

BaRu₂As₂ Malzemesinin Fiziksel Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi Kullanılarak İncelenmesi

Investigation of Physical Properties of the BaRu₂As₂ by Using Density Functional Theory

Ertuğrul KARACA*

Biyomedikal, Manyetik ve Yarıiletken Malzemeler Araştırma Merkezi (BIMAYAM), Sakarya Üniversitesi, Adapazarı

• Geliş tarihi / Received: 21.12.2018

• Düzeltilerek geliş tarihi / Received in revised form: 01.04.2019

• Kabul tarihi / Accepted: 29.04.2019

Öz

BaRu₂As₂ bileşiğinin yapısal, elektronik, fonon ve süperiletkenlik özellikleri ab initio pseudopotansiyel metodu kullanılarak incelendi. Elektronik hesaplamaların sonucunda, Fermi enerjisi durum yoğunluğu $N(E_F)$ 1.79 durum/eV olarak bulundu ve Fermi enerjisi civarında en büyük katkı Ru 4d ve As 4p orbitallerinden kaynaklandığı gözlemlendi. Bu bileşiğin fonon dağılım eğrilerinin ve fonon durum yoğunluğunun hesaplaması doğrusal tepki metodu kullanılarak yapıldı. Fonon dağılım eğrileri ve fonon durum yoğunluğu sonuçları BaRu₂As₂ bileşiğinin dinamik kararlı olduğunu gösterdi. Ayrıca doğrusal tepki metodu ve Migdal-Eliashberg yaklaşımı kullanılarak BaRu₂As₂ bileşiğinin elektron-fonon matris elemanları hesaplandı. Bu matris elemanları yardımıyla BaRu₂As₂ bileşiği için ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi $\lambda=0.21$ gibi zayıf bir etkileşim olarak bulundu. Bu sonuç incelenen bileşikte elektron-fonon etkileşiminin çok küçük olduğunu göstermektedir. Bu düşük λ değeri incelenen bileşikte 0.1 K değerine kadar geleneksel süperiletkenlik gözlemlenememesini açıklamaktadır.

Anahtar kelimeler: Elektronik Özellikler, Fononlar, Süperiletkenlik, Yoğunluk Fonksiyonel Teori

Abstract

Ab initio pseudopotential calculations have been made to investigate structural, electronic, vibrational, and superconducting properties of BaRu₂As₂. Electronic results show that the calculated density of states at the Fermi level $N(E_F)$ is 1.79 states/eV and $N(E_F)$ is mainly contributed by Ru 4d states and As 4p states. A linear response approach is used to determine phonon dispersion curves and phonon density of states for this compound. The phonon dispersion curves and phonon density of states indicate the optimized structure of BaRu₂As₂ is dynamically stable. Furthermore, the linear response method and the Migdal-Eliashberg approach have been used to calculate electron-phonon matrix elements for BaRu₂As₂. By using these matrix elements, the average electron-phonon coupling parameter is found to be weak strength such as $\lambda=0.21$. This result confirms that very small electron-phonon interaction occurring in this compound. This low value of (λ) explains the absence of conventional superconductivity up to 0.1 K in this compound.

Keywords: Electronic properties, Phonons, Superconductivity, Density Functional Theory

* Ertuğrul KARACA; ertugrulkaraca@sakarya.edu.tr; Tel: (0264) 295 31 73; orcid.org/0000-0003-4451-4989

1. Giriş

ThCr₂Si₂ tipi kristalleşen AT₂X₂ (A = Toprak alkali metal veya Lantanit element, T = Geçiş metali, X = Si, P, Ge, As) bileşikleri çok yoğun bir şekilde deneysel ve teorik olarak çalışılmaktadır (Nagarajan vd., 1981; Sampathkumaran vd., 1986; Ronning vd., 2008; Kim vd., 2012). Bu bileşikler düşük sıcaklıklarda süperiletkenlik (Hull vd., 1981; Jeitschko vd., 1987; Tomioka vd., 2009; Hirai vd., 2010), basınç (Torikachvili vd., 2008; Miclea vd., 2009; Ronning vd., 2009) veya farklı malzemelerle katılanarak (Rotter vd., 2008; Sefat vd., 2008; Jeevan vd., 2008; Shan vd., 2012; Hirai vd., 2012) yüksek sıcaklıklarda süperiletkenlik ve farklı manyetik özelliğe sahip olma (Reehuis vd., 1992) gibi ilginç fiziksel özellikler göstermektedirler. ThCr₂Si₂ tipi süperiletkenler bu karmaşık davranışlarından dolayı basınç altında birinci veya ikinci tür faz geçişi gösterebilirler (Shein ve Ivanovskii, 2009b). LaRu₂P₂ bileşiği için süperiletkenlik geçiş sıcaklığı 4 K olarak gözlenmiştir (Jeitschko vd., 1987). Bu bileşik manyetik element içermediğinden süperiletkenlik durumunda herhangi bir manyetik geçiş gözlenmeyecektir. Bu yüzden Süperiletkenliğin doğasının incelenmesi için oldukça uygun bileşiktir. Bu bileşik ile ilgili son yıllarda elektronik ve süperiletkenlik özelliklerini incelemek için deneysel çalışmalar yapılmış ve bileşiğin süperiletkenlik özelliği gösterdiği doğrulanmıştır (Schaak ve Cava, 2004; Moll vd., 2011; Ying vd., 2010; Razzoli vd., 2012). Ayrıca bu bileşiğin elektronik özellikleri çeşitli teorik çalışmalarla incelenmiştir (Moll vd., 2011; Razzoli vd., 2012). Mine vd. (2008) yapmış oldukları çalışmada BaNi₂P₂ bileşiğinin süperiletken olduğunu kanıtladılar ve bu bileşik için süperiletkenlik geçiş sıcaklığını 3 K olarak belirlediler. Keimes vd. (1997) BaNi₂P₂ bileşiğinin yapısal özelliklerini yapmış oldukları deneysel çalışma ile belirlemişlerdir. Ayrıca BaNi₂P₂ bileşiğinin elektronik özellikleri teorik çalışma ile belirlenmiştir (Shein ve Ivanovskii, 2009b). BaNi₂P₂ bileşiğine çok benzer kristalleşen BaIr₂P₂ ve BaRh₂P₂ bileşikleri için de çalışmalar yapılmıştır (Wurth vd., 1997; Lohken vd., 2002). BaIr₂P₂ ve BaRh₂P₂ bileşiklerinin BaNi₂P₂ bileşiğinden farkları, manyetik Ni bileşeni yerine manyetik olmayan Ir ve Rh atomlarını içermeleridir. BaIr₂P₂ ve BaRh₂P₂ bileşikleri için deneysel olarak yapılan ısı kapasitesi, direnç ve manyetik duygunluk ölçümlerinde süperiletkenlik geçiş sıcaklıkları sırasıyla 2.1 K (Berry vd., 2009) ve 1 K (Hirai vd., 2009) olarak belirlenmiştir. Fujii ve Sato (2009), SrPd₂Ge₂ bileşiği için

