



ThCr₂Si₂ ve LuNi₂B₂C Tipi Süperiletkenlerin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi Kullanılarak İncelenmesi

Program Kodu: 1001

Proje No: 114F192

Proje Yürütücüsü:
Prof. Dr. HÜSEYİN MURAT TÜTÜNCÜ

Araştırmacı(lar):
Doç. Dr. Şule UĞUR

Bursiyer(ler):
Arş. Gör. Hüseyin Yasin Uzunok
Doktora Öğrencisi Ertuğrul Karaca
Yüksek Lisans Öğrencisi Serkan Karadağ

NİSAN 2017
ANKARA



ÖNSÖZ

Proje kapsamında, ThCr_2Si_2 -tipi kristalleşen SrPd_2Ge_2 , LaRu_2P_2 , BaNi_2P_2 , LiCu_2P_2 ve $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ -tipi kristalleşen $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$, $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$ kristallerinin yapısal, elektronik ve süperiletkenlik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak detaylı bir şekilde incelenmiştir. Projenin ilk aşamasında $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ tipi kristalleşen $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$ ve $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$ kristallerinin yapısal ve elektronik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)'nin Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı (GGA) ve *ab-initio* düzlem dalga pseudopotansiyel metotları kullanılarak incelendi. İncelemelerde düzlem dalga ve pseudopotansiyel teorilerini baz alan QUANTUM ESPRESSO programı kullanılırken; Perdew-Burke-Ernzerhof tarafından parametrize edilmiş GGA yaklaşımı kullanılarak değiş tokuş ve korelasyon etkileşimlerini incelemek için kullanılmıştır. Daha sonra lineer tepki metodu ile $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$ ve $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$ kristallerinin titreşim özellikleri ve süperiletkenlik özellikleri incelendi. Projenin son kısmında ThCr_2Si_2 tipi kristalleşen SrPd_2Ge_2 , LaRu_2P_2 , BaNi_2P_2 , LiCu_2P_2 kristallerinin yapısal, elektronik, titreşim ve süperiletkenlik özellikleri araştırılmıştır.

Yukarıdaki çalışmaları içeren ve ' ThCr_2Si_2 ve $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ tipi süperiletkenlerin yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak incelenmesi' konulu projemiz Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK) tarafından 114F192 proje numarasıyla 30 Ay süre ile desteklenmiştir.

Proje Yürütücüsü : Prof. Dr. Hüseyin Murat TÜTÜNCÜ

İÇİNDEKİLER

İÇİNDEKİLER	iii
SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ	v
ŞEKİLLER LİSTESİ	vi
TABLolar LİSTESİ	ix
ÖZET	xi
ABSTRACT	xii
BÖLÜM 1. GİRİŞ	1
BÖLÜM 2. LİTERATÜR ÖZETİ	3
BÖLÜM 3. MATERYAL VE YÖNTEM	6
3.1 Teori	6
3.1.1 Yoğunluk Fonksiyonel Teori	6
3.1.2 Kristalin Toplam Enerjisinin Hesaplanması	6
3.1.3 Örgü Sabitleri ve Hacim Modülünün Belirlenmesi	7
3.1.4 Elektronik Band Yapı Teorisi	8
3.1.5 Elektronik Band Yapısının Hesaplanması	9
3.1.6 Ab initio Örgü Dinamiği Teorisi	9
3.1.7 Fonon Spektrumu ve Durum Yoğunluğunun Hesaplanması	10
3.1.8 Süperiletkenlik Özellikleri İçin Kullanılan Teori	10
BÖLÜM 4. KONU ve KAPSAM	15
BÖLÜM 5. ANALİZ VE BULGULAR	21
5.1 YPd ₂ B ₂ C Materyalinin İncelenmesi	21
5.1.1 YPd ₂ B ₂ C Materyalinin Yapısal Özellikleri	21
5.1.2 YPd ₂ B ₂ C Materyalinin Elektronik Yapısı	22
5.1.3 YPd ₂ B ₂ C Materyalinin Titreşim Özellikleri	25
5.1.4 YPd ₂ B ₂ C Materyalinin Süperiletkenlik Özellikleri	26
5.2 LaPt ₂ B ₂ C Materyalinin İncelenmesi	29
5.2.1 LaPt ₂ B ₂ C Materyalinin Yapısal Özellikleri	29

5.2.2 LaPt ₂ B ₂ C Materyalinin Elektronik Özellikleri	30
5.2.3 LaPt ₂ B ₂ C Materyalinin Titreşim Özellikleri	32
5.2.4 LaPt ₂ B ₂ C Materyalinin Süperiletkenlik Özellikleri	33
5.3 SrPd ₂ Ge ₂ Malzemesinin Hesaplanmış Değerleri	34
5.3.1 SrPd ₂ Ge ₂ Malzemesinin Yapısal Özellikleri	34
5.3.2 SrPd ₂ Ge ₂ Malzemesinin Elektronik Yapısı	37
5.3.3 SrPd ₂ Ge ₂ Malzemesinin Titreşim Özellikleri	39
5.3.4 SrPd ₂ Ge ₂ Malzemesinin Süperiletkenlik Özellikleri	42
5.4 LiCu ₂ P ₂ Malzemesinin Hesaplanmış Değerleri	44
5.4.1 LiCu ₂ P ₂ Malzemesinin Yapısal Özellikleri	44
5.4.2 LiCu ₂ P ₂ Malzemesinin Elektronik Yapısı	46
5.4.3 LiCu ₂ P ₂ Malzemesinin Titreşim Özellikleri	49
5.4.4 LiCu ₂ P ₂ Malzemesinin Süperiletkenlik Özellikleri	53
5.5 BaNi ₂ P ₂ Malzemesinin Hesaplanmış Değerleri	54
5.5.1 BaNi ₂ P ₂ Malzemesinin Elektronik Yapısı	56
5.5.2 BaNi ₂ P ₂ Malzemesinin Titreşim Özellikleri	59
5.5.3 BaNi ₂ P ₂ Malzemesinin Süperiletkenlik Özellikleri	62
5.6 LaRu ₂ P ₂ Malzemesinin Hesaplanmış Değerleri	64
5.6.1 LaRu ₂ P ₂ Malzemesinin Yapısal Özellikleri	64
5.6.2 LaRu ₂ P ₂ Malzemesinin Elektronik Yapısı	66
5.6.3 LaRu ₂ P ₂ Malzemesinin Titreşim Özellikleri	69
5.6.4 LaRu ₂ P ₂ Malzemesinin Süperiletkenlik Özellikleri	71
BÖLÜM 6. TARTIŞMA	73

SİMGELER VE KISALTMALAR LİSTESİ

Å	: Angström
BCT	: Hacim Merkezli Tetragonal
BCS	: Bardeen-Cooper- Schrieffer
DFT	: Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
eV	: Elektron-Volt
GGA	: Genelleştirilmiş Gradyan Yaklaşımı
GPa	: GigaPascal
\hbar	: İndirgenmiş Planck Sabiti ($1.054571726 \times 10^{-34}$ j.s)
K	: Kelvin
LA	: Boyuna Akustik
LMTO	: Linear Muffin-Tin Orbital
LO	: Boyuna Optik
$N(E_F)$: Fermi Seviyesi Elektronik Durum Yoğunluğu
\vec{q}	: Dalga Vektörü
Ry	: Rydberg
$\rho(r)$: Temel Hal Elektronik Yük Yoğunluğu
Θ_D	: Debye Sıcaklığı
TA	: Enine Akustik
T_c	: Süperiletkenliğe Geçiş Sıcaklığı (Kritik Sıcaklık)
THz	: TeraHertz
TO	: Enine Optik
SI	: Uluslararası Sistem
ω	: Açısal Frekans

ŞEKİLLER LİSTESİ

Şekil 3.1. (a) Dhcp La yapısı ve (b) bu yapı için enerji-hacim grafiği.	8
Şekil 3.2. LaNiGa ₂ elektron-fonon spektral fonksiyonunun ve elektron-fonon çiftlenim parametresinin frekansa göre değişimi	14
Şekil 4.1. (a) ThCr ₂ Si ₂ kristal yapısı ve b) LuNi ₂ B ₂ C kristal yapısı	16
Şekil 4.2. Süperiletken ZnNNi ₃ 'ün elektronik yapısı. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.	17
Şekil 4.3. Mo ₃ Si'nin fonon dispersiyon grafiği. Boş daireler teorik sonuçları, dolu kareler ise deneysel sonuçları göstermektedir.	17
Şekil 4.4. Mo ₃ Si için hesaplanan toplam ve parçalı durum yoğunluğu grafikleri	18
Şekil 4.5. ZnNNi ₃ için hesaplanan Eliashberg spektral fonksiyonu	19
Şekil 5.1. YPd ₂ B ₂ C malzemesi için a.) kristal yapının gösterimi ve b.) hesaplamalar sonucu elde edilen enerji-hacim grafiği.....	22
Şekil 5.2. YPd ₂ B ₂ C malzemesi için yüksek simetri boyunca elektronik enerji band yapısı. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.	23
Şekil 5.3. YPd ₂ B ₂ C malzemesi için toplam (siyah) ve kısmi (renkli) elektronik durum yoğunluğu. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.	24
Şekil 5.4. (Solda) Titreşim modlarının farklı yüksek simetri doğrultularında dağılımlarının gösterilmesi (sağda) titreşim durum yoğunluğunun atomların katkısına göre gösterimi.....	25
Şekil 5.5. YPd ₂ B ₂ C için (a) [100] doğrultusunda elektron-fonon parametresinin (kırmızı çizgi) TA ₁ fonon titreşim moduyla (mavi çizgi) değişimi ve (b) $q = 2\pi a (0.55, 0.00, 0.00)$ noktasında TA ₁ modunun özvektörler ile atomik yer değiştirmelerin gösterimi.....	26
Şekil 5.6. YPd ₂ B ₂ C malzemesi için Z noktasında TA ve LA modlarının özvektörler ile gösterimi.....	27
Şekil 5.7. YPd ₂ B ₂ C malzemesi için (Üstte) $\Gamma - Z$ doğrultusu boyunca düşük	

frekanslı titreşimlerin dağılımı görülmektedir. (Altta) $\Gamma - Z$ boyunca λ parametresine en yüksek katkıyı yapan titreşim modlarının etkisi görülmektedir.	28
Şekil 5.8. YPd_2B_2C malzemesi için Eliashberg spektral fonksiyonunun elektron-fonon etkileşim parametresine göre değişimi	29
Şekil 5.9. $LaPt_2B_2C$ malzemesi için a.) kristal yapının gösterimi ve b.) hesaplamalar sonucu elde edilen enerji-hacim grafiği	30
Şekil 5.10. $LaPt_2B_2C$ için elektronik band dağılımı ve hesaplanmış durum yoğunlukları	31
Şekil 5.11. $LaPt_2B_2C$ malzemesi için a-) (Solda) Titreşim modlarının farklı yüksek simetri doğrultularında dağılımlarının gösterilmesi b-) (sağda) titreşim durum yoğunluğunun atomların katkısına göre gösterimi	32
Şekil 5.12. $LaPt_2B_2C$ malzemesinin Eliashberg spektral fonksiyonunun elektron-fonon etkileşim parametresine göre değişimi	33
Şekil 5.13. $SrPd_2Ge_2$ malzemesi için a.) kristal yapının gösterimi ve b.) hesaplamalarımız sonucu elde edilen enerji-hacim grafiği.....	35
Şekil 5.14. $SrPd_2Ge_2$ malzemesi için yüksek simetri boyunca elektronik enerji band yapısı. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.	37
Şekil 5.15. $SrPd_2Ge_2$ malzemesi için toplam (siyah) ve kısmi (renkli) elektronik durum yoğunluğu. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.	38
Şekil 5.16. $SrPd_2Ge_2$ malzemesi için elektron fonon etkileşim parametresine en yüksek katkıyı yapan E_g ve A_{1g} optik fonon modlarının özvektörler ile atomik yer değiştirmelerin gösterimi.....	40
Şekil 5.17. $SrPd_2Ge_2$ malzemesi için a-) fonon modlarının farklı yüksek simetri doğrultularında dağılımlarının gösterilmesi b-) fonon durum yoğunluğuna atomların katkısına göre gösterimi	41
Şekil 5.18. $SrPd_2Ge_2$ malzemesi için Eliashberg spektral fonksiyonunun elektron-fonon etkileşim parametresine göre değişimi	44
Şekil 5.19. $LiCu_2P_2$ malzemesi için a.) kristal yapının gösterimi ve b.) hesaplamalar sonucu elde edilen enerji-hacim grafiği.....	45
Şekil 5.20. $LiCu_2P_2$ malzemesi için yüksek simetri boyunca elektronik enerji band yapısı. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.	47
Şekil 5.21. $LiCu_2P_2$ malzemesi için toplam (siyah) ve kısmi (renkli) elektronik	

durum yoğunluğu. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.	48
Şekil 5.22. LiCu_2P_2 malzemesinin optik modlara ait özvektörler ile atomik yer değiştirmelerin gösterimi.	50
Şekil 5.23. LiCu_2P_2 malzemesi için a-) fonon modlarının farklı yüksek simetri doğrultularında dağılımlarının gösterilmesi b-) fonon durum yoğunluğuna atomların katkısına göre gösterimi	52
Şekil 5.24. LiCu_2P_2 malzemesi için Eliashberg spektral fonksiyonunun elektron-fonon etkileşim parametresine göre değişimi	53
Şekil 5.25. BaNi_2P_2 malzemesi için a.) kristal yapının gösterimi ve b.) hesaplamalar sonucu elde edilen enerji-hacim grafiği	55
Şekil 5.26. BaNi_2P_2 malzemesi için yüksek simetri boyunca elektronik enerji band yapısı. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.	57
Şekil 5.27. BaNi_2P_2 malzemesi için toplam (siyah) ve kısmi (renkli) elektronik durum yoğunluğu. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.	58
Şekil 5.28. BaNi_2P_2 malzemesi için elektron fonon etkileşim parametresine en yüksek katkıyı yapan E_g , B_{1g} ve A_{1g} modlarının özvektörler ile atomik yer değiştirmelerin gösterimi.	60
Şekil 5.29. BaNi_2P_2 malzemesi için a-) fonon modlarının farklı yüksek simetri doğrultularında dağılımlarının gösterilmesi b-) fonon durum yoğunluğuna atomların katkısına göre gösterimi	61
Şekil 5.30. BaNi_2P_2 malzemesi için Eliashberg spektral fonksiyonunun elektron-fonon etkileşim parametresine göre değişimi	64
Şekil 5.31. LaRu_2P_2 malzemesi için a.) kristal yapının gösterimi ve b.) hesaplamalar sonucu elde edilen enerji-hacim grafiği	65
Şekil 5.32. LaRu_2P_2 için elektronik enerji band yapısı	67
Şekil 5.33. LaRu_2P_2 için elektron durum yoğunluğu	68
Şekil 5.34. a-) Titreşim modlarının farklı yüksek simetri doğrultularında dağılımlarının gösterilmesi b-) titreşim durum yoğunluğunun atomların katkısına göre gösterimi	70
Şekil 5.35. Eliashberg spektral fonksiyonunun elektron-fonon etkileşim parametresine göre değişimi	71

TABLULAR LİSTESİ

Tablo 3.1. Dhcp La'nın durgun özelliklerinin deneysel ve teorik sonuçlarla karşılaştırılması.....	8
Tablo 3.2. Dhcp La için hesaplanan süperiletkenlik parametreleri.....	13
Tablo 4.1. Tungsten-Carbide yapıdaki CrC'nin yapısal özellikleri.....	16
Tablo 5.1. YPd ₂ B ₂ C malzemesi için hesaplanan yapısal değerlerin daha önceki deneysel ve teorik verilerle kıyaslanması.....	22
Tablo 5.2. YPd ₂ B ₂ C malzemesi için elde edilmiş değerler; N(E _F), Fermi seviyesinde durum yoğunluğunu; λ , elektron-fonon etkileşim parametresini; ω_{ln} , ortalama logaritmik frekansı; θ_D , Debye sıcaklığını; T _c , süperiletkenliğe geçiş sıcaklığını göstermektedir.....	28
Tablo 5.3. LaPd ₂ B ₂ C malzemesi için hesaplanan yapısal değerlerin daha önceki deneysel ve teorik verilerle kıyaslanması.....	30
Tablo 5.4. LaPt ₂ B ₂ C malzemesi için elde edilmiş değerler; N(E _F), Fermi seviyesinde durum yoğunluğunu; λ , elektron-fonon etkileşim parametresini; ω_{ln} , ortalama logaritmik frekansı; θ_D , Debye sıcaklığını; T _c , süperiletkenliğe geçiş sıcaklığını göstermektedir.....	34
Tablo 5.5. SrPd ₂ Ge ₂ malzemesi için hesaplanan yapısal değerlerin daha önceki deneysel ve teorik verilerle kıyaslanması.....	36
Tablo 5.6. SrPd ₂ Ge ₂ malzemesinin optik modlara ait frekans (THz) değerleri ve onlara karşılık gelen elektron-fonon etkileşim parametre değerleri.....	40
Tablo 5.7. SrPd ₂ Ge ₂ malzemesi için elde edilmiş değerler; N(E _F), Fermi seviyesinde durum yoğunluğunu; λ , elektron-fonon etkileşim parametresini ; ω_{ln} , ortalama logaritmik frekansı; γ , Elektronik özgül ısı katsayısı; T _c , süperiletkenliğe geçiş sıcaklığını göstermektedir.	43
Tablo 5.8. LiCu ₂ P ₂ malzemesi için hesaplanan yapısal değerlerin daha önceki deneysel ve teorik verilerle kıyaslanması.....	46

Tablo 5.9. BaNi ₂ P ₂ malzemesi için hesaplanan yapısal değerlerin daha önceki deneysel ve teorik verilerle kıyaslanması.....	56
Tablo 5.10. BaNi ₂ P ₂ malzemesinin optik modlara ait frekans (THz) değerleri ve onlara karşılık gelen elektron-fonon etkileşim parametresi değerleri.	59
Tablo 5.11. BaNi ₂ P ₂ malzemesi için elde edilmiş değerler; N(E _F), Fermi seviyesinde durum yoğunluğunu; λ , elektron-fonon etkileşim parametresini ; ω_{ln} , ortalama logaritmik frekansı; γ , Elektronik özgül ısı katsayısı; T _C , süperiletkenliğe geçiş sıcaklığını göstermektedir.	63
Tablo 5.12. LaRu ₂ P ₂ malzemesi için hesaplanan yapısal değerlerin daha önceki deneysel ve teorik verilerle kıyaslanması.....	66
Tablo 5.13. LaRu ₂ P ₂ malzemesi için elde edilmiş değerler; N(E _F), Fermi seviyesinde durum yoğunluğunu; λ , elektron-fonon etkileşim parametresini; ω_{ln} , ortalama logaritmik frekansı; T _C , süperiletkenliğe geçiş sıcaklığını göstermektedir.....	71

ÖZET

YNi_2B_2C materyalinde süperiletkenlik geçiş sıcaklığının 15 K'e yakın sıcaklıkta bulunmasından hemen sonra, borkarbür süperiletken malzemeler üzerine devam eden ve gittikçe artan bir ilgi oluşmuştur. Birçok deneysel ve teorik çalışmalar yeni ve daha yüksek süperiletkenlik geçiş sıcaklığına (T_c) sahip borkarbür süperiletken malzemeler bulmak için yapıldı. Sonunda, kristal yapısı ($LuNi_2B_2C$ yapısı) $ThCr_2Si_2$ 'den türeyen yüksek sıcaklıklı yeni borkarbür süperiletkenler bulundu. Bunların içinde en yüksek T_c değeri 23 K ile YPd_2B_2C için elde edildi. Böylece, $ThCr_2Si_2$ tipi metaller arası (intermetalik) malzemeler onların süperiletkenlik ve manyetik özelliklerinden dolayı çalışıldı. $ThCr_2Si_2$ tipi kristal yapıya sahip olan $SrPd_2Ge_2$ için ikinci tip süperiletkenlik bildirildi ($T_c \sim 3$ K). Bu süperiletken, demir içeren süperiletkenlere göre oldukça ilgi çekiciydi çünkü manyetik metal (Fe), manyetik olmayan metal (Pd) ile yer değiştirmişti. Bu süperiletkenin bulunması $LiCu_2P_2$ ve $BaNi_2P_2$ ikinci tip süperiletkenlerin bulunmasına öncülük etti.

Birçok deneysel çalışma bu süperiletken malzemelerin süperiletkenlik parametrelerini elde etmek için yapıldı. Bu deneysel çalışmalar bu malzemelerin yapısal ve elektronik özellikleri üzerine olan teorik çalışmalara bir zemin hazırladı. Bu malzemelerde süperiletkenliğin daha iyi anlaşılması için onların fonon özellikleri de araştırılmalıdır. Çünkü süperiletkenliğin kaynağı hemen hemen elektron-fonon etkileşimidir. Bizim bilgilerimize göre, bu süperiletkenlerde elektron-fonon etkileşiminin teorik incelenmesi yapılmamıştır. Bu nedenle bu süperiletkenlerde, süperiletkenliğin kaynağı literatürde halen bilinmemektedir.

Bu projenin amacı YPd_2B_2C , $LaPt_2B_2C$, $LaRu_2P_2$, $BaNi_2P_2$, $LiCu_2P_2$ ve $SrPd_2Ge_2$ süperiletkenlerinin yapısal ve elektronik özelliklerinin günümüzde en gelişmiş teorik metotlardan birisi olan yoğunluk fonksiyonel teorisi ve düzlem dalga sözdepotansiyel (pseudopotansiyel) metodu ile araştırılmasıdır. Yapısal ve elektronik özellikler elde edildikten sonra lineer tepki metodu bu malzemelerde fononların çalışılması için kullanılacaktır. Ayrıca, bu materyallerin Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu ($N(E_F)$), Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$), elektron-fonon etkileşme parametresi (λ), elektronik özgül ısı katsayısı (γ) ve süperiletkenlik geçiş sıcaklığı (T_c) gibi süperiletkenlik parametrelerini belirlemek için, elektron-fonon etkileşimleri de araştırılacaktır. Hesaplanan süperiletkenlik parametrelerini kullanarak bu materyallerin süperiletkenlik özelliklerinin fiziksel açıklaması yapılacaktır.

Anahtar Kelimeler: $ThCr_2Si_2$ yapısı, $LuNi_2B_2C$ yapısı, süperiletkenlik, elektronik yapı, fononlar, elektron-fonon etkileşimi, yoğunluk fonksiyonel teorisi

ABSTRACT

Immediately after the discovery of superconductivity near 15 K in $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$, there has been continued and increasing interest in borocarbide superconducting materials. Many experimental and theoretical works have been made for the discovery of new borocarbide superconductors with higher transition temperature (T_C) values. At the end, new borocarbide superconductors with ThCr_2Si_2 -derivative structure ($\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ structure) indicating high T_C values have been discovered. Among these materials, the highest T_C value of 23 K has been observed for $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$. Thus, ThCr_2Si_2 type intermetallics have been studied due to their superconducting and magnetic properties. Type-II superconductivity has been reported for SrPd_2Ge_2 (T_C near 3 K), which has ThCr_2Si_2 -type structure. This superconductor seems enchanting as compared to Fe-based superconductors because the magnetic metal (Fe) is replaced by the nonmagnetic metal (Pd). This has led to the discovery of type-II superconductivity in LiCu_2P_2 , BaNi_2P_2 .

Several experimental studies have been made to obtain superconducting parameters of these superconductors. The experimental works have provided impetus for theoretical studies of the structural and electronic properties of these materials. In order to achieve a better understanding of superconductivity in these materials, phonon properties of them must be studied experimentally as well as theoretically because the source of superconductivity is almost exclusively the electron-phonon interaction. To the best of our knowledge, theoretical investigation of the electron-phonon interaction in these superconductors has not been made. Thus, the source of superconductivity in these superconductors are still lacking in the literature.

The goal of this project is to make the state-of-the-art investigations of the structural and electronic properties of the superconductors $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$, $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$, LaRu_2P_2 , BaNi_2P_2 , LiCu_2P_2 and SrPd_2Ge_2 by employing the plane wave pseudopotential method and density functional theory. With the availability of these results, a linear response method will be applied to study phonons in these materials. Moreover, we will carry out *ab initio* calculations of electron-phonon interaction for these materials in order to calculate their superconducting parameters such as the density of states at the Fermi level ($N(E_F)$), the Eliashberg spectral function ($\alpha^2F(\omega)$), the electron-phonon coupling parameter (λ), the electronic specific heat coefficient (γ) and superconducting transition temperature (T_C). Using the calculated superconducting parameters, we will try to explain the physics of superconductivity in these superconductors.

Keywords: ThCr_2Si_2 structure, $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ structure, superconductivity, electronic structure, phonons, electron-phonon interaction, density functional theory.



BÖLÜM 1. GİRİŞ

Malzemeler akıma karşı göstermiş olduğu tepkilere göre iletken, yarı iletken ve yalıtkan olarak üç kısma ayrılmaktadır. Bazı metaller ve onların bazı bileşikleri yeteri kadar düşük sıcaklıklara soğutulduğu zaman akıma karşı direnç göstermediği gözlemlenmiştir. Bu durum “süperiletkenlik” olayı olarak isimlendirilmiştir. Süperiletkenlik olayı ilk olarak 1911 yılında Hollanda’lı fizikçi Heike Kamerlingh Onnes tarafından keşfedilmiştir. Kamerlingh Onnes yapmış olduğu çalışmada cıvayı sıvı helyum ortamında 4,2 K civarına kadar soğutmuştur ve bu sıcaklık yakınlarında cıvanın akıma karşı direnç göstermediğini gözlemlemiştir (Onnes 1911). Yani Kamerlingh Onnes cıvanın 4,2 K civarında süperiletkenlik durumuna geçtiğini gözlemlemiştir. Kamerlingh Onnes tarafından keşfedilmiş olan bu süperiletkenlik olayı sadece bilimsel açıdan değil teknolojik açıdan da çok önemlidir. Çünkü direnci olmayan elektrik kabloları ile akım kayıpsız olarak istenilen her yere taşınabilir. Ayrıca süperiletkenler ısı yaymadığı için daha küçük hacme sahip hızlı çalışabilen devreler yapılabilir. Bu olay telefon, bilgisayar, televizyon gibi teknolojik cihazların geliştirilmesinde önemli bir rol oynayabilir. Örneğin dünyanın en hızlı süper bilgisayarlarından birisi (Tanhe-2) Çin’liler tarafından süperiletken malzeme kullanılarak üretilmiştir. Süperiletkenliğin akıma karşı direnç göstermemesinin yanısıra diğer önemli bir özelliği de manyetik alanı dışarlamasıdır. 1933 yılında Walter Meissner ve Robert Ochsenfeld tarafından keşfedilen bu etki, manyetik alan içerisinde bulunan bir süperiletken malzeme süperiletkenlik geçiş sıcaklığının (T_c) altına kadar soğutulduğunda manyetik alan çizgilerini dışlaması olayıdır. Manyetik alanın bu şekilde dışarlanması olayı Meissner etkisi olarak bilinir (Meissner ve Ochsenfeld 1933). Meissner etkisinden faydalanılarak tasarlanan maglev trenleri Japonya’nın Yamana şehrinde gerçekleştirilen deneme sürüşünde 603 km/h hıza ulaşmıştır. Ayrıca süperiletkenlerin önemli özelliklerinden faydalanılarak günlük hayatta kullanılan birçok cihaz tasarlanmıştır. Bu cihazlara MRI (manyetik rezonans görüntüleme) mıknatısları, NMR (nükleer manyetik rezonans) spektroskopisi, SQUID (süperiletken kuantum girişim cihazı) manyetometresi gibi kimyasal analitik cihazlar, motorlar, gemi iticileri ve soğutucu mıknatıslar örnek olarak verilebilir. Bu keşiflerden sonra süperiletkenliğin mekanizması ve yeni süperiletken malzeme bulmak için yapılan çalışmalar hızlanmıştır. Bu çalışmalar sonucunda yüzlerce süperiletkenlik



gösteren malzeme keşfedilmiştir.

Süperiletkenlik olayının detaylarını araştırabilmek için London 1935 yılında (London ve London 1935), 1950 yılında Ginzberg tarafından iki önemli teori ortaya atılmıştır (Ginzburg 1950). 1957 yılında Bardeen, Cooper ve Schrieffer isimli üç bilim adamının soy isimlerinin baş harfleri ile adlandırılan BCS teorisi bu iki teoriye göre daha modern ve süperiletkenlik olayını daha iyi açıklamaktadır (Bardeen vd. 1957). 1972 yılında Bardeen, Cooper ve Schrieffer yapmış oldukları çalışmalar için Nobel Fizik ödülüne layık görülmüşlerdir. BCS teorisine göre süperiletkenlik olayı elektron-fonon etkileşmelerinden kaynaklanmaktadır. BCS teorisi 30 K sıcaklığının altında süperiletken olan malzemeler için geçerlidir.

Doğada bulunan ThCr_2Si_2 ve $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ kristallerine benzer yapıda kristalleşen malzemelerden birçoğu süperiletkenlik özelliği göstermektedir. Bu iki kristal yapıya benzer olarak kristalleşen malzemeler yıllardır çok yoğun bir şekilde deneysel ve teorik olarak çalışılmaktadır. Bu iki kristal yapıda kristalleşen 800'ün üzerinde süperiletken malzeme bulunmaktadır. Bu proje de $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ yapıya benzer olarak kristalleşen $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$ ve $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$ malzemelerinin ve ThCr_2Si_2 yapıya benzer olarak kristalleşen SrPd_2Ge_2 , LaRu_2P_2 , BaNi_2P_2 ve LiCu_2P_2 malzemelerinin süperiletkenlik özellikleri Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi kullanılarak teorik olarak incelenmiştir. Yazılım olarak ise Yoğunluk Fonksiyonel Teorisini temel alan özellikle elektronik yapı ve fonon hesapları gibi önemli çalışmalar yapılabilen "Quantum Espresso" programı kullanılmıştır (Giannozzi vd. 2009).



BÖLÜM 2. LİTERATÜR ÖZETİ

ThCr_2Si_2 kristal yapıya benzer olarak kristalleşen bileşikler son yıllarda çok fazla çalışılmaktadır. Bu bileşikler düşük sıcaklıklarda süperiletkenlik gösterme (Hull vd. 1981; Jeitschko vd. 1987; Ronning vd. 2008; Fujii ve Sato 2009; Berry vd. 2009; Tomioka vd. 2009; Hirai vd. 2010; Sung vd. 2011; Anand vd. 2013; Kim vd. 2012), basınç (Torikachvili vd. 2008; Miclea vd. 2009; Ronning vd. 2009) veya farklı malzemelerle dop edilerek (Rotter vd. 2008; Sefat vd. 2008; Jeevan vd. 2008; Shan vd. 2012; Hirai vd. 2012) yüksek sıcaklıklarda süperiletkenlik gösterme ve farklı manyetik özellik gösterme (Reehuis vd. 1992) gibi ilginç fiziksel özellik göstermektedirler. ThCr_2Si_2 tipi süperiletkenler bu karmaşık davranışlarından dolayı basınç altında birinci veya ikinci tür faz geçişi gösterebilir (Shein ve Ivanovskii 2009b). 1987 yılında LaRu_2P_2 malzemesi için süperiletkenlik geçiş sıcaklığı 4 K olarak gözlemlendi (Jeitschko vd. 1987). Bu malzemenin süperiletkenlik göstermesi çok ilginçtir. Çünkü bu malzemenin bileşenlerinde manyetik malzeme yoktur. Bu yüzden de süperiletkenlik durumunda muhtemelen manyetik düzen göstermemektedir. Bu malzeme ile ilgili son yıllarda elektronik ve süperiletkenlik özelliklerini incelemek için deneysel çalışmalar yapılarak bu malzemenin süperiletkenlik özelliği gösterdiği doğrulanmıştır (Schaak ve Cava 2004; Ying vd. 2010; Razzoli vd. 2012; Moll vd. 2011). Ayrıca bu malzemenin elektronik özellikleri çeşitli teorik çalışmalarla yapılmıştır (Razzoli vd. 2012; Moll vd. 2011). 2008'de Takashi Mine ve arkadaşları (Mine vd. 2008) yapmış oldukları çalışmada BaNi_2P_2 malzemesinin süperiletken olduğunu kanıtladılar ve bu malzeme için süperiletkenlik geçiş sıcaklığını 3 K olarak belirlediler. Keimes ve arkadaşlarının (Keimes vd. 1997) 1997 yılında BaNi_2P_2 malzemesinin yapısal özelliklerini yapmış oldukları deneysel çalışma ile belirlemişlerdir. BaNi_2P_2 malzemesinin elektronik özelliklerini belirlemek için birkaç teorik çalışma yapılmıştır (Shein ve Ivanovskii 2009b). 2009 yılında Fujii ve Sato, SrPd_2Ge_2 malzemesi için yapmış oldukları çalışmada süperiletkenlik geçiş sıcaklığını yaklaşık olarak 3 K olarak bulmuşlardır (Fujii ve Sato 2009). SrPd_2Ge_2 malzemesinin süperiletkenlik özelliklerini belirleyebilmek için birkaç deneysel çalışma yapılmıştır (Sung vd. 2011; Samuely vd. 2013; Wang vd. 2012; Hung vd. 2013). Yapılan çalışmalar sonucu SrPd_2Ge_2 malzemesinin II. tip süperiletken olduğu bulunmuştur (Shein ve Ivanovskii 2009b; Shein ve Ivanovskii 2011; Razzoli vd. 2012; Shein ve Ivanovskii

2010; Ghebouli vd. 2011). Ayrıca SrPd_2Ge_2 malzemesinin elektronik özelliklerini belirleyebilmek için teorik çalışmalarda yapılmıştır (Jayalakshmi ve Sundareswari 2013; Ghebouli vd. 2011; Shein vd. 2014). 2010 yılında Han ve arkadaşları tarafından LiCu_2P_2 malzemesinin süperiletkenlik geçiş sıcaklığı 3,7 K olarak belirlenmiştir. (Han vd. 2010). Bir yıl sonra Shein ve Ivanovskii LiCu_2P_2 malzemesinin yapısal, elektronik ve Fermi yüzeyi çalışmalarını teorik olarak incelemiştir (Shein ve Ivanovskii 2011). LiCu_2P_2 malzemesi ile ilgili yine 2011 yılında yapılan deneysel çalışmada bu malzemenin süperiletken olmadığı bulundu (Han vd. 2011). Shein ve Ivanovskii tarafından yapılan çalışmada bu malzemenin süperiletken olup olmadığı ile ilgili çalışma yapılmamıştır. Bu projede LiCu_2P_2 malzemesinin süperiletken olup olmadığı da araştırılmıştır. Günümüzde $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ kristal yapıdaki materyaller deneysel olarak yoğun bir şekilde araştırılmaktadır (Kumagai vd. 1996; Murdoch vd. 1999; Bitterlich vd. 2001; Bitterlich vd. 2002; Anand vd. 2007; Ivanovskii 2013; Fujii vd. 1996; Dezaneti vd. 2000; Ghosh vd. 2001; Wang vd. 2005). $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ yapıya benzer olarak kristalleşen malzemelerin birçoğu yüksek süperiletkenlik geçiş sıcaklığı göstermişlerdir (Grigereit vd. 1994; Lin vd. 1995; Huang vd. 1995; Cho vd. 1995; Schmidt ve Jeitschko 2002; Sánchez vd. 2005; Jensen ve Hedegard 2007; DeBeer-Schmitt vd. 2007; Schneider vd. 2009; Weigand vd. 2013; Wulferding vd. 2015). Özellikle bu projede incelenecek olan $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$ ve $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$ malzemeleri için süperiletkenlik geçiş sıcaklığı sırasıyla 21 K (Sun vd. 1994) ve 10,5 K (Singh 1994) olarak bulunmuştur.

ThCr_2Si_2 (SrPd_2Ge_2 , LaRu_2P_2 , BaNi_2P_2 , LiCu_2P_2) ve $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ($\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$, $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$) kristal yapılarındaki süperiletkenlerin yapısal ve elektronik özellikleri incelenmiş olmasına rağmen bu süperiletkenlerde elektron-fonon etkileşimi ve fononlar üzerine ciddi çalışmalar yapılmamıştır. Shein ve Ivanovskii tarafından 2009 yılında (Shein ve Ivanovskii 2009b) yapılan teorik çalışmada SrNi_2As_2 ($T_C \sim 0,6\text{K}$) ve BaNi_2As_2 ($T_C \sim 0,7\text{K}$) süperiletkenleri için elektron-fonon etkileşim parametreleri (λ) hesaplanmıştır. Fakat Shein ve Ivanovskii yapmış oldukları çalışmada belirttikleri gibi kullandıkları yöntem basit bir yaklaşımdır. Shein ve Ivanovskii deneysel ve teorik Sommerfeld sabitlerini kullanarak $\gamma^{\text{deney}} = \gamma^{\text{teorik}}(1+\lambda)$ formülünden bu süperiletkenler için λ değerlerini yaklaşık olarak 0,16 ve 0,24 olarak belirlemiştir. Bu çalışmada BaNi_2P_2 malzemesi için elektron-fonon etkileşim parametresini (λ) deneysel data olmadığı için hesaplayamamışlardır. BCS teorisine göre süperiletkenlik elektron-fonon etkileşiminden kaynaklanmaktadır. Bu yüzden 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 hem elektronlardan, hem fononlardan, hem de onların



etkileşiminden gelen katkıyı içermektedir. Şimdiye kadar bu fonksiyon bu projede çalışılmış olan hiçbir malzeme için hesaplanmamıştır.

