

V₃Ge bileşiğinin fiziksel özelliklerinin ve süperiletkenlik mekanizmasının teorik olarak incelenmesi

Theoretical Investigation of the physical properties and superconductivity mechanism of V₃Ge compound

Süleyman Berkutay DURSUN*¹ , Sadık BAĞCI¹ 

¹Fizik Bölümü, Fen Fakültesi, Sakarya Üniversitesi, Sakarya, Türkiye

• Geliş tarihi / Received: 19.02.2024

• Kabul tarihi / Accepted: 11.06.2024

Öz

Bu çalışmada Yoğunluk Fonksiyonel Teorisini ele alan Quantum Espresso paket programı kullanılarak A15 tipi V₃Ge bileşiğinin yapısal, elektronik, elastik ve fonon özellikleri araştırılmış ve süperiletkenlik mekanizması teorik olarak incelenmiştir. Örgü sabiti hesaplamalarını müteakip hacim modülü ve hacim modülünün basınca göre birinci türevi farklı örgü sabitlerine karşılık gelen enerji değerleri ve Murnaghan durum denklemleri yardımıyla elde edilmiştir. Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı ve Yapay Potansiyel Metodu kullanılarak elektronik özelliklere ilişkin hesaplamalar yapılmış ve neticesinde V₃Ge bileşiğinin elektronik bant yapısı grafikleri spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak ve spin-orbit etkileşimi hariç tutularak ayrı ayrı hazırlanmıştır. Bunun yanı sıra V₃Ge kristali için hesaplanan elektron durum yoğunluğu grafiklerinden, V₃Ge kristalinin süperiletkenlik mekanizmasının araştırılmasında önemli bir yer tutan Fermi enerjisi civarındaki durum yoğunluğu $N(E_F)$, tam-rölativistik ultrasoft yapay potansiyeller kullanılarak hesaplanmıştır. Süperiletken materyallerin elastik özelliklerinin araştırılması, süperiletkenlik özelliklerinin teorik olarak anlaşılabilmesi için de oldukça önemlidir. Bu nedenle bu çalışmada V₃Ge bileşiğinin elastik özellikleri ayrıntılı olarak ele alınmıştır. Elastik sabitlerin değerleri, Gerilme-Gerinim (Stress-Strain) metodu kullanılarak elde edilmiştir. V₃Ge'nin süperiletkenlik özelliklerinin incelenebilmesi için fonon özelliklerinin de incelenmesi gerekir. Fonon hesaplamaları neticesinde ortalama fonon frekansı ve elektron-fonon etkileşim parametresi elde edilmiştir. Bu parametre değerleri ve Migdal-Eliashberg yaklaşımı kullanılarak V₃Ge bileşiğinin süperiletkenliğe geçiş kritik sıcaklığı ortaya konmuştur.

Anahtar kelimeler: A15 tipi, Elektronik özellikler, Fonon özellikler, Süperiletkenlik, Yapısal özellikler, Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi

Abstract

In this study, the superconductivity mechanism was theoretically examined by investigating the structural, electronic, elastic and phonon properties of the A15 type V₃Ge compound using the Quantum Espresso package program, which deals with Density Functional Theory. Following the lattice constant calculations the bulk modulus and the first derivative of the bulk modulus with respect to pressure were with the help of energy values corresponding and different lattice constants and Murnaghan equations of state. Calculations regarding the electronic properties were made using the Generalized Gradient Approach and Pseudopotential Method and as a result, the electronic band structure graphs of the V₃Ge compound were prepared separately by including the spin-orbit interaction in the calculation and excluding the spin-orbit interaction. In addition, from the electronic density of states graph calculated for the V₃Ge crystal, the density of states at the Fermi level, $N(E_F)$, which has an important place in the investigation of the superconductivity mechanism of the V₃Ge crystal was calculated using full-relativistic ultrasoft pseudopotentials. Investigation of the elastic properties of superconducting materials is also very important for the theoretical understanding of superconductivity properties. Therefore, in this study, the elastic properties of the V₃Ge compound are discussed in detail. Elastic constant values have been obtained by using the Stress-Strain method. In order to investigate the superconductivity properties of V₃Ge, phonon properties should be analysed. As a result of the phonon calculations, the average phonon frequency and electron-phonon interaction parameter were obtained. These parameter values were used to reveal the critical temperature of the V₃Ge compound for transition to superconductivity using the Migdal-Eliashberg approach.

Keywords: A15 type, Electronic properties, Phonon properties, Superconductivity, Structural properties, Density Functional Theory

*Süleyman Berkutay DURSUN; berkutaydursun@hotmail.com

1. Giriş

1. Introduction

Süperiletkenlik özellikleri araştırılan gruplardan biri de A15 tipi malzemelerdir. İlk olarak 1931 yılında bir tungsten allotropunda gözlenen ve bu nedenle β -W veya Cr_3Si olarak da bilinen A15 fazı, metallerin biraraya gelmesi ile oluşur. A_3B kimyasal formuyla bilinen bu yapıda A geçiş metalini B ise uygun olan diğer elementi simgeler. Yüksek manyetik alan ve yüksek sıcaklıklarda süperiletken özellik gösterebilen A15 tipi bileşikler, günümüzde teknoloji alanında birçok uygulamada kullanılmaya devam ederken bilimsel çalışmalarda da hala süregelen önemli bir araştırma alanıdır. Yakın geçmişte çok daha yüksek sıcaklıklarda süperiletken özellik gösteren malzemeler keşfedilmesine rağmen, A15 tipi süperiletkenler 10T'dan daha yüksek manyetik alan gerektiren uygulamalarda kullanılan ana malzemeler olmuşlardır. A15 tipi malzemelerden biri olan ve 17.1 K kritik sıcaklığa sahip V_3Si 'nin keşfi 1953 yılında gerçekleşmiştir (Hardy & Hulm, 1953). Bu bileşik aynı zamanda bu çalışmada üzerinde çalışılmış olduğumuz V_3Ge bileşiğinin izomorfudur. Bu çalışmada üzerinde çalıştığımız A15 tipi süperiletkenlerden biri olan V_3Ge bileşiği de literatürde geniş bir perspektifte çalışılmış (Mattheiss, 1975, Dew-Hughes, 1975, Somekh & Evetts, 1977, Nettel & Thomas, 1977, Arbman & Jarlborg, 1978, Menon & Philip, 1978, Achar & Barsch, 1979, Philip, 1980, Papaconstantopoulos & Soukoulis, 1981, Kodess & Butman, 1982, Radousky vd., 1982, Dierker vd., 1983, Solleder vd., 1984, Skripov & Stepanov, 1984, Klein & Lu, 2001, Delaire vd., 2008; Delaire, 2010, Chihi vd., 2012, Surikov vd., 2021, Ahmed vd., 2022) ve çalışmalar halihazırda büyük bir ilgi ile devam etmektedir.

Bu makalede öncelikle V_3Ge bileşiğinin yapısal özellikleri hesaplanmıştır. Yapısal özelliklerinden faydalanılarak V_3Ge 'nin elastik ve mekanik özellikleri belirlenmiştir. Bir sonraki adım olarak V_3Ge kristalinin elektronik özellikleri araştırılmış, elektronik bant yapısı ve elektronik durum yoğunluğu elde edilmiştir. Elektronik özelliklerini müteakip bu malzemenin fonon dispersiyon grafiği ve fonon durum yoğunluğu hesaplamaları ilk kez bu çalışma kapsamında ele alınarak, titreşim özellikleri ayrıntılı bir şekilde tartışılmıştır. V_3Ge bileşiğinin yapısal, elektronik, elastik, mekanik ve fonon özelliklerinin elde edilmesinden sonra kristal için elektron-fonon etkileşimi detaylı bir şekilde ele alınmıştır. Bu çalışmanın ilerleyen kısımlarında V_3Ge bileşiği için elde edilen tüm bu özelliklerden yararlanılarak süperiletkenlik parametreleri hesaplamaları yapılmıştır. Bununla birlikte özellikle süperiletkenlik mekanizmasının belirlenmesinde çok büyük bir öneme sahip olan elektron-fonon etkileşimi teorik olarak ilk kez bu çalışma kapsamında incelenmiştir. Bu çalışmada teorik olarak yapılan hesaplamalar ve elde edilen sonuçlar, literatürde yer alan teorik ve deneysel çalışmaların sonuçları ile karşılaştırılarak detaylı bir biçimde tartışılmıştır.

2. Hesaplama metodu

2. Calculation method

Bu çalışma kapsamında yapılan çalışmaların sayısal hesaplamalarını elde etmek için Yoğunluk Fonksiyonel Teorisini temel alan Quantum-Espresso paket programı kullanılmıştır (Giannozzi vd., 2009; Giannozzi vd., 2017). İlk olarak (8x8x8) ve (12x12x12) k-noktası ağırları kullanılarak birbirlerinden farklı örgü sabiti değerleri için V_3Ge kristal yapısı oluşturulmuş ve seçilen her bir farklı örgü sabitine karşılık gelen enerji değerleri belirlenmiştir. Sonrasında, XCRSDEN programı (Kokalj, 1999) sayesinde V ve Ge atomları arasındaki bağ uzunlukları hesaplanmıştır. Yapılan tüm bu hesaplamalar spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak ayrıca tekrarlanmıştır. Hacim modülü ve hacim modülünün basınca göre birinci türevi, farklı örgü sabitine karşılık gelen enerji değerleri ve Murnaghan durum denklemleri (Murnaghan, 1944) kullanılarak elde edilmiştir. Kohn-Sham denklem çözümleri, Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı ve Yapay (Pseudo) Potansiyel metodları (Perdew & Burke, 1996) kullanılarak elde edilmiştir. Bu sayede V_3Ge bileşiğinin elektronik özelliklerine ilişkin verilere ulaşabileceğimiz elektronik bant yapısı grafiği ortaya çıkarılmıştır. Ayrıca hesaplanan elektronik durum yoğunluğu grafiğinden Fermi enerjisi civarındaki durum yoğunluğu, spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak tam-rölativistik ultrasoft yapay potansiyeller kullanılarak belirlenmiştir. V_3Ge bileşiğinin fonon hesaplamalarında, başarısını literatürde bulunan birçok çalışmada etkin olarak kanıtlamış olan Lineer Tepki Metodu (Allen & Dynes, 1975; Giannozzi vd., 2009) kullanılmıştır. V_3Ge bileşiğine ait fonon dispersiyon grafiğini elde etmek için 4x4x4 \mathbf{q} -noktası ağında 10 adet dinamik matris kullanılmıştır. Momentum uzayında elde edilen bu matrisler normal uzaya Fourier dönüşümleri kullanılarak taşınmıştır. Daha sonra hareket denklemi hesaplaması yapılarak birinci Brillouin bölgesinde simetri yönlerinde fonon eğrileri elde edilmiştir. V_3Ge bileşiğinin süperiletkenlik mekanizmasının incelenebilmesi kapsamında BCS Teorisinin temel aldığı elektron-fonon etkileşim parametresinin doğru bir şekilde hesaplanabilmesi için Lineer Tepki Metodu ve Migdal-Eliashberg (Allen & Dynes, 1975; Giannozzi vd., 2009) teoremleri kullanılmıştır. Yapılan

hesaplamalarda $32 \times 32 \times 32$ değerinde **k**-noktası ağı kullanılmıştır. Elde edilen ortalama fonon frekansı ve elektron-fonon etkileşim parametresi değerleri Migdal-Eliashberg yaklaşımı kullanılarak V_3Ge bileşiğinin süperiletkenliğe geçiş kritik sıcaklık değeri belirlenmiştir.