yapmış oldukları çalışmada süperiletkenlik geçiş sıcaklığını yaklaşık olarak 3 K olarak bulmuşlardır. SrPd₂Ge₂ bileşiğinin süperiletkenlik özelliklerini belirleyebilmek için birkaç deneysel çalışma daha yapılmıştır (Sung vd., 2011; Wang vd., 2012; Hung vd., 2013; Samuely vd., 2013). Yapılan çalışmalar sonucu SrPd₂Ge₂ bileşiğinin II. tip süperiletken olduğu bulunmuştur (Shein ve Ivanovskii, 2009b; Shein ve Ivanovskii, 2011; Razzoli vd., 2012; Ghebouli vd., 2011; Kittel, 2014). Anand vd., (2013) deneysel olarak SrPd₂As₂ ve CaPd₂As₂ bileşiklerinin yapısal, elektronik, manyetik ve süperiletkenlik özelliklerini incelemişler ve SrPd₂As₂ ve CaPd₂As₂ bileşiklerinin süperiletkenlik geçiş sıcaklıklarını sırasıyla 0.92 K ve 1.27 K olarak belirlemişlerdir. Ayrıca SrPd₂Ge₂, SrPd₂As₂ ve CaPd₂As₂ bileşiklerinin elektronik özelliklerini belirleyebilmek için de teorik çalışmalar da yapılmıştır (Jayalakshmi ve Sundareswari, 2013; Ghebouli vd., 2011; Shein vd., 2014).

BaRu₂As₂ bileşiğinin manyetik, termal ve elektriksel direnç ölçümleri Nath vd., (2009) tarafından deneysel olarak incelenmişler ve BaRu₂As₂ bileşiğinin sıcaklığa karşı direnç davranışının normal metallerin davranışına benzer olduğunu gözlemlemişlerdir. Shein ve Ivanovskii (2009a) SrRu₂As₂, BaRu₂As₂, SrRh₂As₂, BaRh₂As₂ bileşiklerinin yapısal ve elektronik özelliklerini teorik olarak incelenmişlerdir. Ayrıca yine Shein ve Ivanovskii (2010) SrRu₂As₂ ve BaRu₂As₂ bileşiklerinin bant yapısı özelliklerini teorik olarak incelenmişler. ve SrRu₂As₂ ve BaRu₂As₂ bileşiklerinin elektron-fonon etkileşim parametrelerini (λ) hesaplamışlardır. Fakat Shein ve Ivanovskii (2010) yapmış oldukları çalışmada belirttikleri gibi kullandıkları yöntem basit bir yaklaşımdır. Onlar deneysel ve teorik Sommerfeld sabitlerini kullanarak $\gamma^{\text{dency}} = \gamma^{\text{teorik}}(1+\lambda)$ formülünden SrRu₂As₂ ve BaRu₂As₂ süperiletkenleri için λ değerlerini yaklaşık olarak sırasıyla 0.20 ve 0.02 olarak belirlemişlerdir. Bardeen, Cooper ve Schrieffer (BCS) teorisine göre süperiletkenlik elektron-fonon etkileşiminden kaynaklanmaktadır. Elektron-fonon etkileşim parametresini hesaplamının en iyi yolu Eliashberg spektral fonksiyonunu ($\alpha^2F(\omega)$) belirlemektir (Tütüncü vd., 2012; Tütüncü vd., 2010; Bağcı vd., 2010; Liu ve Quong, 1996; Bauer vd., 1998; Baroni vd., 2001; Weber vd., 2012). Çünkü bu fonksiyon elektronlar, fononlar ve onların etkileşiminden gelen katkıyı içermektedir. Şimdiye kadar bu fonksiyon BaRu₂As₂ bileşiği için incelenmemiştir. Bu çalışmada, teorik olarak bu bileşiğin süperiletken olup olmadığını belirleyebilmek amaçlı BaRu₂As₂ bileşiğinin

yapısal, elektronik, fonon ve elektron-fonon özellikleri detaylı olarak incelenmiştir. Bu sebeple Fermi seviyesindeki elektronik durum yoğunluğu ($N(E_F)$), Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) ve elektron-fonon etkileşim parametresi (λ) tayin edilmiştir. Bu parametrelerden yararlanılarak BaRu₂As₂ bileşiğinin süperiletkenlik geçiş sıcaklığı (T_c) belirlenmiştir. süperiletkenlik için elde edilen sonuçlar, mevcut deneysel ve teorik sonuçlarla karşılaştırılmıştır.

2. Hesaplama Metodu

Hesaplamamızda düzlem dalga ve pseudopotansiyel teorilerini temel alan QUANTUM ESPRESSO (Giannozzi vd., 2009) programı ve Perdew vd. (1996) tarafından elde edilmiş Genelleştirilmiş Gradyent Yaklaşımı (GGA) kullanıldı. Elektron-iyon etkileşimleri için Ultrasoft (Vanderbilt, 1990; Rappe vd., 1990) pseudopotansiyeller kullanıldı. Kohn ve Sham (1965) denklemleri Brillouin bölgesi içerisinde bir set olan Monkhorst ve Pack (1976) özel \vec{k} noktaları kullanılarak belirlendi. BaRu₂As₂ bileşiğinin yapısal parametrelerini belirlemek için \vec{k} -noktalar $8 \times 8 \times 8$ alınarak kullanıldı. Elektronik yapı ve elektronik durum yoğunluğu hesaplamaları için $24 \times 24 \times 24$ 'lük \vec{k} -noktalar kullanıldı. Fonon frekansları lineer-tepki metodu (Perdew vd., 1996) kullanılarak hesaplandı. Ayrıca süperiletkenlik özellikleri Migdal (1958) ve Eliashberg (1960) yaklaşımları kullanılarak hesaplandı. Fonon hesaplamaları için indirgenmiş Brillouin bölgesinde $8 \times 8 \times 8$ 8'lik \vec{k} -noktalar kullanılmıştır. Brillouin bölgesinde $4 \times 4 \times 4$ 'lük \vec{q} -noktalar kullanılarak 13 dinamik matris belirlendi.

Elektron-fonon etkileşimleri için matris elemanları

$$g_{(\vec{k}+\vec{q})m;kn}^{\vec{q}j} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}j}}} \langle \Phi_{(\vec{k}+\vec{q})m} | \vec{e}_{\vec{q}j} \vec{\nabla} V^{\text{SCF}}(\vec{q}) | \Phi_{\vec{k}n} \rangle \quad (1)$$

ifadesi ile verilir. Burada M atomik kütleli ifade ederken, $\vec{\nabla} V^{\text{SCF}}(\vec{q})$ ise, \vec{q} dalga vektörlü bir fonondan kaynaklanan atomik yer değiştirmeye göre kararlı etkin potansiyelin türevini ifade etmektedir. Elektron-fonon matris elemanları Denklem 1'den yararlanılarak $\gamma_{\vec{q}j}$ fonon çizgi genişliği hesaplanabilir.

