



**T.C.
AKSARAY ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

FİZİK ANABİLİM DALI

**MANYETİK ALAN İÇERİSİNDEKİ KÜRESEL KUANTUM
NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK ENERJİ SEVİYELERİNİN
HESAPLANMASI**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fatma YILMAZER

**DANIŞMAN
Prof. Dr. Yusuf YAKAR**

AKSARAY, 2018



**T.C.
AKSARAY ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

FİZİK ANABİLİM DALI

**MANYETİK ALAN İÇERİSİNDEKİ KÜRESEL KUANTUM
NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK ENERJİ SEVİYELERİNİN
HESAPLANMASI**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fatma YILMAZER

**DANIŞMAN
Prof. Dr. Yusuf YAKAR**

AKSARAY, 2018

ONAY BELGESİ

Aksaray Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü'nün 152310002 numaralı Yüksek Lisans öğrencisi, **Fatma YILMAZER** tarafından hazırlanan **MANYETİK ALAN İÇERİSİNDEKİ KÜRESEL KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK ENERJİ SEVİYELERİNİN HESAPLANMASI** adlı tez çalışması aşağıdaki jüri tarafından OY BİRLİĞİ ile FİZİK Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Danışman : Prof. Dr. Yusuf YAKAR

Aksaray Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.



Üye : Prof. Dr. Bekir ÇAKIR

Selçuk Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.



Üye : Prof. Dr. Engin DELİGÖZ

Aksaray Üniversitesi

Bu tezin, kapsam ve kalite olarak Yüksek Lisans Tezi olduğunu onaylıyorum.



Tez Savunma Tarihi: 14/09/2018

Jüri tarafından kabul edilen bu tezin Yüksek Lisans Tezi olması için gerekli şartları yerine getirdiğini onaylıyorum.

.....

Doç. Dr. Mehmet Ali HİNİS

Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürü

DOĞRULUK BEYANI

Yüksek lisans tezi olarak sunduğum bu çalışmayı, akademik kurallara, bilimsel etik, ahlak ve geleneklere aykırı düşecek bir yol ve yardıma başvurmaksızın yazdığımı, yararlandığım eserlerin kaynakçada gösterilenlerden oluştuğunu çalışmamda kullandığım verilerin orijinallliğini ve her türlü intihalden uzak olduğunu beyan ederim.

Enstitü tarafından belli bir zamana bağlı olmaksızın, tezimle ilgili yaptığım bu beyana aykırı bir durumun saptanması durumunda, ortaya çıkacak tüm ahlaki ve hukuki sonuçlara katlanacağımı bildiririm.

Fatma YILMAZER



TEŐEKKÖR

Öncelikle danışmanlığımı üstlenerek tezin seçim aşamasından tamamlanmasına kadar olan tüm aşamalarında benden yardımını esirgemeyen, değerli görüşleriyle, tecrübesiyle ve bilgileriyle beni yönlendiren danışman hocam Prof. Dr. Yusuf YAKAR'a sonsuz şükranlarımı sunarım. Bu süreçte gerekli yardım ve anlayışı gösteren sevgili eşime ve her zaman her konuda manevi desteklerini benden esirgemeyen canım aileme sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Fatma YILMAZER
Aksaray, 2018



İÇİNDEKİLER

Sayfa

TEŞEKKÜR	i
İÇİNDEKİLER	ii
ÖZET.....	iii
ABSTRACT	iv
ŞEKİLLER DİZİNİ	v
ÇİZELGELER DİZİNİ	vii
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ	viii
1.GİRİŞ	1
2. DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR.....	6
2. 1. Düşük Boyutlu Yapı Çeşitleri	6
2.1.1.Kuantum kuyuları	6
2.1.2 Kuantum teller.....	7
2.1.3 Kuantum nokta yapılar.....	8
2.2. Serbest Elektron Modeli.....	8
2.3. Kısmen Serbest Elektron Modeli	9
2.4. Düşük Boyutlu Yapıların Elde Edilme Yöntemleri	11
2.4.1. Asitle eritme yöntemi.....	11
2.4.2. Modüle edilmiş elektrik alan yöntemi	11
2.4.3. Kendiliğinden büyütme yöntemi.....	12
2.4.4. Seçici büyütme yöntemi.....	12
2.4.5. Kuantum kuyusu ve engel arası iç difüzyon yöntemi	13
2.4.6. Yarı iletken mikro kristaller	13
2.5. Kuantum Genetik Algoritma.....	13
3. TANIMLAMALAR VE YÖNTEM.....	16
3.1. Giriş.....	16
3.2. Slater Tipi Orbitaller	16
3.3.Hartree-Fock-Roothaan Yöntemi.....	18
3.4. Etkin Kütle Yaklaşımı.....	19
4. KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ.....	21
4.1 Giriş.....	21
4.2 Dalga Fonksiyonu ve Sınır Şartları	22
4.3 Kuantum Nokta Yapıların Schrödinger Denklemi ve Çözümü	22
5. DIŞ MANYETİK ALAN İÇERISİNDEKİ KUANTUM NOKTA YAPILAR.....	24
6. HESAPLAMA METODU	27
7. BULGULAR VE TARTIŞMA	30
8. SONUÇ VE ÖNERİLER.....	61
KAYNAKLAR	63
EKLER.....	67
ÖZGEÇMİŞ.....	82

YÜKSEK LİSANS TEZİ

MANYETİK ALAN İÇERİSİNDEKİ KÜRESEL KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK ENERJİ SEVİYELERİNİN HESAPLANMASI

Fatma YILMAZER

**Aksaray Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı**

Danışman: Prof. Dr. Yusuf YAKAR

ÖZET

Bu çalışmada, dış manyetik alanın varlığında ve yokluğunda küresel bir kuantum nokta yapının elektronik özellikleri incelendi. Kuantum nokta yapının sonlu ve sonsuz sınırlandırıcı potansiyele sahip olduğu göz önüne alınmıştır. R yarıçaplı GaAs/Al_xGa_{1-x}As küresel kuantum nokta yapıda hidrojenik safsızlığın 1s, 2p, 3d ve 4f enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonları Kuantum Genetik Algoritma(KGA) ve Hartree-Fock Roothaan (HFR) methodu kullanılarak hesaplanmıştır. Hesaplanan dalga fonksiyonları ve enerjileri kullanılarak, sonlu ve sonsuz sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının bağlanma enerjisi, nokta yarıçapı ve alüminyum katkılanma oranına bağlı olarak hesaplandı. Ayrıca bu çalışmada, dış manyetik alanın kuantum nokta yapının enerji seviyelerine ve bağlanma enerjilerine olan etkileri de incelenmiştir. Kuantum nokta yapının alt seviyeler arasındaki lineer Zeeman ve kuadratik Zeeman geçiş enerjileri nokta yarıçapının ve manyetik alanın fonksiyonu olarak hesaplandı. Hesaplamalardan manyetik alan, safsızlık yükü, nokta yarıçapı ve alüminyum katkılanma oranının, sistemin enerji seviyeleri Zeeman enerjileri üzerinde güçlü bir etkiye sahip olduğu görülmüştür. Ayrıca, dış manyetik alan etkileri büyük nokta yarıçaplarında Zeeman seviyeleri arasındaki optiksel geçişleri güçlü bir şekilde etkilediği görülmüştür. Güçlü uzaysal sınırlandırmanın olduğu bölgelerde enerji seviyeleri manyetik alanın etkisinden çok az etkilenirken, orta sınırlandırmanın olduğu bölgelerde alanın sınırlandırma etkisi ile uzaysal sınırlandırma etkisinin yarıştığı ve zayıf sınırlandırma bölgesinde ise manyetik alan etkisinin daha güçlü olduğu görülmüştür.

Anahtar Kelimeler: Küresel kuantum nokta yapılar, Kuantum Genetik Algoritma (KGA, Hartree-Fock Roothaan (HFR), Slater tipi orbital, Manyetik alan etkileri, Bağlanma enerjisi.

Eylül, 2018; 82 sayfa

M.Sc. THESIS

CALCULATION OF ELECTRONIC ENERGY STATES OF A SPHERICAL QUANTUM DOTS INSIDE MAGNETIC FIELD

Fatma YILMAZER

**Aksaray University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics**

Supervisor: Prof. Dr. Yusuf YAKAR

ABSTRACT

In this study, in existence and absence of an external magnetic field, the electronic properties of a spherical quantum dot were investigated. The quantum dot (QD) is assumed to have a finite and an infinite confining potential well. 1s, 2p, 3d and 4f energy levels and the wave functions of a hydrogenic impurity in GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ spherical quantum dot with radius R are calculated by the Quantum Genetic Algorithm (QGA) and Hartree-Fock Roothan (HFR) method. Based on the wave functions and energy states, the binding energy of the spherical QD is carried out as a function of dot radius and aluminium concentration ratio. In addition, we report a detailed theoretical investigation of the effect of an external magnetic field on the energy states and binding energies of a spherical quantum dot. The Linear Zeeman and quadratic Zeeman transition energies between subbands were computed as a function of dot radius and magnetic field. The results show that the magnetic field, impurity charge, dot radius and aluminium concentration ratio have a strong influence on the energy states and the Zeeman transitions. Besides, the results present that, in large dot radius, the external magnetic field affects strongly the optical transitions between Zeeman states. In the strong spatial confinement cases, energy level is relatively insensitive to the magnetic field, and electron spatial confinement prevails over magnetic confinement.

Keywords: Spherical quantum dot, Quantum Genetik Algoritim (QGA), Hartree-Fock Roothaan (HFR), Slater type orbital, Magnetic field effects, Binding energy.

September, 2018; 82 pages

ŞEKİLLER DİZİNİ

	<u>Sayfa</u>
Şekil 1.1. Hetero yapılarda kuantum kuyusunun oluşumu.....	3
Şekil 1.2. a) Kuantum kuyusu; b) Kuantum teli, c) Kuantum nokta yapısı.....	3
Şekil 2.1. Serbest elektronun dispersiyon eğrisi.....	9
Şekil 2.2. Kısmen serbest elektron modeli ve serbest elektron modeli dispersiyon eğrilerinin birlikte gösterimi.....	10
Şekil 2.3. a) Metaller, b) Yarıiletkenler, c) Yalıtkanlara ait bant profilleri. Burada E_g yasak bant aralığını ve gölgeli bölgeler de elektronlarla dolu enerji seviyelerini temsil etmektedir.....	11
Şekil 7.1. Nokta yarıçapının fonksiyonu olarak sonsuz sınırlandırıcı potansiyele sahip küresel kuantum nokta yapının enerji seviyeleri.....	33
Şekil 7.2. Nokta yarıçapının fonksiyonu olarak sonlu ($x=0.1, 0.2, 0.3$ ve 0.4) sınırlandırıcı potansiyele sahip küresel kuantum nokta yapının enerji seviyeleri.....	39
Şekil 7.3. a.b.c. Nokta yarıçapının fonksiyonu olarak 1s ve 2p Zeeman enerji seviyeleri.....	42
Şekil 7.4. a.b.c. Nokta yarıçapının fonksiyonu olarak 1s ve 2p Zeeman geçiş enerjileri.....	43
Şekil 7.5. a.b.c. Nokta yarıçapının fonksiyonu olarak 2p ve 3d Zeeman enerji seviyeleri.....	45
Şekil 7.6. a.b.c. Nokta yarıçapının fonksiyonu olarak 2p ve 3d Zeeman geçiş enerjileri.....	46
Şekil 7.7. γ nın 3 farklı değeri için 1s, 2p, 3d ve 4f seviyelerinin manyetik kuantum sayıları $m=0$ durumunda nokta yarıçapının fonksiyonu olarak pertürbasyon enerjileri.....	48
Şekil 7.8. γ nın 3 farklı değeri için 1s, 2p, 3d ve 4f seviyelerinin manyetik kuantum sayıları $m=1$ durumunda nokta yarıçapının fonksiyonu olarak pertürbasyon enerjileri.....	49
Şekil 7.9. a.b.c. γ nın üç farklı değeri için nokta yarıçapının fonksiyonu olarak pertürbe olmuş ve olmamış 1s ve 2p enerji seviyeleri.....	51
Şekil 7.10. a.b. Manyetik alanın fonksiyonu olarak $R=3$ ve $R=6$ için pertürbe olmuş ΔE ve pertürbe olmamış ΔE^0 2p ve 1s enerji seviyeleri arasındaki Zeeman geçiş enerjileri.....	53
Şekil 7.11. $R=2$ nokta yarıçapında γ nın üç farklı değeri için 2p Zeeman enerji seviyesinde diamagnetik terimin etkisini gösteren diyagram.....	54
Şekil 7.12. $R=4$ nokta yarıçapında γ nın üç farklı değeri için 2p Zeeman enerji seviyesinde diamagnetik terimin etkisini gösteren diyagram.....	55
Şekil 7.13. $R=10$ nokta yarıçapında γ nın üç farklı değeri için 2p Zeeman enerji seviyesinde diamagnetik terimin etkisini gösteren diyagram.....	56

Şekil 7.14. a.b.c.d. γ nın üç farklı değeri için sonsuz sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum noktanın 1s,2p,3d ve 4f seviyelerinin bağlanma enerjileri.....	58
Şekil 7.15. a.b.c.d. γ nın üç farklı değeri için sonlu sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum noktanın 1s,2p,3d ve 4f seviyelerinin bağlanma enerjileri.....	59
Şekil 7.16. a.b.c.d. x 'in üç farklı değeri için sonlu sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum noktanın 1s,2p, 3d ve 4f seviyelerinin bağlanma enerjileri.....	60



ÇİZELGELER DİZİNİ

Sayfa

Çizelge 7.1. Sonsuz küresel sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının taban ve çeşitli uyarılmış durumlarına ait enerji değerleri. Tüm enerji değerleri atomik birimde (Hartree) verilmiştir.....	34
Çizelge 7.2. Sonlu ($x=0.1$) küresel sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının taban ve çeşitli uyarılmış durumlarına ait enerji değerleri. Tüm enerji değerleri atomik biriminde (Hartree) verilmiştir.....	35
Çizelge 7.3. Sonlu ($x=0.2$) küresel sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının taban ve çeşitli uyarılmış durumlarına ait enerji değerleri. Tüm enerji değerleri atomik biriminde (Hartree) verilmiştir.....	36
Çizelge 7.4. Sonlu ($x=0.3$) küresel sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının taban ve çeşitli uyarılmış durumlarına ait enerji değerleri. Tüm enerji değerleri atomik biriminde (Hartree) verilmiştir.....	37
Çizelge 7.5. Sonlu ($x=0.4$) küresel sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının taban ve çeşitli uyarılmış durumlarına ait enerji değerleri. Tüm enerji değerleri atomik biriminde (Hartree) verilmiştir.....	38