3. Bulgular

3. Results

3.1. V_3Ge kristalinin yapısal ve elektronik özellikleri

3.1. Structural and electronic properties of V_3Ge crystal

Uzay grubu $Pm\bar{3}n$ (No:223) olan bu kristal yapı basit kübik örgüye sahiptir. V_3Ge bileşiğinin bir birim hücrede 8 adet (6 V ve 2 Ge) atom bulunmaktadır. V atomları 6c Wyckoff pozisyonları olan $(1/4, 0, 1/2)$, $(1/2, 1/4, 0)$, $(0, 1/2, 1/4)$, $(3/4, 0, 1/2)$, $(1/2, 3/4, 0)$ ve $(0, 1/2, 3/4)$ koordinatlarında bulunurken, Ge atomları ise 2a Wyckoff pozisyonları olan $(0,0,0)$ ve $(1/2, 1/2, 1/2)$ konumlarında yer alırlar. Hesaplamalar neticesinde ortaya çıkan V_3Ge 'nin kristal yapısı Şekil 1 ile gösterilmektedir. V ve Ge atomları arasında hesaplanan bağlar birbirlerine eşit uzunlukta olup $2,6695 \text{ \AA}$ olarak bulunmuştur. Kübik yapıda olmasından kaynaklı V atomları arasında bağlar eşit ve $2,3877 \text{ \AA}$ olarak ölçülmüştür. V atomları arasındaki bağ uzunlukları literatürde daha önce yer alan bir çalışmada (James & Straumanis, 1961) %99 oranında saflık içeren bir vanadyum kristali için $2,6189 \text{ \AA}$ olarak elde edilmiştir. Elde edilen sonuçlar arasındaki fark, V_3Ge bileşiği içerisinde V-V atomlarının arasındaki bağ uzunluğunun kısalmış, bir başka deyişle V-V bağının V_3Ge bileşiğinde daha güçlü kurulmuş olduğunun göstergesidir. V_3Ge bileşiğinin örgü sabiti değerini teorik yöntemlerle hesaplamak adına farklı örgü sabiti değerleri için bu kristal yapı oluşumu sağlanmıştır. Seçilen her bir farklı örgü sabiti değerine karşılık oluşturulan kristalin toplam enerji değeri hesaplanmış ve bu sayede farklı örgü sabiti değerlerine karşılık gelen enerji değeri hesaplamaları yapılabilmektedir. Hesaplanan farklı örgü sabiti değerlerine karşılık gelen enerji değerleri ve aşağıda 1 ve 2 olarak verilen Murnaghan durum denklemleri (Murnaghan, 1944) yardımıyla ortaya çıkan enerji-örgü sabiti grafiği Şekil 2 ile gösterilmiştir. Örgü sabiti değeri, spin-orbit etkileşimi hesaba katılmadan $(8 \times 8 \times 8)$ k-noktası ağı kullanıldığında $4,771 \text{ \AA}$, $(12 \times 12 \times 12)$ k-noktası ağı kullanıldığında ise $4,772 \text{ \AA}$ olarak hesaplanmıştır. Yapılan hesaplamalarda V_3Ge için spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak, degauss değeri 0.05 ve k-noktası ağı $(8 \times 8 \times 8)$ seçilerek elde edilen örgü sabiti değeri ise $4,775 \text{ \AA}$ olarak elde edilmiştir. Bununla birlikte karşılaştırma yapmak ve ileride yapacağımız hesaplamalarda kullanmak için degauss 0.02 ve k-noktası ağı $(8 \times 8 \times 8)$ alınarak da hesaplama yapılmış ve diğer sonuçlarla neredeyse aynı değerler elde edilmiştir. Sonuç olarak, farklı degauss ve k-noktası ağları için tekrar tekrar yapılan örgü sabiti hesaplamalarında optimum değere, degauss=0.05 ve k-noktası ağı olarak ise $(8 \times 8 \times 8)$ kullanılarak varılabileceği gözlenmiştir. Bu ideal hesaplama kriterleri kullanılarak, V_3Ge bileşiğini A15 yapıda kararlı kılan örgü sabiti (a), Bulk modülü (B_0) ve Bulk modülünün basınca göre birinci türevi (B_0') elde edilmiştir.

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

$$E = \frac{\Omega_0 B_0}{B_0'} \left[\frac{1}{B_0' - 1} \left(\frac{\Omega}{\Omega_0} \right)^{B_0' - 1} + \frac{\Omega}{\Omega_0} \right] - \frac{\Omega_0 B_0}{B_0' - 1} + E(\Omega_0) \quad (2)$$

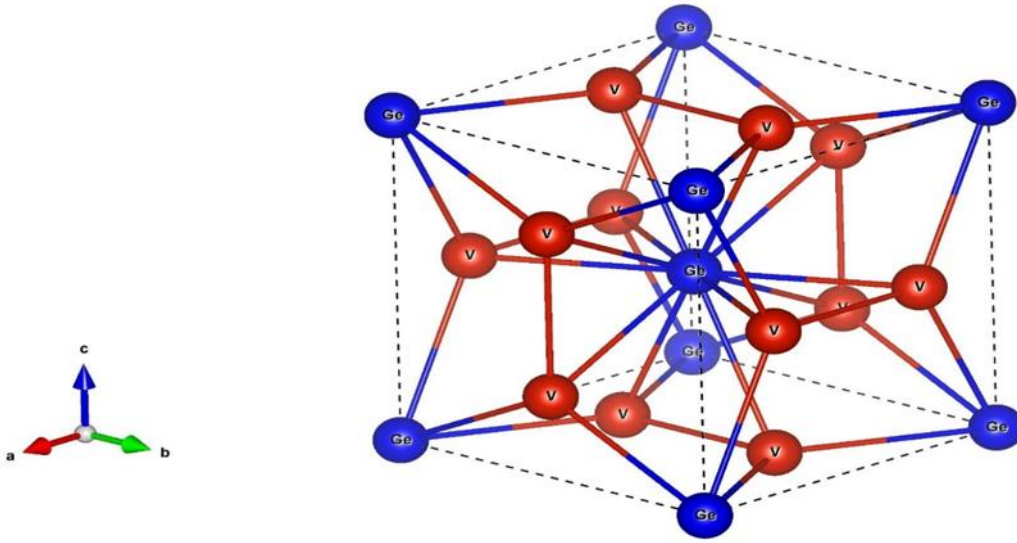
Bulk modülü değerinin hesaplanması kristallerin teknoloji alanında verimli şekilde kullanılabilmesi açısından dayanıklılığının bir ölçüsü olması nedeniyle oldukça önemlidir. Elde edilen bu yapısal parametreler (a, B_0 ve B_0') Tablo 1'de sunulmaktadır. Bu çalışma kapsamında elde edilen değerlerin daha önceki deneysel (Somekh & Evetts, 1977) ve teorik (Mattheiss, 1975; Menon & Philip, 1978, Chihi vd., 2012) sonuçlar ile oldukça uyumlu olduğu görülmektedir.

Tablo 1. V_3Ge kristali için hesaplanan yapısal parametreler ve bu parametrelerin daha önceki deneysel ve teorik verilerle kıyaslanması (Tüm uzunluklar Å birimindedir).

Table 1. Calculated structural parameters for V_3Ge crystal and comparison of these parameters with previous experimental and theoretical data (All lengths are in Å units).

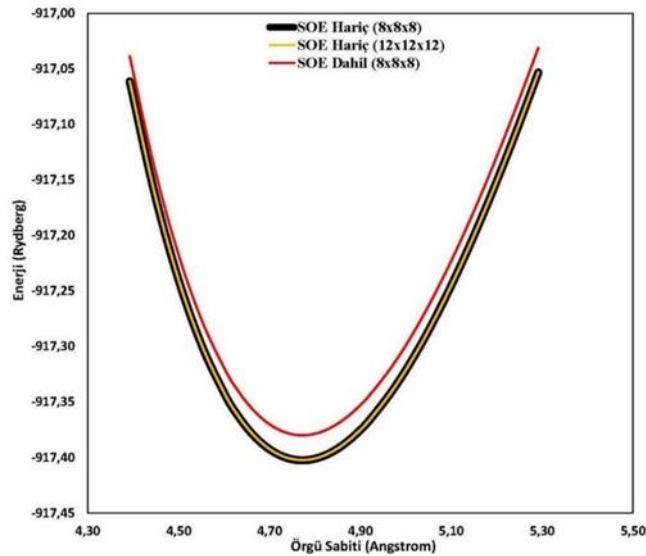
	Degauss	K-Point	a(Å)	B_0 (GPa)	B_0'
Bu Çalışma (SOE'li*)	0.05	8x8x8	4.775	176.8	4.02
Bu Çalışma (SOE'siz**)	0.05	8x8x8	4.771	178.5	4.33
Bu Çalışma (SOE'siz**)	0.05	12x12x12	4.772	178.5	4.32
Bu Çalışma (SOE'siz**)	0.02	8x8x8	4.772	178.8	4.30
Teorik (Mattheiss, 1975)			4.769		
Deneysel (Somekh & Evetts, 1977)			4.778		
Teorik (Menon & Philip, 1978)					4.49
Teorik (Chihl vd., 2012)			4.767	175.8	

Bu Çalışma (SOE'li*), Hesaplamalara spin-orbit etkileşimi dahil edilmiştir.
Bu Çalışma (SOE'siz**), Hesaplamalarda spin-orbit etkileşimi hariç tutulmuştur.