Sonuç olarak literatür araştırması göstermiştir ki ThCr_2Si_2 (SrPd_2Ge_2 , LaRu_2P_2 , BaNi_2P_2 , LiCu_2P_2) ve $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ($\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$, $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$) tipi süperiletkenler üzerine yapılan çalışmalar doksanlı yıllardan günümüze kadar güncelliğini korumuştur. Fakat yapılan teorik çalışmalarda elektron-fonon etkileşimleri hesaba katılmamıştır. BCS teorisinden bilinmektedir ki süperiletkenliğe yol açan Cooper çiftleri elektron-fonon etkileşiminin bir sonucunda oluşmaktadır. Bu yüzden bu malzemelerde süperiletkenliğin kaynağının tespit edilmesi için elektronik, fonon ve elektron-fonon etkileşimi hesaplamaları birlikte yapılmalıdır. Böylece hangi titreşim modlarının hangi elektron orbitalleri ile etkileştiği bulunabilir. Bu durumda ThCr_2Si_2 (SrPd_2Ge_2 , LaRu_2P_2 , BaNi_2P_2 , LiCu_2P_2) ve $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ($\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$, $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$) süperiletkenlerinin yapısal, elektronik, titreşim ve süperiletkenlik özelliklerinin günümüz teorik metotları ile araştırılmasının gerekliliği açık bir şekilde ortadadır.

Bu yüzden bu projenin temel amaçları; ThCr_2Si_2 (SrPd_2Ge_2 , LaRu_2P_2 , BaNi_2P_2 , LiCu_2P_2) ve $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ($\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$, $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$) kristallerinin yapısal ve elektronik özelliklerinin yoğunluk fonksiyonel teorisiyle detaylı bir şekilde incelenmesi, elde edilen bulguların deneysel ve teorik sonuçlarla karşılaştırılmasıdır. Projenin devamında lineer tepki metodu ile yukarıda belirtilen kristallerin titreşim özelliklerinin incelenmesi yapılacak ve elde edilen bulgular tartışılacaktır. Bu projenin temel amacı, çalışılan süperiletkenlerde süperiletkenliğin kaynağının belirlenmesidir. Bu yüzden bu projede çalışılmış olan malzemelerde elektron-fonon etkileşimi detaylı bir şekilde incelenecek ve süperiletkenlik parametreleri Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu ($N(E_F)$), Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$), elektron-fonon etkileşme parametresi (λ) ve elektronik özgül ısı katsayısı (γ) tayin edilecektir. Bu parametrelerden yararlanılarak bu projede çalışılacak süperiletkenlerin süperiletkenlik geçiş sıcaklıkları (T_c) belirlenecektir. Süperiletkenlik için elde edilen sonuçlar, mevcut deneysel ve teorik sonuçlarla karşılaştırılacaktır.

BÖLÜM 3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1 Teori

3.1.1 Yoğunluk Fonksiyonel Teori

Temeli yoğunluk fonksiyonel teorisine dayanan *ab initio* teorileri, kristallerin yapısal, elektronik ve dinamik özelliklerini araştırmak için ideal metotlardır. Bu metotların son yıllarda oldukça popüler olmalarının nedeni, hiçbir deneysel veriye ihtiyaç duymadan kullanılabilmesidir. Yoğunluk fonksiyonel teorisinin temelleri 1960'lı yıllarda Hohenberg-Kohn (Hohenberg ve Kohn 1964) ve Kohn-Sham (Kohn ve Sham 1965) tarafından atılmıştır. Günümüzde bilgisayar sistemlerinin gelişmesi ve bu sayede bilgisayarların işlemleri çok daha hızlı bir şekilde yapabilmeleri, bu metotların önemini iyice artırmıştır. Şimdiye kadar bu metotlarla yapılan araştırmalar, deneysel sonuçlarla mükemmelere varan uyumlar vermiştir. Bununla birlikte deneysel çalışma yapmanın çok zor olduğu kristallerin taban durum özellikleri de bu metotlarla belirlenerek, katıhal fiziğinin ve elektronüğün kullanımına sunulabilir. Şimdi yoğunluk fonksiyonel teorisinin uygulanışından kısaca bahsedelim.

3.1.2 Kristalin Toplam Enerjisinin Hesaplanması

Bu teoride taban durumu dalga fonksiyonu Ψ , elektronik yük yoğunluğuna bağlı olarak ifade edilir. Aynı şekilde sistemin toplam enerjisi $E_{top}(R_\alpha)$ da elektronik yük yoğunluğunun ($n(r, R_\alpha)$) bir fonksiyonu olur. Bu teoride kristalin toplam enerjisi,

$$E_{top}(R_\alpha) = \sum_i^{\text{val.el.}} \Psi_i^*(r, R_\alpha) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \Psi_i(r, R_\alpha) + \sum_i^{\text{val.el.}} \Psi_i^*(r, R_\alpha) V^{PS} \Psi_i(r, R_\alpha) dr \quad (3.1)$$
$$+ \frac{e^2}{2} \int \frac{n(r, R_\alpha) n(r', R_\alpha)}{|r - r'|} dr dr' + E_{XC}[n(r, R_\alpha)] + \frac{e^2}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|}$$

şeklinde ifade edilir. Buradaki toplamlar değerlik elektronları üzerindedir. Çünkü kimyasal ve fiziksel özelliklerin belirlenmesine katkıda bulunan elektronlar bunlardır. r ve R_α sırasıyla elektron ve iyon korlarının pozisyonlarını ifade eder. $n(r, R_\alpha)$ ise temel hal elektronik yük yoğunluğudur.

3.1.3 Örgü Sabitleri ve Hacim Modülünün Belirlenmesi

Bir kristalin toplam enerjisinin bulunması oldukça önemlidir. Çünkü toplam enerjinin bulunması ile materyalin fiziksel özelliklerinin tayini mümkün olur. Toplam enerjiyi hesaplamak için denge durumundaki örgü sabitlerinin tayin edilmesi gerekir. Örgü sabitlerinin belirlenebilmesi için öncelikle kristalin yapısı bilinmelidir. Şekil 3.1 (a)'da Lantanyum (La) kristalinin çift hegzagonal sıkı paketlenmiş yapısı (dhcp) gösterilmiştir. Bu kristalin örgüsünün hegzagonal olduğu açıktır. Bu kristal için a ve c olmak üzere iki örgü parametresi bulunmaktadır.

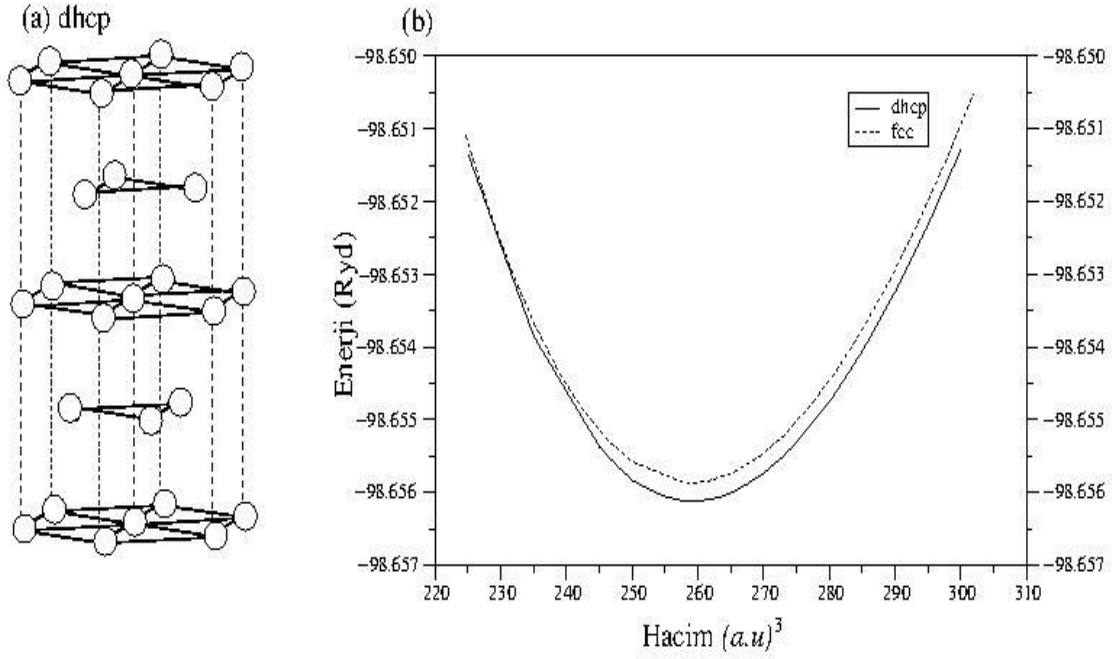
Bu kristal yapıda denge durumu örgü sabitlerini belirlemek için yukarıdaki enerji formülü kullanılarak farklı hacim değerlerine karşılık gelen enerjiler hesaplanır. Elde edilen sonuçlardan yararlanılarak, enerji-hacim grafiği çizilir. Bu grafikte enerjinin minimum olduğu yerde hacmin değeri belirlenir. Şekil 3.1 (b)'de dhcp La kristali için minimum enerjiyi gösteren grafik sunulmuştur.

Toplam enerji ve denge durumundaki örgü sabiti bulunduktan sonra aşağıda verilen Murnaghan eşitliklerinden (Murnaghan 1944),

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

$$E = \frac{\Omega_0 B_0}{B_0'} \left[\frac{1}{B_0' - 1} \left(\frac{\Omega}{\Omega_0} \right)^{B_0' - 1} + \frac{\Omega}{\Omega_0} \right] - \frac{\Omega_0 B_0}{B_0' - 1} + E(\Omega_0) \quad (3.3)$$

hacim modülü (B_0) ve onun basınca göre türevi hesaplanacaktır. Unutulmamalıdır ki hacim modülü bir kristalin dayanıklılığının bir ölçüsüdür. Hacim modülü hesaplanmadan hiçbir kristal teknolojik uygulamalarda verimli bir şekilde kullanılamaz.



Şekil 3.1. (a) Dhcp La yapısı ve (b) bu yapı için enerji-hacim grafiği.

La için hesaplanan statik özellikler Tablo 3.1’de sunulmuştur (Bağcı vd. 2010). Bu tabloda hesaplanan özellikler deneysel verilerle karşılaştırılmıştır (Syassen ve Holzapfel 1975; Kittel 2014). Hesaplanan α ve c değerleri deneysel değerlerden sırasıyla %2,8 ve %1,5 farklıdır. Hesaplanan hacim modülü de deneysel değer olan 24,3 GPa değeriyle uyum içindedir.

Tablo 3.1. Dhcp La’nın durgun özelliklerinin deneysel ve teorik sonuçlarla karşılaştırılması

	$\alpha(\text{Å})$	$c(\text{Å})$	$B_0(\text{GPa})$	B'
GGA (Bağcı vd. 2010)	3,801	12,261	26,30	2,89
Deneysel (Syassen ve Holzapfel 1975)	3,773	12,081		
Deneysel (Kittel 2014)			24,3	

3.1.4 Elektronik Band Yapı Teorisi

Yoğunluk fonksiyonel teorisine göre bir kristalin elektronik enerjisi:

$$E_{el}[V_{dış}, n] = T_0[n] + \int dr V_{dış}(r)n(r) + \frac{e^2}{2} \int \int dr dr' \frac{n(r) n(r')}{|r - r'|} + E_{det-e}[n] \quad (3.4)$$

şeklinde. Buradaki birinci terim $T_0[n]$, $n(r)$ yoğunluklu birbirleriyle etkileşmeyen elektronlardan oluşan bir sistemin kinetik enerjisidir. İkinci terim, iyonların oluşturduğu potansiyelin toplam enerjiye katkısını ifade eder. Üçüncü terim, elektronların birbirleriyle etkileşmelerinin toplam enerjiye katkısıdır. Son terim $E_{at}[n]$ ise, bağımsız elektron modeli için klasik olmayan çok cisim değiş tokuş etkileşimlerini ifade eder.

3.1.5 Elektronik Band Yapısının Hesaplanması

Denge durumundaki örgü sabitleri kullanılarak yukarıda verilen eşitlikten elektronik enerji (E_{el}) hesaplanacaktır. Toplam enerjinin hesaplanmasında elektronların maksimum kinetik enerjileri 60 Ry alınacak ve ters örgü uzayındaki toplamlar için 349 özel \mathbf{k} değeri kullanılacaktır. Tüm çözümler GGA yaklaşımı altında yapılacak ve değiş-tokuş etkileşimi için Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE) parametreleri hesaba katılacaktır (Perdew vd. 1996).

3.1.6 *Ab initio* Örgü Dinamiği Teorisi

Bu metotta kristaldeki elektron-iyon potansiyeli atomik yerdeğiştirmelere bağlı olan bir $\lambda=(\lambda_i)$ parametresi cinsinden ifade edilebilir (Srivastava 1990). Böylece elektronların temel hal enerjisinin bu parametreye göre türevi;

$$\frac{\partial E_\lambda}{\partial \lambda_i} = \int n_\lambda(r) \frac{\partial V_\lambda(r)}{\partial \lambda_i} dr \quad (3.5)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada $n_\lambda(r)$ elektron yoğunluk dağılımını ifade eder. Kullandığımız λ parametreleri, $u_{ai}(R)$ ile ifade edilirse, sistemin kuvvet sabiti, atomik ve elektronik kuvvet sabitlerinin toplamı şeklinde aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\frac{\partial^2 E}{\partial u_{ai}(R) \partial u_{bj}(R)} = \Phi_{ai,bj}^{iyon}(R - R') + \Phi_{ai,bj}^{elektron}(R - R') \quad (3.6)$$

İyonik kuvvet sabitleri aşağıda belirtilen iyonik enerjinin, yerdeğiştirmeye göre ikinci türevinden hesaplanabilir (Srivastava 1990).

$$E_{iyon-iyon} = \sum_i \sum_j \frac{e^2 Z_i Z_j}{|R + \tau_i - R' - \tau_j|} \quad (3.7)$$

Elektronik kuvvet sabitleri ise iyon-elektron etkileşiminden oluşan potansiyellerle kısaca aşağıdaki şekilde ifade edilebilir.

$$\Phi_{\alpha i, \beta j}^{\text{elektron}}(R - R') = \int \left(\frac{\partial n(r)}{\partial u_{\alpha i}(R)} \frac{\partial V_{\text{iyon}}(r)}{\partial u_{\beta j}(R)} + n_0(r) \frac{\partial^2 V_{\text{iyon}}(r)}{\partial u_{\alpha i}(R) \partial u_{\beta j}(R)} \right) dr \quad (3.8)$$

Toplam kuvvet sabiti aşağıdaki gibi bir hareket denkleminde yerine konularak, hem iyonların titreşim vektörleri hem de titreşim enerjileri hesaplanır (Srivastava 1990).

$$M_i \ddot{u}_i(R) = - \sum_{R', j} \Phi_{\alpha \beta}^{\text{iyon+elektron}} u_{\beta}(R') \quad (3.9)$$

3.1.7 Fonon Spektrumu ve Durum Yoğunluğunun Hesaplanması

Hacim fonon spektrumlarını elde etmek için 13 \mathbf{q} noktası için dinamik matrisler hesaplanacaktır. Daha sonra ters örgü uzayında olan bu matrisler Fourier dönüşümleri ile normal uzaya taşınacaktır. Sonrasında hareket denklemleri çözülerek 1. Brillouin bölgesinde simetri yönlerinde fonon eğrileri çizilecektir. Durum yoğunluğunun hesaplanması ise indirgenmiş birinci Brillouin bölgesinin içinde alınan daha çok sayıda \mathbf{q} vektörleri ile yapılacaktır.

3.1.8 Süperiletkenlik Özellikleri İçin Kullanılan Teori

Fonon durum yoğunluğu,

$$F(\omega) = \sum_{\mathbf{q}j} \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}j}) \quad (3.10)$$

ile verilir. Burada $\omega_{\mathbf{q}j}$ atomik yerdeğiştirmeler ile ilgili $\mathbf{q}j$ 'inci fonon modudur. Elektron-fonon etkileşimleri için matris elemanları (McMillan 1968; Allen 1972),

$$g_{(\mathbf{k}+\mathbf{q})m, \mathbf{k}n}^{\mathbf{q}j} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\mathbf{q}j}}} \langle \Phi_{(\mathbf{k}+\mathbf{q})m} | \mathbf{e}_{\mathbf{q}j} \cdot \vec{\nabla} V^{\text{SCF}}(\mathbf{q}) | \Phi_{\mathbf{k}n} \rangle \quad (3.11)$$

şeklinde dir. Burada M atomik kütle ve $\vec{\nabla} V^{\text{SCF}}(\mathbf{q})$, \mathbf{q} dalga vektörlü bir fonondan kaynaklanan atomik yerdeğiştirmeye göre kararlı etkin potansiyelin türevidir.

Elektron-fonon matris elemanları ile

$$\gamma_{qj} = 2\pi\omega_{qj} \sum_{knm} \left| g_{(k+q)m;kn}^{qj} \right|^2 \delta(\varepsilon_{kn} - \varepsilon_F) \delta(\varepsilon_{(k+q)m} - \varepsilon_F) \quad (3.12)$$

eşitliğinden yararlanılarak γ_{qj} fonon çizgi genişliği hesaplanır.

λ_{qj} fonon bağımlı elektron-fonon çiftlenimini daha hassas biçimde belirlemek için 24x24x24 **k** ağı ve 0,03 Ryd Gaussian genişliğini seçmek uygundur. Elektron-fonon çiftlenimi,

$$\lambda_{qj} = \frac{\gamma_{qj}}{\pi N(E_F) \omega_{qj}^2} \quad (3.13)$$

bağıntısından belirlenebilir. Burada $N(E_F)$ Fermi seviyesinde elektronik durum yoğunluğudur. Elektron-fonon etkileşme parametresi ve fonon genişliği hesaplamalarında fonon spektrumlarında görülen beklenmedik durumlar etkili olmaktadır.

Elektron-fonon etkileşim parametresini elde etmek için elektron-fonon spektral fonksiyonu, fonon çizgi genişliği kullanılarak (McMillan 1968; Allen 1972),

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{1}{2\pi N(E_F)} \sum_{qj} \frac{\gamma_{qj}}{\hbar\omega_{qj}} \delta(\omega - \omega_{qj}) \quad (3.14)$$

bağıntısından elde edilir. Ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi ise (McMillan 1968; Allen 1972),

$$\lambda = 2 \int \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega \quad (3.15)$$

formülden elde edilir. Süperiletkenlik çalışmalarında anafikirlerden birisi elektron-fonon etkileşiminin gücünü tayin etmektir. Yukarıdaki formülle dhcp La için elektron-fonon etkileşimi parametresi 0,97 olarak bulunmuştur. Bu veri dhcp La'nın süperiletkenlik için bir aday olduğunu gösterir. λ parametresi hesaplandıktan sonra süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı,

$$T_c = \frac{\omega_{ln}}{1,2} \exp\left(-\frac{1,04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^*(1 + 0,62\lambda)}\right) \quad (3.16)$$

eşitliğinden hesaplanabilir. Burada ω_{ln} , logaritmik ortalama fonon frekansı ve μ^* Coulomb itme sabitidir. Bu iki parametre aşağıdaki gibi hesaplanabilir.

$$\omega_{ln} = \exp\left[2\lambda^{-1} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \alpha^2 F(\omega) \ln\omega\right] \quad (3.17)$$

$$\mu^* = \frac{0.20 N(E_F)}{(1 + N(E_F))} \quad (3.18)$$

Bu parametrelere ek olarak ortalama fonon frekansları,

$$\langle\omega\rangle = \frac{\int_0^\infty \omega^n \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega}{\int_0^\infty \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega} \quad (3.19)$$

formülüyle hesaplanır. **$\langle\omega^n\rangle$ değerleri kullanmış olduğumuz Quantum Espresso programı tarafından hesaplanmamaktadır. Programa müdahale edilerek bu değer hesaplanması sağlanmıştır. Özellikle $\langle\omega^2\rangle$ değeri oldukça önemlidir çünkü bu değer büyük olması elektron-fonon etkileşimine negatif katkı yapmaktadır.** Bu negatif katkı aşağıdaki formülden

$$\lambda = \frac{\eta}{M\langle\omega^2\rangle} \quad (3.20)$$

açık bir şekilde görülebilir. Buna ek olarak ω^2 'nin ortalama değerini kullanarak Debye sıcaklığına geçiş yapmak mümkündür. Bu geçiş aşağıdaki formül kullanılarak kolay bir şekilde yapılabilir,

$$\theta_D^2 = 2.0 \langle\omega^2\rangle \quad (3.21)$$

T_c ve θ_D değerlerinin bilinmesiyle elektron çiftleri arasındaki çekici etkileşim potansiyeline geçiş yapılabilir.

$$N(E_F)V_p = \left(\ln\left(\frac{1.14\theta_D}{T_c}\right)\right)^{-1} \quad (3.22)$$

BCS teorisinde Cooper çiftlerinin ayrılması için gerekli olan boşluk enerjisi 2Δ , T_c 'ye aşağıdaki gibi bağlıdır.

$$2\Delta = 3.53 k_B T_c \quad (3.23)$$

Burada k_B , Boltzmann sabitidir. **Elektron-fonon etkileşim parametresi, elektronik ısı sığası katsayısının hesaplanmasında kullanılabilir. Elektronik ısı sığası katsayısı (γ) da Quantum Espresso programı tarafından hesaplanamamaktadır. Yine bu programa müdahale edilerek bu katsayının hesaplanması sağlanmıştır.** Bu katsayı aşağıdaki formülle verilir,

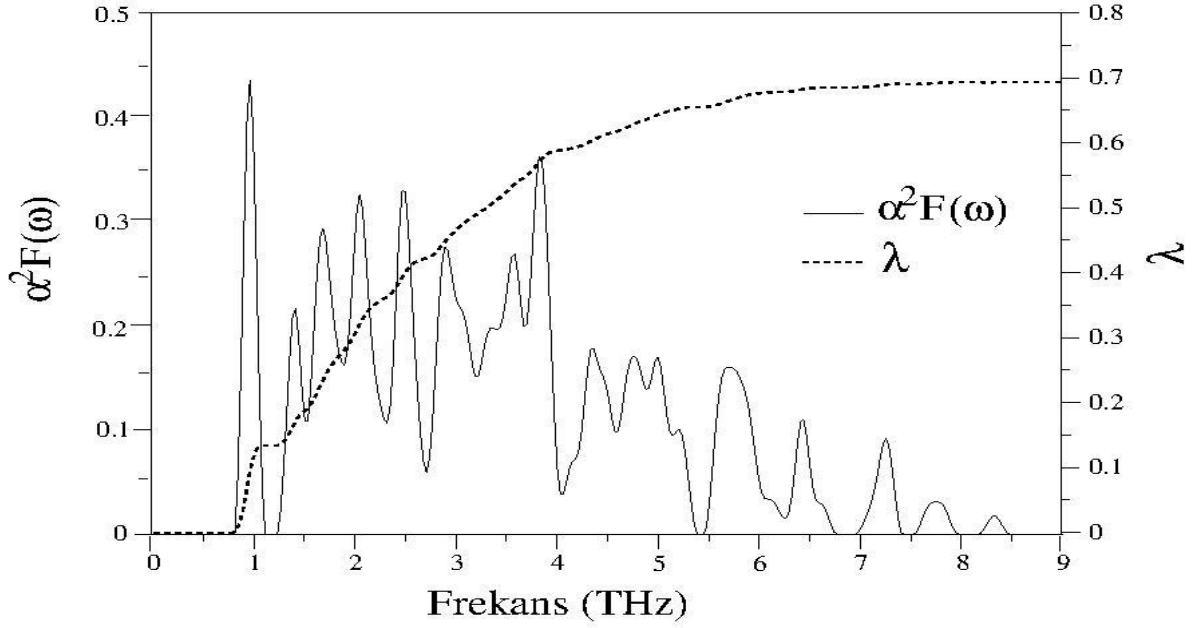
$$\gamma = \frac{1}{3} \pi^2 k_B^2 N(E_F) (1 + \lambda + \mu^*) \quad (3.24)$$

Örnek olarak dhcp La için hesaplanan süperiletkenlik parametreleri Tablo 3.2'de verilmiştir.

Tablo 3.2. Dhcp La için hesaplanan süperiletkenlik parametreleri

	μ^*	$N(E_F)$ (Durum/eV)	λ	ω_{in} (K)	$\langle \omega \rangle$ (K)	$\langle \omega^2 \rangle^{1/2}$	T_c (K)
Dhcp La ^(Bağcı vd. 2010)	0,13	1,49	0,97	82	88	91	4,87
Deneysel ^(Rapp ve Sundqvist 1981)			0,85				5,05

Teorik olarak hesaplanan süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı Tablo 3.2'den görüldüğü gibi deneysel değerden %3,6 oranında farklıdır. Bu iyi uyum bize kullandığımız teorinin ne kadar kayda değer olduğunu açık bir şekilde göstermektedir. **Ayrıca Quantum Espresso programı elektron-fonon etkileşim parametresinin frekansa (ω) göre değişimini vermemektedir. Programa müdahale edilerek bu parametrenin frekansa göre değişimi hesaplanmıştır.** Şekil 3.2'de LaNiGa₂ elektron-fonon spectral fonksiyonunun ve elektron-fonon etkileşim parametresinin frekansa göre değişimi gösterilmiştir (Tütüncü ve Srivastava 2014).



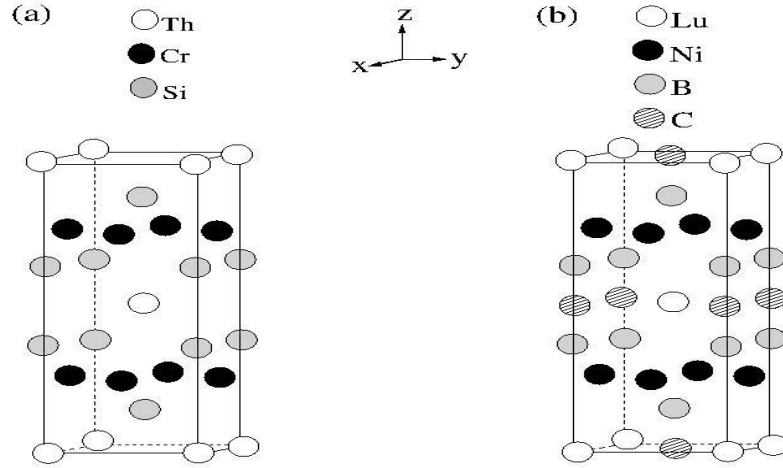
Şekil 3.2. LaNiGa₂ elektron-fonon spektral fonksiyonunun ve elektron-fonon çiftlenim parametresinin frekansa göre değişimi

Bu grafikten elde edilen sonuca göre frekansı 4 THz'den az olan fonon modları elektron-fonon etkileşim parametresine %85'lik bir katkı yapmaktadır. Bu büyük katkının nedeni $\lambda = \int \frac{\alpha^2 F(\omega)}{\omega} d\omega$ ifadesindeki ω^{-1} terimidir. Yukarıdaki grafikten LaNiGa₂ materyali için elektron-fonon etkileşim parametresi 0,695 olarak bulunmuştur. Bu parametre kullanılarak bu malzemenin süperiletkenlik sıcaklığı 1,90 K olarak tayin edilmiştir. Bu değer deneysel değer (Zeng ve Lee 2002) olan 1,7 K'den yine %3,6 farklıdır. Kısacası kullandığımız yöntem süperiletkenlik özelliklerin hesaplanması için oldukça uygundur.

BÖLÜM 4. KONU ve KAPSAM

Süperiletken malzemelerin verimli bir şekilde kullanılabilmesi, temel özelliklerinin detaylı bir şekilde incelenmesi ile mümkündür. Son yıllarda yoğunluk fonksiyonel teorisi, bilgisayarların hesaplama gücünün artmasıyla, kristallerin süperiletkenlik özelliklerinin de incelenmesini mümkün kılmıştır. Bu projenin konusu $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ($\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$ ve $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$) ve ThCr_2Si_2 (LaRu_2P_2 , BaNi_2P_2 , LiCu_2P_2 , SrPd_2Ge_2) kristal yapılarıdaki malzemelerin yapısal, elektronik, titreşim, elektron-fonon etkileşimi ve süperiletkenlik özelliklerinin günümüzdeki en gelişmiş teorik metot olan yoğunluk fonksiyonel teorisiyle incelenmesidir. Projenin konu ve kapsamı aşağıda maddeler halinde belirtilmiştir.

1.) ThCr_2Si_2 kristali hacim merkezli tetragonal örgü üzerine kurulmuş ve uzay grubu $I4/mmm$ olan bir yapıdır. Şekil 4.1 (a)'da bu kristal yapı gösterilmiştir. Bu kristal yapıdaki atomların Wyckoff pozisyonları: Th 2a (0, 0, 0), Cr 4d (0, 1/2, 1/4) ve Si 4e (0, 0, z) olarak verilir. Şekil 4.1 (b)'de görüleceği gibi $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ kristal yapısı ThCr_2Si_2 kristal yapısına oldukça benzemektedir. Lu, Ni ve B atomları sırasıyla Th, Cr ve Si atomlarının pozisyonlarına yerleşirler. C atomu ise 2b (0, 0, 1/2) pozisyonunu doldurur. ThCr_2Si_2 kristal yapısı ilkel birim hücrelerinde 5 atom içerirken karbon atomundan dolayı $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ kristal yapısı 6 atom içerir. İki kristal yapı arasındaki benzerlik onların taban durumu özelliklerinin ve süperiletkenlik özelliklerinin bir arada incelenmesini ilgi çekici yapmaktadır. İki kristal yapı içinde iki tane örgü parametresi (a ve c) ve z iç parametresi tayin edilmesi gerekir. Bunun için yoğunluk fonksiyonel teorisi ile ilk olarak enerji hacim grafikleri hesaplanacak ve daha sonra bu grafiklerden örgü parametreleri ve iç parametre elde edilecektir. Tablo 4.1'de tungsten-carbide kristal yapıya sahip CrC için hesaplanan (Tütüncü vd. 2012) yapısal parametre değerleri verilmiş ve bu değerler diğer teorik çalışmalarla karşılaştırılmıştır. Teorik çalışmalar arasında bir uyum gözlemlenmektedir.

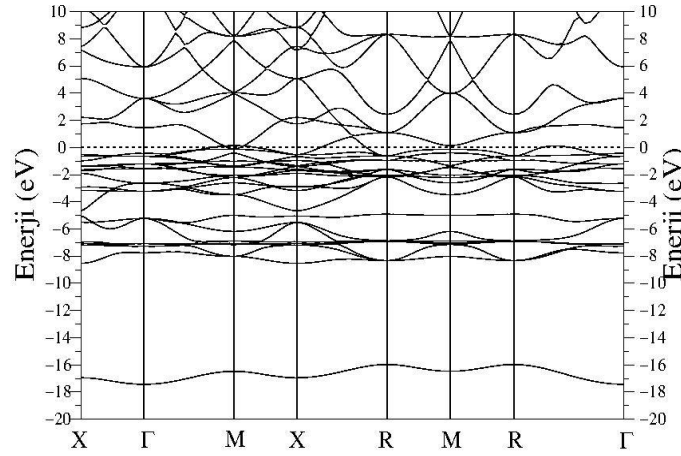


Şekil 4.1. (a) ThCr_2Si_2 kristal yapısı ve b) $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ kristal yapısı

Tablo 4.1. Tungsten-Carbide yapıdaki CrC'nin yapısal özellikleri

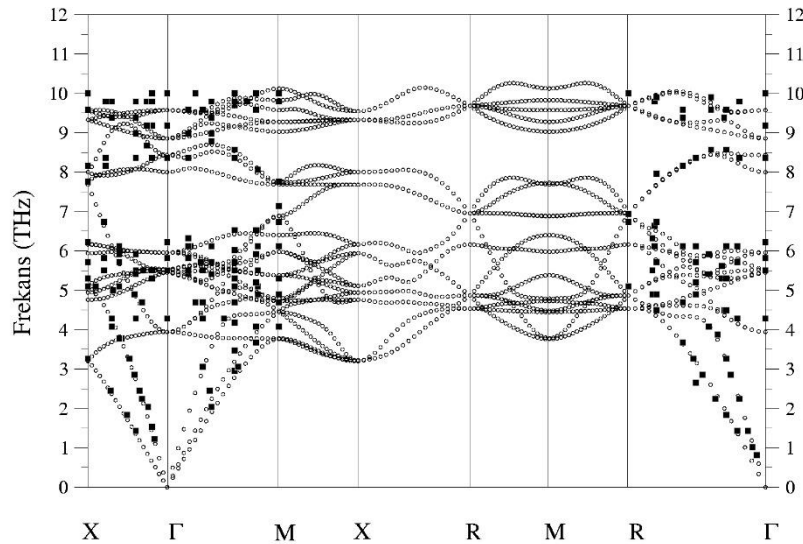
	$\alpha(\text{Å})$	$c(\text{Å})$	$B_0(\text{GPa})$	B'
GGA ^(Tütüncü vd. 2012)	2,71	2,62	337	4,31
LDA ^(Jiang 2008)	2,66	2,60		
GGA ^(Jiang 2008)	2,71	2,62		

2.) Projenin ikinci kısmında süperiletken malzemelerin elektronik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisi kullanılarak hesaplanacaktır. Bir örnek olarak süperiletken ZnNi_3 süperiletkeninin elektronik yapısı (Tütüncü ve Srivastava 2013) Şekil 4.2'de gösterilmiştir. Şekil 4.2'den görüldüğü gibi bazı bandlar Fermi enerjisi seviyesini kesmekte ve böylece iletkenlik bandları ile değerlik bandları üst üste binmektedir. Bu durum incelenen süperiletkenin metalik özellik gösterdiğinin bir kanıtıdır.



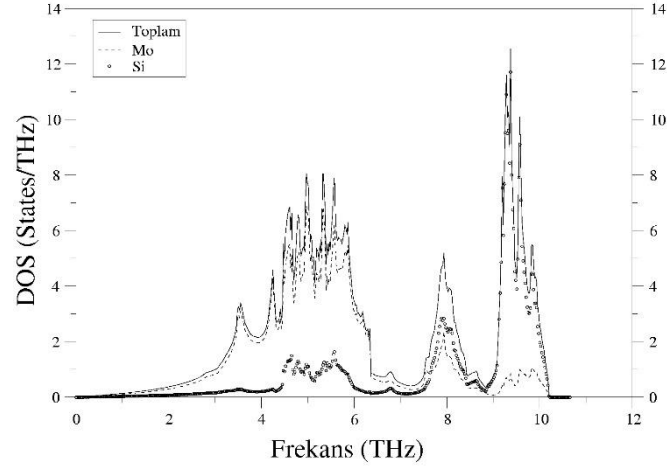
Şekil 4.2. Süperiletken ZnNi₃'ün elektronik yapısı. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.

3.) Elde edilen yapısal ve elektronik özellikler kullanılarak lineer tepki metodu ile projedeki süperiletkenlerin titreşim özellikleri incelenecektir. Cooper çiftlerinin oluşmasında fononların büyük rolü olduğu açıktır. Bu yüzden fonon enerjilerinin hesaplanması süperiletkenliğin incelenmesi için olmazsa olmazdır. Şekil 4.3'te Mo₃Si için elde edilen fonon dispersiyon eğrisi (Tütüncü vd. 2010), deneysel sonuçlarla (Christensen vd. 1986) birlikte gösterilmiştir. Hesaplanan sonuçlar deneysel değerler ile uyum içindedir. Bu uyum yoğunluk fonksiyonel teorisine dayanan lineer tepki metodunun fonon özelliklerini incelemek için iyi bir yöntem olduğunun kanıtıdır.



Şekil 4.3. Mo₃Si'nin fonon dispersiyon grafiği. Boş daireler teorik sonuçları, dolu kareler ise deneysel sonuçları göstermektedir.

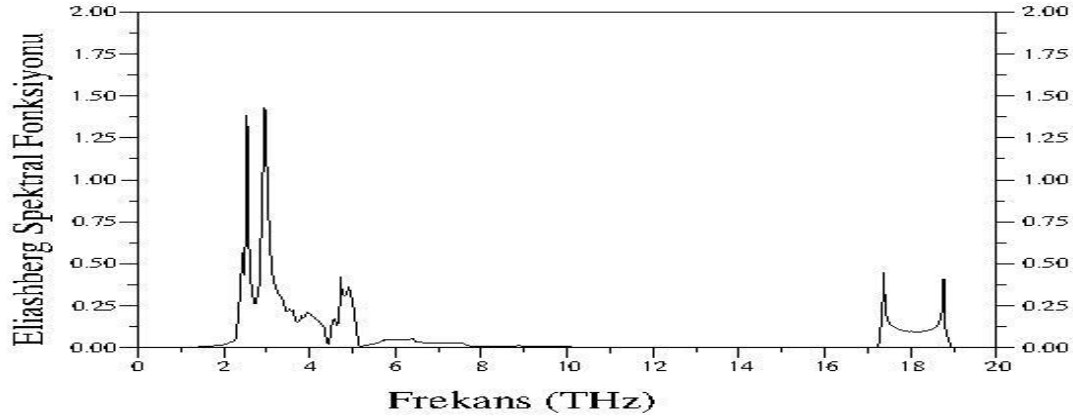
Örgü dinamiği çalışmalarında durum yoğunluğu oldukça önemlidir. Durum yoğunluğu grafiği hangi frekans aralığında hangi atomların titreştiğini açık bir şekilde verir. Örnek olarak Mo_3Si için hesaplanan toplam ve parçalı durum yoğunluğu grafikleri Şekil 4.4'te sunulmuştur.



Şekil 4.4. Mo_3Si için hesaplanan toplam ve parçalı durum yoğunluğu grafikleri

Şekil 4.4'te görüldüğü gibi frekans aralığı 0-6,5 THz arasında bulunan modlar Mo atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Bu titreşim bölgesinde Si atomlarından da katkı gelmektedir fakat bu katkı Mo atomlarından gelen katkıya göre oldukça düşüktür. 8 THz civarındaki pik hem Mo hem de Si atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. 9 THz'in üstündeki pikler genel olarak Si atomlarının titreşimleriyle oluşmaktadır. Bu bölgede Mo atomları ağır kütlelerinden dolayı oldukça az katkı yapmaktadırlar.