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

B	Manyetik Alan Şiddeti
c	Açılım katsayısı
E_{ntm}	Hamiltoniyen operatörünün öz değer enerjisi
H	Sistemin Hamiltoniyeni
HFR	Hartree-Fock-Roothaan
KGA	Kuantum Genetik Algoritma
ℓ	Yörünge kuantum sayısı
L_z	Açısal momentum
m	Manyetik kuantum sayısı
m_0	Serbest elektron kütlesi
m^*	Etkin kütle
n	baş kuantum sayısı
R	Kuantum noktanın yarıçapı
STO	Slater Tipi Orbitaller
V_0	Sınırlandırıcı potansiyel yüksekliği (bariyer yüksekliği)
V_c	Sınırlandırıcı potansiyel
x	Alüminyum katkılanma oranı
QDs	Kuantum Nokta Yapılar
QWs	Kuantum Kuyular
QWWs	Kuantum Teller
$\psi_{n\ell m}$	Hamiltoniyen operatörünün öz fonksiyonu
ϵ_r	ortamın dielektrik sabiti
χ	Slater atom orbitalleri
ζ	Perdeleme sabiti

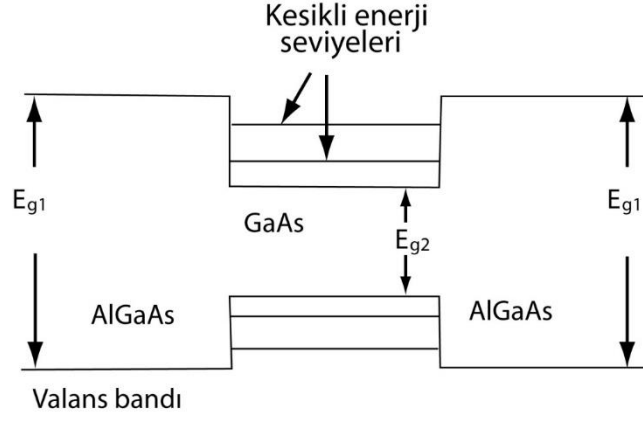
1.GİRİŞ

Yeryüzünde bulunan bütün maddeler atomlardan oluşmuştur. Atom ise merkezde bir çekirdek ve bunun etrafındaki farklı yörüngelerde hareket eden elektronlardan oluşmaktadır. Atom ve moleküllerin biraraya gelmesiyle de maddeler oluşmaktadır. Maddeler elektrik akımını iletmelerine göre iletken, yalıtkan ve yarı iletken olmak üzere üçe ayrılırlar. İçerisinde elektronların serbestçe hareket edebildiği maddelere iletken maddeler, serbestçe hareket edemediği maddelere de yalıtkan maddeler denir. Maddelerin iletkenliğini belirleyen en önemli faktör atomlarının son yörüngesindeki elektron sayısıdır. Bu son yörüngeye "Valans Yörünge" ve buradaki elektronlara da "Valans Elektron" denir. Valans elektronlar atom çekirdeğine zayıf olarak bağlıdır. Bu yüzden kolaylıkla uyarılabilir ya da koparılabilirler. Yarı iletken malzemeler doğada saf olarak bulunmaz, ancak teknolojik olarak üretilebilirler. Periyodik cetvelde 3. 4. ve 5. grupta bulunan elementler birbirleriyle katılanmak suretiyle yarı iletken malzemeler üretilebilir. Yarı iletkenlerin özdirençleri oda sıcaklığında $10^{-2} \Omega \text{ cm}$ ile $10^9 \Omega \text{ cm}$ aralığındadır. Bu aralık $10^{-6} \Omega \text{ cm}$ den küçük özdirence sahip olan iletkenler ile özdirençleri 10^{14} - $10^{20} \Omega \text{ cm}$ aralığında olan yalıtkanlar arasındaki bölgeye düşer. Bir yarı iletkenin elektriksel iletkenliği sıcaklığına bağlıdır. Sıcaklık yükseldikçe yarı iletkenin özdirencinin küçülmesi onun en belirgin özelliğidir. 1873 yılında selenyumun fotoiletkenliğinin keşfi ile yarı iletken bilimi başlamış oldu (Smith, 1873). Daha sonra 1940 lı yılların sonunda farklı fiziksel ve kimyasal özelliklere sahip yeni bir aygıt olan transistörün ortaya çıkması ile yarı iletken biliminde yeni bir dönem başladı (Bardenn ve Brattain, 1948; Shockleey, 1949). Hall vd., (1962) tarafından yarı iletken lazerin icat edilmesi ve birbirinden farklı en az iki yarı iletken kullanılarak oluşturulan heteroeklemlerin ortaya çıkışı (Anderson, 1962) 1960'lı yıllarda kuantum mekaniğinin katıhal elektroniği üzerindeki etkisini arttırmıştır.

Günümüzde yarı iletken teknolojisinde görülen olağanüstü gelişmeler sayesinde düşük boyutlu yapıların (low-dimesional structures) teknolojik olarak üretimi mümkün hale gelmiştir. Düşük boyutlu yapılar aynı zamanda nanoyapılar olarak ta adlandırılır ve böyle yapıların üretilebildiği teknolojiye de nanoteknoloji adı verilir. Nanoteknoloji aşırı küçük yapıların üretilebilmesi, onların çeşitli fiziksel ve kimyasal özelliklerinin araştırılması ve bunlardan yararlanılması üzerinde çalışır. Nanoteknoloji maddeyi dolaylı olarak atom boyutuna yani nanoboyuta indirgeme işi

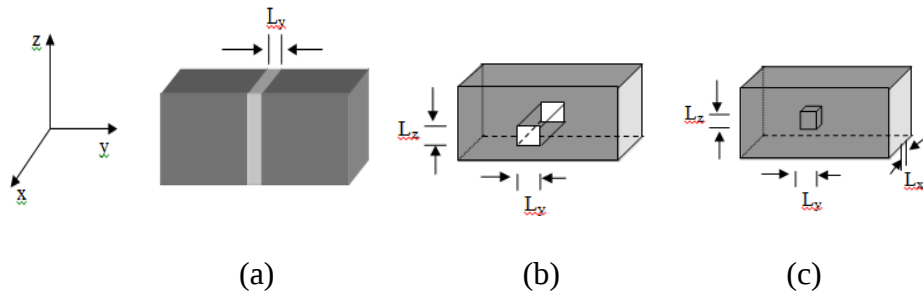
olarak da ifade edilebilir. Drexler (1990)'in ifadesiyle nanoteknoloji “Yapı üzerinde atom atom oynama yaparak maddenin yapısının moleküler seviyede kontrol edilmesi” anlamına gelmektedir. Bir başka ifadeyle nanoteknoloji büyüklüğü metrenin 100 milyon ile 1 milyar da biri arasında değişen malzemelerin üretimi, montajı ve kullanımı ile ilgilenen teknoloji olarak ta adlandırılabilir. Nanobilim ise nanometre ($1\text{nm}=10^{-9}\text{m}$) boyutlarında olan sistemlerle ilgilenen bir bilimdir. Bir nanometre bir milimetrenin milyonda biri veya bir metrenin milyarda biri ya da insan saç telinin on binde biri kadar bir kalınlığa tekabül eder ve bu uzunluk atom ve moleküllerin içindeki en küçük mesafeleri tanımlamak için kullanılır. Böylece nanoteknoloji atomları tek tek kullanmak suretiyle makro dünyada olmayan niteliklere sahip çok küçük cihazların üretilmesi ve kullanılmasını amaçlayan bir alandır. Maddelerin nanoboyutta (veya atomik boyutta) incelenmesinin nedeni maddeler bu boyutlarda farklı davranış sergilemektedir. Yani, olağan halde sert olmayan maddelerin nano boyutta elmasan bile daha sert olması, ya da normal halde elektrik ve ışığı ileten maddeler nano boyutta tam tersi özellikler göstermesi mümkündür. Bununla birlikte malzemeler nano boyutta üretildiği zaman normal halde göremediğimiz üstün özellikleri ortaya çıkar. Nanoteknolojik olarak üretilen malzemeler daha dayanıklı, daha hafif ve teknolojik olarak katma değeri daha fazladır.

Doğada bulunan yapılar makroskopik (hareketlerin istatistiksel olarak tanımlanabildiği), mikroskopik (hareketlerin atomik boyutlarda tanımlanabildiği) ve mesoskopik olmak üzere üçe ayrılırlar. Düşük boyutlu yapılar aynı zamanda Mezoskopik yapılar olarak ta adlandırılmaktadır. Bu yapıların boyutları yaklaşık 10Å - 1000Å (1 nm - 100 nm) arasındadır. Böyle yapılarda taşıyıcıların (elektron veya deşikler) hareketlerinin engelleyici bir potansiyel ile sınırlandırılması deneysel olarak mümkün olabilmektedir. Bunun için yasak enerji aralıkları farklı olan iki yarı iletken malzeme kullanılarak sandviç yöntemi ile ara yüzeyde bir potansiyel engeli oluşturulur. Böylece oluşturulan bu potansiyel engeli ile yarı iletken içerisindeki yük taşıyıcılarının hareketleri sınırlandırılmış olur. Bu durum aşağıdaki Şekil 1.1’de gösterilmektedir.



Şekil 1.1. Hetero yapılar da kuantum kuyusunun oluşumu.

Burada yasak enerji aralığı E_{g1} olan yarı iletken malzeme içerisine, yasak enerji aralığı E_{g2} olan başka bir yarı iletken malzeme atom katmanları olarak büyütülür. Böylece yasak enerji aralıklarının farkından dolayı ara yüzeyde bir potansiyel engeli oluşturulur. Bu engel yük taşıyıcılarının hareketlerinin bu bölgede sınırlandırılmasına neden olur. Düşük boyutlu yapılar içerisindeki yük taşıyıcılarının hareketlerinin tek boyutta sınırlandırılmasıyla kuantum kuyular (quantum wells, QWs) ve iki boyutta sınırlandırılmasıyla kuantum teller (quantum well wires, QWWs) oluşturulurken, yük taşıyıcılarının üç boyutta sınırlandırılmasıyla da quantum nokta yapılar (quantum dots, QDs) oluşturulur. Kuantum nokta yapılar aynı zamanda sıfır boyutlu yapılar olarakta adlandırılmaktadır. Bu durumlar Şekil 1.2’de gösterilmektedir.



Şekil 1.2. a) Kuantum kuyusu; b) Kuantum teli, c) Kuantum nokta yapısı

Nano teknoloji deki son gelişmeler ve üretim tekniklerindeki ilerlemeler kuantum nokta yapılar olarak bilinen sıfır boyutlu yapıların (quantum dots) üretilmesine olanak sağlamaktadır. Kuantum nokta yapılar tek elektron transistörleri, ışık yayan

diyetler, kuantum nokta lazerler, optiksel hafızalar, yüksek-hızlı elektro optik modölatörler, kuantum bilgisayarlar, kuantum infrared fotodedektörleri gibi optoelektronik ve mikroelettronik cihazların teknolojik olarak üretilmesinde çeşitli uygulama alanlarına sahiptir. Kuantum nokta yapılar kesikli enerji seviyeleri ve kabuklu yapılara sahip olması gibi atomik özellikler gösterdiği için yapay atom olarak da adlandırılmaktadır. Dolayısıyla bu yapılar ile ilgili yapılan çalışmalar yoğun madde fiziği, atom fiziği ve kuantum kimyası ile yakından ilgilidir.

Kuantum nokta yapıların elektronik yapısı ve fiziksel özelliklerini inceleyen çok sayıda teorik ve deneysel çalışmalar yapılmıştır. Varshni (1996) ve Bose ve Sarkar (1998) sonlu kuantum nokta yapılarda varyasyonel ve pertürbasyon metodunu kullanarak nokta yapının bağlanma enerjilerini hesapladılar. Marin ve Cruz (1991) sonsuz küresel kuyu içerisindeki hapsedilmiş hidrojen atomu ve harmonik osilatörün enerji seviyelerini, Montenegro ve Perez (1992) küresel kuantum noktadaki hidrojenik safsızlığın taban durum enerjisi ve bağlanma enerjisini varyasyonel metod kullanarak hesapladılar. Grigoreko ve Garcia (2002), Şahin vd., (2005) hidrojenik safsızlığın taban ve bazı uyarılmış enerji seviyelerini ve bağlanma enerjilerini KGA yöntemi kullanarak hesapladılar. Yang vd., (1998) tam çözüm yöntemi ile kuantum nokta yapının merkezine yerleştirilmiş hidrojenik safsızlığın enerji seviyelerini ve ince yapı yarılmalarının hesabını yaptılar. Çakır vd., (2007, 2008) KGA ve HFR yöntemini kullanarak bir ve iki elektronlu hidrojenik safsızlığın enerji seviyelerini ve bağlanma enerjilerini hesapladılar. Aynı zamanda Özmen vd., (2009) , Çakır vd., (2015) ile Yakar vd., (2010, 2012 , 2015) yine aynı yöntemi kullanarak bir ve iki elektronlu küresel kuantum nokta yapıların lineer ve nonlineer absorpsiyon katsayılarını, kırılma indislerini ve bağlanma enerjileri ile ilgili optiksel özellikleri hesapladılar. Bunların yanında Yakar vd., (2013) ile Çakır vd., (2016) yine hidrojenik safsızlık için kinetik enerji düzeltme terimi, LS etkileşim terimi ve Darwin terimi gibi rölativistik terimlerini nokta yarıçapının fonksiyonu olarak hesapladılar.