Şekil 1. V_3Ge bileşiğinin kristal yapısı

Figure 1. Crystal structure of V_3Ge compound



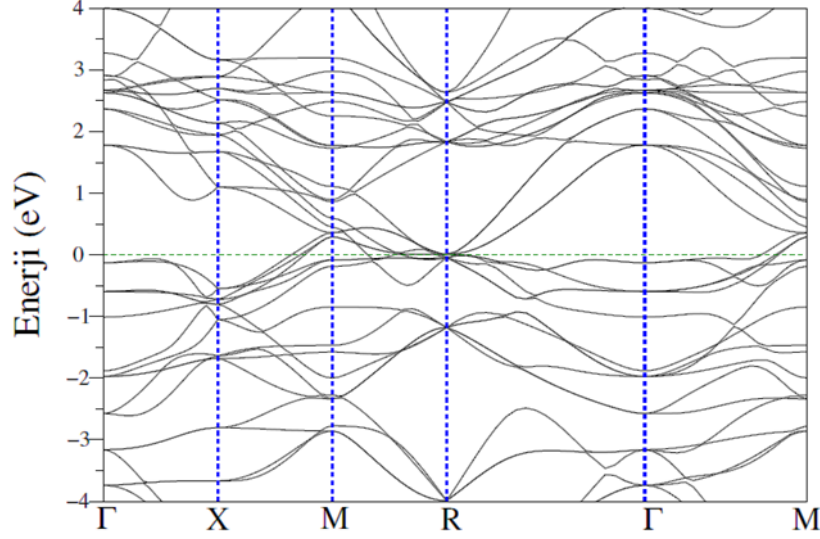
Şekil 2. V_3Ge için enerji-örgü sabiti grafiği

Figure 2. Energy-lattice constant plot for V_3Ge

3.2. V₃Ge kristalinin elektronik özellikleri

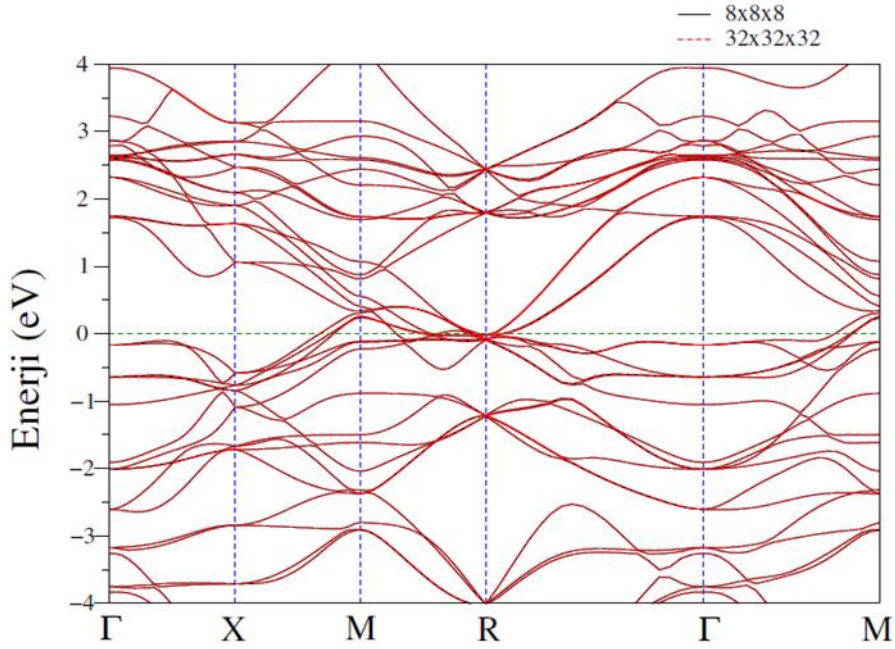
3.2. Electronic properties of V₃Ge crystal

Elektronik yapı hesaplamaları neticesinde basit kübik örgü yüksek simetri yönleri boyunca elde edilen V₃Ge bileşiğinin elektronik bant yapısı grafikleri spin-orbit etkileşimi hariç ve dahil olmak üzere sırasıyla Şekil 3 ve Şekil 4 ile gösterilmektedir. Bant yapısı incelendiğinde açıkça görüldüğü üzere elektronik enerji bantları Fermi enerji seviyesini bazı simetri yönlerinde kesmektedir. Bu gözlem V₃Ge bileşiğinin mekanik bir yapıya sahip olduğunun göstergesidir.



Şekil 3. V₃Ge kristalinin spin-orbit etkileşimi hesaba katılmadan elde edilen elektronik bant yapısı grafiği. (Yeşil kesikli yatay çizgi Fermi seviyesini belirtir.)

Figure 3. Electronic band structure graph of the V₃Ge crystal obtained without including the spin-orbit interaction. (Green dashed horizontal line indicates the Fermi level.)

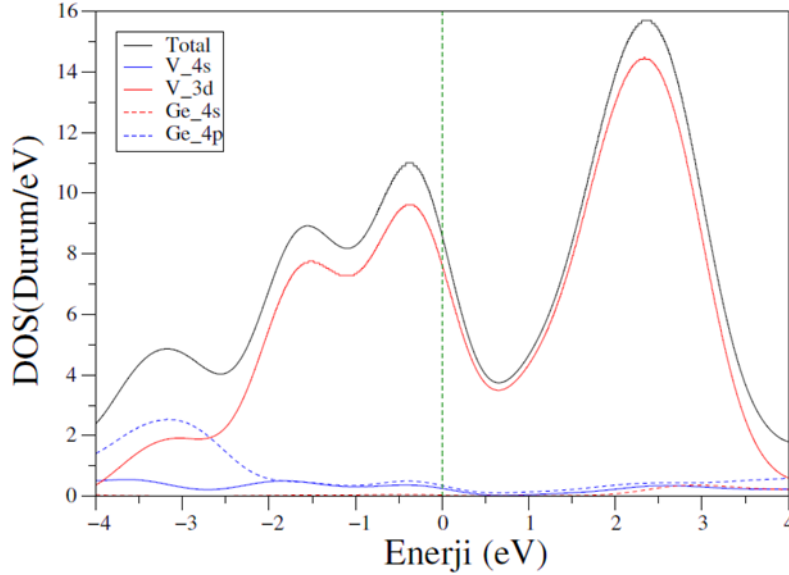


Şekil 4. V₃Ge kristalinin spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak elde edilen elektronik bant yapısı grafiği. Fermi seviyesi 0 eV olarak alınmıştır.

Figure 4. Electronic band structure graph of the V₃Ge crystal obtained by including the spin-orbit interaction. The Fermi level is taken as 0 eV.

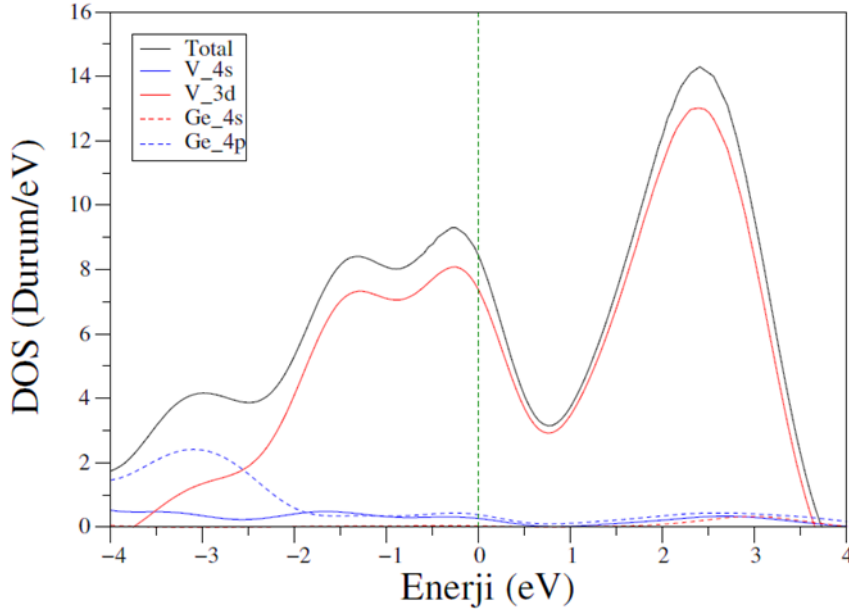
Şekil 3 ve Şekil 4 birlikte incelendiğinde, spin-orbit etkileşiminin V_3Ge 'nin elektronik bant yapısı üzerine neredeyse hiç etki etmediği görülmektedir. Bunun nedeni spin-orbit etkisinin daha çok ağır atomlarda kendini göstermesidir. Ayrıca Şekil 4'de $8 \times 8 \times 8$ ve $32 \times 32 \times 32$ k-noktası ağı kullanılarak, k-noktası ağının farklı kullanılmasının V_3Ge 'nin elektronik bant yapısına etkisi de araştırılmıştır ve iki seçim arasında neredeyse hiç fark olmadığı görülmüştür. Böylece, V_3Ge için yapılan elektronik bant yapısı hesaplamalarında $8 \times 8 \times 8$ k-noktası ağı kullanılmasının yeterli olduğu sonucuna ulaşılmıştır.

