandların varlığı araştırılmıştır. Bir malzemenin süperiletkenlik özelliklerinin incelenmesinde BCS teorisine göre önemli bir parametre olan Fermi enerji seviyesi durum yoğunluğu ($N(E_F)$) bulunmuş ve durum yoğunluğuna hangi orbitallerin katkı yaptığı belirlenmiştir. Böylece süperiletkenliğin kaynağının hangi elektronik durumlara bağlı olduğu ortaya konulmuştur.

Elektron-fonon etkileşimi, BCS teorisinde belirtildiği gibi süperiletken özelliklerin belirlenmesinde çok önemli bir rol oynamaktadır. Fonon spektrumu ve elastik özellikler arasındaki ilişki göz önüne alındığında, süperiletken özelliklerin elastik özelliklerden de etkilendiği düşünülebilir. Bu nedenle, süperiletken bileşiklerin elastik özelliklerinin analizi, süperiletken özelliklerinin teorik yönlerinin anlaşılmasında çok önemli bir rol oynamaktadır. Ayrıca, elastik sabitler bileşiklerin mekanik kararlılığını ve sertliğini belirlemek için kullanılabilir. Bu sonuçlar, potansiyel uygulama alanlarının belirlenmesi için faydalı bilgiler verir. Kübik kristal Nb₃X bileşikleri için elastik sabitler (C_{11} , C_{12} ve C_{44}), genelleştirilmiş Hooke yasasına dayanan gerilme-gerinim yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır. Nb₃X bileşikleri için hesaplanan elastik

sabitler aracılığıyla kayma modülü, bulk modülü, Young modülü ve Poisson oranı (ν) gibi değerler hesaplanmıştır. Bunun sonucu olarak da bileşiklerin mekanik kararlılığı ve sertliği belirlenmiştir. Cooper çiftlerinin oluşmasında önemli bir role sahip olan fonon enerjilerini hesaplamak için lineer tepki metodu ile Nb_3X bileşiklerinin titreşim özellikleri belirlenmiş ve fonon durum yoğunluğu incelenerek hangi frekans aralığında hangi atomun titreştiği ve hangi atomun süperiletkenlik için daha çok katkı yaptığı ortaya konulmuştur. Daha sonra ortalama elektron fonon etkileşim parametresi λ 'nın frekansa bağlı değişimi ve Eliashberg spektral fonksiyonu $\alpha^2F(\omega)$ incelenmiş ve elektron fonon etkileşimine hangi frekans aralığındaki modların daha fazla katkı yaptığı belirlenmiştir.





2. TEORİ

2.1. Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT)

2.1.1. Giriş

Atomların, moleküllerin, kristallerin, fiziksel özelliklerini detaylı şekilde araştırmak için onların yapısal, elektronik ve mekanik özellikleri gibi temel özelliklerinin ayrıntılı bir şekilde incelenmesi gerekir. Teorik fizik ve kimyadaki temel problemlerden biri olan çok elektronlu sistemlerin yapı ve dinamiklerinin tanımlanması geleneksel yöntemlerle oldukça zordur. Kuantum mekaniğinde, bir sistemdeki tüm elektronların dalga fonksiyonunu tanımlamak için Schrödinger denkleminin çözülmesi gereklidir ve elektron sayısı arttıkça bu denklemin çözülmesi oldukça karmaşıktır. Bunun için bir sistemin toplam enerjisini karmaşık dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğuna bağlı olarak tanımlamak daha basit bir çözüm sunar. Bu sebeple kuantum mekaniksel sistemlerdeki çok elektronlu problemleri çözmenin zorluklarını aşmak ve bu sistemlerin hesaplanabilirliğini ve pratikliğini artırmak amacıyla 1960'lı yıllarda yoğunluk fonksiyonel teorisi geliştirilmiştir (Kohn ve Sham, 1965; Hohenberg ve Kohn, 1964). Yoğunluk fonksiyonel teorisi yapısal, elektronik ve mekanik özellikleri araştırmak için ilk prensiplere (First principle) dayalı ideal bir yöntemdir. Deneysel verilerle uyumlu sonuçlar vermesi ve hiçbir deneysel veriye ihtiyaç duymadan sadece incelenecek malzemenin atom numarası ve kristal yapısı ile malzemenin özelliklerini belirleyebilmeye olanak tanınması sebebiyle yoğunluk fonksiyonel teorisi son yılların en yaygın yöntemlerinden biridir.

2.1.2. Thomas-Fermi teorisi

Çoklu elektron sistemlerinin elektronik yapısını açıklamak ve sistemin toplam enerjisini çok elektron dalga fonksiyonu yerine elektron yoğunluğu ($\rho(r)$) cinsinden ifade etmek için yoğunluk fonksiyonel teorisi ortaya çıkmıştır. 1927 yılında yoğunluk fonksiyonel teorisinin temeli olarak kabul edilebilecek Thomas-Fermi teorisi ortaya atılmıştır (Thomas, 1927; Fermi, 1927, 1928). Thomas ve Fermi kinetik enerjiyi elektron yoğunluğuna bağlı bir fonksiyon olarak

$$\epsilon_{kin}(\rho) = C_F \rho^{\frac{2}{3}}, \quad C_F = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \quad (2.1)$$

şeklinde ifade etmişlerdir. Belirli bir hacim üzerinde elektronların toplam sayısı

$$\int d^3r \rho(r) = N \quad (2.2)$$

olduğundan birim hacimdeki kinetik enerji ise

$$E_{kin} \approx \int d^3r \rho(r) \epsilon_{kin}(\rho) = C_F \int d^3r \rho^{\frac{5}{3}}(r) \quad (2.3)$$

şeklinde ifade edilir. Thomas ve Fermi bu ifadeyi çekirdek-elektron ve elektron-elektron Coulomb etkileşmelerine ait potansiyel enerji ifadeleri ile birleştirerek bir atomun enerjisini hesapladılar. Thomas-Fermi teorisi çok elektronlu sistemlerde enerjinin elektron yoğunluğuna bağlı bir fonksiyon olarak kullanılabileceğini göstermiş ve değiş-tokuş enerjisi dikkate alınmaması gibi bazı sınırlamaları sebebiyle yoğunluk fonksiyonel teorisinin gelişmesine yol açmıştır. Yoğunluk fonksiyonel teorisi değişim ve korelasyon enerjilerini daha doğru hesaplayarak, Thomas-Fermi teorisinin eksikliklerini giderir ve çok elektronlu sistemlerin daha doğru ve detaylı bir modelini sunar.

2.1.3. Hohenberg ve Kohn teoremleri

Yoğunluk fonksiyonel teorisinin temelini oluşturan ve çok elektronlu kuantum sistemlerinin incelenmesinde devrim yaratan iki önemli teoremdir (Hohenberg ve Kohn, 1964). Bu teoremler, bir sistemin tüm temel durum özelliklerini açıklamak için çok elektronlu dalga fonksiyonları yerine elektron yoğunluğunun yeterli olduğunu göstermektedir. 1998 yılında yoğunluk fonksiyonel teorisinin geliştirilmesine katkılarından dolayı Nobel Kimya ödülü Walter Kohn'a verilmiştir. Bu teorilerden ilkinde göre dış potansiyel altındaki bir sistemin dış potansiyeli $V_{dış}(r)$ yerine değişken olarak elektron yoğunluğu $\rho(r)$ kullanılarak sistemin dış potansiyeli ve buna bağlı olarak da diğer tüm özellikleri temel durum elektron yoğunluğu $\rho_0(r)$ tarafından belirlenir. Buna göre bir sistemin temel durum yoğunluğu $\rho_0(r)$ ifadesinin verilmesi durumunda temel durum yoğunluğu $\rho_0(r)$ ile ilişkili olan dış potansiyel ve temel durum dalga fonksiyonu $\psi_0(r)$ bulunabileceği söylenebilir. İkinci teorem bir dış potansiyel altında, temel durum enerjisi ve yoğunluğunun elektron yoğunluğuna bağlı toplam

enerji fonksiyoneli $E(\rho(r))$ yardımıyla belirlenebileceğini açıklamaktadır. Toplam enerji fonksiyoneli $E(\rho(r))$ 'nın temel durum elektron yoğunluğu $\rho_0(r)$ için enerji ifadesi $E_0(\rho(r))$;

$$E_o(\rho(r)) = \min_{\psi \rightarrow \rho_o(r)} \langle \psi | T_e + V_{dış} + V_H | \psi \rangle \quad (2.4)$$

şeklinde olur. Burada T_e elektronların kinetik enerjisini, $V_{dış}$ elektronlara etkiyen dış potansiyel enerjiyi, V_H elektron-elektron Coulomb etkileşim potansiyel enerjisini tanımlamaktadır ve bu denklemler;

$$T_e = \frac{1}{2} \int \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.5)$$

$$V_{dış} = \frac{1}{2} \int V_{dış}(\vec{r}) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}) \psi(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.6)$$

$$V_H = \frac{1}{2} \int \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}) \vec{\nabla} \psi^*(\vec{r}') \psi(\vec{r}') \psi(\vec{r}) d\vec{r} d\vec{r}' \quad (2.7)$$

şeklinde ifade edilir. Dış potansiyele bağlı ψ_e temel durumu için elektronik durum yoğunluğu ifadesi;

$$\rho(\vec{r}) = \langle \psi_e | \psi_e \rangle \quad (2.8)$$

denklemleri ile ifade edilir. Denklem 2.8. dış potansiyele bağlı olduğu için kinetik enerji ve elektron-elektron Coulomb etkileşim potansiyel enerjisi $\rho(\vec{r})$ 'ye bağlı bir fonksiyonel olarak

$$F[\rho(\vec{r})] = \langle \psi_e | T_e + V_H | \psi_e \rangle \quad (2.9)$$

şeklinde ifade edilir. $F[\rho(\vec{r})]$ yardımıyla bir dış potansiyel ($V_{dış}$) için bir sistemin toplam enerji fonksiyoneli

$$E[\rho(\vec{r})] = F[\rho(\vec{r})] + \int V_{dış}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d\vec{r} \quad (2.10)$$

şeklinde tanımlanabilir.

2.1.4. Kohn-Sham teoremi

1965 yılında Kohn-Sham teoremi, Hohenberg-Kohn teoremleri üzerine inşa edilmiştir. Hohenberg-Kohn teoremleri ile elde edilen denklemler bu teorem sayesinde çözüme ulaşmış ve yoğunluk fonksiyonel teorisi uygulanabilir hale gelmiştir (Kohn ve Sham, 1965). Hohenberg ve Kohn Teoremleri temel durum yoğunluğu ile enerji arasında bir ilişki olduğunu ve temel durum enerjisini hesaplayabilmenin gerekliliklerinden biri olan $F[\rho(\vec{r})]$ fonksiyonelinden bahseder fakat nasıl olması gerektiğini tam olarak ifade etmez. Buna göre temel durum elektron yoğunluğu $\rho_0(r)$ için sistemin toplam enerjisini minimum yapan ve denklem 2.4. ile verilen enerji ifadesi;

$$E_{el}[V_{dış}, \rho] = T_0[\rho] + \int dr V_{dış}(r) \rho(r) + \frac{e^2}{2} \iint dr' dr \frac{\rho(r) \rho(r')}{|r - r'|} + E_{XC}[n] \quad (2.11)$$

şeklini alır. Burada elektron yoğunluğu $\rho(r)$;

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^n |\Phi_i(r)|^2 \quad (2.12)$$

şeklinde tanımlanabilir. Burada ($i=1,2,3,...,n$) ve $\Phi_i(r)$ ise etkileşimsiz olarak kabul ettiğimiz elektronların aşağıdaki gibi bir Schrödinger denklemini sağlayan dalga fonksiyonlarını ifade etmektedir.

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{den}(r) \right] \Phi_i(r) = \varepsilon_i \Phi_i(r) \quad (2.13)$$

bu ifadedeki $V_{den}(r)$, $\rho(r)$ elektron yoğunluğuna sahip tek parçacık için deneme potansiyeli olarak tanımlanır. Bu denklemin çözümü

$$\sum_i \varepsilon_i = \sum_i \left[\Phi_i \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{den}(r) \right) \Phi_i \right] = T_0[\rho] + \int dr V_{dış}(r) \rho(r) \quad (2.14)$$

şeklinde yazılabilir. Buna göre denklem 2.11. tekrar düzenlenir ve

$$E_{el}[\rho] = \sum_j \varepsilon_j + \int dr V_{den}(r) \rho(r) + \int dr V_{dış}(r) \rho(r) + \frac{1}{2} \iint dr' dr \frac{\rho(r) \rho(r')}{|r - r'|} + E_{XC}[\rho] \quad (2.15)$$

şeklini alır. Bu denklemi minimum hale getirmek için, V_{den} 'i, $\rho(r)$ 'ye ya da $\rho(r)$ 'yi V_{den} 'e bağlı bir fonksiyon kabul etmek gerekir. Burada $E_{el}[\rho]$ 'yu minimum yapacak olan $V_{den}(r)$, $\rho(r)$ 'ye bağlı bir döngü olarak;

$$V_{den}(r) = V_{dis}(r) + \int dr' \frac{\rho(r')}{|r - r'|} + \frac{\partial E_{xc}[\rho]}{\partial \rho(r)} = V_{ks}(r) + E_{sabit} \quad (2.16)$$

gibi yazılabilir. Burada V_{KS} , etkin bir potansiyel olan Kohn-Sham potansiyelidir ve

$$\begin{aligned} V_{KS}(r) &= V_{dis}(r) + \int dr' \frac{\rho(r')}{|r - r'|} + \frac{\partial E_{xc}[\rho]}{\partial \rho(r)} \\ &= V_{dis}(r) + V_H(r) + V_{xc}(r) \end{aligned} \quad (2.17)$$

şekilde verilir (Kohn ve Sham, 1965). Burada V_H elektron-elektron Coulomb etkileşim potansiyel enerjisine eşdeğerdir. Yukarıdaki V_H 'nin karşılığı;

$$V_H(r) = \int dr' \frac{\rho(r')}{|r - r'|} \quad (2.18)$$

denklemi ile verilir. V_{xc} ifadesi ise;

$$V_{xc}(r) = \frac{\partial E_{xc}[\rho(r)]}{\partial \rho(r)} \quad (2.19)$$

olup tek elektron için değiş tokuş potansiyelidir. Buna göre denklem 2.12. ve denklem 2.13. aşağıda verildiği gibi

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{KS}(r) \right] \Phi_j(r) = \varepsilon_j \Phi_j(r) \quad (2.20)$$

$$\rho_o(r) = \sum_{j=1}^N |\Phi_j(r)|^2 \quad (2.21)$$

temel hal durumunu temsil edecek şekilde yazılabilir. Denklem 2.20'de parantezli kısım Kohn-Sham hamiltoniyenidir ($\hat{H}_{KS}$). Bu eşitliklere “kendi kendini doğrulayabilen Kohn Sham denklemleri” denir (Kohn ve Sham, 1965). Burada $\rho_o(r)$ fonksiyonu enerjinin minimum değerini veren temel yoğunluk fonksiyonudur. Bu eşitliklerin çözümlenebilmesi için bir yaklaşıma ihtiyaç doğmuştur. Bunlar yoğunluk fonksiyonel teorisinin kapsamındaki değiş-tokuş-korelasyon fonksiyonellerini

tanımlamaya yarayan Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGA) ve Yerel Yoğunluk yaklaşımlarıdır (LDA). Bu tez kapsamında yapılan incelemeler Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGA) ile gerçekleştirilmiştir.

2.1.5. Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı (GGA)

Genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı, yoğunluk fonksiyonel teorisinde kullanılan değişim-korelasyon fonksiyonellerini geliştirmek için kullanılan bir yöntemdir. GGA, yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA)'ya kıyasla elektron yoğunluğunun homojen olmadığı sistemin her yerinde farklılık gösterdiği durumlarda yoğunluk fonksiyonel teorisinin temel bileşenlerinden biri olan değişim-korelasyon enerjisinin daha doğru bir şekilde hesaplanmasını sağlar. GGA yaklaşımı her zaman LDA yaklaşımına göre iyi sonuçlar vermese de yoğunluk gradyentini de dikkate alarak toplam enerji ve bağ uzunlukları gibi sistemin birçok özelliğini yüksek bir doğrulukla vermektedir. Bu durumda GGA'da yoğunluğun gradyanı ($\vec{\nabla}\rho(\vec{r})$) de dikkate alınarak değiş-tokuş-korelasyon enerjisi

$$E_{XC}^{GGA}(\rho) = \int f^{GGA}[\rho(\vec{r}), \vec{\nabla}\rho(\vec{r})] d\vec{r} \quad (2.22)$$

eşitliği ile ifade edilmiştir (Becke, 1988; Lee ve ark., 1988; Perdew ve ark., 1996).

2.1.6. Sözde (Pseudo) potansiyel metodu

Sözde potansiyel yöntemi, yoğunluk fonksiyonel teorisi hesaplamalarında sıkça kullanılan bir yöntemdir. 1966 yılında Harrison'un yapmış olduğu çalışmalar neticesinde sözde potansiyel metodu ortaya atılmıştır (Harrison, 2012). Bu yöntem, elektronların davranışını modellemek ve hesaplamaların karmaşıklığını azaltmak için kullanılır. Bir atom çekirdek, iç elektronlar (çekirdek elektronları) ve dış (valans) elektronları olarak üçe ayrılır. İç ve dış elektronlar arasında büyük farklılıklar vardır. İç elektronlar, çekirdeğe daha yakın ve çekirdeğin güçlü Coulomb potansiyelinin etkisi altında olduklarından hareketleri daha karmaşıktır ve kimyasal etkileşimlerden etkilenmezler. Çekirdekle iç elektronların oluşturduğu bu sisteme kor bölgesi adı verilir. Dış elektronlar ise çekirdek bölgesinden uzakta çekirdek ve iç elektronların oluşturduğu bir alanda hareket ederler. Valans elektronlar bir atomun tüm fiziksel ve kimyasal özelliklerinin belirlenmesinde daha belirleyicidirler. Sözde potansiyel yöntemi, sadece valans elektronlarının davranışını doğru bir şekilde modellemeyi amaçlayarak hesaplamaların daha basit ve daha hızlı yapılmasını sağlar. Valans

elektronları için etkili bir potansiyel oluşturulur. Bu etkili potansiyel, gerçek çekirdek potansiyelini ve iç elektronların etkilerini taklit eder, ancak daha basit bir formdadır. Bu sözde potansiyel, çekirdeğin etrafındaki karmaşık kısa menzilli potansiyeli içermez, böylece valans elektronları üzerindeki etkileri daha doğru bir şekilde modellenmiş olur. Şimdi valans elektronları ile iç elektronların dalga fonksiyonlarının ortogonal olduğu bir sistem düşünelim. Sözde potansiyel yaklaşımına göre elektronik özelliklerin belirlenmesinde daha önce de belirttiğimiz gibi valans elektronları rol oynarken kor bölgesinin bir rolü olmaz. Bu durumda böyle bir sistemde elektronik özellikler

$$H\Psi = \varepsilon\Psi \quad (2.23)$$

Schrödinger eşitliğinden yararlanılarak belirlenebilir. Burada H, Kinetik enerji (T) ile iç elektronların V_A potansiyelinin toplamı olan Hamiltoniyeni göstermektedir. Denklem 2.23.'de verilen Ψ , kaynağı değerlik elektronlar olan düşük etkili ϕ fonksiyonu ile, kaynağı iyon çekirdekleri olan ϕ_c fonksiyonlarının toplamı Schrödinger dalga fonksiyonu,

$$\Psi = \phi + \sum_c b_c \phi_c \quad (2.24)$$

şeklinde yazılabilir (Srivastava, 1982). Ψ ile ϕ_c 'nin ortogonal olmaları için gerekli olan normalizasyon sabitleri b_c katsayıları;

$$\langle \Psi | \phi_c \rangle = 0 \quad (2.25)$$

şeklindedir (Uzunok, 2015). Denklem 2.24. ve denklem 2.25.'ten yararlanılarak elektronik enerji ifadesi denklem 2.23. tekrar düzenlenirse;

$$H\phi + \sum_c (\varepsilon - E_c | \phi_c \rangle \langle \phi_c | \phi) = \varepsilon\phi \quad (2.26)$$

eşitliği elde edilir. Denklem 2.26.'daki E_c ifadesi, iyon çekirdeği kısmındaki öz değerlerin biridir. Bu eşitlikten yararlanılarak aşağıdaki gibi iki denklem yazılabilir (Narayan ve ark., 2019).

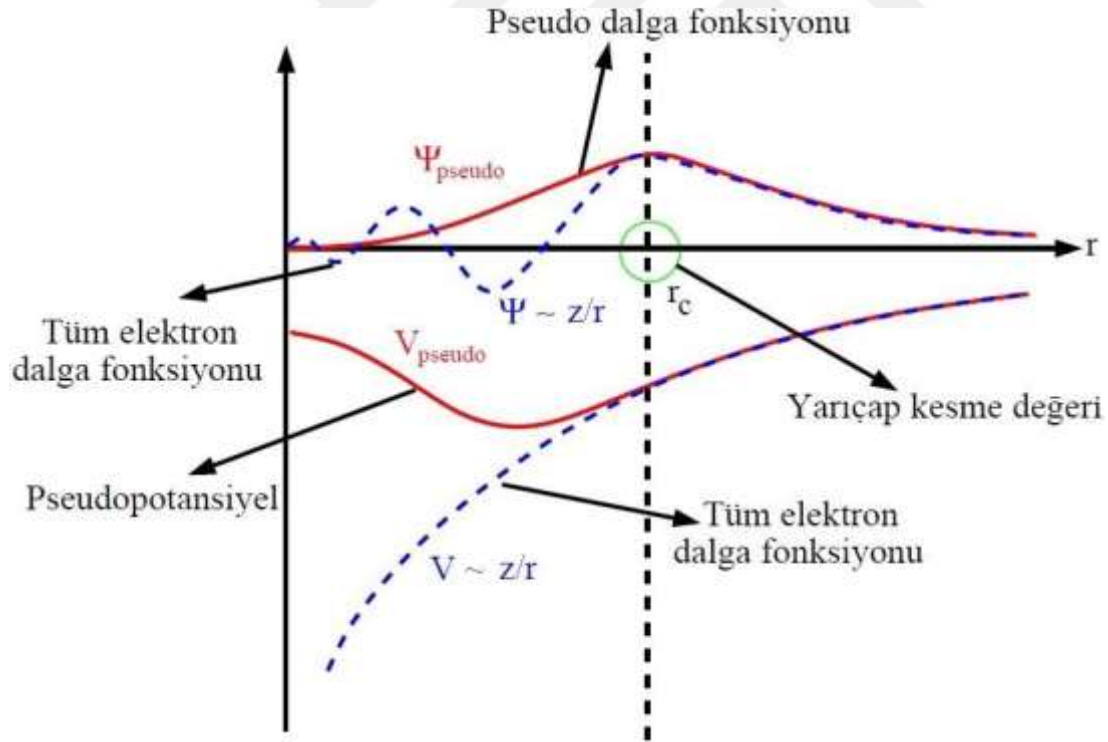
$$(H + V_R)\phi = \varepsilon\phi \quad (2.27)$$

$$(T + V_{ps})\phi = \epsilon\phi \quad (2.28)$$

Yukarıdaki denklemlerin ilkinde itici potansiyel operatörü olarak V_R tanımlanmıştır (Uzunok, 2015). İkinci denklemdeki V_{ps} potansiyeli ise aşağıdaki gibi tanımlanan

$$V_{ps} = V_A + V_R \quad (2.29)$$

bir sözde-potansiyel operatörüdür (Srivastava, 1982). Zayıf bir potansiyel olan V_{ps} potansiyeli, itici potansiyel V_R ile etkin potansiyel V_A 'nın etkileşimlerinden oluşmaktadır. Bu durumda ϕ ve V_{ps} sırasıyla sözde dalga fonksiyonu ve potansiyel olarak tanımlanır (Uzunok, 2015). Şekil 2.1.'den de görüleceği gibi dalga fonksiyonu hesaplamalarında kısa menzilli olan bu potansiyel çabuk yakınsadığı için tercih sebebidir (Karaca, 2017). Şekildeki Ψ ve V sırasıyla gerçek dalga fonksiyonu ve potansiyeldir. İyon çekirdeği bölgesinin yarıçapı r_c ile gösterilmektedir. İyon çekirdeği bölgesinin dışında potansiyel ve dalga fonksiyonları çakışmaktadır.



Şekil 2.1. Pseudo dalga fonksiyonu ve potansiyeli grafiği.

2.2. Katıların Örgü Dinamiği

2.2.1. Örgü dinamiği ve kuvvet sabitleri

Bir örgü, örgü temel vektörleri vasıtasıyla ifade edilebilir. Örgü vektörü,

$$\vec{X}_\ell = \ell_1 \vec{a}_1 + \ell_2 \vec{a}_2 + \ell_3 \vec{a}_3 \quad (2.30)$$

şeklinde gösterilir (Srivastava, 1982). Burada ℓ_1, ℓ_2, ℓ_3 pozitif, negatif veya sıfır olabilir. Eğer birim hücre başına bir atom varsa bu formül atomların pozisyonlarını da verir. Eğer birim hücre p tane atom içeriyorsa birim hücredeki her atomun konumu $\vec{X}(b)$ vektörleri ile verilir. Burada b birim hücredeki farklı cins atomları belirtir ve 1, 2, 3, ..., p gibi değerler alır. Buna göre ℓ . birim hücredeki b. atomun pozisyonu $X(\ell b)$,

$$X(\ell b) = X(\ell) + X(b) \quad (2.31)$$

olarak ifade edilir. b. atomun denge durumundan yerdeğiştirmesi $\vec{U}(\ell b)$ ile gösterilirse kinetik enerji,

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\ell b \alpha} M_b \dot{U}_\alpha^2(\ell b) \quad (2.32)$$

şeklinde yazılabilir. Burada M_b , b. atomun kütlesi, $U_\alpha(\ell b)$ ise $U(\ell b)$ nin x, y, z bileşenleridir. Atom denge konumundan $\vec{U}(\ell b)$ kadar yer değiştirirse kristalin potansiyel enerjisi,

$$\Phi = \Phi_0 + \sum_{\ell b \alpha} \Phi_\alpha(\ell b) U_\alpha(\ell b) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\ell b \alpha \\ \ell' b' \beta}} \Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell' b') U_\alpha(\ell b) U_\beta(\ell' b') \quad (2.33)$$

şeklinde yazılabilir (Srivastava, 1982). Burada Φ_0 , denge durumundaki potansiyel enerjiyi verir ve dinamik problemimiz için önemli değildir. Çünkü, potansiyelin konuma göre türevi kuvveti verir ve denge durumunda kuvvet sıfır olacaktır. Kristalin denge durumunu ifade eden $\Phi_\alpha(\ell b)$ ve $\Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell' b')$,

$$\Phi_\alpha(\ell b) = \left. \frac{\partial \Phi}{\partial U_\alpha(\ell b)} \right|_0 \quad \text{ve} \quad \Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell' b') = \left. \frac{\partial^2 \Phi}{\partial U_\alpha(\ell b) \partial U_\beta(\ell' b')} \right|_0 \quad (2.34)$$

şeklinde verilir. Kristalin kararlı olması için $\Phi_\alpha(\ell b)$ denge durumunda sıfır olmalıdır. Kristal için hamiltonyen harmonik yaklaşım altında,

$$H = \Phi_0 + \frac{1}{2} \sum_{\ell b \alpha} M_b \dot{U}_\alpha^2(\ell b) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\ell b \alpha \\ \ell' b' \beta}} \Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell' b') U_\alpha(\ell b) U_\beta(\ell' b') \quad (2.35)$$

şeklinde yazılabilir. ℓ . birim hücredeki b . atomun hareket denklemi ise,

$$M_b \ddot{U}_\alpha(\ell b) = - \frac{\partial \Phi}{\partial U_\alpha(\ell b)} = - \sum_{\ell' b' \beta} \Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell' b') U_\beta(\ell' b') \quad (2.36)$$

olur. $\Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell' b')$ ifadesi atomik kütle sabiti olarak bilinir. Bu ifade ($\ell' b'$) atomu β yönünde yerdeğiştirdiğinde (ℓb) atomuna α yönünde etkiyen negatif kuvveti verir. Kuvvet sabitleri iki temel simetri şartını sağlamalıdır. Bu şartlar geçiş simetrisinden kaynaklanmaktadır.

$$\Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell' b') = \Phi_{\alpha\beta}(0b; (\ell' - \ell)b') \quad (2.37)$$

Her atom aynı miktarda yerdeğiştirdiğinde herhangi bir atom üzerindeki kuvvet sıfır olmalıdır (Srivastava, 1982; Tütüncü, 1998).

$$\sum \Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell' b') = 0$$

$$\sum_{\ell' b' \neq \ell b} \Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell' b') + \Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell b) = 0 \quad (2.38)$$

$$\Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell b) = - \sum_{\ell' b' \neq \ell b} \Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell' b')$$

Yukarıdaki denklemde bulunan $\Phi_{\alpha\beta}(\ell b; \ell b)$ kuvvet sabiti öz-terim olarak bilinir. Geçiş simetrisinden yararlanarak hareket denklemi,

$$M_b \ddot{U}_\alpha(\ell b) = - \sum_{\ell' b' \beta} \Phi_{\alpha\beta}(0b; \ell' b') U_\beta(\ell' b') \quad (2.39)$$

şeklinde yazılabilir. Bu denkleme,

$$U_\alpha(\ell b; q) = \frac{1}{\sqrt{M_b}} \sum_q U_\alpha(b; q) \exp[i(q \cdot x(\ell) - \omega t)] \quad (2.40)$$

şeklinde bir çözüm önerilebilir. Burada $\vec{q}$ dalga vektörüdür ve $U_\alpha(b,q)$, ℓ' 'den bağımsızdır. Bu ifadeyi hareket denkleminde yerine yazarsak hareket denklemi,

$$\omega^2 U_\alpha(q; b) = \sum_{b'\beta} D_{\alpha\beta}(bb'; q) U_\beta(q; b') \quad (2.41)$$

şeklini alır. Burada $D_{\alpha\beta}(bb'; q)$ D-tipi dinamik matris olarak bilinir (Srivastava, 1982). Bu matris 3x3 lük bir matris olup,

$$D_{\alpha\beta}(bb'; q) = \frac{1}{\sqrt{M_b}} \sum_{\ell'} \Phi_{\alpha\beta}(0b; \ell'b') \exp[iq \cdot x(\ell')] \quad (2.42)$$

olarak açılır. Sonuç olarak fonon modları,

$$|D_{\alpha\beta}(bb'; q) - \omega^2 \delta_{\alpha\beta} \delta_{bb'}| = 0 \quad (2.43)$$

determinantı çözülerek hesaplanır. Bazen çözüm,

$$U_\alpha(\ell b; q) = \frac{1}{\sqrt{M_b}} \dot{U}_\alpha(b, q) \exp[i(q \cdot x(\ell b) - \omega t)] \quad (2.44)$$

şeklinde verilen bir denklem ile önerilebilir. Bu ifade denklem 2.39.'daki hareket denkleminde yerine yazılarak,

$$\omega^2 \dot{U}_\alpha(q; b) = \sum_{b'\beta} C_{\alpha\beta}(bb'; q) \dot{U}_\beta(b'; q) \quad (2.45)$$

denklemi elde edilebilir. Burada $C_{\alpha\beta}(bb', q)$ C tipi dinamik matris olarak bilinir ve bu matris

$$C_{\alpha\beta}(bb'; q) = \frac{1}{\sqrt{M_b M_{b'}}} \sum_{\ell'} \Phi_{\alpha\beta}(0b; \ell'b') \exp[-iq \cdot [x(0b) - x(\ell'b')]] \quad (2.46)$$

şeklinde ifade edilir (Srivastava, 1982).

2.2.2. Örgü dinamiğinde lineer bağımlılık

Kristal yapılarda sistemde bulunan elektronlara etki eden dış potansiyel $\lambda = \lambda_i$ olan bir fonksiyon olarak düşünüldüğünde, kuvvet bu parametrelere bağlı olarak aşağıdaki

denklem ile ifade edilir (Baroni ve ark., 2001; Giannozzi ve ark., 1991; Baroni ve ark., 1987).

$$\frac{\partial E_\lambda}{\partial \lambda_i} = \int n_\lambda(r) \frac{\partial V_\lambda(r)}{\partial \lambda_i} dr \quad (2.47)$$

Burada E_λ , elektronların taban durum enerjisini ve $n_\lambda(r)$ ise elektron yoğunluk dağılımını ifade etmektedir. Bu denklem Taylor serisine açarsak,

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_\lambda}{\partial \lambda_i} = \int & \left[n_\lambda(r) \frac{\partial V_\lambda(r)}{\partial \lambda_i} + \sum_j \lambda_j \frac{\partial n_\lambda(r)}{\partial \lambda_j} \frac{\partial V_\lambda(r)}{\partial \lambda_i} \right. \\ & \left. + n_0(r) \sum_j \lambda_j \frac{\partial^2 V_\lambda(r)}{\partial \lambda_j \partial \lambda_i} \right] dr + Q(\lambda^2) \end{aligned} \quad (2.48)$$

denklemini elde edilir. Bu seri için $\lambda = 0$ civarında türevler hesaplanırsa aşağıdaki denklem elde edilir.

$$\begin{aligned} E_\lambda = E_0 + \sum_i \lambda_i \int n_0(r) \frac{\partial V_\lambda(r)}{\partial \lambda_i} dr \\ + \frac{1}{2} \sum_{ij} \lambda_i \lambda_j \int \left(\frac{\partial n_\lambda(r)}{\partial \lambda_j} \frac{\partial V_\lambda(r)}{\partial \lambda_i} + n_0(r) \frac{\partial^2 V_\lambda(r)}{\partial \lambda_j \partial \lambda_i} \right) dr \end{aligned} \quad (2.49)$$

Burada λ parametreleri, $U_{\alpha i}(R)$ ifadesi ile gösterilen iyonların yer değiştirmesini ifade eder. Enerjinin ikinci dereceden türevi, kuvvet sabitleri matrisleri ile doğrudan ilişkilidir ve bu ilişki;

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 E}{\partial u_{\alpha i}(R) \partial u_{\beta j}(R)} &= \Phi_{\alpha i, \beta j}(R - R') \\ &= \Phi_{\alpha i, \beta j}^{\text{iyon}}(R - R') + \Phi_{\alpha i, \beta j}^{\text{elektron}}(R - R') \end{aligned} \quad (2.50)$$

$$\Phi_{\alpha i, \beta j}^{\text{iyon}}(R - R') = \frac{\partial^2 E_{\text{iyon-iyon}}}{\partial u_{\alpha i}(R) \partial u_{\beta j}(R)} \quad (2.51)$$

denklemleri ile verilir. Denklem 2.51.'de bulunan $E_{\text{iyon-iyon}}$ terimi;

$$E_{\text{iyon-iyon}} = \sum_i \sum_j \frac{e^2 Z_i Z_j}{|R + \tau_i - R' - \tau_j|} \quad (2.52)$$

şeklinde yazılır. Bu ifadedeki toplam sonsuz bir kristalde yakınsamaz, bu nedenle bu toplama işlemi ters örgü uzayında yapılmıştır. Son olarak elektronik kuvvet sabiti de,

$$\Phi_{\alpha i, \beta j}^{\text{elektron}}(R - R') = \int \left(\frac{\partial n(r)}{\partial u_{\alpha i}(R)} \frac{\partial V_{\text{iyon}}}{\partial u_{\beta j}(R)} + n_0(r) \frac{\partial^2 V_{\text{iyon}}}{\partial u_{\alpha i}(R) \partial u_{\beta j}(R)} \right) dr \quad (2.53)$$

şeklinde verilir. Denklem 2.51. ve 2.53. ile verilen iyonik ve elektronik kuvvet sabitleri, denklem 2.41.'de yerine konularak dinamik matrisler elde edilir ve denklem 2.43.'ün çözülmesiyle titreşim enerjileri hesaplanabilir.

2.3. Teorinin uygulanışı

1960'larda Kohn-Sham ve Hohenberg-Kohn tarafından ortaya atılan ve birçok alanda çok yaygın bir şekilde kullanılan DFT ilk prensiplere dayalı bir yöntemdir (Kohn ve Sham, 1965; Hohenberg ve Kohn, 1964). Malzemelerin temel özellikleri hakkında ayrıntılı araştırma imkanı tanıyan ve malzemelerin yapısal, elektronik, elastik ve titreşim özellikleri gibi birçok özelliğinin teorik olarak incelenmesine imkan vermektedir. Hesaplarımızda kökeni düzlem dalga ve pseudopotansiyel teorilerine dayanan QUANTUM ESPRESSO (QE) paket programı kullanılmıştır (Giannozzi vd., 2009; Giannozzi vd., 2017). Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) tarafından parametrize edilmiş Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımından (GGA) yararlanılmış ve Değiş-tokuş ve korelasyon etkileşimleri incelenmiştir (Perdew vd., 1996).

2.3.1. Kristal toplam enerji hesaplaması

Elektronik yük yoğunluğuna bağlı temel durum dalga fonksiyonu Ψ , elektronların davranışını yoğunluk fonksiyonu üzerinden açıklar. $E_{\text{top}}(R_\alpha)$ sistemin toplam enerjisi, $\rho(r, R_\alpha)$ elektronik yük yoğunluğu olarak ifade edilir. DFT'de kristalin toplam enerjisi $V_{\text{dış}}$ potansiyeli altında yoğunluğa bağlı olarak,

$$\begin{aligned}
E_{top}(R_\alpha) = & \sum_i^{val.el.} \Psi_i^*(r, R_\alpha) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \Psi_i(r, R_\alpha) \\
& + \sum_i^{val.el.} \Psi_i^*(r, R_\alpha) V^{PS} \Psi_i(r, R_\alpha) dr \\
& + \frac{e^2}{2} \int \frac{\rho(r, R_\alpha) \rho(r', R_\alpha)}{|r - r'|} dr dr' + E_{XC}[\rho(r, R_\alpha)] \\
& + \frac{e^2}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|}
\end{aligned} \tag{2.54}$$

denklemleri ile verilir. Denklemlerdeki toplamlar, yalnızca önemli bir role sahip olan valans elektronları arasındaki etkileşimler dikkate alınarak hesaplanacaktır. İyon korları ve elektronların pozisyonları sırasıyla R_α ve r ile, temel durum elektronik yük yoğunluğu ise $\rho(r, R_\alpha)$ ile ifade edilmiştir. Bu denklemden elde edilen toplam enerji sonuçları, yapısal ve elastik özelliklerin belirlenmesinde kullanılacaktır. Bu enerji hesaplamalarından yararlanılarak inceleyeceğimiz kristal yapıların hangisinin daha kararlı olacağı tespit edilecektir.