Dış pertürbasyonlar olarak bilinen elektrik ve manyetik alanın uygulanması sınırlandırılmış sistemler hakkında çok değerli eşsiz bilgiler ortaya çıkarabilir. Manyetik ve elektrik alan gibi dış pertürbasyon etkileri kuantum noktaların elektronik ve optiksel özelliklerinin daha iyi anlaşılmasında artan bir ilgiye sahiptir. Safsızlık (impurity) seviyelerinin simetrisi, dalga fonksiyonlarının yapısı ve safsızlık seviyelerinin diğer özellikleri kuantum nokta yapılara dış manyetik alan uygulayarak

değiştirilebilir. Böylece son zamanlarda manyetik alan varlığında kuantum nokta yapıların elektronik yapısı, enerji seviyeleri, bağlanma enerjileri ve optiksel özellikleri ile ilgili çalışmalar artan bir ilgiye sahiptir. Xiao vd., (1996) varyasyonel metodu kullanarak manyetik alan içerisindeki küresel kuantum nokta yapıların bağlanma enerjilerini hesapladılar. Peter vd., (2005) ile Wu ve Won (2012) güçlü bir dış manyetik alan içerisinde parabolik ve küresel kuantum noktaların elektronik yapısını ve bağlanma enerjilerini incelediler. Zhang vd., (2010) ile Seddik vd., (2005) dış manyetik alanın parabolik kuantum noktaların optiksel özellikler üzerine olan etkilerini detaylı olarak çalıştılar. Yine dış manyetik alanın varlığında varyasyonel yaklaşımı kullanarak Yeşilgül vd., (2011) ile Ghazi vd., (2013) kuantum tel ve küresel kuantum nokta yapıların safsızlık konumunu ve bağlanma enerjisini incelediler. Niculescu ve Bejan (2015) piramit kuantum nokta yapısı için elektronik seviyeler ve lineer olmayan absorpsiyon katsayıları üzerinde manyetik alanın etkilerini ve safsızlığın konumunu çalıştı. Gürültünün varlığında ve yokluğunda kuantum nokta yapının optiksel absorpsiyon katsayılarının detaylı bir çalışması Mandal vd., (2015) tarafından yapıldı. Çok yakın bir zamanda Çakır vd., (2016, 2017) ve Yakar vd., (2017) sonlu ve sonsuz sınırlandırıcı potansiyele sahip küresel kuantum nokta yapıların enerji seviyeleri, bağlanma enerjileri ve absorpsiyon katsayıları üzerinde manyetik alan etkilerini detaylı bir şekilde incelediler.

Yukarıda ifade edilen çalışmaların çoğunda taban durum ($L=0$) ve ilk uyarılmış seviye $2p$ ($L=1$) ler üzerinde manyetik ve elektrik alan etkileri incelenmiştir. Bizim yaptığımız bu çalışmada ise taban durum ($1s$) ve çeşitli uyarılmış elektronik enerji seviyeler ($2p$, $3d$ ve $4f$) üzerinde paramanyetik ve diyamanyetik alan etkileri incelenmiştir. Burada diyamanyetik terim pertürbasyon terimi olarak gözönüne alınmıştır. Taban ve uyarılmış enerji seviyelerinin grafikleri nokta yarıçapının fonksiyonu olarak elde edilmiş ve bu seviyeler arasındaki Zeeman enerji geçişleri nokta yarıçapının ve manyetik alanın fonksiyonu olarak ifade edilmiştir. Ayrıca diyamanyetik pertürbasyon teriminin Zeeman geçişlerine olan etkisi de incelenmiştir.

2. DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR

2. 1. Düşük Boyutlu Yapı Çeşitleri

2.1.1.Kuantum kuyuları

Düşük boyutlu yapılar içerisindeki yük taşıyıcılarının hareketi bir boyutta sınırlandırıldığı zaman parçacıklar iki boyutta serbest olarak hareket edebilir. Böyle yapılara kuantum kuyular adı verilir. Kuantum kuyular yasak enerji aralığı büyük olan bir malzeme içerisinde yasak enerji aralığı küçük olan bir malzemenin tabaka halinde yerleştirilmesi ile elde edilir. Şekil 1.2a'da görüleceği gibi elektronların hareketi y-doğrultusunda sınırlandırıldığı zaman elektronlar diğer iki boyutta serbestçe hareket ederler. Elektronların iki boyutta serbestçe hareket edebildiği yapılara iki boyutlu elektron gazı da denir. Kuantum kuyularında sınırlandırma sadece y doğrultusunda olduğu için kuantum etkisi sadece bu doğrultuda görülür. Elektronun x ve z doğrultusunda herhangi bir sınırlandırma olmadığı için dalga fonksiyonu;

$$\psi(x,y,z) = \exp(ik_x x + ik_z z)\phi(y) \quad (2.1)$$

ile verilir. Burada k_x ve k_z x ve z doğrultusundaki dalga vektörünün bileşenleridir. ϕ_y fonksiyonu ise sınırlandırmanın olduğu doğrultuya karşılık gelen fonksiyonu tanımlar. Kuantum etkisinin görüldüğü y doğrultusu için Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\frac{d^2\phi(y)}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E_y - V(y))\phi(y) = 0 \quad (2.2)$$

Burada E_y ve $V(y)$ parçacığın y-doğrultusundaki enerjisini ve sınırlandırıcı potansiyelini göstermektedir. Burada sınırlandırıcı potansiyel sonsuz yükseklikte alınırsa kuyu içerisinde $V(y)=0$ olur. Yani kuyu içerisinde serbest parçacık durumunu gösterir. Dalga fonksiyonunun y-doğrultusundaki bileşeni kuyu sınırlarında sınır şartları uygulandığında aşağıdaki denklem elde edilir.

$$k_{n_y} = \frac{n_y\pi}{L_y} \quad (2.3)$$

Burada L_y kuyu genişliğidir. Görüldüğü gibi dalga fonksiyonunun bileşeni kesikli değerler aldığı için kuyu içerisindeki parçacığın enerji özdeğeri

$$E_{n_y} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n_y \pi}{L_y} \right)^2 \quad (2.4)$$

şeklinde olur. Bu durumda parçacığın toplam enerjisi

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left[k_x^2 + k_z^2 + \left(\frac{n_y \pi}{L_y} \right)^2 \right] \quad (2.5)$$

ile verilir.

2.1.2 Kuantum teller

Yük taşıyıcıların iki boyutta sınırlandırıldığı ve dolayısıyla tek boyutta serbestçe hareketin olabildiği sistemlere kuantum teller denir. Böyle sistemlerde kuantumlanma etkisi elektron hareketinin sınırlandırıldığı iki boyutta görülür. Bu durum Şekil 1.2b’de gösterilmektedir. Böyle bir sistem içerisindeki elektron tek serbestlik derecesi ile tanımlanır ve elektrona eşlik eden dalga fonksiyonu

$$\psi(x, y, z) = \exp(ik_x x) \phi(y, z) \quad (2.6)$$

biçiminde yazılır.

Burada $\phi(y, z)$ sınırlandırmanın olduğu doğrultulara karşılık gelen dalga fonksiyonunu gösterir. İki boyutlu sınırlandırmanın olduğu sistemlerde Schrödinger dalga denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) \phi(y, z) + V(y, z) \phi(y, z) = E_{y,z} \phi(y, z) \quad (2.7)$$

biçiminde yazılabilir.

Burada y ve z doğrultusundaki sınırlandırıcı potansiyeller sonsuz yükseklikte alınırsa $V(y, z) = 0$ olur. Bu durumda dalga fonksiyonuna sınır şartları uygulandığında

$$k_{n_y} = \frac{n_y \pi}{L_y} \text{ ve } k_{n_z} = \frac{n_z \pi}{L_z} \quad (2.8)$$

elde edilir ve enerji özdeğerleri

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \left[k_x^2 + \left(\frac{n_y \pi}{L_y} \right)^2 + \left(\frac{n_z \pi}{L_z} \right)^2 \right] \quad (2.9)$$

şeklinde verilir.

2.1.3 Kuantum nokta yapılar

Düşük boyutlu yapılarda yük taşıyıcıların hareketlerinin üç boyutlu sınırlandırıldığı yapılara kuantum nokta yapılar (quantum dots) denir. Bu durum Şekil 1.2c'de gösterilmiştir. Elektronların hareketi üç boyutta sınırlandırıldığı için kuantumlanma etkisi de üç boyutta da görülür. Böyle yapılardaki parçacıklar için Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}\right)\phi(x,y,z) + V(x,y,z)\phi(x,y,z) = E_{x,y,z}\phi(x,y,z) \quad (2.10)$$

biçiminde yazılır.

Buradaki sınırlandırıcı potansiyel sonsuz kuyu şeklinde alınırsa kuyu içerisinde potansiyelin değeri sıfır olur. Yani $V(x,y,z) = 0$ dır. Sınır şartları kullanılarak dalga vektörü bileşenleri de

$$k_{n_x} = \frac{n_x\pi}{L_x}, \quad k_{n_y} = \frac{n_y\pi}{L_y} \quad \text{ve} \quad k_{n_z} = \frac{n_z\pi}{L_z} \quad (2.11)$$

yazılır ve enerji özdeğerleri

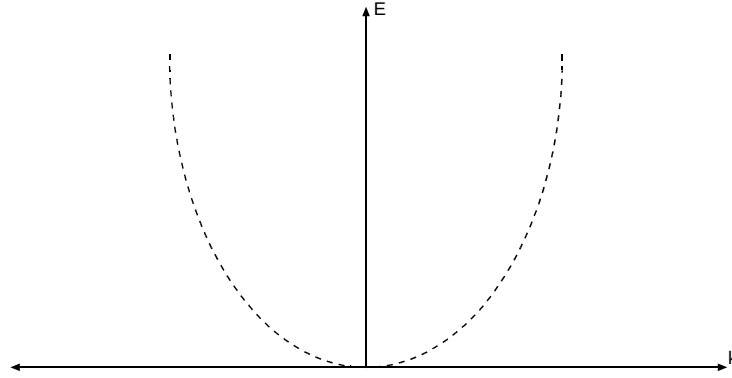
$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\left(\frac{n_x\pi}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y\pi}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z\pi}{L_z}\right)^2\right) \quad (2.12)$$

elde edilebilir.

2.2. Serbest Elektron Modeli

Katıyı oluşturmak için izole atomları bir araya getirme düşüncesinden ziyade, atomların kristalin örgü noktalarına yerleşmiş olduğu durumdan başlayarak da katıların bant yapısı elde edilebilir. Katıyı oluşturan her bir atom, konumu sabit olan ve valans elektronun katı içinde serbest olduğu pozitif yüklü iyon olarak düşünülebilir. Pozitif yüklü bu iyonlar kristal içinde periyodik olarak yerleşmiş olduklarından kristal boyunca yük yoğunluğu düzgün olarak dağılmış olacaktır. Pozitif yüklü iyonlar ile elektronlar arasındaki potansiyel enerjinin sıfır olduğu yani elektronun yalnızca kinetik enerjiye sahip olduğu ve elektronların içinde bulundukları kristalin sınırlarının V yüksekliğinde bariyerler olduğu düşünüldüğünde elektron enerjisinin bulunması problemi, kuantum kuyusu içindeki elektronun enerjisini bulmak için Schrödinger denkleminin çözülmesine indirgenmiş olur. Bu

yöntem Serbest Elektron Modeli olarak adlandırılır. Serbest elektron modeli metallerin bazı özelliklerini açıklayan basit bir modeldir. Ancak katı cisimlerin metal, yarıiletken ve yalıtkan olarak sınıflandırılması bu model ile yapılamaz.



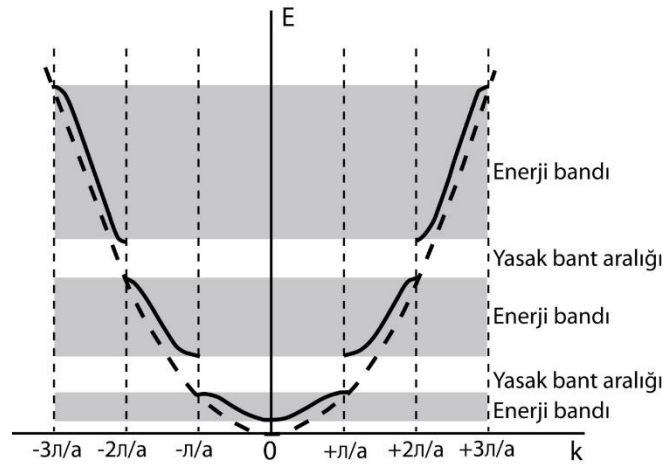
Şekil 2.1. Serbest elektronun dispersiyon eğrisi.

2.3. Kısmen Serbest Elektron Modeli

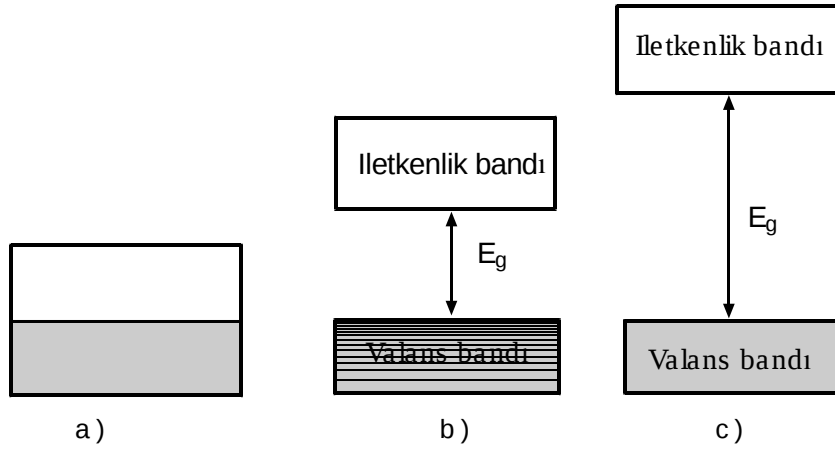
Katıların elektriksel iletkenliğinin katıdan katıya nasıl ve neden değiştiğini açıklamak için elektronların pozitif iyonlarla etkileşmelerinin göz önüne alındığı kısmen serbest elektron modeli kullanılabilir. Kısmen serbest elektron modelinde kristal makroskobik boyutlardaki kuantum kuyusuyla temsil edilmektedir. Atomlar arasındaki Coulomb potansiyeli, katı içindeki iyonların birbirini iten alanlarından dolayı bağımsız atomlarda gözlenen potansiyelin indirgenmiş halidir. İyonlar arasında Coulomb potansiyelinin bu indirgenmiş hali komşu atomik yörüngelerin etkileşmesi sonucunda enerji seviyelerinde genişlemeye ve elektron yük dağılımının uzaysal olarak yayılmasına neden olur. Metallerde elektronlar atomlarından ayrıdır ve serbest olarak metal içinde hareket edebilirler. Ancak yarıiletkenlerde sıcaklığa bağlı olarak serbest elektron sayısı değişmekte ve bu nedenle yarı iletkenin iletkenliğide sıcaklığa bağlı olarak değişmektedir. Kısmen serbest elektron modelinde elektron katı cisim içinde pozitif iyonların oluşturduğu a periyoduyla değişen periyodik bir potansiyelin etkisi altındadır.