Elektronik bant yapısı grafikleri neticesinde ortaya çıkan enerji bantlarının analizini daha ayrıntılı yapmak adına elektron durum yoğunluğu grafikleri spin-orbit etkileşimi hesaba katılmadan ve spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak sırasıyla Şekil 5 ve Şekil 6 ile gösterilmiştir. Elektronik durum yoğunluğu grafikleri; elde edilen enerji bantlarının, V_3Ge kristalini oluşturan atomların hangi orbitallerinden kaynaklandığına dair fikir sahibi olmamıza yardımcı olacaktır. Elektronik durum yoğunlukları grafiklerinde yer alan 0 eV değerindeki dikey kesikli çizgi Fermi seviyesini göstermektedir. Grafikler incelendiğinde -4 eV ile -2.5 eV enerji aralığında kalan bölgede oluşan pike en büyük katkı Ge atomunun 4p orbitalinden gelmektedir. Bu pikin oluşumuna diğer katkılar ise V atomunun 3d orbitali ve az miktarda da olsa V atomunun 4s orbitali tarafından sağlanmaktadır. -2.2 eV ile yaklaşık -0.3 eV değerleri arasında ikili bir pik yapısı gözlenmiştir. -0.5 eV değerinde oluşan pik Fermi enerjisi seviyesi altında bulunan ve en yüksek durum yoğunluğuna sahip piktir. Yaklaşık -1.5 eV ve -0.5 eV değerindeki piklerin oluşumlarında en büyük katkı V atomunun 3d orbitalinden gelmektedir. Bu piklerin oluşumuna diğer katkılar ise az da olsa sırasıyla Ge atomu 4p ve V atomu 4s orbitallerinden gelmektedir. Fermi enerjisi seviyesi altındaki piklerin oluşumunda çok etkin rol oynayan V atomu 3d orbitalleri, fermi enerjisi seviyesi üzerinde oluşan piklere de oldukça yüksek katkı sağlamışlardır. Şekil 5 ve Şekil 6 bütünsel olarak ele alındığında; tüm piklerin oluşumunda en etkin rolü üstlenen V atomu 3d orbitali, toplam durum yoğunluğuna bu orbitale kıyasla daha az miktarda katkı sağlayan Ge atomu 4p orbitali ve V atomu 4s orbitali dışında diğer atom orbitallerinin katkı seviyelerinin oldukça düşük olduğu sonucuna varılmıştır. Bu çalışmanın ana unsurlarından olan V_3Ge bileşiğinin süperiletkenlik mekanizmasının araştırılmasında BCS teorisine göre Fermi seviyesi civarındaki elektron durum yoğunluğu $N(E_F)$ oldukça önemli bir yer tutar. Çünkü bahse konu teori Cooper çiftlerinin oluşumuna Fermi enerjisi seviyesi civarındaki elektronların neden olduğunu belirtir. Fermi enerjisi civarında elde edilen elektronik durum yoğunluğu değeri ($N(E_F)$) spin-orbit etkileşimi hesaba katılmadan yaklaşık olarak 8.268 Durum/eV, spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak ise 8.275 Durum/eV olarak hesaplanmıştır. Bu durum yoğunluğunun oluşumuna en büyük katkı görüldüğü gibi yaklaşık %87 ile V atomu 3d orbitallerinden gelmektedir.



Şekil 5. V_3Ge kristalinin spin-orbit etkileşimi hesaba katılmadan elde edilen elektronik durum yoğunluğu grafiği. Fermi seviyesi 0 eV olarak alınmıştır.

Figure 5. Electronic density of states graph of the V_3Ge crystal obtained without including the spin-orbit interaction. The Fermi level is taken as 0 eV.



Şekil 6. V_3Ge kristalinin spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak elde edilen elektronik durum yoğunluğu grafiği. Fermi seviyesi 0 eV olarak alınmıştır.

Figure 6. Electronic density of states graph of the V_3Ge crystal obtained by including the spin-orbit interaction. The Fermi level is taken as 0 eV.

3.3. V_3Ge kristalinin elastik ve mekanik özellikleri

3.3. Elastic and mechanical properties of V_3Ge crystal

Süperiletken malzemelerin elastik ve mekanik özelliklerinin incelenmesi gerek bu malzemelerin kullanım alanlarının belirlenmesinde gerekse süperiletkenlik mekanizmasının teorik olarak araştırılmasında oldukça etkin bir rol oynar. Kristalin elastik özellikleri ile fonon spektrumu arasındaki ilişki göz önüne alındığında, kristalin süperiletkenlik mekanizmasının kristalin elastik özellikleri ile de alakalı olabileceğine kanaat getirilebilir. Nitekim BCS teorisine göre elektron-fonon etkileşimi süperiletkenlik mekanizmasının belirlenmesinde büyük önem taşımaktadır. Elastik sabitler (basit kübik örgü için C_{11} , C_{12} , C_{44}) kullanılarak bileşiklerin kullanım alanlarının belirlenmesinde faydalı veriler sunan parametreler (sertlik, mekanik kararlılık vb.) elde edilmektedir. Bu çalışmada bu sabitlerin hesaplanması, spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak ve spin-orbit etkileşimi hesaba katılmadan ayrı ayrı gerinim-gerilme (stress-strain) metodu kullanılarak yapılmıştır. V_3Ge kristali için hesaplanan elastik sabitler ile literatürde daha önce yer alan teorik bir çalışmadan elde edilmiş sonuçlar (Chihı vd., 2012) Tablo 2 ile gösterilmiştir.

Tablo 2. V_3Ge kristali için hesaplanan elastik sabitler (GPa), bulk modülü B_H (GPa), kayma modülü G_H (GPa), young modülü E_H (GPa), G_H/B_H oranı ve poisson oranı (σ).

Table 2. The elastic constants (in GPa), bulk modulus B_H (in GPa), shear modulus G_H (in GPa), young modulus E_H (in GPa), G_H/B_H ratio and Poisson's ratio (σ).

	Degauss	K-Point	C_{11}	C_{12}	C_{44}	B_H	G_H	E_H	G_H/B_H	σ
Bu Çalışma (SOE'siz**)	0.02	6x6x6	269.786	141.011	63.312	183.936	63.740	171.419	0.347	0.345
Bu Çalışma (SOE'siz**)	0.05	6x6x6	313.095	119.900	72.933	184.299	81.627	213.377	0.443	0.307
Bu Çalışma (SOE'siz**)	0.05	12x12x12	313.671	120.086	72.836	184.614	81.629	213.428	0.442	0.307
Bu Çalışma (SOE'siz**)	0.05	16x16x16	313.707	120.100	72.829	184.636	81.628	213.428	0.442	0.307
Bu Çalışma (SOE'li*)	0.05	12x12x12	313.144	119.751	72.540	184.216	81.398	212.843	0.442	0.307
Teorik (Chihı vd., 2012)			220.51	153.55	21.23	175.87	26.13	94.45	0.148	0.410

Bu Çalışma (SOE'li*), Hesaplamalara spin-orbit etkileşimi dahil edilmiştir.

Bu Çalışma (SOE'siz**), Hesaplamalarda spin-orbit etkileşimi hariç tutulmuştur.

Kübik yapıda bulunan kristal bir malzemenin Born kriterlerini (Born & Huang, 1996) sağlaması halinde mekanik olarak kararlı olduğu sonucuna varılabilir. Bu kriterler;

$$C_{11}>0; C_{11}-C_{12}>0; C_{44}>0; C_{11}+2C_{12} > 0 \quad (3)$$

şeklinde dir. Tablo 2'deki değerler incelendiğinde bu koşulların elde etmiş olduğumuz veriler ile sağlandığı açıkça görülmekte ve V_3Ge kristalinin mekanik olarak kararlı olduğu sonucuna varılmaktadır. Tablo 2'de açıkça görülmektedir ki V_3Ge kristali için degauss=0.05 ve k-noktası ağının ise (12x12x12) seçilmesi halinde optimum elastik sabiti değerlerine ulaşılabilir. Elastik sabitlerin elde edilmesinin ardından müteakip B_H ve G_H parametreleri Voigt-Reuss-Hill (VRH) metodu (Voigt, 1928; Reuss, 1929) ile hesaplanabilir. B_H değeri Voigt ve Reuss tarafından aynı şekilde belirlenebilirken, G_H değerinin iki farklı hesaplama yöntemi mevcuttur. Voigt ve Reuss tarafından belirlenen B_H ve G_H denklemleri (Voigt, 1928; Reuss, 1929; Hill, 1952):

$$B_V = B_R = \frac{1}{3}(C_{11} + 2C_{12}) \quad (4)$$

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

$$G_R = \frac{5(C_{11}-C_{12})C_{44}}{4C_{44}+3(C_{11}-C_{12})} \quad (6)$$

değerlerinin ortalamaları kullanılarak;

$$B_H = (B_V + B_R) / 2 \quad (7)$$

$$G_H = (G_V + G_R) / 2 \quad (8)$$

şeklinde hesaplanmaktadır ve elde edilen değerler hacim modülü (B_H) ile kayma modülü (G_H) olarak nitelendirilirler. Tablo 2 ile belirtilen değerlere bakıldığında, daha önce Murnaghan denklemi ile elde edilen hacim modülü (B_0) değerinin (bakınız Tablo 1), elastik sabitler yardımı ile hesaplanan B_H değeri ile uyumlu olduğu gözlenebilir. Bu uyum yapılan hesaplamaların doğruluğunu kanıtlar niteliktedir. Yapılan hesaplamalar ve elde edilen en doğru sonuçlar için en uygun degauss değeri 0.05 ve k-noktası ağı ise (12x12x12) olarak belirlenmiştir. Bu değerler ile spin-orbit etkisi de hesaba katılarak yapılan elastik sabiti hesaplamalarından elde edilen sonuçların da diğer sonuçlarla neredeyse aynı olduğu ve spin-orbit etkisinin elastik özellikler üzerinde de neredeyse hiçbir değişiklik oluşturmadığı sonucuna ulaşılmıştır. Elastik modüllerin elde edilmesini müteakip Young modülü (E) ve Poisson oranı (σ) hesaplamaları yapılmalıdır. Bir madde üzerinde boyuna deformasyona boyuna gerilmenin oranı olarak belirtilen Young modülü değeri optimum sonuca ulaşılan 0.05 degauss değeri ve (12x12x12) k-noktası ağı için spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak 212.843 GPa ve spin-orbit etkileşimi hesaba katılmadan 213.428 GPa olarak hesaplanmıştır. Poisson etkisini ölçmekte kullanılan poisson oranı, tek eksen üzerinden uygulanan bir basınç altında bir malzemenin yanal geriliminin aksel gerinime oranının negatifine eşittir. Bu oran malzemelerin davranışını tahmin etmek ve bu malzemeler kullanılarak yapılacak olan tasarımlar açısından oldukça önemlidir. Bu oranın -0.5 ve +1 arasındaki değerleri malzemenin kararlı yapıda olduğu değer aralığıdır. Tablo 2'de V_3Ge için hesaplanmış olan Poisson oranı değerleri göz önünde bulundurulduğunda kayma gerilimi durumunda bu materyalin kararlı yapıda olduğu söylenebilir.

Yine Tablo 2'de sunulmuş olan bir diğer parametre olan G_H/B_H ise malzemenin sünek/kırılğan yapıda olup olmadığı hakkında bilgi verir. Malzemenin sünek/kırılğan doğası Poisson, G_H/B_H ve Cauchy basıncından ($C_{12}-C_{44}$) tahmin edilebilmektedir. Poisson oranı 0.26'dan büyük, G_H/B_H oranı 0.5'ten küçük ve Cauchy basıncı ($C_{12}-C_{44}$) pozitif ise malzemenin sünek özellik gösteren bir malzeme olduğu söylenebilir (Tahsin vd., 2023). Bu değerlerin aksine bir durumda malzemenin kırılğan yapıya sahip bir malzeme olması beklenir. Cauchy basıncının negatif değer alması malzemenin kovalent karakterli ve kırılğan, pozitif bir değer alması ise metalik karakterli ve sünek bir yapıda olduğunu gösterir. Dolayısıyla yukarıda anlatılan tüm kriterler ve Tablo 2'de sunulan sonuçlar kullanılarak V_3Ge bileşiğinin metalik yapıda ve sünek bir malzeme olduğu bulunmuştur.