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

Elektron-fonon çiftlenimi,

$$\lambda_{\vec{q}j} = \frac{\gamma_{\vec{q}j}}{\pi N(E_F) \omega_{\vec{q}j}^2} \quad (3)$$

eşitliğinden belirlenebilir. Denklem 3'te bulunan $N(E_F)$, Fermi seviyesi durum yoğunluğunu ifade etmektedir. Elektron-fonon etkileşim parametresi ve fonon genişliği hesaplamalarında fonon spektrumlarında meydana gelen beklenmeyen durumları analiz etmek çok önemlidir. Çünkü bu durum elektron-fonon etkileşimi olduğunun bir göstergesidir. Elektron-fonon etkileşim parametresini elde edebilmek için Eliashberg spektral fonksiyonunu kullanmak uygundur. Bu fonksiyon;

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{1}{2\pi N(E_F)} \sum_{\vec{q}j} \frac{\gamma_{\vec{q}j}}{\hbar\omega_{\vec{q}j}} \delta(\omega - \omega_{\vec{q}j}) \quad (4)$$

eşitliği ile verilir. Ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi ise,

$$\lambda = 2 \int \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega \quad (5)$$

eşitliğinden hesaplanabilir. Süperiletkenlik çalışmalarının ana fikirlerinden birisi elektron-fonon etkileşiminin gücünü belirleyebilmektir. Elektron-fonon etkileşim parametresi hesaplandıktan sonra süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı;

$$T_c = \frac{\omega_{ln}}{1.2} \exp\left(-\frac{1.04(1+\lambda)}{\lambda - \mu^*(1+0.62\lambda)}\right) \quad (6)$$

eşitliğinden hesaplanabilir. Burada ω_{ln} , logaritmik ortalama fonon frekansını ifade etmektedir. Bu ifade;

$$\omega_{ln} = \exp[2\lambda^{-1} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2 F(\omega) \ln\omega] \quad (7)$$

denkleminde hesaplanır. Elektron-fonon etkileşim parametresi elektronik ısı sığası katsayısının (γ) hesaplanması için de kullanılabilir. Bu katsayı aşağıdaki formül ile verilir;

$$\gamma = \frac{1}{3} \pi^2 k_B^2 N(E_F) (1 + \lambda). \quad (8)$$

3. Bulgular ve Tartışma

3.1. BaRu₂As₂ Bileşiğinin Yapısal Özellikleri

BaRu₂As₂ bileşiği için hesaplamalar sonucu elde edilmiş olan kristal yapı Şekil 1a'da ve Enerji-Hacim grafiği Şekil 1b'de verildi. Bu bileşiğin ThCr₂Si₂-tipi hacim merkezli tetragonal yapıda

kristalleştiği bilinmektedir (Nath vd., 2009; Shein ve Ivanovskii, 2009a; Shein ve Ivanovskii, 2010). BaRu₂As₂ kristali BCT örgü üzerine kurulmuş ve uzay grubu I4/mmm olan bir yapıdır. Bu kristal yapıdaki atomların Wyckoff pozisyonları: Ba 2a(0, 0, 0), Ru 4d(0, 1/2, 1/4) ve As 4e(0, 0, z) olarak verilir. Burada z iç parametre olarak isimlendirilir. Bu yüzden bu yapı iki kristal parametresi (a ve c) ve bir iç parametre (z) ile belirlenir. Enerji-Hacim grafiği çizilerek bileşiğin en kararlı olduğu nokta hesaplandı ve bu noktada bileşiğin örgü parametreleri, Bulk modülü (B) ve Bulk modülünün basınca göre birinci türevi (B') aşağıda verilen Murnaghan (1944) eşitliğinden yararlanılarak elde edildi.

$$P = \frac{B_0}{B_0'} \left[\left(\frac{\Omega_0}{\Omega} \right)^{B_0'} - 1 \right] \quad (9)$$

$$E = \frac{\Omega_0 B_0}{B_0'} \left[\frac{1}{B_0'-1} \left(\frac{\Omega}{\Omega_0} \right)^{B_0'-1} + \frac{\Omega}{\Omega_0} \right] - \frac{\Omega_0 B_0}{B_0'-1} + E(\Omega_0) \quad (10)$$

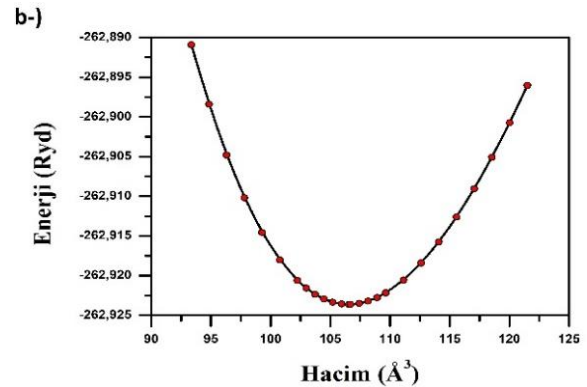
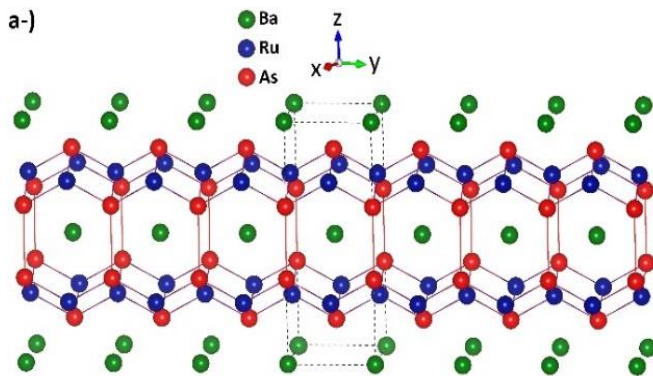
Burada Ω ve B_0 değerleri sırasıyla örgü sabiti ve Bulk modülü değerlerini ifade etmektedir. Bulk modülü kristallerin dayanıklılığının bir ölçüsüdür. Bulk modülü hesaplaması yapılmadan hiçbir

kristal teknolojik uygulamalarda verimli bir şekilde kullanılması beklenmez. Bu grafikten elde edilen örgü parametreleri BaRu₂As₂ bileşiği için $a = b = 4.203 \text{ \AA}$, $c = 12.063 \text{ \AA}$ ve iç parametre değeri kristal koordinatlar cinsinden $z = 0.352$ olarak hesaplandı. Bulunan bu değerlerin daha önceki deneysel sonuçlar olan $a = b = 4.152 \text{ \AA}$ ve $c = 12.250 \text{ \AA}$ (Nath vd., 2009) değerleri ile uyumlu olduğu görülmektedir. BaRu₂As₂ bileşiği için elde edilen Bulk modülü (B) ve Bulk modülün basınca göre birinci türevi (B') değerleri sırasıyla 70.3 GPa ve 3.84 olarak hesaplandı. Bu bileşik için yapılan incelemelerde Bulk modülünün ve Bulk modülünün birinci türevinin literatürde daha önceden verilmediği gözlemlendi.

Tablo 1'de bileşiğin hesaplanan teorik yapısal parametre değerleri ve onlara karşılık gelen önceki deneysel ve teorik değerler verildi. Bunlara ek olarak elektron-fonon etkileşimini farklı şekillerde etkilediği düşünülen bazı mesafeler de hesaplandı. Tablo 1'den görüleceği gibi elde ettiğimiz a ve c değerlerinin daha önceki teorik ve deneysel sonuçlarla uyumlu olduğu görülmektedir. İç parametre (z) değerinin de teorik veri ile uyumludur.

Tablo1. BaRu₂As₂ bileşiği için hesaplanan yapısal değerler ve bu değerlerin daha önceki deneysel ve teorik verilerle kıyaslanması (Tüm uzunluklar Å birimindedir).