4.) Projemizin son kısmında elektron-fonon etkileşimi projedeki süperiletkenler için incelenecektir. Elektron-fonon etkileşim parametresini elde etmenin en iyi yolu Eliashberg spektral fonksiyonunun hesaplanması ile mümkündür. ZnNNi_3 için hesaplanan bu fonksiyon Şekil 4.5'te gösterilmiştir.



Şekil 4.5. ZnNNi₃ için hesaplanan Eliashberg spektral fonksiyonu

Eliashberg spektral fonksiyonunda 2-4 THz arasında maksimumlar gözlemlenmiştir. Bu maksimumlar, frekansı 4 THz'den az olan fonon modlarının elektron-fonon etkileşiminde daha önemli rol oynadığının bir işaretidir. Bu fonksiyonu kullanarak elektron-fonon etkileşiminin büyüklüğünü gösteren ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi Denklem 3.15'te verilen formül ile hesaplanabilir. (McMillan 1968; Allen 1972; Weber 1973; Bauer vd. 1998; Bağcı vd. 2010). Denklem 3.15' de verilen eşitlikten ZnNNi₃ için ortalama elektron-fonon etkileşim parametresi 0,654 olarak hesaplanmıştır. Bu parametreye frekansı 4 THz'den az olan fononlar %77 katkı yapmaktadır. Frekansı 4 THz'den az olan fononlar Ni atomlarının titreşimlerinden kaynaklanmaktadır. Böylece bu materyalde süperiletkenlikte Ni atomlarının rolü oldukça büyüktür. Bu beklenen bir sonuçtur çünkü Fermi seviyesindeki durum yoğunluğuna ($N(E_F)$) Ni atomunun elektronik durumlarının katkısı %86'dır.

Elektron-fonon etkileşim parametresi hesaplandıktan sonra Coulomb itme parametresi (μ^*) Denklem 3.18'de verilen Benneman-Garland formülünden hesaplanabilir (Bennemann ve Garland 1973). Hesaplanan $N(E_F)$, μ^* ve λ değerleri kullanılarak elektronik ısı sığası katsayısı (γ) Denklem 3.24'de verilen formülle elde edilebilir (Tütüncü ve Srivastava 2013). ZnNNi₃ için elektronik ısı sığası katsayısı 12,83 mJ/molK² olarak hesaplanmıştır. Bu değer deneysel değer olan 13 mJ/molK² ile oldukça iyi bir uyum içindedir (Uehara vd. 2010). Bu uyum yoğunluk fonksiyonel teorisinin süperiletkenlik hesaplarında başarısının bir göstergesi sayılabilir.

Süperiletkenlik geçiş sıcaklığı (T_c) Denklem 3.16'da verilen Allen-Dynes formülünden hesaplanabilir (McMillan 1968; Allen 1972; Bağcı vd. 2010). Denklem 3.16'da verilen formül kullanılarak ZnNNi₃ için süperiletkenlik geçiş sıcaklığı $T_c = 2,93$ K olarak hesaplanmıştır. Bu değer deneysel değer olan 3 K ile uyumludur (Uehara vd. 2010). Kısacası lineer tepki metodu



ile yapılan fonon ve süperiletkenlik hesapları deneysel sonuçlarla uyum göstermektedir. Eğer deneysel sonuçlar mevcut değil ise bu teorik hesaplamalar deneysel hesaplamalara ışık tutacaktır.

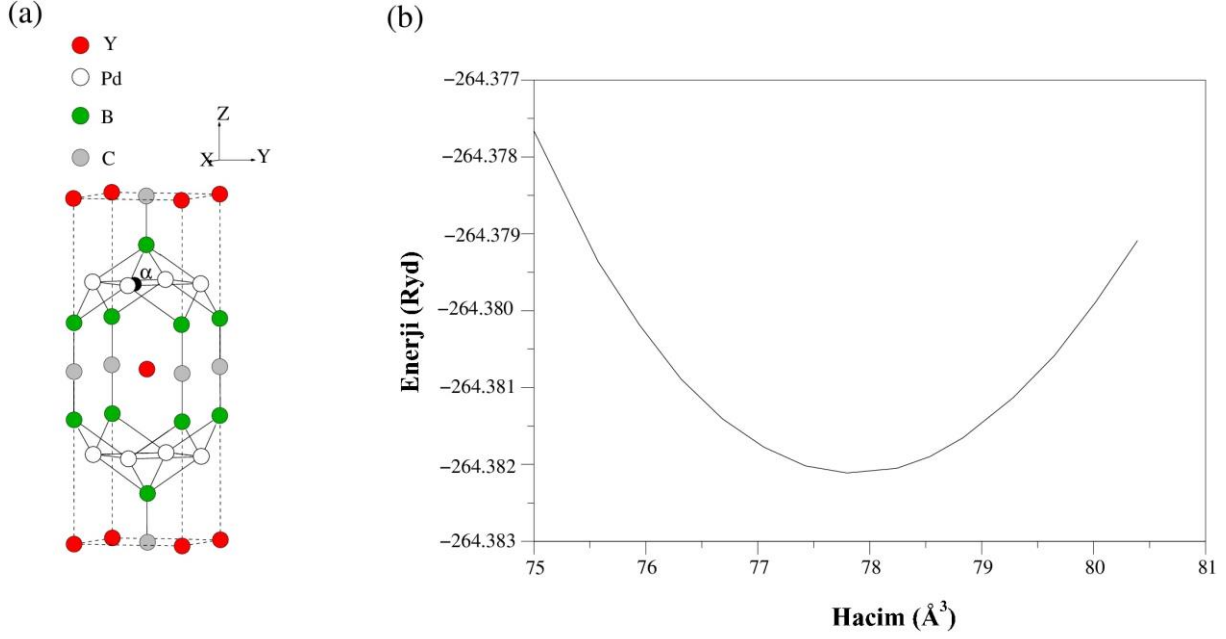
BÖLÜM 5. ANALİZ VE BULGULAR

Bu proje çalışmasında önerilmiş olan YPd_2B_2C , $LaPt_2B_2C$, $SrPd_2Ge_2$, $LaRu_2P_2$, $BaNi_2P_2$ ve $LiCu_2P_2$ kristallerinin yapısal, elektronik ve süperiletkenlik özellikleri yoğunluk fonksiyonel teorisiyle detaylı bir şekilde incelenmiştir. Elde edilen bulgular bu bölümde anlatılacaktır.

5.1 YPd_2B_2C Materyalinin İncelenmesi

5.1.1 YPd_2B_2C Materyalinin Yapısal Özellikleri

YPd_2B_2C materyali için elde edilmiş kristal yapı ve enerji-hacim grafiği Şekil 5.1'de verilmiştir. Bu malzeme Cisim Merkezli Tetragonal (Body Centred Tetragonal-BCT) $LuNi_2B_2C$ kristal yapıda (ThCr₂Si₂-yapı bazlı) olduğu bulunmuştur. Enerji-Hacim grafiği çizilerek malzemenin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisine göre en kararlı olduğu nokta hesaplanmış ve bu noktada malzemenin örgü parametreleri ile Bulk modülü ve Bulk modülünün basınca göre birinci türevi de hesaplanmıştır. Bu grafikten elde edilen örgü parametreleri YPd_2B_2C için $a = b = 3,807 \text{ \AA}$, $c = 10,745 \text{ \AA}$ ve iç parametre değeri kristal koordinatlar cinsinden $z=0,3631$ olarak hesaplandı. Bulunan bu değerler daha önceki deneysel sonuçlar olan $a = b = 3,760 \text{ \AA}$ ve $c = 10,740 \text{ \AA}$ (Bitterlich vd. 2001) ile uyum içerisinde olduğu görülmektedir. YPd_2B_2C için bulk modülü (B) ve bulk modülün basınca göre birinci türevi (B') değerleri ise sırasıyla 203,5 GPa ve 4,01 olarak hesaplanmıştır. B değerinin daha önceden bulunmuş olan teorik değeri 228,0 GPa'dır (Cappannini vd. 1998). Tablo 5.1'de malzemenin hesaplanan teorik değerleri ve onlara karşılık gelen önceki deneysel ve teorik değerler görülmektedir. Bunlara ek olarak elektron-fonon etkileşimini farklı şekillerde etkilediğini düşündüğümüz bazı mesafeler ve açılar da hesaplanmıştır. Karbon ve Bor atomları arasındaki mesafe $d(C-B)$; geçiş metalleri Paladyumlar arasındaki mesafe $d(Pd-Pd)$; Paladyum ve Bor atomları arasındaki mesafe $d(Pd-B)$ ve B-Pd-B arasındaki açı " α " da hesaplamalarımız arasındadır. Tablo 5.1'den de görülebileceği gibi elde ettiğimiz sonuçların daha önceki verilerle iyi uyumlu olduğu görülmektedir. Bu da yapmış olduğumuz yapısal hesaplamaların başarılı olduğunun bir kanıtıdır.



Şekil 5.1. YPd₂B₂C malzemesi için a.) kristal yapının gösterimi ve b.) hesaplamalar sonucu elde edilen enerji-hacim grafiği

Atomlar arası mesafeleri ve açısı, diğer materyaller ile de kıyaslayarak Şekil 5.1'de gözlemlenen tetrahedra yapının ideal açısı olan 109⁰'ye yaklaşıldıkça süperiletkenlik parametresinin değişimi hakkında yorumda bulunabileceğiz.

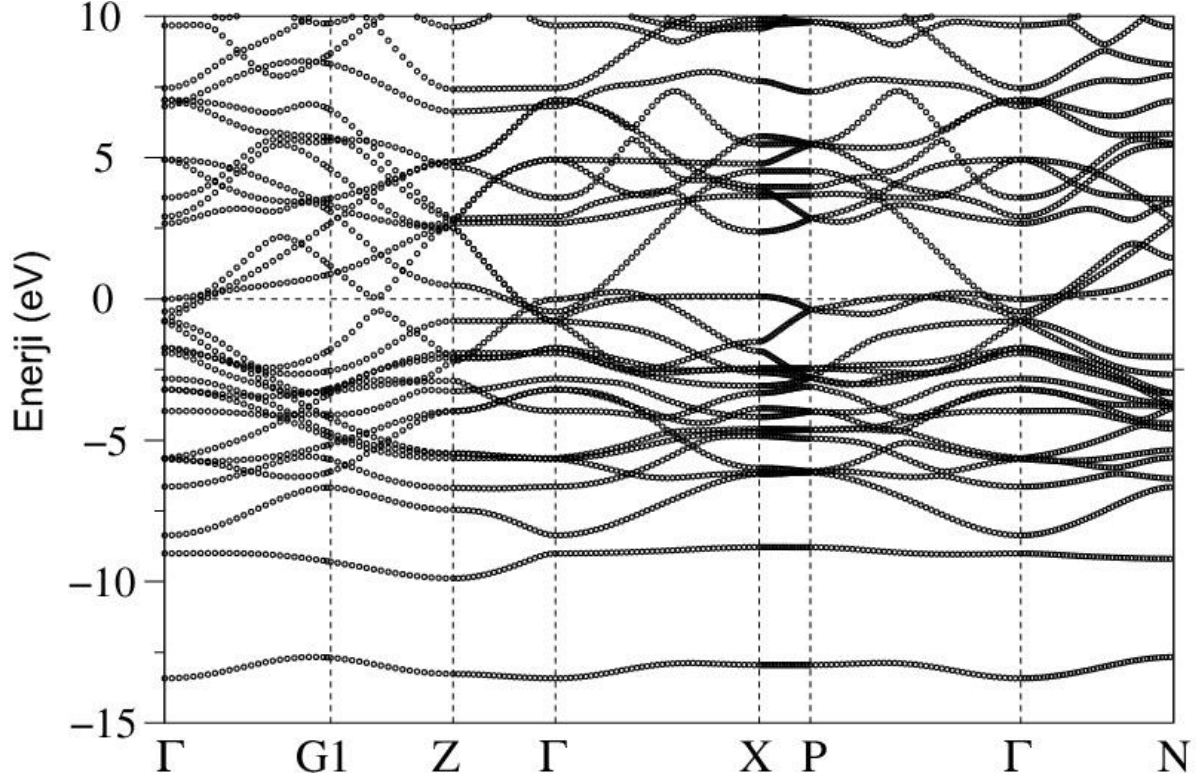
Tablo 5.1. YPd₂B₂C malzemesi için hesaplanan yapısal değerlerin daha önceki deneysel ve teorik verilerle kıyaslanması

	$a(\text{Å})$	$c(\text{Å})$	$V(\text{Å}^3)$	B(Gpa)	B'	z	d(Pd-B)(Å)	α (°)
Bu Çalışma	3,807	10,745	77,86	203,5	4,01	0,363	2,258	106,84
LDA (Cappannini vd. 1998)	3,760	10,719	75,77	228				
Deneysel (Sun vd. 1994)	3,710	10,810	74,39					
Deneysel (Ghosh vd. 2001)	3,760	10,740	75,91					

5.1.2 YPd₂B₂C Materyalinin Elektronik Yapısı

YPd₂B₂C için elektronik enerji band yapısı Şekil 5.2'de görüldüğü gibi elde edilmiştir. Fermi enerji seviyesi sıfır olarak ayarlanmış ve yatay kesikli çizgi ile gösterilmiştir. Elde edilen bulgular daha önce hesaplanmış teorik çalışmalar ile oldukça uyumludur (Sun vd. 1994). Şekli incelediğimizde dağılımda Fermi seviyesinin üstündeki ve altındaki bandlarda hatırı sayılır bir üst üste binme olduğu açıkça görülmektedir. Bu da YPd₂B₂C'nin metalik bir yapıya sahip olduğunun kanıtıdır. En düşük band, diğer valans bandlarından tamamen ayrılmış ve özellikle

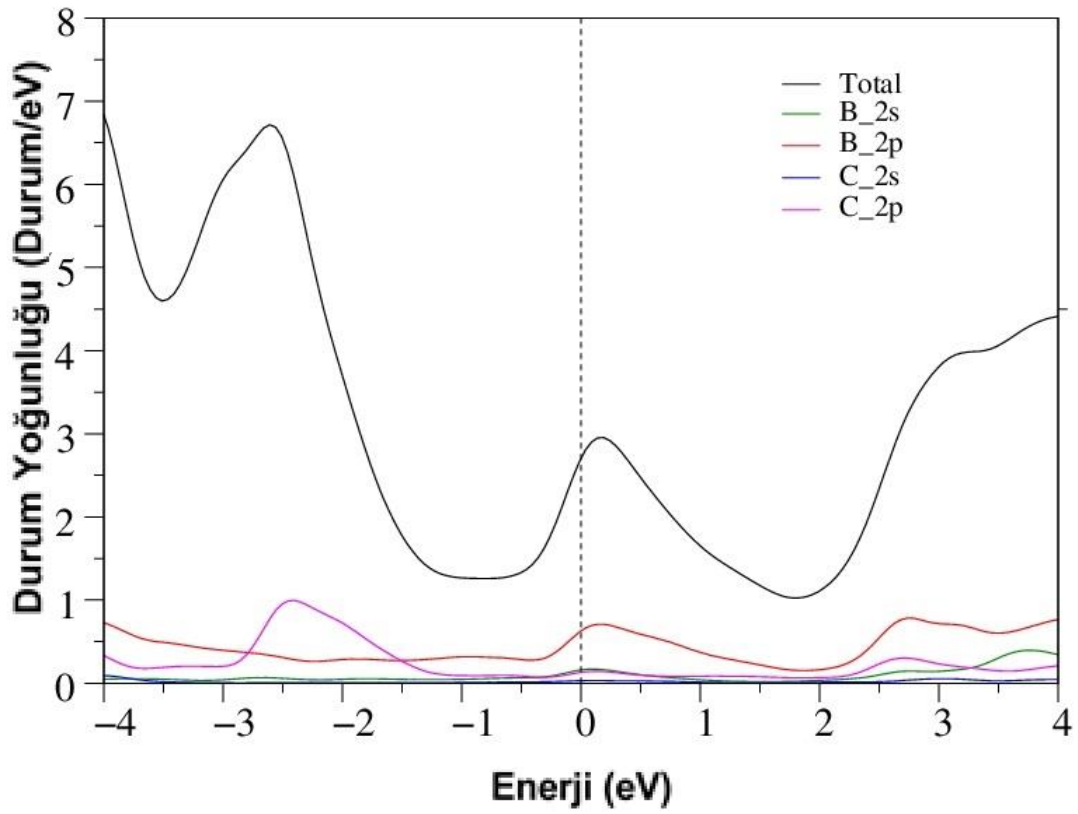
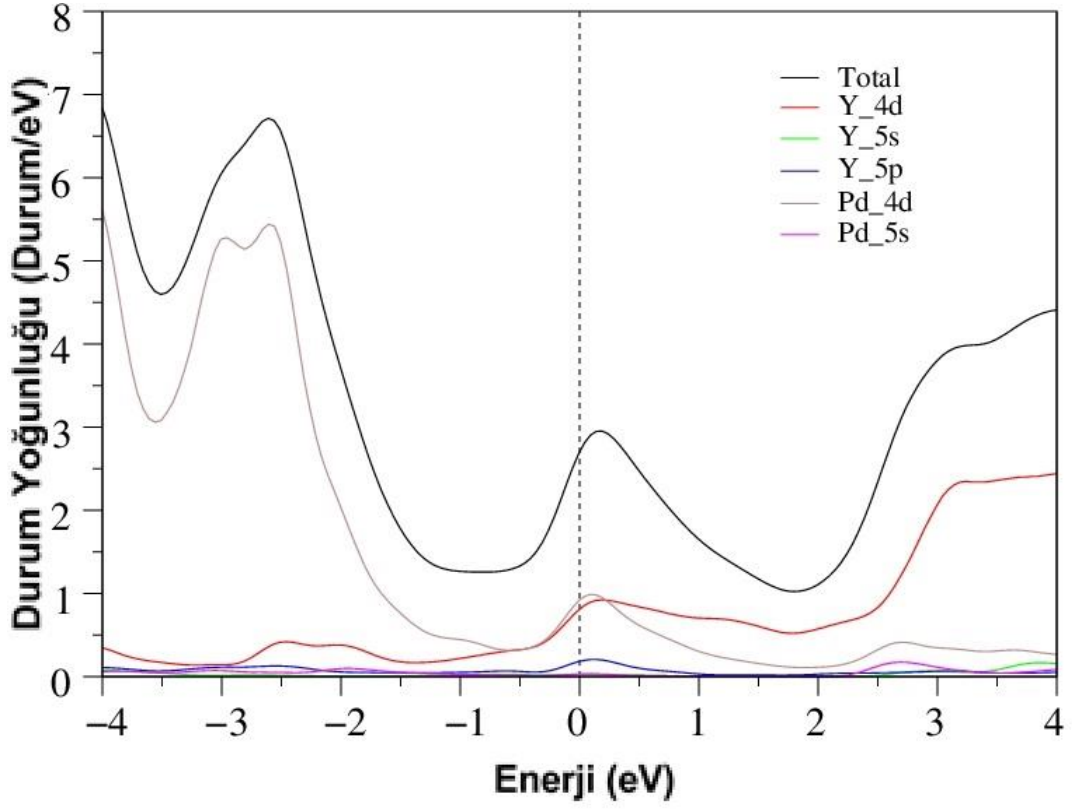
Γ -N ve Γ -P simetri yönlerinde parabolik bir dağılım göstermektedir. Şekil 5.3'te görülen enerji durum yoğunluğu grafiklerine bakarak bu banda daha çok C 2s orbitalinin katkı yaptığını, B atomunun da 2s ve 2p orbitallerinin de bir miktar katkıda bulunduğunu görebiliriz. -9 eV seviyesinden başlayan tek banda katkı daha çok B 2s ve C 2p orbitallerinden kaynaklanmıştır.



Şekil 5.2. YPd₂B₂C malzemesi için yüksek simetri boyunca elektronik enerji band yapısı. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.

Fermi seviyesine en fazla katkıda bulunan orbital ise Pd 4d olduğu görülmektedir. Daha sonraki en büyük katkı Y atomlarının 4d orbitalinden gelmektedir. B ve C atomları ise 2p orbital hibritleşmesi ile Fermi seviyesine katkıda bulunmaktadır. Bulmuş olduğumuz bu sonuçlar daha önceki teorik çalışma ile de oldukça uyumludur (Sun vd. 1994).

Elektronik durum yoğunluklarına bakıldığında Fermi seviyesi civarındaki durum yoğunluğu ($N(E_F)$) 2,86 durum/eV olarak bulunmuştur. $N(E_F)$ değerine en büyük katkı %32 ile Pd 4d orbitalinden, daha sonra ise %28 ile Y 4d orbitalinden gelmektedir. B atomunun 2p orbitalinin katkısı ise %22 kadar olduğu hesaplanmıştır. Bu da Cooper çiftleri oluşumuna en fazla katkının bu üç orbitalden geldiğini göstermektedir (Şekil 5.3).

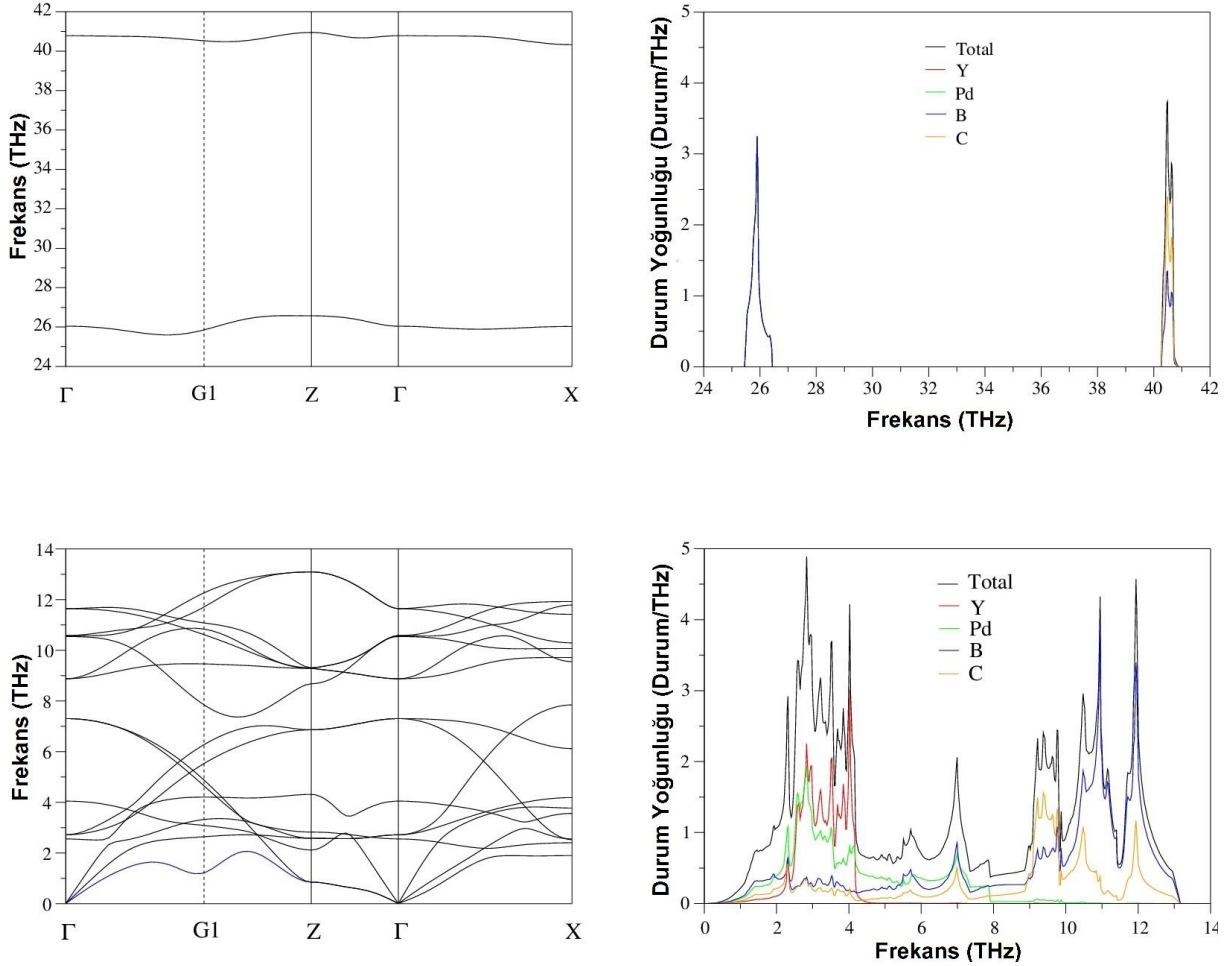


Şekil 5.3. YPd₂B₂C malzemesi için toplam (siyah) ve kısmi (renkli) elektronik durum yoğunluğu. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.

5.1.3 YPd₂B₂C Materyalinin Titreşim Özellikleri

Titreşim özellikleri tam bir elektron-fonon etkileşim parametresinin hesaplanabilmesi için ölçülmesi gereken en önemli özelliklerden birisidir. Bunun için Brillouin bölgesi içerisinde hesapladığımız fonon dağılım eğrileri Şekil 5.4'te görülmektedir. Tüm fonon modları pozitif frekanslara sahip olduklarından malzemenin Cisim merkezli tetragonal yapıda dinamik olarak kararlı olduğunu rahatlıkla söyleyebiliriz.

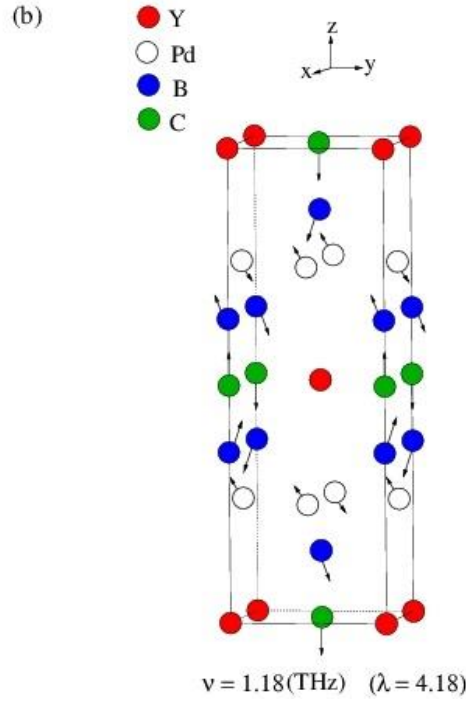
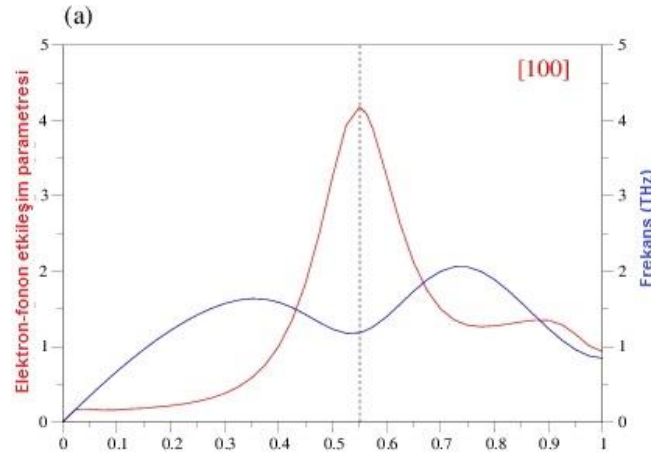
YPd₂B₂C malzemesi her bir birim hücrede altı atom içerdiğinden toplamda on sekiz adet fonon moduna sahiptir. Bunlardan üçü akustik diğer on beş tanesi ise optik moddur. İlk on altı atom modu 13,2 THz seviyesine kadar çıkarken 26 THz frekansındaki A_{1g} modu neredeyse dümdüzdür. En üstteki düz band ise 41 THz seviyelerinde yer almaktadır.



Şekil 5.4. (Solda) Titreşim modlarının farklı yüksek simetri doğrultularında dağılımlarının gösterilmesi (sağda) titreşim durum yoğunluğunun atomların katkısına göre gösterimi

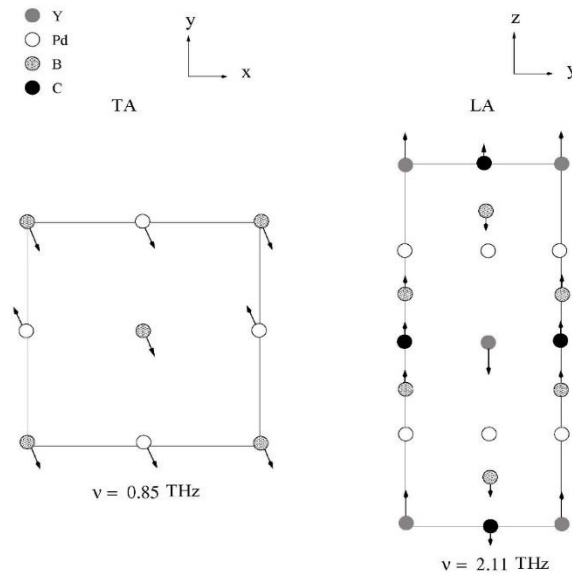
5.1.4 YPd₂B₂C Materyalinin Süperiletkenlik Özellikleri

Süperiletkenlik incelemeleri için elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın hesabını yapmak için Denklem 3.15'te verilen eşitlik kullanıldı. Bu hesaba göre YPd₂B₂C malzemesi için elde ettiğimiz elektron-fonon etkileşim parametresi değeri 1,48 civarında bulunmuştur. Bu parametre oldukça güçlü bir elektron-fonon etkileşimi olduğunu ve yüksek bir geçiş sıcaklığı beklenmesini öngörmektedir. Şekil 5.5'te elektron-fonon etkileşimine en yüksek katkıyı sağlayan TA₁ titreşimi görülmektedir.



Şekil 5.5. YPd₂B₂C için (a) [100] doğrultusunda elektron-fonon parametresinin (kırmızı çizgi) TA₁ fonon titreşim moduyla (mavi çizgi) değişimi ve (b) $q = \frac{2\pi}{a}$ (0.55,0.00,0.00) noktasında TA₁ modunun özvektörler ile atomik yer değiştirmelerin gösterimi.

YPd₂B₂C malzemesi için Z noktasında en büyük katkıyı yapan Enine Akustik (TA) ve Boyuna Akustik (LA) modlarının özvektörleri ile gösterimi de Şekil 5.6.'da verilmiştir. Yine Şekil 5.7' de $\Gamma - Z$ doğrultusu boyunca düşük frekanslı titreşim modlarının dağılımı ve elektron-fonon parametresinin $\Gamma - Z$ doğrultusu boyunca en yüksek katkıyı yapan modlarla değişimi görülmektedir. Dikkat edileceği gibi Γ noktasında en yüksek katkı B_{1g} modundan geliyor olsa da $\Gamma - Z$ boyunca en yüksek katkı TA modundan kaynaklanmaktadır. Süperiletkenliğe geçiş sıcaklığının hesaplanması için Denklem 3.14'ten yararlanılarak Eliashberg spektral fonksiyonu hesaplanır. Denklem 3.14 ve Denklem 3.15'ten faydalanılarak Denklem 3.17'de verilmiş olan logaritmik ortalama fonon frekansı elde edilir. Bu hesaplama yapıldıktan sonra Allen-Dynes denklemi ile süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı bulunabilir. Bulunan değerler ve daha önceki çalışmalar ile kıyaslanmaları Tablo 5.2'de verilmiştir.



Şekil 5.6. YPd₂B₂C malzemesi için Z noktasında TA ve LA modlarının özvektörleri ile gösterimi

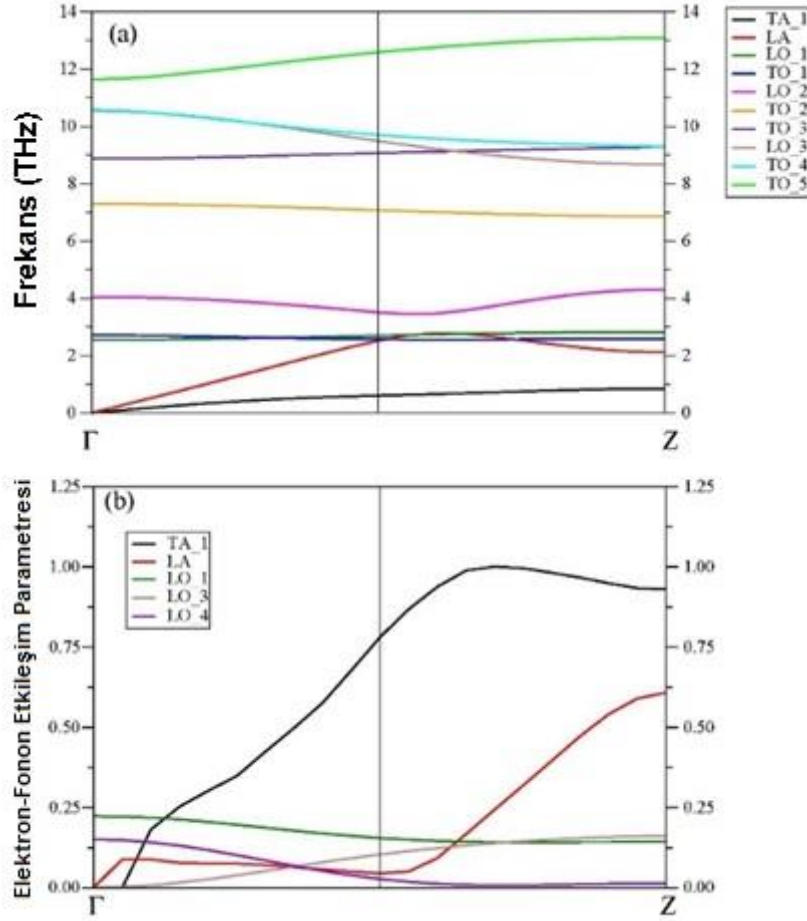
Bilindiği gibi Debye sıcaklığı kullanılarak kritik sıcaklık;

$$T_c = \frac{\theta_D}{1,45} \exp\left(-\frac{1,04(1 + \lambda)}{\lambda - \mu^*(1 + 0,62\lambda)}\right) \quad (3.1)$$

olarak da bulunabilir. Bu iki değer karşılaştırılarak yine aynı tabloda Debye sıcaklığı;

$$\theta_D = \frac{1,45}{1,2} \omega_{ln} \quad (3.2)$$

denkleminde elde edilmiştir. Görüldüğü gibi hesaplamalarımızla bulduğumuz teorik T_c değeri ile deneysel T_c değeri arasında oldukça iyi bir uyum söz konusudur.

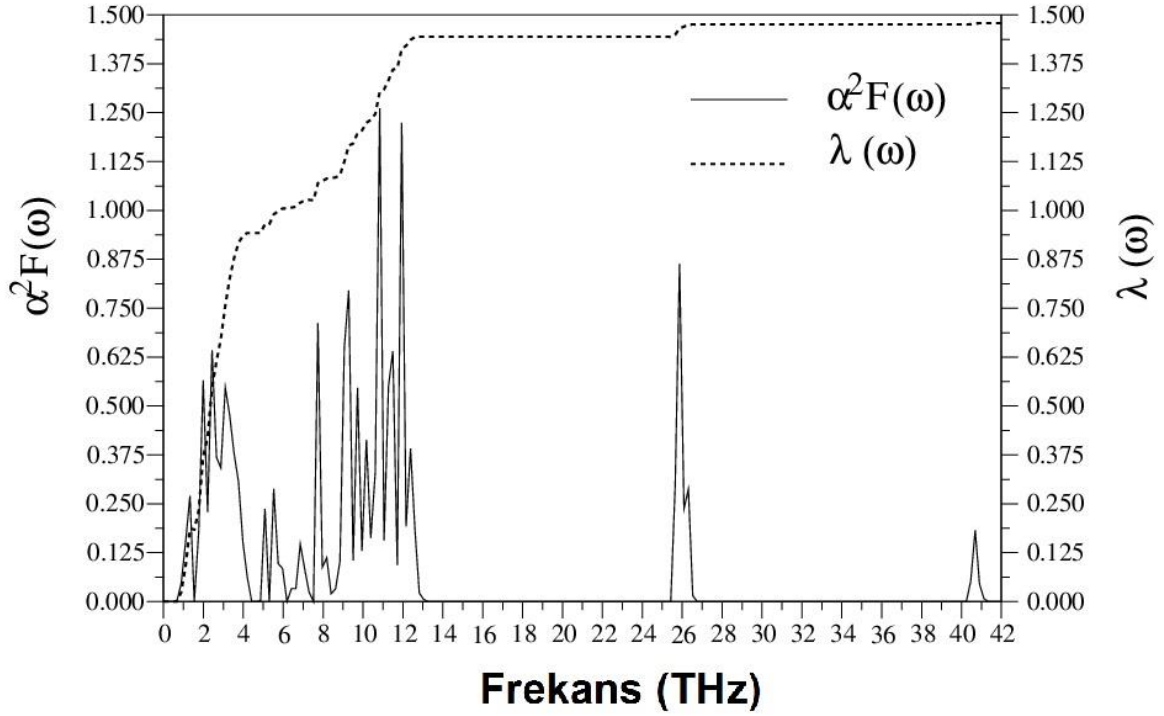


Şekil 5.7. YPd₂B₂C malzemesi için (Üstte) $\Gamma - Z$ doğrultusu boyunca düşük frekanslı titreşimlerin dağılımı görülmektedir. (Altta) $\Gamma - Z$ boyunca λ parametresine en yüksek katkıyı yapan titreşim modlarının etkisi görülmektedir.

Tablo 5.2. YPd₂B₂C malzemesi için elde edilmiş değerler; $N(E_F)$, Fermi seviyesinde durum yoğunluğunu; λ , elektron-fonon etkileşim parametresini; ω_{ln} , ortalama logaritmik frekansı; θ_D , Debye sıcaklığını; T_c , süperiletkenliğe geçiş sıcaklığını göstermektedir.