Şekil 2.2’de kısmen serbest elektron modeli ve serbest elektron modelinin öngördüğü dispersiyon eğrileri birlikte gösterilmiştir. Kısmen serbest elektron modeli belli k değerlerinde elektron enerjisinin serbest elektron modelinden farklılaşacağını gösterir. Ancak bu k değerleri civarında dispersiyon eğrisinin nasıl değiştiği bilgisini

vermez. Bu deęişimin nasıl olduęunu öngörebilmek için Bragg yasasından yararlanılır. Bragg yasasına göre $k = n\pi/a$ deęerlerinde duran dalgalar oluşur yani elektronun grup hızı sıfırdır. Grup hızı dispersiyon eęrisinin birinci türeviyle ($v_g = \frac{d\omega}{dk}$) belirlendięi için bu k deęerlerinde dispersiyon eęrisinin maksimuma ya da minimuma gidecek şekilde serbest elektron modelinin dispersiyon eęrisinden farklılık göstereceęi öngörülebilir. Görüldüęü gibi periyodik örgü potansiyeli, dispersiyon eęrisinde hiçbir elektron durumunun olmadıęı enerji aralıklarının oluşmasına neden olmaktadır. Bu bölgeler yasak enerji aralıkları yada bant aralıkları olarak tanımlanır. Elektronların izinli olduęu bölgeler enerji bantları olarak adlandırılır. Katılar yasak bant aralıęının büyüklüęüne göre elektriksel olarak metal, yarımetal ve yalıtkan olarak sınıflandırılabilir. Katının ilkel hücresindeki valans elektron sayısı tek olduęunda, en yüksek enerjili bant kısmen doluyken, valans elektron sayısı çift olduęunda bant tamamen doludur. Dolayısıyla valans elektronu tek sayıda olan katılar metal, çift sayıda olanlar ise yasak bant aralıęı küçükse yarıiletken, büyükse yalıtkan olarak adlandırılır. Metal, yarıiletken ve yalıtkana ait bant profilleri Şekil 2.3’de gösterilmektedir. Bu gösterimde yaklaşık mutlak sıfır sıcaklıęında elektronlarla dolu en üsteki bant valans bandı, yasak bant aralıęıyla valans bandından ayrılmıř olan bant ise iletkenli bandı olarak adlandırılır.



Şekil 2.2. Kısımlen serbest elektron modeli (düz çizgiler) ve serbest elektron modeli (kesikli çizgiler) dispersiyon eęrilerinin birlikte gösterimi.



Şekil 2.3. a) İletken, b) Yarıiletken, c) Yalıtkana ait bant profilleri. Burada E_g yasak bant aralığını ve gölgeli bölgeler de elektronlarla dolu enerji seviyelerini temsil etmektedir.

2.4. Düşük Boyutlu Yapıların Elde Edilme Yöntemleri

2.4.1. Asitle eritme yöntemi

Bu yöntem kuantum nokta yapıların üretiminde kullanılan ilk yöntemdir (Reed vd., 1986). Bu yöntemin ilk aşamasında bir ya da birden fazla kuantum kuyusuna sahip bir yapının yüzeyi polimer maskeyle kaplanır. Sonra polimer maske elektron veya iyon demetine maruz bırakılarak oluşturulacak nano yapının sınırları ve şekli belirlenir. Polimer tabaka yüksek çözünürlüğe sahip olduğundan yapının şekli ve sınırları belirlenirken görünür bölgedeki elektromanyetik dalga kullanılmaz. Daha sonraki aşamada numunenin yüzeyi ince bir metal tabakayla kaplanır. Sonra seçilen yüzey dışındaki tüm yüzey aktive edilmiş iyon demetine maruz bırakılarak metal ve altındaki polimer tabaka temizlenir ve basit yapı elde edilir. Sınırlandırıcı bölge yüzeyi üzerindeki metal tabaka elektrot olarak kullanılabilir. Bundan sonra metal maskeyle korunmamış bölgeler kimyasal olarak aktif iyonlarla aşındırılır ve kuantum kuyu parçaları içeren ince yapılar oluşmuş olur. Son olarak bu yapılar kesilerek yüzeyden ayrılır (Jacak vd., 1998; Jacak, 2000; Reed, 1993). Böylece bu yöntemle boyutları 10-100 nm mertebesinde sınırlandırılmış kuantum yapılar elde edilir (Demel vd., 1990; Smith vd., 1988).

2.4.2. Modüle edilmiş elektrik alan yöntemi

Bu yöntem, kuantum kuyusu yüzeyi üzerine çok küçük elektrotlar yerleştirilmesi esasına dayanan litografik bir yöntemdir. Elektrotlara belli büyüklükteki potansiyel farkı uygulanması ile elektronların hareketini sınırlandıran çok küçük bir elektrik

alanı oluşur. Bu elektrik alan uygulanan gerilim ile ayarlanabilir. Bu yöntemle elde edilen kuantum kuyuların kenarlarında eritme yönteminde oluşan malzemeye bağlı olan kenar kusurları oluşmaz. Aynı zamanda bu yöntemle eritme yönteminde olduğu gibi yan yana düzgün dizilmiş birden fazla kuantum noktası oluşturulabilir (Jacak, 1998).

2.4.3. Kendiliğinden büyütme yöntemi

Bu yöntem kuantum kuyuların kendiliğinden kristalleştirilmesi yöntemidir (Petroff ve Denbaars, 1994). Bu yöntemde alt tabaka ve kristalleşen malzemenin örgü sabitleri önemli ölçüde farklılık gösteriyorsa sadece ilk çökeltilecek tek tabakalar, örgü sabiti alt tabakaninkine eşit katmanlar olarak epitaksiyel formda kristalleşir. Kritik kalınlık aşıldığında tabaka içerisinde meydana gelen önemli ölçüdeki gerilme, düzenli yapının bozulmasına ve aynı boyutlarda düzenli biçimlere sahip rasgele dağılmış küçük odacıkların kendiliğinden oluşmasına neden olur. Bu odacıkların şekli ve büyüklüğü örgü sabitleri arasındaki uyumsuzluğa bağlı olarak tabaka içinde oluşan gerilme şiddetine, büyütmenin olduğu sıcaklığa ve büyütme hızına bağlıdır. Bu yolla elde edilen kuantum nokta yapıların boyutları küçük ve homojen büyüklükte, kenar kusurları olmayan ve oldukça elverişli büyüme süreçlerine sahip olduğu için opto elektronik ve mikro elektronik uygulamalarda ümit vaat etmektedir.

2.4.4. Seçici büyütme yöntemi

Bu yöntemde yasak enerji aralığı çok dar olan GaAs gibi yarı iletken bir malzeme yüzeyinin üzeri daha geniş yasak enerji aralığına sahip AlGaAs gibi bir malzemeyle kaplanır. Sonra bu tabakanın üzerinde koruyucu bir tabaka (SiO_2) ile kaplanır. Yüzey üzerinde büyütmenin yapılacağı alan belirlenir ve bu alan üzerinde eritme yapmak suretiyle minyatür üçgenler oluşturulur. Bu minyatür üçgen yüzeylere Metal-Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD) tekniği uygulanarak sıcaklıkları $700\text{ }^\circ\text{C}$ - $800\text{ }^\circ\text{C}$ ye kadar çıkarılır. Sıcaklık etkisiyle hacimleri büyüyen üçgen yüzeyler tetrahedral piramit haline dönüşür ve büyütme tamamlanmış olur. Bu yöntemle elde edilen kuantum nokta yapının boyutları 100 nm den daha küçüktür (Grundmann vd., 1995; Raymond vd., 1996).

2.4.5. Kuantum kuyusu ve engel arası iç difüzyon yöntemi

Bu yöntem kuantum kuyusunun belirlenen bir bölgesinin lazer demeti ile ısıtılmasına dayanan bir tekniktir. Kalınlığı yaklaşık olarak 3 nm olan GaAs kuantum kuyusu, yaklaşık olarak 20 nm kalınlığına sahip iki adet $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ yapılarının arasına yerleştirilmesiyle bir kuantum kuyusu oluşturulabilir. Sonra 10 nm kalınlığında GaAs tabakası, AlGaAs tabakası üzerine yerleştirilir. Lazer demetinin neden olacağı erime veya oksitlenmeleri engellemek amacı için en üst yüzey yaklaşık 100 nm kalınlıklı SiN_4 tabakası ile kaplanır (Jacak, 1998).

2.4.6. Yarı iletken mikro kristaller

Bu yöntemde herhangi bir dielektrik malzeme içerisine (örneğin cam) yarı iletken mikro kristaller yerleştirilmesi ile kuantum nokta yapıları elde edilir. Bunun için belli oranlarda CuCl, CdSe veya CdS gibi bileşikler silikat cam bileşiklerinin belirli oranlarıyla birkaç yüz santigrat derecede ısıya tabi tutulur. Sıcaklığa ve ısıtma süresine bağlı olarak istenilen büyüklükte ve boyutta kuantum noktaları elde edilebilir. Kristal yarıçapı a , ısıtma süresi t ve sıcaklık T olmak üzere

$$a^{-3} = te^{-\frac{\epsilon}{kT}} \quad (2.13)$$

bağıntısıyla üretilen kuantum nokta yapının genişliği kontrol edilebilir. Bu yöntem ile 1,2 nm ile 18 nm genişliğinde kuantum nokta yapılar üretilebilir (Ekimov vd., 1985; Jacak, 1998).

2.5. Kuantum Genetik Algoritma

Ortama iyi uyum sağlayabilen bireylerin hayatta kalması, sağlayamayan bireylerin elenmesine genetik algoritma denir. Genetik algoritma ilk kez Holland (1975) tarafından kullanılmış olup daha ziyade mühendislik ve malzeme biliminde yaygın olarak kullanılmaktadır. Son yıllarda fiziğin birçok alanında da genetik algoritma yöntemi kullanılmaktadır. Örneğin kuantum mekaniksel sistemleri enerjisinin belirlenmesinde kullanılmaktadır. Genetik algoritma kuantumlu yapılarda kullanıldığında kuantum genetik algoritma (KGA) adını alır ve bu yöntem varyasyonel yöntemde olduğu gibi enerji minimizasyon ilkesine dayanır.

Kuantum mekaniksel sistemleri temsil eden Schrödinger denkleminin çözümlerini bulmak için de kuantum genetik algoritma kullanılmaya başlanmıştır. Sayısal

optimizasyon yöntemi olan KGA geleneksel olarak bilinen varyasyonel yöntemden önemli ölçüde farklılık arz eder. Varyasyonel yöntem bazı kurallara bağlı iken KGA rastgelelik tekniği üzerine dayanır. Varyasyonel yöntem çözüme tek bir noktadan veya analitik olarak ifade edilen bir sonuçtan başlarken KGA tekniği olası çözümleri oluşturan noktalar topluluğu (başlangıç popülasyonu) ile işe başlar. Varyasyonel yöntemde parametreler sıralı bir biçimde değiştirilirken KGA’da belli bir sıra yoktur. Yani parametreler aynı anda değiştirilebilir.

KGA yöntemi kopyalama (yeniden oluşum), çaprazlama ve mutasyon olmak üzere üç temel unsur üzerine kurulmuştur. Burada yeniden oluşum sürecinde bireylerin hayatta kalma olasılıkları belirlenir. Hayatta kalma olasılığı en düşük olan bireyler elenirken hayatta kalma olasılığı yüksek olan bireyler bir sonraki nesle aktarılır. Bireyler çaprazlama sürecinde biyoloji biliminde kullanılan doğal çaprazlama işlemine benzer bir sürece tabi tutulur. Çaprazlama işlemi yeniden elde edilen bireyler üzerine uygulanır ve rastgele seçilen iki birey üzerinden yürütülür. İki bireyin genetik bilgileri (kodları) rastgele bir noktadan kesilerek birinci bireyin kesilen noktasından sonra kalan bilgiler ikinci bireyin kestiğimiz noktanın önünde kalan bilgiler ile eşleştirilir. Aynı durum ikinci birey için de geçerlidir. Böylece her iki birey de birbirlerinin genetik bilgilerini taşımış olurlar. Mutasyon işlemi KGA yönteminde yerel minimumlardan kurtulmak için uygulanan bir süreçtir. Nüfus içinden rastgele seçilen bir birey üzerinden mutasyon işlemi uygulanır. Mutasyon sürecinde gerçekleştirme olasılığı yanlış çözümlere gitmemek için mümkün mertebe düşük seçilir. Olasılığın büyük seçilmesi durumunda yakınsama güçleşir ve rastgelelik çok artar.

KGA tekniği uygulanırken iki farklı yöntemden bahsedilebilir. Bunlardan birincisi parametre eniyilemesi, ikincisi ise dalga fonksiyonu eniyilemesidir (Çakır, 2007). ψ ($c_1, c_2, \dots, c_n, \zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_n$) kuantum mekanik sistemi temsil eden schrödinger denkleminin olası çözümü olsun. Eğer varyasyon yönteminde olduğu gibi parametre eniyilemesi yapıp c_i ve ζ_i değerleri belirlenecekse bu durumda başlangıç nüfusunun bireyleri c_i ve ζ_i lerin rastgele belirlenmiş değerlerinden oluşur. Bu değerler dalga fonksiyonunun analitik ifadesinde kullanılır ve elde edilen bu analitik ifade kullanılarak hesaplamalar yapılır. Eğer dalga fonksiyonu eniyilemesi yapılacaksa c_i ve ζ_i lerin rastgele belirlenen değerleri kullanılarak dalga fonksiyonunun sayısal değerlerinden oluşan başlangıç nüfusu oluşturulur ve bu dalga fonksiyonlarının her

biri bir birey alınır. Hesaplamalar bu sayısal dalga fonksiyonu üzerinden yapılır. Böylece analitik ifade de c_i ve ζ_i ler bir kez kullanılmış olur.