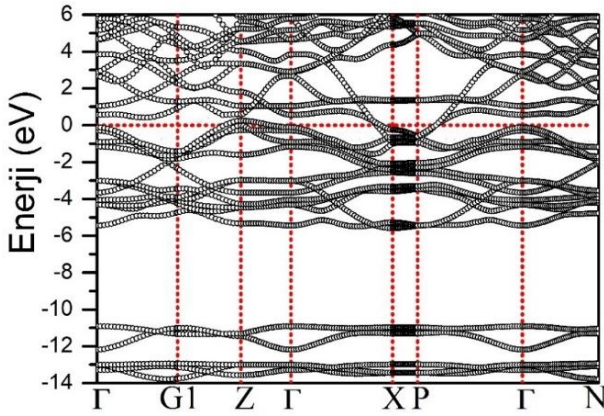
	a	c	z	d _{Ru-Ru}	d _{Ru-As}	d _{As-As}	B(GPa)	B'
Bu Çalışma	4.203	12.063	0.352	2.972	2.434	3.574	70.3	3.84
Deneysel (Nath vd., 2009)	4.152	12.250	0.353					
GGA (Shein ve Ivanovskii, 2009a)	4.193	12.314	0.351	2.966	2.438	3.671		



Şekil 1. BaRu₂As₂ bileşiği için a-) kristal yapının gösterimi b-) hesaplamalar sonucu elde edilen Enerji-Hacim grafiği

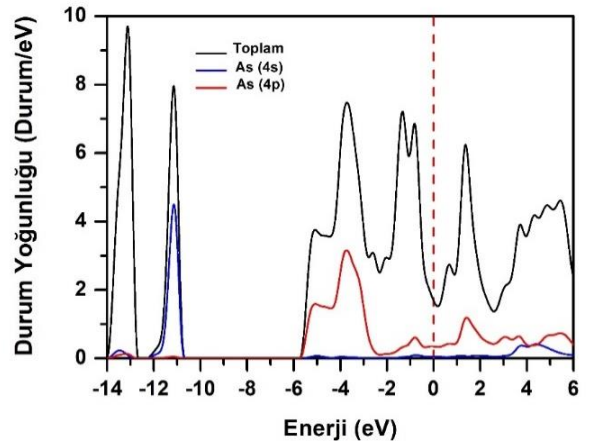
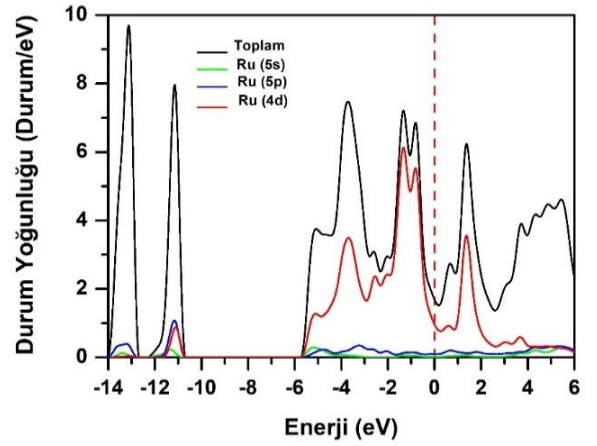
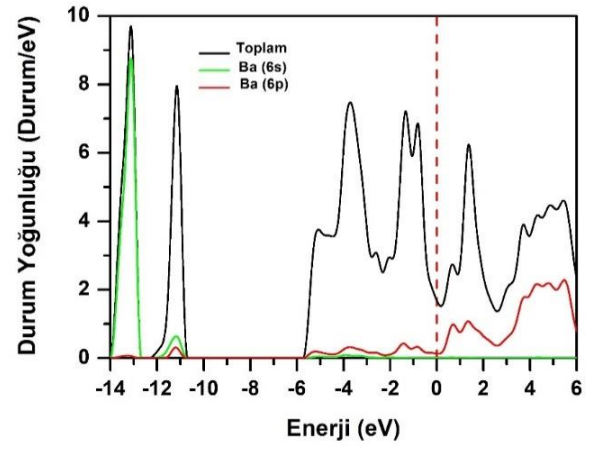
3.2. BaRu₂As₂ Bileşiğinin Elektronik Özellikleri

BaRu₂As₂ bileşiği için elektronik enerji band yapısı Şekil 2.'de görüldüğü gibi elde edildi. Fermi enerjisi sıfır olarak seçildi ve yatay kesikli çizgi ile gösterildi. Elde edilen bulgular daha önce hesaplanmış teorik çalışma ile uyumludur (Shein ve Ivanovskii, 2009a). Şekil 2 detaylı olarak incelendiğinde değerlik ve iletkenlik bandlarının Fermi seviyesini kestiği açık bir şekilde görülmektedir. Bu durum BaRu₂As₂ bileşiğinin metalik bir yapıya sahip olduğunu göstermektedir. Ru-As atomları arası mesafe 2.434 Å olarak hesaplanmıştır ve bu mesafe Ru ve As atomlarının kovalent yarıçapları toplamından (2.45 Å) daha küçüktür. Bu durum Ru ve As atomları arasında güçlü kovalent bağ olduğunu gösterir.



Şekil 2. BaRu₂As₂ bileşiği için yüksek simetri noktaları boyunca elektronik enerji band yapısı. Fermi enerjisi 0 eV olarak alındı.

Şekil 3'te BaRu₂As₂ bileşiği için hesaplamalar sonucu elde edilen enerji durum yoğunluğu ve atomik bazda durum yoğunluğu grafiği verildi. Enerji durum yoğunluğu sonuçları önceki teorik verilerle uyumludur (Shein ve Ivanovskii, 2009a; Shein ve Ivanovskii, 2010). Şekil 3'ten görüldüğü gibi -14.0 eV ile -12.6 eV enerji aralığındaki üç banda en fazla katkı Ba 6s orbitalinden gelmiştir. -12.4 eV ile -10.6 eV enerji aralığındaki iki banda en fazla katkı As 4s orbitalinden gelmiştir. Bu enerji bölgesinde diğer orbitallerden de katkı gelmektedir. Fakat bu katkı çok küçüktür. Bu düşük enerjili valans bandları 4.8 eV değerinde bir enerji ile yüksek valans bölgesinden ayrılmıştır. Yüksek valans bölgesi -5.8 eV değerinden Fermi enerjisi seviyesine kadar uzanmaktadır. -5.8 eV ile -2.2 eV enerji aralığında Ru d orbitali ile As p orbitalleri güçlü bir hibritleşme göstermektedir. Bu durum Ru ile As atomları arasında kovalent bağ olduğunu vurgulamaktadır. -3.7 eV enerji değerinde yoğun bir pik bulunmaktadır.



Şekil 3. BaRu₂As₂ bileşiği için toplam ve kısmi elektronik durum yoğunluğu. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.