	$N(E_F)$ (durum/eV)	λ	ω_{ln} (K)	θ_D (K)	T_c (K)
Bu Çalışma	2,86	1,48	182	218	20,6
Deneysel (Sun vd. 1994)					21

Elektron-fonon parametresinin hesaplanmasından sonra Eliashberg spektral fonksiyonunu kullandık ve elde ettiğimiz dağılımları Şekil 5.8'de gösterdik. Buna göre elektron-fonon etkileşim parametresine en büyük katkı düşük frekanslı modlardan gelmekte olduğu bariz bir biçimde görülmektedir.



Şekil 5.8. YPd₂B₂C malzemesi için Eliashberg spektral fonksiyonunun elektron-fonon etkileşim parametresine göre değişimi

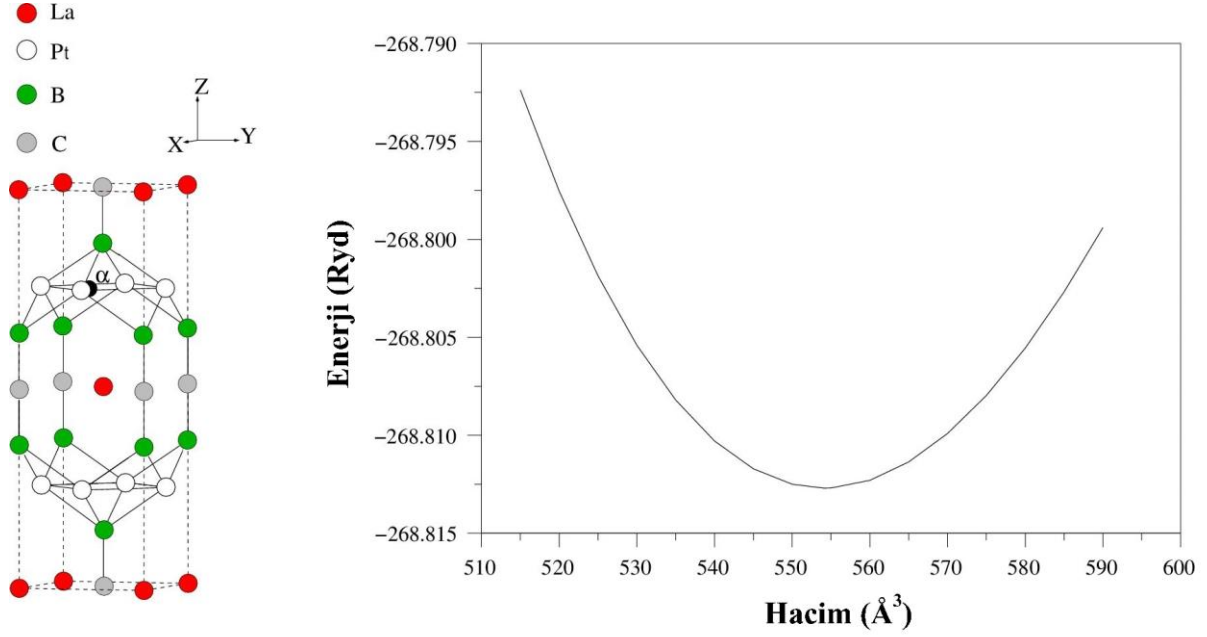
5.2 LaPt₂B₂C Materyalinin İncelenmesi

5.2.1 LaPt₂B₂C Materyalinin Yapısal Özellikleri

LaPt₂B₂C malzemesi için örgü parametreleri $a = b = 3,904 \text{ \AA}$ ve $c = 10,773 \text{ \AA}$ olarak hesaplanmış ve kristal yapı da Şekil 5.9'da gösterilmiştir. Aynı zamanda hesaplanan yapısal değerlerle daha önceden yapılmış deneysel çalışmaların bir karşılaştırılmasına Tablo 5.3'ten ulaşılabilir.

Tablo 5.3. LaPd₂B₂C malzemesi için hesaplanan yapısal değerlerin daha önceki deneysel ve teorik verilerle kıyaslanması

	$a(\text{\AA})$	$c(\text{\AA})$	$V(\text{\AA}^3)$	B(Gpa)	z	$d(\text{C-B})(\text{\AA})$	$d(\text{Pt-B})(\text{\AA})$
Bu Çalışma	3,904	10,773	82,09	188,6	0,362	1,485	2,296
Deneysel (Siegrist vd. 1994)	3,868	10,705	80,08			1,48	2,274

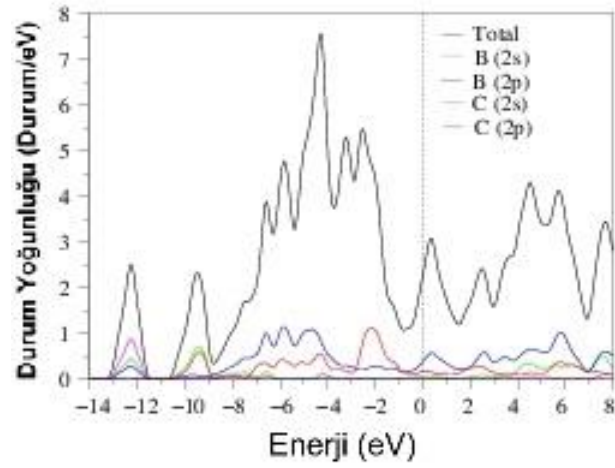
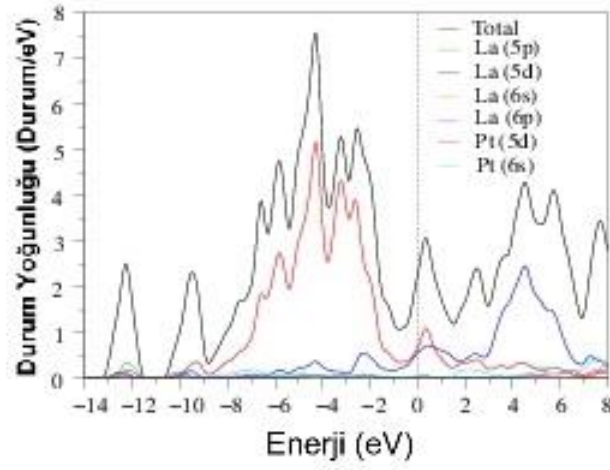
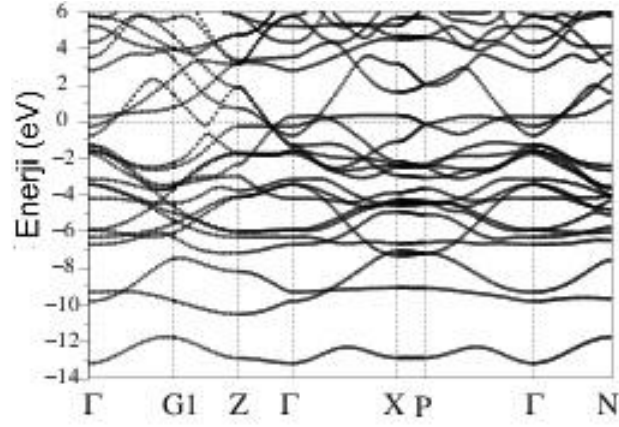


Şekil 5.9. LaPt₂B₂C malzemesi için a.) kristal yapının gösterimi ve b.) hesaplamalar sonucu elde edilen enerji-hacim grafiği

Tablodan da görüleceği üzere bulmuş olduğumuz değerler, deneysel verilerle oldukça iyi uyum içerisindedir. Bu da kullanmış olduğumuz metodun bu malzemenin araştırılması için ideal bir seçim olduğunu göstermektedir.

5.2.2 LaPt₂B₂C Materyalinin Elektronik Özellikleri

LaPt₂B₂C malzemesi de incelediğimiz YPd₂B₂C malzemesinde olduğu gibi metalik özellik göstermektedir (Şekil 5.10). En ilgi çekici özellik Γ -Z yönünde ilerlerken Fermi seviyesinin hemen altında yer alan doğrusal banddır. Bu band Pt atomlarının 5d orbitalince oluşturulmuştur. Durum yoğunluğu Fermi seviyesinde 2,18 durum/eV olarak hesaplanmıştır. Pt atomu Fermi seviyesinde 36% katkı ile baskın rol oynamaktadır. La, B ve C atomlarının Fermi seviyesine katkıları ise sırasıyla 30%, 23 % ve 11% kadardır (Şekil 5.10).

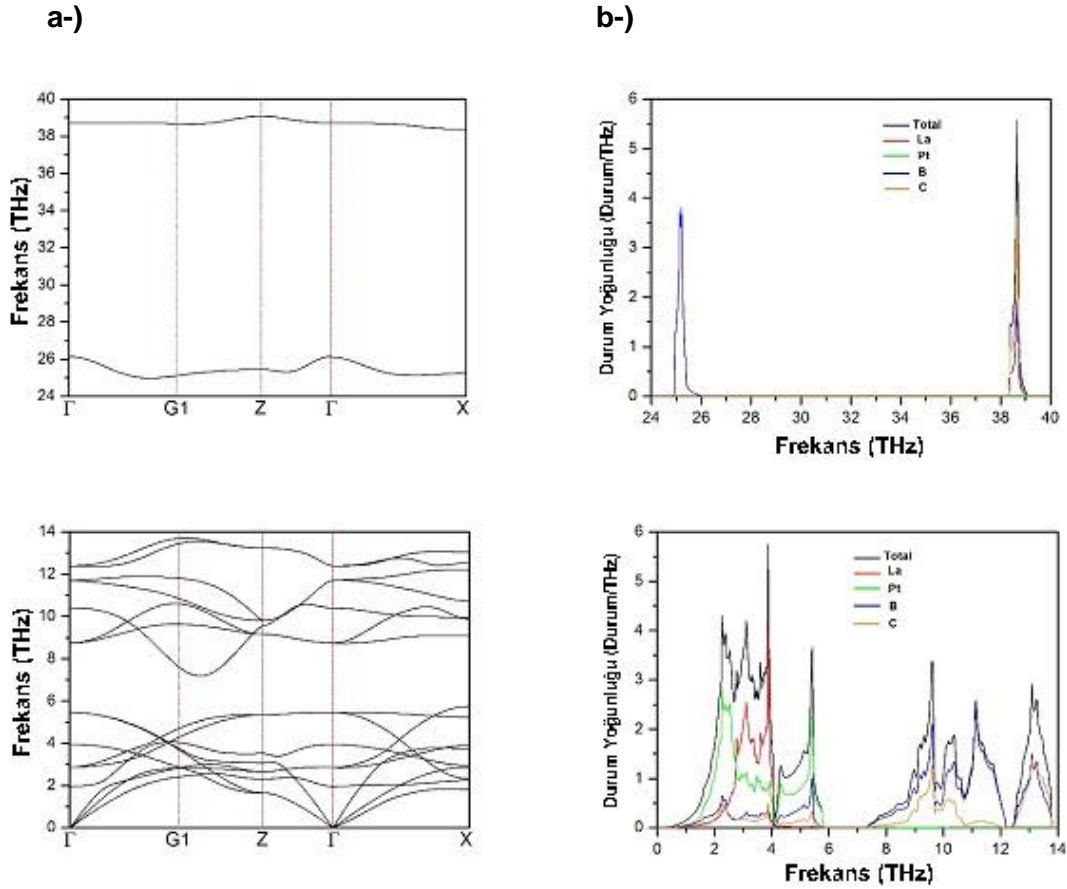


Şekil 5.10. LaPt₂B₂C için elektronik band dağılımı ve hesaplanmış durum yoğunlukları

5.2.3 LaPt₂B₂C Materyalinin Titreşim Özellikleri

Titreşim özellikleri tam bir elektron-fonon etkileşim parametresinin hesaplanabilmesi için ölçülmesi gereken en önemli özelliklerden birisidir. LaPt₂B₂C materyali için Brillouin bölgesi içerisinde hesapladığımız fonon dağılım eğrileri Şekil 5.11'de görülmektedir. Fonon dağılım eğrisi incelendiğinde dört bölgeye ayrıldığı görülmektedir. Şekilden görüldüğü gibi tüm fonon modları pozitif frekanslara sahip olduklarından malzemenin Cisim Merkezli Tetragonal yapıda dinamik olarak kararlı olduğu söylenebilir.

LaPt₂B₂C malzemesi için her bir birim hücre altı atom içerdiğinden toplamda on sekiz adet fonon modu vardır. Bunlardan üçü akustik diğer on beş tanesi ise optik fonon moddur. Üç akustik ve altı optik fonon modu 5,5 THz seviyesinin altında kalan düşük frekans bölgesindedir. Yedi tane optik fonon modu orta düzeyli frekans bölgesindedir. Bu iki bölge 1,5 THz'lik bir değer ile birbirinden ayrılmıştır. Diğer iki fonon modu 24 THz seviyesinden yüksek olan yüksek frekans bölgesindedir.

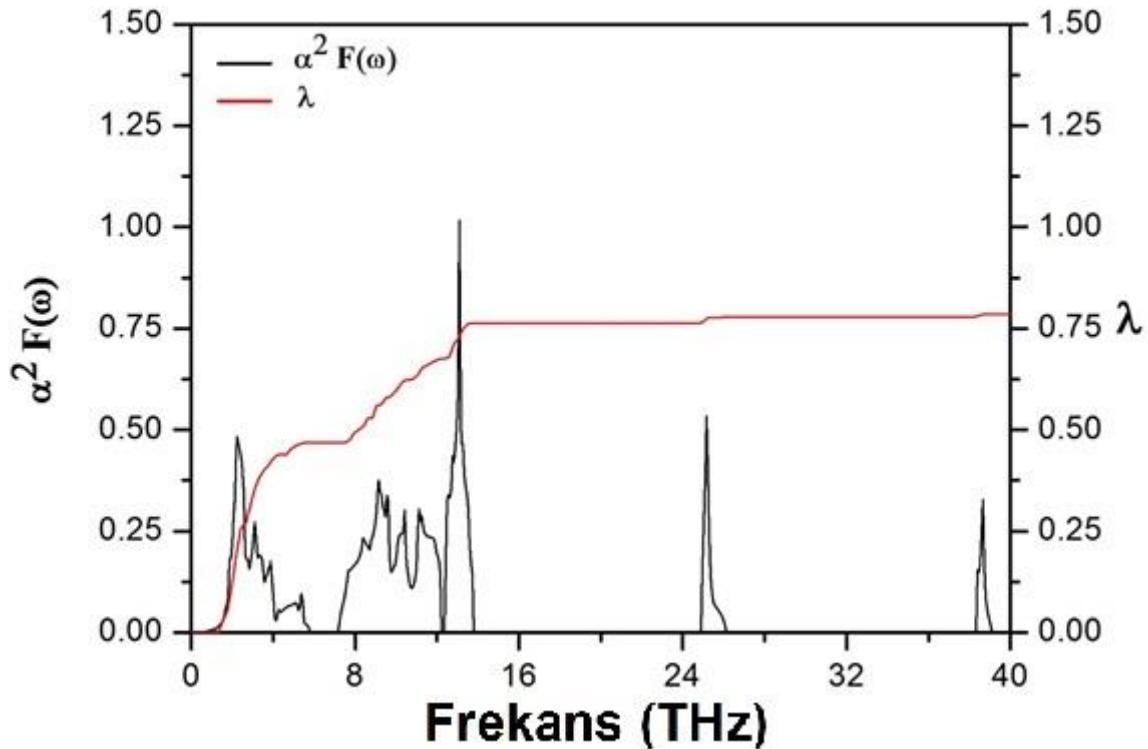


Şekil 5.11. LaPt₂B₂C malzemesi için a-) (Solda) Titreşim modlarının farklı yüksek simetri doğrultularında dağılımlarının gösterilmesi b-) (sağda) titreşim durum yoğunluğunun atomların katkısına göre gösterimi

Fonon durum yoğunluğu eğrisi Şekil 5.11.b' de gösterilmektedir. Fonon durum yoğunluğu 0 ile 2,5 THz bölgesinde en büyük katkı Pt atomlarından gelmektedir. 2,5 ile 4 THz bölgesinde La ve Pt atomları arasında güçlü bir hibritleşme olduğu görünmektedir. Bu bölgede en fazla katkı bu hibritleşmeden kaynaklanmaktadır. Bu bölgede B ve C atomlarından gelen katkı küçüktür. 7,3 ile 12,2 THz arasında kalan bölgede fonon durum yoğunluğuna en fazla katkı B atomundan gelir. C atomu bu bölgede daha az katkıda bulunmuştur. 12,4 ile 13,8 THz ile değişen bölgede en fazla katkı B ve C atomlarının hibritleşmesinden kaynaklanmaktadır. 25,3 THz' deki keskin pike katkı B atomundan gelmektedir. 38,7 THz' deki keskin pike katkı B ve C atomlarının güçlü hibritleşmesinden kaynaklanmaktadır.

5.2.4 LaPt₂B₂C Materyalinin Süperiletkenlik Özellikleri

Süperiletkenlik incelemeleri için elektron-fonon etkileşim parametresi λ 'nın hesabını yapmak için Denklem 3.15'te verilen eşitlik kullanıldı. Bu hesaba göre LaPt₂B₂C malzemesi için elde ettiğimiz elektron-fonon etkileşim parametresi değeri 0,78 olarak bulunmuştur. Bu parametre orta güçlükte bir elektron-fonon etkileşim değeridir



Şekil 5.12. LaPt₂B₂C malzemesinin Eliashberg spektral fonksiyonunun elektron-fonon etkileşim parametresine göre değişimi

Süperiletkenliğe geçiş sıcaklığının hesaplanması için Denklem 3.14'ten yararlanılarak Eliashberg spektral fonksiyonu hesaplanır. Denklem 3.14 ve Denklem 3.15'ten faydalanılarak Denklem 3.17'de verilmiş olan logaritmik ortalama fonon frekansı elde edilir. Bu hesaplama yapıldıktan sonra Allen-Dynes denklemi ile süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı bulunabilir. Bulunan değerler ve daha önceki çalışmalar ile kıyaslanmaları Tablo 5.4'te verilmiştir. Tablo 5.4'ten görüldüğü gibi hesaplamalarımızla elde ettiğimiz teorik T_c değeri ile deneysel T_c değeri arasında çok iyi bir uyum vardır.

Elektron-fonon parametresinin hesaplanmasından sonra Eliashberg spektral fonksiyonu kullandık ve elde ettiğimiz dağılımları Şekil 5.12'de gösterdik. Buna göre elektron-fonon etkileşim parametresine en büyük katkı düşük frekanslı modlardan gelmekte olduğu bariz bir biçimde görülmektedir.

Tablo 5.4. LaPt₂B₂C malzemesi için elde edilmiş değerler; $N(E_F)$, Fermi seviyesinde durum yoğunluğu; λ , elektron-fonon etkileşim parametresini; ω_{ln} , ortalama logaritmik frekansı; Θ_D , Debye sıcaklığını; T_c , süperiletkenliğe geçiş sıcaklığını göstermektedir.

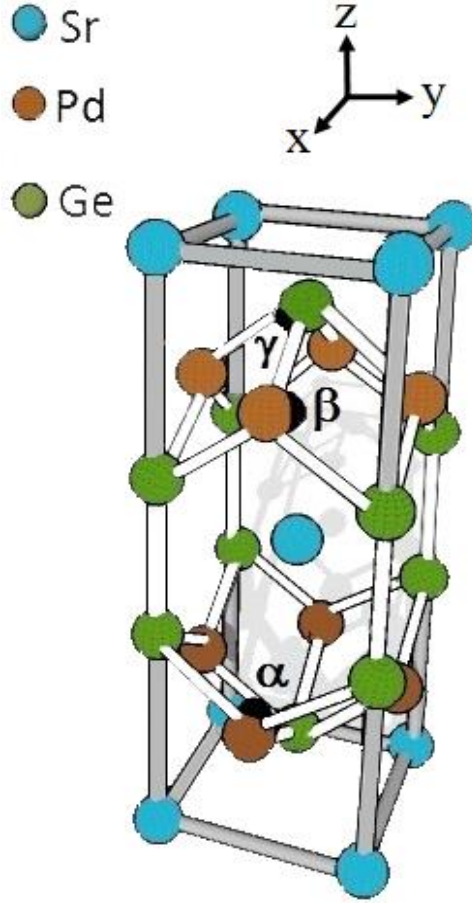
	$N(E_F)$ (durum/eV)	λ	ω_{ln} (K)	Θ_D (K)	T_c (K)
Bu Çalışma	2,18	0,78	235	283	10,4
Deneysel (Singh 1994)					10,5
Teorik (LDA) (Cava vd. 1994)	2,49				

5.3 SrPd₂Ge₂ Malzemesinin Hesaplanmış Değerleri

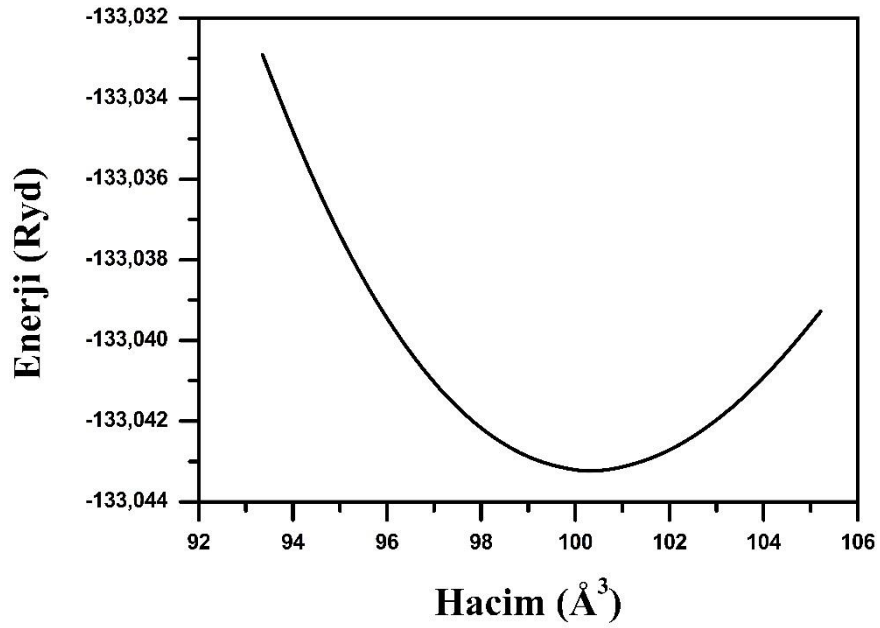
5.3.1 SrPd₂Ge₂ Malzemesinin Yapısal Özellikleri

SrPd₂Ge₂ malzemesi için yapısal hesaplamalarımız sonucunda elde edilen kristal yapı Şekil 5.13.a'da ve enerji-hacim grafiği Şekil 5.13.b'de verilmiştir. Bu malzeme BCT yapıya sahip olan ThCr₂Si₂ kristal yapıya benzer yapıda kristalleştiği bulundu. SrPd₂Ge₂ kristali hacim merkezli tetragonal örgü üzerine kurulmuş ve uzay grubu I4/mmm olan bir yapıdır. Bu kristal yapıdaki atomların Wyckoff pozisyonları: Sr 2a (0, 0, 0), Pd 4d (0, 1/2, 1/4) ve Ge 4e (0, 0, z) olarak verilmektedir.

a-)



b-)



Şekil 5.13. SrPd₂Ge₂ malzemesi için a.) kristal yapının gösterimi ve b.) hesaplamalarımız sonucu elde edilen enerji-hacim grafiği

Enerji-Hacim grafiği çizilerek SrPd₂Ge₂ malzemenin Yoğunluk Fonksiyonel teorisine göre en kararlı olduğu nokta belirlendi ve elde edilen grafik Murnaghan eşitliğine göre fit edilerek SrPd₂Ge₂ malzemesi için örgü parametreleri ile Bulk modülü ve Bulk modülünün basınca göre birinci türevleri belirlendi. Enerji-Hacim grafiğinin fit edilmesi sonucunda elde edilen örgü parametreleri SrPd₂Ge₂ malzemesi için $a = b = 4,423 \text{ \AA}$, $c = 10,259 \text{ \AA}$ olarak bulundu ve iç parametre değeri kristal koordinatlar cinsinden $z = 0,372$ olarak hesaplandı. Bulunan yapısal parametreler daha önceki deneysel sonuçlar olan $a = b = 4,420 \text{ \AA}$, $c = 10,104 \text{ \AA}$ (Wang vd. 2012) ile uyum içerisinde olduğu görülmektedir. SrPd₂Ge₂ malzemesi için bulk modülü ve bulk modülün basınca göre birinci türevi değerleri sırasıyla 79,9 GPa ve 5,20 olarak hesaplandı. Tablo 5.5'te SrPd₂Ge₂ malzemesinin hesaplanan teorik yapısal parametre değerleri ve onlara karşılık gelen önceki deneysel ve teorik değerleri verilmiştir. Ayrıca elektron-fonon etkileşimini farklı şekillerde etkilediğini düşündüğümüz bazı mesafeler ve açılar da hesaplandı. Paladyum ve Germanyum atomları arasındaki mesafe $d_{\text{Pd-Ge}}$; geçiş metali Paladyumlar arasındaki mesafe $d_{\text{Pd-Pd}}$; Paladyum ve Germanyum atomları arasındaki mesafe $d_{\text{Pd-Ge}}$ ve bağ açıları " α, β, γ " değerleride hesaplandı.

Tablo 5.5. SrPd₂Ge₂ malzemesi için hesaplanan yapısal değerlerin daha önceki deneysel ve teorik verilerle kıyaslanması

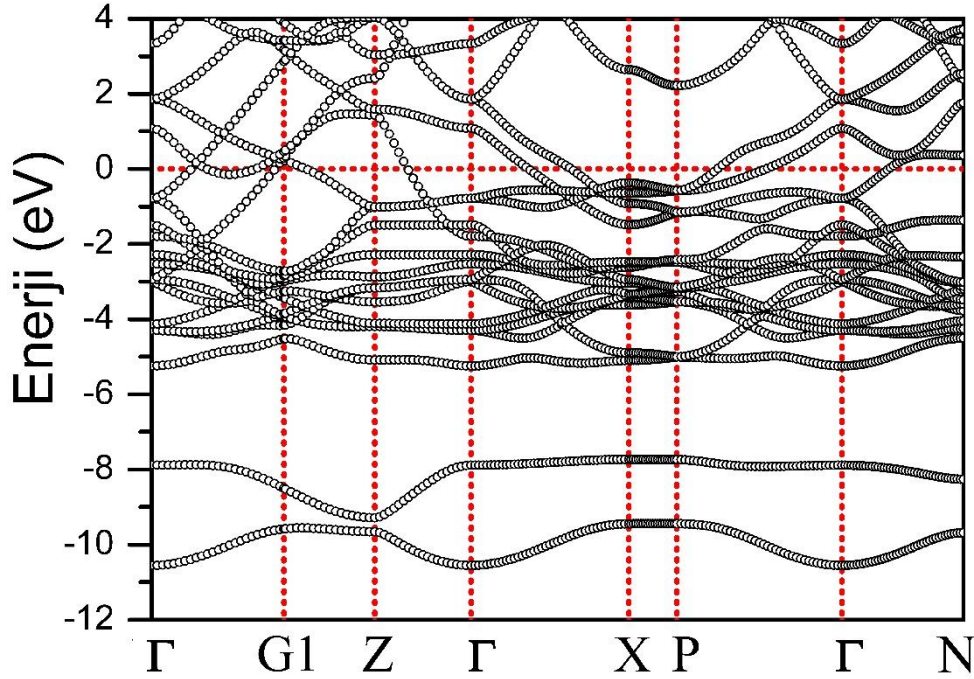
	$a(\text{\AA})$	$c(\text{\AA})$	z	$V(\text{\AA}^3)$	$d_{\text{Pd-Ge}}(\text{\AA})$	$\alpha (^{\circ})$	$\beta (^{\circ})z$	$\gamma (^{\circ})$
Bu Çalışma	4,423	10,259	0,372	100,32	2,542	120,85	104,10	75,90
Deneysel (Wang vd. 2012)	4,420	10,104	0,370	98,70	2,521	122,49	103,38	76,62
Deneysel (Fujii ve Sato 2009)	4,409	10,127	0,370	98,43	2,519	122,13	103,54	76,46
GGA (Shein ve Ivanovskii 2010)	4,459	10,321	0,370	102,60	2,573	121,34	104,15	76,12
GGA (Ghebouli vd. 2011)	4,373	9,981	0,370	95,43	2,493	122,58	103,34	76,66

Tablodan da görülebileceği gibi elde ettiğimiz a ve c değerlerinin daha önceki teorik ve deneysel sonuçlarla uyumlu olduğu görülmektedir. İç parametre (z) değerinin de teorik ve deneysel verilerle uyumlu olduğu görülmektedir. Ayrıca hesaplanmış olan atomlar arası mesafeler ve açılarda teorik ve deneysel sonuçlarla uyum halindedir. Elde etmiş olduğumuz bu sonuçlar yapmış olduğumuz yapısal hesaplamaların güvenilir olduğunu göstermektedir.

Atomlar arası mesafeleri ve açığı, diğer materyaller ile de kıyaslayarak Şekil 5.13'te gözlemlenen tetrahedra yapıda bulunan α açısının ideal açısı olan $109,0^{\circ}$ değerine yaklaşıldıkça süperiletkenlik parametresinin değişimi hakkında yorumda bulunabileceğiz.

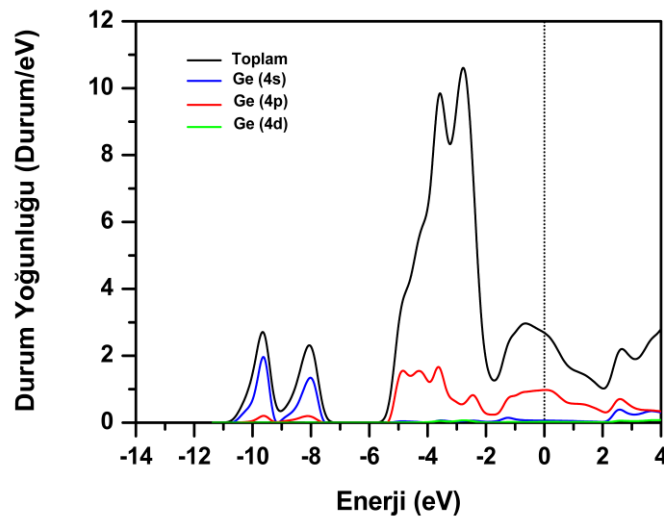
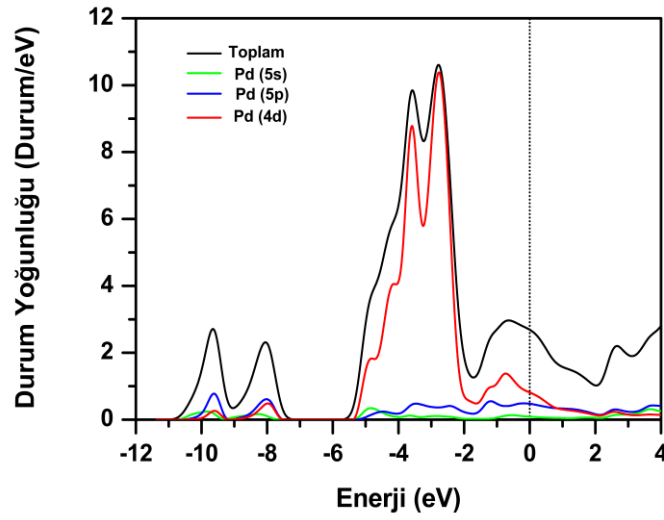
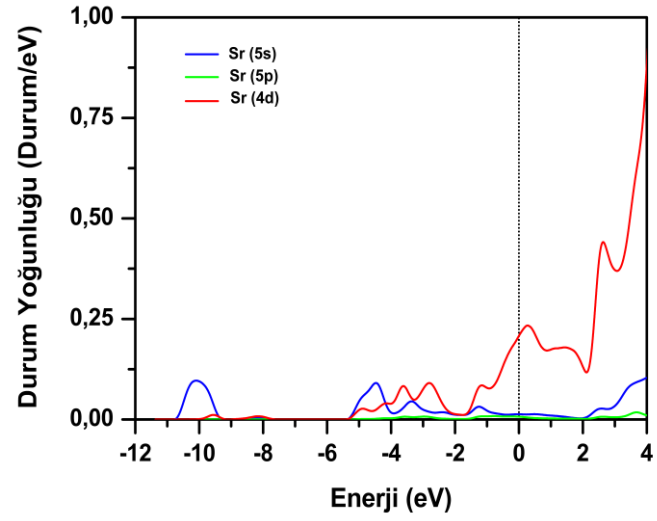
5.3.2 SrPd₂Ge₂ Malzemesinin Elektronik Yapısı

SrPd₂Ge₂ malzemesi için yüksek simetri yönünde elektronik enerji band yapısı Şekil 5.14'te görüldüğü gibi elde edilmiştir. Fermi enerji seviyesi sıfır olarak seçilmiştir ve yatay kesikli çizgi ile gösterilmiştir. Elde edilen bulgular daha önce hesaplanmış teorik çalışmalar ile oldukça uyumludur (Shein ve Ivanovskii 2010). Şekil 5.14 detaylı olarak incelediğinde değerlik ve iletkenlik bandlarının Fermi seviyesini kestiği açıkça görülmektedir. Bu da SrPd₂Ge₂ malzemesinin metalik bir yapıya sahip olduğunu göstermektedir.



Şekil 5.14. SrPd₂Ge₂ malzemesi için yüksek simetri boyunca elektronik enerji band yapısı. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.

En düşük enerjiye sahip iki band, diğer valans bandlarından tamamen ayrılmıştır. Şekil 5.15'te hesaplamamız sonucu elde edilen elektronik durum yoğunluğu grafiği verilmiştir. Şekil 5.15'te enerji durum yoğunluğu grafiklerinden görüldüğü gibi -10,6 eV ile -9,6 eV enerji aralığında bulunan banda en fazla katkı Ge 4s orbitalinden gelmiştir. -9,4 eV ile -7,8 eV enerji aralığında değişen banda da en fazla katkı yine Ge 4s orbitalinden gelmiştir. Bu band yüksek valans band bölgesinden yaklaşık 2,5 eV değerinde bir enerji değeri ile ayrılmıştır. -5,5 eV ile -2 eV enerji aralığında en yüksek katkı Pd 4d orbitalinden gelmektedir. Bu enerji bölgesinde Pd 4d orbitalinden sonra en yüksek katkı Ge 4p orbitalinden gelmektedir. Bu enerji seviyesindeki valans durumuna Sr atomundan gelen katkı çok düşüktür. Bunun sebebi Sr atomu iki elektronunu vererek Sr⁺² iyon durumuna geçerek elektronik olarak kararlı durum gibi davranmıştır.



Şekil 5.15. SrPd_2Ge_2 malzemesi için toplam (siyah) ve kısmi (renkli) elektronik durum yoğunluğu. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.

Dolayısıyla elektronik özelliklere katkısı azalmıştır. -2 eV ile 0 eV enerji aralığında ki bölge de en fazla katkı Ge 4p ve Pd 4d orbitalleri hibritleşerek katkıda bulunmaktadır. Fermi enerji seviyesine en fazla katkıda bulunan orbital ise Ge 4p olduğu görülmektedir. Daha sonraki en büyük katkı Pd atomlarının 4d ve 5p orbitalinden gelmektedir. Bulmuş olduğumuz bu sonuçlar daha önceki teorik çalışma ile de oldukça uyumludur (Shein ve Ivanovskii 2010). Elektronik durum yoğunluklarına bakıldığında Fermi seviyesi civarındaki durum yoğunluğu ($N(E_F)$) 2,70 durum/eV olarak bulunmuştur ve bu değer Fermi enerji seviyesini 2,90 durum/eV olarak bulan deneysel çalışma ile çok iyi uyumludur (Shein ve Ivanovskii 2010).

$N(E_F)$ değerine en büyük katkı %51 ile Ge ($N(E_F^{Ge} = 1,377$ durum/eV)) atomundan, daha sonra ise %41 ile Pd ($N(E_F^{Pd} = 1,107$ durum/eV)) atomundan gelmektedir. Fermi seviyesi civarındaki en küçük katkı ise %8 ile Sr ($N(E_F^{Sr} = 0,216$ durum/eV)) atomundan gelmektedir. Bu da Cooper çiftleri oluşumuna en fazla katkının Ge atomunun 4p orbitalinden ve Pd atomunun 4d ve 5p orbitallerinden geldiğini göstermektedir (Şekil 5.15).

5.3.3 SrPd₂Ge₂ Malzemesinin Titreşim Özellikleri

Bu malzemenin BCS teorisine göre süperiletken özelliklerinin incelenmesi için fonon özelliklerinin incelenmesi gerekir. Titreşim özellikleri tam bir elektron-fonon etkileşim parametresinin hesaplanabilmesi için ölçülmesi gereken en önemli özelliklerden birisidir. Bu sebepten dolayı; bu malzeme için fonon yapısı, fonon durum yoğunluğu, Eliashberg spektral fonksiyonu ve elektron-fonon etkileşim parametresi incelenmiştir.