Öz ısı, erime sıcaklığı ve elastik sabitler ile ilgili temel bir fiziksel özellik olan debye sıcaklığı; katılarda, düşük ve yüksek sıcaklık bölgelerini ayırmak için kullanılır. Bu sıcaklık değerinin altındaki fononlar için dalga boyları büyük, üzerindeki fononlar için ise dalga boyları küçüktür. Debye sıcaklığı;

$$\theta_D = \frac{h}{k} \left[\frac{3n}{4\pi} \left(\frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{\frac{1}{3}} V_M \quad (9)$$

denklemleri kullanılarak bulunabilir. Burada belirtilen ortalama ses hızı değeri (V_M);

$$V_M = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{2}{V_T^3} + \frac{1}{V_L^3} \right) \right]^{-\frac{1}{4}} \quad (10)$$

denklemleri ile hesaplanabilir. Bu denklemde V_T enine ve V_L ise boyuna dalga hızlarını simgeler ve bu hızlar aşağıdaki denklemlerle bulunabilir.

$$V_T = \sqrt{\frac{G}{\rho}} \quad (11)$$

$$V_L = \sqrt{\frac{4B+3G}{3\rho}} \quad (12)$$

$V_3\text{Ge}$ kristali için spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak ve spin-orbit etkileşimi hesaba katılmadan elde edilen dalga hızları (V_L , V_T , V_M) ve debye sıcaklık (θ_D) değerleri Tablo 3 ile verilmiştir. Tablodan görüldüğü gibi 2021 ve 2022 yıllarında $V_3\text{Ge}$ bileşiği için yapılan deneysel çalışmalarda Debye sıcaklıkları sırasıyla 390 K ve 430 K olarak ölçülmüştür (Surikov vd., 2021; Ahmed vd., 2022). Bu deneysel sonuçlar arasındaki fark ele alındığında bizim hesapladığımız θ_D değerlerinin de kabul edilebilir sınırlar içinde olduğu görülmektedir.

Tablo 3. $V_3\text{Ge}$ kristali için hesaplanan elastik dalga hızları (V_L , V_T , V_M) ve debye sıcaklık (θ_D) değerleri.

Table 3. The elastic wave velocities constants (V_L , V_T , V_M) and debye temperature values calculated for $V_3\text{Ge}$ crystal.

	Degauss	K-Point	V_L (m/s)	V_M (m/s)	V_T (m/s)	θ_D (K)
Bu Çalışma (SOE'siz**)	0.02	6x6x6	6253.318	5171.66	3044.407	426.54
Bu Çalışma (SOE'siz**)	0.05	6x6x6	6525.288	5174.00	3443.367	480.23
Bu Çalışma (SOE'siz**)	0.05	12x12x12	6528.827	5178.44	3443.402	480.25
Bu Çalışma (SOE'siz**)	0.05	16x16x16	6529.046	5178.74	3443.375	480.25
Bu Çalışma (SOE'li*)	0.05	12x12x12	6524.872	5175.94	3440.592	479.68
Deneysel (Ahmed vd., 2022)						430

Bu Çalışma (SOE'li*), Hesaplamalara spin-orbit etkileşimi dahil edilmiştir.

Bu Çalışma (SOE'siz**), Hesaplamalarda spin-orbit etkileşimi hariç tutulmuştur.

Sonuç olarak elde edilen tüm bu verilere tekrar bakılacak olursa, $V_3\text{Ge}$ bileşiğinin sünek ve metalik bir karakterde olduğu söylenebilir. Bu özelliği ile $V_3\text{Ge}$ kolay şekil alabileceği için endüstriyel alanda oldukça geniş bir kullanım alanına sahip olabilecek uygun bir malzemedir.

3.4. $V_3\text{Ge}$ kristalinin fonon özellikleri

3.4. Phonon properties of $V_3\text{Ge}$ crystal

$V_3\text{Ge}$ bileşiğinin Γ noktasındaki optik fonon modları O_h nokta grup simetrisine göre;

$$\Gamma(O_h) = T_{1g} + T_{2g} + 2T_{1u} + 2T_{2u} + E_g + A_{2g} \quad (13)$$

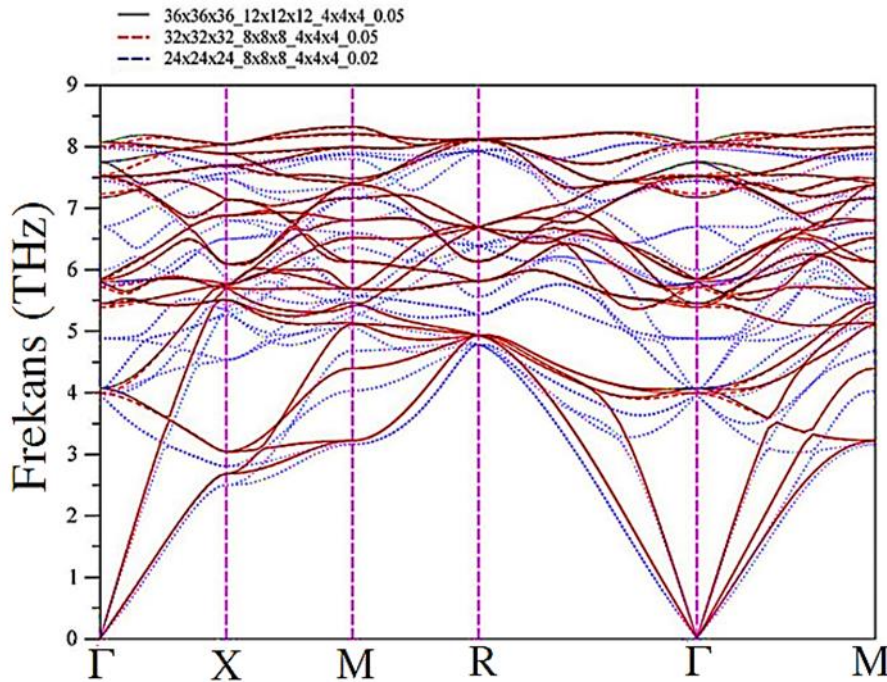
olarak ifade edilebilir. Burada A tek katlı, E çift katlı ve T üç katlı fonon modlarına karşılık gelmektedirler. T_{1u} fonon modu infrared aktif, E_g ve T_{2g} fonon modları raman aktif ve diğer modlar ise pasif modlar olarak sınıflandırılmışlardır. V_3Ge bileşiği için Γ noktasında hesaplanan optik modların frekansları (ν), aktif ve pasif fonon modları ve bu modların oluşumlarına katkı sunan atom titreşimlerinin özkarakterleri Tablo 4 ile sunulmuştur.

Tablo 4. V_3Ge bileşiği için Γ noktasında sırasıyla spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak ve hariç tutularak (parantez içindeki veriler) elde edilen optik modların frekansları (ν), aktif ve pasif fonon modları ve bu modların oluşumlarına katkı sunan atom titreşimlerinin özkarakterleri.

Table 4. Frequencies of optical modes (ν), active and passive phonon modes and eigencharacters of the atomic vibrations that contribute to the formation of the modes obtained by including and excluding (data in the parenthesis) the spin-orbit interaction at the Γ point for V_3Ge compound.

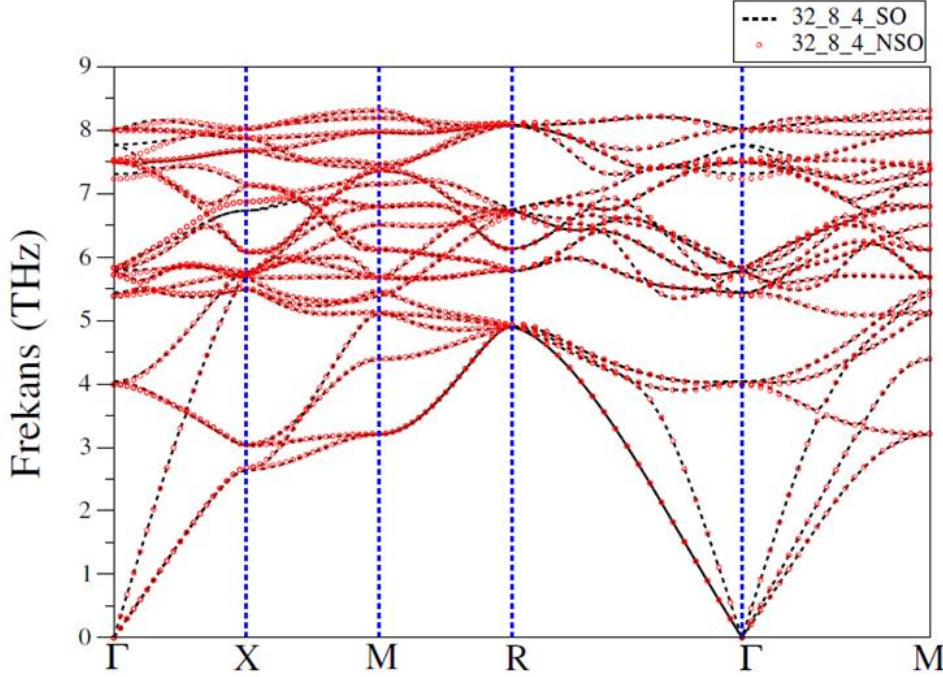
Fonon modu	ν (THz)	Aktif/Pasif	Özkarakter
T_{1g}	5.434 (5.386)	Pasif	V
T_{2g}	5.789 (5.718)	Raman Aktif	V
T_{1u}	5.822 (5.831)	Infrared Aktif	V + Ge
T_{2u}	4.038 (3.990)	Pasif	V + Ge
T_{1u}	7.492 (7.507)	Infrared Aktif	V + Ge
E_g	7.769 (7.528)	Raman Aktif	V
T_{2u}	8.017 (7.999)	Pasif	V + Ge
A_{2g}	7.306 (7.228)	Pasif	V

Tablo 4'te sunulan veriler ışığında Γ noktasındaki optik modlarının oluşumunda en etkin rolü V atomlarının oynadığı görülmektedir. Gerek spin-orbit etkileşimi dahil edilerek gerekse spin-orbit etkileşimi hariç tutularak elde edilen hesaplamalarda T_{1g} , T_{2g} , E_g ve A_{2g} modlarının oluşumlarında yalnızca V atomları titreşimlerinin etkin olduğu, T_{1u} ve T_{2u} fonon modları oluşumlarında ise V ve Ge atomlarının birlikte katkı sağladıkları görülmüştür. V_3Ge bileşiğinin ilkel birim hücresinde 8 adet atom bulunmaktadır. Bu yüzden fonon spektrumunda 24 tane fonon modu vardır. Bu modların 3'ü akustik ve 21'i ise optik moddur. A15 tipi kristalleşen ve basit kübik kristal yapıda bulunan V_3Ge bileşiği için yüksek simetri yönleri boyunca spin-orbit etkileşimi hesaba katılmaksızın elde edilen fonon dağılımı grafiği Şekil 7 ile gösterilmiştir.