3. TANIMLAMALAR VE YÖNTEM

3.1. Giriş

Teknolojideki son gelişmeler sayesinde kuantum kuyular, kuantum teller ve kuantum nokta yapıların üretilmesi mümkün hale gelmiştir. Bu yapılar içerisinde özellikle kuantum nokta yapılar kesikli enerji seviyeleri ve kabuklu yapıya sahip olmasından dolayı atomlara benzer özellikler göstermektedir (Çakır, 2007, 2008). Bundan dolayı teknolojiye mikroelektronik ve optoelektronik cihazların üretilmesinde potansiyel kullanım alanlarına sahiptir (Özmen, 2009). Bu nedenle son yıllarda birçok araştırmacı tarafından teorik ve deneysel çalışma konusu olarak tercih edilmektedir.

Bu bölümde elektronun sonlu ve sonsuz küresel sınırlandırıcı potansiyel kuyusu içerisinde bulunduğu merkezinde safsızlık olan bir nokta yapı (hydrogenic impurity) göz önüne alınacaktır. Küresel nokta yapının taban ve çeşitli uyarılmış enerji seviyelerinin beklenen değeri ve bu seviyelere karşılık gelen en iyi dalga fonksiyonları Kuantum Genetik Algoritma prosedürü ve Hartree-Fock Roothaan metodu kullanılarak hesaplanacaktır. Hesaplamalarda tek elektron dalga fonksiyonları Slater tipi orbitallerin lineer bileşenlerinden oluşturulacaktır.

3.2. Slater Tipi Orbitaller

Zener (1930) Lityumdan Neona kadar olan atomlar için hidrojene benzer atomların dalga fonksiyonlarına ek parametreler katarak bu atomlar için dalga fonksiyonunu tanımladı. Slater (1930), Zener'in dalga fonksiyonlarını daha büyük atomlar için genelleştirerek atom ve iyonlar için yaklaşık analitik fonksiyonları bulmada bir yöntemi geliştirdi. Slater'ın bu yöntemine yarı deneysel genelleştirme olarak bakılabilir. Slater'ın yönteminde atomun herhangi bir elektronunun, yükü $2 - \gamma$ olan bir çekirdeğin oluşturduğu merkezci alanda hareket ettiği kabul edilir. Burada γ çekirdeğin yükünün diğer elektronlar tarafından perdelenmesidir. Hidrojene benzer atomların dalga fonksiyonlarının radyal kısmı r ye göre $n - \ell - 1$ sayıda terimi olan bir polinomdur. Polinomun en yüksek mertebeli terimi ℓ ye bağlı değildir ve r^{n-1} ile orantılıdır. Slater'a göre hidrojene benzer atomların dalga fonksiyonlarının yardımı ile atomların özellikleri incelenirken en önemli terim r nin derecesi en büyük olan terimdir. Yani r^{n-1} olan terimdir. Buna göre Slater atom orbitalinin (STO) radyal kısmı,

$$R_{n^*}(\zeta, r) = A_{n^*}(\zeta) r^{n^*-1} e^{-\zeta r} \quad (3.1)$$

şeklinde tanımlamıştır. Burada $\zeta = \frac{Z-\gamma}{n^*}$ olup perdeleme sabiti, $A_{n^*}(\zeta)$ normalizasyon katsayısı ve n^* etkin baş kuantum sayısıdır. n^* tam değerler aldığımda ($n^*=1,2,3,\dots$) normalizasyon katsayısı $A_n(\zeta) = \frac{(2\zeta)^{\frac{n+1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}}$ olur. Böylece Slater yaklaşımına göre n tam değerler aldığımdan bir elektronlu atom orbitalinin radyal kısmı

$$R_n(\zeta r) = \frac{(2\zeta)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\zeta r} \quad (3.2)$$

şeklinde ifade edilir.

n ve γ deneysel özelliklerden yararlanarak bulunur ve Slater'ın kendi adını taşıyan bazı kurallara uyar. Bu değerler Slater'ın yarı deneysel kurallarından başka öz uyumlu alan (varyasyonel) yöntemiyle de bulunabilir. Küçük atomlarda Slater kurallarından bulunan ζ larla, büyük atomlarda ise öz uyumlu alandan bulunan ζ larla yapılan hesaplamalar daha iyi sonuç vermiştir.

$Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ küresel harmonikler olup

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} P_{\ell|m|}(\cos\theta) e^{im\phi} \quad (3.3)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $P_{\ell|m|}(\cos\theta)$, normalize assosiyé Legendre polinomu olup

$$P_{\ell|m|}(x) = \frac{1}{2^{\ell}\ell!} \left[\frac{2^{\ell+1}(\ell-|m|)!}{2(\ell+|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{\ell+|m|}}{dx^{\ell+|m|}} (x^2-1)^{\ell} \quad (3.4)$$

ile verilir (Messiah, 1961). Burada ℓ yörünge açısal momentum, m ise manyetik açısal momentum kuantum sayılarıdır. Kompleks küresel harmonikler Condon-Shortly (1970) fazında $Y_{\ell-m}(\theta, \phi) = (-1)^{\ell} Y_{\ell m}^*(\theta, \phi)$ ile verilir. Kompleks küresel harmonikler

$$\int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) Y_{\ell' m'}(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (3.5)$$

ortonormallik şartını sağlar. Burada $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ dır. Böylece normalize Slater atom orbitalleri,

$$\chi_{n\ell m}(\zeta, r\theta\phi) = \frac{(2\zeta)^{\frac{n+1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\zeta r} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (3.6)$$

şeklinde verilir. Slater atom orbitallerinin radyal kısmı normalizedir ancak ortogonal değildir.

Slater atom orbitalleri çekirdeğe çok yakın ve uzak bölgelerdeki uygun davranışları nedeniyle atom ve benzeri sistemlerin (kuantum nokta yapıların) elektronik yapısının hesaplamalarında ideal temel fonksiyonlar olarak kullanılır. Ancak Slater atom orbitalleri kullanılarak yapılan hesaplamalarda karşılaşılan temel güçlük Hartree-Fock-Roothaan denklemlerinin çözümünde karşılaşılan çok merkezli integrallerin hesaplanmasında ortaya çıkmaktadır ve çok merkezli integrallerinin çözümünü zorlaştırmaktadır (Yakar, 2002).

3.3.Hartree-Fock-Roothaan Yöntemi

Zamandan bağımsız parçacık modelinde “her elektron bir etkin potansiyelde hareket eder ve çok elektronlu sistemdeki her elektron kendi dalga fonksiyonu ile tanımlanır” ifadelerinden hareketle Hartree, bireysel elektron dalga fonksiyonlarının denklemlerini yazdı ve çok elektronlu sistemin dalga fonksiyonunu tek elektron dalga fonksiyonlarının (orbitallerin) çarpımı şeklinde ifade etti.

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \prod_{i=1}^N \phi_i \quad (3.7)$$

Hartree ayrıca bu denklemlerin çözümü için bir tekrarlama (öz-uyum gerekliliğini temel alan) süreci önerdi. Böylece 1929’da D.Hartree tarafından yazılan Hartree denklemleri ile çok elektronlu sistemlerin (atom ve molekül) yapılarının incelenmesi yapıldı. Ancak bu yöntemi elektronların birer fermiyon olarak antisimetrik kuantum durumları(dalga fonksiyonları) ile temsil edilmesi gerektiğini hesaba katmamaktaydı. Yani toplam dalga fonksiyonu, elektron koordinatları bakımından antisimetrik değildi. 1930’lu yıllarda Fock ve Slater Pauli’nin dışarlama ilkesi ile getirilen bu antisimetri özelliğini dikkate alarak Hartree metodunu geliştirdi. Böylece Hartree-Fock teorisi adı verilen ve günümüzde hala geçerliliğini koruyan bu teorinin temelleri atılmış oldu. Hartree- Fock yaklaşımında bağımsız parçacık yaklaşıklığı ve Pauli dışarlanma ilkesine uygun olarak N elektronlu bir sistemin dalga fonksiyonu Ψ Slater determinant ile ifade edilir veya başka ifadeyle tek elektron spin yörüngemsilerinin antisimetrik bir çarpımı olduğu varsayılır. En iyi bireysel elektron spin yörüngemsileri Slater determinantının en iyi biçimi olan varyasyonel yöntemi

kullanılarak elde edilir. Bu yüzden Hartree-Fock yöntemi varyasyonel yöntemin özel bir halidir. Hartree-Fock teorisi uzaydaki elektron dağılımını ciddi ölçüde iyi bir şekilde verdiği için (sonuçlar X-ışını kırınım desenleri ile oldukça uyumlu) hala geçerliliğini korumaktadır. Yöntemin en büyük avantajlarından biri çok elektronlu Schrödinger denklemini çok daha basit tek elektronlu denklemlere dönüştürmesidir. Ancak bu yöntem elektronlar arası etkileşim konusunda yetersiz kalmaktaydı ve bu nedenle hesaplanan toplam enerjiler gerçek enerjiden önemli ölçüde sapmaktadır. Enerjideki bu hata değerine korelasyon enerjisi denir.

1950'li yıllarda HF yöntemi Roothaan tarafından moleküllere genişletildi ve Hartree-Fock-Roothaan (HFR) yöntemi adını aldı. HFR yönteminde molekülün dalga fonksiyonu Slater determinant biçiminde yazılır ve bu determinantın elemanları moleküler orbitallerdir (tek elektron dalga fonksiyonları). Moleküler orbitaller ise atom orbitallerinin lineer toplamı şeklinde yazılır.

3.4. Etkin Kütle Yaklaşımı

Serbest bir parçacığın enerji ile dalga vektörü arasındaki ilişkiyi göz önüne alacak olursak momentumu $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ olan serbest bir elektronun kinetik enerjisi

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (3.8)$$

ile verilir. Kristal yapı içerisinde bir elektron periyodik bir potansiyel altında hareket ettiği için artık kristal içindeki elektronun momentumu serbest haldeki elektronun momentumundan farklı olur. Kristal yapıda örgü noktalarının periyodik potansiyeli altında hareket eden bir elektrona dışarıdan bir F_d kuvveti uygulanırsa elektron dinamiğin ikinci yasasına göre

$$F_d + F_i = m \frac{dv}{dt} = m a \quad (3.9)$$

kuvveti altında ivmelenecektir. Buradaki F_i kristal yapının elektrona uyguladığı iç kuvvettir. Bu iç kuvveti de kapsayacak şekilde yeni bir dış kuvvet tanımlaması yapılırsa

$$F_D = m^* a = m^* \frac{dv}{dt} \quad (3.10)$$

olur. Burada m^* , elektronun Kristal yapı içindeki kütlesi olup etkin kütle olarak bilinir (Harrison, 1999 ve Davies, 1999).

Kuantum teorisinin katıhal fiziğine getirdiği ilginç açıklamalardan biri de elektronun kristal yapı içerisindeki hareketleri ile ilgilidir. Elektron kristal yapı içerisinde dalga paketi gibi grup hızı

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad (3.11)$$

olacak şekilde hareket eder. Kuantum enerjisi

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (3.12)$$

olduğuna göre grup hızı;

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (3.13)$$

şeklinde elde edilir.

Denklem 3.8, 3.10 ve 3.13 birleştirilirse kristal yapı içerisindeki elektronun etkin kütlesi

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2} \quad (3.14)$$

şeklinde elde edilir. Görüleceği gibi periyodik potansiyel içerisinde hareket eden elektronun etki kütlesi enerjisine bağlı olarak değişmektedir.

4. KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

4.1 Giriş

Etkin kütle yaklaşımında, küresel potansiyel kuyu tarafından sınırlandırılan ve merkezinde safsızlık bulunan bir sistemin Hamiltoniyeni

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{kZe^2}{\epsilon_r r} + V_c(r) \quad (4.1)$$

ile verilir. Burada m^* , ϵ_r ve Z sırasıyla elektronun etkin kütlesi, ortamın dielektrik sabiti ve safsızlığın yükünü göstermektedir. Denklem 4.1 atomik birimlerde ($e = \hbar = m_0 = a_0 = 1$) ifade edilecek olursa

$$H = -\frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{Z}{\epsilon_r r} + V_c(r) \quad (4.2)$$

şeklinde yazılabilir. Denklem 4.2 de verilen Hamiltoniyende eşitliğin sağındaki ilk terim kinetik enerji operatörü ve ikinci terim de potansiyel enerji operatörüdür. $V_c(r)$ terimi ise sınırlandırıcı potansiyel (confining potential) olarak bilinir. Sınırlandırıcı potansiyelin formu sonsuz sınırlandırıcı potansiyel engeli durumda

$$V_c(r) = \begin{cases} 0 & r < R \\ \infty & r \geq R \end{cases} \quad (4.3)$$

ile tanımlanırken, sonlu sınırlandırıcı potansiyel engeli durumunda

$$V_c(r) = \begin{cases} 0 & r < R \\ V_0 & r \geq R \end{cases} \quad (4.4)$$

şeklinde alınır. Burada V_0 sınırlandırıcı potansiyel yüksekliğini (bariyer yüksekliği) ve R de kuantum noktanın yarıçapını göstermektedir. Sonlu sınırlandırıcı potansiyel durumunda Denklem 4.1 ve 4.2’de verilen etkin kütle m^* ve dielektrik sabiti ϵ_r kuyu içinde ve kuyu dışında.

$$m^*(r) = \begin{cases} 1, & r < R_{dot} \\ \frac{m_2}{m_1}, & r > R_{dot} \end{cases} \quad (4.5)$$

$$\epsilon_r(r) = \begin{cases} 1, & r < R_{dot} \\ \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}, & r > R_{dot} \end{cases} \quad (4.6)$$

şeklinde tanımlanır (Çakır, 2007). Burada GaAs ve AlGaAs nin içerisinde elektronların etkin kütleleri sırasıyla m_1 ve m_2 , dielektrik sabitlerini de ϵ_1 ve ϵ_2 olarak alındı.