Bu pike en büyük katkı Ru 4d orbitali ile As 4p orbitalinin hibritleşmesinden gelmektedir. -2.0 eV ile Fermi enerjisi seviyesine kadar olan bölgede Ru 4d orbitali en büyük katkıyı yapmaktadır. Süperiletkenlik özelliklerini daha detaylı inceleyebilmek için Fermi enerjisi durum yoğunluğu hesaplanmalıdır. Çünkü BCS teorisine göre Cooper çiftleri oluşumu Fermi enerjisi seviyesine yakın olan elektronlardan kaynaklanmaktadır. Fermi enerjisi seviyesine en fazla katkıda bulunan orbital ise Ru 4d olduğu bulundu. Daha

sonra en büyük katkının As 4p orbitalinden kaynaklandığı bulundu. BaRu₂As₂ bileşiğinin elektronik durum yoğunluğuna bakıldığında N(E_F) 1.79 Durum/eV olarak bulundu. N(E_F) değerine Ru ve As atomlarından gelen katkılar sırasıyla %65.1 ve %24.9 olarak elde edildi. Ba atomundan gelen katkı ise %9.9'dur. Bu gözlem [Shein ve Ivanovskii \(2009a\)](#) tarafından yapılan teorik çalışma ile uyumludur. Fermi enerjisi durum yoğunluğuna en büyük katkının Ru 4d orbitalinden kaynaklandığı (%59.1) ve daha sonra en büyük katkının As 4p orbitalinden kaynaklandığı (%21.7) bulundu. Ayrıca N(E_F) değerine tüm atomlardan katkı geldiğinden dolayı BaRu₂As₂ bileşiğinin elektronik yapısının üç boyutlu karakter gösterdiği söylenebilir.

3.3. BaRu₂As₂ Bileşiğinin Titreşim Özellikleri

BaRu₂As₂ bileşiğinin BCS teorisine göre süperiletkenlik özelliklerinin incelenmesi için fonon özelliklerinin incelenmesi gerekir. Titreşim özellikleri tam bir elektron-fonon etkileşim parametresinin hesaplanabilmesi için ölçülmesi gereken en önemli özelliklerden birisidir. BaRu₂As₂ bileşiği için elektron-fonon etkileşimi daha önce teorik veya deneysel olarak çalışılmamıştır. Bu sebepten BaRu₂As₂ bileşiği için teorik olarak fonon yapısı, fonon durum yoğunluğu, Eliashberg spektral fonksiyonu ve elektron-fonon etkileşim parametresi incelendi.

BaRu₂As₂ bileşiği için merkezi-fonon modları D_{4h} (4/mmm) nokta grubu ile tanımlanır. BaRu₂As₂ bileşiği için grup teorie göre Γ noktasındaki optik fonon modları simetrisi Denklem 9'da verilmiş olan eşitlikle tanımlanır.

$$\Gamma = 2E_g + B_{1g} + 2E_u + 2A_{2u} + A_{1g} \quad (11)$$

Burada, E_g , B_{1g} , A_{1g} modları Raman aktif ve E_u , A_{2u} modları Kızıl-ötesi (İnfrared) aktiftir. Dejenere olmuş E modlarında bulunan atomların titreşimleri x-y düzleminindedir. A ve B modlarındaki atomların titreşimleri ise z yönündedir. Tablo 2'de Brillouin merkezi-fonon modlarının frekans değerleri ve elektron-fonon etkileşim parametre değerleri verildi. Elektron-fonon etkileşim hesaplamalarımıza göre elektron-fonon etkileşim parametresi tüm Brillouin merkezi-fonon modlarında çok küçük değere sahiptir. Bu da BaRu₂As₂ bileşiğinde zayıf elektron-fonon etkileşiminin olduğunun bir göstergesidir. Brillouin bölgesi içerisinde hesapladığımız fonon dispersiyon eğrisi ve fonon durum yoğunluğu grafikleri Şekil 4'te verildi. Şekil 4a'da görüldüğü gibi tüm fonon modları pozitif frekanslara sahip olduklarından BaRu₂As₂ bileşiği BCT yapıda dinamik kararlıdır. BaRu₂As₂ bileşiği her bir birim hücresinde beş atom içerdiğinden toplamda on beş adet fonon modu vardır. Bunlardan üçü akustik diğer on iki tanesi ise optik moddur. Fonon dispersiyon eğrisi grafiği incelendiğinde iki ana bölgeye ayrıldığı açıkça görülmektedir. Bu iki bölge 0 ile 5.8 THz arasındaki frekanslarda değişen düşük frekans bölgesi (Low Frequency Region-LFR), 6.4 ile 8.6 THz arasındaki frekanslarda değişen yüksek frekans bölgesidir (High Frequency Region-HFR). LFR bölgesinde üç akustik altı optik mod olmak üzere dokuz fonon modu bulunmaktadır. HFR bölgesinde ise altı optik fonon modu bulunmaktadır. HFR bölgesi LFR bölgesinden 0.6 THz değerinde bir frekans ile ayrılmıştır.

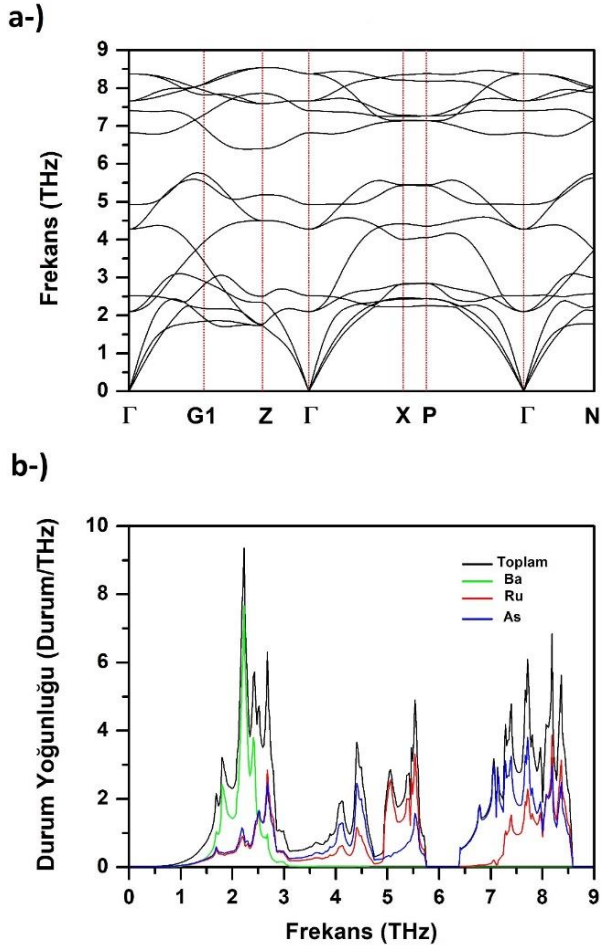
Tablo 2. BaRu₂As₂ bileşiğinin Γ noktasındaki optik modlara ait frekans (THz) ve onlara karşılık gelen elektron-fonon etkileşim parametresi değerleri.

Bileşik	E_u	A_{2u}	E_g	B_{1g}	A_{1g}	A_{2u}	E_u	E_g
BaRu ₂ As ₂ (ν)	2.102	2.523	4.277	4.926	6.822	7.401	7.663	8.376
BaRu ₂ As ₂ (λ)	0.019	0.067	0.089	0.042	0.039	0.005	0.004	0.010

LFR bölgesi incelendiğinde bu bölgedeki akustik modlar ile düşük frekanslı optik modların üst üste bindiği gözükmemektedir. Bu üst üste binmenin sonucunda ısı taşıyan fonon modları saçılmakta ve malzemenin elektrik iletkenliğinde azalma olması beklenmektedir. Bu yüzden BaRu₂As₂ bileşiğinde fononların termal iletkenliğe katkısı azalmış olabilir. Fonon dispersiyon eğrisini daha iyi anlayabilmek için fonon durum yoğunluğu

özellikleri incelendi. Fonon durum yoğunluğu eğrisi Şekil 4b'de gösterildi. Fonon durum yoğunluğuna 0 ile 3.0 THz arasında değişen frekans bölgesinde en büyük katkı Ba atomlarından kaynaklanmaktadır. Bunun sebebi Ba atomlarının kütlelerinin diğer atomların kütlelerinden fazla olmasındandır. Ru ve As atomlarının da bu bölgede önemli katkısı bulunmaktadır. Ayrıca bu bölgede Ru ve As

atomlarının hibritleştiği açık bir şekilde görülmektedir. 3.0 THz değerinden daha yüksek frekans bölgesinde Ba atomundan katkı gelmemektedir. 3.0 ile 5.0 THz arasında kalan bölgede fonon durum yoğunluğuna katkı Ru ve As atomlarının hibritleşmesinden kaynaklanmaktadır HFR bölgesinde de ana katkı Ru ile As atomlarının hibritleşmesinden kaynaklanmaktadır. Bu yüzden bu frekans bölgesindeki titreşimler RuP_4 tetrahedral yapısından kaynaklanmaktadır.