Brillouin merkezi-fonon (zone-center) modlarını incelemek malzemelerin kristal dinamiği çalışmaları için çok önemli bilgiler verir. SrPd₂Ge₂ malzemesi için zone-center fonon modları D4h (4/mmm) nokta grubu ile tanımlanır. SrPd₂Ge₂ malzemesi için grup teoriye göre optik fonon modları simetrisi

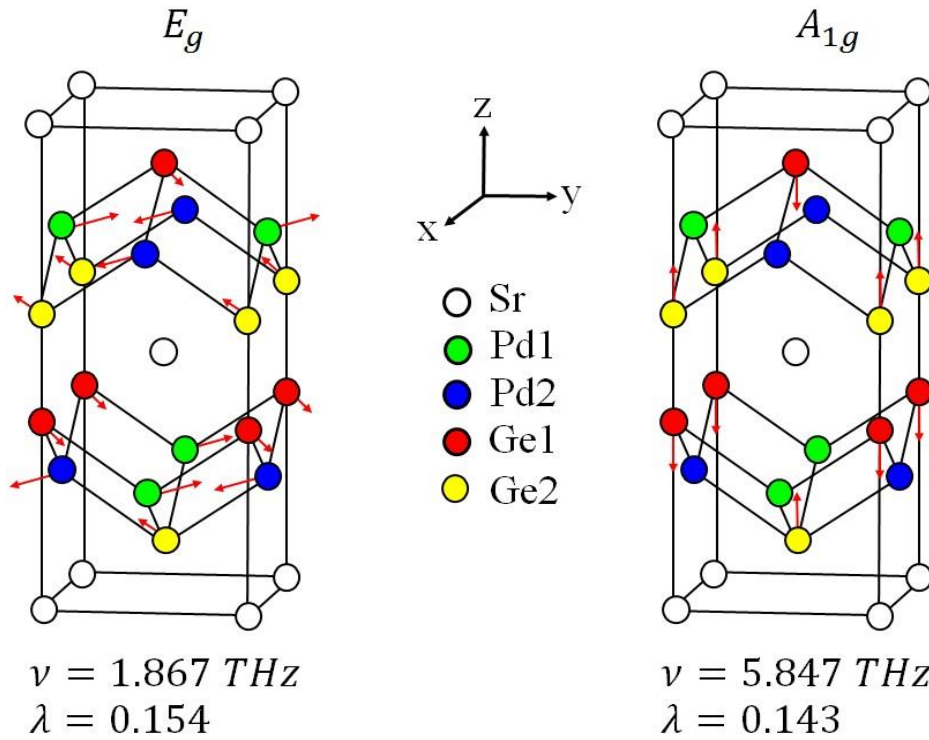
$$\Gamma = 2E_g + B_{1g} + 2E_u + 2A_{2u} + A_{1g} \quad 5.1$$

denklemleri ile tanımlanır. 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 5.6'da Brillouin merkezi fonon modlarının frekans değerleri ve elektron fonon etkileşim parametre değerleri verilmiştir.

Tablo 5.6. SrPd₂Ge₂ malzemesinin optik modlara ait frekans (THz) değerleri ve onlara karşılık gelen elektron-fonon etkileşim parametre değerleri.

Malzeme	E_g	E_u	B_{1g}	A_{2u}	A_{2u}	E_u	E_g	A_{1g}
SrPd ₂ Ge ₂ (ν)	1,867	3,285	3,312	3,762	5,146	5,702	5,779	5,847
SrPd ₂ Ge ₂ (λ)	0,154	0,006	0,077	0,005	0,009	0,004	0,026	0,143

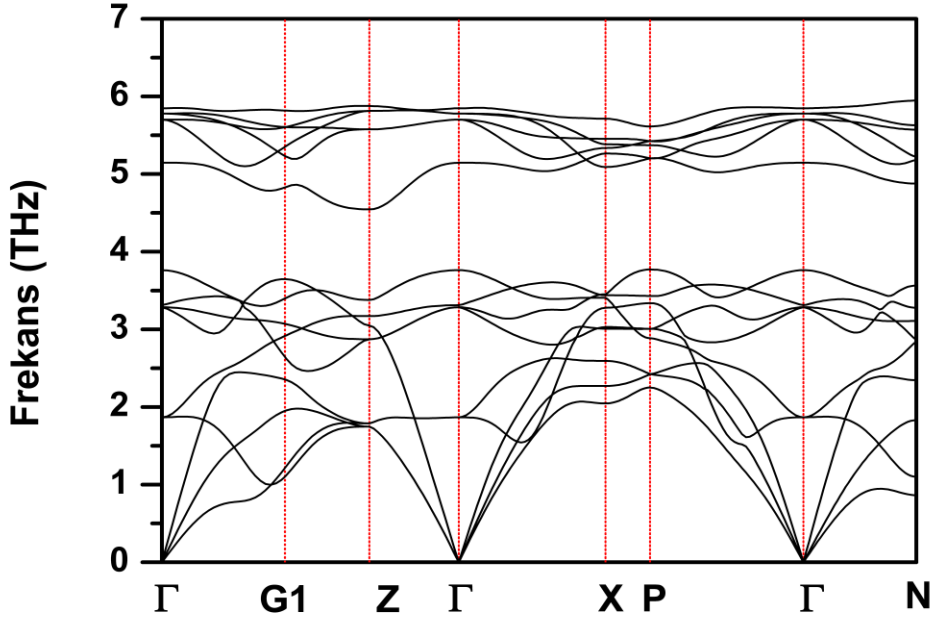
Tablo 5.6'dan görüldüğü gibi elektron fonon etkileşim parametresine en yüksek katkı yapan modun düşük frekanslı E_g modu ve daha sonra en yüksek katkı yapan modun A_{1g} modu olduğu bulundu. Şekil 5.16'da elektron-fonon etkileşim parametresine en büyük katkı yapan E_g ve A_{1g} modlarının titreşimleri verilmiştir. E_g modunun titreşimleri incelendiğinde Pd ve Ge atomları titreşirken Sr atomu titreşmemektedir. Bu beklenen bir durumdur. Çünkü; SrPd₂Ge₂ malzemesinde $N(E_F)$ değerine en büyük katkılar Pd ve Ge atomlarından gelmektedir.



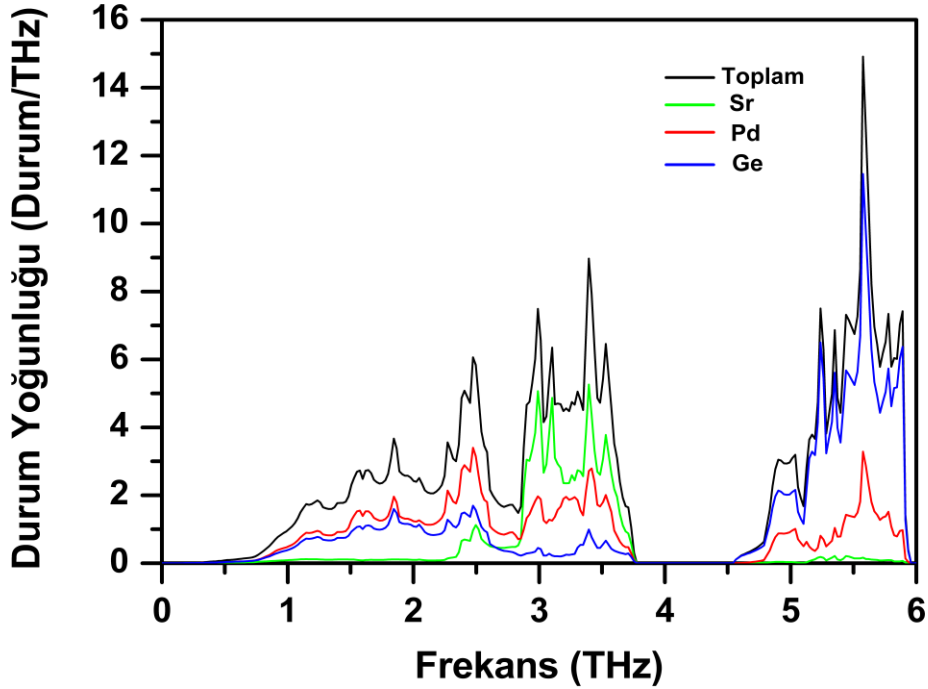
Şekil 5.16. SrPd₂Ge₂ malzemesi için elektron fonon etkileşim parametresine en yüksek katkıyı yapan E_g ve A_{1g} optik fonon modlarının özvektörleri ile atomik yer değiştirmelerin gösterimi.

E_g modunda Pd ve Ge atomlarının titreşimi tetrahedra yapıda bulunan bağ açısının değişmesine sebep olur. Bu durum Pd ve Ge atomlarının elektronik durumlarında üst üste binmelere sebep olur. Bu sebepten dolayı E_g modunun elektron-fonon etkileşim parametresi diğer optik fonon modlarının elektron-fonon etkileşim parametresinden daha büyük olmasına yol açar. A_{1g} modunun titreşimlerine bakıldığında sadece Ge atomları titreşmektedir.

a-)



b-)



Şekil 5.17. SrPd₂Ge₂ malzemesi için a-) fonon modlarının farklı yüksek simetri doğrultularında dağılımlarının gösterilmesi b-) fonon durum yoğunluğuna atomların katkısına göre gösterimi

Şekil 5.16'da yine SrPd_2Ge_2 malzemesi için elektron-fonon etkileşim parametresine E_g modundan sonra en büyük katkıyı yapan A_{1g} modunun titreşimi gösterilmiştir. A_{1g} modunun titreşimleri incelendiğinde sadece Ge atomlarının titreştikleri görülmektedir.

Brillouin bölgesi içerisinde hesapladığımız fonon dağılım grafiği ve fonon durum yoğunluğu grafikleri Şekil 5.17'de görülmektedir. Tüm fonon modları pozitif frekanslara sahip olduklarından SrPd_2Ge_2 malzemesi Cisim Merkezli Tetragonal yapıda dinamik olarak kararlı haldedir. SrPd_2Ge_2 malzemesi her bir birim hücrede beş atom içerdiğinden toplamda on beş adet fonon modu vardır. Bunlardan üçü akustik diğer on iki tanesi ise optik moddur. Fonon dağılım eğrisi iki açık bölgeye ayrılmıştır. Bu iki bölge 0 ile 3,8 THz arasındaki frekanslarda değişen düşük frekans bölgesi (LFR) ve 4,6 ile 5,9 THz arasındaki frekanslarda değişen yüksek frekans bölgesidir (HFR). LFR bölgesinde üç akustik altı optik mod olmak üzere dokuz atom modu bulunmaktadır. Diğer altı atom modu HFR bölgesindedir. En yüksek optik fonon modu diğer modlar ile karşılaştırıldığında fazla değişmemektedir. Fonon durum yoğunluğu eğrisi Şekil 5.17.b'de gösterilmektedir. Fonon durum yoğunluğu grafiği incelendiğinde 0 ile 2,2 THz arasında değişen frekans bölgesinde Pd ve Ge atomları arasında güçlü bir hibritleşme olduğu görülmektedir. 2,2 ile 2,7 THz arasında kalan bölgede fonon durum yoğunluğuna en fazla katkı Pd atomundan gelir. Sr ve Ge atomları bu bölgede daha az katkıda bulunmuştur. 2,7 ile 3,8 THz ile değişen bölgede en fazla katkı Sr atomundan gelmektedir. Diğer atomlardan gelen katkı daha küçüktür. HFR bölgesinde en fazla katkı Ge atomundan gelmektedir. Bunun sebebi Ge atomunun kütlesi diğer atomlardan daha küçüktür. HFR bölgesinde Pd atomunun kütlesi Sr atomunun kütlesinden daha büyük olmasına rağmen Sr atomundan daha fazla katkıda bulunmaktadır. Bunun sebebi Pd ve Ge atomları arasındaki kovalent bağdan kaynaklanmaktadır.

5.3.4 SrPd_2Ge_2 Malzemesinin Süperiletkenlik Özellikleri

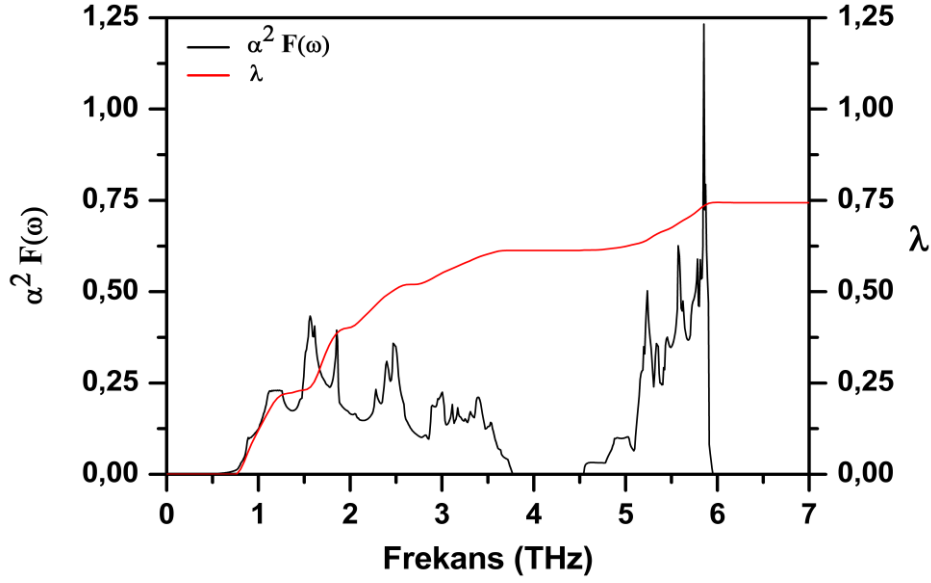
SrPd_2Ge_2 malzemesi için elde ettiğimiz elektron-fonon etkileşim parametre değeri 0,74 olarak bulundu. Bu parametre orta güçlükte bir elektron-fonon etkileşimi olduğunu göstermektedir. SrPd_2Ge_2 malzemesi için hesaplanan teorik Fermi seviyesi durum yoğunluğu ($N(E_F)$), elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik frekansı (ω_{ln}), Elektronik özgül ısı katsayısı (γ), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_C) değerleri Tablo 5.7'de verilmiştir.

Tablo 5.7. SrPd₂Ge₂ malzemesi için elde edilmiş değerler; N(E_F), Fermi seviyesinde durum yoğunluğunu; λ, elektron-fonon etkileşim parametresini; ω_{ln}, ortalama logaritmik frekansı; γ, Elektronik özgül ısı katsayısı; T_c, süperiletkenliğe geçiş sıcaklığını göstermektedir.

	N(E _F) (durum/eV)	λ	ω _{ln} (K)	γ($\frac{mJ}{mol.K^2}$)	T _c (K)
Bu Çalışma	2,70	0,74	101,4	11,04	3,20
DeneySEL (Fujii ve Sato 2009)					3,04
DeneySEL (Sung vd. 2011)				7,83	2,70
DeneySEL (Hung vd. 2013)				15,3	2,92
DeneySEL (Samuely vd. 2013)					2,90
Teorik (GGA) (Shein ve Ivanovskii 2010)	2,90			6,84	

Görüldüğü gibi hesaplamalarımızla bulduğumuz teorik T_c değeri ile deneySEL T_c değerleri arasında oldukça iyi bir uyum söz konusudur. Hesaplamalarımız sonucu süperiletkenlik geçiş sıcaklığını 3,20 K olarak hesapladık. Bu değer süperiletkenlik geçiş sıcaklığını 3,04 K olarak bulan deneySEL çalışmadan yaklaşık olarak %5 farklıdır. Tablo 5.7'den görüldüğü gibi N(E_F) değeri 2,70 durum/eV olarak hesaplandı. Bu değer 2,90 durum/eV olarak bulan teorik çalışma ile uyumludur. Elektron fonon etkileşim parametresi ve ortalama logaritmik frekans sırasıyla 0,74 ve 101,4 K olarak hesaplandı. SrPd₂Ge₂ malzemesi için araştırmalarımıza göre elektron-fonon etkileşim parametresi ve ortalama logaritmik frekanslar yapmış olduğumuz çalışmalardan önce teorik veya deneySEL olarak hesaplanmamıştır.

Elektron-fonon parametresinin hesaplanmasından sonra Eliashberg spektral fonksiyonu hesabı için Denklem 3.14 kullanıldı. Bu hesaplama sonucunda elde ettiğimiz dağılımları Şekil 5.18'de gösterdik. Buna göre elektron-fonon etkileşim parametresine en büyük katkı düşük frekanslı modlardan kaynaklandığı açık bir şekilde görülmektedir. Araştırmalarımıza göre SrPd₂Ge₂ malzemesi için Eliashberg spektral fonksiyonu hesaplanmamıştır.



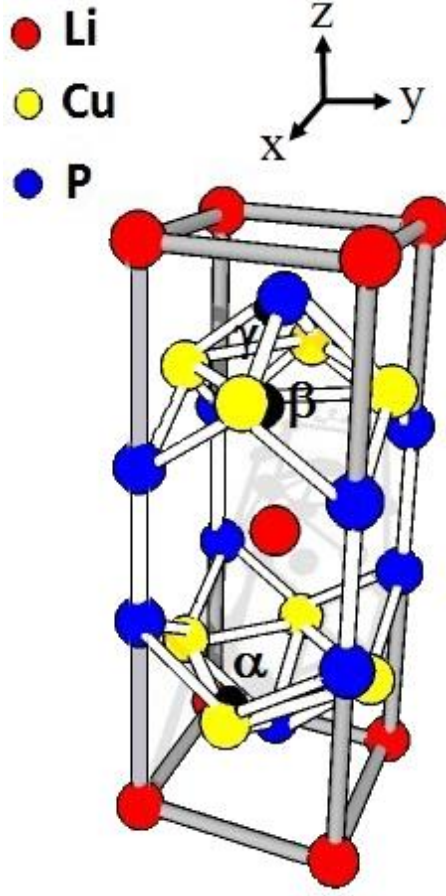
Şekil 5.18. SrPd₂Ge₂ malzemesi için Eliashberg spektral fonksiyonunun elektron-fonon etkileşim parametresine göre değişimi

5.4 LiCu₂P₂ Malzemesinin Hesaplanmış Değerleri

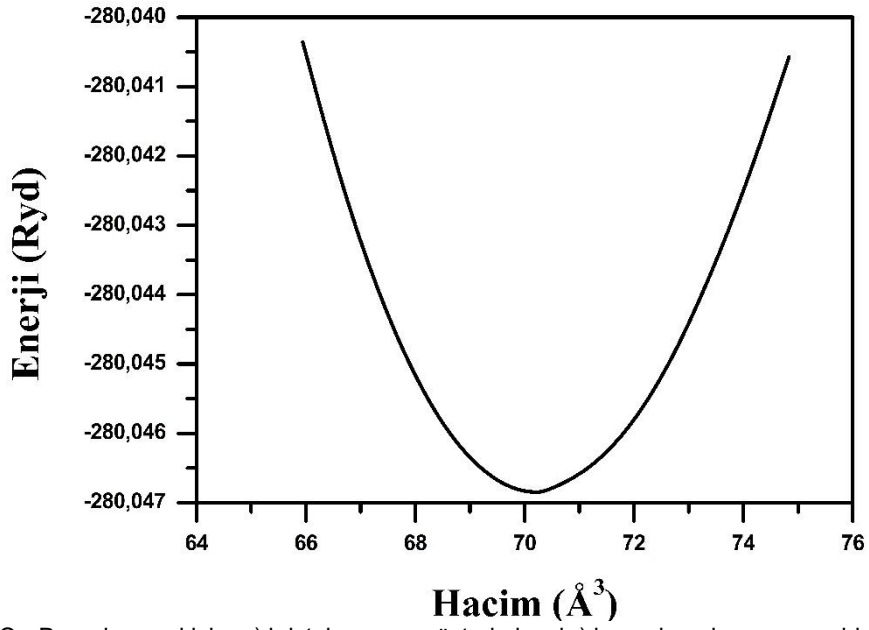
5.4.1 LiCu₂P₂ Malzemesinin Yapısal Özellikleri

LiCu₂P₂ materyali için hesaplamalarımız sonucu elde edilmiş olan kristal yapı Şekil 5.19.a'da ve enerji-hacim grafiği Şekil 5.19.b'de görülmektedir. Bu malzeme BCT yapıya sahip olan ThCr₂Si₂ kristal yapıya benzer yapıda kristalleştiği bulunmuştur. LiCu₂P₂ kristali hacim merkezli tetragonal örgü üzerine kurulmuş ve uzay grubu I4/mmm olan bir yapıdır. Bu kristal yapıdaki atomların Wyckoff pozisyonları: Li 2a (0, 0, 0), Cu 4d (0, 1/2, 1/4) ve P 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 malzemenin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisine göre en kararlı olduğu nokta hesaplanmış ve bu noktada malzemenin örgü parametreleri ile Bulk modülü ve Bulk modülünün basınca göre birinci türevi de hesaplanmıştır. Bu grafikten elde edilen örgü parametreleri LiCu₂P₂ malzemesi için $a = b = 3,846 \text{ \AA}$, $c = 9,491 \text{ \AA}$ ve iç parametre değeri kristal koordinatlar cinsinden $z = 0,387$ olarak hesaplandı. Bulunan bu değerler daha önceki deneysel sonuçlar olan $a = b = 3,888 \text{ \AA}$ ve $c = 9,563 \text{ \AA}$ (Han vd. 2010) değerleri ile çok iyi uyum içerisinde olduğu görülmektedir. Şekil 5.19'dan görüldüğü gibi Li tabakası (CuP)₂ tabakası ile 1:1 oranı ile bağlanmıştır. (CuP)₂ tabakası sırasıyla dört fosfor atomunun oluşturmuş olduğu tetrahedral yapıyla fosfor tabakasının arasında kalan kare düzlemsel yapıya sahip (CuP)₂ yapısından oluşmaktadır.

a-)



b-)



Şekil 5.19. LiCu_2P_2 malzemesi için a.) kristal yapının gösterimi ve b.) hesaplamalar sonucu elde edilen enerji-hacim grafiği

LiCu₂P₂ malzemesi için elde edilen bulk modülü ve bulk modülün basınca göre birinci türevi değerleri sırasıyla 99,3 GPa ve 4,20 olarak hesaplandı. Tablo 5.8’de malzemenin hesaplanan teorik yapısal parametre değerleri ve onlara karşılık gelen önceki deneysel ve teorik değerler verilmiştir. Bunlara ek olarak elektron-fonon etkileşimini farklı şekillerde etkilediğini düşündüğümüz bazı mesafeler ve açılar da hesaplanmıştır. Bakır atomları ile fosfor atomları arasındaki mesafe $d_{\text{Cu-P}}$; geçiş metalleri ile fosfor arasındaki mesafe $d_{\text{Cu-P}}$; fosfor-fosfor atomları arasındaki mesafe $d_{\text{P-P}}$ ve bağ açıları “ α, β, γ ” değerleride hesaplandı.

Tablo 5.8. LiCu₂P₂ malzemesi için hesaplanan yapısal değerlerin daha önceki deneysel ve teorik verilerle kıyaslanması

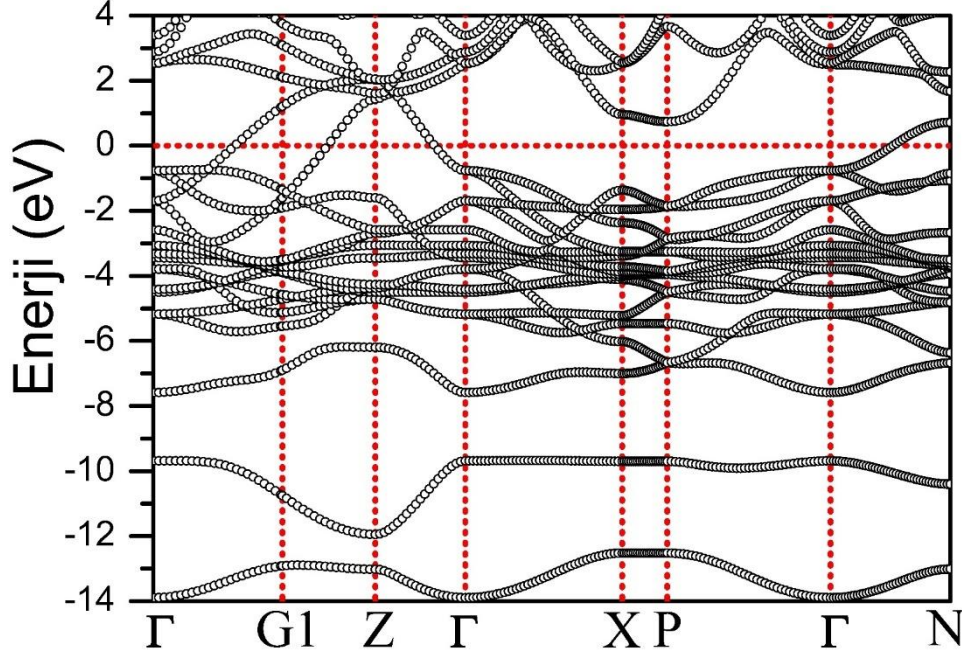
	$a(\text{Å})$	$c(\text{Å})$	z	$d_{\text{Cu-Cu}}(\text{Å})$	$d_{\text{Cu-P}}(\text{Å})$	$d_{\text{P-P}}(\text{Å})$	$\alpha(^{\circ})$	$\beta(^{\circ})$	$\gamma(^{\circ})$
Bu Çalışma	3,846	9,491	0,387	2,72	2,32	2,14	111,8	108,3	71,8
Deneysel (Han vd. 2010)	3,888	9,563			2,35		111,7	108,4	71,6
Deneysel (Han vd. 2011)	3,891	9,561							
LAPW (Shein ve Ivanovskii 2011)	3,909	9,585	0,387	2,76	2,36	2,17	112,2	108,1	71,9

Tablodan 5.8’den görülebileceği gibi elde ettiğimiz a ve c değerlerinin daha önceki teorik ve deneysel sonuçlarla uyumlu olduğu görülmektedir. İç parametre (z) değerinin de teorik ve deneysel verilerle uyumlu olduğu görülmektedir. Bu da yapmış olduğumuz yapısal hesaplamaların güvenilir olduğunun bir kanıtıdır. Atomlar arası mesafeleri ve açığı, diğer materyaller ile de kıyaslayarak

5.4.2 LiCu₂P₂ Malzemesinin Elektronik Yapısı

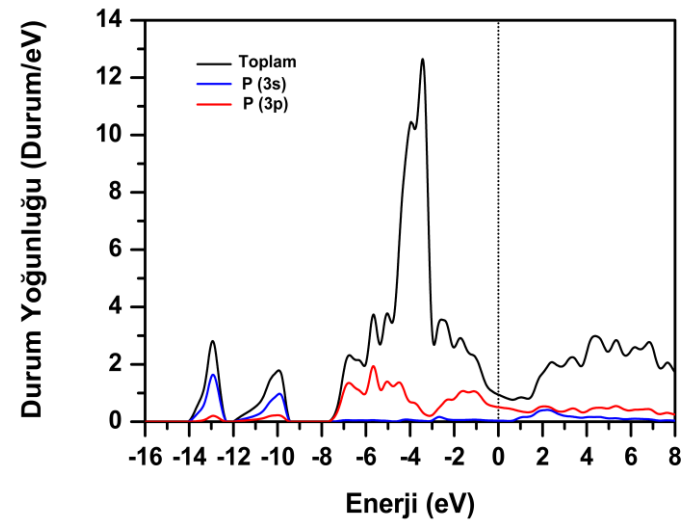
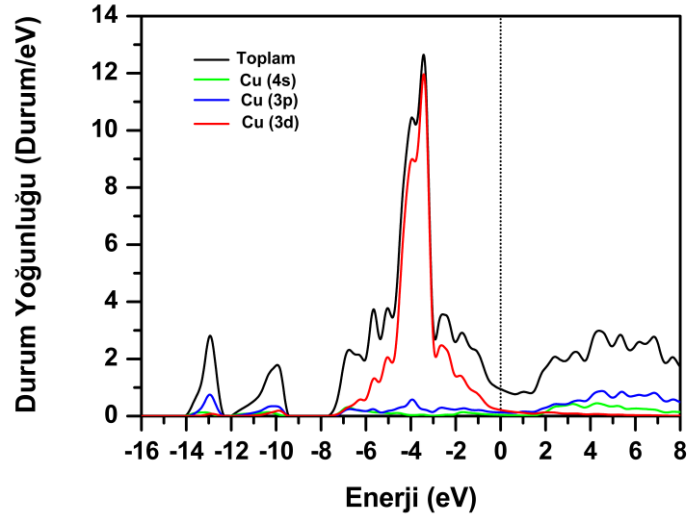
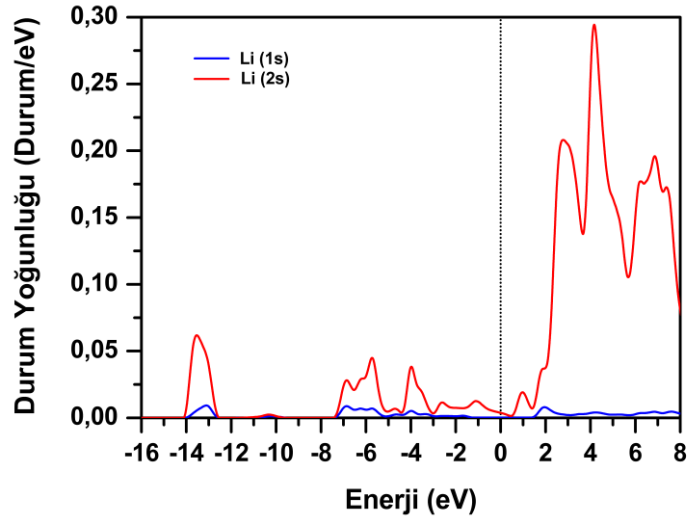
LiCu₂P₂ malzemesi için elektronik enerji band yapısı Şekil 5.20’den görüldüğü gibi elde edilmiştir. Fermi enerji seviyesi sıfır olarak seçilmiştir ve yatay kesikli çizgi ile gösterilmiştir. Elde edilen bulgular daha önce hesaplanmış teorik çalışmalar ile oldukça uyumludur (Shein ve Ivanovskii 2011). Şekil 5.20 detaylı olarak incelendiğinde değerlik ve iletkenlik bandlarının Fermi seviyesini kestiği açık bir şekilde görülür. Bu durum LiCu₂P₂ malzemesinin metalik bir yapıya sahip olduğunu göstermektedir. P-P arası mesafenin küçük olması (2,14 Å) güçlü kovalent bağın varlığını göstermektedir. Cu- Cu arası mesafe 2,72 Å olarak hesaplandı ve bu mesafe bakır metalindeki Cu-Cu arası mesafeden (2,55 Å) daha büyüktür. Bu yüzden LiCu₂P₂ malzemesindeki Cu-Cu arasındaki metalik bağ bakır metalindeki metalik bağdan daha zayıftır. Bu yapı negatif yüklü (CuP)₂ ve pozitif yüklü Li tabakasını içerir. Bu yüzden Li atomu ile Cu-P tabakası arasında iyonik bağ oluşmaktadır. Cu-P arasında çok az metalik karakter göstermekle

birlikte kovalent bağ bulunmaktadır. Bu sebepten dolayı hesaplamalarımız sonucu LiCu_2P_2 malzemesinin iyonik kovalent ve metalik bağların üçünü de içerdiğini söyleyebiliriz.



Şekil 5.20. LiCu_2P_2 malzemesi için yüksek simetri boyunca elektronik enerji band yapısı. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.

ThCr_2Si_2 tipinde kristalleşen malzemelerde yapılan deneysel (Berry vd. 2009; Hirai vd. 2009; Razzoli vd. 2012) ve teorik çalışmalar (Banu vd. 2000; Shein ve Ivanovskii 2009a; Razzoli vd. 2012) süperiletkenliğin z yönünde bulunan P-P arasındaki mesafeye bağlı olarak değişebileceğini buldu. ARh_2P_2 malzemelerinde yapılan deneysel ve teorik çalışmalar bu malzemeleri iki grupta sınıflandırmıştır. LaRu_2P_2 , BaRh_2P_2 ve BaIr_2P_2 malzemelerinde P-P arası mesafe $d_{\text{P-P}} \geq 2,7 \text{ \AA}$ olarak bulundu. CaRh_2P_2 malzemesinde ise $d_{\text{P-P}} \approx 2,3$ olarak bulundu. LaRu_2P_2 , BaRh_2P_2 ve BaIr_2P_2 malzemelerinde süperiletkenlik keşfedilmesine karşın CaRh_2P_2 malzemesinde süperiletkenlik olayı ile karşılaşılmasıdır. LiCu_2P_2 malzemesi için birbirine yakın olan z yönünde ki P-P arası mesafe $2,14 \text{ \AA}$ olarak hesaplandı. Bu sebepten dolayı biz LiCu_2P_2 malzemesinde süperiletkenliğin kaybolduğunu düşünebiliriz (Berry vd. 2009; Hirai vd. 2009; Razzoli vd. 2012; Banu vd. 2000; Shein ve Ivanovskii 2009a). Şekil 5.21'den görüldüğü gibi en düşük enerjiye sahip olan iki band, diğer valans bandlarından tamamen ayrılmıştır. Şekil 5.21'de LiCu_2P_2 malzemesi için hesaplamalarımız sonucu elde ettiğimiz enerji durum yoğunluğu ve atomik bazda durum yoğunluğu grafiği verilmiştir. Enerji durum yoğunluğu sonuçları önceki teorik verilerle çok iyi uyumludur. Şekil 5.21'den görüldüğü gibi -14 eV ile -9,4 eV enerji aralığındaki iki banda en fazla katkı P 3s orbitalinden gelmiştir.

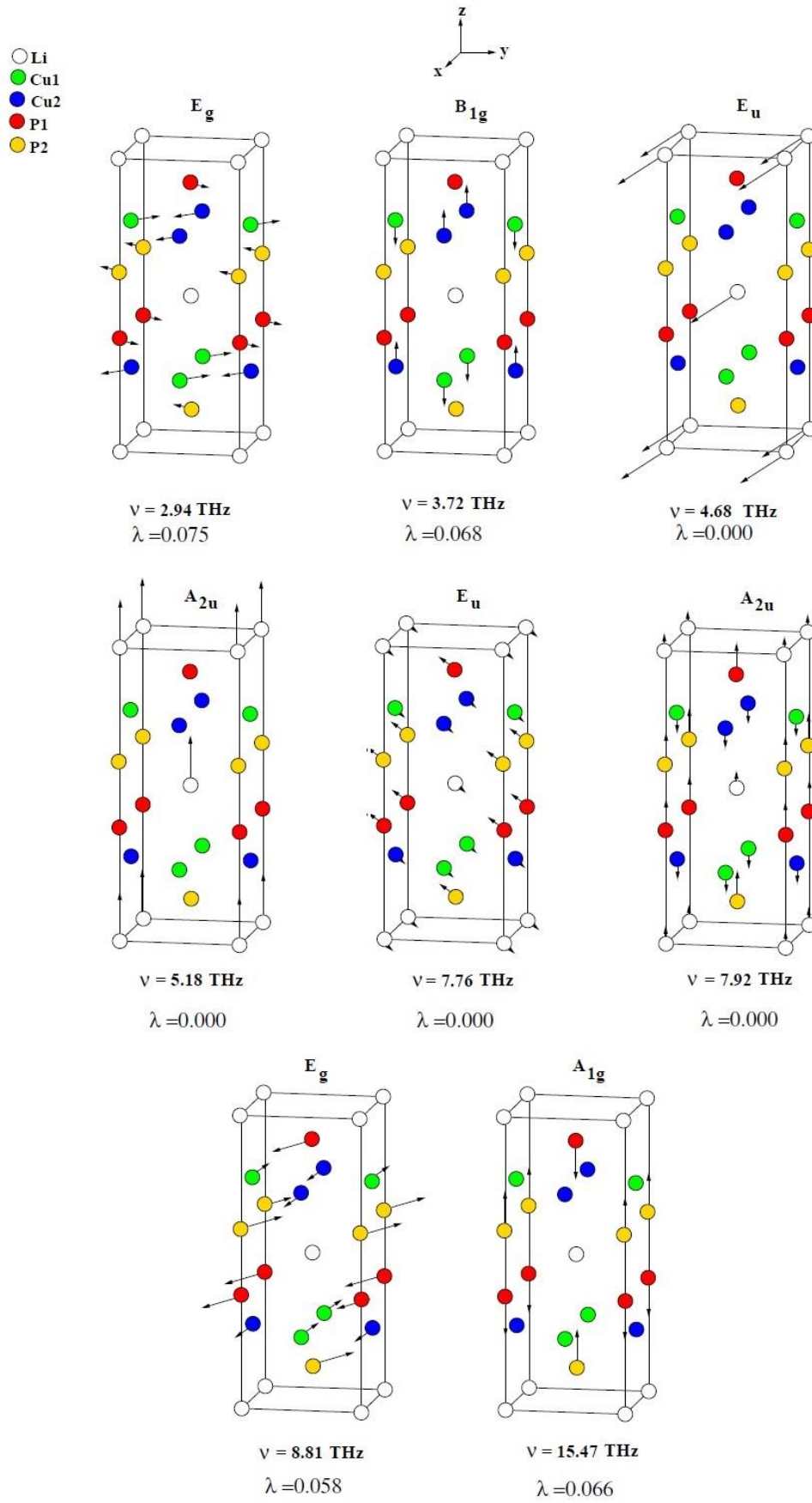


Şekil 5.21. LiCu_2P_2 malzemesi için toplam (siyah) ve kısmi (renkli) elektronik durum yoğunluğu. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.