2.3.2. Kristal yapı parametresinin hesaplanması

Malzemelerin fiziksel özelliklerini yorumlayabilmek için toplam enerjinin hesaplanması bunun için de denge halindeki örgü parametresinin belirlenmesi gerekmektedir. Örgü parametrelerinin belirlenebilmesi kristallerin yapısının bilinmesi ile mümkündür. Bu tez kapsamında kristal yapısı kübik, uzay grubu $cP8$ Pearson sembolü ile $Pm\bar{3}n$ (No:223) olan A15 yapısına sahip niyobyum bazlı Nb_3X (X: Ge, Sb, Os, Ir, Pt, Rh) bileşiklerinin özellikleri araştırılacaktır. Birim hücredeki 6 Nb atomu ile 2 X atomları için Wyckoff konumları sırasıyla 6Nb için (6c) (1/4, 0, 1/2) ve 2X için (2a) (0,0,0) şeklindedir. Örgü parametrelerinin belirlenebilmesi için belli bir aralıktaki örgü sabitlerine karşılık enerji değerleri hesaplanarak enerjinin örgü sabitine bağlı grafiği çizilir ve Murnaghan eşitliğine göre fit edilir. Bunun sonucunda enerjinin minimum olduğu en kararlı durum denge durumundaki örgü sabiti belirlenmiş olur. Bu bileşikler için örgü parametresi hesaplanacak ve bu hesaplamalar sonucunda kübik kristal yapı için denge durumu kristal özellikleri belirlenecektir. Denge durumu örgü parametresi belirlendikten sonra aşağıda verilen Murnaghan eşitliğinden

yararlanılarak Bulk modülü (B_0) ve onun basınca göre birinci türevi (B'_0) belirlenir (Murnaghan, 1944).

$$P = \frac{B_0}{B'_0} \left[\left(\frac{\Omega_0}{\Omega} \right)^{B'_0} - 1 \right] \quad (2.55)$$

$$E = \frac{\Omega_0 B_0}{B'_0} \left[\frac{1}{B'_0 - 1} \left(\frac{\Omega}{\Omega_0} \right)^{B'_0 - 1} + \frac{\Omega}{\Omega_0} \right] - \frac{\Omega_0 B_0}{B'_0 - 1} + E(\Omega_0) \quad (2.56)$$

Bulk modülü dayanıklılığın bir ölçüsü olduğu için malzemelerin teknolojik uygulamalarda verimli kullanılabilmesi için bu değerin hesaplanması önemlidir. Bu tez çalışmasında GGA metodunu kullanılarak hesaplanan toplam enerji değerleri literatürdeki verilerle karşılaştırılarak kullanılan teorinin uyumluluğu ispatlanmıştır. Teorik olarak hesapladığımız sonuçlar, literatürde bulunan deneysel ve teorik veriler ile karşılaştırıldığında mükemmel yakın bir uyum olduğu söylenebilir. Örgü parametrelerindeki farklılık en fazla %1'dir. Ayrıca iç parametre ve bulk modülü değerleri de literatürdeki sonuçlarla neredeyse aynı çıkmıştır.

2.3.3. Elektronik enerji band yapısı hesaplamaları

Kristalin yapısal parametreleri belirlendikten sonra elektronik yapı hesaplamaları yapılacaktır. DFT'ye göre elektronik enerji (E_{el}) denklem 2.11'de verilen eşitlikten yararlanarak hesaplanır. Hesaplamalarımız boyunca, genişlemedeki düzlem dalga sayısı 60 Ry'lık bir kesme enerjisi kullanılarak belirlenecektir. Momentum uzayı entegrasyonu, Brillouin bölgesinin (IBZ) indirgenemez kısmı üzerinde Monkhorst-Pack özel k-noktaları örnekleme şeması kullanılarak gerçekleştirilir (Monkhorst ve ark., 1976).

Hesaplamalarımız sonucunda bu tez kapsamında incelenecek malzemelerin enerji band yapısı ve elektronik durum yoğunluğu grafikleri elde edilmiştir. Elektronik enerji band grafikleri incelendiğinde, değerlik ve iletkenlik bandlarının Fermi seviyesini kestikleri bu yüzden bu malzemelerin iletkenlik özelliği gösterdikleri görülmüştür. BCS teorisi, süperiletkenlik olayının Fermi seviyesi civarındaki elektronlar tarafından kaynaklandığını belirtir. Bu yüzden Fermi seviyesindeki elektronik durum yoğunluğu süperiletkenlik için önemli bilgiler vermektedir. Elektronik durum yoğunluğu grafikleri incelendiğinde en büyük katkının büyük oranda Nb atomunun 4d orbitalinden kaynaklandığı görülmüştür. Bu yüzden bu süperiletkenlerde Cooper

çiftlerinin oluşumunda Nb atomlarının etkisinin önemli olduğu söylenebilir. Süperiletkenliğe hangi orbitallerin ne ölçüde katkı yaptığını belirlemek önemli bilgiler verdiğinden tez kapsamında çalışılacak malzemelerin elektronik enerji hesaplamaları yapılmıştır.

2.3.4. Elastik özelliklerin belirlenmesi

C_{11} , C_{12} , ve C_{44} olmak üzere kübik kristaller için birbirlerinden bağımsız üç elastik sabit vardır. Mekanik olarak kararlı olabilmesi için kübik yapıların aşağıdaki Born kriterlerini sağlaması gerekir (Afaq vd., 2019; Heciri vd., 2019).

$$\begin{aligned} C_{11} &> 0 \\ C_{44} &> 0 \\ C_{11} - C_{12} &> 0 \\ C_{11} + 2 C_{12} &> 0 \end{aligned} \quad (2.57)$$

Tez kapsamında incelenecek tüm bileşiklerin elastik sabitleri hesaplanacak ve bu yapıların mekanik olarak kararlı oldukları belirlenecektir. Ayrıca Voigt-Reuss-Hill (VRH) eşitlikleri kullanılarak isotropik Bulk modülü (B_{VRH}), isotropik shear modülü (G_{VRH}), Poisson oranı (ν) ve elastik modülü (E) belirlenecektir. Kübik kristaller için genel Voigt-Reuss-Hill formülleri;

$$B_V = B_R = \frac{1}{3} (C_{11} + 2C_{12}) \quad (2.58)$$

$$G_V = \frac{1}{5} (C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (2.59)$$

$$G_R = [5(C_{11} - C_{12})C_{44}] / [4C_{44} + 3(C_{11} - C_{12})] \quad (2.60)$$

$$B_H = \frac{1}{2} (B_V + B_R) \quad (2.61)$$

$$G_H = \frac{1}{2} (G_V + G_R) \quad (2.62)$$

$$E = \frac{9B_H G_H}{3B_H + G_H} \quad (2.63)$$

$$\nu = \frac{3B_H - E}{6B_H} \quad (2.64)$$

şeklindedir (Voigt, 1928; Reuss, 1929; Hill, 1952). Bu tez kapsamında çalışılan tüm bileşikler için, bulk modülü (B_H), shear modülü (G_H), Young modülü (E), bulk modülünün shear modülüne oranı (B_H/G_H) ve Poisson oranı (ν) yukarıdaki denklemler kullanılarak hesaplanmış ve tüm bileşiklerin süneklik koşullarını sağladıkları görülmüştür. Voigt şeması, polikristalin malzeme boyunca gerilmenin tekdüze olduğunu varsayarken, Reuss şeması tekdüze bir gerilimi dikkate alır. Sonuç olarak, Voigt ve Reuss modülleri sırasıyla gerçek polikristal modüller için üst ve alt sınırlara karşılık gelir. Hill şeması, tek kristal elastik sabitlerinden mekanik özellikler için en iyi tahmini ifade eden iki sınırın bir ortalamasıdır.

Isı kapasitesi ve erime sıcaklığı gibi kristallerin önemli bazı fiziksel özelliğini belirlemek için Debye sıcaklığından yararlanılabilir. Debye sıcaklığı aşağıdaki denklem ile ifade edilir.

$$\Theta_D = \frac{h}{k_B} \left(\frac{3n N_A \rho}{4\pi M} \right)^{1/3} V_m \quad (2.65)$$

Burada h : Planck sabiti, k_B : Boltzmann sabiti, n : atom sayısı, N_A : Avagadro sayısı, ρ : yoğunluk ve M ise moleküler ağırlığı belirtmektedir. V_m ses hızını ifade etmektedir ve ses hızı aşağıdaki denklem ile verilir.

$$V_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{V_T^3} + \frac{1}{V_L^3} \right) \right]^{-1/3} \quad (2.66)$$

$$V_T = \left(\frac{G_H}{\rho} \right)^{(1/2)} \quad (2.67)$$

$$V_L = \left(\frac{3B_H + 4G_H}{3\rho} \right)^{(1/2)} \quad (2.68)$$

Burada V_T ile V_L sırası ile boyuna ve enine ses hızını belirtir.

2.3.5. Ab initio örgü dinamiği teorisi

Bu tez kapsamında bir diğer hedefimiz çalışılacak kristallerin fonon yapılarını inceleyerek süperiletkenlik özelliklerini daha iyi anlayabilmektir. Bunun için

çalışılacak malzemelerin fonon spektrumu ve fonon durum yoğunluğu, örgü dinamiğinden elde edilen kuvvet sabitleri kullanılarak belirlenecektir. Kübik kristal yapıya sahip malzemelerinin fonon durum yoğunluğu grafikleri elde edilmiştir. Fonon spektrumlarının belirlenmesi için Brillouin bölgesinde $4 \times 4 \times 4$ 'lük $\vec{q}$ noktaları ile kübik yapı için simetriden dolayı 10 dinamik matris hesaplanmıştır. İncelediğimiz bileşiklerin kristali birim hücrede sekiz atom içermektedir. Bu yüzden yirmi dört fonon modu elde edilir. Bunlardan üç tanesi akustik kalan yirmi bir tanesi optik fonon modudur. Daha sonra titreşimlere hangi atomun hangi frekans aralığında ne ölçüde katkı yaptığını belirleyebilmek ve fonon yapısını daha iyi anlayabilmek için Brillouin bölgesinin içinde alınan $\vec{q}$ vektörleri ile fonon durum yoğunluğu hesaplaması yapılmıştır. Fonon spektrumunu ve durum yoğunluğunu belirleyebilmek için dinamik matrisler Fourier dönüşümüne tabi tutulmuştur.

2.3.6. Süperiletkenlik özellikleri için kullanılan teori

Elektron-fonon etkileşim matrisi $g_{(\vec{k}+\vec{q})m;kn}^{\vec{q}j}$ aşağıdaki şekilde ifade edilir.

$$g_{(\vec{k}+\vec{q})m;kn}^{\vec{q}j} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}j}}} \langle \Phi_{(\vec{k}+\vec{q})m} | \vec{e}_{\vec{q}j} \vec{\nabla} V^{\text{SCF}}(\vec{q}) | \Phi_{kn} \rangle \quad (2.69)$$

Burada M atomik kütle belirtmektedir. $\vec{\nabla} V^{\text{SCF}}(\vec{q})$ ise $\vec{q}$ dalga vektörüne sahip bir fonondan kaynaklanan atomik yerdeğiştirmeye göre kararlı etkin potansiyelin türevini belirtir. Elektron-fonon matris elemanları ve $\gamma_{\vec{q}j}$ fonon çizgi genişliği belirlenir.

$$\gamma_{\vec{q}j} = 2\pi\omega_{\vec{q}j} \sum_{\vec{k}nm} |g_{(\vec{k}+\vec{q})m;kn}^{\vec{q}j}|^2 \delta(\varepsilon_{kn} - \varepsilon_F) \delta(\varepsilon_{(\vec{k}+\vec{q})m} - \varepsilon_F) \quad (2.70)$$

Süperiletkenlik hesaplamaları için çok önemli olan elektron-fonon etkileşim parametresi ise aşağıdaki denklem ile belirlenir.

$$\lambda_{\vec{q}j} = \frac{\gamma_{\vec{q}j}}{\pi N(E_F) \omega_{\vec{q}j}^2} \quad (2.71)$$

Burada $N(E_F)$, Fermi seviyesi durum yoğunluğunu ifade etmektedir. Elektron fonon etkileşim parametresini hesaplamak için izotropik Eliashberg spektral fonksiyonu uygundur. Bu fonksiyon;

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{1}{2\pi N(E_F)} \sum_{\vec{q}j} \frac{\gamma_{\vec{q}j}}{\hbar \omega_{\vec{q}j}} \delta(\omega - \omega_{\vec{q}j}) \quad (2.72)$$

eşitliği ile verilir. İzotropik durumlar için ortalama electron fonon etkileşim parametresi;

$$\lambda(\omega) = 2 \int \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega \quad (2.73)$$

eşitliğinden hesaplanabilirken anizotropik durumlar için electron fonon etkileşim parametresi şu şekilde hesaplanacaktır;

$$\lambda(\vec{k}, m) = 2N(E_F) \sum_{m'} \frac{\omega_{m'}}{\omega_m^2 + \omega_{m'}^2} \left| g_{(\vec{k}+\vec{q})m;kn}^{\vec{q}j} \right|^2 \quad (2.74)$$

Elektron-fonon etkileşim parametresi hesaplandıktan sonra süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı aşağıdaki denklem ile belirlenebilir;

$$T_c = \frac{\omega_{ln}}{1.2} \exp[-[1.04(1 + \lambda)]/[\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)]] \quad (2.75)$$

Burada ω_{ln} logaritmik ortalama fonon frekansını ifade etmektedir ve aşağıdaki denklem ile belirlenir;

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

Elektronik özgül ısı sığası katsayısı ise aşağıdaki formülle verilir.

$$\gamma = \frac{1}{3} \pi^2 k_B^2 N(E_F) (1 + \lambda) \quad (2.77)$$

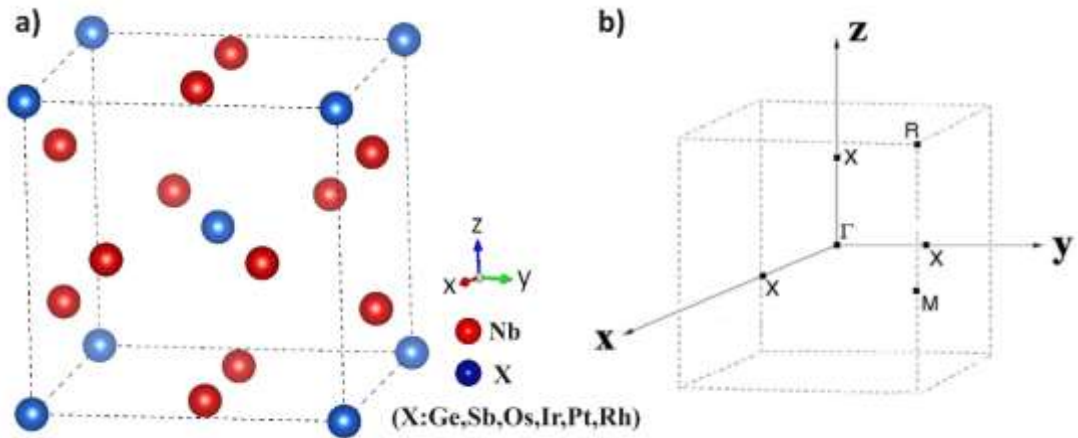
Son olarak elektron fonon etkileşimine hangi modların ne ölçüde katkı yaptığı Eliashberg spektral fonksiyonu dağılımından yararlanılarak belirlenecektir.



3. ARAŞTIRMA SONUÇLARI

3.1. Giriş

Teknolojik uygulamalarda birçok çalışma alanı olan A15 tipi süperiletkenler üzerine yapılan araştırmalar günümüzde halen artarak devam etmektedir (Sattigeri ve ark. 2024; Wu, L. N. ve ark. 2023; Zeng, L. Y. ve ark. 2023; Ahmed, E. ve ark. 2022; Karaca, E. ve ark. 2022). A15 tipi kübik kristal yapıda kristalleşen süperiletkenler içinde en yüksek süperiletkenlik geçiş sıcaklığına sahip olan bileşiğin Nb_3Ge olması nedeniyle uzun yıllardır Nb tabanlı bileşikler üzerine yapılan çalışmalar ilgi çekici olmuştur. Bu nedenle, bu tez kapsamında kristal yapısı kübik, uzay grubu $cP8$ Pearson sembolü ile $Pm\bar{3}n$ (No:223) olan A15 yapısına sahip niyobyum bazlı Nb_3X (X: Ge, Sb, Os, Ir, Pt, Rh) bileşiklerinin süperiletkenlik özellikleri araştırılmış ve elde edilen sonuçlar önceki bulunan veriler ile karşılaştırılmış ve detaylı bir şekilde tartışılmıştır. Birim hücredeki 6 Nb atomu ile 2 X atomları için Wyckoff konumları sırasıyla $6Nb$ için (6c) $(1/4, 0, 1/2)$ ve $2X$ için (2a) $(0,0,0)$ şeklindedir. Kübik A15 tipi Nb_3X bileşiklerinin elde edilen kristal yapısı Şekil 3.1(a)'da verilmiştir. Basit kübik kristal örgünün birinci Brillouin bölgesi üzerindeki yüksek simetri noktaları Şekil 3.1(b)'de sunulmuştur. Bu şekilde yüksek simetri noktaları $\Gamma(0,0,0)$, $X(0, \frac{1}{2}, 0)$, $M(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$, ve $R(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 'dir.



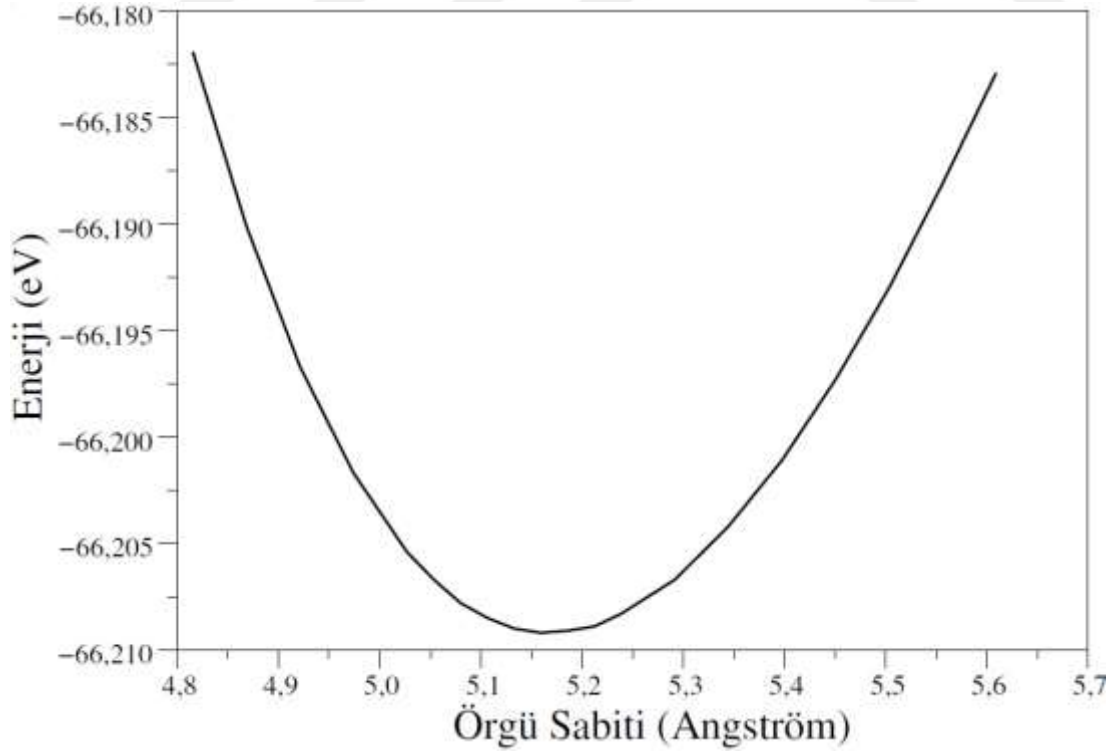
Şekil 3.1. a) Nb_3X bileşikleri için kristal yapının gösterimi. b) Basit kübik örgünün ilk Brillouin bölgesindeki yüksek simetri noktaları.

Bu bileşiklerin hepsinin kristal yapısı aynı olduğu için sonuç kısmının ilk kısmında bu kristal yapının özellikleri sunulmuştur. Daha sonra tüm bileşiklerin tez kapsamında incelenen özellikleri ayrıntılı bir şekilde her bir bileşik için tek tek ele alınmıştır.

3.2. Nb₃Os Bileşiği

3.2.1. Nb₃Os bileşiğinin yapısal özellikleri

A15 tipinde olan Nb₃Os'nin kübik kristal yapısı Şekil 3.1.'de gösterilmiştir. Nb₃Os'nin örgü sabiti (a), bulk modülü (B) ve basınç türevi (B') geometri optimizasyonu ve Murnaghan durum denklemleri denklem 2.55. ve 2.56. kullanılarak belirlenmiştir (Murnaghan,1944). Denge parametreleri (a, B ve B') Tablo 3.1.'de listelenmiştir. Bu değerler önceki teorik ve deneysel sonuçlarla uyumludur (Naher ve ark., 2018; Paduani, 2007a ; Nevit, 1977; Beck, 1963). Denge durumundaki örgü sabitinin tayin edilmesi, fiziksel özelliklerin belirlenmesi açısından önemli bir parametre olan toplam enerjinin hesaplanması için gereklidir. Bu sebeple Nb₃Os bileşiği için belli bir aralıktaki örgü sabitlerine karşılık enerji değerleri hesaplanarak Şekil 3.2.'de gösterilen enerjinin örgü sabitine bağlı grafiği çizilmiş ve Murnaghan eşitliğine göre fit edilmiştir.



Şekil 3.2. Nb₃Os bileşiği için enerjinin örgü sabitine bağlı grafiği.

Nb ve Os atomları arasındaki bağ uzunluğu değeri 2.891 Å olarak belirlenmiştir, bu değer Niyobyum ve Osmiyum atomları için 3.08 Å olan kovalent yarıçapların toplamından biraz daha kısadır (Cordero ve ark., 2008; Pyykkö ve ark., 2009). Bu sonuçlar Nb ve Os atomlarının iyonik ve kovalent etkileşimlerin bir kombinasyonu ile bağlı olduğunu göstermektedir. Nb₃Os için Nb-Nb mesafesi 2.585 Å olup, elementel Nb'deki Nb-Nb mesafesinden (2.86 Å) oldukça kısadır (Karaca ve ark., 2021). Sonuçlar, Nb₃Os bileşiğindeki Nb atomları arasında güçlü bağ kuvvetlerinin varlığına işaret etmektedir. Ayrıca bu değerler daha önceki değerler ile uyumludur (Naher ve ark., 2018).

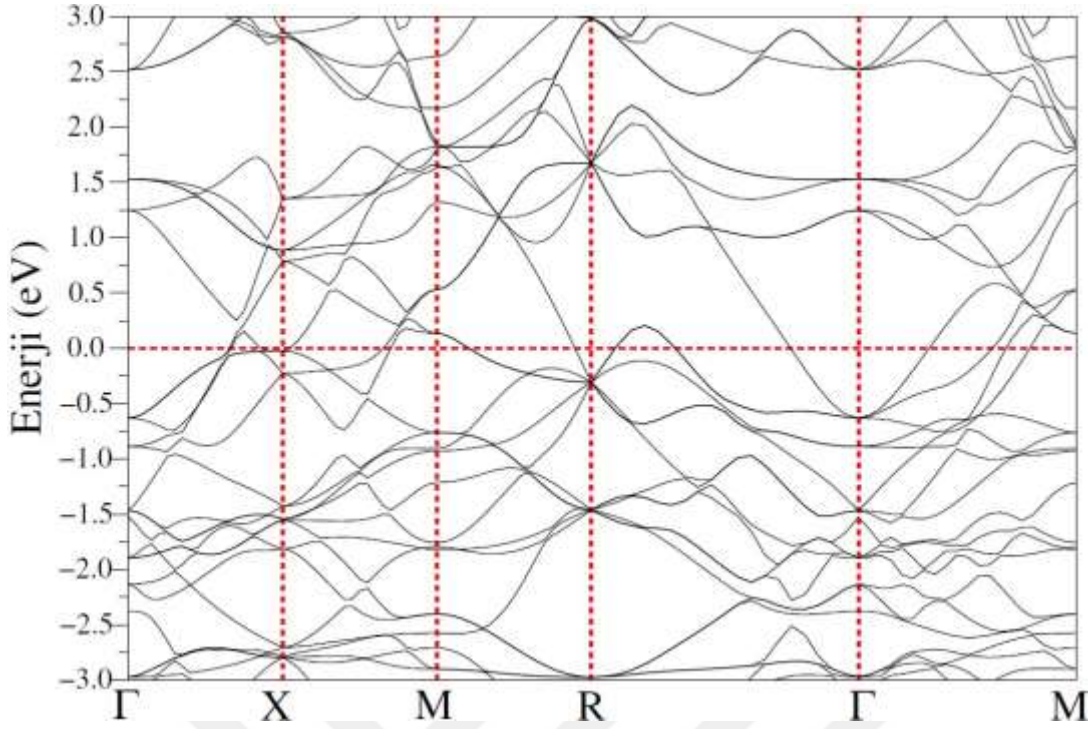
Tablo 3.1. Kübik Nb₃Os bileşiği için elde edilen yapısal parametreler ve bu parametrelerin deneysel ve teorik veriler ile karşılaştırılması.

	a (Å)	d ₁ (Å)	d ₂ (Å)	B(GPa)	B'
Bu Çalışma	5.17	2.585	2.891	218.7	3.91
Teorik (GGA) (Paduani, 2007a)	5.18			218.78	
Teorik (GGA) (Naher ve ark., 2018)	5.16	2.580	2.900	225.26	
Deneysel (Beck, 1963; Nevit, 1977)	5.14				

a: Kübik Nb₃Os bileşiğinin örgü sabiti; d₁: Nb-Nb arasındaki bağ uzunluğu; d₂: Nb-Os arasındaki bağ uzunluğu; B: Bulk modülü; B': Bulk modülünün basınca göre birinci türevi

3.2.2. Nb₃Os bileşiğinin elektronik özellikleri

Nb₃Os'nin basit kübik Brillouin bölgesi içinde seçilen yüksek simetri yönleri boyunca hesaplanan enerji bandı yapıları Şekil 3.3.'de gösterilmiştir. Şekilde 0 eV Fermi enerjisi seviyesini göstermektedir. İncelenen Nb₃Os bileşiği, gösterilen band yapısında belirtildiği gibi üç boyutlu bir metaldir; önemli dağılıma sahip bir dizi band Fermi seviyesini geçmektedir. Bileşiğin elektronik yapısı $\Gamma - X$ yönünün sonunda Fermi seviyesine karşılık gelen kısa bir bölgede hemen hemen düz bir band bulunmaktadır ve bu band Fermi seviyesinin yakınında keskin bir pik yapma potansiyeli taşımaktadır. Ayrıca $\Gamma - X$ yönündeki bu düz band bize Nb₃Os'nin Fermi seviyesindeki durum yoğunluğunun ($N(E_F)$) değeri hakkında da bilgi vermektedir. Bu özellik, A15 bileşiklerindeki süperiletkenliği anlamak için büyük önem taşımaktadır. BCS teorisi, süperiletkenlik olayının Fermi seviyesi civarındaki elektronlardan kaynaklandığını ve Cooper çiftlerini bu elektronların oluşturduğunu belirtir. Daha önceki teorik çalışmaların hesaplanan enerji bandı yapısı ile uyumu elde edilen sonuçların güvenilir olduğunu göstermektedir (Naher ve ark., 2018; Paduani, 2007a).



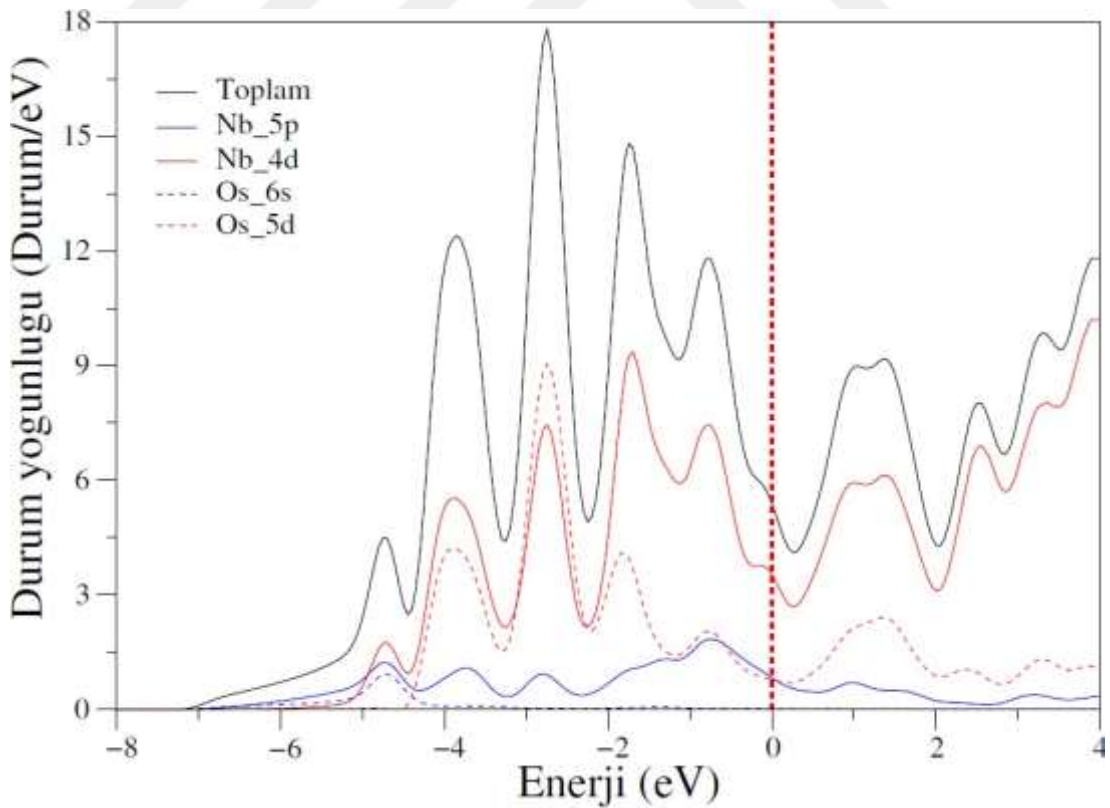
Şekil 3.3. Nb₃Os bileşiği için elektronik band yapısı grafiği.

Nb₃Os bileşiğinin elektronik enerji band yapısındaki elektronik bandların kökenini belirlemek için Nb₃Os bileşiğinin toplam ve kısmi durum yoğunluğu (DOS) analiz edilmiş ve şekil 3.4.'de verilmiştir. Şekilde 0 eV daki kırmızı kesikli çizgi Fermi enerji seviyesini ifade etmektedir. Bu sonuçlar, kübik Nb₃Os bileşiğinin süperiletken özelliklerinin oluşumuna en önemli katkının -7.2 ile -5.0 eV arasında Nb 5p elektronlarından, -5.0 eV'dan Fermi seviyesine kadar ise Os 5d elektronlarının katkısının daha büyük olduğu -3.0 ile -2.0 eV arasında kalan bölge hariç büyük oranda Nb atomlarının 4d elektronlarından gelmektedir. Bu sonuçlar, kübik Nb₃Os bileşiğinin süperiletken özelliklerinin oluşumuna en önemli katkının Nb atomlarının 4d elektronlarından geldiğini ve bunun da $N(E_F)$ değerini arttırdığını ve aşağıda verilen denklem 3.1. McMillan-Hopfield ifadesine göre λ değerinde bir artışa yol açtığı anlamına gelmektedir (Allen ve ark., 1975; Beckstein ve ark., 2001);

$$\lambda = \frac{N(E_F)\langle I^2 \rangle}{M\langle W^2 \rangle} \quad (3.1)$$

Burada $\langle W^2 \rangle$ ortalama karesi alınmış fonon frekansını, $\langle I^2 \rangle$ ise ortalama karesi alınmış elektron-fonon matris elemanını tanımlar ve M ortalama atomik kütleyi gösterir.

Değerlik DOS bölgesi incelendiğinde gözlemlenebilen birkaç dikkat çekici pik özelliği vardır. İlk pik yaklaşık -4.7 eV civarındadır ve tüm bu pikler Nb 4d, Nb 5p ve Os 6s elektronik durumlarının kombinasyonu ile ilgilidir. Ayrıca Nb 4d ve Os 5d durumları arasında hibritleşme gösteren yaklaşık -3.8 ve -2.8 eV enerjili iki pik daha vardır. Bu hibritleşme ilgili atomların hem iyonik hem de kovalent etkileşimler yoluyla bağlandığını göstermektedir. Nb 4d durumları, diğer elektronik durumlardan gelen küçük katkılarla birlikte -2.3 ile 4.0 eV arasında baskındır. Bu durumlar Nb-Nb bağları gibi metalik bağlarda rol oynamaktadır. Os'nin Fermi seviyesi yakınındaki durum yoğunluğunun (DOS) Nb atomlarına kıyasla çok küçük olmasından dolayı Os atomlarının Nb₃Os'nin elektronik ve süperiletkenlik özellikleri üzerindeki etkisinin ihmal edilebileceğini sonucuna varabiliriz. Dolayısıyla, Os atomlarının rolü Nb₃Os'nin kübik kristal yapısının kararlılığını artırmaktır. Nb₃Os'nin Fermi seviyesindeki DOS değeri $N(E_F) = 0.664$ durum/eV.atom olarak belirlenmiş olup Nb ve Os atomlarının $N(E_F)$ 'ye katkısının büyük oranda Nb atomlarının 4d elektronlarından kaynaklandığı söylenebilir. Bu sonuçların daha önceki teorik sonuçlarla uyumlu olduğu görülmektedir. (Naher ve ark., 2018; Paduani, 2007a)



Şekil 3.4. Nb₃Os bileşiği için toplam ve kısmi elektronik durum yoğunluğu.

3.2.3. Nb₃Os bileşiğinin elastik ve mekanik özellikleri

Süperiletken bileşiklerin elastik özelliklerinin analizi, süper iletken özelliklerinin teorik yönlerinin anlaşılmasında çok önemli bir rol oynamaktadır. Ayrıca, elastik sabitler bileşiklerin mekanik kararlılığını ve sertliğini belirlemek için kullanılabilir. Bu sonuçlar, potansiyel uygulama alanlarının belirlenmesi için faydalı bilgiler verir. Kübik kristal Nb₃Os için elastik sabitler (C_{11} , C_{12} ve C_{44}), genelleştirilmiş Hooke yasasına dayanan gerilme-gerinim yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır (Beckstein ve ark., 2001). Bu yöntemde, kristal örgüye küçük gerilmeler uygulanır ve ardından ortaya çıkan gerilmeyi belirlemek için örgü gevşetilir. Son olarak, Nb₃Os için üç farklı tek kristal elastik sabiti, gerilme-gerinim ilişkileri kullanılarak hesaplanmıştır (Dal Corso, 2016). Nb₃Os için belirlenen elastik sabitler ve mevcut teorik veriler Tablo 3.2.'de gösterilmiştir (Naher ve ark., 2018). Tablo 3.2.'de görüldüğü gibi Nb₃Os'nin en yüksek elastik sabiti C_{11} değerine ait olduğu için x eksenini boyunca doğrusal sıkıştırmaya karşı büyük bir dirence sahiptir. Bu, Nb₃Os bileşiğinin bu yönde en yüksek sıkıştırılmazlığa sahip olduğu anlamına gelir. Kübik kristallerde, bir element Born kriterlerini karşılıyorsa mekanik olarak karardır. Tablo 3.2.'den, Nb₃Os bileşiğinin mekanik olarak karardır olduğu açıktır çünkü Born'un kübik kristaller için karardılık koşullarını karşılamaktadır (Born ve ark., 1955).

Tablo 3.2. Kübik Nb₃Os bileşiği için hesaplanan elastik sabitler, elastik modüller ve bu değerlerin teorik verilerle karşılaştırılması.

	C_{11}	C_{12}	C_{44}	B_H	G_H	E_H	C_p	B_H/G_H	ν
Bu Çalışma	399.2	135.7	63	223.5	85.1	226.5	72.7	2.63	0.33
Teorik (GGA)	413.1	131.3	67.3	225.3	90.9	240.3	64	2.48	0.32

(Naher ve ark., 2018)

C_{11} , C_{12} ve C_{44} (GPa): Elastik sabitler; B_H (GPa): Bulk modülü; G_H (GPa): Kayma modülü; E_H (GPa): Young modülü; C_p (GPa): Cauchy basıncı; B_H/G_H : Bulk modülünün kayma modülüne oranı; ν : Poisson oranı

Nb₃Os'nin mekanik özellikleri, elastik sabitler ve Voigt-Reuss-Hill (VHR) yaklaşımı kullanılarak elastik modüller (bulk modülü B_H , kayma modülü G_H , Young modülü E) ve Poisson oranı ν hesaplanarak belirlenmiştir (Han ve ark., 2018). Bu yöntem alt sınır olarak Voigt yaklaşımını ve üst sınır olarak Reuss yaklaşımını kullanır. Hill yaklaşımı Voigt ve Reuss değerlerinin ortalamasını temsil etmek için kullanılır. Bulk modülü denklem 2.58., kayma modülü denklem 2.59. ve 2.60., Bulk ve kayma modülünün ortalamaları da denklem 2.61. ve 2.62., Young modülü (E) denklem 2.63. ve Poisson oranı (ν) denklem 2.64. ile hesaplanabilir (Chen ve ark., 2014; Salma ve ark., 2018; Luan ve ark., 2018). Tablo 3.2., Nb₃Os için bu yaklaşımla elde edilen tüm

parametreleri ve Nb₃Os için önceki teorik sonuçları göstermektedir (Naher ve ark., 2018). Nb₃Os için elastik sabitlerden elde edilen 223.5 GPa bulk modülü, Tablo 3.1.'de gösterildiği gibi Murnaghan durum denkleminde hesaplanan 218.7 GPa değeriyle uyumludur. Her iki yöntemden elde edilen sonuçların benzerliği, hesaplamalarımızın doğruluğunun kanıtıdır. Bulk modülü bize malzemenin sıkıştırılabilirliği hakkında, Young modülü, katıların sertliği hakkında fikir verir. Cauchy basıncı ($C_p = C_{12} - C_{44}$), B_H/G_H oranı ve Poisson oranı (ν) kübik kristallerin doğal sünekliğini ve kırılabilirliğini değerlendirmek ve kristallerin kayma deformasyonuna karşı kararlılık ölçümü için kullanılabilir (Lebga ve ark., 2018; Ganeshan ve ark., 2009; Haines ve ark., 2001; Pugh, 1954). C_p değeri sıfırdan büyükse, kristal sünek özelliklere sahiptir. Aksine, değer sıfırdan küçük veya sıfıra eşitse, kristal kırılabilir olarak kabul edilir. Tablo 3.2.'den Nb₃Os'nin C_p değerinin 72.7 GPa olduğu görülmektedir. Bu sonuç, Nb₃Os'nin sünek bir karakter sergilediğini göstermektedir. B_H/G_H oranı, bir malzemenin sünek mi yoksa kırılabilir mi olduğunu belirlemek için kullanılan 1.75'lik kritik bir değere sahiptir (Pugh, 1954). Nb₃Os, Tablo 3.2.'deki 2.63 değeri ile 1.75'ten büyük B_H/G_H oranına sahiptir, bu da Cauchy basınç hesaplamalarından elde edilene benzer şekilde Nb₃Os'nin sünek özelliklere sahip olduğunu gösterir. Malzemelerin sünek ve kırılabilir karakterlerini belirleyebilen bir diğer parametre, kritik değeri 0.26 olan Poisson oranıdır. Poisson oranının kritik değerden büyük olması durumunda malzemenin sünek davranış sergilediği, aksi takdirde kırılabilir olarak kabul edildiği iyi bilinmektedir. Nb₃Os'nin Tablo 3.2.'deki 0.33 Poisson oranı değerinin kritik değer 0.26 olan değerden daha büyük bir değere sahip olması sünek karaktere sahip olduğunu göstermektedir.