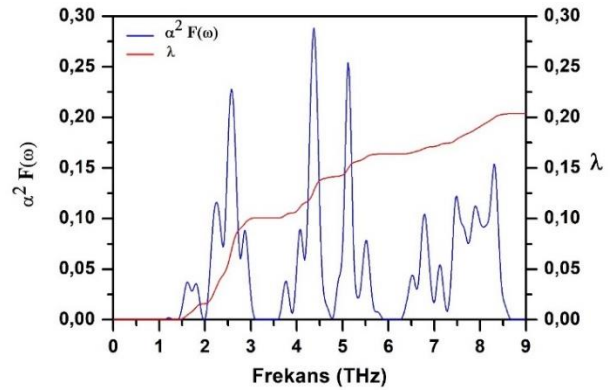


Şekil 4. $BaRu_2As_2$ bileşiği için a-) fonon modlarının farklı yüksek simetri doğrultularında dağılımlarının gösterilmesi b-) atomların katkısına göre fonon durum yoğunluğunun gösterimi.

3.4. $BaRu_2As_2$ Bileşiğinin Süperiletkenlik Özellikleri

$BaRu_2As_2$ bileşiği için yapmış olduğumuz hesaplamaların temel amacı $BaRu_2As_2$ bileşiğinde süperiletkenliğin neden 0.1 K gibi çok düşük sıcaklıklara kadar gözlemlenemediğidir. Bu amacımıza ulaşabilmek için son olarak Eliashberg spektral fonksiyonunu ($\alpha^2 F(\omega)$) ve toplam elektron-fonon etkileşim parametresini (λ_{acc}) hesapladık. $BaRu_2As_2$ bileşiği için $\lambda = 0.21$

olarak bulunmuştur. Bu değer çok küçük çıkması $BaRu_2As_2$ bileşiğinde elektron-fonon etkileşiminin çok zayıf olduğunun bir göstergesidir. Ayrıca bu değer çok küçük çıkması $BaRu_2As_2$ bileşiğinde süperiletkenliğin olmadığını ana göstergesidir. Eliashberg spektral fonksiyonu ve elektron-fonon etkileşim parametresinin frekansa göre değişimi Şekil 5'te verilmiştir. Eliashberg spektral fonksiyonu hesaplamalarımıza göre λ_{acc} değerine LFR ve HFR bölgelerinden gelen katkılar sırasıyla %81 ve %19 olarak hesaplanmıştır. Bu sebepten dolayı elektron-fonon etkileşimine ana katkı LFR bölgesindeki fononlar tarafından kaynaklanmaktadır. Ayrıca ortalama logaritmik frekans (ω_{ln}) değerini 174.24 K olarak hesaplanmıştır. Son olarak süperiletkenlik geçiş sıcaklığı T_c değeri Allen-Dynes formülünü kullanarak $T_c = 0.01$ K olarak bulundu. Bizim bu sonucumuz Nath vd. (2009) tarafından yapılan deneysel çalışma ile uyum içindedir. Çünkü Nath vd. (2009) $BaRu_2As_2$ bileşiğinin sıcaklığa bağlı direnç davranışının süperiletken bileşiklerden ziyade normal metallerin davranışına benzediğini söylemişlerdir.



Şekil 5. $BaRu_2As_2$ bileşiği için Eliashberg spektral fonksiyonu ve elektron-fonon etkileşim parametresinin frekansa göre değişimi.

4. Sonuçlar

Bu çalışmada $BaRu_2As_2$ kristalinin yapısal ve elektronik özellikleri DFT'nin GGA ve *ab-initio* düzlem dalga pseudopotansiyel metotları kullanılarak incelendi. İncelemelerde düzlem dalga ve pseudopotansiyel teorilerini baz alan QUANTUM ESPRESSO programı kullanılırken; Perdew vd. (1996) tarafından parametrize edilmiş GGA yaklaşımı değiş-tokuş ve korelasyon etkileşimlerini incelemek için kullanıldı. $BaRu_2As_2$ bileşiği için yapısal hesaplamalar sonucunda elde edilen yapısal değerler daha önceki deneysel ve teorik değerler ile

karşılaştırıldı. Yapısal hesaplamalarımız sonucu elde ettiğimiz veriler teorik ve deneysel sonuçlarla genel olarak uyum içerisindedir. Elektronik yapı incelemeleri kapsamında BaRu₂As₂ bileşiğinin enerji bandlarının c-ekseni boyunca dağılımları göz önüne alınarak iki boyutludan ziyade üç boyutlu karakter gösterdiği söylenebilir.

Bu çalışmanın ana amacı BaRu₂As₂ bileşiğinde süperiletkenliğin neden olmadığını belirlemesidir. Bu nedenle elektron-fonon etkileşimi detaylı bir şekilde incelenmiştir ve süperiletkenlik parametreleri; Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu ($N(E_F)$), Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$) ve elektron-fonon etkileşim parametresi (λ) tayin edildi. Hesaplamalarımız sonucu ThCr₂Si₂ yapıya benzer olarak kristalleşen BaRu₂As₂ bileşiği için elektron-fonon etkileşim parametresi (λ) 0.21 olarak bulundu. Hesaplamış olduğumuz elektron-fonon etkileşim parametreleri ve logaritmik ortalama fonon frekans (ω_{ln}) değerlerini kullanarak süperiletkenlik geçiş sıcaklığı (T_c) 0.01 K olarak belirlendi.