4.2 Dalga Fonksiyonu ve Sınır Şartları

Tek elektron spin orbitalleri $\psi_{n\ell sm_s}(\mathbf{q})$ elektronun uzaysal $\psi_{n\ell m}(\mathbf{r})$ ve spin $\sigma_{m_s}(s)$ fonksiyonlarının çarpımı şeklinde ifade edilir, yani $\psi_{n\ell sm_s}(\mathbf{q}) = \psi_{n\ell m}(\mathbf{r})\sigma_{m_s}(s)$. Eğer Hamiltoniyen spin operatörü içermiyorsa enerji dalga fonksiyonları spin kısmından bağımsız olur ve etkilenmez. Böylece tek elektron dalga fonksiyonunun uzaysal kısmı baz fonksiyonlarının (Slater tipi orbital χ) lineer toplamından ibaret olacak şekilde aşağıdaki gibi yazılabilir

$$\psi_p = \sum_{k=1}^{\sigma} c_{pk} \chi_k(\zeta_k, \vec{r}) \quad (4.7)$$

Burada $k \rightarrow n_k, \ell_k, m_k$ baz setlerinin kuantum sayıları, σ baz seti sayısı, c_{pk} açılım katsayısı, ζ_k perdeleme sabitidir. ψ dalga fonksiyonu aşağıda verildiği gibi

$$\int_{r < R} |\psi^{r < R}|^2 dV + \int_{r \geq R} |\psi^{r \geq R}|^2 dV = 1 \quad (4.8)$$

normalizasyon şartını sağlar. $\psi^{r < R}$ kuyu içerisindeki dalga fonksiyonunu, $\psi^{r \geq R}$ de kuyu dışındaki dalga fonksiyonunu göstermektedir. Dalga fonksiyonunun kendisi ve birinci türevi sınırlarda süreklilik şartını sağlaması gerekir ve

$$\psi^{r < R}|_{r=R} = \psi^{r \geq R}|_{r=R} \quad (4.9a)$$

$$\frac{d}{m_1^* dr} \psi^{r < R}|_{r=R} = \frac{d}{m_2^* dr} \psi^{r \geq R}|_{r=R} \quad (4.9b)$$

4.3 Kuantum Nokta Yapıların Schrödinger Denklemi ve Çözümü

Rölativistik olmayan bir sistemin Schrödinger denklemi

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (4.10)$$

ile verilir. Burada E Hamiltoniyen operatörünün özdeğer enerjisi ve $\psi(\mathbf{r})$ de bu operatörün öz fonksiyonunu gösterir. $\psi(\mathbf{r})$ fonksiyonu eğer normalize dalga fonksiyonu şeklinde alınırsa bu durumda sistemin enerjisinin beklenen değeri

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (4.11)$$

şeklinde ifade edilir. Denklem 4.2 de verilen Hamiltoniyen burada yerine konulursa enerjinin beklenen değeri atomik birimlerde

$$E = \left\langle \psi \left| -\frac{\nabla^2}{2m^*} \right| \psi \right\rangle - \left\langle \psi \left| \frac{Z}{\epsilon_r r} \right| \psi \right\rangle + \langle \psi | V_c(r) | \psi \rangle \quad (4.12)$$

elde edilir.

Denklem 4.7 kullanılarak Denklem 4.12'nin sağ tarafında verilen enerjilerin beklenen değerleri STO lar üzerinden aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

Kinetik enerji;

$$T_p = \left\langle \psi \left| -\frac{\nabla^2}{2m^*} \right| \psi \right\rangle = \sum_k \sum_{k'} c_{pk} c_{pk'}^* \int \chi_k^* \frac{-\nabla^2}{2m^*} \chi_{k'} dV \quad (4.13)$$

Potansiyel enerji;

$$V_p = \left\langle \psi \left| -\frac{Z}{\epsilon_r r} \right| \psi \right\rangle = \sum_k \sum_{k'} c_{pk} c_{pk'}^* \int \chi_k^* \frac{-Z}{\epsilon_r r} \chi_{k'} dV \quad (4.14)$$

ve sınırlandırıcı potansiyel enerji de;

$$V_c(r) = \langle \psi | V_c(r) | \psi \rangle = \sum_k \sum_{k'} c_{pk} c_{pk'}^* \int \chi_k^* V_c(r) \chi_{k'} dV \quad (4.15)$$

ile verilir. Burada p tek elektron dalga fonksiyonlarının kuantum sayılarını gösterir.

Kuantum nokta yapıların sonlu sınırlandırıcı potansiyel engeline sahip olması durumunda Denklem 4.13, 4.14 ve 4.15 ile verilen enerjiler

$$T_p = T_p^{r < R} + T_p^{r \geq R} \quad (4.16)$$

$$V_p = V_p^{r < R} + V_p^{r \geq R} \quad (4.17)$$

$$V_c(r) = V_0 \int_R^\infty |\psi_p(r)|^2 dV \quad (4.18)$$

şeklinde ifade edilir. Yani elektronun kinetik enerjisi kuyu içerisinde ve kuyu dışarısındaki enerjilerinin toplamı şeklinde olacaktır. Benzer durum diğer enerjiler içinde geçerlidir. Kuantum nokta yapılar için bu enerji integrallerinin analitik ifadeleri Yakar vd., (2006, 2007) tarafından atomlar için verilen ifadelerin modifiye edilmesi ile elde edilebilir. Denklem 4.13, 4.14 ve 4.15'in Slater orbitalleri üzerinden analitik olarak elde edilmiş hali Ek A'da verilmiştir.

5. DIŞ MANYETİK ALAN İÇERİSİNDEKİ KUANTUM NOKTA YAPILAR

Düzgün bir dış manyetik alan içerisine konulmuş merkezinde safsızlık olan R yarıçaplı küresel kuantum nokta yapı göz önüne alınsın. Spinsiz bir parçacık aynı anda hem skaler merkezci bir potansiyel hem de manyetik alan kaynaklı bir vektör potansiyelinin etkisi altında kaldığında böyle bir sistemin Hamiltoniyeni aşağıdaki gibi yazılabilir (Xiao vd., 1996; An ve Liu 2006; Çakır vd., 2016).

$$H = \frac{1}{2m^*}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + V_C(\mathbf{r}) \quad (5.1)$$

Burada $\mathbf{p}$ parçacığın lineer (çizgisel) momentumu ve $\mathbf{A}$ da vektör potansiyelini göstermektedir. Burada dış manyetik alan $\mathbf{B}$, vektör potansiyeline bağlı olarak $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ şeklinde tanımlanır. Düzgün bir manyetik alanda $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ alınırsa vektör potansiyeli $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$ olarak ifade edilebilir. Dış manyetik alan içerisindeki kuantum nokta yapının küresel koordinatlarda Hamiltoniyeni atomik birimlerde aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$H = -\frac{1}{2m^*}\nabla^2 - \frac{Z}{\epsilon_r r} - \frac{1}{2}L_r B_r + \frac{1}{8}B_r^2 r^2 \sin^2 \theta + V_C \quad (5.2)$$

Denklem 5.2 ile verilen Hamiltoniyenin elde edilmesi Ek B'de verilmiştir. Eğer dış manyetik alan z- yönünde seçilirse ($\mathbf{B} = B\hat{k}$), denklem 5.2 de verilen Hamiltoniyen aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$H = -\frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{Z}{\epsilon_r r} + \frac{1}{2}\gamma L_z + \frac{1}{8}\gamma^2 r^2 \sin^2 \theta + V_C(r) \quad (5.3)$$

Burada birinci terim elektronun kinetik enerjisini, ikinci terim elektronla safsızlık arasındaki Coulomb potansiyel enerjiyi, üçüncü ve dördüncü terimlerde manyetik alandan kaynaklanan paramanyetik Zeeman (lineer Zeeman terim) ve diamanyetik Zeeman (kuadratik terim) terimlerini göstermektedir. Burada, L_z elektronun açısal momentum operatörünün z-bileşenini göstermektedir. Denklem 5.3 deki γ terimi $\gamma = a_0^2 \frac{e}{\hbar} B$ şeklinde ifade edilir ve manyetik alanın boyutsuz bir ölçüsünü tanımlar. γ terimi etkin kütle ve dielektrik sabitine bağlı olduğundan dolayı, manyetik alanın verilen bir değerinde, γ terimi yarıiletken yarıiletkenine değişebilmektedir. Denklem 5.3 de eşitliğin sağındaki üçüncü terim (γL_z) manyetik alan içerisinde yörünge açısal momentum vektörünün presesyon hareketinden ileri gelir ve bu durum Zeeman etkisi olarak da bilinir. Bu etki dış manyetik alanla elektronun

yörünge manyetik dipol arasındaki etkileşim enerjisini tanımlar. Dış manyetik alan kuantum nokta yapıların enerji seviyeleri üzerindeki m dejenereliğini kaldırır. Enerji seviyelerindeki yarıma yörünge açısal momentum kuantum sayısı olarak bilinen ℓ ile ilişkilidir ve manyetik alanın varlığında yarılan seviyelerin sayısı $2\ell+1$ kadardır. Yani her seviye $2\ell+1$ kez yarılr. s seviyesinde $\ell=0$ (manyetik kuantum sayısı $m=0$) olduğundan manyetik alan içerisinde yarılmaz. 2p seviyesinde $\ell=1$ olduğu için manyetik alan içerisinde 3 seviyeye yarılr. Benzer şekilde 3d enerji seviyesinde $\ell=2$ olacağından manyetik alan içerisinde 5 e yarılr. Lineer Zeeman etkisi olarak bilinen paramanyetik terim γ ile orantılı iken kuadratik Zeeman etkisi olarak bilinen diamanyetik terimde γ^2 ile orantılıdır. Paramanyetik terim enerji seviyelerinde yarılmalara neden olurken diamanyetik terim ise bu seviyelerin kaymasına neden olmaktadır.

Diamaynetik terim perturbasyon terimi olarak göz önüne alınırsa Denklem 5.3 ile verilen Hamiltoniyen

$$H = H^0 + H' \quad (5.4)$$

şeklinde yazılabilir. Burada

$$H^0 = -\frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{Z}{\epsilon_r r} + \frac{1}{2}\gamma L_z + V_C(r) \quad (5.5)$$

ile verilir ve pertürbe olmamış Hamiltoniyeni gösterir. Diğer taraftan kuadratik terim perturbasyon Hamiltoniyeni olarak gözönüne alınır ve

$$H' = \frac{1}{8}\gamma^2 r^2 \sin^2 \theta \quad (5.6)$$

ile verilir. Burada düşük manyetik alan şiddetlerinde H^0 , H' ile karşılaştırıldığında çok küçüktür ($H' \ll H^0$).

Pertürbe olmamış Hamiltoniyen için Schrödinger denklemi aşağıdaki gibi yazılır

$$H^0 \psi_{n\ell m}^{(0)}(\mathbf{r}) = E^0 \psi_{n\ell m}^{(0)}(\mathbf{r}), \quad (5.7)$$

burada H^0 pertürbe olmamış Hamiltoniyeni, E^0 pertürbe olmamış Hamiltoniyenin özdeğer enerjisini, $\psi_{n\ell m}^{(0)}$ da bu Hamiltoniyenin özfonksiyonunu göstermektedir ve $n\ell m$ de atomik orbitallerin kuantum sayılarını gösterir.

Yukarıda verilen Denklem 4.7, 4.11 ve 5.5 kullanılarak biraz sıkıcı bir işlemten sonra küresel nokta yapının pertürbe olmamış enerjisi aşağıdaki gibi elde edilebilir:

$$\begin{aligned}
E^0 &= \left\langle \psi_p^{(0)} \left| -\frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{Z}{\varepsilon_r r} + \frac{1}{2} \gamma L_z \right| \psi_p^{(0)} \right\rangle \\
&= \sum_{n\ell m=1}^{\sigma} \sum_{n'\ell'm'=1}^{\sigma} c_{pn\ell m}^* c_{pn'\ell'm'} \left\{ \frac{\ell'(\ell'+1)-n'(n'-1)}{2} J_{n+n'-2}(\zeta + \zeta') + \right. \\
&\quad \left. [n'\zeta' - Z] J_{n+n'-1}(\zeta + \zeta') - \frac{1}{2} [\zeta'^2 + \gamma m] J_{n+n'}(\zeta + \zeta') \right\} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \quad (5.8)
\end{aligned}$$

(5.8)

burada $J_N(\alpha) = \int_0^R r^N e^{-\alpha r} dr$ şeklinde verilir ve incomplete gamma integralidir.

Denklem 4.7, 4.11 ve 5.6 kullanılarak diamanyetik terimin perturbasyon enerjisi

$$\begin{aligned}
E' &= \left\langle \psi_p^{(0)} \left| \frac{1}{8} \gamma^2 r^2 \sin^2 \theta \right| \psi_p^{(0)} \right\rangle \\
&= \sum_k^{\sigma} \sum_{k'}^{\sigma} c_{pk}^* c_{pk'} \left\{ \frac{\gamma^2}{12} J_{n+n'+2}(\zeta + \zeta') \delta_{ll'} \delta_{mm'} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\gamma^2}{8} \sqrt{\frac{16\pi}{45}} \sum_{L=L_{min}}^{L_{max}} \binom{2}{2} \langle lm | l'm' | L m - m' \rangle J_{n+n'+2}(\zeta + \zeta') \delta_{L2} \delta_{m-m',0} \right\} \quad (5.9)
\end{aligned}$$

şeklinde elde edilebilir. Burada $L_{min} = \max\{|\ell - \ell'|, |m - m'|\}$, $L_{max} = \ell + \ell'$ ve $\langle \ell m | \ell' m' | L M \rangle$ de Gaunt katsayısı olarak bilinir ve $L \geq M$, $M = |m - m'|$. Binom katsayıları cinsinden Gaunt katsayılarının analitik ifadesi Yakar vd., (2007) tarafından tanımlanmış ve bazı nümerik değerleri Ek C'de verilmiştir.