3.2.4. Nb₃Os bileşiğinin titreşim özellikleri

Merkezi-fonon modları O_h ($Pm\bar{3}n$) nokta grubu ile tanımlanır ve Γ noktasındaki optik fonon modları denklem 3.2. ile verilmiştir.

$$\Gamma(O_h) = T_{1g} + T_{2g} + 2T_{1u} + 2T_{2u} + E_g + A_{2g} \quad (3.2)$$

Nb₃Os için Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν) ve elektron fonon etkileşim parametreleri (λ) Tablo 3.3.'de gösterilmiştir. A, E ve T sırasıyla tekli, çift ve üçlü dejenere modlardır. T_{2g} ve E_g modları Raman aktif, T_{1u} modları kızılötesi aktif ve geri

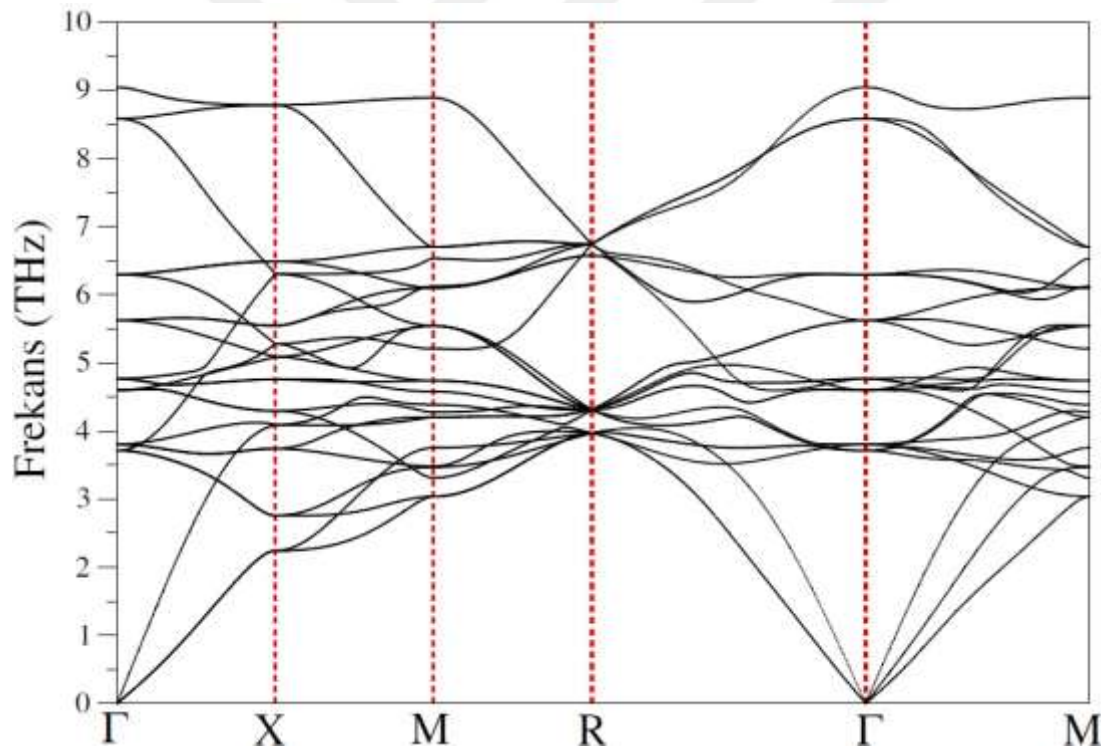
kalan modlar pasiftir. Ayrıca λ değerinin en büyük değeri pasif T_{1g} moduna aittir. Bu bileşiğin titreşim özellikleri daha önce çalışılmadığı için karşılaştırma yapılamamıştır.

Tablo 3.3. Nb₃Os için Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν) ve her moda karşılık hesaplanan elektron fonon etkileşim parametreleri (λ).

	$T_{1u}(I)$	$T_{2u}(S)$	$T_{1g}(S)$	$T_{1u}(I)$	$T_{2g}(R)$	$T_{2u}(S)$	$E_g(R)$	$A_{2g}(S)$
ν (THz)	3.704	3.805	4.601	4.729	5.624	6.297	8.586	9.046
λ	0.017	0.010	0.035	0.014	0.024	0.006	0.013	0.012

I, R ve S gösterimleri sırasıyla kızılötesi aktif, raman aktif ve pasif (silent) modları ifade etmektedir.

Şimdiye kadar Nb₃Os'nin Γ noktası optik fonon modlarını tartıştık, ancak T_c 'yi tahmin etmek için ortalama λ 'yı hesaplamak amacıyla, fonon spektrumlarının tamamını ve fonon durum yoğunluğunu (DOS) anlamak çok önemlidir. Nb₃Os'nin basit kübik Brillouin bölgesindeki fonon dispersiyon grafiği Şekil 3.5.'de gösterilmiştir.



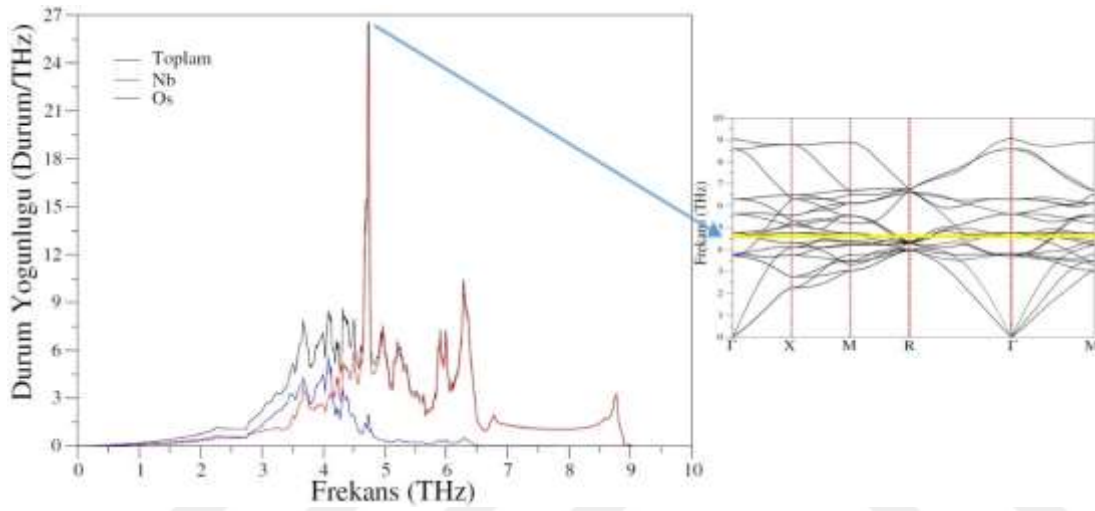
Şekil 3.5. Nb₃Os bileşiği için hesaplanan fonon dispersiyon eğrileri.

Nb₃Os bileşiğinin birim hücresindeki 8 atomun 24 fonon modu ürettiği iyi bilinmektedir. Bu modlardan üçü akustik, diğer 21'i ise optik modlardır. 3 akustik modun 2'si enine akustik (TA) ve 1'i boyuna akustik (LA) iken, benzer şekilde 21 optik modun 14'ü enine optik (TO) ve 7'si boyuna optik (LO) modlardır. Bununla birlikte, basit kübik örgünün simetrisi nedeniyle bazı modlar üst üste biner ve bu nedenle bu

24 mod Şekil 3.5.'deki tüm yönler ve simetri noktaları için görünmez. Γ noktasında sekiz optik fonon modu vardır. Bunlardan altısı 3 kat dejenere, bir fonon modu 2 kat dejenere ve diğeri de dejenere değildir. Benzer şekilde, X noktasında 12 çift dejenere fonon modu vardır. M noktasında, 6 çift dejenere mod vardır ve diğeri dejenere değildir. Son olarak, R noktasında, üçü 6 kat dejenere, biri 4 kat dejenere ve diğeri 2 kat dejenere olmak üzere toplam 5 fonon modu vardır. Bir katının temel uyarımlarının, atomlar arası etkileşimlerin gücünü yansıtan özvektörler ve özfrekanslar ile tanımlandığı iyi bilinmektedir. Denge yapısının simetrisi (uzay grubu) nedeniyle, bireysel özvektörler için kısıtlamalar vardır. Özel yüksek simetri durumlarında, fonon özvektörleri yalnızca grup teorik değerlendirmeler temelinde bile tahmin edilebilir. Bu simetri kısıtlamaları nedeniyle, fonon modları yüksek simetri noktalarında dejenere olabilir. Şekil 3.5.'de görüldüğü gibi akustik ve optik modlar arasında bir boşluk bölgesi yoktur. Bu sonuç, ilgili atomlar arasındaki güçlü bağ kuvvetleri ile ilişkilendirilebilir. Tüm fonon modları pozitifdir, bu da A15 sistemleri için Nb_3Os 'nin dinamik kararlılığını gösterir.

Nb_3Os 'nin toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu (PhDOS) için yapılan hesaplamaların sonuçları ve en yüksek yoğunluklu piki üreten fonon modlarının vurgulandığı fonon dispersiyon grafiği Şekil 3.6.'da sunulmuştur. Bu şekil, farklı fonon modlarının fonon spektrumunu nasıl etkilediğini anlamaya yardımcı olur. Nb_3Os 'nin toplam fonon DOS'unda herhangi bir boşluk bulunmamaktadır. Şekil 3.6.'de Nb_3Os 'nin kısmi DOS'u, Nb atomları 4.2 THz'in üstündeki geniş bölgede baskın olduğundan optik fonon dalları büyük ölçüde Nb atomlarının titreşiminden kaynaklanmaktadır. Kısmi DOS 4.2 THz altındaki bölgede ise hibridizasyon etkisi olduğu ve Os atomlarının katkısının daha güçlü olduğu görülmektedir. Buna göre Nb ve Os'nin bir kovalent bağa sahip olabileceği düşünülebilir. Bu DOS varyasyonları, elektron-fonon etkileşimini ve dolayısıyla T_c 'yi etkileyebilir. Fonon DOS grafiğinde dikkat çeken bir diğer nokta da 4.73 THz'deki en yüksek yoğunluklu piktir. Düz fonon dispersiyon bandlarının bileşiklerin fonon yoğunluk durumlarında keskin zirvelere yol açabileceği iyi bilinmektedir. Nb_3Os 'deki bu düz fonon bandlarını daha iyi görebilmek için, en yüksek yoğunluklu piki üreten fonon modlarının vurgulandığı fonon dispersiyon grafiği de Şekil 3.6.'da sunulmuştur. Daha önce de belirttiğimiz gibi, Nb_3Os 'de birim hücrede 6 Nb ve 2 Os atomu vardır. Birim hücrede 6 Nb atomu olması ve bunların birbirleriyle bağ yapması, 4.73 THz'deki en yüksek yoğunluklu pike

yaptıkları katkıyı açıklamaktadır. Dolayısıyla, bu pik için 6 Nb atomunun katkısı 2 Os atomunun katkısından çok daha büyüktür. Ayrıca bu pikin oluşumuna katkı sağlayacak enerji değerlerine sahip fonon modlarının özvektörleri fonon dispersiyon grafiğindeki tüm yönler için incelendiğinde, bu enerji değerlerinde Nb atomlarının Os atomlarına göre her zaman çok daha fazla titreştiği görülmüştür. Hatta bazı enerji değerleri için Os atomları hiç titreşmemekte ya da ihmal edilebilecek kadar az titreşmektedir. Bu nedenlerden dolayı, Nb atomları 4.73 THz'deki en yüksek yoğunluklu pikin oluşumunda çok baskın bir rol oynamaktadır.



Şekil 3.6. Nb₃Os bileşiği için elde edilen fonon durum yoğunluğu ve en yüksek yoğunluklu piki üreten fonon modlarının vurgulandığı fonon dispersiyon grafiği.

3.2.5. Nb₃Os bileşiğinin süperiletkenlik özellikleri

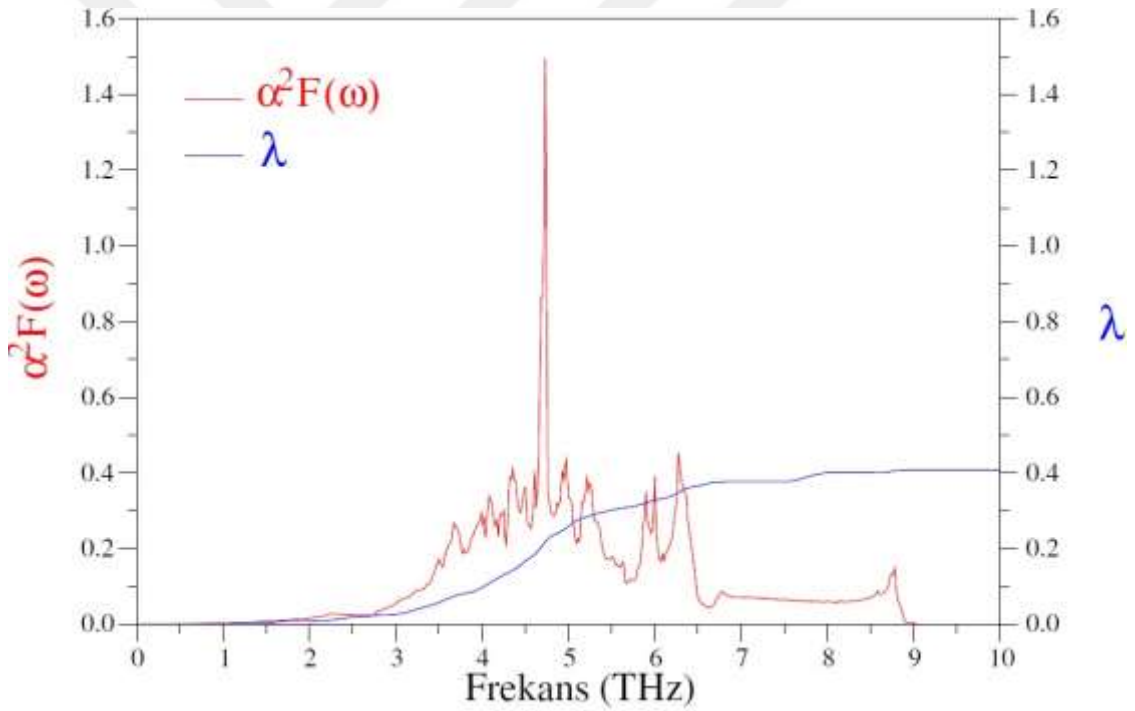
Bu araştırmanın temel amacı, Nb₃Os'deki süperiletkenliğin kaynağını elektron-fonon etkileşiminin gücünü inceleyerek araştırmaktır. Bu hedefe ulaşmak için Nb₃Os'nin Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) hesaplanmıştır. Bu spektral fonksiyonun entegrasyonundan ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi (λ) ile ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}) aşağıda verilen denklem 3.3. ve 3.4. kullanılarak ve süperiletken geçiş sıcaklığı (T_c) Allen-Dynes tarafından önerilen düzenlenmiş McMillan denklemi 3.5. ile belirlenebilir (Allen ve ark., 1975; McMillan, 1968). Burada μ^* , Coulomb itmesi için etkili bir perdeleme parametresidir. Çoğu çalışmada μ^* değeri 0.10 ile 0.16 arasında değişmektedir (Tütüncü ve ark., 2015; Allen ve ark., 1975). Biz kendi amaçlarımız doğrultusunda $\mu^*=0.13$ değerini kullanmayı tercih ettik.

$$\lambda = \int_0^{\infty} \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega \quad (3.3)$$

$$\omega_{ln} = \exp \left(2\lambda^{-1} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2 F(\omega) \ln \omega \right) \quad (3.4)$$

$$T_c = \frac{\omega_{ln}}{1.2} \exp \left(-\frac{1.04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^*(1 + 0.62\lambda)} \right) \quad (3.5)$$

Nb₃Os'nin ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ ve Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2 F(\omega)$)'nın frekansa bağlı grafiği Şekil 3.7.'de gösterilmiştir. Nb₃Os'nin λ değeri 0.41 olarak hesaplanmıştır. Şekil 3.7., $\lambda(\omega)$ 'nin en düşük frekans bölgesi tarafından domine edildiğini ve burada $\lambda \propto \omega$ olduğunu doğrulamaktadır.



Şekil 3.7. Nb₃Os için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2 F(\omega)$) (kırmızı çizgiler) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın (mavi çizgiler) frekans değişimleri.

Düşük frekans bölgesinin toplam λ 'ya katkısı %90.24'dür. Bu katkı, Nb ve Os atomlarının birleşik hareketinden kaynaklanmaktadır. Yüksek frekans bölgesi λ 'ya %9.76 katkı yapar. $\lambda(\omega)$ değeri kullanılarak logaritmik ortalama fonon frekansı (ω_{ln}) 222.97 K olarak hesaplanmıştır. Bu değerler daha sonra McMillan formülünün Allen-Dynes modifikasyonunu kullanarak süperiletken geçiş sıcaklığı T_c 'yi hesaplamak için

kullanılır. Nb₃Os'nin T_c değeri 1.05 K olarak hesaplanmıştır. Nb₃Os malzemesi için hesaplanan durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri Tablo 3.4.'de verilmiştir. Elde edilen T_c değeri deneysel değerler ile mükemmel bir uyum içindedir (Mattheis ve ark., 1963; Blaugher ve ark., 1969).

Tablo 3.4. Nb₃Os malzemesi için Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri.

	$N(E_F)$ (Durum/eV.atom)	λ	ω_{ln} (K)	T _c (K)
Bu Çalışma	0.664	0.41	222.97	1.05
Deneysel (Mattheis ve ark., 1963)				1.05
Deneysel (Blaugher ve ark., 1969)				0.943

Nb₃Os bileşiğinin süperiletkenlik özelliklerini daha iyi analiz edebilmek için en yüksek T_c sıcaklığına sahip A15 malzemesi olan Nb₃Ge ile karşılaştırmak faydalı olacaktır. BCS teorisine göre, $N(E_F)$ ve λ parametreleri bir malzemenin süperiletkenlik özelliklerini belirlemede önemli bir role sahiptir. Bu parametrelerin her ikisinin de büyük olması, süperiletken geçiş sıcaklığının da büyük olacağını gösterir. Nb₃Ge için 1984 yılında yapılan deneysel çalışmada $N(E_F)$ değeri yaklaşık 12 durum/eV olarak bulunurken, λ 1.4 olarak elde edilmiştir (Kihlstrom ve ark., 1984). Nb₃Ge için FPLAPW yöntemi kullanılarak yapılan teorik çalışmada ise $N(E_F)$ ve λ değerleri sırasıyla 14.4 durum/eV ve 1.8 olarak hesaplanmıştır (Paduani, 2009). Nb₃Ge için önceki çalışmalarda Kihlstrom ve arkadaşları (1984) tarafından elde edilen deneysel ve Paduani (2009) tarafından elde edilen teorik $N(E_F)$ değerleri, Nb₃Os için elde edilen $N(E_F) = 0.664$ durum/eV.atom değerinin iki katından fazladır. Ayrıca aynı çalışmalarda Nb₃Ge için elde edilen λ değerleri, bu çalışmada Nb₃Os için hesaplanan $\lambda = 0.41$ sonucundan çok daha büyüktür (Kihlstrom ve ark., 1984; Paduani, 2009). Bu karşılaştırmalar sonucunda Nb₃Os için hesaplanan T_c = 1.05 K değeri, Nb₃Ge için hem Paduani (2009) tarafından teorik olarak hem de Testardi (1974) tarafından deneysel olarak elde edilen 23.2 K değerinden çok daha küçüktür.

3.3. Nb₃Ge Bileşiğı

3.3.1. Nb₃Ge bileşiğinin yapısal özellikleri

A15 tipinde olan Nb₃Ge'nin kübik kristal yapısı Şekil 3.1.'de gösterilmiştir. Daha önce olduğu gibi, Nb₃Ge'nin örgü sabiti (a), bulk modülü (B) ve basınç türevi (B') geometri optimizasyonu ve Murnaghan durum denklemleri 2.55. ve 2.56. kullanılarak belirlenmiştir (Murnaghan,1944). Denge parametreleri (a, B ve B') Tablo 3.5.'de listelenmiştir. Bu değerler önceki teorik ve deneysel sonuçlarla uyumludur (Gavaler, 1973; Gavaler ve ark., 1974; Papadimitriou ve ark., 2015a, 2015b; Wu ve ark.,2020).

Tablo 3.5. Kübik Nb₃Ge bileşiğı için elde edilen yapısal parametreler ve bu parametrelerin deneysel ve teorik veriler ile karşılaştırılması.

	a (Å)	B(GPa)	B'
Bu Çalışma	5.169	168.4	3.99
Teorik (GGA) (Papadimitriou ve ark., 2015a)	5.151	174.0	4.00
Teorik (GGA) (Wu ve ark.,2020)	5.187		
Teorik (LDA) (Papadimitriou ve ark., 2015b)	5.159	172.8	4.00
Deneysel (Gavaler, 1973)	5.152±0.001		
Deneysel (Gavaler ve ark., 1974)	5.143±0.003		

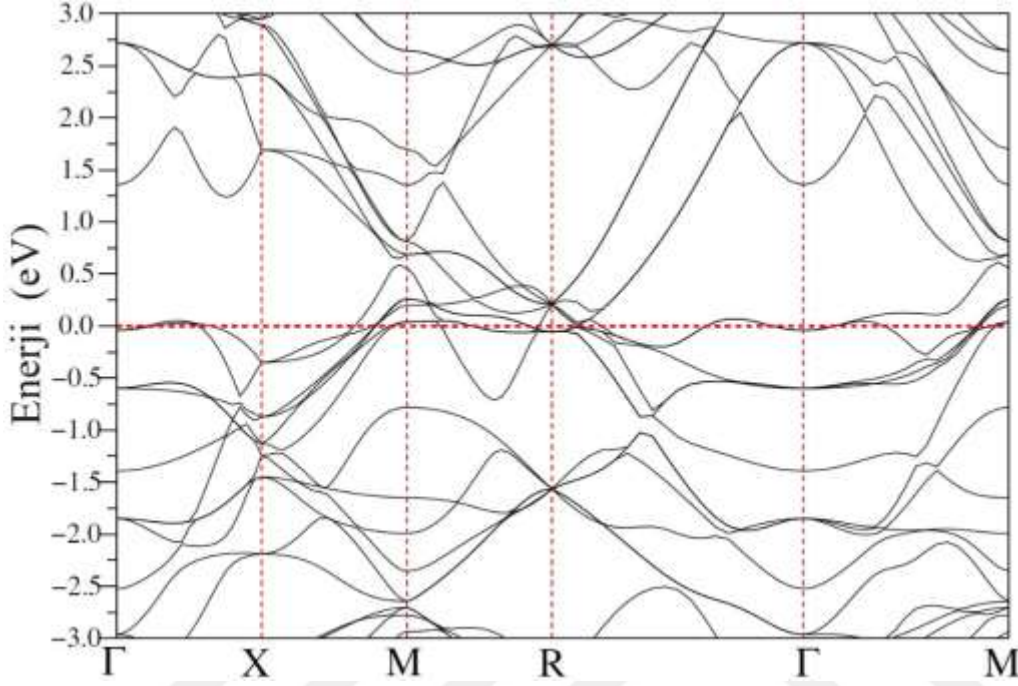
a: Kübik Nb₃Ge bileşiğinin örgü sabiti; B: Bulk modülü; B': Bulk modülünün basınca göre birinci türevi

Nb ve Ge atomları arasındaki bağ uzunluğu değeri 2.88 Å olarak belirlenmiştir, bu değer Niyobyum ve Germanyum atomları için 2.89 Å olan kovalent yarıçapların toplamından biraz daha kısadır (Cordero ve ark., 2008; Pyykkö ve ark., 2009). Bu sonuçlar Nb ve Ge atomlarının iyonik ve kovalent etkileşimlerin bir kombinasyonu ile bağlı olduğunu göstermektedir. Nb₃Ge için Nb-Nb mesafesi 2.65 Å olup, elementel Nb'deki Nb-Nb mesafesinden (2.86 Å) oldukça kısadır (Karaca ve ark., 2021). Sonuçlar, Nb₃Ge bileşiğindeki Nb atomları arasında güçlü bağ kuvvetlerinin varlığına işaret etmektedir.

3.3.2. Nb₃Ge bileşiğinin elektronik özellikleri

Nb₃Ge'nin basit kübik Brillouin bölgesi içinde seçilen yüksek simetri yönleri boyunca hesaplanan enerji bandı yapıları Şekil 3.8.'de gösterilmiştir. Şekilde 0 eV Fermi enerji seviyesini göstermektedir. İncelenen Nb₃Ge bileşiğı, gösterilen band yapısında belirtildiğı gibi üç boyutlu metallerdir; önemli dağılıma sahip bir dizi band Fermi seviyesini geçmektedir. Bileşiğın elektronik yapısı $\Gamma - X$, $M - R$, $R - \Gamma$ ve $\Gamma - M$

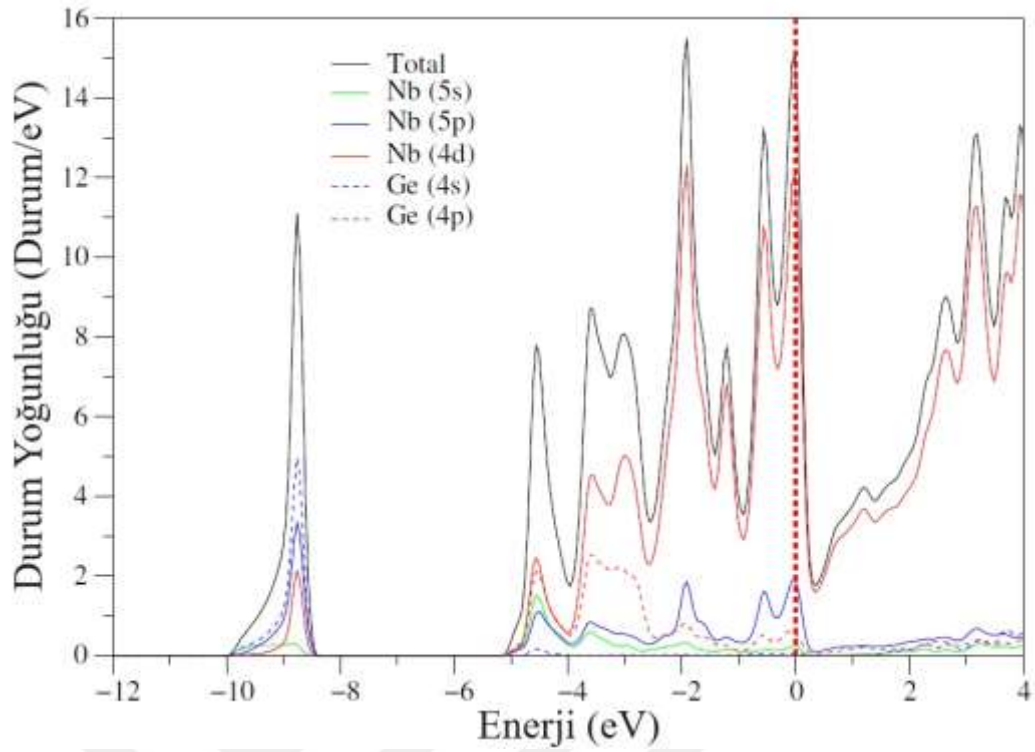
simetri çizgileri boyunca Fermi seviyesine paralel olan hemen hemen düz bandlar olduğu görülmektedir. Fermi seviyesinin yakınındaki bu düz bandlar, keskin bir pik yapma potansiyeline sahiptir. Bu özellik, A15 bileşiklerindeki süperiletkenliği anlamak için büyük önem taşımaktadır.



Şekil 3.8. Nb₃Ge bileşiğinin elektronik band yapısı.

BCS teorisi, süperiletkenlik olayının Fermi seviyesi civarındaki elektronlardan kaynaklandığını ve Cooper çiftlerini bu elektronların oluşturduğunu belirtir. Ayrıca düz bandlar $\Gamma - X$, $R - \Gamma$ ve $\Gamma - M$ yönlerinde neredeyse Fermi seviyesi ile çakıştığından Nb₃Ge'nin Fermi seviyesindeki durum yoğunluğunun ($N(E_F)$) yüksek bir değere sahip olabileceğini göstermektedir.

Nb₃Ge bileşiğinin elektronik enerji band yapısındaki elektronik bandların kökenini belirlemek için Nb₃Ge bileşiğinin toplam ve kısmi durum yoğunluğu (DOS) analiz edilmiş ve Şekil 3.9.'da verilmiştir. Şekilde 0 eV daki kırmızı kesikli çizgi Fermi enerji seviyesini ifade etmektedir. Bu sonuçlar, kübik Nb₃Ge bileşiğinin süperiletken özelliklerinin oluşumuna en önemli katkının Nb atomlarının 4d elektronlarından geldiğini ve bunun da $N(E_F)$ değerini arttırdığını ve denklem 3.1. ile verilen McMillan-Hopfield ifadesine göre λ değerinde bir artışa yol açtığı anlamına gelmektedir.



Şekil 3.9. Nb₃Ge bileşiği için toplam ve kısmi elektronik durum yoğunluğu.

Nb₃Ge'nin valans DOS bölgesi, 3.2 eV'lik bir boşlukla iki bölgeye ayrılır. Alt kısım -9.9 ile -8.3 eV arasında uzanırken, önemli kimyasal öneme sahip olan üst kısım yaklaşık -5.1 eV'dan Fermi seviyesine kadar uzanır. Alt kısımda -8.9 eV'de tek bir pik vardır ve bu pik Ge 4s, Nb 5p ve Nb 4d durumlarının önemli bir karışımıdır. Değerlik DOS bölgesinin yüksek kısmında gözlemlenebilen birkaç dikkat çekici pik özelliği vardır. -4.8 eV'deki ilk pik çoğunlukla Nb elektronik durumları ve Ge 4p durumlarının kombinasyonu ile ilgilidir. Nb 4d ve Ge 4p durumları arasındaki önemli hibritleşmeyi gösteren -3.8 ve -3.0 eV enerjili iki pik daha vardır. Bu hibritleşme ilgili atomların hem iyonik hem de kovalent etkileşimler yoluyla bağlandığını göstermektedir. Nb 4d durumları, diğer elektronik durumlardan gelen küçük katkılarla birlikte -2.8 ile 4.0 eV arasında baskındır. Bu durumlar Nb-Nb bağları gibi metalik bağlarda rol oynamaktadır. Sonuçlarımıza göre, Ge atomlarının Nb₃Ge'nin elektronik ve süperiletken özellikleri üzerindeki etkisinin ihmal edilebileceği sonucuna varabiliriz. Bunun nedeni, Ge'nin Fermi seviyesi yakınındaki gibi durum yoğunluğunun (DOS) ihmal edilebilir olmasıdır. Dolayısıyla, Ge atomlarının rolü Nb₃Ge'nin kübik kristal yapısının kararlılığını artırmaktır. Nb₃Ge'nin Fermi seviyesindeki DOS değeri $N(E_F) = 1.609$ durum/(eV.atom) olarak belirlenmiş olup, Nb ve Ge atomları sırasıyla yaklaşık

%85 ve %15 oranında katkıda bulunmaktadır. Ayrıca, Nb₃Ge için Nb 4d elektronlarının tek başına N(E_F)'ye katkısının %82 olduğu belirtilmelidir.

3.3.3. Nb₃Ge bileşiğinin elastik ve mekanik özellikleri

Elektron-fonon etkileşimi, BCS teorisinde belirtildiği gibi süperiletken özelliklerin belirlenmesinde çok önemli bir rol oynamaktadır. Fonon spektrumu ve elastik özellikler arasındaki ilişki göz önüne alındığında, süperiletken özelliklerin elastik özelliklerden de etkilendiği düşünülebilir. Bu nedenle, süperiletken bileşiklerin elastik özelliklerinin analizi, süperiletken özelliklerinin teorik yönlerinin anlaşılmasında çok önemli bir rol oynamaktadır. Ayrıca, elastik sabitler bileşiklerin mekanik kararlılığını ve sertliğini belirlemek için kullanılabilir. Bu sonuçlar, potansiyel uygulama alanlarının belirlenmesi için faydalı bilgiler verir. Kübik kristal Nb₃Ge için elastik sabitler (C₁₁, C₁₂ ve C₄₄), genelleştirilmiş Hooke yasasına dayanan gerilme-gerinim yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır (Beckstein ve ark., 2001). Bu yöntemde, kristal örgüye küçük gerilmeler uygulanır ve ardından ortaya çıkan gerilmeyi belirlemek için örgü gevşetilir. Son olarak, Nb₃Ge için üç farklı tek kristal elastik sabiti, gerilme-gerinim ilişkileri kullanılarak hesaplanmıştır. Nb₃Ge için belirlenen elastik sabitler Tablo 3.6.'da gösterilmiştir.

Tablo 3.6. Kübik Nb₃Ge bileşiği için hesaplanan elastik sabitler, elastik modüller ve bu değerlerin deneysel ve teorik verilerle karşılaştırılması.

	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄	B _H	G _H	E _H	C _P	B _H /G _H	ν
Bu Çalışma	273.92	119.92	52.47	171.25	61.19	164.03	67.45	2.799	0.340
Teorik (GGA)	298.30	112.20	62.80	174.20	73.50	193.30	49.40	2.370	0.315
(Papadimitriou ve ark., 2015a)									
Teorik (GGA)	297.00	108.00	63.00		73.87	194.00	45.00	2.326	0.660
(Sreenivasa Reddy ve ark., 2016)									
Teorik (GGA) (Wu ve ark.,2020)	308.30	105.10	65.00	172.80	77.80	202.90	40.10	2.222	0.326
Teorik (LDA)	308.20	106.90	65.60	174.00	77.90	240.30	41.30	2.234	0.305
(Papadimitriou ve ark., 2015b)									

C₁₁, C₁₂ ve C₄₄ (GPa): Elastik sabitler; B_H (GPa): Bulk modülü; G_H (GPa): Kayma modülü; E_H (GPa): Young modülü; C_P (GPa): Cauchy basıncı; B_H/G_H: Bulk modülünün kayma modülüne oranı; ν : Poisson oranı

Tablo 3.6.'da görüldüğü gibi Nb₃Ge'nin en yüksek elastik sabiti C₁₁ değerine ait olduğu için x eksenini boyunca doğrusal sıkıştırmaya karşı büyük bir dirence sahiptir. Bu, Nb₃Ge bileşiğinin bu yönde en yüksek sıkıştırmazlığa sahip olduğu anlamına gelir. C₄₄ değerinin kayma modülü ile ilişkili olduğu iyi bilinmektedir (Wu ve ark.,2020). Kübik kristallerde, bir element Born kriterlerini karşılıyorsa mekanik olarak kararlıdır (Born ve ark., 1955; Wu ve ark., 2007). Tablo 3.6.'dan, Nb₃Ge bileşiğinin mekanik

olarak kararlı olduğu açıktır çünkü Born'un kübik kristaller için kararlılık koşullarını karşılamaktadır (Born ve ark., 1955). Nb₃Ge'nin mekanik özellikleri, elastik sabitler ve Voigt-Reuss-Hill (VHR) yaklaşımı kullanılarak elastik modüller (bulk modülü B_H, kayma modülü G_H, Young modülü E) ve Poisson oranı ν hesaplanarak belirlenmiştir (Voigt, 1928; Reuss, 1929; Hill, 1952; Wu ve ark., 2007). Bu yöntem alt sınır olarak Voigt yaklaşımını ve üst sınır olarak Reuss yaklaşımını kullanır. Hill yaklaşımı Voigt ve Reuss değerlerinin ortalamasını temsil etmek için kullanılır. Tablo 3.6., Nb₃Ge için bu yaklaşımla elde edilen tüm parametreleri ve Nb₃Ge için önceki teorik sonuçları göstermektedir (Papadimitriou ve ark., 2015a, 2015b; Sreenivasa Reddy ve ark., 2016; Wu ve ark., 2020). Nb₃Ge için elastik sabitlerden elde edilen 171.25 GPa bulk modülü, Tablo 3.5.'de gösterildiği gibi Murnaghan durum denkleminde hesaplanan 168.4 GPa değeriyle uyumludur. Her iki yöntemden elde edilen sonuçların benzerliği, hesaplamamızın doğruluğunun kanıtıdır. Ayrıca bulk modülünün değeri bize malzemenin sıkıştırılabilirliği hakkında bilgi verir. Young modülü, gerilimin gerilmeye bölünmesiyle hesaplanır ve katıların sertliği hakkında fikir verir. Bir malzemenin Young modülünün diğerlerinden daha büyük olması, o malzemenin daha sert ve deformasyona karşı daha dayanıklı olduğunu gösterir. Cauchy basıncı (C_p), B_H/G_H oranı ve Poisson oranı (ν) kübik kristallerin doğal sünekliğini ve kırılabilirliğini değerlendirmek için kullanılabilir (Ganeshan ve ark., 2009; Haines ve ark., 2001; Pugh, 1954). C_p değeri sıfırdan büyükse, kristal sünek özelliklere sahiptir. Aksine, değer sıfırdan küçük veya sıfıra eşitse, kristal kırılabilir olarak kabul edilir. Tablo 3.6.'dan Nb₃Ge'nin C_p değerinin 67.45 GPa olduğu görülmektedir. Bu sonuç, Nb₃Ge'nin sünek bir karakter sergilediğini göstermektedir. B_H/G_H oranı, bir malzemenin sünek mi yoksa kırılabilir mi olduğunu belirlemek için kullanılan 1.75'lik kritik bir değere sahiptir (Pugh, 1954). Nb₃Ge, Tablo 3.6.'daki 2.799 değeri ile 1.75'ten büyük B_H/G_H oranına sahiptir, bu da Cauchy basınç hesaplamalarından elde edilene benzer şekilde Nb₃Ge'nin sünek özelliklere sahip olduğunu gösterir. Malzemelerin sünek ve kırılabilir karakterlerini belirleyebilen bir diğer parametre, kritik değeri 0.26 olan Poisson oranıdır. Poisson oranının kritik değerden büyük olması durumunda malzemenin sünek davranış sergilediği, aksi takdirde kırılabilir olarak kabul edildiği iyi bilinmektedir. Nb₃Ge'nin Tablo 3.6.'daki 0.340 Poisson oranı değerinin kritik değer 0.26 olan değerden daha büyük bir değere sahip olması sünek karaktere sahip olduğunu göstermektedir.

Denklem 2.65. ile verilen Debye sıcaklığı (Θ_D) ve denklem 2.66., 2.67. ve 2.68. ile verilen ses hızları malzemelerin termal özelliklerinin anlaşılmasında önemli faktörlerdir. Debye sıcaklığı, malzemelerin sertlik, özgül ısı ve erime noktası gibi önemli kimyasal özelliklerinin anlaşılmasını sağlar. Debye sıcaklığı yüksek olan malzemelerin daha yüksek sertlik ve erime sıcaklığı dereceleri sergilemesi muhtemeldir. Debye sıcaklığı ve ses hızı değerleri, elastik sabitlere dayanan denklem 2.65., 2.66., 2.67. ve 2.68. kullanılarak hesaplanabilir (Wu ve ark.,2020). Nb₃Ge için hesaplanan ses hızları V_T , V_L , V_M değerleri ve Debye sıcaklığı Θ_D değeri Tablo 3.7.'de gösterilmektedir. Ses hızları V_T , V_L , V_M değerleri sırasıyla 2690.98 m/s, 5469.99 m/s, 3013.05 m/s olarak hesaplandı ve hesaplanan bu değerler mevcut teorik verilere karşılık gelmektedir (Sreenivasa Reddy ve ark., 2016). Debye sıcaklığı Θ_D değeri ise 348.12 K olarak belirlendi ve ölçülen bu değer mevcut teorik ve deneysel veriler ile uyumludur (Sreenivasa Reddy ve ark., 2016; Stewart ve ark., 1978).

Tablo 3.7. Nb₃Ge için hesaplanan ses elastik dalga hızları, Debye sıcaklığı değerleri ve bunların mevcut teorik ve deneysel verilerle karşılaştırılması.