Kaynaklar

- Anand, V.K., Kim, H., Tanatar, M.A., Prozorov, R. ve Johnston, D.C., 2013. Superconducting and normal-state properties of APd₂As₂ (A = Ca, Sr, Ba) single crystals. *Physical Review B*, 87, 224510.
- Bağcı, S., Tütüncü, H.M, Duman, S. veSrivastava, G.P., 2010. Phonons and superconductivity in fcc and dhcp lanthanum. *Physical Review B*, 81, 144507.
- Baroni, S., De Gironcoli, S., Dal Corso, A. ve Giannozzi, P., 2001. Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory., *Reviews of Modern Physics*, 73, 515.
- Bauer, R., Schmid, A., Pavone, P. ve Strauch, D., 1998. Electron-phonon coupling in the metallic elements Al, Au, Na, and Nb: A first-principles study., *Physical Review B*, 57, 11276.
- Berry, N., Capan, C., Seyfarth, G., Bianchi, A.D., Ziller, J. ve Fisk, Z., 2009. Superconductivity without Fe or Ni in the phosphides BaIr₂P₂ and BaRh₂P₂. *Physical Review B*, 79, 180502.
- Eliashberg, G., 1960. Interactions between electrons and lattice vibrations in a superconductor, *Sov. Phys.-JETP (Engl. Transl.);(United States)*, 11, 696.
- Fujii, H. ve Sato, A., 2009. Superconductivity in SrPd₂Ge₂. *Physical Review B*, 79, 224522.
- Ghebouli, M.A., Bouhemadou, A., Ghebouli, B., Fatmi, M. ve Bin-Omran, S., 2011. Prediction study of the elastic and thermodynamic properties of the newly discovered tetragonal SrPd₂Ge₂ phase. *Solid State Communications*, 151, 976-981.
- Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G.L., Cococcioni, M., Dabo, I., Dal Corso, A., De Gironcoli, S., Fabris, S., Fratesi, G., Gebauer, R., Gerstmann, U., Gougoussis, C., Kokalj, A., Lazzeri, M., Martin-Samos, L., Marzari, N., Mauri, F., Mazzarello, R., Paolini, S., Pasquarello, A., Paulatto, L., Sbraccia, C., Scandolo, S., Sclauzero, G., Seitsonen, A.P., Smogunov, A., Umari, P., Wentzcovitch, R.M., 2009. QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics Condensed Matter*, 21, 395502.
- Hirai, D., Takayama, T., Hashizume, D., Higashinaka, R., Yamamoto, A., Hiroko, A.K. ve Takagi, H., 2010. Superconductivity in 4d and 5d transition metal layered pnictides BaRh₂P₂, BaIr₂P₂ and SrIr₂As₂. *Physica C:Superconductivity and Its Applications*, 470, 296-S297.
- Hirai, D., Takayama, T., Higashinaka, R., Aruga-Katori, H. ve Takagi, H., 2009. Superconductivity in Layered Pnictides BaRh₂P₂ and BaIr₂P₂. *Journal of the Physical Society of Japan*, 78, 023706.
- Hirai, D., von Rohr, F.ve Cava, R., 2012. Emergence of superconductivity in BaNi₂(Ge_{1-x}P_x)₂ at a structural instability. *Physical Review B*, 86, 100505.
- Hull, G.W., Wernick, J.H., Geballe, T.H., Waszczak, J.V. ve Bernardini, J.E., 1981. Superconductivity in the ternary intermetallics YbPd₂Ge₂, LaPd₂Ge₂, and LaPt₂Ge₂. *Physical Review B*, 24, 6715-6718.
- Hung, T.L., Chen, I.A., Huang, C.H., Lin, C.Y., Chen, C.W., You, Y.B., Jian, S.T., Yang, M.C., Hsu, Y.Y., Ho, J.C., Chen, Y.Y. ve Ku, H.C., 2013. Low Temperature Heat Capacity of Layered Superconductors SrNi₂Ge₂ and SrPd₂Ge₂. *Journal of Low Temperature Physics*, 171, 148-155.
- Jayalakshmi, D.S. ve Sundareswari, M., 2013. Effect of pressure on structural, electronic and bonding properties of CaTM₂Pn₂ (TM = Ni, Pd; Pn = P, As) compounds: A full potential computational study., *Journal of Alloys and Compounds*, 561, 268-275.
- Jeevan, H., Hossain, Z., Kasinathan, D., Rosner, H., Geibel, C. ve Gegenwart, P., 2008. High-temperature superconductivity in

- Eu_{0.5}K_{0.5}Fe₂As₂. *Physical Review B*, 78, 092406.
- Jeitschko, W., Glaum, R. ve Boonk, L., 1987. Superconducting LaRu₂P₂ and other alkaline earth and rare earth metal ruthenium and osmium phosphides and arsenides with ThCr₂Si₂ structure. *Journal of Solid State Chemistry*, 69, 93-100.
- Keimes, V., Johrendt, D., Mewis, A., Huhnt, C. ve Schlabit, W., 1997. About polymorphism of SrNi₂P₂ and crystal structure of BaNi₂P₂. *Zeitschrift Fur Anorganische Und Allgemeine Chemie*, 623, 1699-1704.
- Kim, T.K., Yaresko, A.N., Zabolotnyy, V.B., Kordyuk, A.A., Evtushinsky, D.V., Sung, N.H., Cho, B.K., Samuely, T., Szabó, P., Rodrigo, J.G., Park, J.T., Inosov, D.S., Samuely, P., Büchner, B. ve Borisenko, S.V., 2012. Conventional superconductivity in SrPd₂Ge₂. *Physical Review B*, 85, 014520.
- Kittel, C., 2014. *Katı Hal Fiziğine Giriş*, (çev: G. Öngüt, D. Öngüt), Palme Yayınları, ISBN 9780471415268, Ankara, 257s.
- Kohn, W. ve Sham, L.J., 1965. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 140, A1133.
- Liu, A.Y. ve Quong, A.A., 1996. Linear-response calculation of electron-phonon coupling parameters. *Physical Review B*, 53, R7575.
- Lohken, A., Lux, C., Johrendt, D. ve Mewis, A., 2002. Crystal and electronic structures of AlR₂P₂ (A : Ca-Ba). *Zeitschrift Fur Anorganische Und Allgemeine Chemie*, 628, 1472-1476.
- Miclea, C.F., Nicklas, M., Jeevan, H.S., Kasinathan, D., Hossain, Z., Rosner, H., Gegenwart, P., Geibel, C. ve Steglich, F., 2009. Evidence for a reentrant superconducting state in EuFe₂As₂ under pressure. *Physical Review B*, 79, 212509.
- Migdal, A. 1958. Interaction between electrons and lattice vibrations in a normal metal, *Sov. Phys. JETP*, 7, 996-1001.
- Mine, T., Yanagi, H., Kamiya, T., Kamihara, Y., Hirano, M. ve Hosono, H., 2008. Nickel-based phosphide superconductor with infinite-layer structure, BaNi₂P₂. *Solid State Communications*, 147, 111-113.
- Moll, P.J.W., Kanter, J., McDonald, R.D., Balakirev, F., Blaha, P., Schwarz, K., Bukowski, Z., Zhigadlo, N.D., Katrych, S., Mattenberger, K., Karpinski, J. ve Batlogg, B., 2011. Quantum oscillations of the superconductor LaRu₂P₂: Comparable mass enhancement $\lambda \approx 1$ in Ru and Fe phosphides, *Physical Review B*, 84, 224507
- Monkhorst, H.J. ve Pack, J.D., 1976. Special points for Brillouin-zone integrations., *Physical Review B*, 13, 5188.
- Murnaghan, F., 1944. The compressibility of media under extreme pressures. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 30, 244-247.
- Nagarajan, R., Sampathkumaran, E.V., Gupta, L.C., Vijayaraghavan, R., Prabhawalkar, V., Bhaktidarshan ve Padalia, B.D., 1981. Mössbauer and x-ray absorption spectroscopic measurements on the new mixed-valence system EuNi₂P₂. *Physics Letters A*, 84, 275-277.
- Nath, R., Singh, Y. ve Johnston, D., 2009. Magnetic, thermal, and transport properties of layered arsenides BaRu₂As₂ and SrRu₂As₂. *Physical Review B*, 79, 174513.
- Perdew, J.P., Burke, K. ve Ernzerhof, M., 1996. Generalized gradient approximation made simple. *Physical Review Letters*, 77, 3865.
- Rappe, A.M., Rabe, K.M., Kaxiras, E. ve Joannopoulos, J., 1990. Optimized pseudopotentials, *Physical Review B*, 41, 1227.
- Razzoli, E., Kobayashi, M., Strocov, V.N., Delley, B., Bukowski, Z., Karpinski, J., Plumb, N.C., Radovic, M., Chang, J., Schmitt, T., Patthey, L., Mesot, J. ve Shi, M., 2012. Bulk Electronic Structure of Superconducting LaRu₂P₂ Single Crystals Measured by Soft-X-Ray Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy. *Physical Review Letters*, 108, 257005.
- Reehuis, M., Jeitschko, W., Möller, M.H. ve Brown, P.J., 1992. A Neutron diffraction study of the magnetic structure of EuCo₂P₂. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 53, 687-690.
- Ronning, F., Bauer, E.D., Park, T., Baek, S.H., Sakai, H. ve Thompson, J.D., 2009. Superconductivity and the effects of pressure and structure in single-crystalline SrNi₂P₂. *Physical Review B*, 79, 134507.
- Ronning, F., Kurita, N., Bauer, E.D., Scott, B.L., Park, T., Klimczuk, T., Movshovich, R. ve Thompson, J.D., 2008. The first order phase transition and superconductivity in BaNi₂As₂ single crystals. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20, 342203.
- Rotter, M., Tegel, M. ve Johrendt, D., 2008. Superconductivity at 38 K in the iron arsenide (Ba_{1-x}K_x)Fe₂As₂. *Physical Review Letters*, 101, 107006.
- Sampathkumaran, E.V., Wortmann, G. ve Kaindl, G., 1986. Valence state of Eu in Eu_{0.05}Y_{0.95}Ni₂P₂ and Eu_{0.05}Y_{0.95}Pd₂P₂. *Journal of*