Şekil 7. V_3Ge kristalinin spin-orbit etkileşimi hesaba katılmadan elde edilen fonon dağılımı grafiği.
Figure 7. Phonon dispersion graph of the V_3Ge crystal obtained without the spin-orbit interaction.

Farklı degauss değerleri ve farklı k-noktası ağları seçilerek yapılan hesaplamalarda degauss değeri 0.02 ve k-noktası ağları (24x24x24_8x8x8) seçildiğinde elde edilen sonuçların istenilen düzeyde olmadığı gözlemlenmiştir. V_3Ge bileşiğinin fonon dağılım grafiği için optimum değere, degauss 0.05 ve k-noktası ağları olarak ise (32x32x32_8x8x8) kullanılarak varılabileceği gözlenmiştir. Bu ideal degauss ve k-noktası ağı değerleri kullanılarak, spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak ve spin-orbit etkisi göz önünde bulundurulmadan elde edilen fonon dağılım grafikleri Şekil 8 ile tek bir çatı altında ortaya konmuştur.

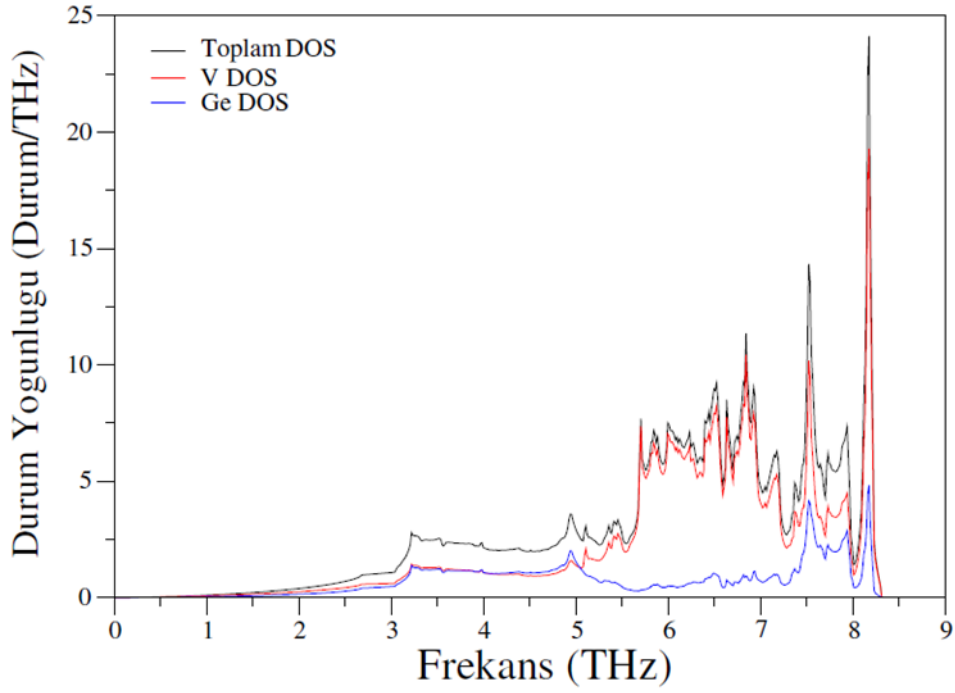


Şekil 8. V_3Ge kristalinin spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak (kesikli çizgiler) ve spin-orbit etkisi göz önünde bulundurulmadan (kırmızı yuvarlaklar) elde edilen fonon dağılımı grafiği.

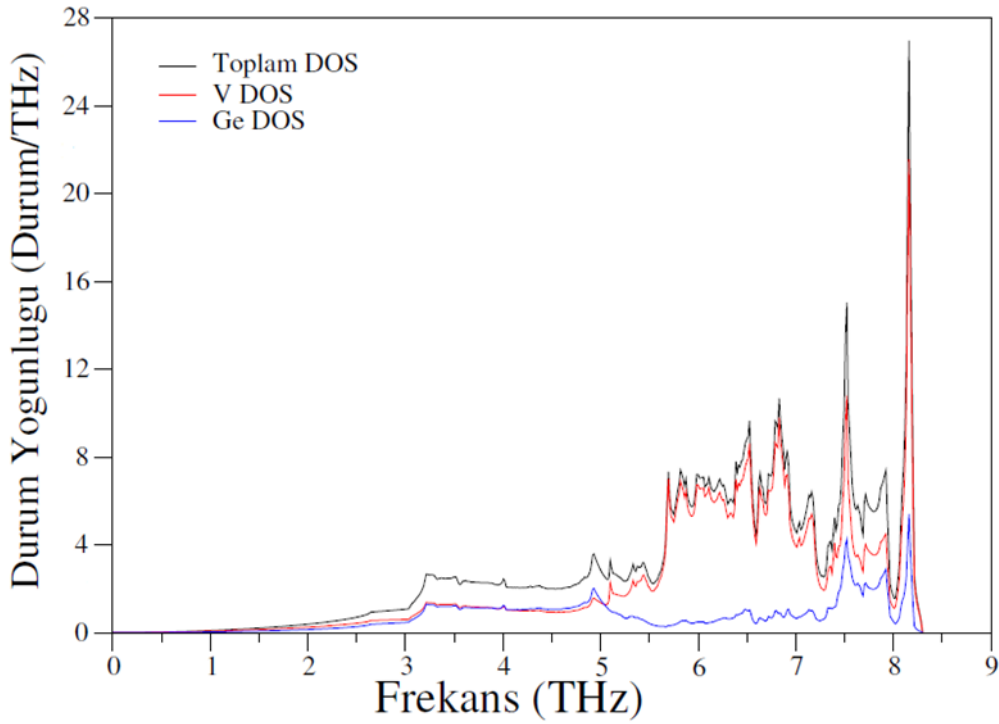
Figure 8. Phonon distribution graph of the V_3Ge crystal, including the spin-orbit interaction (dashed lines) and without considering the spin-orbit effect (red circles).

Fonon spektrumunun kimi bölgelerinde simetri kaynaklı fonon modlarının çakışması neticesinde 24 adet fonon modunda azalmalar meydana gelmiştir. V_3Ge bileşiği içerisinde V atomları sayısal olarak fazla olmalarından dolayı spektrumun oluşumunda çok etkin bir rol oynamışlardır. Bu yüzden V ve Ge atomları arasındaki büyük kütle farkına karşın fonon spektrumunda boşluk bölgesi yoktur. Şekil 8’de göze çarpan bir diğer husus ise V_3Ge bileşiğinin yalnızca pozitif frekanslara sahip olmasıdır. Bu gözlem V_3Ge kristalinin dinamik açıdan kararlı olduğunu kanıtlamaktadır. V_3Ge kristalinin fonon özelliklerinin ayrıntılı bir şekilde incelenebilmesi için Şekil 7 ve Şekil 8 ile belirtilen fonon dağılımı grafiklerinin yanı sıra bu grafikler ile birlikte ele alınması gereken ve Şekil 9 ile Şekil 10’da gösterimi sunulan sırasıyla spin-orbit etkisi hesaba katılmadan ve spin-orbit etkisi hesaba katılarak elde edilen fonon durum yoğunluğu grafikleri de oldukça önem arz etmektedir.

Şekil 9 ve Şekil 10’da toplam fonon durum yoğunlukları ile birlikte V ve Ge atomlarının katkılarını da içeren kısmi fonon durum yoğunlukları da ele alınmıştır. Bu grafikler, fonon modlarının hangi atomların titreşimlerinden kaynaklandığı konusunda yol gösterici niteliktedir. V_3Ge kristaline ait fonon durum yoğunluğu grafikleri incelendiğinde 0 ile 5 THz arasındaki fonon modlarının oluşumunda V ve Ge atomlarının birlikte katkı sağladıkları, 5 THz ile 7.4 THz arasındaki modların oluşumunda ise büyük oranda V atomlarının katkı verdikleri sonucuna varılmıştır. 7.4 THz ile 8 THz aralığında V atomlarından gelen katkının baskın olması ile birlikte Ge atomlarından da katkı geldiği, 8 THz üzerindeki optik fononların oluşumunda ise V atomlarının titreşimlerinin çok baskın olduğu görülmektedir. Genel kanı en yüksek frekans değerine sahip optik fonon modların oluşumunda kütlesi düşük olan atomların etkin rol oynaması yönündedir. V_3Ge kristalinde atomlar arası kütle farkının büyük olmasına rağmen V atomlarının arasındaki bağın çok güçlü olması nedeniyle bu genel kanı gerçekleşmemiştir.



Şekil 9. V_3Ge kristalinin spin-orbit etkileşimi hesaba katılmadan elde edilen fonon durum yoğunluğu grafiği.
Figure 9. Phonon density of states graph of the V_3Ge crystal obtained without the spin-orbit interaction.