	V_T (m/s)	V_L (m/s)	V_M (m/s)	Θ_D (K)
Bu Çalışma	2690.98	5469.99	3013.05	348.12
Teorik (GGA) (Sreenivasa Reddy ve ark., 2016)	3043.00	5738.00	3401.00	389.00
Deneysel (Stewart ve ark., 1978)				302±3

V_T : Enine ses elastik dalga hızı; V_L : Boyuna ses elastik dalga hızı; V_M : Ortalama ses elastik dalga hızı; Θ_D : Debye sıcaklığı

3.3.4. Nb₃Ge bileşiğinin titreşim özellikleri

Merkezi-fonon modları O_h ($Pm\bar{3}n$) nokta grubu ile tanımlanır ve Γ noktasındaki optik fonon modları denklem 3.2. ile verilmiştir. Nb₃Ge için Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν), elektron fonon etkileşim parametreleri (λ), titreşim modu öz karakterleri (EC) ve baskın atomlar Tablo 3.8.'de gösterilmiştir. T_{2g} ve E_g modları Raman aktif, T_{1u} modları kızılötesi aktif ve geri kalan modlar pasifdir. T_{1g} , T_{2g} , A_{2g} ve E_g fonon modlarındaki baskın titreşimler Nb atomlarını içerirken, Ge atomları pasif kalmaktadır. Nb ile ilişkili T_{1g} , T_{2g} , A_{2g} ve E_g fonon modlarının elektron-fonon etkileşim parametreleri, Tablo 3.8.'de gösterildiği gibi, diğer fonon modlarından çok daha yüksektir. Bu gözlemlerle ilişkilendirilebilecek iki neden vardır. İlk olarak, fonon modlarının daha düşük frekanslara sahip olduğunu gözlemlemek önemlidir, bu da denklem 3.1. ile verilen McMillan-Hopfield ifadesi tarafından tahmin edildiği gibi daha yüksek değerlere yol açabilir. İkinci nokta, atomik yer değiştirme şekillerinin

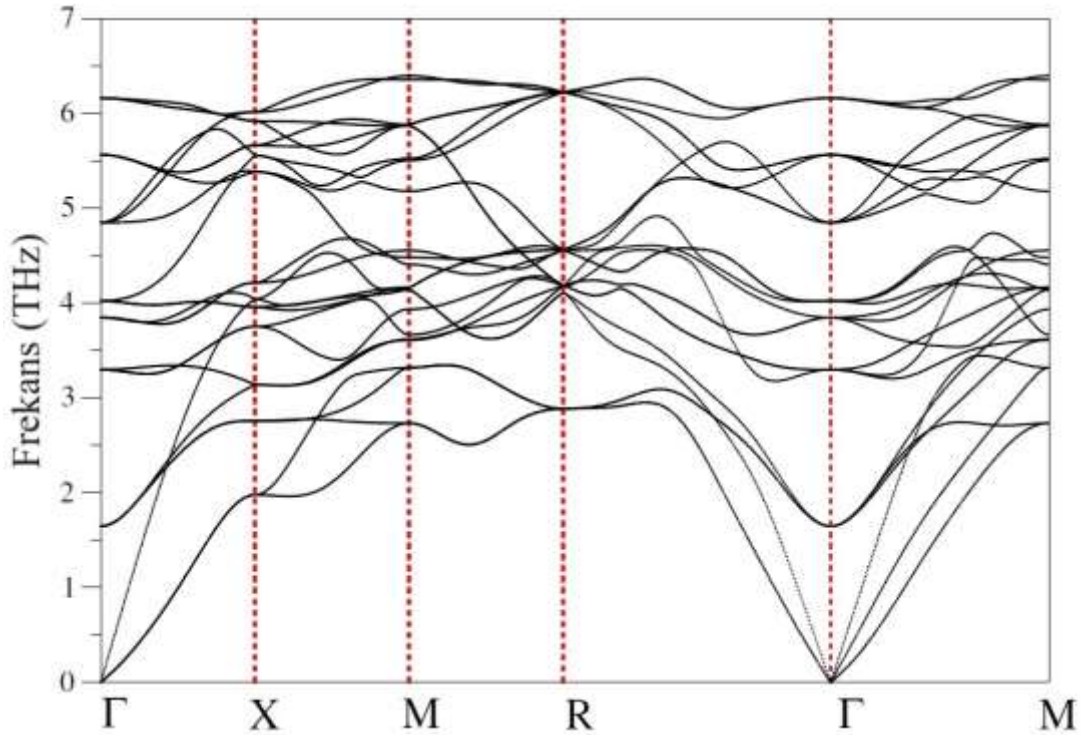
Fermi seviyesindeki durum yoğunluğunun çoğunu içeren d durumları, tamamen Nb atomlarının titreşimleri tarafından belirlenmesidir.

Tablo 3.8. Nb₃Ge bileşiği için hesaplanan Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν), her biri için hesaplanan elektron fonon etkileşim parametreleri (λ) ve titreşim modu öz karakterleri (EC).

	$T_{1g}(S)$	$T_{2g}(R)$	$T_{2u}(S)$	$T_{1u}(I)$	$E_g(R)$	$A_{2g}(S)$	$T_{1u}(I)$	$T_{2u}(S)$
ν (THz)	1.648	3.297	3.848	4.022	4.846	4.850	5.563	6.162
λ	1.225	0.321	0.026	0.023	0.533	0.415	0.009	0.020
EC	Nb	Nb	Nb+Ge	Nb+Ge	Nb	Nb	Nb+Ge	Nb+Ge

I, R ve S gösterimleri sırasıyla kızılötesi aktif, Raman aktif ve pasif (silent) modları ifade etmektedir.

Şimdiye kadar Nb₃Ge'nin Γ noktası optik fonon modlarını tartıştık, ancak T_c 'yi tahmin etmek için ortalama λ 'yı hesaplamak amacıyla, fonon spektrumlarının tamamını ve fonon durum yoğunluğunu (DOS) anlamak çok önemlidir. Nb₃Ge'nin basit kübik Brillouin bölgesindeki fonon dispersiyon grafiği Şekil 3.10.'da gösterilmiştir.

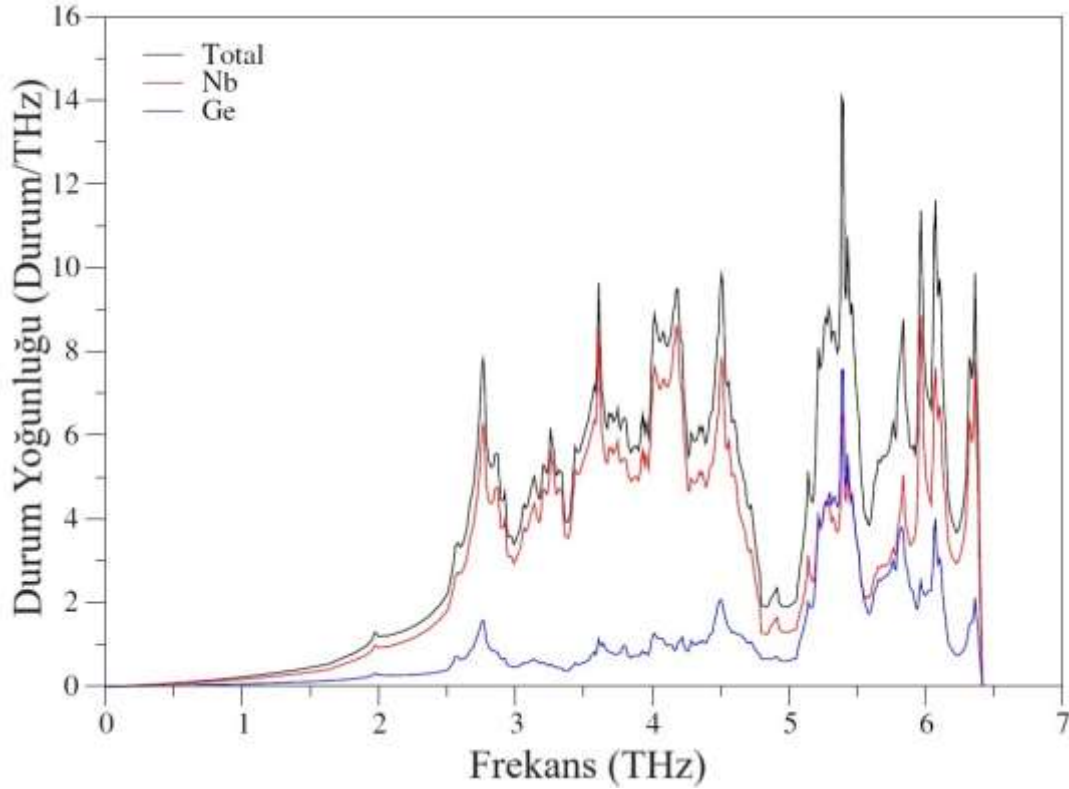


Şekil 3.10. Nb₃Ge bileşiği için hesaplanan fonon dispersiyon eğrileri.

A15 tipi kübik yapıya sahip Nb₃Ge birim hücresi sekiz atom ve üçü akustik geri kalanı optik olan 24 fonon modu içerir. Tüm fonon modları pozitifdir, bu da A15 sistemleri için Nb₃Ge'nin dinamik kararlılığını gösterir. Bu 24 fonon modu, Nb ve Ge atomları arasındaki önemli kütle farkına rağmen, fonon spektrumunda herhangi bir boşluk

olmaksızın frekans aralığını tamamen doldurmaktadır. Bu sonuç, ilgili atomlar arasındaki güçlü bağ kuvvetleri ile ilişkilendirilebilir.

Nb₃Ge'nin toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu (PhDOS) için yapılan hesaplamaların sonuçları Şekil 3.11.'de verilmiştir.



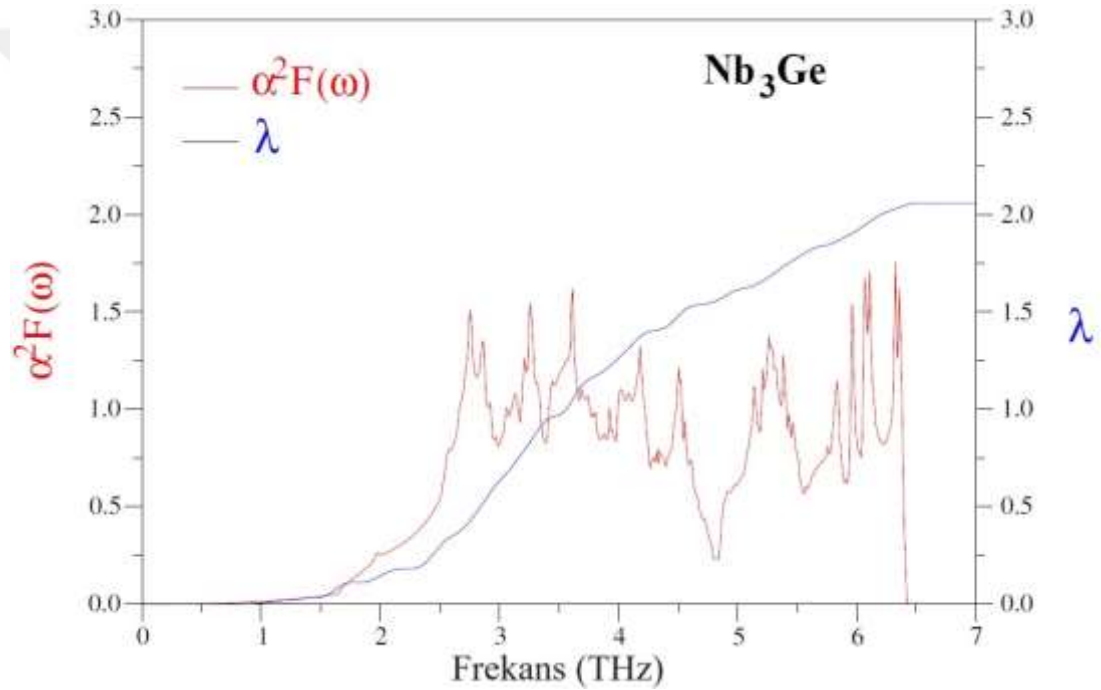
Şekil 3.11. Nb₃Ge bileşiğinin toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu.

Bu şekiller, farklı fonon modlarının fonon spektrumunu nasıl etkilediğini anlamaya yardımcı olur. Nb ve Ge arasındaki kütle farkına rağmen, Nb₃Ge'nin toplam fonon DOS'unda herhangi bir boşluk bulunmamaktadır. Nb₃Ge materyali, 5.0 THz ile 6.5 THz frekans aralığında hibridleşme sergiler. Bu nedenle, Nb ve Ge'nin bir kovalent bağa sahip olduğu varsayılabilir. Nb₃Ge'nin kısmi DOS'u, Nb atomlarının 5.0 THz'in altındaki geniş bölgede baskın olduğunu üstündeki bölgede ise hibridizasyon etkisi olduğunu gösterir. Bu nedenle, Nb₃Ge'nin üç akustik fonon dalı büyük ölçüde Nb atomlarının titreşimlerinin bir sonucudur. Bu DOS varyasyonları, elektron-fonon etkileşimini ve dolayısıyla T_c'yi etkileyebilir.

3.3.5. Nb₃Ge bileşiğinin süperiletkenlik özellikleri

Bu araştırmanın temel amacı, Nb₃Ge'deki süperiletkenliğin kaynağını elektron-fonon etkileşiminin gücünü inceleyerek araştırmaktır. Bu hedefe ulaşmak için Nb₃Ge'nin

Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) hesaplanmıştır. Bu spektral fonksiyonun entegrasyonundan ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi (λ) ile ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}) denklem 3.3. ve 3.4. kullanılarak ve süperiletken geçiş sıcaklığı (T_c) Allen-Dynes tarafından önerilen düzenlenmiş McMillan denklemi 3.5. ile belirlenebilir. Burada μ^* , Coulomb itmesi için etkili bir perdeleme parametresidir. Çoğu çalışmada μ^* değeri 0.10 ile 0.16 arasında değişmektedir (Tütüncü ve ark., 2015; Allen ve ark., 1975). Biz kendi amaçlarımız doğrultusunda $\mu^*=0.13$ değerini kullanmayı tercih ettik. Nb₃Ge için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın frekansa göre değişimi Şekil 3.12.'de gösterilmiştir.



Şekil 3.12. Nb₃Ge için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) (kırmızı çizgiler) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın (mavi çizgiler) frekans değişimleri.

Nb₃Ge'nin λ değeri 2.056 olarak hesaplanmıştır. Bilindiği gibi, büyük bir λ değeri bir süper iletkenin T_c değerinin büyük olmasına yol açabilir. Şekil 3.12., $\lambda(\omega)$ 'nin en düşük frekans bölgesi tarafından domine edildiğini ve burada $\lambda \propto \omega$ olduğunu doğrulamaktadır. Düşük frekans bölgesinin toplam λ 'ya katkısı %81'dir. Bu katkı, Nb ve Ge atomlarının birleşik hareketinden kaynaklanmaktadır. Yüksek frekans bölgesi λ 'ya %19 katkı yapar. $\lambda(\omega)$ değeri kullanılarak logaritmik ortalama fonon frekansı (ω_{ln}) 170.58 K olarak hesaplanmıştır. Bu değerler daha sonra McMillan formülünün

Allen-Dynes modifikasyonunu kullanarak süperiletken geçiş sıcaklığı T_c 'yi hesaplamak için kullanılır. Nb_3Ge malzemesinin T_c değeri 23.37 K olarak hesaplanmıştır. Nb_3Ge malzemesi için hesaplanan durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri Tablo 3.9.'da verilmiştir. Elde edilen T_c değeri deneysel değerler ile mükemmel bir uyum içindedir (Testardi ve ark., 1974).

Tablo 3.9. Nb_3Ge malzemesi için Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri

	$N(E_F)$ (Durum/eV.atom)	λ	ω_{ln} (K)	T_c (K)
Bu Çalışma	1.609	2.056	170.58	23.37
Deneysel (Testardi ve ark., 1974)				23.2

3.4. Nb_3Sb Bileşiği

3.4.1. Nb_3Sb bileşiğinin yapısal özellikleri

A15 tipinde olan Nb_3Sb 'nin kübik kristal yapısı Şekil 3.1.'de gösterilmiştir. Daha önce olduğu gibi, Nb_3Sb 'nin örgü sabiti (a), bulk modülü (B) ve basınç türevi (B') geometri optimizasyonu ve Murnaghan durum denklemleri 2.55. ve 2.56. kullanılarak belirlenmiştir (Murnaghan,1944). Denge parametreleri (a, B ve B') Tablo 3.10.'da listelenmiştir.

Tablo 3.10. Kübik Nb_3Sb bileşiği için elde edilen yapısal parametreler ve bu parametrelerin deneysel ve teorik veriler ile karşılaştırılması.

	a (Å)	B(GPa)	B'
Bu Çalışma	5.301	167.2	4.14
Teorik (GGA) (Sundareswari ve ark., 2010)	5.294	177.69	
Teorik (FLAPW) (Haas, 1999)	5.264	177.69	
Deneysel (Melnyk ve ark., 1999)	5.268		
Deneysel (Lomnytska ve ark., 2006)	5.268		
Deneysel (Chen ve ark., 2021)	5.262		

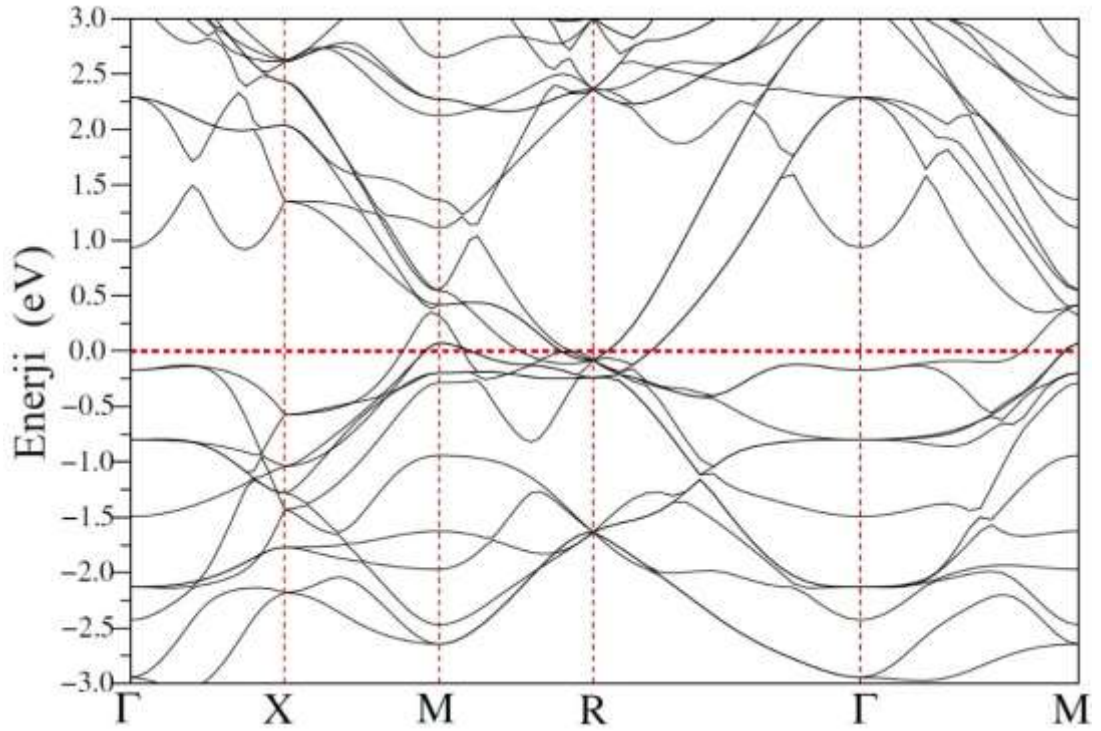
a: Kübik Nb_3Sb bileşiğinin örgü sabiti; B: Bulk modülü; B' : Bulk modülünün basınca göre birinci türevi

Bu değerler önceki teorik ve deneysel sonuçlarla uyumludur (Chen ve ark., 2021; Haas, 1999; Lomnytska ve ark., 2006; Melnyk ve ark., 1999; Sundareswari ve ark., 2010). Nb-Sb arasındaki bağ (2.96 Å) da iki elementin kovalent yarıçaplarının

toplamından (3.04 Å) daha küçüktür (Cordero ve ark., 2008; Pyykkö ve ark., 2009). Bu sonuçlar Nb ile Os ve Nb ile Ge atomları arasındakine benzer şekilde, Nb ve Sb atomlarının da iyonik ve kovalent etkileşimlerin bir kombinasyonu ile bağlı olduğunu göstermektedir. Nb₃Sb için Nb-Nb mesafesi 2.58 Å olup, elementel Nb'deki Nb-Nb mesafesinden (2.86 Å) oldukça kısadır (Karaca ve ark., 2021). Sonuçlar, Nb₃Sb bileşiğindeki Nb atomları arasında güçlü bağ kuvvetlerinin varlığına işaret etmektedir. Bu durum daha önce Nb₃Os ve Nb₃Ge bileşiklerinde de aynı sonuca ulaştığımız için güçlü bağ kuvvetlerinin varlığına dair kanıtı güçlendirmekte ve hesaplamalarımızın tutarlılığını birkez daha göstermektedir.

3.4.2. Nb₃Sb bileşiğinin elektronik özellikleri

Yapısal parametrelerden yararlanarak Nb₃Sb bileşiği için basit kübik Brillouin bölgesi içinde seçilen yüksek simetri yönleri boyunca hesaplanan enerji bandı yapıları Şekil 3.13.'de gösterilmiştir. Şekilde 0 eV Fermi enerji seviyesini göstermektedir.

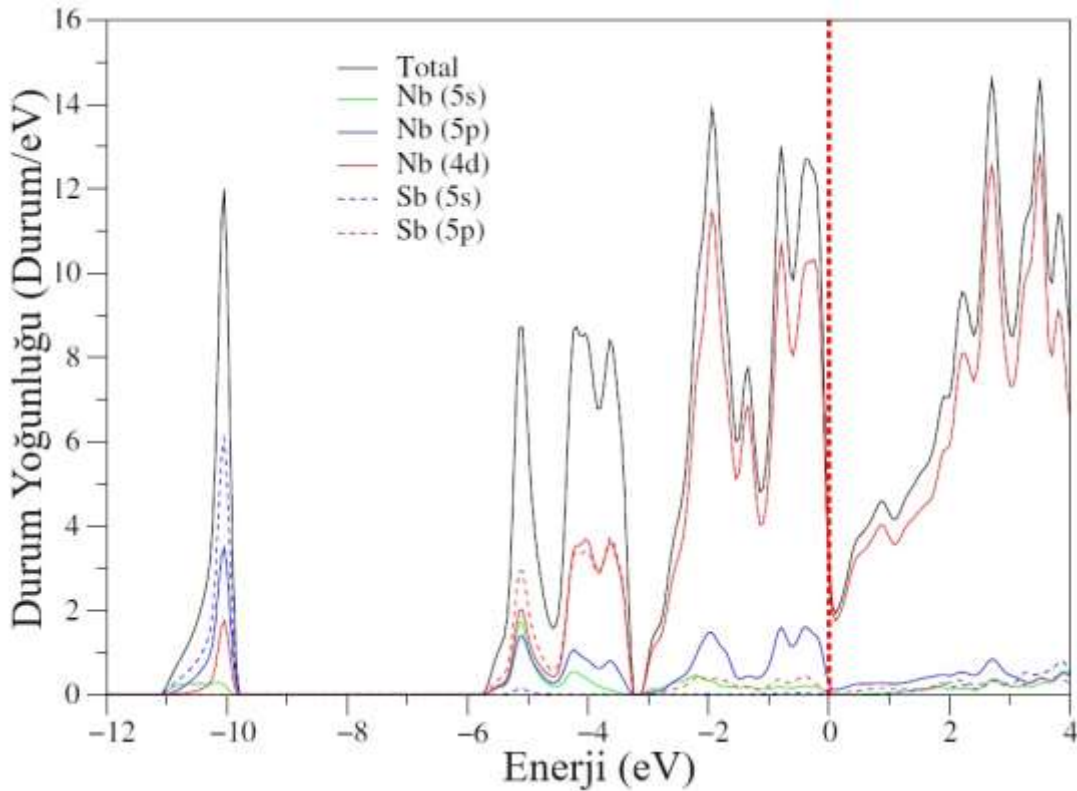


Şekil 3.13. Nb₃Sb bileşiğinin elektronik band yapısı.

Önemli dağılıma sahip bir dizi band Fermi seviyesini geçmektedir bu da Nb₃Sb bileşiğinin metalik yapıda olduğunu gösterir. İncelenen bileşiğin elektronik yapısı Γ -X, M-R, R- Γ ve Γ -M simetri çizgileri boyunca Fermi seviyesine paralel olan neredeyse düz bir band olduğu görülmektedir ancak bu bantlar Fermi seviyesi ile

çakışmadığından Nb₃Sb nin $N(E_F)$ değerinin Nb₃Ge bileşiğinin $N(E_F)$ değerine göre daha düşük olacağı sonucunu doğurur. Bu düz bandlar, Fermi seviyesinin yakınında keskin bir tepe oluşturma potansiyeline sahiptir. Bu şekilde oluşan bir pik Nb₃Sb nin durum yoğunluğu grafiğinde de açıkça görülmektedir. Ancak bu pik değerinin $N(E_F)$ 'ye ve Nb₃Sb nin süperiletkenlik özelliklerin önemli bir katkısı yoktur. BCS teorisinde, Cooper çiftleri Fermi seviyesine yakın enerjilere sahip elektronlar tarafından oluşturulur. Ayrıca bu düz bandlar Nb₃Sb için sadece M–R yönünde Fermi seviyesini geçerken diğer yönlerde geçmez ancak Nb₃Ge bileşiğinde Γ –X, R– Γ ve Γ –M yönlerinde fermi seviyesini geçmekteydi ve bu da Fermi seviyesindeki durum yoğunluğunun ($N(E_F)$) Nb₃Sb malzemesinde Nb₃Ge'ye kıyasla daha düşük bir seviyede olabileceğini göstermektedir.

Nb₃Sb'nin elektronik enerji band yapısındaki elektronik bandların kökenini belirlemek için Nb₃Sb'nin toplam ve kısmi yoğunluk durumları (DOS) analiz edilmiş ve şekil 3.14.'de verilmiştir. Şekilde 0 eV daki kırmızı kesikli çizgi Fermi enerji seviyesini ifade etmektedir.



Şekil 3.14. Nb₃Sb bileşiğinin toplam ve kısmi elektronik durum yoğunluğu.

Nb₃Sb'nin elektronik DOS'unun analizi Nb₃Ge ile çok benzer bir model ortaya koymaktadır. Nb₃Sb'nin üst valans bölgesi sadece 0.1 eV'luk bir boşluk ile iki bölgeye

ayrılmıştır. Daha önce de belirtildiği gibi, BCS teorisi, süperiletkenlik olayının Fermi seviyesi civarındaki elektronlardan kaynaklandığını ve Cooper çiftlerini bu elektronların oluşturduğunu belirtir. Bu nedenle, Fermi seviyesindeki elektronik durumlar süperiletkenlikte çok önemli bir rol oynar. Nb₃Sb'nin Fermi seviyesindeki DOS değeri $N(E_F) = 0.441$ durum/(eV.atom) olarak hesaplanmıştır. Bu değer Nb₃Ge'nin $N(E_F) = 1.609$ durum/(eV.atom) değerinden daha küçüktür. Bu nedenle, Nb₃Ge'nin T_c değerinin Nb₃Sb malzemesinden daha yüksek olduğu sonucuna varılabilir. Ayrıca, Nb₃Sb için Nb 4d elektronlarının tek başına $N(E_F)$ 'ye katkısının %80 olduğu belirtilmelidir. Bu sonuçlar, kübik Nb₃Sb bileşiğinin süperiletken özelliklerinin oluşumuna en önemli katkının aynı Nb₃Os ve Nb₃Ge bileşiklerinde olduğu gibi Nb atomlarının 4d elektronlarından geldiğini ve bunun da $N(E_F)$ değerini arttırdığını ve McMillan-Hopfield ifadesine göre λ değerinde artışa neden olduğunu göstermektedir (Allen ve ark., 1975; Beckstein ve ark., 2001).

3.4.3. Nb₃Sb bileşiğinin elastik ve mekanik özellikleri

Süper iletken özelliklerinin teorik yönlerinin anlaşılmasında elastik özelliklerinin analizi çok önemlidir. Ayrıca, potansiyel uygulama alanları belirlemek için önemli olan elastik sabitler kullanılarak malzemelerin mekanik kararlılığı ve sertliği hakkında bilgi elde edilebilir. Basit kübik örgünün simetrisi, yirmi bir elastik sabitin sadece üç bağımsız sabite indirgenmesini sağlar: C_{11} , C_{12} ve C_{44} . Bu çalışmada, hesaplamada iyi bilinen bir yaklaşım olan gerilme-gerinim yöntemi kullanılmıştır. Yöntem, kristal örgüye küçük gerilmeler uygulanmasını ve ardından ortaya çıkan gerilimi belirlemek için örgünün gevşetilmesini gerektirir. Son olarak, gerilme-gerinim ilişkileri Nb₃Sb için üç farklı tek kristal elastik sabitini hesaplamak için kullanılır. Nb₃Sb için belirlenen elastik sabitler Tablo 3.11.'de gösterilmiştir. Sonuçlarını daha önce vermiş olduğumuz Nb₃Os ve Nb₃Ge malzemelerinde olduğu gibi, Nb₃Sb'nin en yüksek elastik sabiti C_{11} değerine ait olduğu için x eksenini boyunca doğrusal sıkıştırmaya karşı büyük bir direnç sahiptir. Bu, Nb₃Sb bileşiğinin bu yönde en yüksek sıkıştırmazlığa sahip olduğu anlamına gelir. C_{44} değerinin kayma modülü ile ilişkili olduğu iyi bilinmektedir (Wu ve ark.,2020). Nb₃Os, Nb₃Ge ve Nb₃Sb'nin Tablo 3.2., 3.6. ve 3.11.'deki C_{44} değerleri karşılaştırıldığında $Nb_3Sb > Nb_3Os > Nb_3Ge$ şeklinde sıralandığı görülmektedir. Kübik kristallerde, bir element Born kriterlerini karşılıyorsa mekanik olarak karardır (Born ve ark., 1955; Wu ve ark., 2007). Tablo 3.11.'den Born'un kübik kristaller için karardlık koşullarını karşıladığı görülen Nb₃Sb bileşiği de mekanik

olarak kararlıdır (Born ve ark., 1955). Nb_3Sb 'nin mekanik özellikleri, elastik sabitler ve Voigt-Reuss-Hill (VHR) yaklaşımı kullanılarak elastik modüller (yığın modülü B_H , kayma modülü G_H , Young modülü E) ve Poisson oranı hesaplanarak belirlenmiştir (Voigt, 1928; Reuss, 1929; Hill, 1952; Wu ve ark., 2007). Bu yöntem alt sınır olarak Voigt yaklaşımını ve üst sınır olarak Reuss yaklaşımını kullanır. Hill yaklaşımı Voigt ve Reuss değerlerinin ortalamasını temsil etmek için kullanılır. Tablo 3.11., Nb_3Sb için bu yaklaşımla elde edilen tüm parametreleri ve önceki teorik sonuçları göstermektedir (Sundareswari ve ark., 2010). Nb_3Sb için elastik sabitlerden elde edilen 170.43 GPa bulk modülü, Tablo 3.10.'da gösterildiği gibi Murnaghan durum denkleminde hesaplanan 167.2 GPa değeriyle uyumludur. Her iki yöntemden elde edilen sonuçların benzerliği, hesaplamalarımızın doğruluğunun kanıtıdır. Ayrıca bulk modülünün değeri bize malzemenin sıkıştırılabilirliği hakkında bilgi verir.

Tablo 3.11. Kübik Nb_3Sb bileşiği için hesaplanan elastik sabitler, elastik modüller ve bu değerlerin deneysel ve teorik verilerle karşılaştırılması.

	C_{11}	C_{12}	C_{44}	B_H	G_H	E_H	C_p	B_H/G_H	ν
Bu Çalışma	304.02	103.63	68.12	170.43	79.54	206.48	35.51	2.143	0.298
Theory (GGA)	345.80	93.63	91.92	177.75	104.34	261.78	1.71	1.704	0.22

(Sundareswari ve ark., 2010)

C_{11} , C_{12} ve C_{44} (GPa): Elastik sabitler; B_H (GPa): Bulk modülü; G_H (GPa): Kayma modülü; E_H (GPa): Young modülü; C_p (GPa): Cauchy basıncı; B_H/G_H : Bulk modülünün kayma modülüne oranı; ν : Poisson

Tablo 3.2., 3.6. ve 3.11. Nb_3Os , Nb_3Ge ve Nb_3Sb 'nin bulk modülünün sırasıyla 223.5 GPa, 171.25 GPa ve 170.43 GPa olduğunu ve Nb_3Os 'nin dış üniform sıkıştırmaya karşı daha büyük bir dirence sahip olduğunu ve onu daha sıkıştıramaz hale getirdiğini gösterir. Katıların kayma deformasyonuna karşı gösterdikleri direnç kayma modülünün büyüklüğüne bağlıdır. Nb_3Os , Nb_3Ge ve Nb_3Sb 'nin Tablo 3.2., 3.6. ve 3.11.'deki kayma modülü sıralaması, Nb_3Os 'nin Nb_3Ge ve Nb_3Sb 'den kayma deformasyonuna karşı daha yüksek bir dirence sahip olacağını göstermektedir. Katıların sertliği hakkında bize fikir veren Young modülü, gerilimin gerilmeye bölünmesiyle hesaplanır. Bir malzemenin daha sert ve deformasyona karşı daha dayanıklı olması için Young modülünün diğerlerinden daha büyük olması gerekir. Nb_3Os , Nb_3Ge ve Nb_3Sb 'nin Tablo 3.2., 3.6. ve 3.11.'deki Young modülü sıralaması Nb_3Os 'nin Nb_3Ge ve Nb_3Sb 'den daha sert ve deformasyona karşı daha dirençli olduğunu göstermektedir. Cauchy basıncı (C_p), B_H/G_H oranı ve Poisson oranı (ν) kübik kristallerin doğal sünekliğini ve kırılabilirliğini değerlendirmek için kullanılabilir (Ganeshan ve ark., 2009; Haines ve ark., 2001; Pugh, 1954). Tablo 3.11.'den Nb_3Sb 'nin

C_P değerinin 35.51 GPa olduğu görülmektedir. C_P değeri sıfırdan büyükse kristal sünek, sıfırdan küçük veya sıfıra eşitse, kristal kırılğan olarak kabul edilir. Tablo 3.2., 3.6 ve 3.11.'deki Nb_3Os , Nb_3Ge ve Nb_3Sb 'ye ait 72.7 GPa, 67.45 GPa ve 35.51 GPa C_P değerleri her iki bileşiğin de sünek bir karakter sergilediği ve Nb_3Os 'nin Nb_3Ge ve Nb_3Sb 'den daha sünek olduğunu göstermektedir. Bir malzemenin sünek mi yoksa kırılğan mı olduğunu belirlemek için 1.75'lik kritik bir değere sahip olan B_H/G_H oranı da kullanılabilir (Pugh, 1954). Tablo 3.11.'de gösterildiği gibi Nb_3Sb 'nin B_H/G_H oranı 1.75'ten büyüktür, bu da Nb_3Sb 'nin sünek özelliklere sahip olduğunu gösteren diğer bir kanıttır. Bir diğer parametre, kritik değeri 0.26 olan Poisson oranıdır. Poisson oranı kritik değerden büyük olması durumunda malzeme sünek davranış sergilemektedir. Tablo 3.11.'de Nb_3Sb 'nin 0.298 Poisson oranı kritik 0.26 değerinden büyük olduğu için Nb_3Sb bu açıdan da sünek bir karaktere sahip olur.

Malzemelerin termal özelliklerinin anlaşılmasında Debye sıcaklığı (Θ_D) ve ses hızları (enine V_T , boyuna V_L ve ortalama V_M) önemli faktörlerdir. Debye sıcaklığı ve ses hızı değerleri, elastik sabitlere dayanan denklem 2.65., 2.66., 2.67. ve 2.68. kullanılarak hesaplanabilir (Wu ve ark.,2020). Nb_3Sb için hesaplanan ses hızları V_T , V_L , V_M değerleri sırasıyla 2984.29 m/s, 5564.02 m/s, 3322.13 m/s olarak hesaplandı ve hesaplanan bu değerler Tablo 3.12.'de verilmiştir.

Tablo 3.12. Nb_3Sb için hesaplanan ses elastik dalga hızları, Debye sıcaklığı değerleri ve bunların mevcut deneysel verilerle karşılaştırılması.

	V_T (m/s)	V_L (m/s)	V_M (m/s)	Θ_D (K)
Bu Çalışma	2984.29	5564.02	3322.13	374.40
Deneysel (Knapp ve ark., 1976)				335.00

V_T : Enine ses elastik dalga hızı; V_L : Boyuna ses elastik dalga hızı; V_M : Ortalama ses elastik dalga hızı; Θ_D : Debye sıcaklığı

Debye sıcaklığı, malzemelerin sertlik, özgül ısı ve erime noktası gibi önemli kimyasal özelliklerinin anlaşılmasını sağlar. Debye sıcaklığı yüksek olan malzemelerin daha yüksek sertlik ve erime sıcaklığı dereceleri sergilemesi muhtemeldir. Debye sıcaklığı Θ_D değeri ise 374.40 K olarak belirlendi ve Tablo 3.12.'de gösterildiği gibi ölçülen bu değer mevcut deneysel veri ile uyumludur (Knapp ve ark., 1976).

3.4.4. Nb_3Sb bileşiğinin titreşim özellikleri

Merkezi-fonon modları O_h ($Pm\bar{3}n$) nokta grubu ile tanımlanır ve Γ noktasındaki optik fonon modları denklem 3.2. ile verilmiştir. Nb_3Sb için Γ noktası optik fonon

modlarının frekansları (ν), elektron fonon etkileşim parametreleri (λ), titreşim modu öz karakterleri (EC) ve baskın atomlar Tablo 3.13.'de gösterilmiştir.

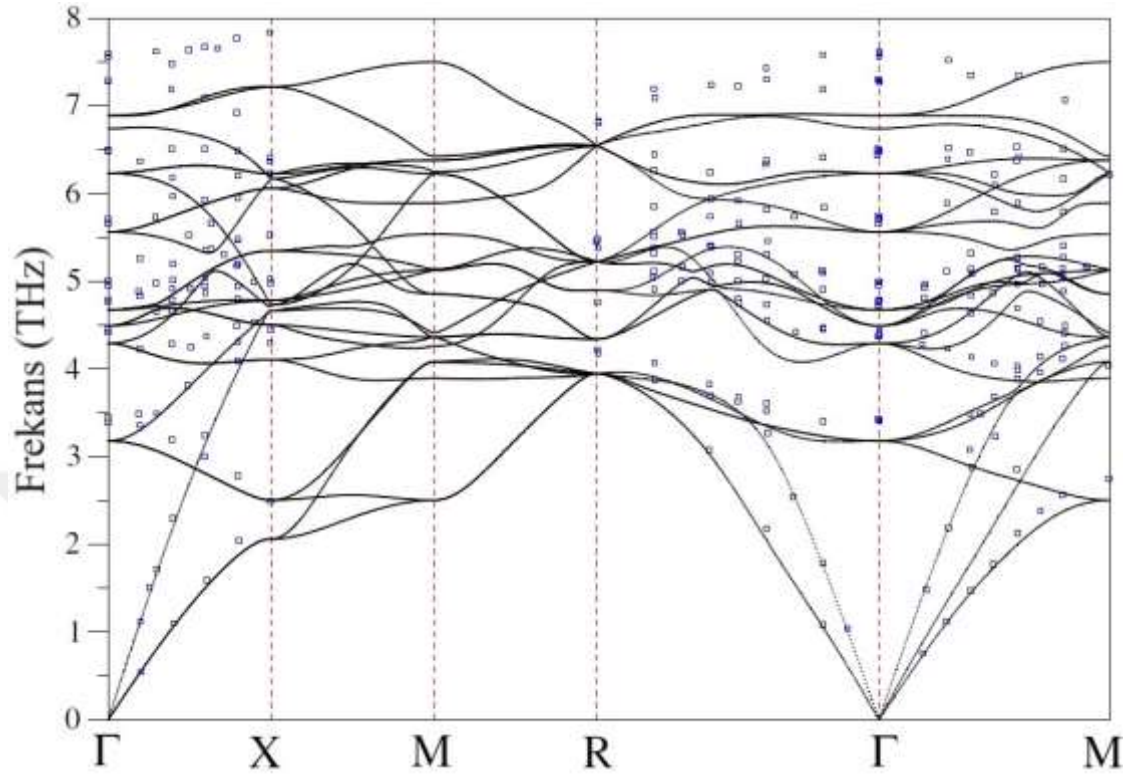
Tablo 3.13. Nb₃Sb bileşiği için hesaplanan Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν), her biri için hesaplanan elektron fonon etkileşim parametreleri (λ) ve titreşim modu öz karakterleri (EC).