Bu enerji bölgesinde Cu 3p orbitalinden de katkı gelmektedir. Fakat bu katkı çok küçüktür. Bu düşük valans bandları 1,4 eV değerinde bir enerji ile yüksek valans bölgesinden ayrılmıştır. Yüksek valans bölgesi -8,0 eV değerinden fermi enerji seviyesine kadar uzanmaktadır. -8 eV ile -5 eV enerji aralığında Cu d orbitali ile P p orbitalleri güçlü bir hibritleşme göstermektedir. Bu durum Cu ile P atomları arasında kovalent bağ olduğunu vurgulamaktadır. -3,3 eV enerji değerinde yoğun bir pik bulunmaktadır. Bu pike en büyük katkı Cu 3d orbitalinden kaynaklanmaktadır. Bu pike Cu ve P atomlarının p orbitallerinden de katkı gelmektedir fakat bu katkı çok küçüktür. -3 eV ile fermi enerji seviyesine kadar olan bölgede Cu d orbitalleri ile P p orbitalleri arasında güçlü bir hibritleşme vardır. Süperiletkenlik özelliklerini inceleyebilmek için Fermi enerjisi durum yoğunluğu hesaplanmalıdır. Çünkü BCS teorisine göre Cooper çiftleri oluşumu fermi enerji seviyesine yakın olan elektronlardan kaynaklanmaktadır. Fermi enerji seviyesine en fazla katkıda bulunan orbital ise P 3p olduğu bulundu. Daha sonra en büyük katkı Cu 3d orbitalinden kaynaklandığı bulundu. LiCu_2P_2 malzemesinin elektronik durum yoğunluğuna bakıldığında $N(E_F)$ 0,95 durum/eV olarak bulundu. $N(E_F)$ değerine Cu ve P atomlarından gelen katkı sırasıyla %58,6 ve %41 olarak bulundu. Li atomundan ($N^{Li}(E_F) = 0,004$ durum/eV (%0,4)) gelen katkı ise ihmal edilebilecek kadar küçüktür. Bu gözlem Shein ve Ivanovskii (Shein ve Ivanovskii 2011) tarafından yapılmış olan teorik çalışma ile uyumludur. Fermi enerjisi durum yoğunluğuna en büyük katkı P p orbitalinden kaynaklandığı (%54) bulundu ve daha sonra en büyük Cu d orbitalinden kaynaklandığı (%22) bulundu. LiCu_2P_2 malzemesi için hesaplamamız sonucu elde edilen elektronik durum yoğunluğu $N(E_F)$ (0,95 durum/eV) değeri süperiletkenlik özellik gösteren ve elektronik durum yoğunluğu 4,18 durum/eV olarak bulunan BaRh_2P_2 malzemesinden neredeyse dört kat daha küçüktür. $N(E_F)$ değerinin bu kadar küçük çıkması LiCu_2P_2 malzemesinde süperiletkenlik bulunmamasının ikinci göstergesi olabilir. Çünkü elektron-fonon etkileşim parametresi (λ) direk olarak elektronik durum yoğunluğu ($N(E_F)$) ile ilişkilidir. $N(E_F)$ değerinin küçük olması elektron-fonon etkileşiminin de zayıf olması anlamına gelmektedir.

5.4.3 LiCu_2P_2 Malzemesinin Titreşim Özellikleri

LiCu_2P_2 malzemenin 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. Bu sebepten dolayı; LiCu_2P_2 malzemesi için teorik olarak fonon yapısı, fonon durum yoğunluğu, Eliashberg spektral fonksiyonu ve elektron fonon etkileşim parametresi incelenmiştir. Brillouin merkezi fonon modlarını teorik olarak incelemek malzemelerin kristal dinamiği çalışmaları için çok önemli bilgiler verir. Çünkü bu özellikler farklı deneysel tekniklerle ölçülebilir.

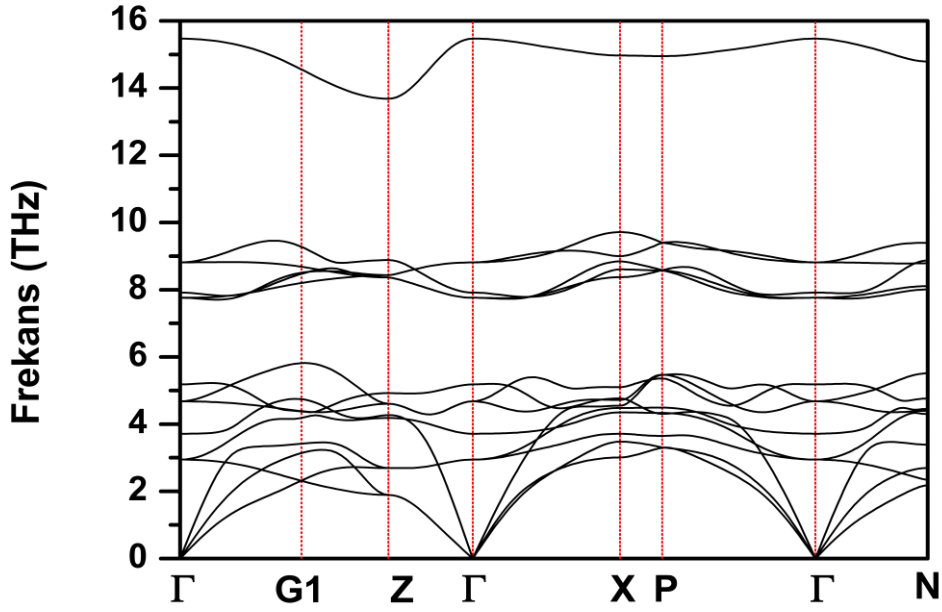


Şekil 5.22. LiCu₂P₂ malzemesinin optik modlara ait özvektörler ile atomik yer değiştirmelerin gösterimi.

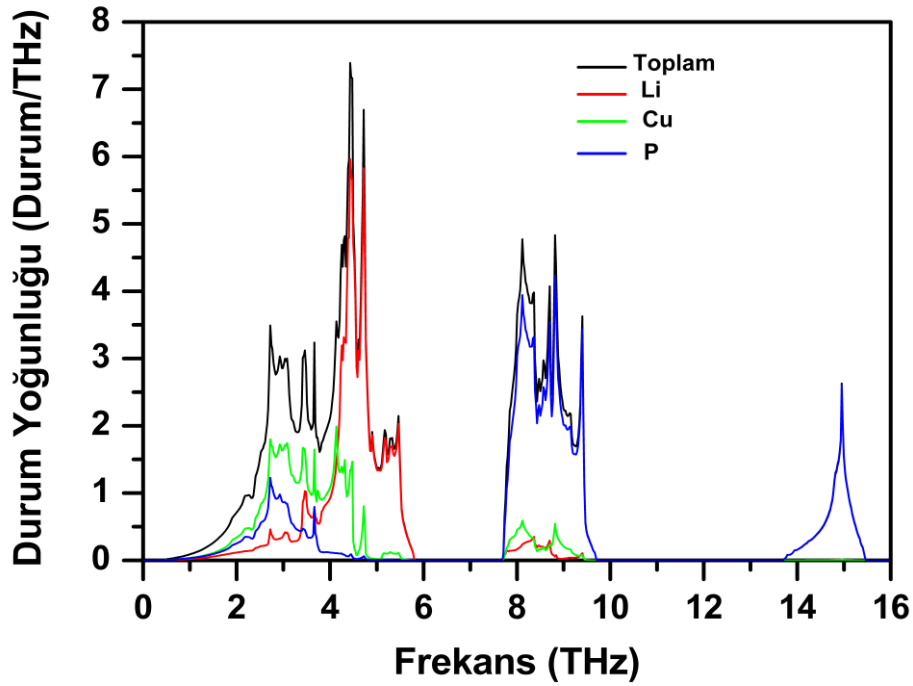
Şekil 5.22'den hesaplamalarımız sonucu elde edilen Brillouin merkezi fonon modlarının titreşimleri ve fonon modlarına karşılık gelen elektron fonon etkileşim parametre değerleri ile birlikte verilmiştir. LiCu_2P_2 malzemesi için merkezi fonon modları $D4h$ (4/mmm) nokta grubu ile tanımlanır. Grup teoriye göre optik fonon modlarının simetrisi bu malzeme için SrPd_2Ge_2 malzemesinde olduğu gibi Denklem 5.1'de verilmiş olan eşitlikle belirlenir. Şekil 5.22'den görüldüğü gibi dejenere olmuş E modlarında atomların titreşimleri x-y düzleminde, A ve B modlarındaki titreşimler ise z eksenine yönelmiştir.

Elektron-fonon etkileşim hesaplamalarımıza göre elektron-fonon etkileşim parametresi tüm Brillouin merkezi fonon modlarında çok küçük değere sahiptir. Bu da LiCu_2P_2 malzemesinde zayıf elektron-fonon etkileşiminin olduğunu bir göstergesidir. Özellikle de Li atomları ile ilişkili E_u, A_{2u} modlarında elektron-fonon etkileşim parametresi sıfırdır. Bu beklenen bir durumdur. Çünkü Li atomları Fermi seviyesinde elektronik durum yoğunluğuna katkı yapmamaktadır. Diğer fonon modlarında elektron-fonon etkileşim parametresi sıfırdan farklıdır. Çünkü bu modlara gelen katkıların büyük çoğunluğu Cu ve P atomlarından kaynaklanmaktadır. Brillouin bölgesi içerisinde hesapladığımız fonon dağılım eğrisi ve fonon durum yoğunluğu grafikleri Şekil 5.23'de verilmiştir. Şekil 5.23.a'dan görüldüğü gibi tüm fonon modları pozitif frekanslara sahip olduklarından LiCu_2P_2 malzemesi Cisim Merkezli Tetragonal yapıda dinamik olarak kararlı haldedir. LiCu_2P_2 malzemesi her bir birim hücrede beş atom içerdiğinden toplamda on beş adet fonon modu vardır. Bunlardan üçü akustik diğer on iki tanesi ise optik moddur. Fonon dağılım eğrisi grafiği incelendiğinde üç ana bölgeye ayrıldığı açıkça görülmektedir. Bu üç bölge 0 ile 5,9 THz arasındaki frekanslarda değişen düşük frekans bölgesi (LFR) ve 7,7 ile 9,8 THz arasındaki frekanslarda değişen orta frekans bölgesi (IFR) ve 13,8 ile 15,5 THz arasındaki frekanslarda değişen yüksek frekans bölgesidir (HFR). LFR bölgesinde üç akustik altı optik mod olmak üzere dokuz atom modu bulunmaktadır. IFR bölgesinde beş optik fonon modu bulunmaktadır. LFR bölgesi IFR bölgesinden 1,8 THz'lik bir frekans değeri ile birbirlerinden ayrılmıştır. HFR bölgesinde ise tek bir tane optik fonon modu bulunmaktadır. HFR bölgesi IFR bölgesinden 4 THz değerinde bir frekans ile birbirlerinden ayrılmıştır. LFR bölgesi incelendiğinde bu bölgedeki akustik modlar ile optik modların önemli ölçüde birbirleriyle üst üste bindiği gözükmektedir. Bu üst üste birikmenin sebebi düşük frekanslardaki optik fonon modların akustik fonon modlara ısı taşınması ile birlikte saçılmasına sebep olmuş olabilir. Bu yüzden LiCu_2P_2 malzemesinde fononların termal iletkenliğe katkısı azalmış olabilir.

a-)



b-)



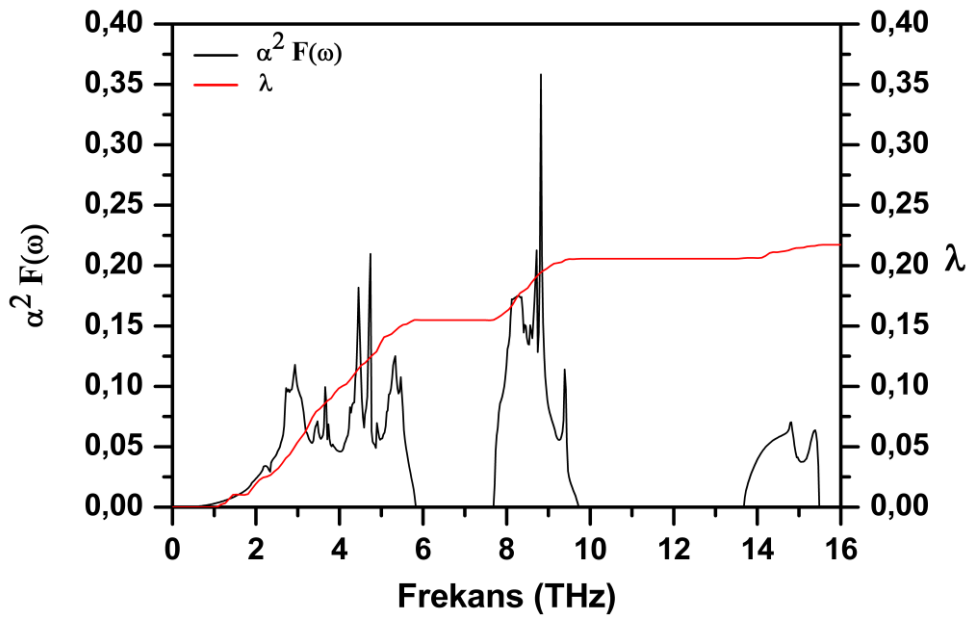
Şekil 5.23. LiCu₂P₂ malzemesi için a-) fonon modlarının farklı yüksek simetri doğrultularında dağılımlarının gösterilmesi b-) fonon durum yoğunluğuna atomların katkısına göre gösterimi

Fonon dağılım eğrisini iyi anlayabilmek için fonon durum yoğunluğu özellikleri incelenmelidir. Fonon durum yoğunluğu eğrisi Şekil 5.23 b'de gösterilmektedir. Fonon durum yoğunluğu 0 ile 3,8 THz arasında değişen frekans bölgesinde en büyük katkı Cu atomlarından

kaynaklanmaktadır. Bunun sebebi bakır atomlarının kütlesi diğer atomların kütlesinden fazla olmasındandır. Li ve P atomlarının da bu bölgede önemli katkısı bulunmaktadır. 3,8 ile 5,9 THz arasında kalan bölgede fonon durum yoğunluğuna en fazla katkı Li atomundan kaynaklanmaktadır. Cu ve P atomlarının katkısı bu bölgede küçüktür. Düşük frekans bölgelerinde Li titreşimleri gösteriyorki Li ile CuP_4 arasındaki iyonik bağ zayıftır. IFR bölgesinde ana katkı P atomlarından kaynaklanmaktadır. Diğer atomların bu bölgede katkısı çok düşüktür. Bu yüzden bu frekans bölgesindeki titreşimler CuP_4 tetrahedra yapısından kaynaklanmaktadır. 15 THz frekans değerindeki pik P atomundan kaynaklanmaktadır. Bu sebepten dolayı bu frekans bölgesindeki P-P arasında güçlü bir bağ oluşmuştur ve bu titreşimler bu bağdan kaynaklanmaktadır.

5.4.4 LiCu_2P_2 Malzemesinin Süperiletkenlik Özellikleri

LiCu_2P_2 malzemesi için yapmış olduğumuz hesaplamaların temel amacı LiCu_2P_2 malzemesinde süperiletkenliğin neden kaybolduğunu araştırmaktır. Bu amacımıza ulaşabilmek için son olarak Eliashberg spektral fonksiyonu hesapladık ve toplam elektron-fonon etkileşim parametresini (λ_{acc}) hesapladık. LiCu_2P_2 malzemesi için $\lambda = 0.22$ olarak bulundu. Bu değer çok küçük çıkması LiCu_2P_2 malzemesinde elektron-fonon etkileşiminin çok zayıf olduğunun bir göstergesidir. Ayrıca bu değer çok küçük çıkması LiCu_2P_2 malzemesinde süperiletkenliğin kaybolduğunun üçüncü göstergesidir.



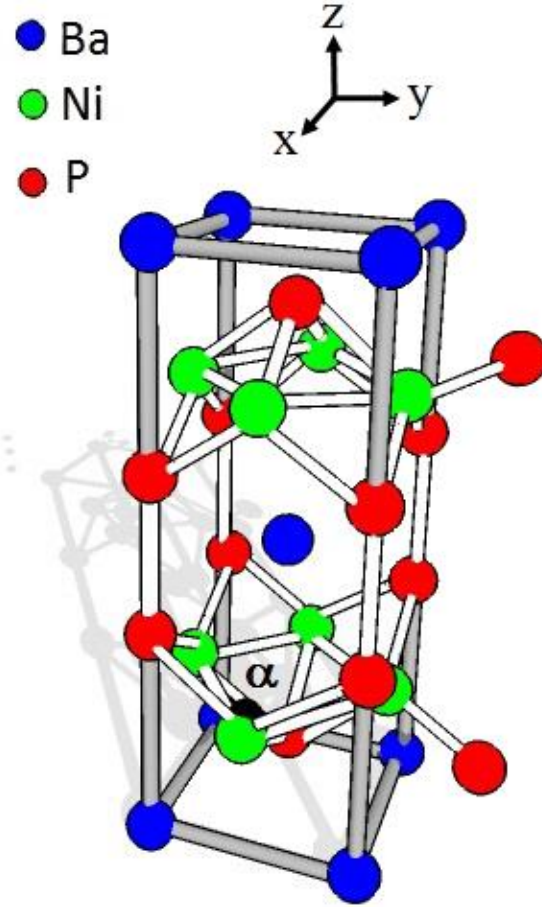
Şekil 5.24. LiCu_2P_2 malzemesi için Eliashberg spektral fonksiyonunun elektron-fonon etkileşim parametresine göre değişimi

Eliashberg spektral fonksiyonunun elektron-fonon etkileşim parametresine göre değişimi Şekil 5.24'de verilmiştir. Eliashberg spektral fonksiyonu hesaplamalarımıza göre λ_{acc} değerine katkı LFR, IFR ve HFR bölgelerinden gelen katkılar sırasıyla %70, %23 ve %2 olarak hesaplandı. Bu sebepten dolayı elektron-fonon etkileşimine ana katkı LFR bölgesindeki fononlar tarafından kaynaklanmaktadır. Ayrıca ortalama logaritmik fonksiyon (ω_{ln}) değerini 224,50 K olarak hesapladık. Son olarak süperiletkenlik geçiş sıcaklığı T_c değerini Allen-Dynes formülünü kullanarak $T_c = 0$ K olarak bulduk. Bizim bu sonucumuz Han ve çalışma arkadaşlarının yapmış olduğu deneysel çalışma ile uyum halindedir (Han vd. 2011). Çünkü Han ve arkadaşları $LiCu_2P_2$ malzemesinde süperiletkenlik olmadığını söylemiştir.

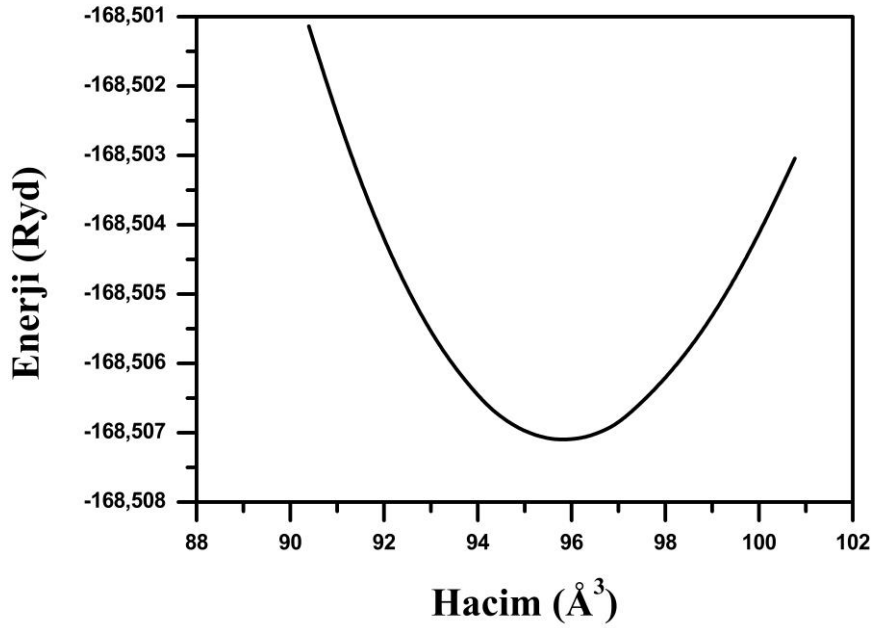
5.5 $BaNi_2P_2$ Malzemesinin Hesaplanmış Değerleri

Yapısal hesaplamalarımız sonucu $BaNi_2P_2$ malzemesinin de BCT yapıya sahip olan $ThCr_2Si_2$ kristal yapıya benzer yapıda kristalleştiği bulundu. $BaNi_2P_2$ kristali hacim merkezli tetragonal örgü üzerine kurulmuş ve uzay grubu $I4/mmm$ olan bir yapıdır. $BaNi_2P_2$ kristalinin yapısında bulunan atomların Wyckoff pozisyonları: Ba 2a (0, 0, 0), Ni 4d (0, 1/2, 1/4) ve P 4e (0, 0, z) olarak verilir. Burada z iç parametre olarak tanımlanır ve birim hücredeki P atomlarının konumuna göre bu değer belirlenir. Bu sebepten dolayı $BaNi_2P_2$ malzemesinin kristal yapısı a, c ve iç parametre (z) ile karakterize edilir. $BaNi_2P_2$ materyali için elde edilmiş kristal yapı Şekil 5.25.a'da ve enerji-hacim grafiği Şekil 5.25.b'de görülmektedir. Bu yapı negatif yüklü tetrahedra yapı NiP_4 ile pozitif yüklü Ba tabakalarının sırasıyla z yönünde dizilmesiyle oluşmuştur. NiP_4 tabakası Ni ve P arasında güçlü kovalent bağ ve zayıf Ni-Ni etkileşimi içermektedir. Ba atomu ve NiP_4 tabakası arasında iyonik bağ söz konusudur. Bu yüzden $BaNi_2P_2$ malzemesinde tek başına kovalent, iyonik veya metalik bağlardan biri yoktur aksine üç bağ türünü de içermektedir. *Ab initio* hesaplamalarımızın ilk aşamasında Enerji-Hacim grafiği çizilerek $BaNi_2P_2$ malzemesinin Yoğunluk Fonksiyonel teorisine göre en kararlı olduğu nokta hesaplandı ve Enerji-Hacim grafiği Murnaghan eşitliğine göre fit edilerek malzemenin örgü parametreleri ile Bulk modülü ve Bulk modülünün basınca göre birinci türevi de hesaplandı. Yapmış olduğumuz fit sonucunda elde edilen örgü parametreleri $BaNi_2P_2$ malzemesi için $a = b = 3,983 \text{ \AA}$, $c = 12,079 \text{ \AA}$ olarak bulundu ve iç parametre değeri kristal koordinatlar cinsinden $z = 0,3407$ olarak bulundu. Hesaplamalarımız sonucunda elde ettiğimiz bu değerler daha önceki deneysel sonuçlar olan $a = b = 3,947 \text{ \AA}$ ve $c = 11,820 \text{ \AA}$ (Keimes vd. 1997) değerleri ile uyum içerisindedir. Hesaplamalarımız sonucunda $BaNi_2P_2$ malzemesi için elde ettiğimiz B ve B' değerleri sırasıyla 75,8 GPa ve 5,06 olarak bulundu.

a-)



b-)



Şekil 5.25. BaNi₂P₂ malzemesi için a.) kristal yapının gösterimi ve b.) hesaplamalar sonucu elde edilen enerji-hacim grafiği

Tablo 5.9'da BaNi₂P₂ malzemesi için hesaplanan teorik yapısal parametre değerleri ve onlara karşılık gelen önceki deneysel ve teorik değerler verilmiştir. Bunlara ek olarak elektron-fonon

etkileşimini farklı şekillerde etkilediğini düşündüğümüz bazı mesafeler ve açılar da hesaplanmıştır. Nikel ve Fosfor atomları arasındaki mesafe d_{Ni-P} ; geçiş metali Nikel atomları arasındaki mesafe d_{Ni-Ni} , Fosfor atomları arasındaki mesafe d_{P-P} ve bağ açıları “ α, β, γ ” değerleride hesaplandı. Tablodan da görüldüğü gibi hesaplamış olduğumuz a ve c değerlerinin daha önceki teorik ve deneysel sonuçlarla uyumlu olduğu görülmektedir. İç parametre (z) değeri deneysel veriyle uyumlu olduğu görülmektedir. Özellikle de yapısal parametreler için en büyük hata yaklaşık olarak %2 civarındadır. İç parametre için hata ise yaklaşık olarak %0.7’dir. Bu da yapmış olduğumuz yapısal hesaplamaların güvenilir olduğunun bir kanıtıdır.

Tablo 5.9. BaNi₂P₂ malzemesi için hesaplanan yapısal değerlerin daha önceki deneysel ve teorik verilerle kıyaslanması

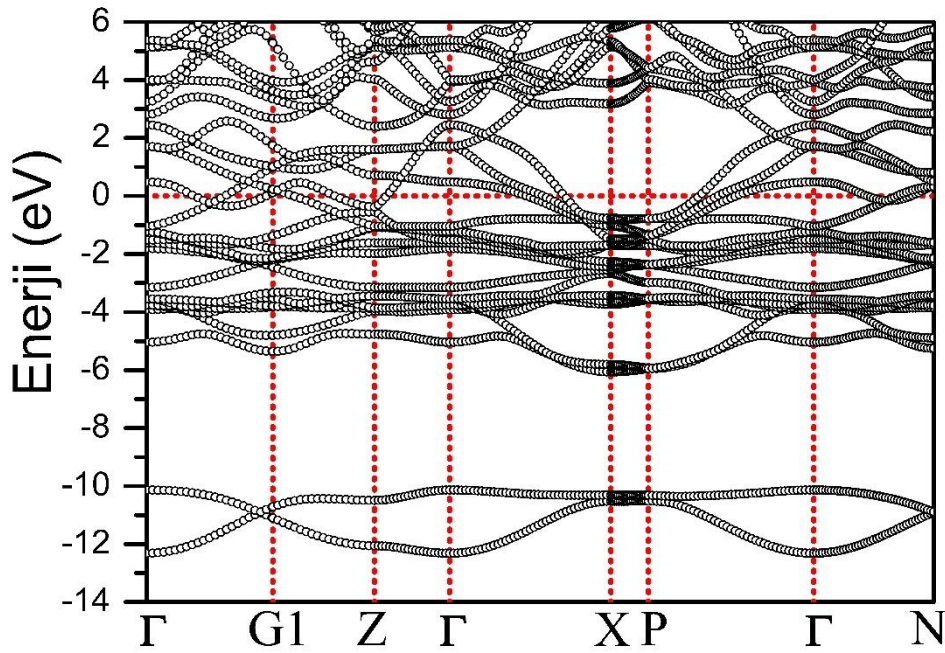
	a(Å)	c(Å)	z	V(Å ³)	d _{Ni-Ni} (Å)	d _{Ni-P} (Å)	d _{P-P} (Å)	α (°)
Bu Çalışma	3,983	12,079	0,3407	95,81	2,816	2,273	3,848	122,34
Deneysel (Keimes vd. 1997)	3,947	11,820	0,3431	92,07	2,791	2,260	3,709	121,71
GGA (Shein ve Ivanovskii 2009b)	3,956	11,995		93,86				
LDA (Banu vd. 1999)	3,945	11,814		91,93				118,42

En yakın Ni-P atomları arası mesafe Tablo 5.9’den görüldüğü gibi 2,273 Å olarak hesaplandı. Bu mesafe Ni ($R^{Ni} = 1,24$ Å) ve P ($R^P = 1,07$ Å) atomlarının toplam kovalent yarıçapından daha küçüktür. Bu sonuç NiP₄ tabakasında bulunan Ni atomları ile P atomları arasındaki bağın güçlü olduğunun bir göstergesidir. BaNi₂P₂ malzemesi için en yakın Ni-Ni atomları arasındaki mesafe 2,816 Å olarak bulundu. BaNi₂P₂ malzemesi için bu değer yüzey merkezli kübik (fcc) yapıdaki Ni metalinin değerinden (2,490 Å) daha büyüktür. Bu sebepten dolayı NiP₄ tabakasında Ni-Ni arasındaki bağ daha zayıftır. BaNi₂P₂ malzemesi için tabakalar arası mesafe d_{P-P} 3,848 Å olarak bulundu. BaNi₂P₂ malzemesi için α açısı 122,34° olarak bulundu.

5.5.1 BaNi₂P₂ Malzemesinin Elektronik Yapısı

BaNi₂P₂ malzemesi için hesaplamalarımız sonucu elde edilen yüksek simetri yönündeki elektronik enerji band yapısı Şekil 5.26’da görüldüğü gibi elde edilmiştir. Fermi enerji seviyesi sıfır olarak seçilmiştir ve yatay kesikli çizgi ile gösterilmiştir. Fermi seviyesi yakınlarında bulunan elektronlar süperiletkenlik olayında etkin rol oynarlar. Bu sebepten dolayı fermi seviyesine yakın bölgede band yapısını incelemek önem arz etmektedir. Şekil 5.26 Fermi seviyesi civarında incelendiğinde herhangi bir boşluk olmadığı görülmektedir. Yani değerlik ve iletkenlik bandlarının Fermi seviyesini kestiği açıkça görülmektedir. Bu da BaNi₂P₂ malzemesinin metalik bir yapıya sahip olduğunun bir göstergesidir. Elde edilen bulgular daha

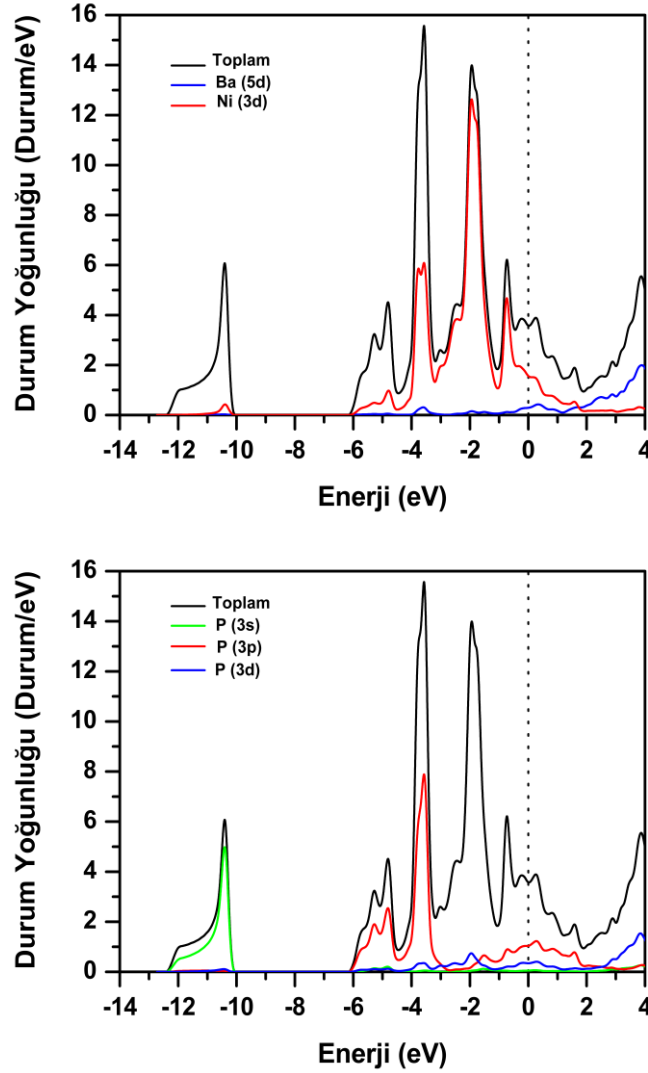
önce hesaplanmış teorik çalışmalar ile oldukça uyumludur (Shein ve Ivanovskii 2009b; Banu vd. 1999). BaNi_2P_2 malzemesi için [100] yönünde (Γ -G1-Z) fermi seviyesini kesen 2 band bulunmaktadır. Γ -X yönünde Fermi seviyesini kesen üç band bulunmaktadır. P- Γ yönünde de Fermi seviyesini kesen üç adet band bulunmaktadır. Bu malzeme için Γ -N yönünde Fermi seviyesini kesen iki band bulunmaktadır. Ayrıca BaNi_2P_2 malzemesi için Γ -Z simetri yönünde yaklaşık olarak -1,2 eV değerindeki enerji bölgesinde düz bir band bulunmaktadır. Elektron-fonon etkileşim parametresi (λ) Denklem 3.15'de verilen formülle hesaplanabilir. Bu eşitlik Fermi seviyesi durum yoğunluğunun artışı ile elektron fonon etkileşiminin artacağını açıkça göstermektedir.



Şekil 5.26. BaNi_2P_2 malzemesi için yüksek simetri boyunca elektronik enerji band yapısı. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.

Elektronik özelliklerin daha iyi anlaşılabilmesi için enerji durum yoğunlukları incelenmelidir. Şekil 5.27'de hesaplamalarımız sonucunda elde edilen toplam ve kısmi enerji durum yoğunluğu (DOS) grafiği verilmiştir. BaNi_2P_2 malzemesinin DOS özellikleri daha önceki teorik çalışmalarla uyum halindedir. BaNi_2P_2 malzemesi için valans bölgesi birbirlerinden yaklaşık 4 eV değerinde bir enerji ile ayrılmış iki ana bölgeden oluşmaktadır. BaNi_2P_2 malzemesi için elde edilen bu iki bölge; -12,4 eV ile -10,1 eV enerji aralığında değişen ilk bölge ile -6,1 eV ile Fermi enerjisine kadar uzanan ikinci bölgedir (ana valans bölgesi). Birinci valans bölgesinde yaklaşık -10,1 eV civarında bulunan yalnızca bir pik vardır. Bu pike ana katkı P 3s orbitalinden gelmektedir. Bu bölgede Ni 3d orbitali ihmal edilebilecek kadar küçük katkıda bulunmaktadır. -6,1 eV değeri ile -4,5 eV arasında değişen ana valans bölgesine katkı P 3p orbitalinden gelmektedir. Bu bölgede Ni 3d orbitali çok küçük katkıda bulunmaktadır. -3,6 eV değerindeki

pik Ni 3d orbitali ile P 3p orbitalinin hibritleşmesinden kaynaklanmaktadır. Bu durumdan Ni ve P atomları arasında güçlü kovalent bağ olduğu çıkarılabilir. -3,1 eV ile -1 eV arasında değişen enerji aralığında ve -1 eV ile -0,4 eV arasında değişen enerji aralığında iki tane pik bulunmaktadır. Bu iki pike en büyük katkısı Ni 3d orbitali yapmaktadır. Bu piklere P atomunun orbitallerinden küçük katkılar gelmektedir. BaNi₂P₂ malzemesi için valans bölgesine katkı NiP₄ tabakasından gelmektedir. Bu bölgede Ba atomu neredeyse katkı yapmamaktadır. Bu beklenen bir durumdur. Çünkü Ba atomu bağ yaparak Ba⁺² iyonu gibi davranmaktadır. Bu yüzden elektronik özelliklere Ba atomunun katkısı çok küçük çıkmıştır. BaNi₂P₂ malzemesinin DOS analizlerinden yola çıkarak bu malzemenin bağ yapısı için iyonik, kovalent ve metalik bağları içerdiğini söyleyebiliriz.



Şekil 5.27. BaNi₂P₂ malzemesi için toplam (siyah) ve kısmi (renkli) elektronik durum yoğunluğu. Fermi enerjisi 0 eV olarak alınmıştır.

BaNi₂P₂ malzemesinin süperiletkenlik özellikleri hakkında bilgi sahibi olabilmek için Fermi seviyesi durum yoğunluğu araştırılmalıdır. Çünkü BCS teorisine göre süperiletkenlik özellikler Fermi seviyesine yakın elektronlar tarafından belirlenir. Bu malzeme için Fermi enerji seviyesine Ni 3d, P 3p, P 3d ve Ba 5d orbitalleri katkıda bulunmaktadır. Bu yüzden süperiletkenlik bu orbitallerden kaynaklanmaktadır. Hesaplamalarımız sonucu $N(E_F)$ BaNi₂P₂ malzemesi için 3,64 durum/eV olarak bulundu. Bu değer Fermi enerji seviyesini 3,82 durum/eV olarak bulan teorik çalışmadan çok az küçüktür (Jayalakshmi ve Sundareswari 2015). BaNi₂P₂ malzemesi için elektronik durum yoğunluğuna Ba atomu elektronik durumu %12, Ni atomunun elektronik durumu %47 ve P atomunun elektronik durumu %41 katkıda bulunmaktadır. $N(E_F)$ değerine en fazla katkı %44 ile Ni 3d orbitali ve %30 ile P 3p orbitalinden gelmektedir. BaNi₂P₂ malzemesi için McMillian Hoperfield eşitliğine göre süperiletkenlik özellikler Ni d ve P p orbitallerinden kaynaklanmaktadır.

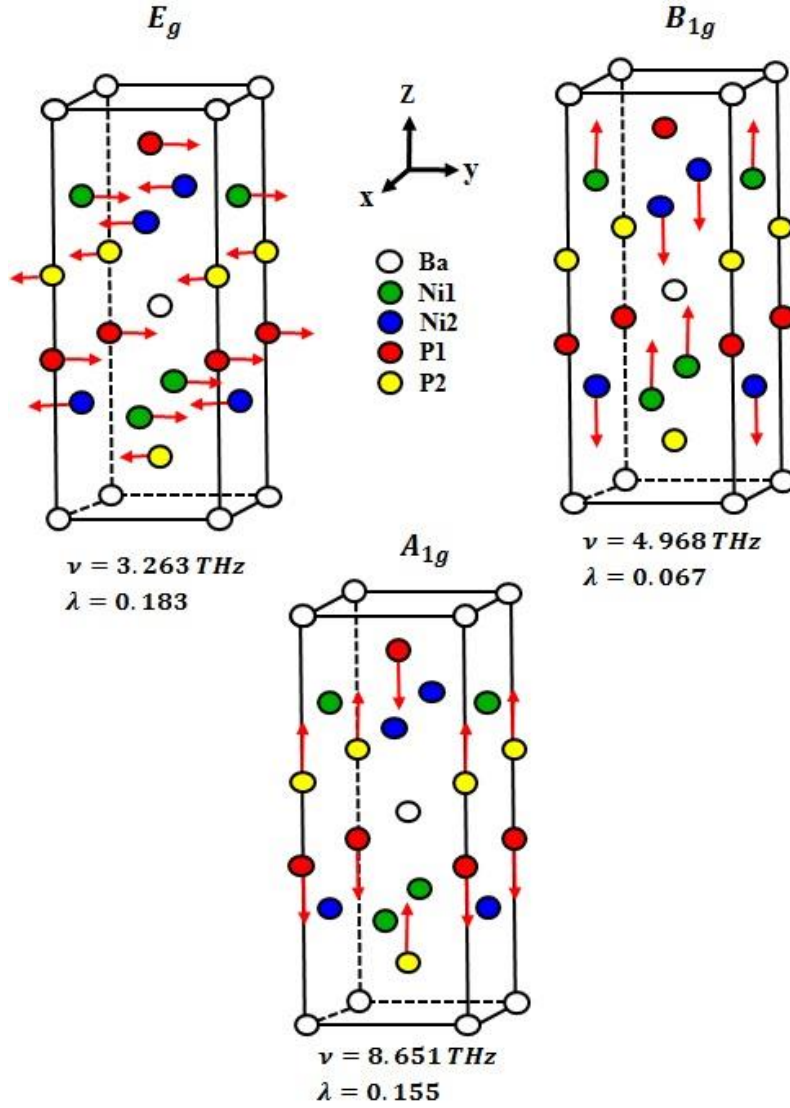
5.5.2 BaNi₂P₂ Malzemesinin Titreşim Özellikleri

BaNi₂P₂ malzemesinin BCS teorisine göre süperiletken özelliklerinin detaylı olarak incelenebilmesi için fonon özelliklerinin incelenmesi gerekir. Titreşim özellikleri elektron-fonon etkileşim parametresinin tam olarak hesaplanabilmesi için ölçülmesi gereken en önemli özelliklerden birisidir. Bu sebepten dolayı; BaNi₂P₂ malzemesi için fonon yapısı, fonon durum yoğunluğu, Eliashberg spektral fonksiyonu ve elektron fonon etkileşim parametresi incelenmiştir. Brillouin merkezi fonon (zone-center) modlarını incelemek malzemelerin kristal dinamiği çalışmaları için çok önemli bilgiler verir. BaNi₂P₂ malzemesi için zone-center fonon modları D_{4h} (4/mmm) nokta grubu ile tanımlanır. BaNi₂P₂ malzemesi için grup teoriye göre optik fonon modları simetrisi bu malzeme için SrPd₂Ge₂ malzemesinde olduğu gibi Denklem 5.1'de verilmiş olan eşitlikle belirlenir. Dejenere olmuş E modlarında bulunan atomların titreşimleri x-y düzleminde, A ve B modlarındaki atomların titreşimleri ise z yönündedir.