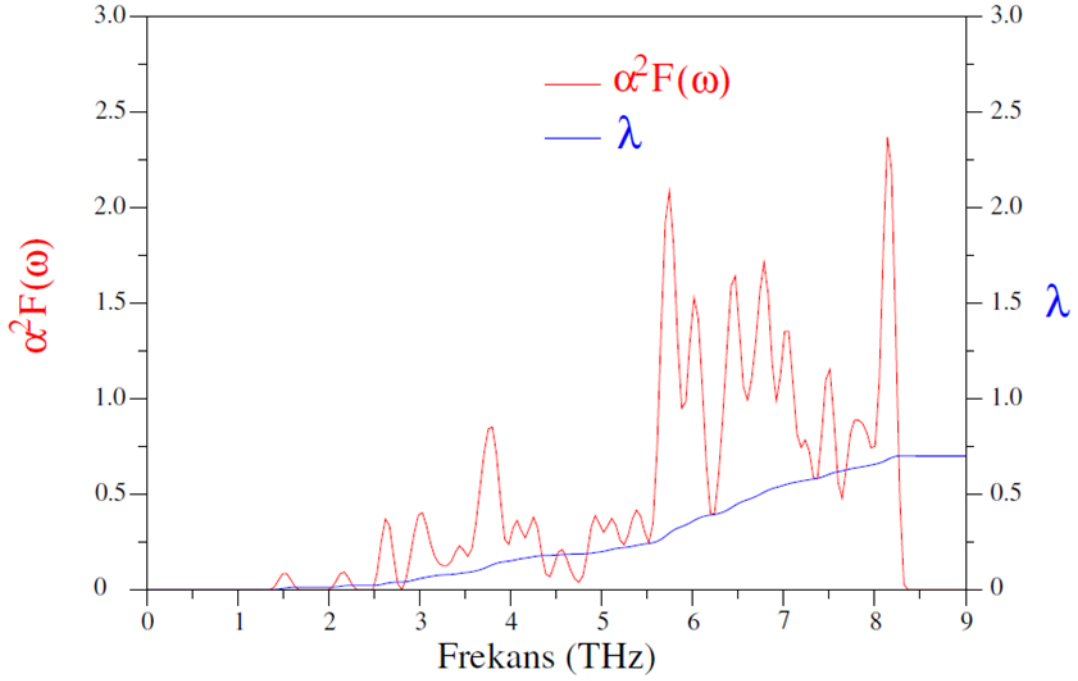


Şekil 10. V_3Ge kristalinin spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak elde edilen fonon durum yoğunluğu grafiği.
Figure 10. Phonon density of states graph of the V_3Ge crystal obtained by including the spin-orbit interaction.

3.5. V_3Ge kristalinin süperiletkenlik özellikleri

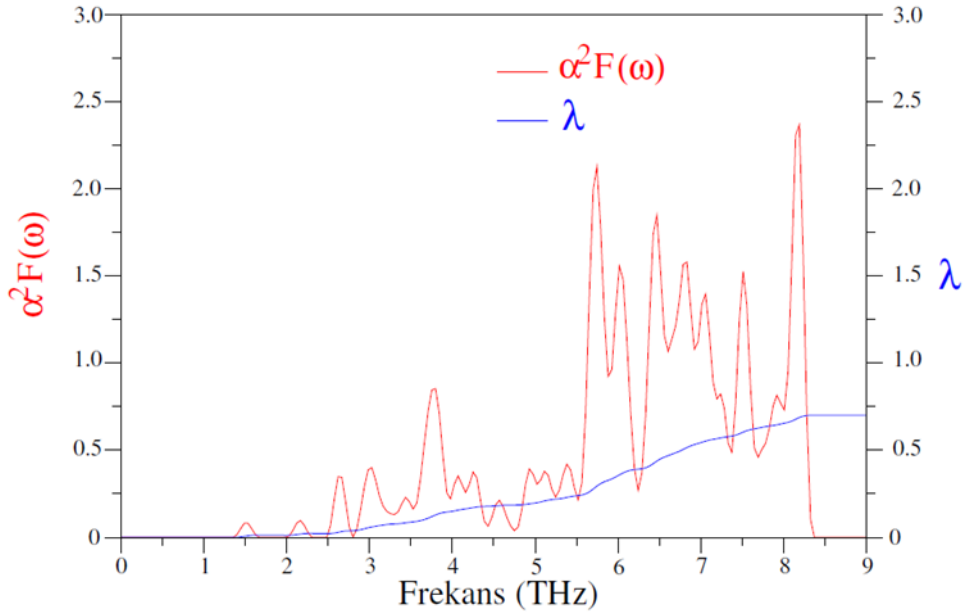
3.5. Superconductivity properties of V_3Ge crystal

V_3Ge bileşiğinin süperiletkenlik mekanizmasına elektron-fonon etkileşiminin etkisini analiz edebilmek adına spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak ve spin-orbit etkileşimi hesaba katılmadan sırasıyla Şekil 11 ve Şekil 12 ile Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) ve elektron-fonon etkileşim parametresinin (λ) frekansla değişimi gösterilmiştir.



Şekil 11. V_3Ge kristali için spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak elde edilen Eliashberg spektral fonksiyonu ve elektron-fonon etkileşim parametresinin frekansla değişimi.

Figure 11. Variation of Eliashberg spectral function and electron-phonon interaction parameter with frequency, obtained by including spin-orbit interaction for V_3Ge crystal.



Şekil 12. V_3Ge kristali için spin-orbit etkileşimi hesaba katılmadan elde edilen Eliashberg spektral fonksiyonu ve elektron-fonon etkileşim parametresinin frekansla değişimi.

Figure 12. Variation of Eliashberg spectral function and electron-phonon interaction parameter with frequency, obtained without spin-orbit interaction for V_3Ge crystal.

Şekil 11 ve Şekil 12 ile gösterime sunulan grafiklere bakıldığında V_3Ge kristali için elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), hem spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak hem de spin-orbit etkisi göz ardı edilerek yapılan hesaplamalarda 0.699 olarak elde edilmiştir. Elde edilen bu değer elektron-fonon etkileşiminin oldukça güçlü olduğunu göstermektedir. 5.5 THz ile 8.3 THz arasında görülen λ değerindeki hızlı artıştan anlaşılacağı üzere bu parametreye en büyük katkı bu aralıktaki fonon modlarından gelmiştir. Şekil 11 ve Şekil 12’de açıkça görülmektedir ki λ değeri 5.5 THz’deki hızlı yükselişini yaklaşık 8.3 THz değerine kadar ivmesi azalarakta

olsa devam ettirmiştir. 8.3 THz değerinden sonra ise λ değerinin yükselişi durma noktasına gelmiştir. Bu analiz neticesinde elektron-fonon etkileşimine en büyük katkıyı düşük frekanslı fonon modlarının sağladığı ifade edilebilir. Şekil 9 ve Şekil 10 incelendiğinde λ değerine en yüksek katkıyı veren 5.5-8.3 THz frekans aralığındaki fonon modlarının V atomlarından kaynaklandığı gözlemlenebilir. V_3Ge kristalinin fonon özelliklerine ilişkin yapılan tüm bu hesaplamalar ve gözlemler ile V_3Ge kristalinin elektronik özelliklerine ilişkin sonuçlar harmanlandığında, V_3Ge kristalinin süperiletkenlik kaynağının V atomlarının d orbitallerini oluşturan elektronlar ile V atomlarının düşük frekanslarda oluşturdukları fononların etkileşmesi olduğu neticesine varılabilir. Şekil 11 ve Şekil 12’de Eliashberg spektral fonksiyonu yüksek pik yaptığı noktaların, λ değerine en yüksek katkının geldiği 5.5-8.3 THz frekans aralığındaki bölgede olması, belirtilen bölgede elektron-fonon etkileşiminin oldukça güçlü olduğunun bir başka kanıtı olarak gösterilebilir. V_3Ge kristaline ait süperiletkenlik parametreleri Tablo 5 ile sunulmuştur.

Tablo 5. V_3Ge kristali için hesaplanan süperiletkenlik parametreleri ve bu parametrelerin daha önceki deneysel verilerle kıyaslanması

Table 5. Calculated superconductivity parameters for V_3Ge crystal and comparison of these parameters with previous experimental data

	Degauss	μ^*	λ	ω_{ln} (K)	$N(E_F)$ (Durum/eV)	T_C (K)
Bu Çalışma (SOE’li*)	0.05	0.14	0.699	259.718	8.275	6.271
Bu Çalışma (SOE’siz**)	0.05	0.14	0.699	260.419	8.268	6.271
Deneysel (Delaire vd.,2008)		0.13	0.71			6.5
Deneysel (Nettel & Thomas, 1977)				274		6.1
Deneysel (Radousky vd., 1982)		0.168	0.67		14.6	5.8
Deneysel (Skripov & Stepanov, 1984)					10	6.3
Deneysel (Ahmed vd., 2022)		0.13	0.61			6.2

Bu Çalışma (SOE’li*), Hesaplamalara spin-orbit etkileşimi dahil edilmiştir.

Bu Çalışma (SOE’siz**), Hesaplamalarda spin-orbit etkileşimi hariç tutulmuştur.

Fermi seviyesinde elektron durum yoğunluğu spin-orbit etkisi hesaba katılarak 8.275 Durum/eV, spin-orbit etkisi hesaba katılmadan 8.268 Durum/eV değerlerindedir. Logaritmik ortalama fonon frekansı (ω_{ln}) spin-orbit etkileşimli 259.718 K, spin-orbit etkileşimi olmaksızın 260.419 K olarak elde edilmiştir. Elde edilen λ ve ω_{ln} değerleri kullanılarak literatürde Migdal-Eliashberg yaklaşımı (Smidman, 2014; Allen, 1972) olarak nitelendirilen hesaplama yöntemi ile V_3Ge kristalinin süperiletkenlik kritik sıcaklığı (T_C) değerleri elde edilmiştir. T_C değerlerine ilişkin yapılan bu hesaplamalar esnasında Coulomb itme potansiyeli (μ^*) 0.14 olarak seçilmiştir. $\mu^* = 0.14$ değeri için hesaplanan süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı değerleri spin-orbit etkileşmesi hesaba katılarak ve katılmaksızın 6.271 K olarak elde edilmiştir. Elde etmiş olduğumuz bu kritik sıcaklık değeri, V_3Ge için literatürde yer alan deneysel çalışmalarda (Delaire vd., 2008; Nettel & Thomas, 1977; Radousky vd., 1982; Skripov & Stepanov, 1984; Ahmed vd., 2022) ortaya çıkan veriler ile uyum içerisinde.