	$T_{1g}(S)$	$T_{2g}(R)$	$T_{2u}(S)$	$T_{1u}(I)$	$E_g(R)$	$A_{2g}(S)$	$T_{1u}(I)$	$T_{2u}(S)$
ν (THz)	4.493	4.674	3.179	4.292	6.892	6.743	5.563	6.233
λ	0.121	0.100	0.030	0.005	0.094	0.146	0.005	0.014
EC	Nb	Nb	Nb+Sb	Nb+Sb	Nb	Nb	Nb+Sb	Nb+Sb

I, R ve S gösterimleri sırasıyla kızılötesi aktif, Raman aktif ve pasif (silent) modları ifade etmektedir.

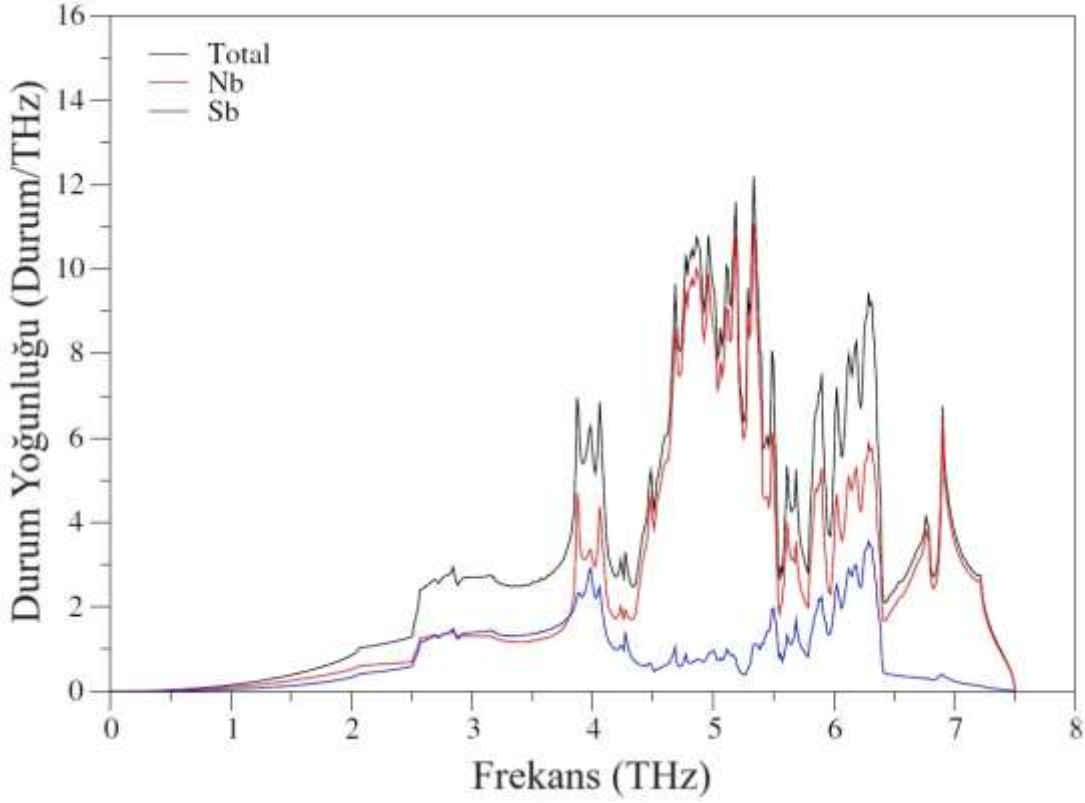
T_{2g} ve E_g modları Raman aktif, T_{1u} modları kızılötesi aktif ve geri kalan modlar pasiftir. T_{1g} , T_{2g} , A_{2g} ve E_g fonon modlarında baskın titreşimler Nb atomlarından gelmektedir. Bu fonon modlarında Sb atomları pasif kalmaktadır. Tablo 3.13.'de gösterildiği gibi, Nb ile ilişkili bu fonon modlarının elektron fonon etkileşim parametreleri, diğer fonon modlarınınkinden çok daha yüksektir. Bu gözlemlerle ilişkilendirilebilecek iki neden vardır. Bu ilk olarak, denklem 3.1. ile verilen McMillan-Hopfield ifadesi tarafından tahmin edildiği gibi fonon modlarının daha düşük frekanslara sahip olması daha yüksek değerlere yol açabileceği için bu durumu gözlemlenmenin önemi ile ilişkilendirilebilir. İkinci nokta, tamamen Nb atomlarının titreşimleri tarafından belirlenen durumları, atomik yer değiştirme şekillerinin Fermi seviyesindeki durum yoğunluğunu içerir. Nb₃Sb'nin Γ noktası optik fonon modlarını tartıştık, ancak T_c 'yi tahmin etmek için ortalama λ 'yı hesaplamak gerekir. Bunun için de fonon spektrumlarının tamamını ve fonon durum yoğunluğunu (DOS) anlamak çok önemlidir. Nb₃Sb'nin basit kübik Brillouin bölgesindeki fonon dispersiyon grafiği Şekil 3.15.'de gösterilmiştir. A15 tipi kübik yapıya sahip Nb₃Sb birim hücresi sekiz atom ve üçü akustik geri kalanı optik olan 24 fonon modu içerir. Aynı Nb₃Ge veya Nb₃Os'de olduğu gibi bu 24 fonon dalının tümü pozitifdir, bu da A15 kübik kristal yapıdaki Nb₃Sb'nin de dinamik olarak kararlı olduğunu gösterir. Bu 24 fonon modu, Nb ve Sb atomları arasındaki önemli kütle farkına rağmen, fonon spektrumunda herhangi bir boşluk olmaksızın frekans aralığını tamamen doldurmaktadır. Bu sonuç, ilgili atomlar arasındaki güçlü bağ kuvvetleri ile ilişkilendirilebilir. Ayrıca, Şekil 3.15.'de Nb₃Sb için mavi açık kareler deneysel fonon sonuçlarını göstermektedir.

(Pintschovius ve ark., 1983). Sonuçlarımız deneysel sonuçlarla uyumludur (Pintschovius ve ark., 1983).



Şekil 3.15. Nb₃Sb bileşiği için hesaplanan fonon dispersiyon eğrileri. Mavi kareler deneysel sonuçlardır.

Nb₃Sb'nin toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu (PhDOS) için yapılan hesaplamaların sonuçları Şekil 3.16.'da verilmiştir. Bu şekiller, farklı fonon modlarının fonon spektrumunu nasıl etkilediğini anlamaya yardımcı olur. Nb ve Sb arasında bir kütle farkı olmasına rağmen, Nb₃Sb'nin toplam fonon DOS'unda herhangi bir boşluk bulunmamaktadır. Nb₃Sb materyali, 4.4 THz ile 5.5 THz aralığı dışında, 6.5 THz frekansına kadar hibridleşme sergiler. Bu nedenle, Nb ve Sb'nin bir kovalent bağa sahip olduğu varsayılabilir. Şekil 3.11.'de Nb₃Ge'nin kısmi DOS'u, Nb atomlarının 5.0 THz'in altındaki geniş bölgede baskın olduğunu 5.0 THz'in üstünde ise hibridizasyon etkisi göstermekteydi. Bu nedenle, Nb₃Ge'nin üç akustik fonon dalı büyük ölçüde Nb atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktaydı. Fakat Şekil 3.16. incelendiğinde Nb₃Sb için 0 – 4.4 THz ve 5.5 – 6.5 THz aralıklarında hibridizasyon etkisi görülürken, diğer bölgelerde ise hibridizasyon etkisi Nb₃Sb için zayıflamakta Nb atomları baskın hale gelmektedir. DOS varyasyonları, elektron-fonon etkileşimini ve dolayısıyla T_c'yi etkileyebilir.

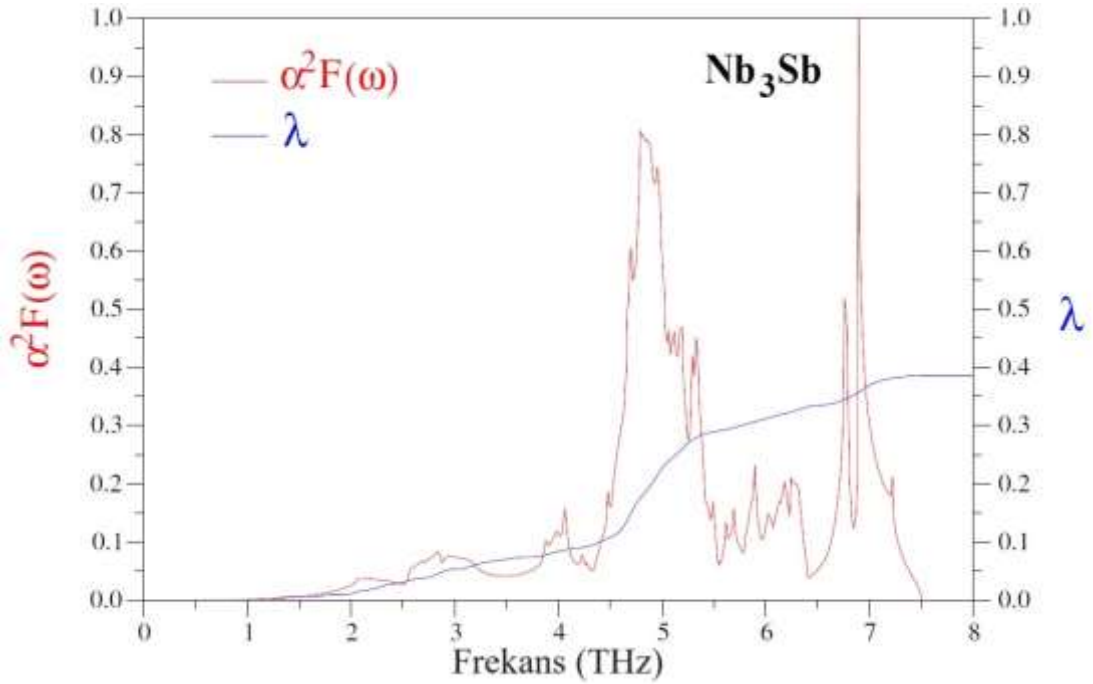


Şekil 3.16. Nb₃Sb bileşiği için hesaplanan toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu.

3.4.5. Nb₃Sb bileşiğinin süperiletkenlik özellikleri

Süperiletkenliğin kökenini araştırmak amacıyla Nb₃Sb'nin elektron-fonon etkileşiminin gücünü incelemek gerekir. Bu amaçla Nb₃Sb'nin Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) hesaplanmıştır. Ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi (λ) ve logaritmik ortalama fonon frekansı (ω_{ln}), denklem 3.3. ve 3.4. kullanılarak bu spektral fonksiyonun entegrasyonundan elde edilebilir. Süperiletken geçiş sıcaklığı (T_c) Allen-Dynes tarafından önerilen düzenlenmiş McMillan denklemi 3.5. ile belirlenebilir. $\mu^*=0.13$ değerini kullanmayı tercih ettik. Nb₃Sb için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) ve ortalama elektron fonon etkileşim parametresi λ 'nın frekansa göre değişimi Şekil 3.17.'de gösterilmiştir. Nb₃Sb'nin λ değeri 0.387 olarak hesaplanmıştır. Bilindiği gibi, T_c değeri λ değeri ile ilişkilidir. Büyük bir λ değeri süper iletkenin T_c değerinin büyük olmasına yol açabilir. Şekil 3.17., $\lambda(\omega)$ 'nin en düşük frekans bölgesi tarafından domine edildiğini ve burada $\lambda \propto \omega$ olduğunu doğrulamaktadır. Nb₃Sb için düşük frekans bölgesinin toplam λ 'ya katkısı %84'dür. Bu katkı, Nb ve Sb atomlarının birleşik hareketinden kaynaklanmaktadır. Yüksek frekans bölgesi λ 'ya %16 katkı yapar. $\lambda(\omega)$ değeri kullanılarak logaritmik ortalama fonon frekansı (ω_{ln}) 219.73 K olarak hesaplanmıştır. Bu değerler daha sonra

McMillan formülünün Allen-Dynes modifikasyonunu kullanarak süperiletken geçiş sıcaklığı T_c 'yi hesaplamak için kullanılır. Nb_3Sb malzemelerinin T_c değeri 0.31 K olarak hesaplanmıştır.



Şekil 3.17. Nb_3Sb için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2 F(\omega)$) (kırmızı çizgiler) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın (mavi çizgiler) frekans değişimleri.

Nb_3Sb malzemesi için hesaplanan durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri Tablo 3.14.'de verilmiştir. Elde edilen T_c değeri deneysel değerler ile mükemmel bir uyum içindedir (Knapp ve ark., 1976).

Tablo 3.14. Nb_3Sb malzemesi için Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri

	$N(E_F)$ (Durum/eV.atom)	λ	ω_{ln} (K)	T_c (K)
Bu Çalışma	0.441	0.387	219.73	0.31
Deneysel (Knapp ve ark., 1976)				0.20

3.5. Nb_3Rh Bileşiği

3.5.1. Nb_3Rh bileşiğinin yapısal özellikleri

A15 tipinde olan Nb_3Rh 'nin kübik kristal yapısı Şekil 3.1.'de gösterilmiştir. Daha önce olduğu gibi, Nb_3Rh 'nin örgü sabiti (a), bulk modülü (B) ve basınç türevi (B') geometri

optimizasyonu ve Murnaghan durum denklemleri 2.55. ve 2.56. kullanılarak belirlenmiştir (Murnaghan,1944). Denge parametreleri (a, B ve B') Tablo 3.15.'de listelenmiştir. Bu değerler önceki teorik ve deneysel sonuçlarla uyumludur (Paduani, 2007b; Greenfield ve Beck, 1956).

Tablo 3.15. Kübik Nb₃Rh bileşiği için elde edilen yapısal parametreler ve bu parametrelerin deneysel ve teorik veriler ile karşılaştırılması.

	a (Å)	B(GPa)	B'
Bu Çalışma	5.174	193.7	3.93
Teorik (GGA) (Paduani, 2007b)	5.182	196.61	
Deneysel (Greenfield ve Beck, 1956)	5.115		

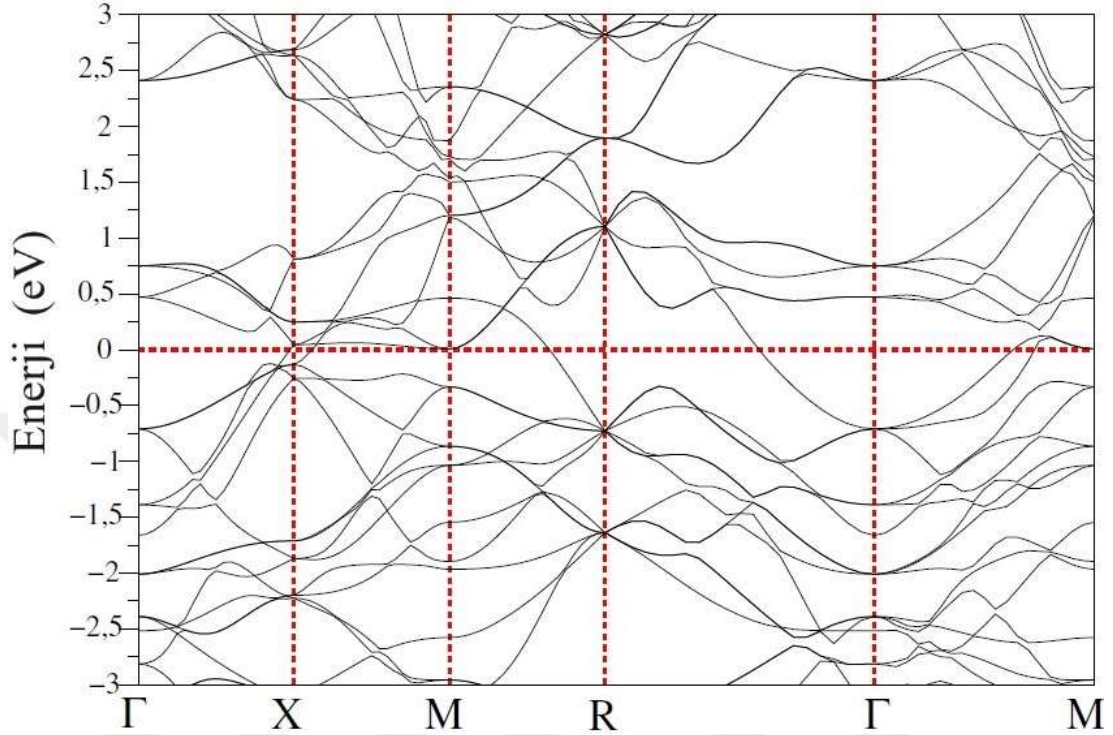
a: Kübik Nb₃Rh bileşiğinin örgü sabiti; B: Bulk modülü; B': Bulk modülünün basınca göre birinci türevi

Nb ve Rh atomları arasındaki bağ uzunluğu değeri 2.886 Å olarak belirlenmiştir, bu değer Niyobyum ve Rodyum atomları için 3.06 Å olan kovalent yarıçapların toplamından biraz daha kısadır (Cordero ve ark., 2008; Pyykkö ve ark., 2009). Bu sonuçlar Nb ve Rh atomlarının iyonik ve kovalent etkileşimlerin bir kombinasyonu ile bağlı olduğunu göstermektedir. Nb₃Rh için Nb-Nb mesafesi 2.581 Å olup, elementel Nb'deki Nb-Nb mesafesinden (2.86 Å) oldukça kısadır (Karaca ve ark., 2021). Sonuçlar, Nb₃Ge bileşiğindeki Nb atomları arasında güçlü bağ kuvvetlerinin varlığına işaret etmektedir. Bu tez kapsamında incelediğimiz diğer bileşiklerde de aynı sonuca ulaştığımız için güçlü bağ kuvvetlerinin varlığına dair kanıtı güçlendirmekte ve bu durum hesaplamalarımızın tutarlılığını birkez daha göstermektedir.

3.5.2. Nb₃Rh bileşiğinin elektronik özellikleri

Nb₃Rh'nin basit kübik Brillouin bölgesi içinde seçilen yüksek simetri yönleri boyunca hesaplanan enerji bandı yapıları Şekil 3.18.'de gösterilmiştir. Şekilde 0 eV Fermi enerji seviyesini göstermektedir. Band yapısı incelendiğinde Nb₃Rh bileşiği, gösterilen band yapısında belirtildiği gibi üç boyutlu bir metaldir; önemli dağılıma sahip bir dizi band Fermi seviyesini geçmektedir. Bileşiğin elektronik yapısı incelendiğinde X – M simetri çizgisi boyunca ve Γ – M yönünün sonunda Fermi seviyesine paralel olan hemen hemen düz bandlar olduğu görülmektedir. Fermi seviyesinin yakınındaki bu düz bandlar, keskin bir pik yapma potansiyeline sahiptir. Bu özellik, A15 bileşiklerindeki süperiletkenliği anlamak için büyük önem taşımaktadır. BCS teorisi, süperiletkenlik olayının Fermi seviyesi civarındaki elektronlardan kaynaklandığını ve

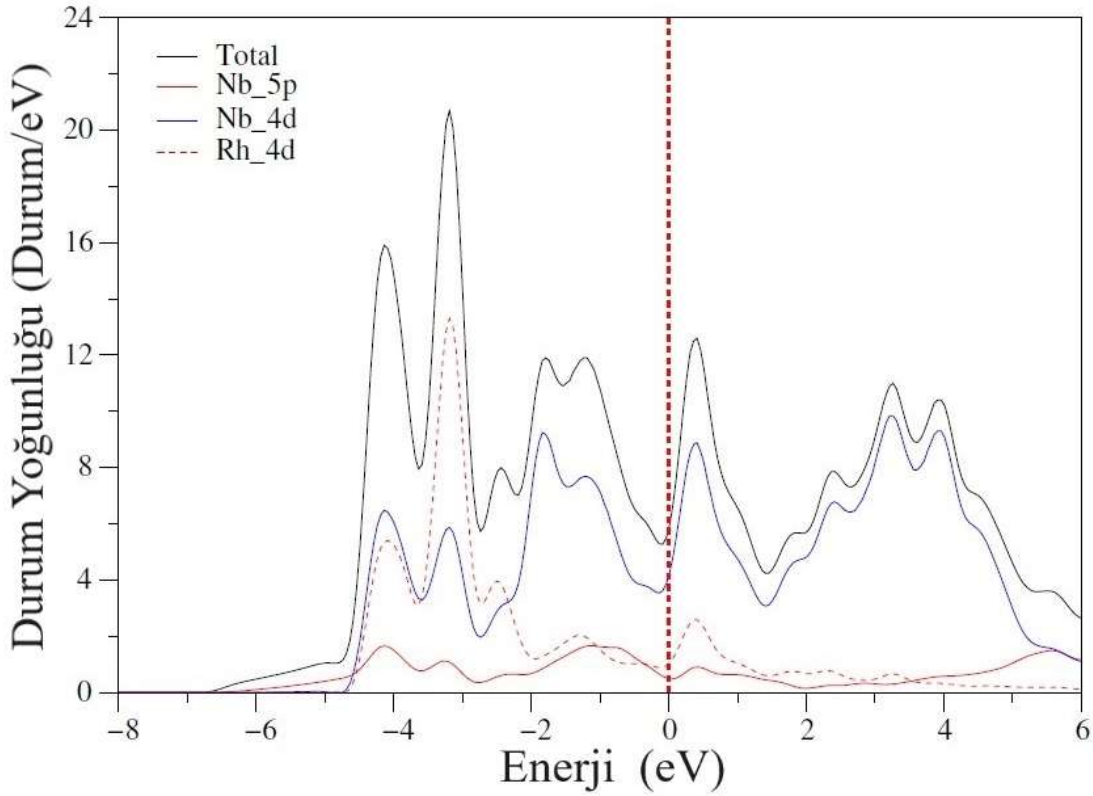
Cooper çiftlerini bu elektronların oluşturduğunu belirtir. Daha önceki teorik çalışmaların hesaplanan enerji bandı yapısı ile uyumu elde edilen sonuçların güvenilir olduğunu göstermektedir (Paduani, 2007b).



Şekil 3.18. Nb₃Rh bileşiğinin elektronik band yapısı.

Elektronik enerji band yapısındaki elektronik bandların kökenini belirlemek için Nb₃Rh'nin toplam ve kısmi yoğunluk durumları (DOS) analiz edilmesi gerekir. Nb₃Rh bileşiğinin toplam ve kısmi durum yoğunluğu (DOS) analiz edilmiş ve şekil 3.19.'da verilmiştir. Şekilde 0 eV daki kırmızı kesikli çizgi Fermi enerji seviyesini ifade etmektedir. Nb₃Rh bileşiğinin süperiletken özelliklerinin oluşumuna en önemli katkı Nb atomlarının 4d elektronlarından gelmektedir. Nb₃Rh'nin DOS bölgesi incelendiğinde gözlemlenebilen birkaç dikkat çekici pik özelliği vardır. İlk pik -4.2 eV civarındadır ve tüm bu pikler Nb 4d, Nb 5p ve Rh 4d elektronik durumlarının kombinasyonu ile ilgilidir. -6.6 eV ile -4.6 eV arasında Nb 5p elektronları, -3.5 ile -2.3 eV arasında Rh 4d elektronları daha baskındır. Nb 4d durumları, diğer elektronik durumlardan gelen küçük katkılarla birlikte -2.3 eV ile 6 eV arasındaki bölgede baskındır. Ayrıca -4.6 eV ile -3.5 eV arasında Nb atomunun 4d orbitali ile Rh atomunun 4d orbitalinden durum yoğunluğuna gelen katkılar en büyük ve birbirine benzer eğilimde olduğu bulunmuştur. Bu benzer eğilim hibritleşmeye ve Nb-Rh

atomları arasında kovalent bağ olabileceğine işaretler. Bu durumlar Nb-Nb bağları gibi metalik bağlarda rol oynamaktadır.



Şekil 3.19. Nb₃Rh bileşiği için toplam ve kısmi elektronik durum yoğunluğu.

Rh'nin Fermi seviyesi yakınındaki durum yoğunluğunun (DOS) Nb atomlarına kıyasla çok küçük olmasından dolayı Rh atomlarının Nb₃Rh'nin elektronik ve süperiletkenlik özellikleri üzerindeki etkisinin ihmal edilebileceğini sonucuna varabiliriz. Dolayısıyla, Rh atomlarının rolü Nb₃Rh'nin kübik kristal yapısının kararlılığını artırmaktır. Nb₃Rh'nin Fermi seviyesindeki DOS değeri $N(E_F) = 0.709$ durum/eV.atom olarak belirlenmiş olup Nb ve Rh atomlarının $N(E_F)$ 'ye katkısının büyük oranda Nb atomlarının 4d elektronlarından kaynaklandığı söylenebilir. Bu sonuçların daha önceki teorik sonuçlarla uyumlu olduğu görülmektedir (Paduani, 2007b). Bu sonuçlar, kübik Nb₃Rh bileşiğinin süperiletken özelliklerinin oluşumuna en önemli katkının bu tez kapsamında incelediğimiz diğer bileşiklerde olduğu gibi Nb atomlarının 4d elektronlarından geldiğini ve bunun da $N(E_F)$ değerini artırdığını ve denklem 3.1. ile verilen McMillan-Hopfield ifadesine göre λ değerinde artışa neden olduğunu göstermektedir.

3.5.3. Nb₃Rh bileşiğinin elastik ve mekanik özellikleri

Elektron-fonon etkileşimi, süperiletken özelliklerin belirlenmesinde önemli bir rol oynamaktadır. Elastik özellikler ve fonon spektrumu arasındaki ilişki sebebiyle süperiletken özellikler elastik özelliklerden de etkilenebilir. Bu nedenle, elastik özellikler iletken özelliklerinin teorik yönlerinin anlaşılması açısından oldukça önemlidir. Bileşiklerin mekanik kararlılığı ve sertliği, elastik sabitler aracılığıyla elde edilebilir ve hangi alanlarda kullanılacağına belirlenmesi açısından faydalı olmaktadır. Basit kübik örgüye sahip olan Nb₃Rh için C₁₁, C₁₂ ve C₄₄ olmak üzere üç bağımsız sabit genelleştirilmiş Hooke yasasına dayanan gerilme gerinim yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır. Nb₃Rh için belirlenen elastik sabitler Tablo 3.16.'da gösterilmiştir. Tablo 3.16.'da görüldüğü gibi Nb₃Rh'nin en yüksek elastik sabiti C₁₁ değerine ait olduğu için x eksenini boyunca doğrusal sıkıştırmaya karşı büyük bir dirence sahiptir. Bu, Nb₃Rh bileşiğinin bu yönde en yüksek sıkıştırılmazlığa sahip olduğu anlamına gelir. Kübik kristallerde, bir element Born kriterlerini karşılıyorsa mekanik olarak karardır (Born ve ark., 1955; Wu ve ark., 2007). Tablo 3.16.'dan, Nb₃Rh bileşiğinin mekanik olarak karardır olduğu açıktır çünkü Born'un kübik kristaller için karardlık koşullarını karşılamaktadır (Born ve ark., 1955). Nb₃Rh'nin mekanik özellikleri, elastik sabitler ve Voigt-Reuss-Hill (VHR) yaklaşımı kullanılarak elastik modüller (bulk modülü B_H, kayma modülü G_H, Young modülü E) ve Poisson oranı ν hesaplanarak belirlenmiştir (Voigt, 1928; Reuss, 1929; Hill, 1952; Wu ve ark., 2007). Bu yöntem alt sınır olarak Voigt yaklaşımını ve üst sınır olarak Reuss yaklaşımını kullanır. Hill yaklaşımı Voigt ve Reuss değerlerinin ortalamasını temsil etmek için kullanılır.

Tablo 3.16. Kübik Nb₃Rh bileşiği için hesaplanan elastik sabitler, elastik modüller ve bu değerlerin deneysel ve teorik verilerle karşılaştırılması.

	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄	B _H	G _H	E _H	C _p	B _H /G _H	ν
Bu Çalışma	372.2	112	64.2	198.72	85.51	224.27	47.8	2.324	0.311
Theory (GGA)				196.61					
(Paduani, 2007b)									

C₁₁, C₁₂ ve C₄₄ (GPa): Elastik sabitler; B_H (GPa): Bulk modülü; G_H (GPa): Kayma modülü; E_H (GPa): Young modülü; C_p (GPa): Cauchy basıncı; B_H/G_H: Bulk modülünün kayma modülüne oranı; ν : Poisson

Tablo 3.16., Nb₃Rh için bu yaklaşımla elde edilen tüm parametreleri ve Nb₃Rh için önceki teorik sonuçları göstermektedir (Paduani, 2007b). Nb₃Rh için elastik sabitlerden elde edilen 198.72 GPa bulk modülü, Tablo 3.15.'de gösterildiği gibi

Murnaghan durum denkleminde hesaplanan 193.7 GPa değeriyle uyumludur. Her iki yöntemden elde edilen sonuçların benzerliği, hesaplamalarımızın doğruluğunun kanıtıdır. Ayrıca bulk modülünün değeri bize malzemenin sıkıştırılabilirliği hakkında bilgi verir. Young modülü, gerilimin gerilmeye bölünmesiyle hesaplanır ve katıların sertliği hakkında fikir verir. Bir malzemenin Young modülünün diğerlerinden daha büyük olması, o malzemenin daha sert ve deformasyona karşı daha dayanıklı olduğunu gösterir. Cauchy basıncı (C_p), B_H/G_H oranı ve Poisson oranı (ν) kübik kristallerin doğal sünekliğini ve kırılgenliğini değerlendirmek için kullanılabilir (Ganeshan ve ark., 2009; Haines ve ark., 2001; Pugh, 1954). C_p değeri sıfırdan büyükse, kristal sünek özelliklere sahiptir. Aksine, değer sıfırdan küçük veya sıfıra eşitse, kristal kırılgen olarak kabul edilir. Tablo 3.16.'dan Nb_3Rh 'nin C_p değerinin 47.8 GPa olduğu görülmektedir. Bu sonuç, Nb_3Rh 'nin sünek bir karakter sergilediğini göstermektedir. B_H/G_H oranı, bir malzemenin sünek mi yoksa kırılgen mi olduğunu belirlemek için kullanılan 1.75'lik kritik bir değere sahiptir (Pugh, 1954). Nb_3Rh , Tablo 3.16.'deki 2.324 değeri ile 1.75'ten büyük B_H/G_H oranına sahiptir, bu da Cauchy basınç hesaplamalarından elde edilene benzer şekilde Nb_3Rh 'nin sünek özelliklere sahip olduğunu gösterir. Malzemelerin sünek ve kırılgen karakterlerini belirleyebilen bir diğer parametre, kritik değeri 0.26 olan Poisson oranıdır. Poisson oranının kritik değerden büyük olması durumunda malzemenin sünek davranış sergilediği, aksi takdirde kırılgen olarak kabul edildiği iyi bilinmektedir. Nb_3Rh 'nin Tablo 3.16.'daki 0.311 Poisson oranı değerinin kritik değer 0.26 olan değerden daha büyük bir değere sahip olması sünek karaktere sahip olduğunu göstermektedir.

Debye sıcaklığı (Θ_D) ve ses hızları (enine V_T , boyuna V_L ve ortalama V_M) malzemelerin termal özelliklerinin anlaşılmasında önemli faktörlerdir. Debye sıcaklığı, malzemelerin sertlik, özgül ısı ve erime noktası gibi önemli kimyasal özelliklerinin anlaşılmasını sağlar. Debye sıcaklığı yüksek olan malzemelerin daha yüksek sertlik ve erime sıcaklığı dereceleri sergilemesi muhtemeldir. Debye sıcaklığı ve ses hızı değerleri, elastik sabitlere dayanan denklem 2.65., 2.66., 2.67. ve 2.68. kullanılarak hesaplanabilir (Wu ve ark., 2020). Nb_3Rh için hesaplanan ses hızları V_T , V_L , V_M değerleri sırasıyla 3065.60 m/s, 5852.83 m/s, 4661.02 m/s olarak hesaplandı ve Debye sıcaklığı Θ_D değeri ise 394.6 K olarak belirlendi. Bu değerler Tablo 3.17.'de gösterilmektedir.

Tablo 3.17. Nb₃Rh için hesaplanan ses elastik dalga hızları, Debye sıcaklığı değerleri ve bunların mevcut deneysel verilerle karşılaştırılması.

	V _T (m/s)	V _L (m/s)	V _M (m/s)	Θ _D (K)
Bu Çalışma	3065.60	5852.83	4661.02	394.6

V_T: Enine ses elastik dalga hızı; V_L: Boyuna ses elastik dalga hızı; V_M: Ortalama ses elastik dalga hızı; Θ_D: Debye sıcaklığı

3.5.4. Nb₃Rh bileşiğinin titreşim özellikleri

Merkezi-fonon modları O_h (Pm $\bar{3}$ n) nokta grubu ile tanımlanır ve Γ noktasındaki optik fonon modları denklem 3.2. ile verilmiştir. Nb₃Rh için Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν), elektron fonon etkileşim parametreleri (λ), titreşim modu öz karakterleri (EC) ve baskın atomlar Tablo 3.18.'de gösterilmiştir.

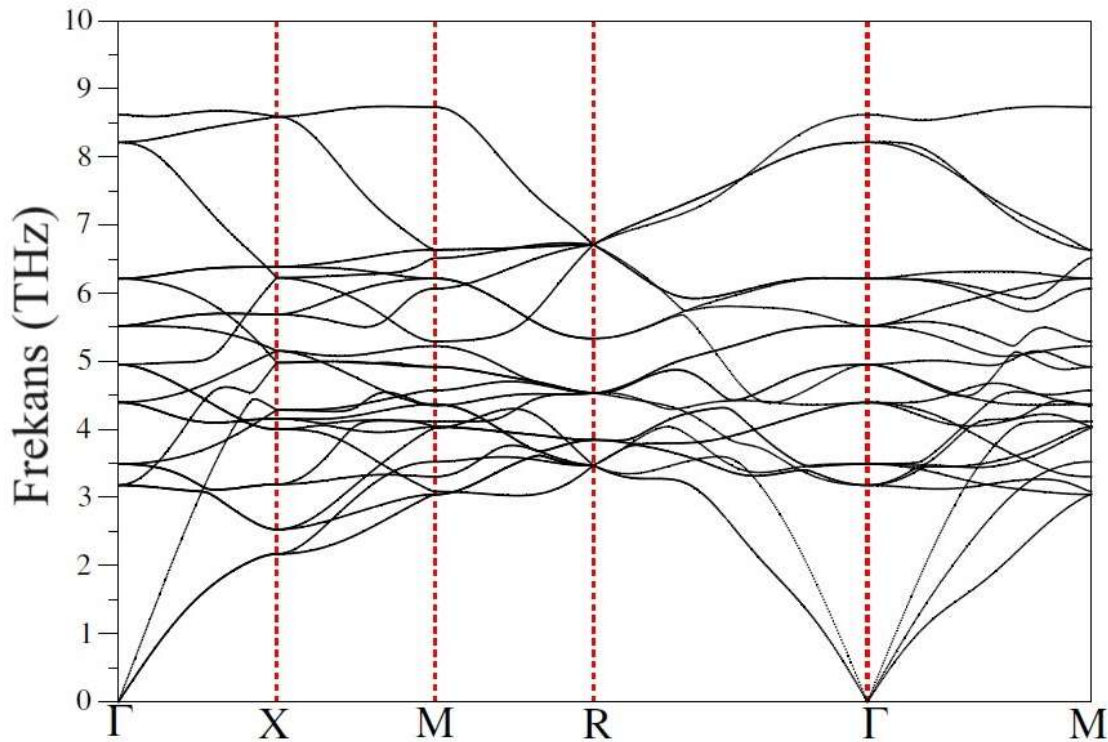
Tablo 3.18. Nb₃Rh bileşiği için hesaplanan Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν), her biri için hesaplanan elektron fonon etkileşim parametreleri (λ) ve titreşim modu öz karakterleri (EC).

	T _{1g} (S)	T _{2g} (R)	T _{2u} (S)	T _{1u} (I)	E _g (R)	A _{2g} (S)	T _{1u} (I)	T _{2u} (S)
ν (THz)	4.394	5.518	3.491	3.179	8.215	8.620	4.954	6.211
λ	0.056	0.040	0.038	0.008	0.039	0.071	0.003	0.003
EC	Nb	Nb	Nb+Rh	Nb+Rh	Nb	Nb	Nb+Rh	Nb+Rh

I, R ve S gösterimleri sırasıyla kızılötesi aktif, Raman aktif ve pasif (silent) modları ifade etmektedir.

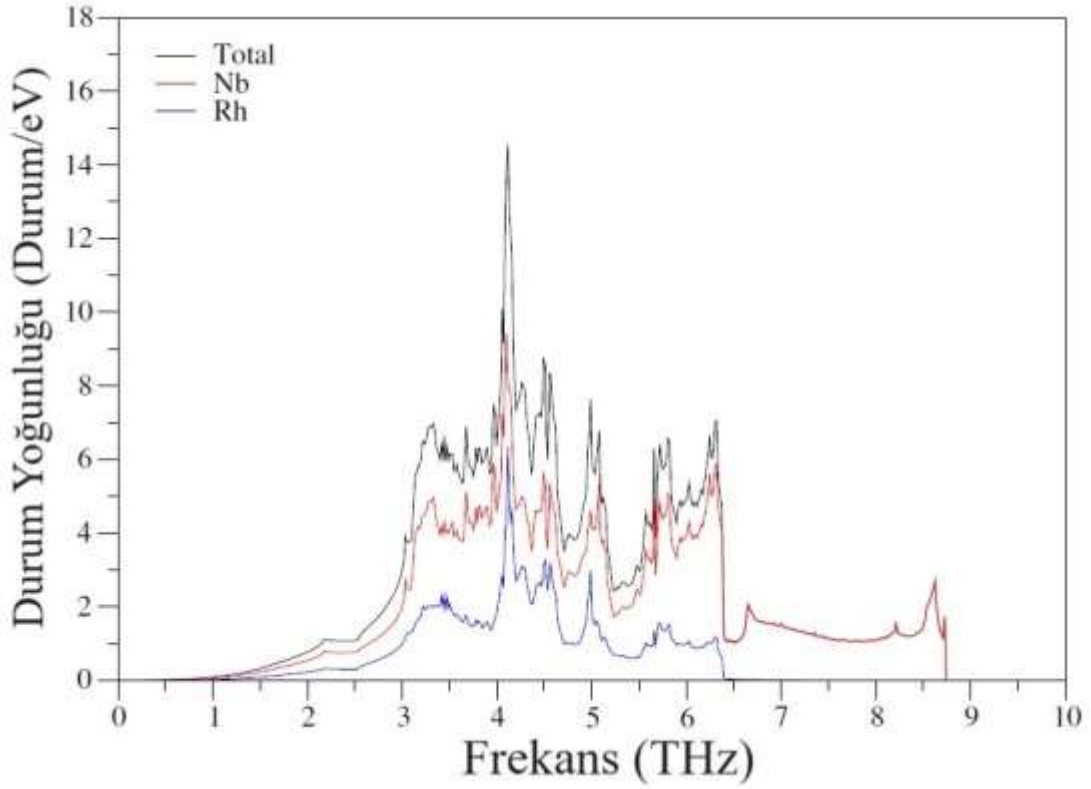
T_{2g} ve E_g modları Raman aktif, T_{1u} modları kızılötesi aktif ve geri kalan modlar pasiftir. T_{1g}, T_{2g}, A_{2g} ve E_g fonon modlarındaki baskın titreşimler Nb atomlarını içerirken, Rh atomları pasif kalmaktadır. Nb ile ilişkili T_{1g}, T_{2g}, A_{2g} ve E_g fonon modlarının elektron-fonon etkileşim parametreleri, Tablo 3.18.'de gösterildiği gibi, diğer fonon modlarından çok daha yüksektir. Bu gözlemle ilişkilendirilebilecek iki neden vardır. Bu ilk olarak, denklem 3.1. ile verilen McMillan-Hopfield ifadesi tarafından tahmin edildiği gibi fonon modlarının daha düşük frekanslara sahip olması daha yüksek değerlere yol açabileceği için bu durumu gözlemlemenin önemi ile ilişkilendirilebilir. İkinci nokta, tamamen Nb atomlarının titreşimleri tarafından belirlenen d durumları, atomik yer değiştirme şekillerinin Fermi seviyesindeki durum yoğunluğunu içerir. Nb₃Rh'nin Γ noktası optik fonon modlarının frekanslarını incelendi, bundan sonra T_c'yi tahmin etmek için yapılması gereken ortalama λ 'yı hesaplamak amacıyla fonon spektrumlarının tamamını ve fonon durum yoğunluğunu (DOS) incelemektir.