- Magnetism and Magnetic Materials, 54–57, 347-348.
- Samuely, T., Szabó, P., Rodrigo, J.G., Sung, N.H., Cho, B.K. ve Samuely, P., 2013. Magnetic Pair Breaking in Superconducting SrPd_2Ge_2 Investigated by Scanning Tunnelling Spectroscopy. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 26, 1199-1203.
- Schaak, R.E. ve Cava, R.J., 2004. Boron substitution in ternary metal phosphide superconductors. *Materials Research Bulletin*, 39, 1231-1235.
- Sefat, A.S., Jin, R., McGuire, M.A., Sales, B.C., Singh, D.J. ve Mandrus, D., 2008. Superconductivity at 22 K in Co-doped BaFe_2As_2 crystals. *Physical Review Letters*, 101, 117004.
- Shan, L., Gong, J., Wang, Y.L., Shen, B., Hou, X., Ren, C., Li, C., Yang, H., Wen, H.H. ve Li, S., 2012. Evidence of a spin resonance mode in the iron-based superconductor $\text{Ba}_{0.6}\text{K}_{0.4}\text{Fe}_2\text{As}_2$ from scanning tunneling spectroscopy. *Physical Review Letters*, 108, 227002.
- Shein, I. ve Ivanovskii, A. 2010. Band structure of new layered arsenides SrRu_2As_2 and BaRu_2As_2 , *Physics of the Solid State*, 52, 6-11.
- Shein, I. ve Ivanovskii, A., 2009a. Structural, electronic properties and intra-atomic bonding in new ThCr_2Si_2 -like arsenides SrRu_2As_2 , BaRu_2As_2 , SrRh_2As_2 and BaRh_2As_2 from first principles calculations. *Solid State Communications*, 149, 1860-1865.
- Shein, I.R. ve Ivanovskii, A.L., 2009b. Electronic and structural properties of low-temperature superconductors and ternary pnictides ANi_2Pn_2 ($A=\text{Sr}, \text{Ba}$ and $\text{Pn}=\text{P}, \text{As}$). *Physical Review B*, 79, 054510.
- Shein, I.R. ve Ivanovskii, A.L., 2011. Electronic band structure and Fermi surface of new 3.7 K superconductor LiCu_2P_2 from first-principles calculations. *Physica C: Superconductivity*, 471, 226-228.
- Shein, I.R., Skornyakov, S.L., Anisimov, V.I. ve Ivanovskii, A.L., 2014. Elastic and Electronic Properties of Superconducting CaPd_2As_2 and SrPd_2As_2 vs. Non-superconducting BaPd_2As_2 . *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 27, 155-161.
- Sung, N., Rhyee, J.S. ve Cho, B. 2011. Superconductivity and anomalous transport in SrPd_2Ge_2 single crystals. *Physical Review B*, 83, 094511.
- Tomioka, Y., Ishida, S., Nakajima, M., Ito, T., Kito, H., Iyo, A., Eisaki, H. ve Uchida, S., 2009. Three-dimensional nature of normal and superconducting states in BaNi_2P_2 single crystals with the ThCr_2Si_2 -type structure., *Physical Review B*, 79, 132506.
- Torikachvili, M.S., Bud'ko, S.L., Ni, N.ve Canfield, P.C., 2008. Pressure induced superconductivity in CaFe_2As_2 , *Physical Review Letters*, 101, 057006.
- Tütüncü, H.M, Bağcı, S. ve Srivastava, G.P., 2010. Electronic structure, phonons, and electron-phonon interaction in Mo_3Si . *Physical Review B*, 82, 214510.
- Tütüncü, H.M., Bağcı, S., Srivastava, G.P. ve Akbulut, A., 2012. Electrons, phonons and superconductivity in rocksalt and tungsten-carbide phases of CrC. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 24, 455704.
- Vanderbilt, D., 1990. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism., *Physical Review B*, 41, 7892.
- Wang, J.W., Chen, I.A., Hung, T.L., You, Y.B., Ku, H.C., Hsu, Y.Y., Ho, J.C. ve Chen, Y.Y., 2012. Superconductivity and structural variation of the electron-correlated layer systems $\text{Sr}(\text{Pd}_{1-x}\text{T}_x)_2\text{Ge}_2$ ($T = \text{Co}, \text{Ni}, \text{Rh}$; $0 \leq x \leq 1$). *Physical Review B*, 85, 024538.
- Weber, F., Rosenkranz, S., Pintschovius, L., Castellan, J.P., Osborn, R., Reichardt, W., Heid, R., Bohnen, K.P., Goremychkin, E.A., Kreyssig, A., Hradil, K. ve Abernathy, D.L., 2012. Electron-phonon coupling in the conventional superconductor $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ at high phonon energies studied by time-of-flight neutron spectroscopy. *Physical Review Letters*, 109, 057001.
- Wurth, A., Johrendt, D., Mewis, A., Huhnt, C., Michels, G., Roepke, M. ve Schlabitz, W., 1997. About the effect of temperature, pressure, and substitution on the crystal structure of ARh_2P_2 ($A = \text{Ca}, \text{Sr}, \text{Eu}, \text{Ba}$). *Zeitschrift Fur Anorganische Und Allgemeine Chemie*, 623, 1418-1424.
- Ying, J., Yan, Y., Liu, R., Wang, X., Wang, A., Zhang, M., Xiang, Z.ve Chen, X., 2010. Isotropic superconductivity in LaRu_2P_2 with the ThCr_2Si_2 -type structure. *Superconductor Science and Technology*, 23, 115009.