4. Tartışma ve Sonuçlar

4. Discussion and Conclusions

Bu çalışmada Yoğunluk Fonksiyonel Teorisini baz alan Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı ve *ab-initio* düzlem dalga metodları kullanılarak V_3Ge ’nin yapısal, elektronik, mekanik, fonon ve süperiletkenlik özellikleri ayrıntılı olarak incelenmiştir. Teorik hesaplamalar için QUANTUM ESPRESSO paket programı, değiş-tokuş ve korelasyon etkileşimlerini incelemek için ise Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı kullanılmıştır. V_3Ge bileşiği için hesaplanan örgü sabiti değerleri spin-orbit çiftlenimi hesaba katılarak ve katılmaksızın birbiriyle neredeyse aynı değerde bulunmuş olup, deneysel sonuçlarla da son derece uyumlu bir şekilde elde edilmiştir. Yapısal özellikler kullanılarak hesaplanan elektronik bant yapısı grafiklerinden V_3Ge ’nin metalik bir yapıda olduğu görülmüştür. Elektronik durum yoğunluğu grafiği incelendiğinde $N(E_F)$ değeri spin-orbit etkileşimi hesaba katılmadan yaklaşık olarak 8.268 Durum/eV, spin-orbit etkileşimi hesaba katılarak ise 8.275 Durum/eV olarak elde edilmiştir. Ayrıca $N(E_F)$ değerinin oluşmasına en büyük katkının V atomlarının d orbitallerinden geldiği de yine elektronik durum yoğunluğu grafiklerinden açıkça görülmüştür. V_3Ge için hesaplanan elastik sabitler ele alındığında V_3Ge bileşiğinin A15 tipi kristal yapıda mekanik olarak kararlı olduğu sonucuna ulaşılmıştır. Ayrıca V_3Ge için hesaplanan Poisson oranı (0.26’dan büyük), G_H/B_H oranı (0.5’ten küçük) ve Cauchy basıncı (($C_{12}-C_{44}$) pozitif) ele alındığında malzemenin sünek özellik gösterdiği

bulunmuştur. V_3Ge için yapısal, elastik ve elektronik özelliklerin yanı sıra bu makale kapsamında ilk kez fonon özellikleri de teorik olarak hesaplanmıştır. Hesaplanan fonon dispersiyon grafiğinde hiçbir negatif fonon modunun olmaması, A15 kristal yapıya sahip V_3Ge bileşiğinin dinamik olarak kararlı olduğunu göstermektedir. Son olarak, V_3Ge bileşiğinin süperiletkenlik özellikleri detaylı bir şekilde sunulmuş ve T_c değeri 6.271 K olarak, daha önceki deneysel verilerle son derece uyumlu bir şekilde elde edilmiştir. Makale kapsamında elde edilen en önemli sonuçlardan bir diğeri de spin-orbit çiftlenim etkisinin V_3Ge 'nin incelenen özelliklerinde neredeyse hiçbir değişmeye sebep olmadığına bulunmuş olmasıdır.

Yazar katkısı

Author contribution

Yazarlar hesaplama, literatür taraması, verilerin analizi, makalenin yazımı ve düzenlenmesi ile sonuçların yorumlanması aşamalarına aynı oranda katkı yapmışlardır.

Etik beyanı

Declaration of ethical code

Bu makalenin yazarları, bu çalışmada kullanılan materyal ve yöntemlerin etik kurul izni ve / veya yasal-özel izin gerektirmediğini beyan etmektedir.

Çıkar çatışması beyanı

Conflicts of interest

Yazarlar herhangi bir çıkar çatışması olmadığını beyan eder.

Kaynaklar

References

- Achar, B. N. N., and Barsch, G. R. (1979). Phonon spectra of the A15 compounds V_3Si , V_3Ge and V_3Ga . *Solid State Communications*, 29(8), 563-566. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(79\)90664-1](https://doi.org/10.1016/0038-1098(79)90664-1)
- Ahmed, E., Kobayashi, K., Arakawa, N., Okuba, Y., Sakai, A., Nakatsuji, S., Iyo, A., and Ebihira, T. (2022). Superconducting properties of the A15 structure compound V_3Ge . *Physica C*, 602, 1354140. <https://doi.org/10.1016/j.physc.2022.1354140>
- Allen, P. B. (1972). Neutron spectroscopy of superconductors. *Physical Review B*, 6(7), 2577. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.6.2577>
- Allen, P. B., and 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>
- Arbman, G., and Jarlborg, T. (1978). Trend studies of A15 compounds by self-consistent band calculations. *Solid State Communications*, 26(11), 857-861. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(78\)90759-7](https://doi.org/10.1016/0038-1098(78)90759-7)
- Born, M., & Huang, K. (1996). Dynamical theory of crystal lattices. *Oxford university press*. <https://doi.org/10.1093/oso/9780192670083.001.0001>
- Chihi, T., Fatmi, M., & Ghebouli, M. A. (2012). Ab initio study of some fundamental properties of the M_3X ($M= Cr, V$; $X= Si, Ge$) compounds. *Physica B: Condensed Matter*, 407(17), 3591-3595. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2012.05.032>
- Delaire, O., Lucas, M. S., Munoz, J. A., Kresch, M., and Fultz, B. (2008). Adiabatic Electron-Phonon Interaction and High-Temperature Thermodynamics of A15 Compounds. *Physics Review Letters*, 101, 105504. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.105504>
- Delaire, O. (2010). Studies of high-temperature electron-phonon interactions with inelastic neutron scattering and first-principles computations. *Applied Physics A*, 99, 523-529. <https://doi.org/10.1007/s00339-010-5618-z>
- Dew-Hughes, D. (1975). Superconducting A-15 compounds: A review. *Cryogenics*, 15(8), 435-454. [https://doi.org/10.1016/0011-2275\(75\)90019-3](https://doi.org/10.1016/0011-2275(75)90019-3)

- Dierker, S. B., Merlin, R., Klein, M. V., Webb, G. W., and Fisk, Z. (1983). Raman scattering in V_3Si , V_3Ge , Nb_3Sn , and Nb_3Sb : Damping of the E_g optical phonon by interband electronic excitations. *Physical Review B*, 27, 3577-3591. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.27.3577>
- 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://iopscience.iop.org/article/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://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-648X/aa8f79>
- Hardy, G. F., and Hulm, J. K. (1953). Superconducting Silicides and Germanides. *Phys. Rev.*, 89, 884. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.89.884>
- Hill, R. (1952). The elastic behaviour of a crystalline aggregate. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 65(5), 349.
- James, W. J., & Straumanis, M. E. (1961). Lattice parameter and coefficient of thermal expansion of vanadium. *Zeitschrift für Physikalische Chemie*, 29(1_2), 134-142. https://doi.org/10.1524/zpch.1961.29.1_2.134
- Kodess, B. N., and Butman, L. A. (1982). Electron density distribution in V_3Ge . *Solid State Communications*, 44(3), 421-424. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(82\)90885-7](https://doi.org/10.1016/0038-1098(82)90885-7)
- Klein, B. M., and Lu, Z. W. (2001). Structural instabilities in A15 materials driven by anharmonic phonons: a first-principles study. *Physica B*, 296(1-3), 120-124. [https://doi.org/10.1016/S0921-4526\(00\)00788-2](https://doi.org/10.1016/S0921-4526(00)00788-2)
- Kokalj, A. (1999). XCrySDen—a new program for displaying crystalline structures and electron densities. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 17(3-4), 176-179. [https://doi.org/10.1016/S1093-3263\(99\)00028-5](https://doi.org/10.1016/S1093-3263(99)00028-5)
- Mattheiss, L. F. (1975). APW-LCAO band model for A15 compound. *Phys. Rev. B*, 12, 2161-2180. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.12.2161>
- Menon, C. S. and Philip, J. (1978). Third order elastic constants of V_3Si and V_3Ge . *Solid State Communications*, 26(12), 897-899. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(78\)91247-4](https://doi.org/10.1016/0038-1098(78)91247-4)
- 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>
- Nettel S. J., and Thomas, H. (1977). Electron density of states and superconducting TC in A15-compounds. *Solid State Communications*, 21(7), 683-686. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(77\)90845-6](https://doi.org/10.1016/0038-1098(77)90845-6)
- Papaconstantopoulos, D. A., and Soukoulis, C. M. (1981). The superconducting transition temperature of disordered A-15 compounds. *Physica B+C*, 107(1-3), 265-266 [https://doi.org/10.1016/0378-4363\(81\)90438-1](https://doi.org/10.1016/0378-4363(81)90438-1)
- Perdew, J. P., and Burke, K. (1996). Comparison shopping for a gradient-corrected density functional. *International journal of quantum chemistry*, 57(3), 309-319. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-461X\(1996\)57:3<309::AID-QUA4>3.0.CO;2-1](https://doi.org/10.1002/(SICI)1097-461X(1996)57:3<309::AID-QUA4>3.0.CO;2-1)
- Philip, J. (1980). Grüneisen parameter and thermal expansion of V_3Si and V_3Ge . *J. Phys. Chem. Solids*, 41(5), 461-463. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(80\)90175-4](https://doi.org/10.1016/0022-3697(80)90175-4)
- Radousky, H. B., Jarlborg, T., Knapp, G. S., and Freeman, A. J. (1982). Assessment of theoretical determinations of the electron-phonon coupling parameter λ in metals and intermetallic compounds. *Physical Review B*, 26, 1208-1222. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.26.1208>
- Reuss, A. J. Z. A. M. M. (1929). Calculation of the flow limits of mixed crystals on the basis of the plasticity of monocrystals. *Z. Angew. Math. Mech*, 9, 49-58. <https://doi.org/10.1002/zamm.19290090104>
- Skripov, A. V., and Stepanov, A. P. (1984). Electronic structure of V_3Si and V_3Ge . *Phys. Stat. Sol. (B)*, 126, 557-563. <https://doi.org/10.1002/pssb.2221260215>

- Smidman, M. (2014). *Superconducting and magnetic properties of non-centrosymmetric systems* [Doctoral dissertation, University of Warwick].
- Solleder, T., Essman, U., and Kronmüller, H. (1984). The paramagnetic susceptibility of neutron irradiated V3Ge single crystals. *Physics Letter A*, 105(7), 377-379. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(84\)90286-X](https://doi.org/10.1016/0375-9601(84)90286-X)
- Somekh, R. E., and Evetts, R.E. (1977). The sputtering of high TC A15 Nb3Si and V3Ge. *Solid State Communications*, 24(10), 733-737. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(77\)90086-2](https://doi.org/10.1016/0038-1098(77)90086-2)
- Surikov, Vad. I., Surikov, Val. I., Kuznetsova, Y.V., Semenyuk, N. A., Lyakh, O.V., and Prokudina, N. A. (2021). Electronic specific heat of vanadium compounds at low temperatures. *Russian Physics Journal*, 64, 376-380. <https://doi.org/10.1007/s11182-021-02340-3>
- Tahsin, Ö., ARIKAN, N., and İHSAN, A. (2023). Kübik HfZnO3 Bileşğinin Yapısal, Mekanik ve Termodinamik Özelliklerinin ab Initio Yöntemi ile İncelenmesi. *Afyon Kocatepe Üniversitesi Fen ve Mühendislik Bilimleri Dergisi*, 23(4), 858-864. <https://doi.org/10.35414/akufemubid.1263710>
- Voigt, W. (1928). *Lehrbuch der Kristallphysik*, Verlag und Druck, Von BG Teubner. *Leipzig und Berlin*, 962.