Nb_3Rh 'nin basit kübik Brillouin bölgesindeki fonon dispersiyon grafiği Şekil 3.20.'de gösterilmiştir. Nb_3Rh bileşiğinin birim hücresindeki 8 atomun üçü akustik, diğerleri optik 24 fonon modu ürettiği iyi bilinmektedir. 3 akustik modun 2'si enine akustik (TA) ve 1'i boyuna akustik (LA) iken, benzer şekilde 21 optik modun 14'ü enine optik (TO) ve 7'si boyuna optik (LO) modlardır. Bununla birlikte, simetri kısıtlamaları nedeniyle, fonon modları yüksek simetri noktalarında dejenere olabilir. Bazı modlar üst üste biner ve bu nedenle bu 24 mod Şekil 3.20.'deki tüm yönler ve simetri noktaları için görünmez. Γ noktasındaki sekiz optik fonon modunun altısı 3 kat dejenere, biri 2 kat dejenere ve diğeri de dejenere değildir. X noktasında 12 çift dejenere mod vardır. M noktasında, ikisi 3 kat dejenere, dördü çift dejenere ve diğerleri dejenere değildir. Son olarak, R noktasında, üçü 6 kat dejenere, biri 4 kat dejenere ve diğeri 2 kat dejenere olmak üzere toplam 5 fonon modu vardır. Birim hücredeki Nb ve Rh atomlarının kütlelerinin birbirine yakın olmasından dolayı, akustik ve optik modlar arasında bir boşluk bölgesi yoktur. Fonon dispersiyon grafiği dikkatli bir şekilde incelendiğinde tüm fonon modları pozitifdir, bu da A15 sistemleri için Nb_3Rh 'nin dinamik kararlılığını gösterir.



Şekil 3.20. Nb_3Rh bileşiği için hesaplanan fonon dispersiyon eğrileri.

Atomik titreşimlerin fonon durum yoğunluğuna katkılarını açık bir şekilde anlayabilmek için toplam ve kısmi DOS grafikleri analiz edilmesi gerekir. Nb₃Rh'nin toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu (PhDOS) için yapılan hesaplamaların sonuçları Şekil 3.21.'de verilmiştir.

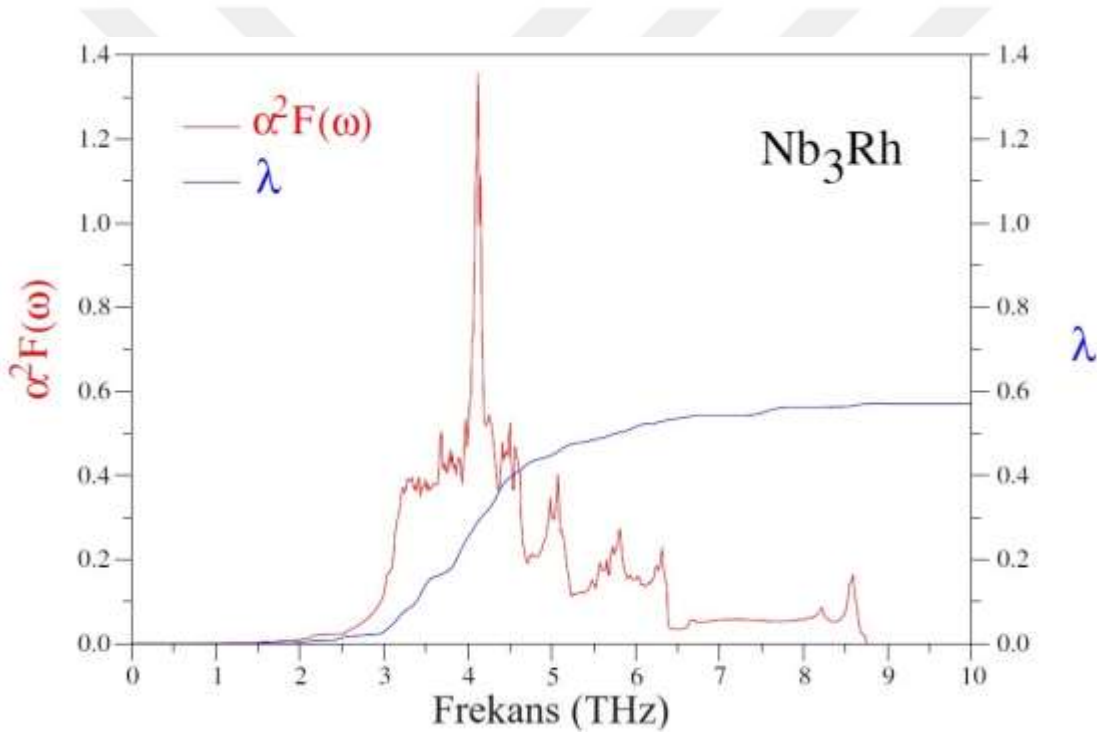


Şekil 3.21. Nb₃Rh bileşiğinin toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu.

Nb₃Rh'nin toplam fonon DOS'unda herhangi bir boşluk bulunmamaktadır. Nb₃Rh materyali, 6.5 THz frekans aralığına kadar hibridleşme sergiler. Bu nedenle, Nb ve Rh'nin bir kovalent bağa sahip olduğu varsayılabilir. Nb₃Rh'nin kısmi DOS'u, Nb atomlarının 4.0 THz'nin altındaki geniş bölgede baskın olduğunu üstündeki bölgede ise hibridizasyon etkisi olduğunu gösterir. Bu nedenle, Nb₃Rh'nin üç akustik fonon dalı büyük ölçüde Nb atomlarının titreşimlerinin bir sonucudur. Bu DOS varyasyonları, elektron-fonon etkileşimini ve dolayısıyla T_c'yi etkileyebilir. Daha önce de belirttiğimiz gibi, Nb₃Rh bileşiğinin birim hücresinde 6 Nb ve 2 Rh olmak üzere 8 atom bulunmaktadır. Birim hücrede 6 Nb atom olması ve bunların birbirleriyle bağ yapması, 4.2 THz'deki en yüksek yoğunluklu pike yaptıkları katkıyı açıklamaktadır. Bu nedenlerden dolayı, Nb atomları 4.2 THz'deki en yüksek yoğunluklu pikin oluşumunda biraz daha baskın bir rol oynamaktadır.

3.5.5. Nb₃Rh bileşiğinin süperiletkenlik özellikleri

Bu araştırmanın temel amacı, Nb₃Rh'deki süperiletkenliğin kaynağını elektron-fonon etkileşiminin gücünü inceleyerek araştırmaktır. Bu hedefe ulaşmak için Nb₃Rh'nin Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) hesaplanmıştır. Bu spektral fonksiyonun entegrasyonundan ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi (λ) ve ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), denklem 3.3. ve 3.4. kullanılarak bu spektral fonksiyonun entegrasyonundan elde edilebilir. Süperiletken geçiş sıcaklığı (T_c) Allen-Dynes tarafından önerilen düzenlenmiş McMillan denklemi 3.5. ile belirlenebilir. $\mu^*=0.13$ değerini kullanmayı tercih ettik. Nb₃Rh için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın frekansa bağlı grafiği Şekil 3.22.'de gösterilmiştir.



Şekil 3.22. Nb₃Rh için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) (kırmızı çizgiler) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın (mavi çizgiler) frekans değişimleri.

Nb₃Rh'nin λ değeri 0.571 olarak hesaplanmıştır. Şekil 3.22., $\lambda(\omega)$ 'nin en düşük frekans bölgesi tarafından domine edildiğini ve burada $\lambda \propto \omega$ olduğunu doğrulamaktadır. Düşük frekans bölgesinin toplam λ 'ya katkısı %92.82'dir. Bu katkı, Nb ve Rh atomlarının birleşik hareketinden kaynaklanmaktadır. Yüksek frekans bölgesi λ 'ya %7.18 katkı yapar. $\lambda(\omega)$ değeri kullanılarak logaritmik ortalama fonon frekansı (ω_{ln}) 201.93 K olarak hesaplanmıştır. Bu değerler daha sonra McMillan formülünün Allen-

Dynes modifikasyonunu kullanarak süperiletken geçiş sıcaklığı T_c 'yi hesaplamak için kullanılır. Nb_3Rh malzemesinin T_c değeri 2.68 K olarak hesaplanmıştır. Nb_3Rh malzemesi için hesaplanan durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri Tablo 3.19.'da verilmiştir. Elde edilen T_c değeri deneysel değerler ile mükemmel bir uyum içindedir (Zegler, 1965).

Tablo 3.19. Nb_3Rh malzemesi için Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri.

	$N(E_F)$ (Durum/eV.atom)	λ	ω_{ln} (K)	T_c (K)
Bu Çalışma	0.709	0.571	201.93	2.68
Deneysel (Zegler, 1965)				2.64

3.6. Nb_3Ir Bileşiği

3.6.1. Nb_3Ir bileşiğinin yapısal özellikleri

A15 tipinde olan Nb_3Ir 'nin kübik kristal yapısı Şekil 3.1.'de gösterilmiştir. Daha önce olduğu gibi, Nb_3Ir 'nin örgü sabiti (a), bulk modülü (B) ve basınç türevi (B') geometri optimizasyonu ve Murnaghan durum denklemleri 2.55. ve 2.56. kullanılarak belirlenmiştir (Murnaghan,1944). Denge parametreleri (a , B ve B') Tablo 3.20.'de listelenmiştir. Bu değerler önceki teorik ve deneysel sonuçlarla uyumludur (Li ve ark., 2017; Tan ve ark., 2000).

Tablo 3.20. Kübik Nb_3Ir bileşiği için elde edilen yapısal parametreler ve bu parametrelerin deneysel ve teorik veriler ile karşılaştırılması.

	a (Å)	B (GPa)	B'
Bu Çalışma	5.173	214	3.97
Teorik (GGA) (Li ve ark., 2017)	5.158	227.4	4.22
Teorik (LDA) (Li ve ark., 2017)	5.077	255.1	4.26
Deneysel (Tan ve ark., 2000)	5.132		

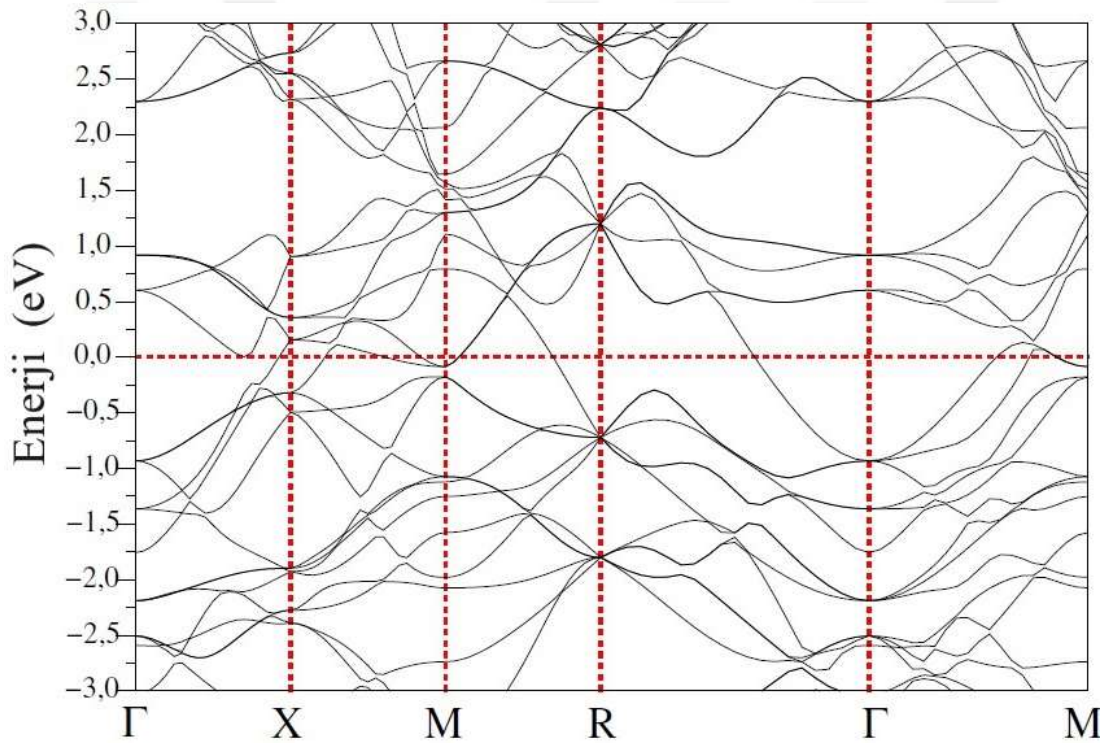
a: Kübik Nb_3Ir bileşiğinin örgü sabiti; B: Bulk modülü; B': Bulk modülünün basınca göre birinci türevi

Nb ve Ir atomları arasındaki bağ uzunluğu değeri 2.892 Å olarak belirlenmiştir, bu değer Niyobyum ve Iridyum atomları için 3.05 Å olan kovalent yarıçapların toplamından biraz daha kısadır (Cordero ve ark., 2008; Pyykkö ve ark., 2009). Bu sonuçlar Nb ve Ir atomlarının iyonik ve kovalent etkileşimlerin bir kombinasyonu ile

bağlı olduğunu göstermektedir. Nb₃Ir için Nb-Nb mesafesi 2.585 Å olup, elementel Nb'deki Nb-Nb mesafesinden (2.86 Å) oldukça kısadır (Karaca ve ark., 2021). Sonuçlar, Nb₃Ir bileşiğindeki Nb atomları arasında güçlü bağ kuvvetlerinin varlığına işaret etmektedir ve bu tez kapsamında incelediğimiz diğer bileşiklerde de aynı sonuca ulaştığımız için güçlü bağ kuvvetlerinin varlığına dair kanıtı güçlendirmekte ve bu durum hesaplamalarımızın tutarlılığını birkez daha göstermektedir.

3.6.2. Nb₃Ir bileşiğinin elektronik özellikleri

Nb₃Ir'nin basit kübik Brillouin bölgesi içinde seçilen yüksek simetri yönleri boyunca hesaplanan enerji bandı yapıları Şekil 3.23.'de gösterilmiştir. Şekilde 0 eV Fermi enerjisi seviyesini göstermektedir.



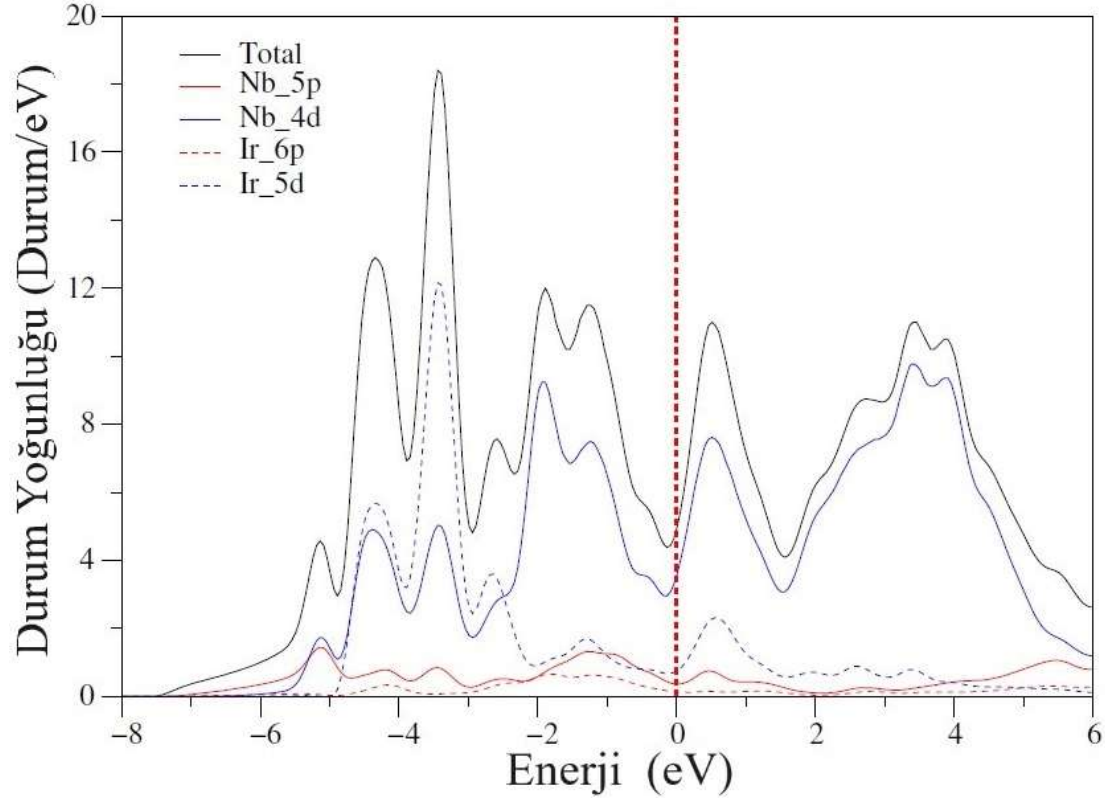
Şekil 3.23. Nb₃Ir bileşiğinin elektronik band yapısı.

Band yapısı incelendiğinde önemli dağılıma sahip birkaç band Fermi seviyesini kesmektedir, bu durumda Nb₃Ir bileşiği metalik yapıdadır. Bileşiğin elektronik yapısı incelendiğinde X – M simetri çizgisi boyunca ve Γ – M yönünün sonunda Fermi seviyesi civarında bandlar olduğu görülmektedir. Fermi seviyesi ile çakışan bu bandlar Nb₃Rh bileşiğinin elektronik yapısında da aynı simetri yönleri boyunca görülmüştür. Bu durum Nb₃Ir ve Nb₃Rh'nin Fermi seviyesindeki durum yoğunluğunun ($N(E_F)$) birbirine çok yakın değer alabileceğinin bir göstergesidir. Sonuç olarak $N(E_F)$

değerleri Nb₃Ir ve Nb₃Rh için sırasıyla 0.758 ve 0.709 durum/eV.atom olarak birbirine yakın değerler bulunmuştur. Bu düz bandlar, Fermi seviyesinin yakınında keskin bir tepe oluşturma potansiyeline sahiptir. Bu özellik, A15 bileşiklerindeki süperiletkenliği anlamak için büyük önem taşımaktadır. BCS teorisinde, Cooper çiftleri Fermi seviyesine yakın enerjilere sahip elektronlar tarafından oluşturulur. Elde edilen elektronik band yapısı grafiği daha önceki teorik çalışmalar ile oldukça uyumludur (Jarlborg ve ark., 1983). Bu uyum, elektronik yapı için elde edilen sonuçların güvenilir olduğuna bir işarettir.

Nb₃Ir'nin elektronik enerji band yapısındaki elektronik bandların kökenini belirlemek için Nb₃Ir'nin toplam ve kısmi yoğunluk durumları (DOS) analiz edilmiş ve Şekil 3.24.'de verilmiştir. Şekilde 0 eV daki kırmızı kesikli çizgi Fermi enerji seviyesini ifade etmektedir. Nb₃Ir'nin elektronik DOS'unun analizi Nb₃Rh ile çok benzer bir model ortaya koymaktadır. Şekil 3.24.'de görüldüğü gibi Nb₃Ir bileşiğinin süperiletken özelliklerinin oluşumuna en önemli katkı Nb atomlarının 4d elektronlarından gelmektedir. Nb₃Ir'nin valans DOS bölgesi incelendiğinde yaklaşık -7.5 eV ile -5.4 eV arasındaki bölgede valans bandlarının oluşumuna en büyük katkı Nb 5p elektronlarından gelmektedir. -5.4 eV değerinden Fermi enerji seviyesine kadar elektronik bandların oluşumuna gelen katkı büyük oranda Nb 4d elektronları tarafından sağlandığı görülmektedir. Ancak -4.8 eV ile -2.5 eV arasındaki bölgede Ir 5d elektronları daha baskındır. Ayrıca -4.8 eV ile -4.0 eV arasında Nb atomunun 4d orbitali ile Ir atomunun 4d orbitalinden durum yoğunluğuna gelen katkılar en büyük ve birbirine benzer eğilimde olduğu bulunmuştur. Bu benzer eğilim hibritleşmeye ve Nb-Ir atomları arasında kovalent bağ olabileceğine işarettir. Fermi seviyesinin yukarıdaki iletkenlik bandlarının oluşumuna ise Şekil 3.24.'de görüldüğü gibi büyük oranda Nb 4d elektronları sebep olmaktadır. Daha önce de belirtildiği gibi, BCS teorisindeki Cooper çiftleri, Fermi seviyesine yakın enerjilere sahip elektronlar tarafından oluşturulur. Bu nedenle, Fermi seviyesindeki elektronik durumlar süperiletkenlikte çok önemli bir rol oynar. Nb₃Ir'nin Fermi seviyesindeki DOS değeri $N(E_F) = 0.758 \text{ durum/(eV.atom)}$ olarak hesaplanmıştır. Bu durum yoğunluğunun oluşumuna en büyük katkı görüldüğü gibi Nb 4d elektronlarından gelmektedir. Fermi enerji seviyesi için elde edilen durum yoğunluğu grafiği daha önceki teorik sonuçlarla benzerlik göstermektedir (Paduani, 2007b). Bu sonuçlar, kübik Nb₃Ir bileşiğinin süperiletken özelliklerinin oluşumuna en önemli katkının Nb atomlarının 4d

elektronlarından geldiğini ve bunun da $N(E_F)$ değerini arttırdığını ve denklem 3.1. ile verilen McMillan-Hopfield ifadesine göre λ değerinde artışa neden olduğunu göstermektedir.



Şekil 3.24. Nb₃Ir bileşiğinin toplam ve kısmi elektronik durum yoğunluğu.

3.6.3. Nb₃Ir bileşiğinin elastik ve mekanik özellikleri

Elektron-fonon etkileşimi, BCS teorisinde belirtildiği gibi süperiletken özelliklerin belirlenmesinde çok önemli bir rol oynamaktadır. Fonon spektrumu ve elastik özellikler arasındaki ilişki göz önüne alındığında, süperiletken özelliklerin elastik özelliklerden de etkilendiği düşünülebilir. Ayrıca, elastik sabitler bileşiklerin mekanik kararlılığını ve sertliğini belirlemek için kullanılabilir. Bu sonuçlar, potansiyel uygulama alanlarının belirlenmesi için faydalı bilgiler verir. Kübik kristal Nb₃Ir için elastik sabitler (C_{11} , C_{12} ve C_{44}), genelleştirilmiş Hooke yasasına dayanan gerilme-gerinim yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır (Beckstein ve ark., 2001). Nb₃Ir için belirlenen elastik sabitler Tablo 3.21.'de gösterilmiştir. Tablo 3.21.'de görüldüğü gibi Nb₃Ir'nin en yüksek elastik sabiti C_{11} değerine ait olduğu için x eksenini boyunca doğrusal sıkıştırmaya karşı büyük bir dirence sahiptir. Bu, Nb₃Ir bileşiğinin bu yönde en yüksek sıkıştırılmazlığa sahip olduğu anlamına gelir. C_{44} değerinin kayma modülü ile ilişkili olduğu iyi bilinmektedir (Wu ve ark.,2020). Kübik kristallerde, bir element

Born kriterlerini karşılıyorsa mekanik olarak kararlıdır (Born ve ark., 1955; Wu ve ark., 2007). Tablo 3.21.'den, Nb₃Ir bileşiklerinin mekanik olarak kararlı olduğu açıktır çünkü Born'un kübik kristaller için kararlılık koşullarını karşılamaktadır (Born ve ark., 1955).

Tablo 3.21. Kübik Nb₃Ir bileşiği için hesaplanan elastik sabitler, elastik modüller ve bu değerlerin deneysel ve teorik verilerle karşılaştırılması.

	C ₁₁	C ₁₂	C ₄₄	B _H	G _H	E _H	C _P	B _H /G _H	v
Bu Çalışma	416.9	120.7	77.8	219.4	100.97	262.53	42.9	2.173	0.30
Theory (GGA) (Li ve ark., 2017)	433.7	123.7	84.5	227	108	279.7	39.2	2.102	0.295
Theory (LDA) (Li ve ark., 2017)	477.7	144.9	86.9	255.8	113.1	295.7	58.0	2.262	0.307

C₁₁, C₁₂ ve C₄₄ (GPa): Elastik sabitler; B_H (GPa): Bulk modülü; G_H (GPa): Kayma modülü; E_H (GPa): Young modülü; C_P (GPa): Cauchy basıncı; B_H/G_H: Bulk modülünün kayma modülüne oranı; v: Poisson

Nb₃Ir 'nin mekanik özellikleri, elastik sabitler ve Voigt-Reuss-Hill (VHR) yaklaşımı kullanılarak elastik modüller (bulk modülü B_H, kayma modülü G_H, Young modülü E) ve Poisson oranı v hesaplanarak belirlenmiştir (Voigt, 1928; Reuss, 1929; Hill, 1952; Wu ve ark., 2007). Bu yöntem alt sınır olarak Voigt yaklaşımını ve üst sınır olarak Reuss yaklaşımını kullanır. Hill yaklaşımı Voigt ve Reuss değerlerinin ortalamasını temsil etmek için kullanılır. Tablo 3.21., Nb₃Ir için bu yaklaşımla elde edilen tüm parametreleri ve Nb₃Ir için önceki teorik sonuçları göstermektedir (Li ve ark., 2017). Nb₃Ir için elastik sabitlerden elde edilen 219.4 GPa bulk modülü, Tablo 3.20.'de gösterildiği gibi Murnaghan durum denkleminde hesaplanan 214 GPa değeriyle uyumludur. Her iki yöntemden elde edilen sonuçların benzerliği, hesaplamamızın doğruluğunun kanıtıdır. Ayrıca bulk modülünün değeri bize malzemenin sıkıştırılabilirliği hakkında bilgi verir. Young modülü, gerilimin gerilmeye bölünmesiyle hesaplanır ve katıların sertliği hakkında fikir verir. Bir malzemenin Young modülünün diğerlerinden daha büyük olması, o malzemenin daha sert ve deformasyona karşı daha dayanıklı olduğunu gösterir. Cauchy basıncı (C_P), B_H/G_H oranı ve Poisson oranı (v) kübik kristallerin doğal sünekliğini ve kırılabilirliğini değerlendirmek için kullanılabilir (Ganesan ve ark., 2009; Haines ve ark., 2001; Pugh, 1954). C_P değeri sıfırdan büyükse, kristal sünek özelliklere sahiptir. Aksine, değer sıfırdan küçük veya sıfıra eşitse, kristal kırılabilir olarak kabul edilir. Tablo 3.21.'den Nb₃Ir'nin C_P değerinin 42.9 GPa olduğu görülmektedir. Bu sonuç, Nb₃Ir'nin sünek bir karakter sergilediğini göstermektedir. B_H/G_H oranı, bir malzemenin sünek

mi yoksa kırılğan mı olduğunu belirlemek için kullanılan 1.75'lik kritik bir değere sahiptir (Pugh, 1954). Nb₃Ir, Tablo 3.21.'deki 2.173 değeri ile 1.75'ten büyük B_H/G_H oranına sahiptir, bu da Cauchy basınç hesaplamalarından elde edilene benzer şekilde Nb₃Ir'nin sünek özelliklere sahip olduğunu gösterir. Malzemelerin sünek ve kırılğan karakterlerini belirleyebilen bir diğer parametre, kritik değeri 0.26 olan Poisson oranıdır. Poisson oranının kritik değerden büyük olması durumunda malzemenin sünek davranış sergilediği, aksi takdirde kırılğan olarak kabul edildiği iyi bilinmektedir. Nb₃Ir'nin Tablo 3.21.'deki 0.30 Poisson oranı değerinin kritik değer 0.26 olan değerden daha büyük bir değere sahip olması sünek karaktere sahip olduğunu göstermektedir. Nb₃Ir için hesaplanan ses hızları V_T, V_L, V_M değerleri sırasıyla 3003.37 m/s, 5613.70 m/s, 3324.07 m/s olarak hesaplandı ve Debye sıcaklığı Θ_D değeri ise 386.11 K olarak belirlendi ve Tablo 3.22.'de gösterildiği gibi ölçülen bu değer mevcut teorik ve deneysel veriler ile uyumludur (Junod ve ark., 1979, Chen ve ark., 2019, Li ve ark., 2017). Malzemelerin termal özelliklerinin anlaşılmasında Debye sıcaklığı (Θ_D) ve ses hızları (enine V_T, boyuna V_L ve ortalama V_M) önemli faktörlerdir. Debye sıcaklığı, malzemelerin sertlik, özgül ısı ve erime noktası gibi önemli kimyasal özelliklerinin anlaşılmasını sağlar. Debye sıcaklığı yüksek olan malzemelerin daha yüksek sertlik ve erime sıcaklığı dereceleri sergilemesi muhtemeldir. Debye sıcaklığı ve ses hızı değerleri, elastik sabitlere dayanan denklem 2.65., 2.66., 2.67. ve 2.68. kullanılarak hesaplanabilir (Wu ve ark.,2020).

Tablo 3.22. Nb₃Ir için hesaplanan ses elastik dalga hızları, Debye sıcaklığı değerleri ve bunların mevcut deneysel verilerle karşılaştırılması.

	V _T (m/s)	V _L (m/s)	V _M (m/s)	Θ_D (K)
Bu Çalışma	3003.37	5613.70	3324.07	386.11
Theory (GGA) (Chen ve ark., 2019)	3079	5706.4	3434.1	396.4
Theory (GGA) (Li ve ark., 2017)	3079	5707	3434	396
Theory (LDA) (Li ve ark., 2017)	3077	5834	3437	403
Deneysel (Junod ve ark., 1979)				377

V_T: Enine ses elastik dalga hızı; V_L: Boyuna ses elastik dalga hızı; V_M: Ortalama ses elastik dalga hızı; Θ_D : Debye sıcaklığı

3.6.4. Nb₃Ir bileşiğinin titreşim özellikleri

Merkezi-fonon modları O_h (Pm $\bar{3}$ n) nokta grubu ile tanımlanır ve Γ noktasındaki optik fonon modları denklem 3.2. ile verilmiştir. Nb₃Ir için Γ noktası optik fonon modlarının

frekansları (ν), elektron fonon etkileşim parametreleri (λ), titreşim modu öz karakterleri (EC) ve baskın atomlar Tablo 3.23.'de gösterilmiştir.

Tablo 3.23. Nb₃Ir bileşiği için hesaplanan Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν), her biri için hesaplanan elektron fonon etkileşim parametreleri (λ) ve titreşim modu öz karakterleri (EC).

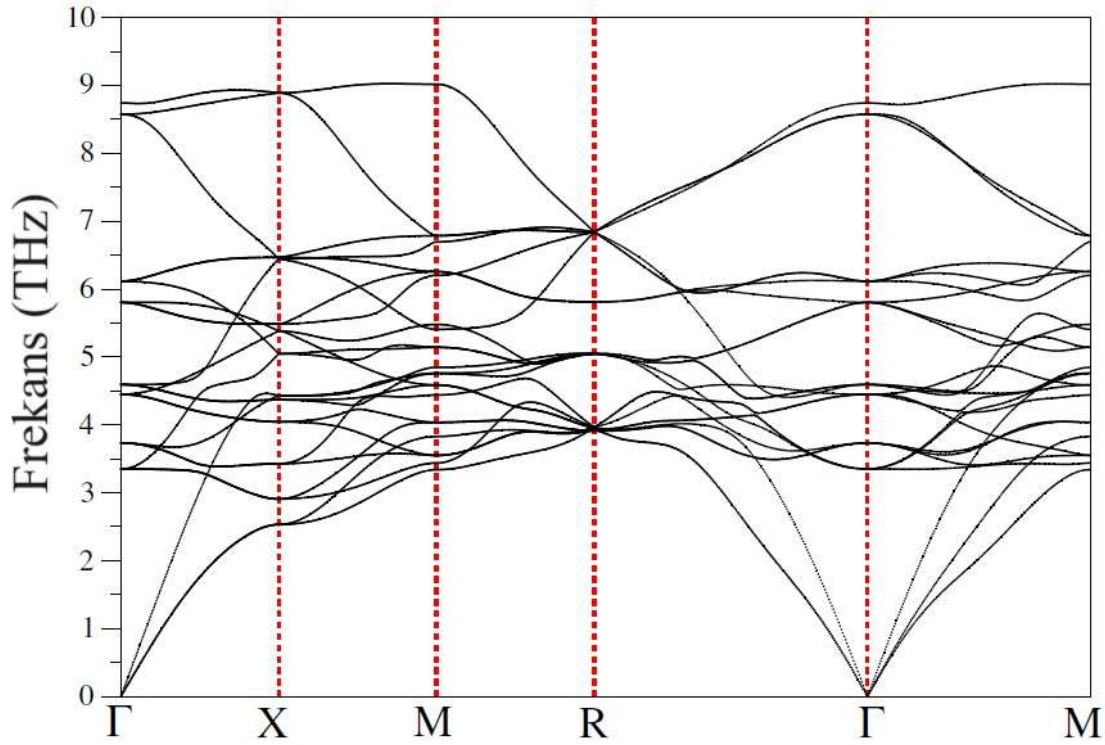
	$T_{1g}(S)$	$T_{2g}(R)$	$T_{2u}(S)$	$T_{1u}(I)$	$E_g(R)$	$A_{2g}(S)$	$T_{1u}(I)$	$T_{2u}(S)$
ν (THz)	4.449	5.804	3.734	3.340	8.573	8.742	4.294	6.115
λ	0.053	0.029	0.021	0.017	0.0019	0.027	0.018	0.005
EC	Nb	Nb	Nb+Ir	Nb+Ir	Nb	Nb	Nb+Ir	Nb+Ir

I, R ve S gösterimleri sırasıyla kızılötesi aktif, Raman aktif ve pasif (silent) modları ifade etmektedir.

T_{2g} ve E_g modları Raman aktif, T_{1u} modları kızılötesi aktif ve geri kalan modlar pasiftir. T_{1g} , T_{2g} , A_{2g} ve E_g fonon modlarındaki baskın titreşimler Nb atomlarını içerirken, Ir atomları pasif kalmaktadır. Nb ile ilişkili T_{1g} , T_{2g} , A_{2g} ve E_g fonon modlarının elektron fonon etkileşim parametreleri, Tablo 3.23.'de gösterildiği gibi, diğer fonon modlarından çok daha yüksektir. Bu gözlemle ilişkilendirilebilecek iki neden vardır. Bu ilk olarak, denklem 3.1. ile verilen McMillan-Hopfield ifadesi tarafından tahmin edildiği gibi fonon modlarının daha düşük frekanslara sahip olması daha yüksek değerlere yol açabileceği için bu durumu gözlemlemenin önemi ile ilişkilendirilebilir. İkinci nokta, tamamen Nb atomlarının titreşimleri tarafından belirlenen d durumları, atomik yer değiştirme şekillerinin Fermi seviyesindeki durum yoğunluğunu içerir. Nb₃Ir'nin Γ noktası optik fonon modlarının frekanslarını tartıştık, bu aşamadan sonra T_c 'yi tahmin etmek için ortalama λ hesaplanmalı. Bunun için fonon spektrumlarının tamamı ve fonon durum yoğunluğunun (DOS) anlaşılması son derece önemlidir.

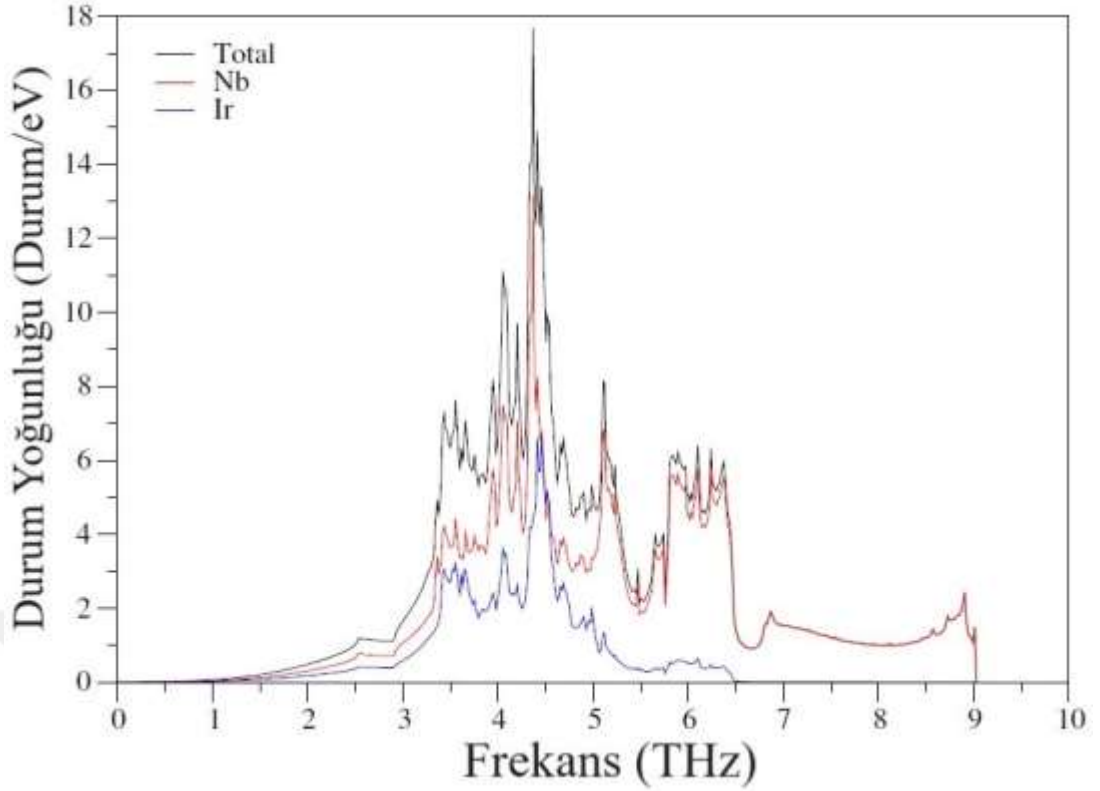
Nb₃Ir'nin basit kübik Brillouin bölgesindeki fonon dispersiyon grafiği Şekil 3.25.'de gösterilmiştir. Nb₃Ir bileşiğinin birim hücresindeki 8 atom üçü akustik, diğerleri optik olmak üzere 24 fonon modu üretmektedir. Bununla birlikte, simetri kısıtlamaları nedeniyle, fonon modları yüksek simetri noktalarında dejenere olabilir. Bazı modlar üst üste biner ve bu nedenle tüm simetri noktaları için görünmeyebilir. Γ noktasındaki sekiz optik fonon modunun altısı 3 kat dejenere, biri 2 kat dejenere ve biri dejenere değildir. Benzer şekilde, X noktasında biri 4 kat dejenere ve 10 çift dejenere mod vardır. M noktasında, 7 çift dejenere mod ve diğerleri dejenere değildir. Son olarak, R noktasında, biri 10 kat dejenere, ikisi 6 kat dejenere ve diğeri 2 kat dejenere olmak

üzere toplam 4 fonon modu vardır. Birim hücredeki Nb ve Ir atomları kütlece birbirine yakın olduklarından akustik ve optik modlar arasında bir boşluk bölgesi yoktur. Fonon dispersiyon grafiği dikkatli bir şekilde incelendiğinde tüm fonon modları pozitifdir, bu da A15 sistemleri için Nb₃Ir'nin dinamik olarak kararlı olması demektir.