Tablo 5.10. BaNi₂P₂ malzemesinin optik modlara ait frekans (THz) değerleri ve onlara karşılık gelen elektron-fonon etkileşim parametresi değerleri.

Malzeme	E_u	E_g	A_{2u}	B_{1g}	A_{2u}	A_{1g}	E_g	E_u
BaNi ₂ P ₂ (v)	3,002	3,263	3,738	4,968	8,351	8,651	9,436	9,461
BaNi ₂ P ₂ (λ)	0,030	0,183	0,009	0,067	0,012	0,155	0,026	0,002

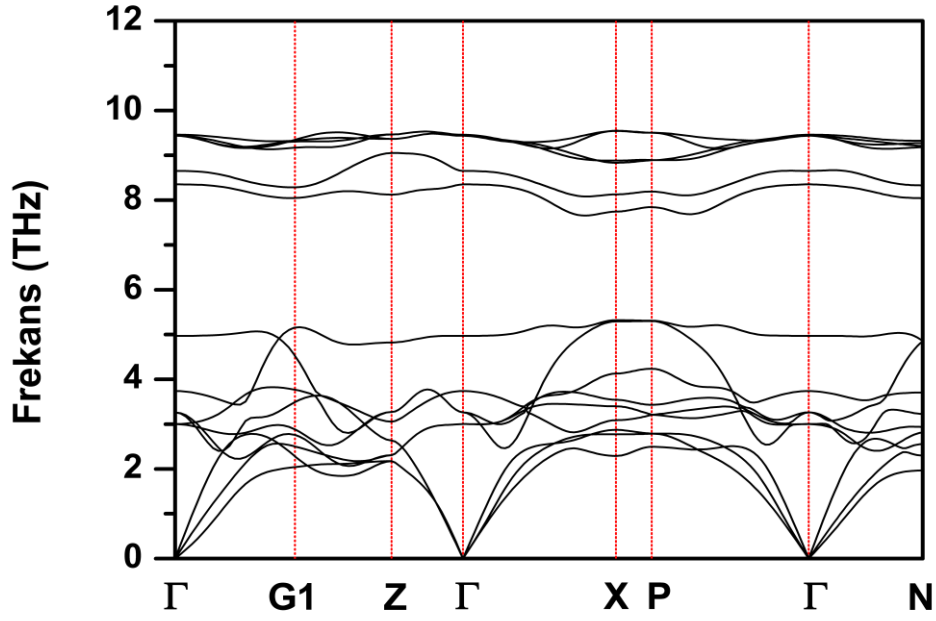
Tablo 5.10'da Brillouin merkezi fonon modlarının frekans değerleri ve elektron fonon etkileşim parametre değerleri verilmiştir.



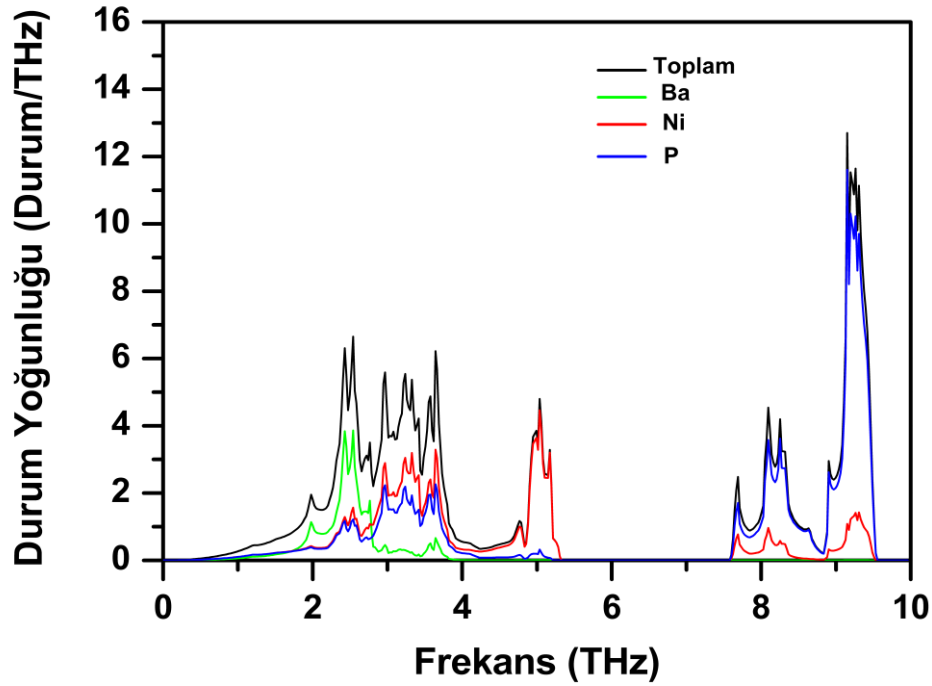
Şekil 5.28. BaNi₂P₂ malzemesi için elektron fonon etkileşim parametresine en yüksek katkıyı yapan E_g, B_{1g} ve A_{1g} modlarının özvektörler ile atomik yer değiştirmelerin gösterimi.

Tablo 5.10'dan görüldüğü gibi elektron fonon etkileşim parametresine en yüksek katkı yapan modun düşük frekanslı E_g modu ve daha sonra en yüksek katkı yapan modun A_{1g} modu olduğu bulundu. Şekil 5.28'de elektron-fonon etkileşim parametresine en büyük katkı yapan E_g, A_{1g} ve B_{1g} modlarının titreşimleri verilmiştir. Bu modların titreşimleri incelendiğinde Ni ve P atomları titreşirken Ba atomu titreşmemektedir. Bu beklenen bir durumdur. Çünkü; BaNi₂P₂ malzemesinde N(E_F) değerine en büyük katkılar Ni ve P atomlarından gelmektedir. Şekil 5.28'de E_g modunun titreşimi incelenirse; Ni ve P atomlarının [010] yönünde hareket ettikleri açıkça görülmektedir. A_{1g} modunun titreşimleri incelenirse sadece P atomları [001] yönünde titreşmektedir. B_{1g} modunun titreşimleri ise sadece Ni atomlarından kaynaklanmaktadır ve Ni atomları [001] yönünde titreşmektedir. Bu fonon modlarında Ni ve P atomlarının titreşmesi tetrahedra yapıda bulunan bağ açısının değişmesine sebep olur.

a-)



b-)



Şekil 5.29. BaNi₂P₂ malzemesi için a-) fonon modlarının farklı yüksek simetri doğrultularında dağılımlarının gösterilmesi b-) fonon durum yoğunluğuna atomların katkısına göre gösterimi

Bu durum Ni ve P atomlarının elektronik durumlarında üst üste binmelere sebep olur. Bu sebepten dolayı E_g , A_{1g} ve B_{1g} modlarının elektron-fonon etkileşim parametresi diğer optik fonon modlarının elektron-fonon etkileşim parametrelerinden daha büyük olmasına yol açar.

Fonon dağılım grafikleri ve fonon durum yoğunluğu grafikleri Şekil 5.29'da birlikte verilmiştir. Tüm fonon modları pozitif frekanslara sahip olduğundan bu malzemede BCT yapıda dinamik olarak kararlı haldedir. $BaNi_2P_2$ malzemesi her bir birim hücrede beş atom içerdiğinden toplamda on beş adet fonon modu vardır. Bunlardan üçü akustik diğer on iki tanesi ise optik moddur. Şekil 5.29.a'da görüldüğü gibi fonon dağılım eğrisi iki açık bölgeye ayrılmıştır. Bu iki bölge 0-5,3 THz frekans aralığında değişen düşük frekans bölgesi (LFR) ile 7,6-9,6 THz frekans aralığında değişen yüksek frekans (HFR) bölgesidir. LFR bölgesinde üç akustik fonon modu ile altı optik fonon modu olmak üzere toplam dokuz fonon modu bulunmaktadır. HFR bölgesinde ise geriye kalan altı optik fonon modu bulunmaktadır. Bu iki bölge 2,3 THz değerinde bir frekans ile birbirlerinden ayrılmıştır. LFR bölgesinde akustik ve optik fonon modları çok değişken karakter göstermektedir. Bu yüzden bu bölgede akustik ve optik fonon modlarının birbirleriyle çakışmasına yol açmıştır. Bu çakışmalar sebebiyle akustik modlar optik modlara ısı taşımış olabilir. Bu yüzden $BaNi_2P_2$ malzemesinde termal iletkenliğe fonon katkısı azalmış olabilir. Fonon dağılım eğrisinin özelliklerini daha iyi anlayabilmek için toplam ve kısmi fonon durum yoğunluğu eğrisi detaylı olarak incelenmelidir (Şekil 5.29.b). Fonon durum yoğunluğu eğrisi incelendiğinde 4 THz'lik frekansın altındaki bölgede üç atomun da titreşimleri görülmektedir. 2,8 THz değerinin altındaki frekanslarda Ba atomundan gelen katkı en fazladır. 4 THz değerinin üstündeki frekanslarda Ba atomları neredeyse titreşmemektedir. Çünkü Ba atomunun kütlesi diğer iki atomun (Ni, P) kütlesinden büyüktür. Bu yüzden düşük frekanslarda titreşim göstermiştir. Ni ve P atomlarından kaynaklanan fonon yoğunlukları tüm frekanslarda katkı sağlamıştır. 2,8 THz ile 4 THz arasında değişen frekanslarda Ni ve P atomları arasında güçlü bir hibritleşme bulunmaktadır. 4,0 THz ile 5,3 THz arasındaki frekans bölgesinde en büyük katkı Ni atomlarından gelmektedir. P atomlarının bu bölgedeki katkısı küçüktür. 7,6 THz değerinden yüksek olan frekans bölgesinde ana katkı P atomları tarafından gelir. Çünkü; P atomunun kütlesi diğer atomlardan küçüktür. Bu bölgede Ni atomları P atomuna göre küçük katkı da bulunmaktadır.

5.5.3 $BaNi_2P_2$ Malzemesinin Süperiletkenlik Özellikleri

$BaNi_2P_2$ malzemesi için elde ettiğimiz elektron-fonon etkileşim parametre değeri 0,61 olarak bulundu. Bu parametre orta güçlükte bir elektron-fonon etkileşimi olduğunu göstermektedir. LFR ve HFR bölgesindeki her bir fonon modlarının elektron-fonon etkileşimine katkıları sırasıyla 0,46 (%75) ve 0,15 (%25) olarak bulundu. Bu yüzden elektron-fonon etkileşimine en büyük katkı LFR bölgesindeki fononlardan kaynaklanmaktadır. HFR bölgesinde de önemli katkı gelmektedir. Bunun sebebi düşük kütleli P atomlarının yüksek frekans bölgesinde

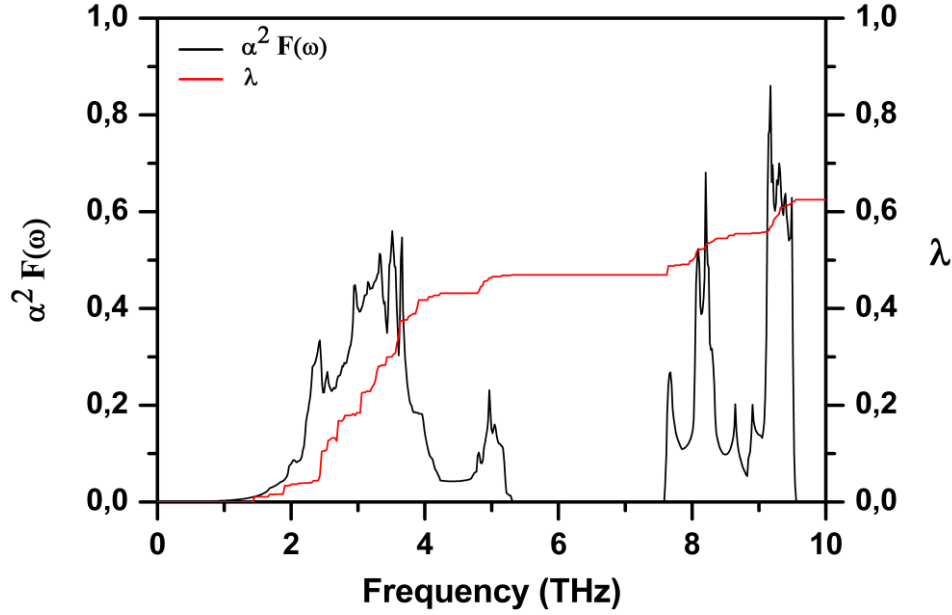
olmasıdır. Çünkü P atomları elektronik durum yoğunluğuna Fermi enerjisi civarında önemli katkıda bulunmaktadır.

BaNi₂P₂ malzemesi için hesaplanan teorik Fermi seviyesi durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik frekansı (ω_{ln}), Elektronik özgül ısı katsayısı (γ), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_C) değerleri Tablo 5.11’de görülmektedir. Elektron fonon etkileşim parametresi ve ortalama logaritmik frekans sırasıyla 0,61 ve 163,1 K olarak hesaplandı. Hesaplamalarımıza göre elde etmiş olduğumuz elektron-fonon etkileşim parametresi ve ortalama logaritmik frekans değerleri araştırmalarımıza göre daha önce hesaplanmamıştır.

Tablo 5.11. BaNi₂P₂ malzemesi için elde edilmiş değerler; $N(E_F)$, Fermi seviyesinde durum yoğunluğunu; λ , elektron-fonon etkileşim parametresini ; ω_{ln} , ortalama logaritmik frekansı; γ , Elektronik özgül ısı katsayısı; T_C , süperiletkenliğe geçiş sıcaklığını göstermektedir.

	$N(E_F)$ (durum/eV)	λ	ω_{ln} (K)	γ ($\frac{mJ}{mol.K^2}$)	T_C (K)
Bu Çalışma	3,64	0,61	163,1	13,80	2,80
DeneySEL (Mine vd. 2008)					3
DeneySEL (Hirai vd. 2012)				14	
Teorik (GGA) (Shein ve Ivanovskii 2009b)	3,97			9,35	
Teorik (LDA) (Terashima vd. 2009)	3,73			8,78	
Teorik (GGA) (Jayalakshmi ve Sundareswari 2015)	3,82				

Tablo 5.11’den görüldüğü gibi hesaplamalarımızda bulduğumuz teorik T_C değeri ile deneySEL T_C değeri birbiriyle uyumludur. Ayrıca hesaplamalarımız sonucu elde edilen spesifik ısı kapasitesi değeri deneySEL ve teorik verilerle oldukça uyumludur. Elektron-fonon parametresinin hesaplanmasından sonra Eliashberg spektral fonksiyonu hesabı için Denklem 3.14 kullanıldı ve elde ettiğimiz dağılımları Şekil 5.30’da gösterdik. Şekil 5.30 detaylı olarak incelendiğinde elektron-fonon etkileşim parametresine en büyük katkı düşük frekanslı modlardan gelmekte olduğu açık bir şekilde görülmektedir.



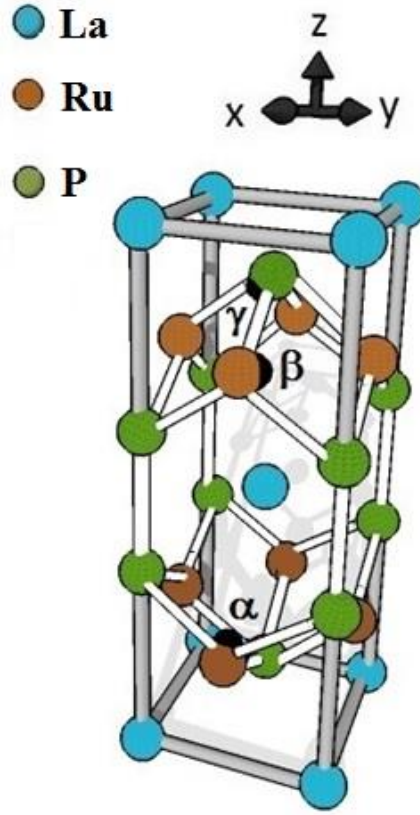
Şekil 5.30. BaNi₂P₂ malzemesi için Eliashberg spektral fonksiyonunun elektron-fonon etkileşim parametresine göre değişimi

5.6 LaRu₂P₂ Malzemesinin Hesaplanmış Değerleri

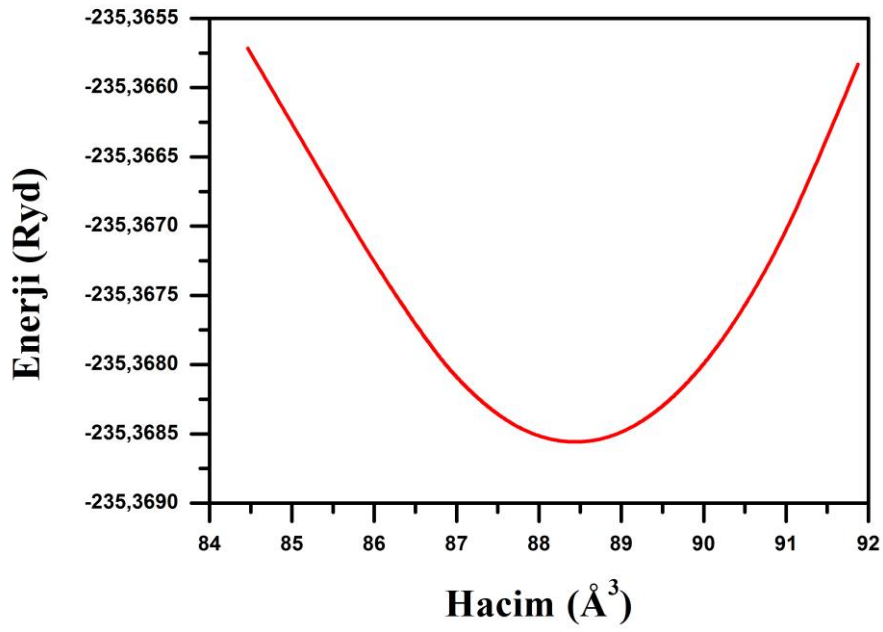
5.6.1 LaRu₂P₂ Malzemesinin Yapısal Özellikleri

Yapısal hesaplamalar sonucu LaRu₂P₂ malzemesinin de bu projede incelenmiş olan diğer malzemeler gibi BCT yapıya sahip olduğu bulundu. Bu malzeme için atomik pozisyonlar ThCr₂Si₂ yapıya benzer olarak bulundu. La atomu Th atomunun pozisyonuna iki Ru atomu iki Cr atomunun konumuna ve iki P atomuda iki Si atomu konumuna oturmuştur. Yine bu projede incelenilen malzemelerde olduğu gibi bu malzeme içinde öncelikle yapısal hesaplamalar yapıldı. LaRu₂P₂ materyali için hesaplamalar sonucu elde edilmiş olan kristal yapı Şekil 5.31 a'da ve enerji-hacim grafiği Şekil 5.31 b'de verildi. Bu proje kapsamında incelenen diğer malzemelere benzer olarak bu malzemenin kristal yapı düzenlenimi negatif yüklü tetrahedra yapı RuP₄ tabakası ile pozitif yüklü La tabakalarının sırasıyla z yönünde dizilmesiyle oluşmuştur. Bu yüzden La atomu ile RuP₄ tabakası arasında iyonik bağ söz konusudur. *Ab initio* hesaplamamızın ilk aşamasında Enerji-Hacim grafiğinden yararlanarak minimum enerjideki örgü parametreleri elde edildi. Bu projede incelenen diğer malzemeler gibi Bulk modülü ve Bulk modülünün basınca göre birinci türevleri de hesaplandı.

a-)



b-)



Şekil 5.31. LaRu_2P_2 malzemesi için a.) kristal yapının gösterimi ve b.) hesaplamalar sonucu elde edilen enerji-hacim grafiği

Hesaplamalarımız sonucu elde edilen örgü parametreleri LaRu₂P₂ malzemesi için $a = b = 4,067 \text{ \AA}$, $c = 10,703 \text{ \AA}$ ve iç parametre değeri kristal koordinatlar cinsinden $z=0,359$ olarak bulundu. Bulunan sonuçlar daha önceki deneysel sonuçlar olan $a = b = 4,031 \text{ \AA}$ ve $c = 10,675 \text{ \AA}$ (Jeitschko vd. 1987) ile karşılaştırıldığında elde edilen sonuçların uyumlu olduğu görüldü. LaRu₂P₂ malzemesi için bulk modülü 78,20 GPa ve bulk modülün basınca göre birinci türevi 1,00 olarak hesaplandı. Tablo 5.12’de hesaplamalar sonucu elde ettiğimiz yapısal sonuçların, daha önceki teorik ve deneysel sonuçlar ile karşılaştırılması verilmiştir. Ayrıca süperiletkenlik özelliklerini etkileyeceğini düşündüğümüz bazı mesafeler ve açılar da hesaplandı. Ayrıca atomlar arasında bulunan bazı açısal değerler de tabloda verildi.

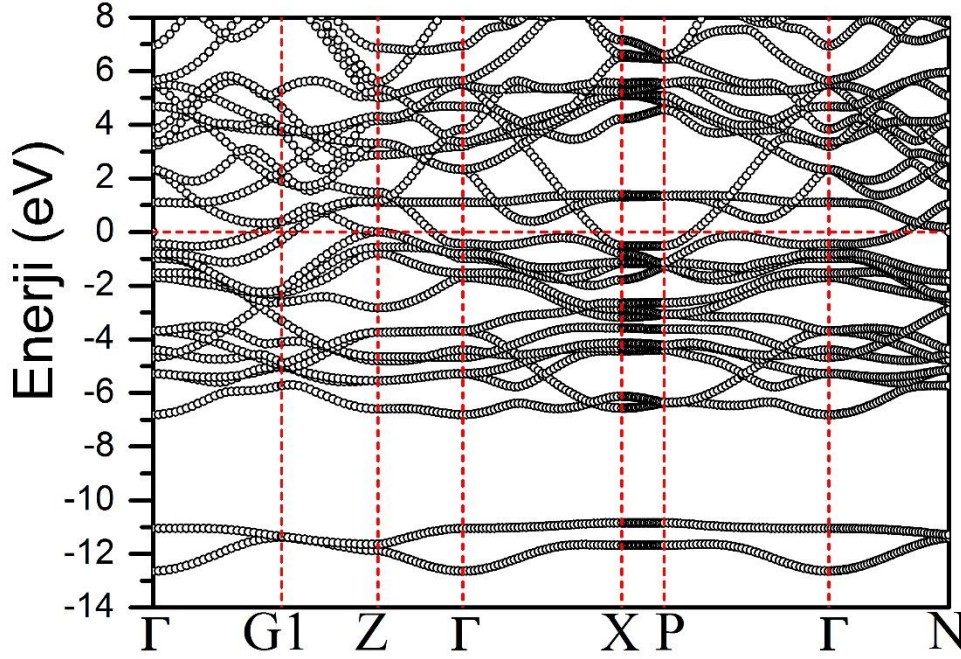
Tablo 5.12. LaRu₂P₂ malzemesi için hesaplanan yapısal değerlerin daha önceki deneysel ve teorik verilerle kıyaslanması

	$a(\text{\AA})$	$c(\text{\AA})$	z	B(GPa)	B'	$d_{\text{Ru-P}}(\text{\AA})$	α°	β°	γ°
Bu Çalışma	4,067	10,703	0,359	78,2	1,00	2,344	120,3	104,3	75,6
Deneysel (Jeitschko vd. 1987)	4,031	10,675	0,359			2,329	119,8	104,3	75,4
Deneysel (Schaak ve Cava 2004)	4,032	10,632							
Deneysel (Moll vd. 2011)	4,025	10,662							
Teorik (Razzoli vd. 2012)			0,362						

Tablo 5.12’de verilmiş olan sonuçlardan açıkça görüldüğü gibi a ve c değerlerinin daha önceki teorik ve deneysel sonuçlarla çok iyi uyumludur. Hesaplamalar sonucu elde ettiğimiz iç parametre (z) değeri de teorik ve deneysel verilerle uyumlu olduğu görülmektedir. Yapısal hesaplamalarımızın diğer teorik ve deneysel sonuçlarla uyumlu çıkması bu malzeme için hesaplanacak olan diğer hesaplamaların doğruya yakın olabileceğini göstermektedir.

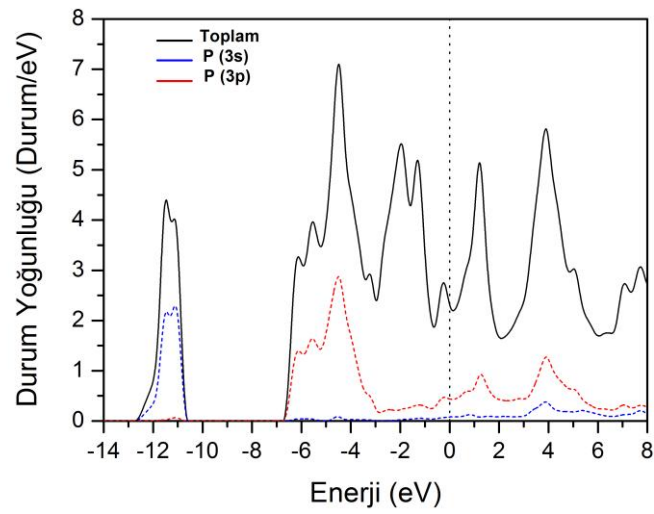
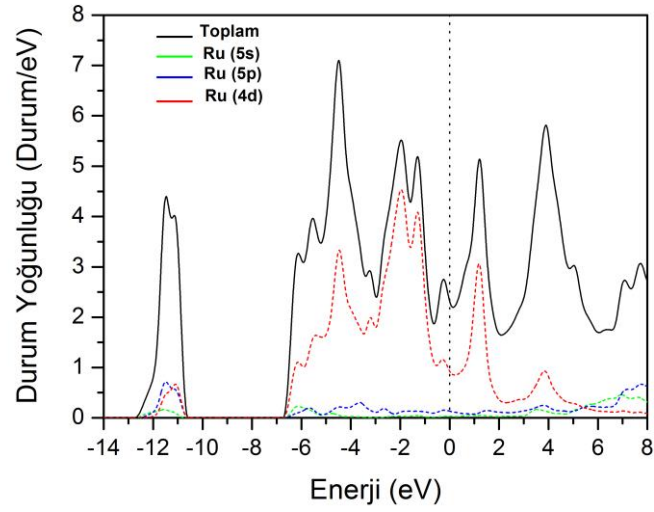
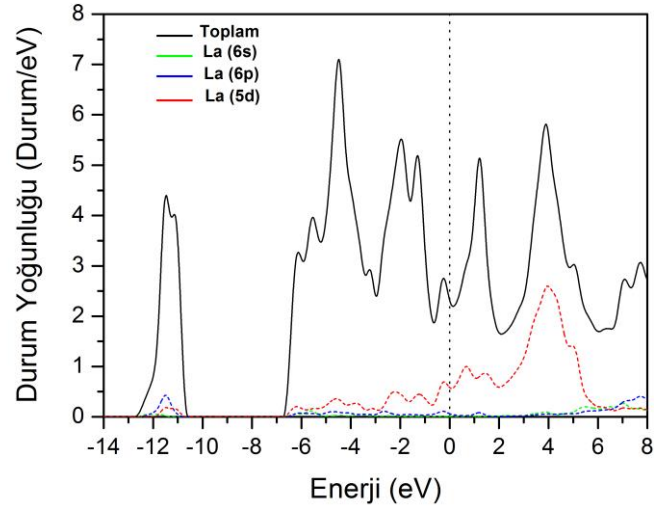
5.6.2 LaRu₂P₂ Malzemesinin Elektronik Yapısı

Yapısal hesaplamalar sonucunda elde edilen verilere bağlı olarak LaRu₂P₂ malzemesi için elektronik enerji band yapısı elde edildi ve elde edilen bu sonuçlar Şekil 5.32’de gösterildi. Şekil 5.32’de Fermi enerji seviyesi sıfır olarak seçildi ve yatay kesikli çizgi ile gösterildi. Elektronik hesaplamalar sonucunda elde ettiğimiz elektronik enerji band yapısı Shein ve Ivanovskii tarafından teorik çalışma ile elde edilen elektronik band yapısı ile uyumludur (Shein ve Ivanovskii 2010). Şekil 5.32 detaylı olarak incelendiğinde LaRu₂P₂ malzemesinin metalik bir yapıya sahip olduğunu göstermektedir.



Şekil 5.32. LaRu₂P₂ için elektronik enerji band yapısı

En düşük enerjiye sahip iki band, diğer valans bandlarından yaklaşık olarak 4 eV değerinde bir enerji ile ayrılmıştır. Elektronik enerji band yapısının daha iyi anlaşılabilmesi için elektronik durum yoğunluğu incelenmelidir. Şekil 5.33'de elektronik hesaplamalar sonucu elde ettiğimiz enerji durum yoğunluğu grafikleri verilmiştir. Bu grafik detaylı olarak incelendiğinde en düşük enerjiye sahip iki banda en fazla katkı P 3s orbitalinden geldiği açıkça görülmektedir. Bu beklenen bir durumdur. Çünkü en düşük enerji seviyelerine "s" orbitalleri yerleşir. Ana valans bölgesi detaylı olarak incelendiğinde, ana valans bölgesi yaklaşık olarak -6,7 eV değerinden Fermi seviyesine kadar uzandığı gözükmemektedir. -11,4 eV enerji değeri yakınlarında keskin bir pik bulunmaktadır. Bu pike ana katkı P atomundan geldiği elektronik enerji durum yoğunluğundan anlaşılmaktadır. La ve Ru atomlarının bu pike katkısı P atomu ile karşılaştırıldığında çok küçük olduğu görülmektedir. -6 eV ile -3 eV enerji aralığında değişen bandlara en yüksek katkının Ru d ve P p orbitallerinden geldiği Şekil 5.33'ten açıkça görülmektedir. -1,9 eV ile -1,2 eV arasında değişen ve -3 eV ile -1 eV arasında değişen enerjilerde bulunan iki pike ana katkı Ru atomunun 4d orbitalinden kaynaklandığı açıkça gözükmemektedir. Bu iki pike P 3p, La 5d ve Ru 5p orbitallerinden katkı gelmektedir. Fakat bu katkılar Ru 4d orbitali ile karşılaştırıldığında küçüktür.



Şekil 5.33. LaRu₂P₂ için elektron durum yoğunluğu

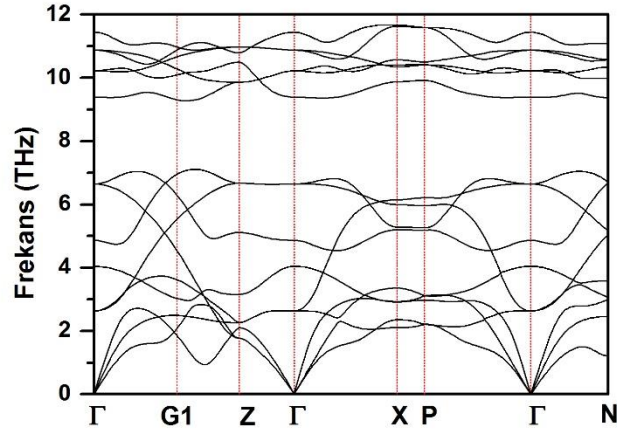
Ru 4d orbitalinin Fermi enerji seviyesine de en yüksek katkıyı yaptığı elektronik enerji durum yoğunluğundan açıkça gözükmektedir. Ru 4d orbitalinden sonra fermi enerjisi durum yoğunluğuna en büyük katkı, La 5d ve P 3p orbitallerinden geldiği Şekil 5.33'ten gözükmektedir. Bulmuş olduğumuz bu sonuçlar yine Shein ve Ivanovskii tarafından yapılan deneysel çalışma ile uyumludur (Shein ve Ivanovskii 2010). LaRu_2P_2 malzemesinin elektronik durum yoğunluğu 2,38 durum/eV olarak hesaplandı ve $N(E_F)$ değeri Fermi enerji seviyesi durum yoğunluğunu 2,46 durum/eV olarak bulan deneysel çalışma ile uyumludur (Shein ve Ivanovskii 2010). LaRu_2P_2 malzemesinin elektronik durum yoğunluğuna en büyük katkı %48 ile Ru atomundan gelmektedir. Daha sonra en büyük katkı %29 ile La atomundan gelmektedir ve en küçük katkı ise %23 ile P atomundan gelmektedir. Yine LaRu_2P_2 malzemesinin elektronik durum yoğunluğuna orbital bazında en büyük katkı %41 Ru 4d orbitalinden gelmektedir. Ru 4d orbitalinden sonra en büyük katkılar sırasıyla %26 ile La 5d ve %19 ile P 3p orbitallerinden gelmektedir. Bu sonuç bize Cooper çiftleri oluşumuna en fazla katkının Ru atomunun 4d orbitalinden, La atomunun 5d ve P atomunun 3p orbitallerinden geldiğini gösterir.

5.6.3 LaRu_2P_2 Malzemesinin Titreşim Özellikleri

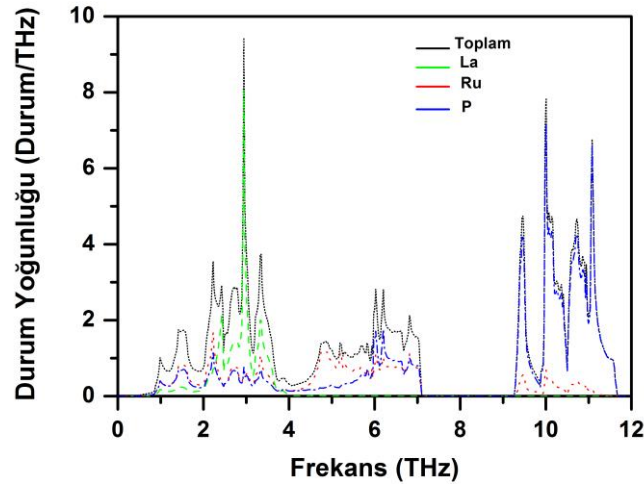
LaRu_2P_2 malzemesinin elektronik özelliklerinin incelenmesinden sonra bu malzemenin süperiletkenlik özelliklerinin daha hassas incelenmesini yapabilmek için titreşim özelliklerini inceledik. Bu proje kapsamında incelenen diğer malzemelerde olduğu gibi; bu malzeme için de fonon yapısı, fonon durum yoğunluğu, Eliashberg spektral fonksiyonu ve elektron fonon etkileşim parametresi incelendi. Hesaplamalarımız sonucunda elde edilen fonon dağılım eğrileri Şekil 5.34'de verildi. Şekil 5.34 deytaylı olarak incelendiğinde tüm fonon modlarının pozitif frekanslara sahip olduğu görülmektedir. Bu yüzden bu malzeme de dinamik olarak kararlı haldedir.