6. HESAPLAMA METODU

Genel bir araştırma ve optimizasyon yöntemi olan genetik algoritma (GA), yeniden oluşum (veya kopyalama), çaprazlama ve mutasyon olmak üzere üç temel ilke üzerine kurulmuştur (Coley, 2001 ve Goldberg, 1999). Bu metot problemin olası çözümlerini oluşturan başlangıç popülasyonu ile işe başlar. Başlangıç nüfusu $r=R$ de sınır şartlarını sağlayacak şekilde Denklem 4.10 un olası çözümleri olan ve rastgele belirlenen Denklem 4.7 deki c_i ve ζ_i değerlerinden oluşturulduktan sonra her bir birey normalize edilir. Aynı tip atomik orbitallerin dikleştirilmesinde Gram-Schmidt yöntemi kullanılmıştır (Arfken, 1985). Çeşitliliği arttırmak için başlangıç nüfus sayısı 100 seçildi. Normalize edilen bu başlangıç bireyleri kullanılarak her bir birey için enerjinin beklenen değeri Denklem 4.12 den hesaplandı (Yakar, 2006). Enerjinin beklenen değeri bir nesil için hesaplanırken hızı arttırmak amacıyla $S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j)$ değerleri bir kere hesaplanıp bir diziye yerleştirildi. Bu da hesaplamada artı bir hız kazandırdı. Buna ilaveten her nesilde enerjisi en düşük dört birey bir sonraki nesle aktarıldı ve böylece çalkantılar engellendi. Genetik algoritma yöntemi çok küçük kuantumlu sistemlere uygulanmasıyla kuantum genetik algoritma (KGA) olarak adlandırılmaktadır. KGA yöntemi tamamen rastgeleliğe dayanan problemlerin olası çözümlerini oluşturan başlangıç nüfusu ile başlar. Bu çalışmada uygulanan KGA yöntemi aşağıdaki gibi özetlenebilir (Çakır, 2007).

1) Yeniden Oluşum (Üretme)

Yeniden üretim (veya kopyalama) sürecinde yeni nesil oluşturmak için her bir bireyin uygunluk değerlerine bakılır ve uygunluk değeri büyük olan bireyler yeni nesle aktarılırken uygunluk değeri küçük olan bireyler ise elenir. Herhangi bir i . bireyin enerji beklenen değeri E_i aşağıdaki eşitlikle uygun (fitness) bir F_i değerine dönüştürülür.

$$F_i = e^{-\beta(E_i - \bar{E}) / (E_{\max} - E_{\min})} \quad (6.1)$$

Burada $\bar{E}$, $E_{\max}$ and $E_{\min}$ sırasıyla ortalama, maksimum and minimum enerjileri gösterir ve β ayar parametresidir. Yeniden oluşumda N_{pop} bireyleri bir önceki nesilden seçilir. P_i olasılığına sahip her bir birey uygun(fitness) F_i ile orantılıdır. Örneğin

$$P_i = \frac{F_i}{\sum_{i=1}^{N_{pop}} F_i} \quad (6.2)$$

Bu işlemde bazı bireylerin gelme olasılığı birden fazla olurken bazı bireylerin gelmeme olasılığı vardır.

2) Çaprazlama (Crossover) işlemi

Çaprazlama işlemi yeniden oluşturma işlemi yapıldıktan sonra yeni kuşaktan rast gele seçilen iki birey arasında gerçekleştirilir. Oluşturulan popülasyon içinden rasgele iki birey seçilir. Seçilen bireylerden birisi 0-1 aralığında rast gele bir s sayısı ile çarpılırken diğer birey ise (1-s) ile çarpılır ve yeni nesil bireyler

$$\zeta'_1 = s_1 \zeta_1 + (1-s_1) \zeta_2 \quad (6.3a)$$

$$\zeta'_2 = s_1 \zeta_2 + (1-s_1) \zeta_1 \quad (6.3b)$$

$$c'_1 = s_2 c_1 + (1-s_2) c_2 \quad (6.3c)$$

$$c'_2 = s_2 c_2 + (1-s_2) c_1 \quad (6.3d)$$

işlemiyle yeni bireyler oluşturuldu. Burada s ler 0 ile 1 arasında rastgele belirlenmiş sayılardır. Hesaplamalarda çaprazlama olasılığını 0.95 olarak alındı.

3) Mutasyon

Mutasyon işlemi yerel minimumlardan kurtulmak için önemli bir rol oynar. Mutasyon olasılığını yüksek seçmek dalga fonksiyonunda istenmeyen kırıklıklara, ya da yanlış çözümlere neden olabilir. Bu yüzden mutasyon olasılığı iyi yakınsamanın gözlenebilmesi için çok küçük seçilmelidir. Mutasyon işlemi rast gele seçilen bir birey üzerinden aşağıdaki gibi bir işlemle yürütülebilir.

$$\zeta'_1 = A + \zeta_1 \quad (6.4a)$$

$$c'_1 = (-1)^M B + c_1 \quad (6.4b)$$

Burada A ve B, (0-1) arasında rasgele belirlenen mutasyon şiddetidir. M ise rastgele belirlenen doğal bir sayıdır. Hesaplamalarda mutasyon olasılığı 0.05 alındı. Bireyleri seçme işleminde rulet çarkı modelini uygulanır.

Genetik süreçteki her bir adımda yeniden oluşturma, çaprazlama ve mutasyon işlemleri rast geleliğe dayanır ve genetik süreç sonunda oluşturulan yeni

popölasyonun her bir bireyi normalize edilir. Bu işlemler en iyi yakınsama elde edilene kadar yürütölür.



7. BULGULAR VE TARTIŞMA

Bu çalışmada dış manyetik alanın varlığında ve yokluğunda sonsuz küresel potansiyel kuyu ile sınırlandırılmış merkezinde hidrojen benzeri safsızlık olan GaAs yapısının taban ve bazı uyarılmış seviyelerinin enerjileri nokta yarıçapına ve manyetik alan şiddetine bağlı olarak hesaplandı. Manyetik alan varlığında enerji seviyelerindeki Zeeman yarılmalarını nokta yarıçapının ve manyetik alan şiddetinin fonksiyonu olarak sayısal değerleri elde edildi ve grafikleri çizildi. Kuadratik terim olarak adlandırılan diamanyetik terim pertürbasyon yaklaşımı ile hesaplanarak Zeeman enerji seviyelerindeki kayma ve bu seviyeler arasındaki Zeeman geçişleri hesaplandı ve grafikleri oluşturuldu. Benzer şekilde yine dış manyetik alan yokluğunda ve varlığında sonlu küresel potansiyel ile sınırlandırılmış merkezinde hidrojen benzeri safsızlık olan GaAs/Al_xGa_{1-x}As küresel nokta yapısının taban ve bazı uyarılmış enerji seviyeleri yine nokta yarıçapına ve manyetik alan şiddetine bağlı olarak hesaplandı. Aynı zamanda alüminyum katkılanma oranına (x) bağlı olarak enerji değişimleri incelendi. Malzeme parametreleri olarak kuyu içinde GaAs ın kuyu dışında ise AlGaAs ın parametreleri kullanılmış olup sınırdaki değişimler ihmal edilmiştir. Hesaplamalar boyunca atomik birimler kullanılmıştır ve etkin Bohr yarıçapı $a^* = 101.6 A^0$, etkin Rydberg enerjisi $R_y^* = 5.72 \text{ meV}$ ve sınırlandırma potansiyelin değeri $V_0 = 0.6(1.155x + 0.37x^2) \text{ eV}$ olarak alınmıştır. Meteryal parametreleri için $m_{GaAs} = 0.0665m_0$, $\epsilon_{GaAs} = 13.18$ ve $m_{AlGaAs} = 0.0665 + 0.0835x$, $\epsilon_{AlGaAs} = 13.18 - 3.12x$ olarak alındı (Adachi 1994). Burada m_0 serbest elektron kütlesi ve x alüminyumun katkılanma oranıdır.

Hesaplamalarda kuantum nokta yapıların kuantum mekaniksel analizleri için safsızlık yakınlarında gerçek dalga fonksiyonu özelliği gösteren Slater Tipi Orbitaler (STO_s) kullanılmıştır. Hesaplamalarda atomik orbitaller farklı s,p,d ve f tipi STO lardan oluşturulmuştur. Örnek olarak sonsuz kuyu durumunda atomik orbitaller 5 tane STO ların toplamından oluşturulurken sonlu kuyu durumunda 7 tane STO'lardan oluşturulmuştur. Ek Ç'de verilen tablodaki değerler kullanılarak 1s seviyesinin atomik orbitali 5 tane STO lardan oluşturulmuş olup Slater atom orbitalleri ve c_{pk} açılım katsayıları aşağıdaki gibi tanımlanmıştır.

$$\chi_1 = \chi_{100}(5.720926753898663, r\theta\phi), \chi_2 = \chi_{100}(1.748386928072556, r\theta\phi),$$

$$\chi_3 = \chi_{100}(11.599766282174546, r\theta\phi), \chi_4 = \chi_{100}(0.312476500643129, r\theta\phi)$$

$$\chi_5 = \chi_{100}(3.536330391874470, r\theta\phi)$$

ve

$$c_{1s1} = -0.360751857711E+01, c_{1s2} = -0.209122299345E+02$$

$$c_{1s3} = -0.703790499830E-01, c_{1s4} = 0.443758622181E+01$$

$$c_{1s5} = 0.139081389988E+02.$$

Burada E+x in anlamı 10^x değerine karşılık gelmektedir. Bu değerler denklem 4.7'te yerine yazılırsa 1s atomik orbitali

$$\psi_{1s} = c_{1s1}\chi_1 + c_{1s2}\chi_2 + c_{1s3}\chi_3 + c_{1s4}\chi_4 + c_{1s5}\chi_5$$

şeklinde yazılır. Aynı şekilde 2p seviyesinin atomik orbitali 5 tane STO lardan oluşturulmuş olup Slater tipi orbitaller ve c_{pk} açılım katsayıları aşağıdaki gibi alınmıştır.

$$\chi_1 = \chi_{210}(57.442551599026132, r\theta\phi), \chi_2 = \chi_{210}(1.895032636433436, r\theta\phi),$$

$$\chi_3 = \chi_{210}(50.874780064698356, r\theta\phi), \chi_4 = \chi_{210}(3.350529289229958, r\theta\phi)$$

$$\chi_5 = \chi_{210}(1.596182309756163, r\theta\phi)$$

ve

$$c_{2p1} = -0.430456888472E-02, c_{2p2} = 0.230781396153E+03$$

$$c_{2p3} = -0.262267896295E-02, c_{2p4} = -0.612700314386E+02$$

$$c_{2p5} = -0.160562780530E+03.$$

Bu değerler denklem 4.7'de yerine yazılırsa 2p atomik orbitalinin dalga fonksiyonu

$$\psi_{2p} = c_{2p1}\chi_1 + c_{2p2}\chi_2 + c_{2p3}\chi_3 + c_{2p4}\chi_4 + c_{2p5}\chi_5$$

şeklinde yazılır. Aynı şekilde 3d seviyesinin atomik orbitali 5 tane STO lardan oluşturulmuş olup Slater tipi orbitaller ve c_{pk} açılım katsayıları aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\chi_1 = \chi_{320}(4.149051854990039, r\theta\phi), \chi_2 = \chi_{320}(2.930026942315004, r\theta\phi),$$

$$\chi_3 = \chi_{320}(5.219132793926557, r\theta\phi), \chi_4 = \chi_{320}(2.810650202256157, r\theta\phi)$$

$$\chi_5 = \chi_{320}(3.067515177508485, r\theta\phi)$$

ve

$$c_{3d1} = 0.778166220382E+03, c_{3d2} = 0.461369619400E+03$$

$$c_{3d3} = -0.143234545482E+03, c_{3d4} = 0.108977902938E+04$$

$$c_{3d5} = -0.218551167394E+04.$$

Benzer şekilde bu değerler denklem 4.7’de yerine yazılırsa 3d atomik orbitalinin dalga fonsiyonu

$$\psi_{3d} = c_{3d1}\chi_1 + c_{3d2}\chi_2 + c_{3d3}\chi_3 + c_{3d4}\chi_4 + c_{3d5}\chi_5$$

şeklinde yazılır. Aynı şekilde 4f seviyesinin atomik orbitali 5 tane STO lardan oluşturulmuş olup Slater tipi orbitaller ve c_{pk} açılım katsayıları aşağıdaki gibi alınmıştır.

$$\chi_1 = \chi_{430}(3.746058002408961, r\theta\phi), \chi_2 = \chi_{430}(7.542338863192025, r\theta\phi),$$

$$\chi_3 = \chi_{430}(1.986273133100385, r\theta\phi), \chi_4 = \chi_{430}(5.589746458014304, r\theta\phi)$$

$$\chi_5 = \chi_{430}(1.693049177654420, r\theta\phi)$$

ve

$$c_{4f1} = -0.150709040059E+04, c_{4f2} = -0.117382746697E+04$$

$$c_{4f3} = 0.879467182221E+03, c_{4f4} = 0.215226023656E+04$$

$$c_{4f5} = -0.502849889593E+03.$$

Yine bu değerler denklem 4.7’de yerine yazılırsa 4f atomik orbitalinin dalga fonsiyonu

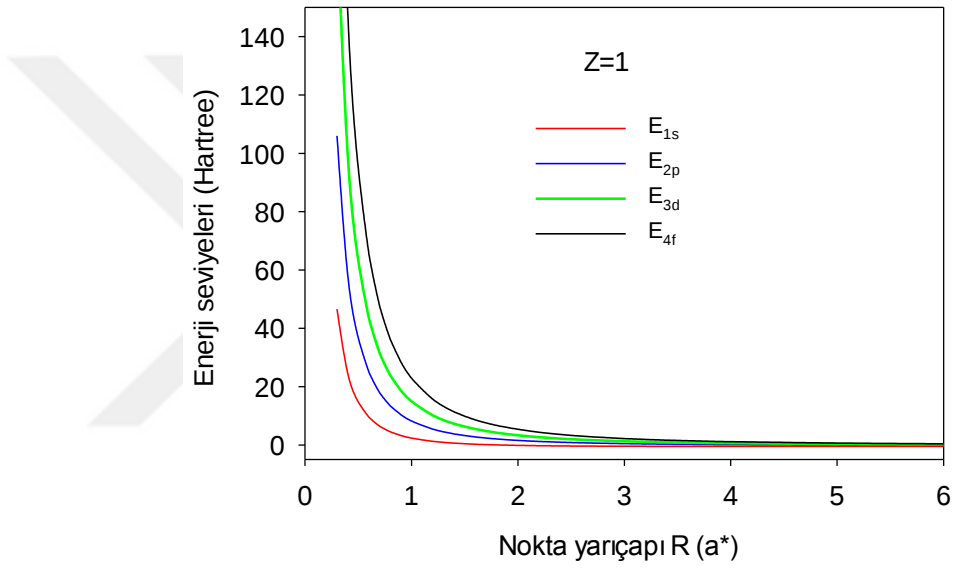
$$\psi_{4f} = c_{4f1}\chi_1 + c_{4f2}\chi_2 + c_{4f3}\chi_3 + c_{4f4}\chi_4 + c_{4f5}\chi_5$$

şeklinde yazılır.