Şekil 3.25. Nb₃Ir bileşiği için hesaplanan fonon dispersiyon eğrileri.

Nb₃Ir'nin toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu (PhDOS) için yapılan hesaplamaların sonuçları Şekil 3.26.'da verilmiştir. Atomik titreşimlerin fonon durum yoğunluğuna katkılarını açık bir şekilde anlayabilmek için bu grafiğin analiz edilmesi gerekir. Nb₃Ir'nin toplam fonon DOS'unda herhangi bir boşluk bulunmamaktadır. Nb₃Ir'nin kısmi DOS'u 6.5 THz frekansına kadar olan tüm bölgede Nb atomlarının daha baskın olduğunu ve yaklaşık 4.6 THz'in altındaki bölgede hibridizasyon etkisi sergilediğini gösterir. Bu nedenle, Nb ve Ir'nin bir kovalent bağa sahip olduğu varsayılabilir. Bu DOS varyasyonları, elektron-fonon etkileşimini ve dolayısıyla T_c'yi etkileyebilir. Daha önce de belirttiğimiz gibi, Nb₃Ir bileşiğinin birim hücresinde 6 Nb ve 2 Ir olmak üzere 8 atom bulunmaktadır. Birim hücrede 6 Nb atom olması ve bunların birbirleriyle bağ yapması, 4.5 THz'deki en yüksek yoğunluklu pike yaptıkları katkıyı açıklamaktadır. Bu nedenlerden dolayı, Nb atomları 4.5 THz'deki en yüksek yoğunluklu pikin oluşumunda biraz daha baskın bir rol oynamaktadır.

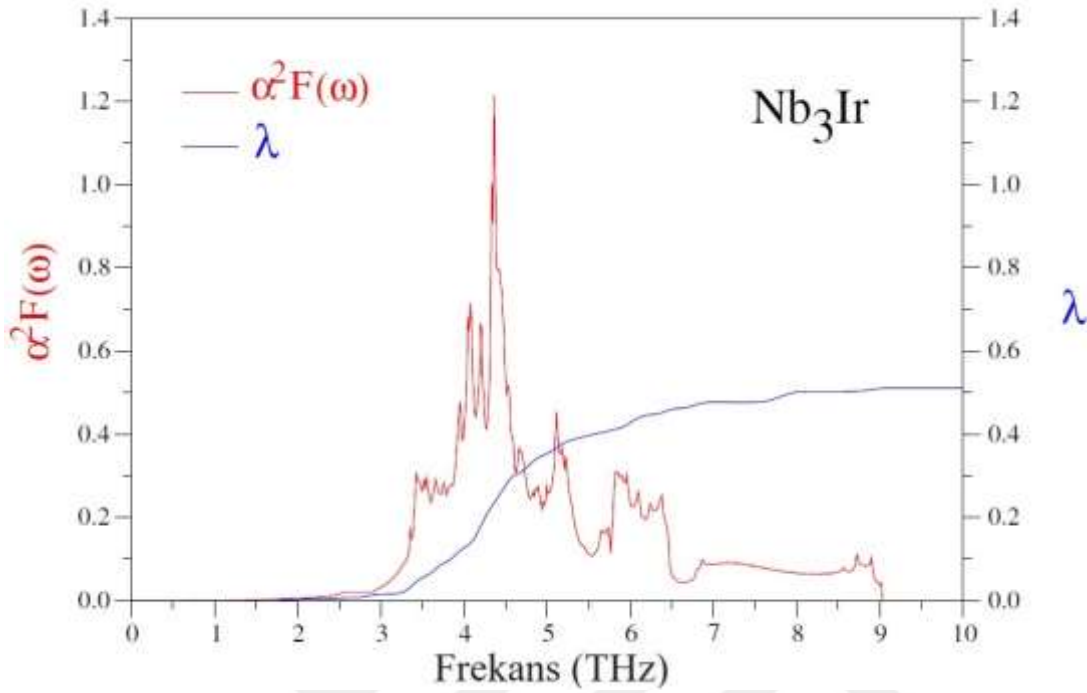


Şekil 3.26. Nb₃Ir bileşiğinin toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu.

3.6.5. Nb₃Ir bileşiğinin süperiletkenlik özellikleri

Bu araştırmanın temel amacı, Nb₃Ir deki süperiletkenliğin kaynağını elektron-fonon etkileşiminin gücünü inceleyerek araştırmaktır. Bu hedefe ulaşmak için Nb₃Ir'nin Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) hesaplanmıştır. Ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi (λ) ve ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), denklem 3.3. ve 3.4. kullanılarak bu spektral fonksiyonun entegrasyonundan elde edilebilir. Süperiletken geçiş sıcaklığı (T_c) Allen-Dynes tarafından önerilen düzenlenmiş McMillan denklemi 3.5. ile belirlenebilir. $\mu^*=0.13$ değerini kullanmayı tercih ettik. Nb₃Ir için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) ve ortalama elektron fonon etkileşim parametresi λ 'nın frekansa bağlı grafiği Şekil 3.27.'de gösterilmiştir. Nb₃Ir'nin λ değeri 0.51 olarak hesaplanmıştır. Şekil 3.27., $\lambda(\omega)$ 'nin en düşük frekans bölgesi tarafından domine edildiğini ve burada $\lambda \propto \omega$ olduğunu doğrulamaktadır. Düşük frekans bölgesinin toplam λ 'ya katkısı %94'dir. Bu katkı, Nb ve Ir atomlarının birleşik hareketinden kaynaklanmaktadır. Yüksek frekans bölgesi λ 'ya %6 katkı yapar. $\lambda(\omega)$ değeri kullanılarak logaritmik ortalama fonon frekansı (ω_{ln}) 222.05 K olarak hesaplanmıştır. Bu değerler daha sonra McMillan formülünün Allen-Dynes

modifikasyonunu kullanarak süperiletken geçiş sıcaklığı T_c 'yi hesaplamak için kullanılır. Nb₃Ir malzemesinin T_c değeri 1.8 K olarak hesaplanmıştır.



Şekil 3.27. Nb₃Ir için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2 F(\omega)$) (kırmızı çizgiler) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın (mavi çizgiler) frekans değişimleri.

Nb₃Ir malzemesi için hesaplanan durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri Tablo 3.24.'de verilmiştir. Elde edilen T_c değeri deneysel değerler ile mükemmel bir uyum içindedir (Zegler, 1965).

Tablo 3.24. Nb₃Ir malzemesi için Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri

	$N(E_F)$ (Durum/eV.atom)	λ	ω_{ln} (K)	T_c (K)
Bu Çalışma	0.758	0.51	222.05	1.8
Deneysel (Zegler, 1965)				1.7

3.7. Nb₃Pt Bileşiği

3.7.1. Nb₃Pt bileşiğinin yapısal özellikleri

A15 tipinde olan Nb₃Pt'nin kübik kristal yapısı Şekil 3.1.'de gösterilmiştir. Nb ve Pt atomları arasındaki bağ uzunluğu değeri 2.904 Å olarak belirlenmiştir, bu değer

niyobyum ve platin atomları için 3.00 Å olan kovalent yarıçaplarının toplamından biraz daha kısadır (Cordero ve ark., 2008; Pyykkö ve ark., 2009). Bu sonuçlar Nb ve Pt atomlarının iyonik ve kovalent etkileşimlerin bir kombinasyonu ile bağlı olduğunu göstermektedir. Nb₃Pt için Nb-Nb mesafesi 2.597 Å olup, elementel Nb'deki Nb-Nb mesafesinden (2.86 Å) oldukça kısadır (Karaca ve ark., 2021). Sonuçlar, Nb₃Pt bileşiğindeki Nb atomları arasında güçlü bağ kuvvetlerinin varlığına işaret etmektedir ve bu tez kapsamında incelenen diğer bileşiklerde de aynı sonuca ulaştığımız için hesaplamalarımızın tutarlılığını birkez daha göstermektedir. Daha önce olduğu gibi, Nb₃Pt'nin örgü sabiti (a), bulk modülü (B) ve basınç türevi (B') geometri optimizasyonu ve Murnaghan durum denklemleri 2.55. ve 2.56. kullanılarak belirlenmiştir (Murnaghan, 1944). Denge parametreleri (a, B ve B') Tablo 3.25.'de listelenmiştir. Bu değerler önceki teorik ve deneysel sonuçlarla uyumludur (Li ve ark., 2017; Flü ve ark., 1969).

Tablo 3.25. Kübik Nb₃Pt bileşiği için elde edilen yapısal parametreler ve bu parametrelerin deneysel ve teorik veriler ile karşılaştırılması.

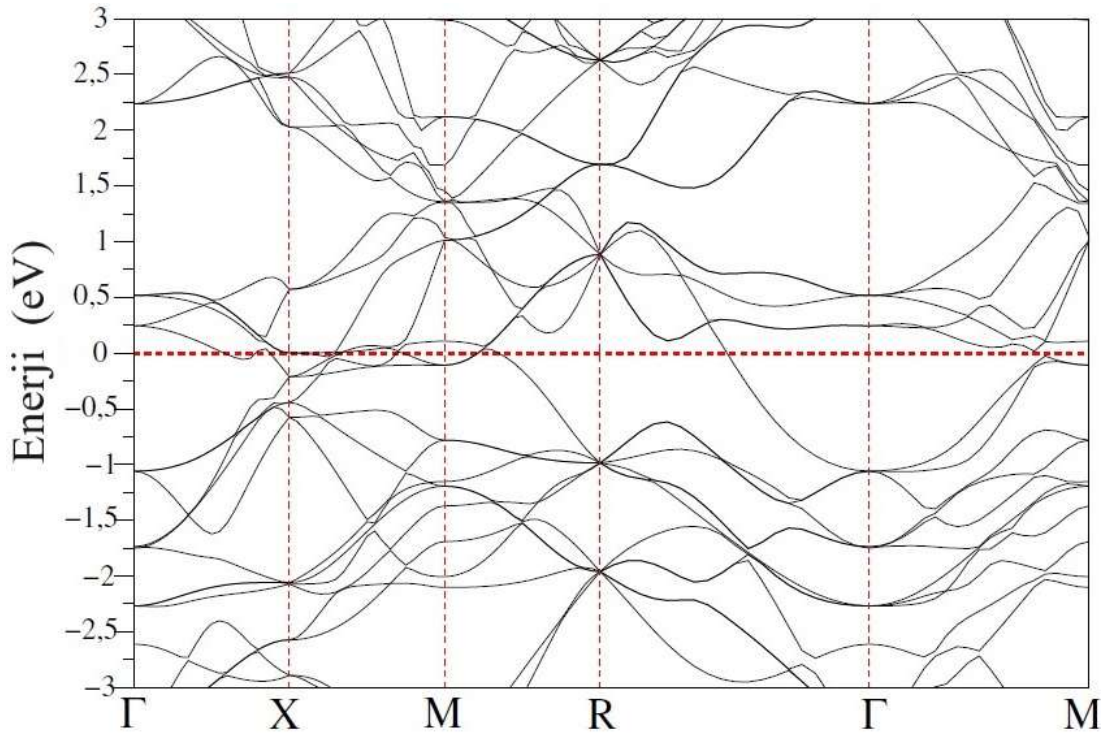
	a (Å)	B(GPa)	B'
Bu Çalışma	5.195	198.9	4.08
Teorik (GGA) (Li ve ark., 2017)	5.1897	207	4.38
Teorik (GGA) (Li ve ark., 2017)	5.1059	236.9	4.29
Deneysel (Flükiger ve ark., 1969)	5.156		

a: Kübik Nb₃Ir bileşiğinin örgü sabiti; B: Bulk modülü; B': Bulk modülünün basınca göre birinci türevi

3.7.2. Nb₃Pt bileşiğinin elektronik özellikleri

Yapısal parametrelerden yararlanılarak Nb₃Pt bileşiği için basit kübik Brillouin bölgesi içinde seçilen yüksek simetri yönleri boyunca hesaplanan enerji bandı yapıları Şekil 3.28.'de gösterilmiştir. Şekilde 0 eV Fermi enerji seviyesini göstermektedir. Band yapısı incelendiğinde önemli dağılıma sahip bir dizi band Fermi seviyesini kesmektedir, bu Nb₃Pt bileşiğinin metalik yapıda olduğunu göstermektedir. Bileşiğin elektronik yapısı incelendiğinde X-M, R- Γ ve Γ -M simetri çizgisi boyunca Fermi seviyesine paralel olan neredeyse düz bir band olduğu görülmektedir. Ancak bu bantlar Fermi seviyesi ile R- Γ ve Γ -M yönlerinde çakışmadığından Nb₃Rh'nin N(E_F) değerinin Nb₃Ge bileşiğinin N(E_F) değerine göre daha düşük olacağı sonucunu doğurur. Bu düz bantlar, Fermi seviyesinin yakınında keskin bir tepe oluşturma potansiyeline sahiptir. Ayrıca bu düz bantlar Nb₃Rh ve Nb₃Ir bileşiklerine kıyasla

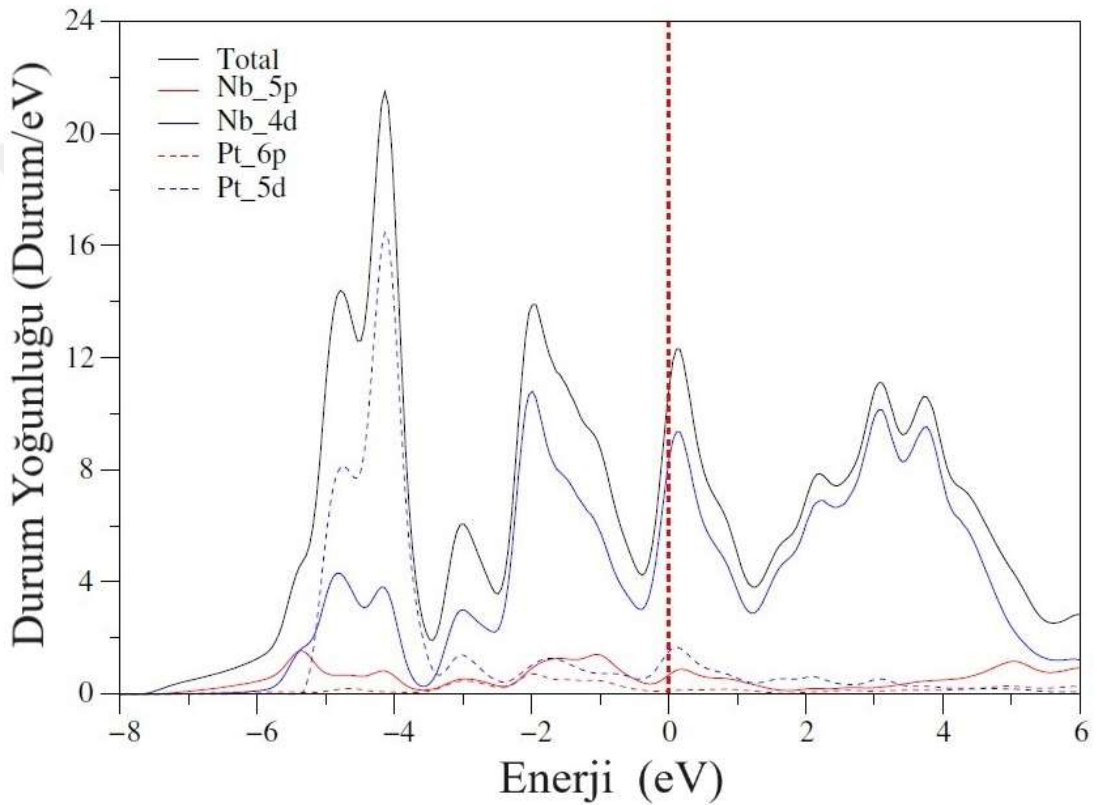
daha yoğun olduğundan ve X–M yönünde fermi seviyesini geçtiğinden Nb₃Pt malzemesinde Fermi seviyesindeki durum yoğunluğunun ($N(E_F)$) Nb₃Rh ve Nb₃Ir'ye göre çok daha yüksek bir seviyede olabileceğini göstermektedir. Bu özellik, A15 bileşiklerindeki süperiletkenliği anlamak için büyük önem taşımaktadır. BCS teorisi, süperiletkenlik olayının Fermi seviyesi civarındaki elektronlardan kaynaklandığını ve Cooper çiftlerini bu elektronların oluşturduğunu belirtir. Daha önceki teorik çalışmaların hesaplanan enerji bandı yapısı ile uyumu elde edilen sonuçların güvenilir olduğunu göstermektedir (Jarlborg ve ark., 1983).



Şekil 3.28. Nb₃Pt bileşiğinin elektronik band yapısı.

Nb₃Pt'nin elektronik enerji band yapısındaki elektronik bandların kökenini belirlemek için Nb₃Pt'nin toplam ve kısmi yoğunluk durumları (DOS) analiz edilmiş ve şekil 3.29.'da verilmiştir. Şekilde 0 eV daki kırmızı kesikli çizgi Fermi enerji seviyesini ifade etmektedir. Nb₃Pt'nin elektronik DOS'unun analizi Nb₃Ir ve Nb₃Rh ile çok benzer bir model ortaya koymaktadır. Şekil 3.29.'da görüldüğü gibi bu tez kapsamında incelenen diğer bileşiklerde olduğu gibi Nb₃Pt bileşiğinin süperiletken özelliklerinin oluşumuna da en önemli katkı Nb atomlarının 4d elektronlarından gelmektedir. Nb₃Pt'nin valans DOS bölgesi incelendiğinde gözlemlenebilen birkaç dikkat çekici pik özelliği vardır. İlk iki pik -5 eV ve -4.5 eV civarındadır ve tüm bu pikler Pt 5d, Nb 4d ve Nb 5p elektronik durumlarının kombinasyonu ile ilgilidir. -7.5 eV ile -5.5 eV

arasında Nb 5p elektronları, -5.2 eV ile -3.5 eV arasında Pt 5d elektronları daha baskındır. Nb 4d durumları, diğer elektronik durumlardan gelen küçük katkılarla birlikte -3.5 eV ile 6.0 eV arasında daha baskındır. Bu durumlar Nb-Nb bağları gibi metalik bağlarda rol oynamaktadır. Sonuçlarımıza göre, Pt atomlarının Nb₃Pt'nin elektronik ve süperiletken özellikleri üzerindeki etkisinin ihmal edilebileceği sonucuna varabiliriz. Bunun nedeni, Pt'nin Fermi seviyesi yakınındaki gibi durum yoğunluğunun (DOS) ihmal edilebilir olmasıdır. Dolayısıyla, Pt atomlarının rolü Nb₃Pt'nin kübik kristal yapısının kararlılığını artırmaktır.



Şekil 3.29. Nb₃Pt bileşiğinin toplam ve kısmi elektronik durum yoğunluğu.

Daha önce de belirtildiği gibi, BCS teorisi, süperiletkenlik olayının Fermi seviyesi civarındaki elektronlardan kaynaklandığını ve Cooper çiftlerini bu elektronların oluşturduğunu belirtir. Bu nedenle, Fermi seviyesindeki elektronik durumlar süperiletkenlikte çok önemli bir rol oynar. Nb₃Pt'nin Fermi seviyesindeki DOS değeri $N(E_F) = 1.032$ durum/(eV.atom) olarak hesaplanmıştır. Bu değer Nb₃Rh'nin $N(E_F) = 0.709$ durum/(eV.atom) ve Nb₃Ir'nin $N(E_F) = 0.758$ durum/(eV.atom) değerinden daha büyüktür. Bu nedenle, Nb₃Pt'nin T_c değerinin Nb₃Rh ve Nb₃Ir malzemesinden daha yüksek olduğu sonucuna varılabilir. Ayrıca, Nb₃Pt için Nb 4d elektronlarının tek başına $N(E_F)$ 'ye katkısının yaklaşık %79 olduğu belirtilmelidir. Bu sonuçlar, kübik

Nb₃Pt bileşiğinin süperiletken özelliklerinin oluşumuna en önemli katkının bu tez kapsamında incelenen diğer Nb bazlı bileşiklerde olduğu gibi Nb atomlarının 4d elektronlarından geldiğini ve bunun da $N(E_F)$ değerini arttırdığını ve McMillan-Hopfield ifadesine göre λ değerinde artışa neden olduğunu göstermektedir (Allen ve ark., 1975; Beckstein ve ark., 2001).

3.7.3. Nb₃Pt bileşiğinin elastik ve mekanik özellikleri

Fonon spektrumu ve elastik özellikler arasındaki ilişki göz önüne alındığında, süperiletken özelliklerin elastik özelliklerden de etkilendiği düşünülebilir. Ayrıca, elastik sabitler bileşiklerin mekanik kararlılığını ve sertliğini belirlemek için kullanılabilir. Nb₃Pt'nin basit kübik örgüye sahip olan simetrisi yirmi bir elastik sabitin sadece üç bağımsız sabite indirgenmesini sağlar: C_{11} , C_{12} ve C_{44} . Bu bağımsız sabitler genelleştirilmiş Hooke yasasına dayanan gerilme-gerinim yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır. Nb₃Pt için belirlenen elastik sabitler Tablo 3.26.'da gösterilmiştir.

Tablo 3.26. Kübik Nb₃Pt bileşiği için hesaplanan elastik sabitler, elastik modüller ve bu değerlerin deneysel ve teorik verilerle karşılaştırılması.

	C_{11}	C_{12}	C_{44}	B_H	G_H	E_H	C_P	B_H/G_H	ν
Bu Çalışma	371.5	118.8	61.4	203.3	82.3	217.44	57.4	2.467	0.321
Theory (GGA) (Li ve ark., 2017)	377.8	120	60	205.9	81.9	217	60.0	2.513	0.324
Theory (LDA) (Li ve ark., 2017)	424.2	112	64.2	236.1	87.1	232.7	79.7	2.711	0.336

C_{11} , C_{12} ve C_{44} (GPa): Elastik sabitler; B_H (GPa): Bulk modülü; G_H (GPa): Kayma modülü; E_H (GPa): Young modülü; C_P (GPa): Cauchy basıncı; B_H/G_H : Bulk modülünün kayma modülüne oranı; ν : Poisson

Nb₃Pt'nin en yüksek elastik sabiti C_{11} değerine ait olduğu için x eksenini boyunca doğrusal sıkıştırmaya karşı büyük bir dirence sahiptir. Bu, Nb₃Pt bileşiğinin bu yönde en yüksek sıkıştırmazlığa sahip olduğu anlamına gelir. C_{44} değerinin kayma modülü ile ilişkili olduğu iyi bilinmektedir (Wu ve ark., 2020). Kübik kristallerde, bir element Born kriterlerini karşılıyorsa mekanik olarak karardır (Born ve ark., 1955; Wu ve ark., 2007). Tablo 3.26.'dan, Nb₃Pt bileşiğinin mekanik olarak karardır olduğu açıktır çünkü Born'un kübik kristaller için karardlık koşullarını karşılamaktadır (Born ve ark., 1955). Nb₃Pt'nin mekanik özellikleri, elastik sabitler ve Voigt-Reuss-Hill (VHR) yaklaşımı kullanılarak elastik modüller (bulk modülü B_H , kayma modülü G_H , Young modülü E) ve Poisson oranı ν hesaplanarak belirlenmiştir (Voigt, 1928; Reuss, 1929; Hill, 1952; Wu ve ark., 2007). Bu yöntem alt sınır olarak Voigt yaklaşımını ve üst sınır

olarak Reuss yaklaşımını kullanır. Hill yaklaşımı Voigt ve Reuss değerlerinin ortalamasını temsil etmek için kullanılır. Tablo 3.26., Nb₃Pt için bu yaklaşımla elde edilen tüm parametreleri ve Nb₃Pt için önceki teorik sonuçları göstermektedir (Li ve ark., 2017). Nb₃Pt için elastik sabitlerden elde edilen 203.3 GPa bulk modülü, Tablo 3.25.'de gösterildiği gibi Murnaghan durum denkleminde hesaplanan 198.9 GPa değeriyle uyumludur. Her iki yöntemden elde edilen sonuçların benzerliği, hesaplamalarımızın doğruluğunun kanıtıdır. Ayrıca bulk modülünün değeri bize malzemenin sıkıştırılabilirliği hakkında bilgi verir. Young modülü, gerilimin gerilmeye bölünmesiyle hesaplanır ve katıların sertliği hakkında fikir verir. Bir malzemenin Young modülünün diğerlerinden daha büyük olması, o malzemenin daha sert ve deformasyona karşı daha dayanıklı olduğunu gösterir. Cauchy basıncı (C_p), B_H/G_H oranı ve Poisson oranı (ν) kübik kristallerin doğal sünekliğini ve kırılma eğilimini değerlendirmek için kullanılabilir (Ganeshan ve ark., 2009; Haines ve ark., 2001; Pugh, 1954). C_p değeri sıfırdan büyükse, kristal sünek özelliklere sahiptir. Aksine, değer sıfırdan küçük veya sıfıra eşitse, kristal kırılma eğilimi olarak kabul edilir. Tablo 3.26.'den Nb₃Pt'nin C_p değerinin 57.4 GPa olduğu görülmektedir. Bu sonuç, Nb₃Pt'nin sünek bir karakter sergilediğini göstermektedir. B_H/G_H oranı, bir malzemenin sünek mi yoksa kırılma eğilimi mi olduğunu belirlemek için kullanılan 1.75'lik kritik bir değere sahiptir (Pugh, 1954). Nb₃Pt, Tablo 3.26.'deki 2.467 değeri ile 1.75'ten büyük B_H/G_H oranına sahiptir, bu da Cauchy basınç hesaplamalarından elde edilene benzer şekilde Nb₃Pt'nin sünek özelliklere sahip olduğunu gösterir. Malzemelerin sünek ve kırılma eğilimi karakterlerini belirleyebilen bir diğer parametre, kritik değeri 0.26 olan Poisson oranıdır. Poisson oranının kritik değerden büyük olması durumunda malzemenin sünek davranış sergilediği, aksi takdirde kırılma eğilimi olarak kabul edildiği iyi bilinmektedir. Nb₃Pt'nin Tablo 3.26.'daki 0.321 Poisson oranı değerinin kritik değer 0.26 olan değerden daha büyük bir değere sahip olması sünek karaktere sahip olduğunu göstermektedir. Nb₃Pt için hesaplanan ses hızları V_T , V_L , V_M değerleri sırasıyla 27742.98 m/s, 5300.37 m/s, 3033.99 m/s olarak hesaplandı ve Debye sıcaklığı Θ_D değeri ise 351.89 K olarak belirlendi ve Tablo 3.27.'de gösterildiği gibi ölçülen bu değer mevcut deneysel ve teorik veri ile uyumludur. (Junod ve ark., 1979, Reddy ve ark., 1986; Li ve ark., 2017; Naher ve ark., 2018). Malzemelerin termal özelliklerinin anlaşılmasında Debye sıcaklığı (Θ_D) ve ses hızları (enine V_T , boyuna V_L ve ortalama V_M) önemli faktörlerdir. Debye sıcaklığı, malzemelerin sertlik, özgül ısı ve erime noktası gibi önemli kimyasal özelliklerinin anlaşılmasını sağlar. Debye sıcaklığı

yüksek olan malzemelerin daha yüksek sertlik ve erime sıcaklığı dereceleri sergilemesi muhtemeldir. Debye sıcaklığı ve ses hızı değerleri, elastik sabitlere dayanan denklem 2.65., 2.66., 2.67. ve 2.68. kullanılarak hesaplanabilir (Wu ve ark.,2020).

Tablo 3.27. Nb₃Pt için hesaplanan ses elastik dalga hızları, Debye sıcaklığı değerleri ve bunların mevcut deneysel verilerle karşılaştırılması.

	V _T (m/s)	V _L (m/s)	V _M (m/s)	Θ _D (K)
Bu Çalışma	2742.98	5300.37	3033.99	351.89
Theory (GGA) (Naher ve ark., 2018)	2884.2	5535.5	2976.6	218.98
Theory (GGA) (Li ve ark., 2017)	2698	5291	3021	347
Theory (LDA) (Li ve ark., 2017)	2714	5459	3044	355
Deneysel (Junod ve ark., 1979)				348
Deneysel (Reddy ve ark., 1986)				242±1

V_T: Enine ses elastik dalga hızı; V_L: Boyuna ses elastik dalga hızı; V_M: Ortalama ses elastik dalga hızı; Θ_D: Debye sıcaklığı

3.7.4. Nb₃Pt bileşiğinin titreşim özellikleri

Merkezi-fonon modları O_h (Pm $\bar{3}$ n) nokta grubu ile tanımlanır ve Γ noktasındaki optik fonon modları denklem 3.2. ile verilmiştir. Nb₃Pt için Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν), elektron fonon etkileşim parametreleri (λ), titreşim modu öz karakterleri (EC) ve baskın atomlar Tablo 3.28.'de gösterilmiştir.

Tablo 3.28. Nb₃Pt bileşiği için hesaplanan Γ noktası optik fonon modlarının frekansları (ν), her biri için hesaplanan elektron fonon etkileşim parametreleri (λ) ve titreşim modu öz karakterleri (EC).

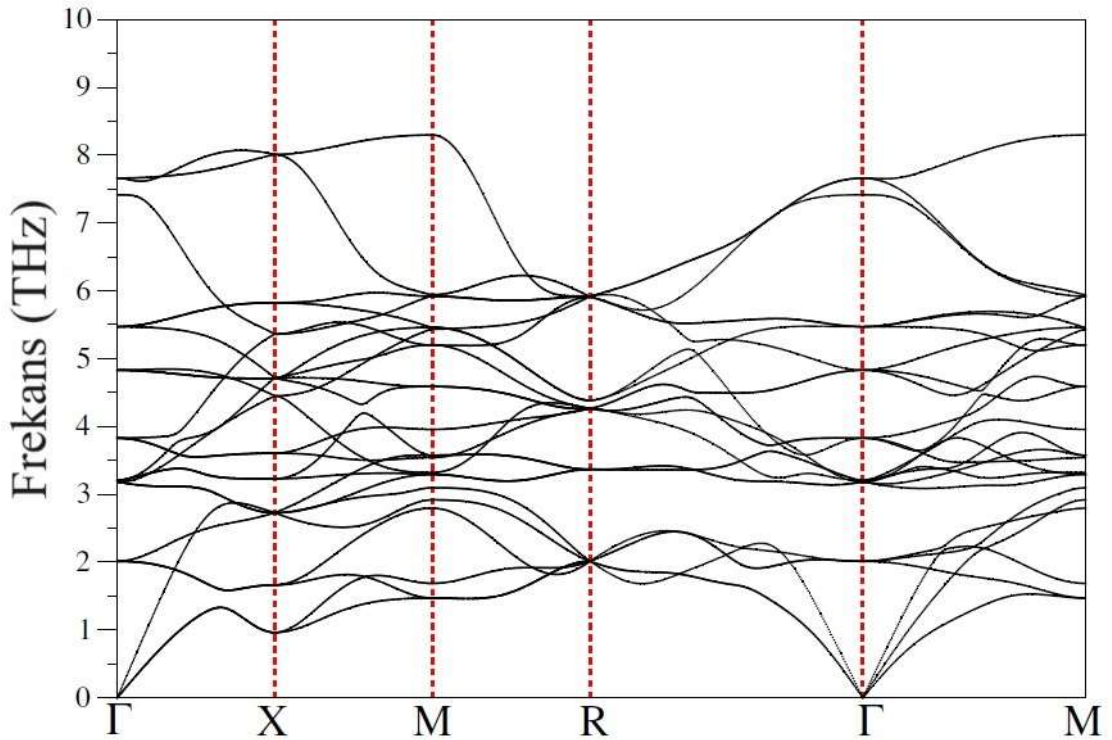
	T _{1g} (S)	T _{2g} (R)	T _{2u} (S)	T _{1u} (I)	E _g (R)	A _{2g} (S)	T _{1u} (I)	T _{2u} (S)
ν (THz)	3.178	4.830	2.013	3.811	7.661	7.414	3.205	5.471
λ	0.119	0.043	0.083	0.025	0.028	0.036	0.025	0.010
EC	Nb	Nb	Nb+Pt	Nb+Pt	Nb	Nb	Nb+Pt	Nb+Pt

I, R ve S gösterimleri sırasıyla kızılötesi aktif, Raman aktif ve pasif (silent) modları ifade etmektedir.

T_{2g} ve E_g modları Raman aktif, T_{1u} modları kızılötesi aktif ve geri kalan modlar pasiftir. T_{1g}, T_{2g}, A_{2g} ve E_g fonon modlarındaki baskın titreşimler Nb atomlarını içerirken, Pt atomları pasif kalmaktadır. Nb ile ilişkili T_{1g}, T_{2g}, A_{2g} ve E_g fonon modlarının elektron fonon etkileşim parametreleri, Tablo 3.28.'de gösterildiği gibi, diğer fonon modlarınınkinden çok daha yüksektir. Bu gözlemlerle ilişkilendirilebilecek iki neden vardır. İlk olarak, fonon modlarının daha düşük frekanslara sahip olduğunu gözlemlemek önemlidir, bu da denklem 3.1. ile verilen McMillan-Hopfield ifadesi

tarafından tahmin edildiği gibi daha yüksek değerlere yol açabilir. İkinci nokta, atomik yer değiştirme şekillerinin Fermi seviyesindeki durum yoğunluğunun çoğunu içeren durumları, tamamen Nb atomlarının titreşimleri tarafından belirlenmesidir. Nb₃Pt için Γ noktası optik fonon modlarının frekansları hesaplandı, şimdi de T_c 'yi tahmin etmek için ortalama λ 'yı hesaplamak gerekir. Bunun için fonon spektrumlarının tamamını ve fonon durum yoğunluğunu (DOS) anlamak çok önemlidir.

Nb₃Pt'nin birim hücresindeki 8 atomun 24 fonon modu ürettiği fonon dispersiyon grafiği Şekil 3.30'da gösterilmiştir. Bu modlardan üçü akustik, diğerleri optiktir. Bu 24 fonon modu, fonon spektrumunda herhangi bir boşluk olmaksızın frekans aralığını tamamen doldurmaktadır. Bu sonuç, ilgili atomlar arasındaki güçlü bağ kuvvetleri ile ilişkilendirilebilir. Ayrıca simetri kısıtlamaları nedeniyle, fonon modları dejenere olabilmektedir.

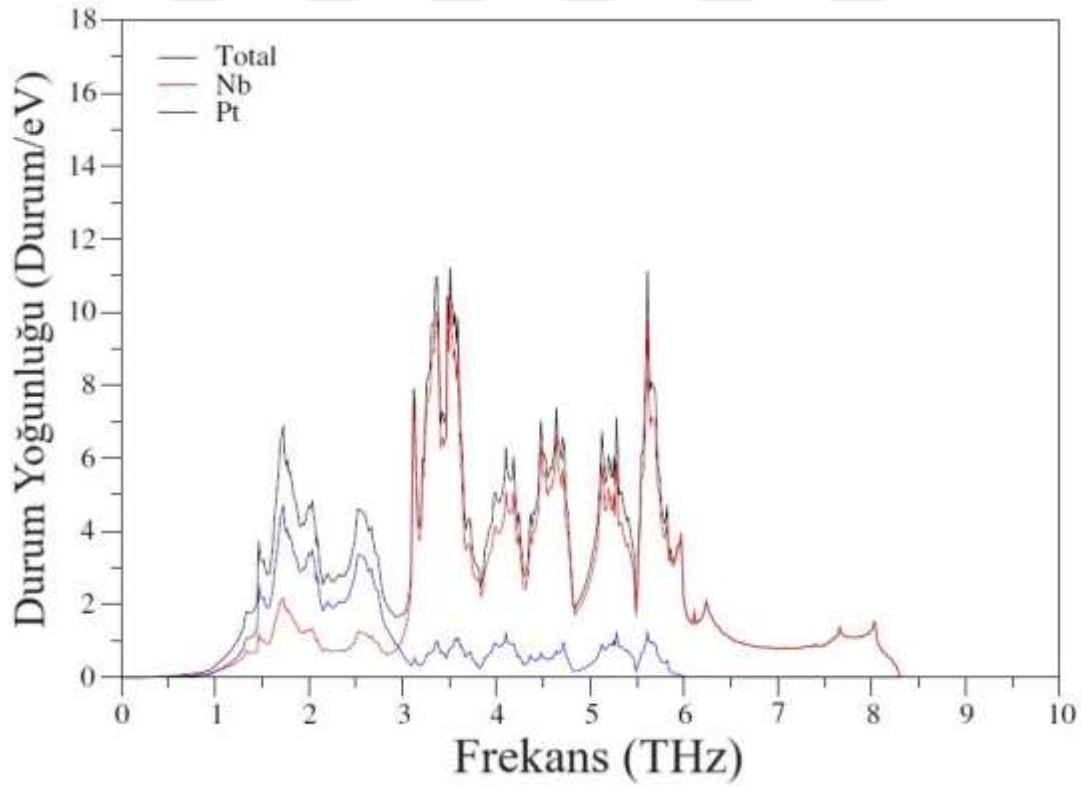


Şekil 3.30. Nb₃Pt bileşiği için hesaplanan fonon dispersiyon eğrileri.

Γ noktasındaki yedi optik fonon modunun biri 6 kat dejenere, dördü 3 kat dejenere biri çift kat dejenere ve diğeri dejenere değildir. X noktasındaki fonon modlarının ikisi 4 kat, sekizi çift kat dejenere, dördü 3 kat dejenere, üçü 2 kat dejenere ve diğerleri dejenere değildir. R noktasında ise ikisi 7 kat dejenere, biri 6 kat dejenere ve ikisi çift kat dejenere olmak üzere toplam 5 fonon modu vardır. Birim hücredeki

Nb ve Pt atomları arasında küçük bir kütle farkı olmasından dolayı, akustik ve optik modlar arasında bir boşluk bölgesi yoktur. Fonon dispersiyon grafiği dikkatli bir şekilde incelendiğinde tüm fonon modları pozitifdir, bu da A15 sistemleri için Nb₃Pt'nin dinamik açıdan kararlı olduğunu gösterir.

Nb₃Ge'nin toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu (PhDOS) için yapılan hesaplamaların sonuçları Şekil 3.31.'de verilmiştir. Bu şekiller, farklı fonon modlarının fonon spektrumunu nasıl etkilediğini anlamaya yardımcı olur. Nb₃Pt'nin toplam fonon DOS'unda herhangi bir boşluk bulunmamaktadır. Nb₃Pt'nin kısmi fonon DOS'u incelendiğinde 3THz'e kadar olan bölgede Pt atomlarının fonon durum yoğunluğuna katkısı daha güçlü olurken 3THz'in üzerindeki bölgede Nb atomları bariz bir şekilde daha baskın gelmektedir. Bu durumda Nb₃Pt'nin optik fonon modlarının oluşumuna gelen en büyük katkı Nb atomlarının titreşimleri olmaktadır.