LaRu_2P_2 malzemesinin birim hücresinde beş atom vardır. Bu yüzden toplamda on beş adet fonon modu vardır. Bu onbeş modun üçü akustik diğer on iki tanesi ise optik fonon moddur. Fonon dağılım eğrisi detaylı olarak incelendiğinde iki açık bölgeye ayrıldığı gözükmektedir. Bu iki bölge yaklaşık olarak 0 ile 7,1 THz arasında değişen düşük frekans bölgesi (LFR) ve 9,3 ile 11,7 THz arasında değişen yüksek frekans bölgeleridir(HFR). LFR bölgesinde dokuz atom modu bulunmaktadır. Bunların üç tanesi akustik ve altı tanesi optik moddur. Kalan altı tane optik mod ise HFR bölgesinde bulunmaktadır. Fonon band yapısını daha iyi anlayabilmek için Fonon durum yoğunluğu eğrisi incelendi ve elde edilen sonuçlar Şekil 5.34 b'de gösterildi. Şekil 5.34'ten açıkça görüldüğü gibi 0 ile 2 THz arasında değişen bölgede Ru ve P atomları arasında güçlü bir hibritleşme vardır.

a-)



b-)



Şekil 5.34. a-) Titreşim modlarının farklı yüksek simetri doğrultularında dağılımlarının gösterilmesi b-) titreşim durum yoğunluğunun atomların katkısına göre gösterimi

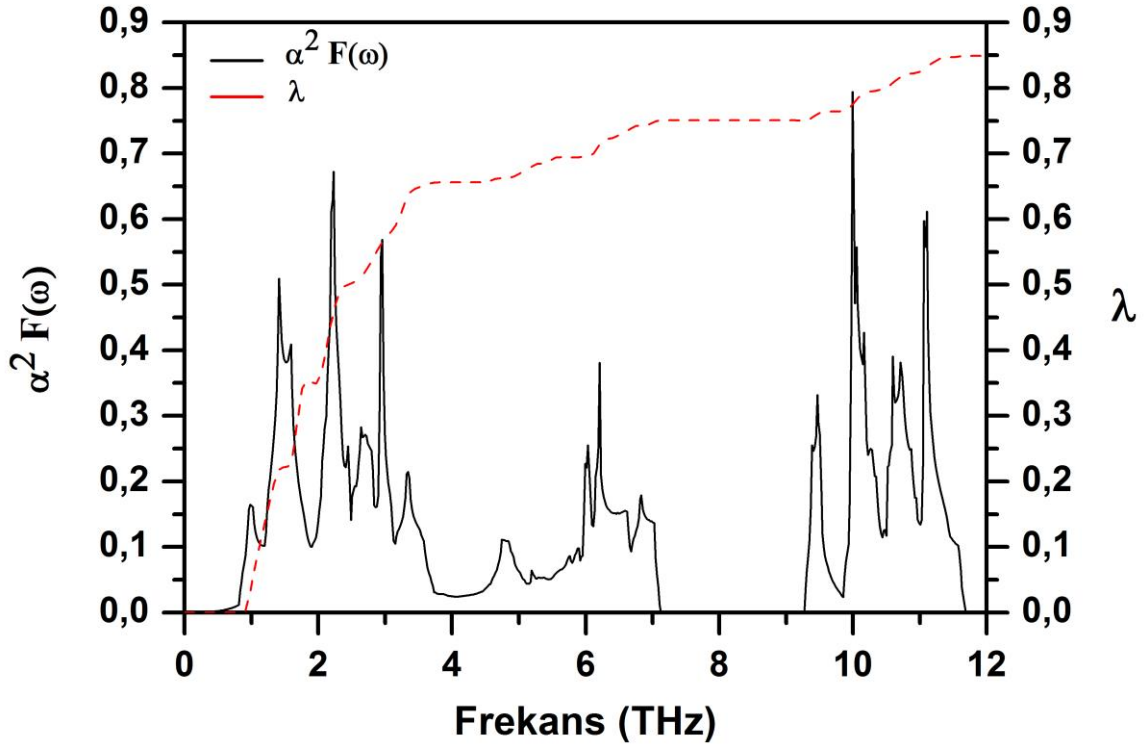
2 ile 4 THz arasında değişen frekans bölgesinde fonon durum yoğunluğuna en fazla katkı La atomundan gelir. Ru ve P atomları La atomu ile karşılaştırıldığında bu bölgede fonon durum yoğunluğuna daha az katkı yapmaktadırlar. Bunun temel sebebi LaRu_2P_2 malzemesinde bulunan La atomunun kütlelerinin Ru ve P atomlarının kütleleri ile karşılaştırıldığında daha büyük olmasıdır. 4 THz ile 6 THz arasında değişen frekans bölgede en fazla katkı Ru atomundan gelmektedir. Ayrıca La atomu bu bölgede neredeyse hiç katkı yapmamaktadır. Bu bölgede P atomundan ise küçük katkı gelmektedir. 6 THz ile 7 THz arasında değişen bölgede fonon durum yoğunluğuna katkının neredeyse tamamının Ru ve P atomlarının hibritleşmesinden geldiği gözükmemektedir. Bu durum Ru ve P atomları arasında güçlü kovalent bağ olduğunun bir kanıtıdır.

5.6.4 LaRu₂P₂ Malzemesinin Süperiletkenlik Özellikleri

LaRu₂P₂ malzemesi için hesaplamalarımız sonucunda elde etmiş olduğumuz elektronik durum yoğunluğu $N(E_F)$, elektron-fonon etkileşim parametresi (λ), ortalama logaritmik frekansı (ω_{ln}), süperiletkenliğe geçiş sıcaklığı (T_C) değerleri Tablo 5.13'te verildi. Tablo 5.13'ten görüldüğü gibi hesaplamalarımız sonucunda elde ettiğimiz teorik T_C değeri ile deneysel T_C değerleri arasında oldukça iyi bir uyum söz konusudur.

Tablo 5.13. LaRu₂P₂ malzemesi için elde edilmiş değerler; $N(E_F)$, Fermi seviyesinde durum yoğunluğunu; λ , elektron-fonon etkileşim parametresini; ω_{ln} , ortalama logaritmik frekansı; T_C , süperiletkenliğe geçiş sıcaklığını göstermektedir.

	$N(E_F)$ (durum/eV)	λ	ω_{ln} (K)	γ ($\frac{mJ}{mol.K^2}$)	T_C (K)
Bu Çalışma	2,38	0,85	127,74	10,35	3,74
Deneysel (Fujii ve Sato 2009)		0,98			4,0
Deneysel (Sung vd. 2011)		0,98		11,50	
Teorik (GGA) (Shein ve Ivanovskii 2010)	2,46				



Şekil 5.35. Eliashberg spektral fonksiyonunun elektron-fonon etkileşim parametresine göre değişimi



Bizim bu projedeki temel amacımız süperiletkenliğin hangi fonon modlarından kaynaklandığını belirlemektir. Bu sebepten dolayı Eliashberg spektral fonksiyonu incelemesi yapıldı ve Şekil 5.35'te elde ettiğimiz sonuçlar grafik halinde verildi. Bu grafikten anlaşıldığı gibi bu malzeme içinde elektron fonon etkileşimine en büyük katkı düşük frekanslı fonon modlarından kaynaklanmaktadır.

BÖLÜM 6. TARTIŞMA

Bu proje çalışmasında $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ($\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$ ve $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$) ve ThCr_2Si_2 (SrPd_2Ge_2 , LiCu_2P_2 , BaNi_2P_2 , LaRu_2P_2) kristallerinin 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 (Giannozzi vd. 2009) programı kullanılırken; Perdew-Burke-Ernzerhof tarafından parametrize edilmiş GGA (Meissner ve Ochsenfeld 1933) yaklaşımı kullanılarak değiş tokuş ve korelasyon etkileşimlerini incelemek için kullanılmıştır. Bu proje kapsamında incelenmiş olan $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$, $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$, SrPd_2Ge_2 , LiCu_2P_2 , BaNi_2P_2 ve LaRu_2P_2 malzemeleri için yapısal hesaplamalar sonucunda elde edilen yapısal değerler daha önceki deneysel ve teorik değerler ile karşılaştırıldı. Yapısal hesaplamamız sonucu elde ettiğimiz sonuçlar teorik ve deneysel sonuçlarla genel olarak çok iyi bir uyum göstermektedir. Bu durum bize kullandığımız metodun ideal olduğunu göstermektedir. Elektronik yapı incelemelerinde proje kapsamında incelenmiş olan malzemelerin enerji bandlarının c-ekseni boyunca dağılımları göz önüne alınarak iki boyutludan çok üç boyutlu karakter gösterdikleri söylenebilir. Projenin devamında lineer tepki metodu ile bu proje kapsamında incelenmiş olan kristallerin titreşim özellikleri incelendi. Bu projenin ana amacı çalışılan süperiletkenlerde, süperiletkenliğin kaynağının belirlenmesidir. Bu nedenle bu projede çalışılan $\text{LuNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ($\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$ ve $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$) ve ThCr_2Si_2 (SrPd_2Ge_2 , LiCu_2P_2 , BaNi_2P_2 , LaRu_2P_2) kristallerinin elektron-fonon etkileşimi detaylı bir şekilde incelendi ve süperiletkenlik parametreleri Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu ($N(E_F)$), Eliashberg spektral fonksiyonu ($\alpha^2F(\omega)$), elektron-fonon etkileşme parametresi (λ) ve elektronik özgül ısı katsayısı (γ) tayin edildi. Bu parametrelerden yararlanılarak projede incelenmiş olan malzemelerin süperiletkenlik geçiş sıcaklıkları (T_c) belirlendi. Süperiletkenlik için elde edilen sonuçlar, mevcut deneysel sonuçlarla karşılaştırıldı. Bu projede incelenmiş olan malzemelerden sadece LiCu_2P_2 malzemesinde süperiletkenliğe rastlanmamıştır. Bizim bulmuş olduğumuz bu sonuç Han ve çalışma arkadaşlarının yapmış olduğu deneysel çalışma ile uyum halindedir (Han vd. 2011). Diğer malzemeler için bulunmuş olan süperiletkenlik geçiş sıcaklıkları da daha önce yapılmış olan deneysel çalışmalarla çok iyi uyumludur. Bu proje



kapsamında incelenmiş olan bütün malzemeler için elektron-fonon etkileşimine en büyük katkılar düşük frekanslı modlardan kaynaklandığı bulundu.



Kaynaklar:

Uncategorized References

Allen, P. B. 1972. "Neutron spectroscopy of superconductors", *Physical Review B*, 6, 2577.

Anand, V., Geibel, C., Hossain, Z. 2007. "Superconducting and magnetic properties of Pt-based borocarbides $R\text{Pt}_2\text{B}_2\text{C}$ ($R = \text{La, Ce, Pr}$)", *Physica C: Superconductivity and its applications*, 460, 636-638.

Anand, V. K., Kim, H., Tanatar, M. A., Prozorov, R., Johnston, D. C. 2013. "Superconducting and normal-state properties of APd_2As_2 ($A = \text{Ca, Sr, Ba}$) single crystals", *Physical Review B*, 87, 224510.

Bağcı, S., Tütüncü, H., Duman, S., Srivastava, G. 2010. "Phonons and superconductivity in fcc and dhcp lanthanum", *Physical Review B*, 81, 144507.

Banu, I. B. S., Rajagopalan, M., Vaitheeswaran, G. 2000. "Structural and bonding properties of intermetallic compounds ARh_2P_2 ($A = \text{Ca, Sr, Ba}$)", *Solid State Communications*, 116, 451-456.

Banu, I. S., Rajagopalan, M., Yousuf, M., Shenbagaraman, P. 1999. "Electronic and bonding properties of ANi_2P_2 ($A = \text{Ca, Sr, Ba}$)", *Journal of alloys and compounds*, 288, 88-95.

Bardeen, J., Cooper, L. N., Schrieffer, J. R. 1957. "Microscopic theory of superconductivity", *Physical Review*, 106, 162-164.

Baroni, S., De Gironcoli, S., Dal Corso, A., Giannozzi, P. 2001. "Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory", *Reviews of Modern Physics*, 73, 515.

Bauer, R., Schmid, A., Pavone, P., Strauch, D. 1998. "Electron-phonon coupling in the metallic elements al, au, na, and nb: A first-principles study", *Physical Review B*, 57, 11276.

Bennemann, K., Garland, J. 1973. "In Superconductivity in d- and f-Band Metals", *Ch. 1, D.H.Douglass, ed., Plenum, New York, p.103.*

Berry, N., Capan, C., Seyfarth, G., Bianchi, A., Ziller, J., Fisk, Z. 2009. "Superconductivity without Fe or Ni in the phosphides BaR_2P_2 and BaRh_2P_2 ", *Physical Review B*, 79, 180502.

Bitterlich, H., Löser, W., Behr, G. 2002. "Constitution and superconductivity of $\text{Y}(\text{Ni}_x\text{Pd}_{1-x})_2\text{B}_2\text{C}$ alloys", *Materials Letters*, 57, 59-63.

Bitterlich, H., Löser, W., Lindenkreuz, H.-G., Schultz, L. 2001. "Superconducting $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ - and $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$ -phase formation from undercooled melts", *Journal of alloys and compounds*, 325, 285-292.



- Cappannini, O., Rodríguez, C., Christensen, N. 1998. "Pressure dependence of compressibilities in $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ and $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$ ", *Physica C: Superconductivity*, 306, 101-106.
- Cava, R., Batlogg, B., Siegrist, T., Krajewski, J., Peck Jr, W., Carter, S., Felder, R., Takagi, H., Van Dover, R. 1994. "Superconductivity in $\text{R Pt}_2\text{B}_2\text{C}$ ", *Physical Review B*, 49, 12384.
- Cho, B. K., Canfield, P. C., Johnston, D. C. 1995. "Onset of superconductivity in the antiferromagnetically ordered state of single-crystal $\text{DyNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ", *Physical Review B*, 52, 3844-3847.
- Christensen, A., Jo, J., Pintschovius, L., Gompf, F., Reichardt, W., Lehner, N. 1986. "Lattice dynamics of the A15 compound Mo_3Si ", *Physical Review B*, 34, 2751.
- DeBeer-Schmitt, L., Eskildsen, M. R., Ichioka, M., Machida, K., Jenkins, N., Dewhurst, C., Abrahamsen, A. B., Bud'ko, S., Canfield, P. 2007. "Pauli paramagnetic effects on vortices in superconducting $\text{TmNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ", *Physical review letters*, 99, 167001.
- Dezaneti, L., Xue, Y., Sun, Y., Ross, K., Chu, C. 2000. "Direct identification of the 23 K superconducting phase in the Y-Pd-B-C system", *Physica C: Superconductivity*, 334, 123-127.
- Fujii, H., Kimura, T., Hirata, K., Mochiku, T., Kumakura, H., Togano, K. 1996. "Phase stability and superconducting properties of $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$ \square $\text{YPt}_2\text{B}_2\text{C}$ solid solutions", *Physica C: Superconductivity*, 257, 143-150.
- Fujii, H., Sato, A. 2009. "Superconductivity in SrPd_2Ge_2 ", *Physical Review B*, 79, 224522.
- Ghebouli, M. A., Bouhemadou, A., Ghebouli, B., Fatmi, M., Bin-Omran, S. 2011. "Prediction study of the elastic and thermodynamic properties of the newly discovered tetragonal SrPd_2Ge_2 phase", *Solid State Communications*, 151, 976-981.
- Ghosh, G., Chinchure, A., Nagarajan, R., Godart, C., Gupta, L. 2001. "Strong magnetic pair breaking and weak magnetic exchange interaction among R ions in $(\text{Y, R})\text{Pd}_2\text{B}_2\text{C}$ ", *Physical Review B*, 63, 212505.
- Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G. L., Cococcioni, M., Dabo, I. 2009. "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials", *Journal of physics: Condensed matter*, 21, 395502.
- Ginzburg, V. 1950. "On the theory of superconductivity", *Zh. eksper. teor. Fiz.*, 20, 1064-1082.
- Grigereit, T. E., Lynn, J. W., Huang, Q., Santoro, A., Cava, R. J., Krajewski, J. J., Peck Jr, W. F. 1994. "Observation of oscillatory magnetic order in the antiferromagnetic



- superconductor HoNi₂B₂C", *Physical Review Letters*, 73, 2756-2759.
- Han, F., Zhu, X., Mu, G., Zeng, B., Cheng, P., Shen, B., Wen, H.-H. 2011. "Absence of Superconductivity in LiCu₂P₂", *Journal of the American Chemical Society*, 133, 1751-1753.
- Han, J. T., Zhou, J. S., Cheng, J. G., Goodenough, J. B. 2010. "A new pnictide superconductor without iron", *Journal of the American Chemical Society*, 132, 908-909.
- Hirai, D., Takayama, T., Hashizume, D., Higashinaka, R., Yamamoto, A., Hiroko, A. K., Takagi, H. 2010. "Superconductivity in 4d and 5d transition metal layered pnictides BaRh₂P₂, BaIr₂P₂ and SrIr₂As₂", *Physica C-Superconductivity and Its Applications*, 470, S296-S297.
- Hirai, D., Takayama, T., Higashinaka, R., Aruga-Katori, H., Takagi, H. 2009. "Superconductivity in Layered Pnictides BaRh₂P₂ and BaIr₂P₂", *Journal of the Physical Society of Japan*, 78, 023706.
- Hirai, D., von Rohr, F., Cava, R. 2012. "Emergence of superconductivity in BaNi₂(Ge_{1-x}P_x)₂ at a structural instability", *Physical Review B*, 86, 100505.
- Hohenberg, P., Kohn, W. 1964. "Inhomogeneous Electron Gas", *Phys. Rev B.*, 136, 864-871.
- Huang, Q., Santoro, A., Grigereit, T. E., Lynn, J. W., Cava, R. J., Krajewski, J. J., Peck Jr, W. F. 1995. "Neutron-powder-diffraction study of the nuclear and magnetic structures of the antiferromagnetic superconductor HoNi₂B₂C", *Physical Review B*, 51, 3701-3708.
- Hull, G. W., Wernick, J. H., Geballe, T. H., Waszczak, J. V., Bernardini, J. E. 1981. "Superconductivity in the ternary intermetallics YbPd₂Ge₂, LaPd₂Ge₂, and LaPt₂Ge₂", *Physical Review B*, 24, 6715-6718.
- Hung, T., Chen, I., Huang, C., Lin, C., Chen, C., You, Y., Jian, S., Yang, M., Hsu, Y.-Y., Ho, J. 2013. "Low Temperature Heat Capacity of Layered Superconductors SrNi₂Ge₂ and SrPd₂Ge₂", *Journal of Low Temperature Physics*, 171, 148-155.
- Ivanovskii, A. L. 2013. "Platinum-based and platinum-doped layered superconducting materials: Synthesis, properties and simulation", *Platinum Metals Review*, 57, 87-100.
- Jayalakshmi, D. S., 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.
- Jayalakshmi, D. S., Sundareswari, M. 2015. "A comparative density functional study of newly proposed '122' compounds with their parent low-temperature superconductors", *Indian Journal of Physics*, 89, 201-208.



- Jeevan, H., Hossain, Z., Kasinathan, D., Rosner, H., Geibel, C., Gegenwart, P. 2008. "High-temperature superconductivity in $\text{Eu}_{0.5}\text{K}_{0.5}\text{Fe}_2\text{As}_2$ ", *Physical Review B*, 78, 092406.
- Jeitschko, W., Glaum, R., Boenk, L. 1987. "Superconducting LaRu_2P_2 and other alkaline earth and rare earth metal ruthenium and osmium phosphides and arsenides with ThCr_2Si_2 structure", *Journal of Solid State Chemistry*, 69, 93-100.
- Jensen, J., Hedegard, P. 2007. "Competing magnetic and superconducting order in the rare-earth borocarbides $\text{RNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ($\text{R}=\text{Tm}, \text{Er}, \text{Ho}, \text{Dy}$)", *Physical Review B*, 76, 094504.
- Jiang, C. 2008. "First-principles study of structural, elastic, and electronic properties of chromium carbides", *Applied Physics Letters*, 92, 1909.
- Keimes, V., Johrendt, D., Mewis, A., Huhnt, C., Schlabit, W. 1997. "About polymorphism of SrNi_2P_2 and crystal structure of BaNi_2P_2 ", *Zeitschrift Fur Anorganische Und Allgemeine Chemie*, 623, 1699-1704.
- Kim, T., Yaresko, A., Zabolotnyy, V., Kordyuk, A., Evtushinsky, D., Sung, N., Cho, B., Samuely, T., Szabó, P., Rodrigo, J. 2012. "Conventional superconductivity in SrPd_2Ge_2 ", *Physical Review B*, 85, 014520.
- Kittel, C. 2014. *'Katı Hal Fiziğine Giriş'*, Çev: Öngüt, G., Öngüt, D., *Sekizinci baskıdan çeviri*. Palme Yayınları.
- Kohn, W., Sham, L. J. 1965. "Self-consistent equations including exchange and correlation effects", *Physical review*, 140, A1133.
- Kumagai, K., Ikeda, S., Roos, J., Mali, M., Brinkmann, D. 1996. " ^{195}Pt and ^{11}B NMR studies of $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$ and $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ", *Physica C: Superconductivity and its Applications*, 272, 301-308.
- Lin, M. S., Shieh, J. H., You, Y. B., Guan, W. Y., Ku, H. C., Yang, H. D., Ho, J. C. 1995. "Magnetic transitions and nearly reentrant superconducting properties of $\text{HoNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ", *Physical Review B*, 52, 1181-1186.
- Liu, A. Y., Quong, A. A. 1996. "Linear-response calculation of electron-phonon coupling parameters", *Physical Review B*, 53, R7575.
- London, F., London, H. 1935. "The Electromagnetic Equations of the Supraconductor", *Proceedings of the Royal Society of London. Series A - Mathematical and Physical Sciences*, 149, 71-88.
- McMillan, W. 1968. "Transition temperature of strong-coupled superconductors", *Physical Review*, 167, 331.



- Meissner, W., Ochsenfeld, R. 1933. "Ein neuer Effekt bei Eintritt der Supraleitfähigkeit", *Die Naturwissenschaften*, 21, 787-788.
- Miclea, C., Nicklas, M., Jeevan, H., Kasinathan, D., Hossain, Z., Rosner, H., Gegenwart, P., Geibel, C., Steglich, F. 2009. "Evidence for a reentrant superconducting state in EuFe_2As_2 under pressure", *Physical Review B*, 79, 212509.
- Mine, T., Yanagi, H., Kamiya, T., Kamihara, Y., Hirano, M., Hosono, H. 2008. "Nickel-based phosphide superconductor with infinite-layer structure, BaNi_2P_2 ", *Solid State Communications*, 147, 111-113.
- Moll, P. J., Kanter, J., McDonald, R. D., Balakirev, F., Blaha, P., Schwarz, K., Bukowski, Z., Zhigadlo, N. D., Katrych, S., Mattenberger, K. 2011. "Quantum oscillations of the superconductor LaRu_2P_2 : Comparable mass enhancement $\lambda \approx 1$ in Ru and Fe phosphides", *Physical Review B*, 84, 224507.
- Murdoch, J., Salamati, H., Quirion, G., Razavi, F. S. 1999. "Magnetic and high-pressure studies in the $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$ system", *Physica C: Superconductivity and its Applications*, 321, 108-112.
- Murnaghan, F. 1944. "The compressibility of media under extreme pressures", *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 30, 244-247.
- Onnes, H. K. 1911. Further experiments with liquid helium. In *Proceedings of the KNAW*, 1910-1911.
- Perdew, J. P., Burke, K., Ernzerhof, M. 1996. "Generalized gradient approximation made simple", *Physical review letters*, 77, 3865.
- Rapp, Ö., Sundqvist, B. 1981. "Pressure dependence of the electron-phonon interaction and the normal-state resistivity", *Physical Review B*, 24, 144.
- 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., Shi, M. 2012. "Bulk Electronic Structure of Superconducting LaRu_2P_2 Single Crystals Measured by Soft-X-Ray Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy", *Physical Review Letters*, 108, 257005.
- Reehuis, M., Jeitschko, W., Möller, M. H., Brown, P. J. 1992. "A Neutron diffraction study of the magnetic structure of EuCo_2P_2 ", *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 53, 687-690.
- Ronning, F., Bauer, E. D., Park, T., Baek, S. H., Sakai, H., Thompson, J. D. 2009. "Superconductivity and the effects of pressure and structure in single-crystalline SrNi_2P_2 ", *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 79, 134507.



- Ronning, F., Kurita, N., Bauer, E. D., Scott, B. L., Park, T., Klimczuk, T., Movshovich, R., Thompson, J. D. 2008. "The first order phase transition and superconductivity in $\text{BaNi}_{1-x}\text{K}_x\text{As}_2$ single crystals", *Journal of Physics Condensed Matter*, 20, 342203.
- Rotter, M., Tegel, M., Johrendt, D. 2008. "Superconductivity at 38 K in the iron arsenide $(\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x)\text{Fe}_2\text{As}_2$ ", *Physical Review Letters*, 101.
- Samuely, T., Szabo, P., Rodrigo, J. G., Sung, N. H., Cho, B. K., 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.
- Sánchez, D. R., Baggio-Saitovitch, E. M., Micklitz, H., Lee, S. I. 2005. "Observation of a pair-breaking field in the magnetically diluted antiferromagnetic superconductor $\text{DyNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ", *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 71.
- Schaak, R., Cava, R. 2004. "Boron substitution in ternary metal phosphide superconductors", *Materials research bulletin*, 39, 1231-1235.
- Schmidt, T., Jeitschko, W. 2002. "Preparation and crystal structure of the ternary lanthanoid platinum antimonides $\text{Ln}_3\text{Pt}_7\text{Sb}_4$ ($\text{Ln} = \text{Ce}, \text{Pr}, \text{Nd}, \text{and Sm}$) with $\text{Er}_3\text{Pd}_7\text{P}_4$ type structure", *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie*, 628, 927-932.
- Schneider, M., Fuchs, G., Müller, K. H., Nenkov, K., Behr, G., Souptel, D., Drechsler, S. L. 2009. "Magnetic pair breaking in superconducting $\text{HoNi}_2\text{B}_2\text{C}$ studied on a single crystal by thermal conductivity in magnetic fields", *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 80, 224522.
- Sefat, A. S., Jin, R., McGuire, M. A., Sales, B. C., Singh, D. J., 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., 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. R., Ivanovskii, A. L. 2009a. "Band structure of new layered superconductors BaRh_2P_2 and BaIr_2P_2 ", *Jetp Letters*, 89, 357-361.
- Shein, I. R., Ivanovskii, A. L. 2009b. "Electronic and structural properties of low-temperature superconductors and ternary pnictides ANi_2Pn_2 ($\text{A}=\text{Sr}, \text{Ba}$ and $\text{Pn}=\text{P}, \text{As}$)", *Physical Review B*, 79, 054510.
- Shein, I. R., Ivanovskii, A. L. 2010. "Electronic band structure of new "122" pnictogen-free superconductor SrPd_2Ge_2 as compared with SrNi_2Ge_2 and SrNi_2As_2 from first



- principles calculations", *Physica B-Condensed Matter*, 405, 3213-3216.
- Shein, I. R., 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 and Its Applications*, 471, 226-228.
- Shein, I. R., Skornyakov, S. L., Anisimov, V. I., 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.
- Siegrist, T., Cava, R. J., Krajewski, J. J., Peck Jr, W. F. 1994. "Crystal chemistry of the series $\text{LnT}_2\text{B}_2\text{C}$ (Ln rare earth, T transition element)", *Journal of Alloys and Compounds*, 216, 135-139.
- Singh, D. J. 1994. " $\text{LaPt}_2\text{B}_2\text{C}$: A conventional borocarbide superconductor", *Physical Review B*, 50, 6486-6488.
- Srivastava, G. P. 1990. *The Physics of Phonons*. Adam Hilger, Bristol.
- Sun, Y. Y., Rusakova, I., Meng, R. L., Cao, Y., Gautier-Picard, P., Chu, C. W. 1994. "The 23 K superconducting phase $\text{YPd}_2\text{B}_2\text{C}$ ", *Physica C: Superconductivity and its applications*, 230, 435-442.
- Sung, N., Rhyee, J.-S., Cho, B. 2011. "Superconductivity and anomalous transport in SrPd_2Ge_2 single crystals", *Physical Review B*, 83, 094511.
- Syassen, K., Holzapfel, W. 1975. "Compression of lanthanum to 120 kbar", *Solid State Communications*, 16, 533-536.
- Terashima, T., Kimata, M., Satsukawa, H., Harada, A., Hazama, K., Imai, M., Uji, S., Kito, H., Iyo, A., Eisaki, H., Harima, H. 2009. "Fermi Surface in BaNi_2P_2 ", *Journal of the Physical Society of Japan*, 78, 033706.
- Tomioka, Y., Ishida, S., Nakajima, M., Ito, T., Kito, H., Iyo, A., Eisaki, H., 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 - Condensed Matter and Materials Physics*, 79, 132506.
- Torikachvili, M. S., Bud'ko, S. L., Ni, N., Canfield, P. C. 2008. "Pressure induced superconductivity in CaFe_2As_2 ", *Physical review letters*, 101, 057006.
- Tütüncü, H., Bağcı, S., Srivastava, G., Akbulut, A. 2012. "Electrons, phonons and superconductivity in rocksalt and tungsten-carbide phases of CrC ", *Journal of Physics: Condensed Matter*, 24, 455704.
- Tütüncü, H., Bağcı, S., Srivastava, G. 2010. "Electronic structure, phonons, and electron-



- phonon interaction in Mo₃Si", *Physical Review B*, 82, 214510.
- Tütüncü, H., Srivastava, G. 2013. "Electronic, vibrational, superconducting and thermodynamic properties of cubic antiperovskite ZnNi₃", *Philosophical Magazine*, 93, 4469-4487.
- Tütüncü, H., Srivastava, G. 2014. "Origin of superconductivity in layered centrosymmetric LaNiGa₂", *Applied Physics Letters*, 104, 022603.
- Uehara, M., Uehara, A., Kozawa, K., Yamazaki, T., Kimishima, Y. 2010. "New antiperovskite superconductor ZnNi₃, and related compounds CdNi₃ and InNi₃", *Physica C: Superconductivity*, 470, S688-S690.
- Wang, J., Chen, I., Hung, T., You, Y., Ku, H., Hsu, Y.-Y., Ho, J., Chen, Y. 2012. "Superconductivity and structural variation of the electron-correlated layer systems Sr (Pd_{1-x}T_x)₂Ge₂ (T= Co, Ni, Rh; 0 ≤ x ≤ 1)", *Physical Review B*, 85, 024538.
- Wang, Y.-K., Hsu, L.-S., Lan, M.-D. 2005. "Experimental and theoretical study of the electronic structures of Y_{1-x}R_xPd₂B₂C (R= Gd, Dy, Ho, and Er) superconductors", *Journal of alloys and compounds*, 389, 1-4.
- Weber, F., Rosenkranz, S., Pintschovius, L., Castellán, J. P., Osborn, R., Reichardt, W., Heid, R., Bohnen, K. P., Goremychkin, E. A., Kreyssig, A., Hradil, K., Abernathy, D. L. 2012. "Electron-phonon coupling in the conventional superconductor YNi₂B₂C at high phonon energies studied by time-of-flight neutron spectroscopy", *Physical Review Letters*, 109.
- Weber, W. 1973. "Phonon anomalies in strongly coupled superconductors", *Physical Review B*, 8, 5093.
- Weigand, M., Civale, L., Baca, F. J., Kim, J., Bud'ko, S. L., Canfield, P. C., Maierov, B. 2013. "Strong enhancement of the critical current at the antiferromagnetic transition in ErNi₂B₂C single crystals", *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 87, 140506.
- Wulferding, D., Yang, I., Yang, J., Lee, M., Choi, H. C., Bud'ko, S. L., Canfield, P. C., Yeom, H. W., Kim, J. 2015. "Spatially resolved penetration depth measurements and vortex manipulation in the ferromagnetic superconductor ErNi₂B₂C", *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 92, 014517.
- Ying, J., Yan, Y., Liu, R., Wang, X., Wang, A., Zhang, M., Xiang, Z., Chen, X. 2010. "Isotropic superconductivity in LaRu₂P₂ with the ThCr₂Si₂-type structure", *Superconductor Science and Technology*, 23, 115009.
- Zeng, N., Lee, W. 2002. "Superconductivity in the Ni-based ternary compound LaNiGa₂", *Physical Review B*, 66, 092503.



TÜBİTAK
PROJE ÖZET BİLGİ FORMU

Proje Yürütücüsü:	Prof. Dr. HÜSEYİN MURAT TÜTÜNCÜ
Proje No:	114F192
Proje Başlığı:	ThCr ₂ Si ₂ ve LuNi ₂ B ₂ C Tipi Süperiletkenlerin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi Kullanılarak İncelenmesi
Proje Türü:	1001 - Araştırma
Proje Süresi:	30
Araştırmacılar:	ŞULE UĞUR
Danışmanlar:	
Projenin Yürütüldüğü Kuruluş ve Adresi:	SAKARYA Ü. BIYOMEDİKAL, MANYETİK VE YARIİLETKEN MALZEMELER UYGULAMA VE ARAŞTIRMA MERKEZİ
Projenin Başlangıç ve Bitiş Tarihleri:	01/10/2014 - 01/04/2017
Onaylanan Bütçe:	172560.0
Harcanan Bütçe:	147239.24
Öz:	<p>YNi₂B₂C materyalinde süperiletkenlik geçiş sıcaklığının 15 K'e yakın sıcaklıkta bulunmasından hemen sonra, borkarbür süperiletken malzemeler üzerine devam eden ve gittikçe artan bir ilgi oluşmuştur. Birçok deneysel ve teorik çalışmalar yeni ve daha yüksek süperiletkenlik geçiş sıcaklığına (TC) sahip borkarbür süperiletken malzemeler bulmak için yapıldı. Sonunda, kristal yapısı (LuNi₂B₂C yapı) ThCr₂Si₂den türeyen yüksek sıcaklıklı yeni borkarbür süperiletkenler bulundu. Bunların içinde en yüksek TC değeri 23 K ile YPd₂B₂C için elde edildi. Böylece, ThCr₂Si₂ tipi metaller arası (intermetalik) malzemeler onların süperiletkenlik ve manyetik özelliklerinden dolayı çalışıldı. ThCr₂Si₂ tipi kristal yapıya sahip olan SrPd₂Ge₂ için ikinci tip süperiletkenlik bildirildi(TC~3 K). Bu süperiletken, demir içeren süperiletkenlere göre oldukça ilgi çekiciydi çünkü manyetik metal (Fe), manyetik olmayan metal (Pd) ile yer değiştirmişti. Bu süperiletkenin bulunması LiCu₂P₂ ve BaNi₂P₂ ikinci tip süperiletkenlerin bulunmasına öncülük etti.</p> <p>Birçok deneysel çalışma bu süperiletken malzemelerin süperiletkenlik parametrelerini elde etmek için yapıldı. Bu deneysel çalışmalar bu malzemelerin yapısal ve elektronik özellikleri üzerine olan teorik çalışmalara bir zemin hazırladı. Bu malzemelerde süperiletkenliğin daha iyi anlaşılması için onların fonon özellikleri de araştırılmalıdır. Çünkü süperiletkenliğin kaynağı hemen hemen elektron-fonon etkileşimidir. Bizim bilgilerimize göre, bu süperiletkenlerde elektron-fonon etkileşiminin teorik incelenmesi yapılmamıştır. Bu nedenle bu süperiletkenlerde, süperiletkenliğin kaynağı literatürde halen bilinmemektedir.</p> <p>Bu projenin amacı YPd₂B₂C, LaPt₂B₂C, LaRu₂P₂, BaNi₂P₂, LiCu₂P₂ ve SrPd₂Ge₂ süperiletkenlerinin yapısal ve elektronik özelliklerinin günümüzde en gelişmiş teorik metotlardan birisi olan yoğunluk fonksiyonel teorisi ve düzlem dalga sözdepotansiyel(pseudopotansiyel) metodu ile araştırılmasıdır. Yapısal ve elektronik özellikler elde edildikten sonra lineer tepki metodu bu malzemelerde fononların çalışılması için kullanılacaktır. Ayrıca, bu materyallerin Fermi seviyesindeki durum yoğunluğu (N(EF)), Eliashberg spektral fonksiyonu (??F(?)), elektron-fonon etkileşme parametresi (?), elektronik özgül ısı katsayısı (?) ve süperiletkenlik geçiş sıcaklığı (Tc) gibi süperiletkenlik parametrelerini belirlemek için, elektron-fonon etkileşmeleri de araştırılacaktır. Hesaplanan süperiletkenlik parametrelerini kullanarak bu materyallerin süperiletkenlik özelliklerinin fiziksel açıklaması yapılacaktır.</p>
Anahtar Kelimeler:	ThCr ₂ Si ₂ yapı, LuNi ₂ B ₂ C yapı, süperiletkenlik, elektronik yapı, fonon, yoğunluk fonksiyonel teorisi
Fikri Ürün Bildirim Formu Sunuldu Mu?:	Hayır

Proje Yapılan Yayınlar:	<p>1- Ab initio investigation of BCS-type superconductivity in LuNi₂B₂C-type superconductors (Makale - İndekli Makale),</p> <p>2- Theoretical investigation of superconductivity in SrPd₂Ge₂, SrPd₂As₂, and CaPd₂As₂ (Makale - Diğer Hakemli Makale),</p> <p>3- Identification of specific phonon contributions in BCS-type superconductivity of boride-carbide crystals with a layer-like structure (Makale - Diğer Hakemli Makale),</p> <p>4- SPECIFIC PHONON CONTRIBUTIONS IN LAYER-LIKE STRUCTURED BORIDE-CARBIDE CRYSTALS WITH BCS-TYPE SUPERCONDUCTIVITY (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Poster Sunum),</p> <p>5- AN AB INITIO INVESTIGATION OF SUPERCONDUCTIVITY IN THE BODY CENTERED TETRAGONAL LuNi₂B₂C AND LaPt₂B₂C (Bildiri - Uluslararası Bildiri - Poster Sunum),</p> <p>6- YPd₂B₂C VE YPt₂B₂C MALZEMELERİNİN FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN İNCELENMESİ (Tez (Araştırmacı Yetiştirilmesi) - Yüksek Lisans Tezi),</p> <p>7- First-principles investigation of superconductivity in the body-centred tetragonal LaRu₂P₂ (Makale - İndekli Makale),</p> <p>8- Electron-phonon superconductivity in the ternary phosphides BaM₂P₂ (M = Ni, Rh, and Ir) (Makale - Diğer Hakemli Makale),</p> <p>9- Theoretical Calculation of Absence Of Superconductivity in LiCu₂P₂ (Bildiri - Ulusal Bildiri - Poster Sunum),</p> <p>10- Hacim Merkezli Tetragonal Yapıya Sahip LaRu₂P₂ Malzemesinin Süperiletkenlik Özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi Kullanılarak İncelenmesi (Bildiri - Ulusal Bildiri - Poster Sunum),</p> <p>11- LaRu₂P₂ malzemesinin Fiziksel özelliklerinin Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi Kullanılarak İncelenmesi (Tez (Araştırmacı Yetiştirilmesi) - Yüksek Lisans Tezi),</p>
-------------------------	--

TÜBİTAK