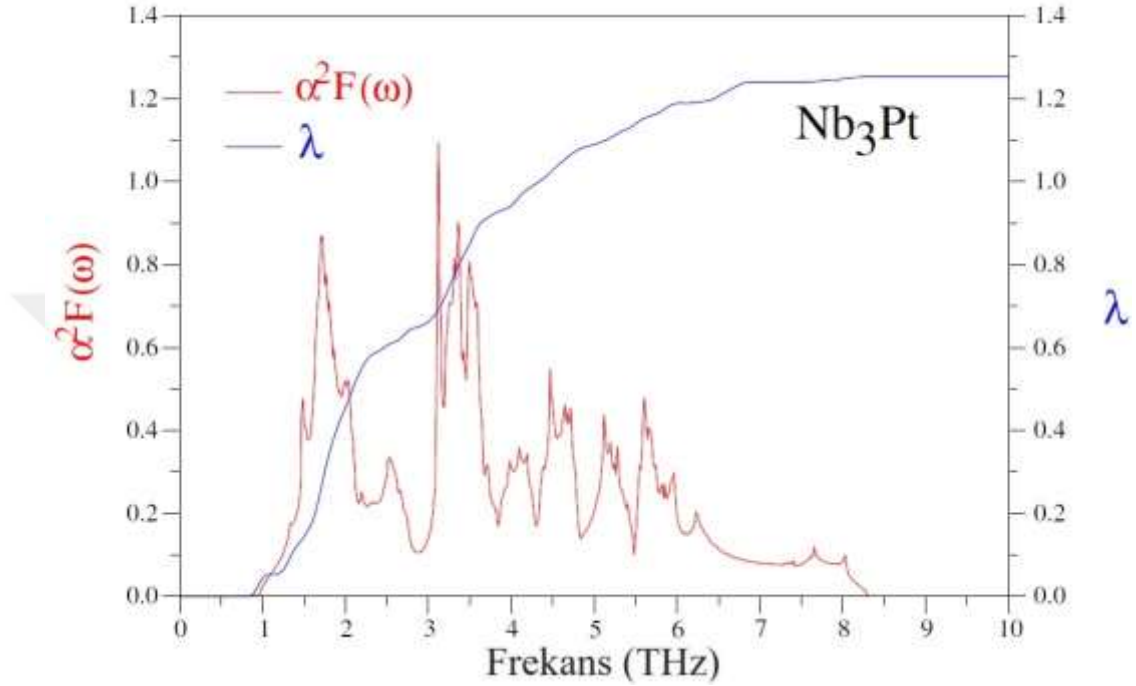


Şekil 3.31. Nb₃Pt bileşiği için hesaplanan toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu.

3.7.5. Nb₃Pt bileşiğinin süperiletkenlik özellikleri

Nb₃Pt deki süperiletkenliğin kaynağını araştırmak için elektron-fonon etkileşiminin gücünü incelemek gerekir. Bunun için Nb₃Pt'nin Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) hesaplanmıştır. Bu spektral fonksiyonun entegrasyonundan ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi (λ) ile ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln})

denklem 3.3. ve 3.4. kullanılarak ve süperiletken geçiş sıcaklığı (T_c) Allen-Dynes tarafından önerilen düzenlenmiş McMillan denklemi 3.5. ile belirlenebilir. Amaçlarımız doğrultusunda $\mu^*=0.13$ değerini kullanmayı tercih ettik. Nb₃Pt için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın frekansa bağlı grafiği Şekil 3.32.'de gösterilmiştir.



Şekil 3.32. Nb₃Pt için Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) (kırmızı çizgiler) ve ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın (mavi çizgiler) frekans değişimleri.

Fonon durum yoğunluğu grafiği ile $\alpha^2F(\omega)$ büyük bir benzerlik göstermektedir. Fonon durum yoğunluğu grafiğinde 3.2 THz civarındaki en yüksek pik değerine büyük ölçüde Nb atomlarının titreşimi sebep olmaktadır. Nb₃Pt'nin λ değeri 1.253 olarak hesaplanmıştır. Bilindiği gibi, T_c değeri λ değeri ile ilişkilidir. Büyük bir λ değeri süper iletkenin T_c değerinin büyük olmasına yol açabilir. Şekil 3.32., $\lambda(\omega)$ 'nin en düşük frekans bölgesi tarafından domine edildiğini ve burada $\lambda \propto \omega$ olduğunu doğrulamaktadır. Nb₃Pt için düşük frekans bölgesinin toplam λ 'ya katkısı %95'dir. Bu katkı, Nb ve Pt atomlarının birleşik hareketinden kaynaklanmaktadır. Yüksek frekans bölgesi λ 'ya %5 katkı yapar. $\lambda(\omega)$ değeri kullanılarak logaritmik ortalama fonon frekansı (ω_{ln}) 128.49 K olarak hesaplanmıştır. Bu değerler daha sonra denklem 3.5. McMillan formülünün Allen-Dynes modifikasyonunu kullanarak süperiletken geçiş sıcaklığı T_c 'yi hesaplamak için kullanılır. Nb₃Pt malzemelerinin T_c değeri 10.82 K

olarak hesaplanmıştır. Nb₃Pt malzemesi için hesaplanan durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri Tablo 3.29.'de verilmiştir. Elde edilen T_c değeri deneysel değerler ile mükemmel bir uyum içindedir (Zegler, 1965).

Tablo 3.29. Nb₃Pt malzemesi için Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik fonon frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_c) değerleri

	$N(E_F)$ (Durum/eV.atom)	λ	ω_{ln} (K)	T_c (K)
Bu Çalışma	1.032	1.253	128.49	10.82
Deneysel (Zegler, 1965)				10.9

4. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında ilginç fiziksel ve kimyasal özellikleri ve teknolojik alanlarda yaygın olarak uygulanmasından dolayı A15 tipi kübik kristal yapıya sahip niyobyum bazlı Nb_3X ($X=Ge, Sb, Os, Rh, Ir, Pt$) bileşiklerinin süperiletkenlik özellikleri DFT'ye dayalı GGA ve ab-initio düzlem dalga metodları aracılığıyla detaylı bir şekilde incelenmiş ve elde edilen sonuçlar literatürdeki sonuçlarla karşılaştırılmıştır. Hesaplamalarımız QUANTUM ESPRESSO paket programı ile yapılmıştır. Değiş tokuş ve korelasyon etkileşimleri Perdew-Burke-Ernzerhof tarafından parametrize edilmiş genelleştirilmiş gradyan yaklaşımı ile detaylı şekilde araştırılmıştır. Nb_3X bileşikleri için geometrik optimizasyon sonucu yapısal parametreler elde edilmiş ve daha önceki teorik ve deneysel değerler ile arasında iyi bir uyum tespit edilmiştir. Bu durum hesaplamalarımızın güvenilirliğini ispatlamıştır.

Yapısal parametrelerin belirlenmesinin ardından, bu parametreler kullanılarak bileşiklerin elektronik özellikleri de analiz edilmiş ve elektronik band yapısı grafiği oluşturulmuştur. Elde edilen elektronik spektrum, önceki teorik sonuçlarla benzerlik göstermiş ve Nb_3X bileşiklerinin metalik özelliklerini doğrulamıştır. Ayrıca, elektronik durum yoğunluğu hesaplamaları sonucunda, süperiletkenlik özelliklerinin belirlenmesinde önemli olan $N(E_F)$ değerleri sırasıyla Nb_3Ge için 1.609 durum/eV.atom, Nb_3Sb için 0.441 durum/eV.atom, Nb_3Os için 0.664 durum/eV.atom, Nb_3Rh için 0.709 durum/eV.atom, Nb_3Ir için 0.758 durum/eV.atom ve Nb_3Pt için 1.032 durum/eV.atom olarak bulunmuştur. Nb_3Ge ve Nb_3Pt 'nin süperiletkenliğe geçiş sıcaklığının incelenen diğer bileşiklere kıyasla daha büyük olmasının bir nedeni de bu bileşiklerin diğerlerine göre daha büyük $N(E_F)$ değerine sahip olması olabilir. Kısmi elektronik durum yoğunluğu incelendiğinde, tüm bileşiklerde $N(E_F)$ değerine en büyük katkının Nb atomlarının 4d elektronlarından kaynaklandığı tespit edilmiştir.

Yapısal ve elektronik özellikler incelendikten sonra Nb_3X bileşiklerinin elastik sabitleri ve mekanik özellikleri stres-strain yöntemi ve Voight-Reuss-Hill (VRH) yaklaşımı kullanılarak belirlenmiştir. Nb_3X bileşikleri için hesaplanan elastik sabitler ve Born kriterleri kullanılarak, Nb_3X bileşiklerinin kübik A15 kristal yapısında mekanik olarak kararlı olduğu bulunmuştur.

Malzemelerin esneklik ve kırılgenlik  zellikleri, elastik sabitlerden elde edilen Cauchy basıncı, Poisson oranları ve B_H/G_H oranları kullanarak belirlenebilir. Y ksek esneklik g steren malzemeler, daha b y k bir Poisson oranına ve B_H/G_H oranına sahip olmalıdır. S nek malzemeleri kırılgen malzemelerden ayıran kriterler ise Poisson oranının $\nu > 0.26$, Cauchy basıncının $C_P > 0$ ve B_H/G_H oranının 1.75'ten b y k olmasıdır. Poisson oranı, Cauchy basıncı ve B_H/G_H kullanarak Nb_3X bileşiklerinin s nek karakterde olduđu tespit edilmiřtir. Nb_3X bileşiklerinin B_H/G_H ve Poisson oranları sıralaması $Nb_3Ge > Nb_3Os > Nb_3Pt > Nb_3Rh > Nb_3Ir > Nb_3Sb$ řeklinedir ve buna g re Nb_3Ge bileřiđi en s nek karakterdedir.

Bu  alıřmanın temel amacı Nb_3X bileşiklerinin s periletkenliđinin kaynađını teorik olarak arařtırmaktır. Bu ama la, Nb_3X bileşiklerinin yapısal ve elektronik  zelliklerinin yanı sıra titreřim  zellikleri de kapsamlı bir řekilde analiz edilmiřtir. Nb_3X bileşiklerinin titreřim  zellikleri dođrusal tepki yaklařımı hesaplamaları ile elde edilmiřtir. İncelenen bileşiklerin fonon dađılım grafiklerinde negatif bir fonon modunun olmaması, bileşiklerin A15 kristal yapısının dinamik olarak kararlı olduđunu g stermektedir. Ayrıca, Nb_3X bileřikleri i in hesaplanan fonon modları,  nceki deneysel sonu larla y ksek uyum g stermekte ve hesaplamalarımızı dođrulamaktadır. Buna ek olarak, d ř k frekanslı fonon modlarının elektron-fonon etkileřim parametresine daha fazla katkı sađladıđı tespit edilmiřtir. Nb_3X bileşiklerinin fonon durum yođunluđu grafikleri incelendiđinde, Nb_3Ge 'nin  ok k   k bir frekans aralıđı dıřında kalan b lgede ve Nb_3Os 'nin 4.2 THz, Nb_3Pt 'nin 3THz  st ndeki b lgede t m bileřikler i in fonon modlarına en b y k katkının Nb atomlarından geldiđi sonucuna varılmıřtır. Bu sonu , Nb_3X bileşiklerinin tamamı i in Nb atomlarının s periletkenlik oluřumunda baskın bir rol oynadıđının g stergesidir.

Son olarak, Nb_3X bileřikleri i in elektronik ve fonon  zellikleri kullanarak s periletkenlikle ilgili parametreler elde edilmiřtir.  zellikle, elektron-fonon etkileřim parametreleri (λ) sırasıyla Nb_3Ge i in 2.056, Nb_3Sb i in 0.387, Nb_3Os i in 0.41, Nb_3Rh i in 0.571, Nb_3Ir i in 0.51 ve Nb_3Pt i in 1.253 olarak hesaplanmıřtır. Bu deđerler b y kten k   ge sıralandıđında en b y k elektron-fonon etkileřim parametresine ilk olarak Nb_3Ge 'nin daha sonra Nb_3Pt 'nin sahip olduđu ve diđer bileřiklerin bu ikisine kıyasla  ok daha k   k deđerler aldıkları g r lmektedir. Bu deđerler arasındaki bu dramatik fark, elektron-fonon etkileřim parametresinin $N(E_F)$ 'den sonra Nb_3Ge ve Nb_3Pt ile diđer bileřikler arasındaki s periletkenlik

sıcaklıklarının neden çok farklı olduğunu anlamaya yardımcı olan başka bir faktördür. Bunun dışında Nb_3X bileşiklerinin logaritmik ortalama fonon frekansları (ω_{ln}) sırasıyla Nb_3Ge için 170.58 K, Nb_3Sb için 219.73 K, Nb_3Os için 222.97 K, Nb_3Rh için 201.93 K, Nb_3Ir için 222.05 K ve Nb_3Pt için 128.49 K olarak belirlenmiştir. Sonuç olarak, süperiletkenlikle ilgili parametreler ve McMillan formülünün Allen-Dynes modifikasyonu kullanılarak, Nb_3X bileşiklerinin T_c değerleri sırasıyla Nb_3Ge için 23.37 K, Nb_3Sb için 0.31 K, Nb_3Os için 1.05 K, Nb_3Rh için 2.68 K, Nb_3Ir için 1.8 K ve Nb_3Pt için 10.82 K olarak elde edilmiş ve deneysel değerlerle mükemmel bir uyum içinde olduğu görülmüştür.





KAYNAKLAR

- Ahmed, E.; Kobayashi, K.; Arakawa, N.; Okubo, Y.; Sakai, A.; Nakatsuji, S.; Iyo, A.; Ebihara, T. (2022). Superconducting properties of the A15 structure compound V_3Ge . *Physica C-Superconductivity And its Applications*, 602, 1354140. <https://doi.org/10.1016/j.physc.2022.1354140>
- Afaq, A., Rizwan, M., & Bakar, A. (2019). Computational investigations of XMgGa (X= Li, Na) half Heusler compounds for thermo-elastic and vibrational properties. *Physica B: Condensed Matter*, 554, 102-106. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2018.11.013>
- Allen, P. B., & Dynes, R. C. (1975). Transition temperature of strong-coupled superconductors reanalyzed. *Physical Review B*, 12(3), 905. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.12.905>
- Antonov, V. E. E., Antonova, T. E., Belash, I. T., Zharikov, O. V., Latynin, A. I., Pal'nichenko, A. V., & Pashchupkin, V. I. (1989). Superconductivity of hydrogen solid solutions in A15 Nb₃Me compounds (Me= Au, Pt, Ir, Os). *Fizika Tverdogo Tela*, 31(10), 12-20.
- Baroni, S., Giannozzi, P., & Testa, A. (1987). Green's-function approach to linear response in solids. *Physical review letters*, 58(18), 1861. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.58.1861>
- Baroni, S., De Gironcoli, S., Dal Corso, A., & Giannozzi, P. (2001). Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory. *Reviews of modern Physics*, 73(2), 515. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.73.515>
- Beck, P. A. (Ed.). (1963). *Electronic structure and alloy chemistry of the transition elements*. Based on a symposium held in New York, February 22, 1962, and sponsored by the Institute of Metals Division, The Metallurgical Society, American Institute of Mining, Metallurgical, and Petroleum Engineers. Interscience Publishers.
- Becke, A. D. (1988). Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. *Physical review A*, 38(6), 3098. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.38.3098>
- Beckstein, O., Klepeis, J. E., Hart, G. L. W., & Pankratov, O. (2001). First-principles elastic constants and electronic structure of α -Pt₂Si and PtSi. *Physical Review B*, 63(13), 134112. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.63.134112>
- Bednorz, J. G., & Müller, K. A. (1986). Possible high T_c superconductivity in the Ba-La-Cu-O system. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 64(2), 189-193. <https://doi.org/10.1007/BF01303701>
- Bernasson, M., Descouts, P., Flükiger, R., & Treyvaud, A. (1970). Magnetic properties of Nb₃X compounds. *Solid State Communications*, 8(11), 837-841. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(70\)90270-X](https://doi.org/10.1016/0038-1098(70)90270-X)

- Blaugher, R. D., Hein, R. E., Cox, J. E., & Waterstrat, R. M. (1969). Atomic ordering and superconductivity in A-15 compounds. *Journal of Low Temperature Physics*, 1, 539-561. <https://doi.org/10.1007/BF00627932>
- Born, M., Huang, K., Lax, M., (1955). *Am. J. Phys.* 23, 474. <https://doi.org/10.1119/1.1934059>
- Chen, D., Chen, Z., Wu, Y., Wang, M., Ma, N., & Wang, H. (2014). First-principles investigation of mechanical, electronic and optical properties of Al₃Sc intermetallic compound under pressure. *Computational materials science*, 91, 165-172. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.05.007>
- Chen, D., Geng, J., Wu, Y., Wang, M., & Xia, C. (2019). Insight into Physical and Thermodynamic Properties of X₃Ir (X= Ti, V, Cr, Nb and Mo) Compounds Influenced by Refractory Elements: A First-Principles Calculation. *Crystals*, 9(2), 104. <https://doi.org/10.3390/cryst9020104>
- Chen, Q., Zhou, Y., Xu, B., Lou, Z., Chen, H., Chen, S., ... & Fang, M. (2021). Large Magnetoresistance and Nontrivial Berry Phase in Nb₃Sb Crystals with A15 Structure. *Chinese Physics Letters*, 38(8), 087501. <https://doi.org/10.1088/0256-307X/38/8/087501>
- Cordero, B., Gómez, V., Platero-Prats, A. E., Revés, M., Echeverría, J., Cremades, E., Barragán, F., & Alvarez, S. (2008). Covalent radii revisited. *Dalton Transactions*, (21), 2832-2838. <https://doi.org/10.1039/B801115J>
- Dal Corso, A. (2016). Elastic constants of beryllium: a first-principles investigation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 28(7), 075401. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/7/075401>
- Dierker, S. B., Merlin, R., Klein, M. V., Webb, G. W., & Fisk, Z. (1983). Raman scattering in V₃Si, V₃Ge, Nb₃Sn, and Nb₃Sb: Damping of the E_g optical phonon by interband electronic excitations. *Physical Review B*, 27(6), 3577.
- Fermi, E. (1927). Statistical method to determine some properties of atoms. *Rend. Accad. Naz. Lincei*, 6(602-607), 5.
- Fermi, E. (1928). Eine statistische Methode zur Bestimmung einiger Eigenschaften des Atoms und ihre Anwendung auf die Theorie des periodischen Systems der Elemente. *Zeitschrift für Physik*, 48(1), 73-79.
- Flükiger, R., Spitzli, P., Heiniger, F., & Muller, J. (1969). Annealing conditions and superconducting behaviour of Nb-based A15-type compounds. *Physics Letters A*, 29(7), 407-408. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(69\)90331-4](https://doi.org/10.1016/0375-9601(69)90331-4)
- Fono-Tamo, R. S., Tien-Chien, J., & Bhila, O. (2018, November). A Comparative Assessment of the Structural, Elastic and Electronic Properties of Nb₃Pt and NbPt₃ Phases Through First-Principles Study. In *ASME International Mechanical Engineering Congress and Exposition* (Vol. 52170, p. V012T11A042). American Society of Mechanical Engineers. <https://doi.org/10.1115/IMECE2018-86911>
- Ganeshan, S., Shang, S. L., Zhang, H., Wang, Y., Mantina, M., & Liu, Z. K. (2009). Elastic constants of binary Mg compounds from first-principles calculations. *Intermetallics*, 17(5), 313-318. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2008.11.005>
- Gavaler, J. R. (1973). Superconductivity in Nb-Ge films above 22 K. *Applied Physics Letters*, 23(8), 480-482. <https://doi.org/10.1063/1.1654966>

- Gavaler, J. R., Janocko, M. A., & Jones, C. K. (1974). Preparation and properties of high- T_c Nb–Ge films. *Journal of Applied Physics*, 45(7), 3009-3013. <https://doi.org/10.1063/1.1663717>
- Geller, S., Matthias, B. T., & Goldstein, R. (1955). Some new intermetallic compounds with the “ β -wolfram” structure. *Journal of the American Chemical Society*, 77(6), 1502-1504. <https://doi.org/10.1021/ja01611a029>
- Ghosh, M., Barman, A., Das, A., Meikap, A. K., De, S. K., & Chatterjee, S. (1997). Resistivity and magnetoresistance studies of Nb₃Ir and V₃Sb compounds. *physica status solidi (b)*, 201(1), 153-160. [https://doi.org/10.1002/1521-3951\(199705\)201:1<153::AID-PSSB153>3.0.CO;2-8](https://doi.org/10.1002/1521-3951(199705)201:1<153::AID-PSSB153>3.0.CO;2-8)
- Giannozzi, P., De Gironcoli, S., Pavone, P., & Baroni, S. (1991). Ab initio calculation of phonon dispersions in semiconductors. *Physical Review B*, 43(9), 7231. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.7231>
- Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... & Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of physics: Condensed matter*, 21(39), 395502. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
- Giannozzi, P., Andreussi, O., Brumme, T., Bunau, O., Nardelli, M. B., Calandra, M., ... & Baroni, S. (2017). Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. *Journal of physics: Condensed matter*, 29(46), 465901. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa8f79>
- Gray, K. E., Kampwirth, R. T., Rosenbaum, T. F., Field, S. B., & Muttalib, K. A. (1987). Weak localization in superconductors: A study of radiation-damaged Nb₃Ir. *Physical Review B*, 35(16), 8405. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.35.8405>
- Greenfield, P., & Beck, P. A. (1956). Intermediate phases in binary systems of certain transition elements. *JOM*, 8, 265-276. <https://doi.org/10.1007/BF03377684>
- Grimsditch, M., Gray, K. E., Bhadra, R., Kampwirth, R. T., & Rehn, L. E. (1987). Brillouin scattering study of lattice-stiffness changes due to ion irradiation: Dramatic softening in Nb₃Ir. *Physical Review B*, 35(2), 883. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.35.883>
- Gupta, V. B., & Gupta, H. C. (1987). Phonon dispersion relations of the A15 compound Nb₃Sb. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 48(8), 743-748. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(87\)90070-9](https://doi.org/10.1016/0022-3697(87)90070-9)
- Ehrenfreund, E., Gossard, A. C., & Wernick, J. H. (1970). Comments on magnetic properties of Nb₃X compounds. *Solid State Communications*, 8(22), 1925-1927. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(70\)90350-9](https://doi.org/10.1016/0038-1098(70)90350-9)
- Haas, H. (1999). Electric field gradients at V, Nb and Ta in A15 alloys. *Hyperfine interactions*, 120(1-8), 157-161. <https://doi.org/10.1023/A:1017094516580>
- Haines, J., Leger, J. M., & Bocquillon, G. (2001). Synthesis and design of superhard materials. *Annual Review of Materials Research*, 31(1), 1-23. <https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.31.1.1>

- Han, Y., Wu, Y., Li, T., Khenata, R., Yang, T., & Wang, X. (2018). Electronic, magnetic, half-metallic, and mechanical properties of a new equiatomic quaternary Heusler compound YRhTiGe: A first-principles study. *Materials*, 11(5), 797. <https://doi.org/10.3390/ma11050797>
- Hardy, G. F., & Hulm, J. K. (1953). Superconducting silicides and germanides. *Physical Review*, 89(4), 884. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.89.884>
- Harrison, W. A. (2012). *Electronic structure and the properties of solids: the physics of the chemical bond*. Courier Corporation.
- Heciri, D., Belkhir, H., Belghit, R., Bouhafs, B., Khenata, R., Ahmed, R., Bouhemadou, A., Ouahrani, T., Wang, X., & Omran, S. B. (2019). Insight into the structural, elastic and electronic properties of tetragonal inter-alkali metal chalcogenides CsNaX (X= S, Se, and Te) from first-principles calculations. *Materials Chemistry and Physics*, 221, 125-137. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2018.09.024>
- Hill, R. (1952). The elastic behaviour of a crystalline aggregate. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 65(5), 349. <https://doi.org/10.1088/0370-1298/65/5/307>
- Hoffmann, L., Jarlborg, T., Manuel, A. A., Peter, M., Singh, A. K., Walker, E., ... & Simievic, A. (1985). Role of the fermi surface in the superconductivity of A15 compounds. *Physica B+ C*, 135(1-3), 350-352. [https://doi.org/10.1016/0378-4363\(85\)90502-9](https://doi.org/10.1016/0378-4363(85)90502-9)
- Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical review*, 136(3B), B864. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864>
- Jarlborg, T., Junod, A., & Peter, M. (1983). Electronic structure, superconductivity, and spin fluctuations in the A15 compounds A₃B: A= V, Nb; B= Ir, Pt, Au. *Physical Review B*, 27(3), 1558. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.27.1558>
- Junod, A., Bichsel, D., & Muller, J. (1979). Modification of the Acoustic Phonon Spectrum in A15-Type Superconductors as a Function of the Electronic Density of States. *Helvetica Physica Acta*, 52(5), 580-596.
- Karaca, E. (2017). *Hacim merkezli tetragonal yapılarda süperiletkenliğin yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak incelenmesi* (Doctoral dissertation, Sakarya Üniversitesi (Turkey)).
- Karaca, E., Byrne, P. J. P., Hasnip, P. J., Tütüncü, H. M., & Probert, M. I. J. (2021). Electron–phonon interaction and superconductivity in hexagonal ternary carbides Nb₂AC (A: Al, S, Ge, As and Sn). *Electronic Structure*, 3(4), 045001. <https://doi.org/10.1088/2516-1075/ac2c94>
- Karaca, E.; Bağcı, S.; Tepeçinar, M.; Uzunok, H. Y.; Tütüncü, H. M. (2022). Physical properties and superconductivity in the cubic A15-type Ta₃Ge compound: A first principles study. *Solid State Communications*, 353, 114838. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2022.114838>
- Kihlstrom, K. E., Mael, D., & Geballe, T. H. (1984). Tunneling $\alpha^2F(\omega)$ and heat-capacity measurements in high-T_c Nb₃Ge. *Physical Review B*, 29(1), 150. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.29.150>

- Klein, B. M., Papaconstantopoulos, D. A. and Boyer, L. L. (1980). In Superconductivity in d- and f- and Metals, edited by H. Suhl and M. B. Maple (Academic, New York), p. 455.
- Knapp, G. S., Bader, S. D., & Fisk, Z. (1976). Phonon properties of A-15 superconductors obtained from heat-capacity measurements. *Physical Review B*, 13(9), 3783. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.3783>
- Koch, C. C., & Scarbrough, J. O. (1971). Superconductivity in Mo-Re and Nb-Ir σ Phases. *Physical Review B*, 3(3), 742. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.3.742>
- Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical review*, 140(4A), A1133. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133>
- Kurmaev, E. Z., Werfel, F., Brümmer, O., & Flükiger, R. (1977). X-ray photoemission spectra of valence electrons in V₃X and Nb₃X compounds. *Solid State Communications*, 21(2), 239-243. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(77\)90693-7](https://doi.org/10.1016/0038-1098(77)90693-7)
- Lebga, N., Daoud, S., Sun, X. W., Bioud, N., & Latreche, A. (2018). Mechanical and thermophysical properties of cubic rock-salt AlN under high pressure. *Journal of Electronic Materials*, 47, 3430-3439. <https://doi.org/10.1007/s11664-018-6169-x>
- Lee, C., Yang, W., & Parr, R. G. (1988). Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density. *Physical review B*, 37(2), 785. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.785>
- Li, X., Chen, D., Wu, Y., Wang, M., Ma, N., & Wang, H. (2017). Assessment on the structural, elastic and electronic properties of Nb₃Ir and Nb₃Pt: A first-principles study. *AIP Advances*, 7(6). <https://doi.org/10.1063/1.4986906>
- Lomnytska, Y. F., & Kuz'ma, Y. B. (2006). The Nb–Sb system. *Journal of alloys and compounds*, 413(1-2), 114-117. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2005.07.002>
- Luan, X., Qin, H., Liu, F., Dai, Z., Yi, Y., & Li, Q. (2018). The mechanical properties and elastic anisotropies of cubic Ni₃Al from first principles calculations. *Crystals*, 8(8), 307. <https://doi.org/10.3390/cryst8080307>
- Machlin, E. S., & Whang, S. H. (1978). A15—A structure stabilized by crystal field distortion of “exotic” elements at chain sites. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 39(6), 607-615. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(78\)90174-9](https://doi.org/10.1016/0022-3697(78)90174-9)
- Matthias, B. T., Wood, E. A., Corenzwit, E., & Bala, V. B. (1956). Superconductivity and electron concentration. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1(3), 188-190. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(56\)90026-9](https://doi.org/10.1016/0022-3697(56)90026-9)
- Matthias, B., Geballe, T., & Compton, V. (1963). Superconductivity. *Reviews of Modern Physics*, 35(1), 1-22. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.35.1>
- Matthias, B. T., Geballe, T. H., Willens, R. H., Corenzwit, E., & Hull Jr, G. W. (1965). Superconductivity of nb₃ ge. *Physical Review*, 139(5A), A1501. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.139.A1501>
- McMillan, W. L. (1968). Transition temperature of strong-coupled superconductors. *Physical Review*, 167(2), 331. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.167.331>

- Melnyk, G., Rogl, P., Skolozdra, R., Maccio, D., Saccone, A., & Ferro, R. (1999). The antimony-niobium (Sb-Nb) system. *Journal of phase equilibria*, 20, 475-478. <https://doi.org/10.1361/105497199770340725>
- Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical review B*, 13(12), 5188. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
- Murnaghan, F. D. (1944). The compressibility of media under extreme pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 30(9), 244-247. <https://doi.org/10.1073/pnas.30.9.244>
- Naher, M. I., Parvin, F., Islam, A. K., & Naqib, S. H. (2018). Physical properties of niobium-based intermetallics (Nb₃B; B= Os, Pt, Au): a DFT-based ab-initio study. *The European Physical Journal B*, 91, 1-13. <https://doi.org/10.1140/epjb/e2018-90388-9>
- Narayan, V., Verpoort, P. C., Dann, J. R. A., Backes, D., Ford, C. J. B., Lanius, M., ... & Grützmacher, D. (2019). Long-lived nonequilibrium superconductivity in a noncentrosymmetric Rashba semiconductor. *Physical Review B*, 100(2), 024504. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.100.024504>
- Nevit, M. V. (1977). *Intermetallics compounds, edited by JH Westbrook*. RE Krieger (Publishing Co, Huntington, NY).
- Onnes, H. K. (1911). Further experiments with liquid helium. In *Proceedings of the KNAW* (Vol. 13, pp. 1910-1911).
- Paduani, C. (2007). Electronic properties of the A-15 Nb-based intermetallics Nb₃(Os, Ir, Pt, Au). *Solid state communications*, 144(7-8), 352-356. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2007.07.030>
- Paduani, C. (2007). Structural and electronic properties of the A-15 compounds Nb₃Rh and Nb₃Ir. *Physica B: Condensed Matter*, 393(1-2), 105-109. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2006.12.051>
- Paduani, C. (2009). Electronic structure and Fermi surfaces of the superconductive A₃B compounds: A = V, Nb; B = Ga, Ge and Sn. *Solid state communications*, 149(31-32), 1269-1273. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2009.05.011>
- Pan, Y., Li, Y., & Zheng, Q. (2019). Influence of Ir concentration on the structure, elastic modulus and elastic anisotropy of NbIr based compounds from first-principles calculations. *Journal of Alloys and Compounds*, 789, 860-866. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.03.083>
- Papadimitriou, I., Utton, C., Scott, A., & Tsakiroopoulos, P. (2015). Ab initio study of binary and ternary Nb₃(X, Y) A15 intermetallic phases (X, Y = Al, Ge, Si, Sn). *Metallurgical and Materials Transactions A*, 46, 566-576. <https://doi.org/10.1007/s11661-014-2403-1>
- Papadimitriou, I., Utton, C., & Tsakiroopoulos, P. (2015). On the Nb-Ge binary system. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 46, 5526-5536. <https://doi.org/10.1007/s11661-015-3149-0>
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*, 77(18), 3865. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>

- Pintschovius, L., Smith, H. G., Wakabayashi, N., Reichardt, W., Weber, W., Webb, G. W., & Fisk, Z. (1983). Lattice dynamics of the A 15 compound Nb₃Sb. *Physical Review B*, 28(10), 5866. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.28.5866>
- Pugh, S. F. (1954). XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 45(367), 823-843. <https://doi.org/10.1080/14786440808520496>
- Pyykkö, P., & Atsumi, M. (2009). Molecular double-bond covalent radii for elements Li–E112. *Chemistry–A European Journal*, 15(46), 12770-12779. <https://doi.org/10.1002/chem.200901472>
- Reddy, S. V., & Suryanarayana, S. V. (1986). X-ray determination of the Debye—Waller factors, amplitudes of vibration and Debye temperatures of some intermetallic compounds with the A15-structure. *Journal of materials science letters*, 5(4), 436-438. <https://doi.org/10.1007/BF01672353>
- Reuss, A. (1929). Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *ZAMM-Journal of Applied Mathematics and Mechanics/Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 9(1), 49-58. <https://doi.org/10.1002/zamm.19290090104>
- Salma, M. U., & Rahman, M. A. (2018). Study of structural, elastic, electronic, mechanical, optical and thermodynamic properties of NdPb₃ intermetallic compound: DFT based calculations. *Computational Condensed Matter*, 15, 42-47. <https://doi.org/10.1016/j.cocom.2018.04.001>
- Sattigeri, R. M.; Cuono, G.; Hussain, G.; Ming, X.; Di Bernardo, A.; Attanasio, C.; Cuoco, M.; Autieri, C. (2024). Dirac surface states, multiorbital dimerization, and superconductivity in Nb- and Ta-based A15 compounds. *Physical Review B*, 109, 075119. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.075119>
- Spitzli, P., Flükiger, R., Heiniger, F., & Muller, J. (1969). Specific heat and superconductivity of Nb-based a 15-type compounds. *Physics Letters A*, 30(3), 170-171. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(69\)90916-5](https://doi.org/10.1016/0375-9601(69)90916-5)
- Spitzli, P. (1971). Chaleur spécifique d'alliages de structure A 15. *Physik der kondensierten Materie*, 13, 22-58. <https://doi.org/10.1007/BF02422590>
- Sreenivasa Reddy, P. V., Kanchana, V., Vaitheeswaran, G., Modak, P., & Verma, A. K. (2016). Electronic topological transitions in Nb₃X (X= Al, Ga, In, Ge, and Sn) under compression investigated by first principles calculations. *Journal of Applied Physics*, 119(7). <https://doi.org/10.1063/1.4941553>
- Srivastava, G. P. (1982). *The Physics of Phonons*, Adam Hilger, Bristol 1990.
- Smith, H. G., Wakabayashi, N., Chang, Y. K., Pintschovius, L., & Weber, W. (1985). Phonon dispersion curves of nonstoichiometric Nb₃Ge. *Physical Review B*, 31(12), 7772. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.31.7772>
- Stewart, G. R., Newkirk, L. R., & Valencia, F. A. (1978). Specific heat of single phase Nb₃Ge. *Solid State Communications*, 26(7), 417-420. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(78\)90518-5](https://doi.org/10.1016/0038-1098(78)90518-5)

- Sultana, F., Uddin, M. M., Ali, M. A., Hossain, M. M., Naqib, S. H., & Islam, A. K. M. A. (2018). First principles study of $M_2\text{InC}$ ($M = \text{Zr, Hf and Ta}$) MAX phases: the effect of M atomic species. *Results in Physics*, 11, 869-876. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2018.10.044>
- Sundareswari, M., Ramasubramanian, S., & Rajagopalan, M. (2010). Elastic and thermodynamical properties of $A15 \text{ Nb}_3\text{X}$ ($\text{X} = \text{Al, Ga, In, Sn and Sb}$) compounds—First principles DFT study. *Solid state communications*, 150(41-42), 2057-2060. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2010.08.004>
- Tan, Y., Ma, C. L., Tanaka, H., Kasama, A., Tanaka, R., Mishima, Y., & Hanada, S. (2000). Influence of boron addition on high temperature mechanical properties of Nb_3Ir intermetallic compounds. *Materials transactions, JIM*, 41(12), 1605-1611. <https://doi.org/10.2320/matertrans1989.41.1605>
- Testardi, L. R., Wernick, J. H., & Royer, W. A. (1974). Superconductivity with onset above 23°K in Nb-Ge sputtered films. *Solid State Communications*, 15(1), 1-4. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(74\)90002-7](https://doi.org/10.1016/0038-1098(74)90002-7)
- Thomas, L. H. (1927, January). The calculation of atomic fields. In *Mathematical proceedings of the Cambridge philosophical society* (Vol. 23, No. 5, pp. 542-548). Cambridge University Press. <https://doi.org/10.1017/S0305004100011683>
- Tütüncü, H. M. (1998). Lattice Dynamics of Semiconductors And Their Surfaces. University of Exeter. *Physics, Ph. D. Thesis*.
- Tütüncü, H. M., Uzunok, H. Y., Karaca, E., Srivastava, G. P., Özer, S., & Uğur, Ş. (2015). Ab initio investigation of BCS-type superconductivity in $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ -type superconductors. *Physical Review B*, 92(5), 054510. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.054510>
- Uzunok, H. Y. (2015). *YPd₂B₂C ve YPt₂B₂C Malzemelerinin Fiziksel Özelliklerinin İncelenmesi* (Doctoral dissertation, Sakarya Üniversitesi (Turkey)).
- Voigt, W. (1928). Lehrbuch der Kristallphysik, Leipzig, Taubner Adv. *Earth Sci*.
- Wang, F. E., & Mitchell, M. A. (1974). A new correlation: superconducting critical temperature vs number of naturally occurring isotopes among superconducting elements. *Solid State Communications*, 15(5), 867-869. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(74\)90682-6](https://doi.org/10.1016/0038-1098(74)90682-6)
- Wu, L. N.; Yang, S. T.; Shen, J. K.; Zhang, J. S.; Liu, F. H. (2023). Coexistence of superconductivity and charge density wave instability in $A15\text{-Nb}_3\text{Sn}$. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 25, 32452-32459. <https://doi.org/10.1039/D3CP04614A>
- Wu, Y., Bao, L., Wang, X., Wang, Y., Peng, M., & Duan, Y. (2020). Insight into structural, electronic, elastic and thermal properties of $A15\text{-type Nb}_3\text{X}$ ($\text{X} = \text{Si, Ge, Sn and Pb}$) compounds. *Materials Today Communications*, 25, 101410. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101410>
- Wu, Z. J., Zhao, E. J., Xiang, H. P., Hao, X. F., Liu, X. J., & Meng, J. (2007). Crystal structures and elastic properties of superhard IrN_2 and IrN_3 from first principles. *Physical Review B*, 76(5), 054115. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.76.054115>

- Zegler, S. T. (1965). Superconductivity in Cr₃Si-type ternary phases with niobium and group VIII metals. *Physical Review*, 137(5A), A1438. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.137.A1438>
- Zeng, L. Y.; Zhou, H. W.; Du, H.; Zhong, R. D.; Guo, R. X.; Guo, S.; Su, W. Z.; Li, K.; Zhang, C.; Yu, P. F.; Luo, H. X. (2023). Superconductivity in the cobalt-doped V₃Si A15 intermetallic compound. *Superconductor Science & Technology*, 36, 035003. <https://doi.org/10.1088/1361-6668/acadb4>





ÖZGEÇMİŞ

Ad-Soyad : Fatih KURTULUŞ

ÖĞRENİM DURUMU:

- **Lisans** : 1999, Sakarya Üniversitesi, Fen Edebiyat Fakültesi, Fizik
- **Yükseklisans** : 2002, Sakarya Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik

MESLEKİ DENEYİM VE ÖDÜLLER:

- 2000-2015 yılları arasında özel sektörde fizik öğretmeni olarak çalıştı.
- 2015-2018 yılları arasında Sakarya Üniversitesi Arifiye MYO'da öğretim görevlisi olarak çalıştı.
- 2018 yılından itibaren Sakarya Uygulamalı Bilimler Üniversitesi Arifiye MYO'da öğretim görevlisi olarak çalışıyor.

TEZDEN TÜRETİLEN ESERLER:

- Kurtuluş, F., Karaca, E., & Bağcı, S. (2024). Investigation of superconductivity of A15 type cubic Nb₃Os material by using density functional theory. *Physica C: Superconductivity and its Applications*, 621, 1354515. <https://doi.org/10.1016/j.physc.2024.1354515>