Bu çalışmamızda sonlu kuyu durumunda da baz fonksiyonu sayısı kuyu içinde ve kuyu dışında yedi (7) tane STO dan oluşturuldu. Alüminyum konsantrasyon oranları $x=0.1, 0.2, 0.3$ ve 0.4 alındı. Böylece sınırlandırma potansiyeli x değerine bağlı

olarak değiştirilmiş oldu. Hesaplamalarda nokta yarıçapı R ise her orbital için $0.3a^*$ dan $20a^*$ ya kadar değiştirildi.

Dış manyetik alan olmadan sonsuz sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının taban ve çeşitli uyarılmış durumlarına ait hesaplanan ve çizilen enerji seviyelerinin grafikleri şekil 7.1’de ve çizelge 7.1’de, sonlu kuyu için hesaplanan ve çizilen grafikler $x=0.1$ için çizelge 7.2 ve şekil 7.2a’de, $x=0.2$ için çizelge 7.3 ve şekil 7.2b’de, $x=0.3$ için çizelge 7.4 ve şekil 7.2c’de ve $x=0.4$ için çizelge 7.5 ve şekil 7.2d’de verilmiştir.



Şekil 7.1. Nokta yarıçapının fonksiyonu olarak sonsuz sınırlandırıcı potansiyele sahip küresel kuantum nokta yapının enerji seviyeleri.

Çizelge 7.1. Sonsuz küresel sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının taban ve çeşitli uyarılmış durumlarına ait enerji değerleri. Tüm enerji değerleri atomik birimde (Hartree) verilmiştir.

$R(a^*)$	$E_{1s}(Z=1)$	$E_{2p}(Z=1)$	$E_{3d}(Z=1)$	$E_{4f}(Z=1)$
0.3	46.602098	106.010484	179.114625	266.232453
0.4	24.638206	58.466741	99.723112	148.902201
0.5	14.749544	36.669499	63.193391	94.696023
0.6	9.528673	24.963545	43.428422	65.334099
0.7	6.470572	17.943110	31.569574	47.694588
0.8	4.543879	13.443438	23.913489	36.273647
0.9	3.262486	10.388500	18.690789	28.476398
1.0	2.374206	8.225787	14.977351	22.910487
1.2	1.269359	5.448360	10.170373	15.698026
1.4	0.647140	3.807855	7.301842	11.376852
1.6	0.271321	2.767435	5.467442	8.593167
1.8	0.032560	2.067286	4.213560	6.701441
2.0	-0.125000	1.576504	3.330988	5.392737
2.2	-0.232033	1.221930	2.682628	4.359033
2.4	-0.306396	0.958996	2.195714	3.609342
2.6	-0.358976	0.758578	1.822391	3.029937
2.8	-0.396664	0.603547	1.528050	2.592835
3.0	-0.423965	0.481437	1.293264	2.207429
3.2	-0.443897	0.383893	1.104660	1.908493
3.4	-0.458543	0.304982	0.950441	1.664969
3.6	-0.469347	0.240697	0.820576	1.461416
3.8	-0.477336	0.187599	0.712996	1.290171
4.0	-0.483256	0.143541	0.621755	1.145512
5.0	-0.496411	7.595943e-3	0.329419	0.670482
6.0	-0.499270	-0.055555	0.180419	0.422215
7.0	-0.499861	-0.087479	0.096691	0.279926
8.0	-0.499973	-0.104449	0.046098	0.189355
9.0	-0.499995	-0.113726	0.014162	0.128903
10	-0.499999	-0.118857	-7.035584e-3	0.088941
12	-0.500000	-0.123252	-0.031250	0.038746
15	-0.500000	-0.124755	-0.046641	2.798144e-3
20	-0.500000	-0.124994	-0.053967	-0.020000

Çizelge 7.2. Sonlu ($\chi=0.1$) küresel sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının taban ve çeşitli uyarılmış durumlarına ait enerji değerleri. Tüm enerji değerleri atomik biriminde (Hartree) verilmiştir.

$R(a^*)$	$E_{1s}(Z=1)$	$E_{2p}(Z=1)$	$E_{3d}(Z=1)$	$E_{4f}(Z=1)$
0.2	5.570500	6.105250	6.186637	6.215123
0.3	5.246700	6.105136	6.186637	6.215123
0.4	4.516400	6.104559	6.186637	6.215123
0.5	3.608800	6.102448	6.186637	6.215123
0.6	2.779600	6.093476	6.186634	6.215123
0.7	2.117500	6.004034	6.186627	6.215123
0.8	1.612100	5.495782	6.186604	6.215123
0.9	1.194200	4.797864	6.186536	6.215123
1.0	0.898600	4.135761	6.186268	6.215123
1.2	0.470500	3.076765	5.659785	6.215123
1.4	0.213600	2.343175	4.505158	6.215123
1.6	-0.026400	1.796394	3.599599	5.610432
1.8	-0.186700	1.356803	2.891307	4.595588
2.0	-0.206400	1.126884	2.383850	3.900069
2.2	-0.251000	0.917920	1.976696	3.294927
2.4	-0.295400	0.773277	1.649954	2.833596
2.6	-0.341800	0.604144	1.390388	2.452544
2.8	-0.370400	0.515350	1.193745	2.153527
3.0	-0.415100	0.420300	1.015010	1.914680
3.2	-0.428900	0.366383	0.883486	1.768523
3.4	-0.437600	0.293973	0.766908	1.618538
3.6	-0.457600	0.224705	0.668286	1.464550
3.8	-0.462600	0.188562	0.579425	1.315466
4.0	-0.471000	0.159670	0.510126	1.198326
5.0	-0.491300	0.054321	0.274420	0.734275
6.0	-0.497900	0.025336	0.155069	0.542397
8.0	-0.499900	-0.083689	0.034943	0.266521
10.0	-0.500000	-0.107974	-8.202081e-3	0.155705
15.0	-0.500000	-0.124778	-0.047358	3.857037e-3
20.0	-0.500000	-0.124993	-0.054069	-0.020172

Çizelge 7.3. Sonlu ($\chi=0.2$) küresel sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının taban ve çeşitli uyarılmış durumlarına ait enerji değerleri. Tüm enerji değerleri atomik biriminde (Hartree) verilmiştir.

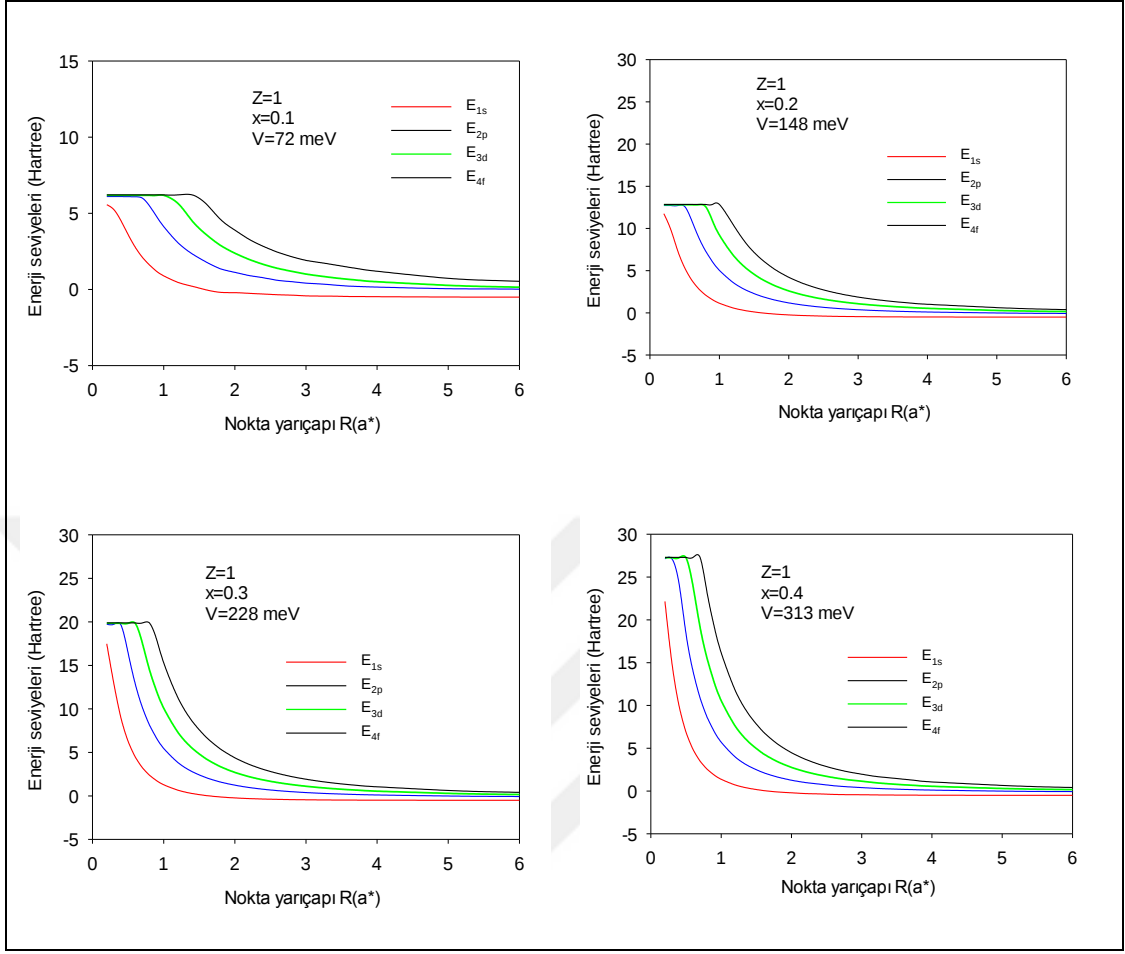
$R(a^*)$	$E_{1s}(Z=1)$	$E_{2p}(Z=1)$	$E_{3d}(Z=1)$	$E_{4f}(Z=1)$
0.2	11.751051	12.720563	12.815593	12.848849
0.3	9.864531	12.720023	12.815594	12.848850
0.4	7.350578	12.716032	12.815592	12.848850
0.5	5.348244	12.611225	12.815590	12.848850
0.6	3.901141	10.975794	12.815571	12.848849
0.7	2.866212	8.982601	12.815493	12.848849
0.8	2.115333	7.351789	12.610261	12.848849
0.9	1.560646	6.059680	10.919327	12.848850
1.0	1.144233	5.042011	9.227115	12.848847
1.2	0.579291	3.588371	6.828926	10.442781
1.4	0.231572	2.633949	5.187449	8.084259
1.6	7.880359e-3	1.981500	4.039289	6.394299
1.8	-0.140917	1.519250	3.213089	5.144847
2.0	-0.242008	1.181955	2.601175	4.215167
2.2	-0.312463	0.929588	2.136559	3.504936
2.4	-0.361041	0.736745	1.776890	2.952120
2.6	-0.400159	0.586801	1.493422	2.513245
2.8	-0.426484	0.468329	1.266690	2.160222
3.0	-0.445353	0.373606	1.082468	1.872413
3.2	-0.459432	0.296786	0.931280	1.635130
3.4	-0.470271	0.233969	0.805740	1.436615
3.6	-0.477891	0.182169	0.700587	1.269841
3.8	-0.483666	0.139049	0.612359	1.128313
4.0	-0.487819	0.103365	0.538181	1.018892
5.0	-0.497302	-0.010510	0.288122	0.624381
6.0	-0.499305	-0.064423	0.160538	0.387502
8.0	-0.499976	-0.106480	0.039093	0.174963
10.0	-0.499997	-0.118970	-6.698080e-3	0.093424
15.0	-0.500000	-0.124751	-0.044480	0.016446
20.0	-0.500000	-0.124988	-0.053255	-0.011192

Çizelge 7.4. Sonlu ($\chi=0.3$) küresel sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının taban ve çeşitli uyarılmış durumlarına ait enerji değerleri. Tüm enerji değerleri atomik biriminde (Hartree) verilmiştir.

$R(a^*)$	$E_{1s}(Z=1)$	$E_{2p}(Z=1)$	$E_{3d}(Z=1)$	$E_{4f}(Z=1)$
0.2	17.482500	19.732093	19.842108	19.880591
0.3	12.882519	19.729997	19.842110	19.880591
0.4	8.944073	19.638972	19.842107	19.880591
0.5	6.274961	16.432498	19.842087	19.880592
0.6	4.483183	12.888814	19.841769	19.880591
0.7	3.252557	10.179744	17.575266	19.880591
0.8	2.383525	8.151515	14.499033	19.880594
0.9	1.753583	6.625947	12.035832	17.992081
1.0	1.286802	5.458957	10.085752	15.302259
1.2	0.661863	3.833535	7.306568	11.288219
1.4	0.282612	2.790502	5.486871	8.586537
1.6	0.040806	2.086995	4.240670	6.721795
1.8	-0.118958	1.593494	3.354017	5.373275
2.0	-0.227575	1.235946	2.704009	4.381116
2.2	-0.303085	0.970017	2.214117	3.629309
2.4	-0.356048	0.767589	1.836589	3.047820
2.6	-0.390465	0.610745	1.540385	2.592081
2.8	-0.422359	0.487534	1.304075	2.220634
3.0	-0.441755	0.388765	1.112834	1.921450
3.2	-0.457250	0.309138	0.956188	1.675846
3.4	-0.468320	0.244095	0.826468	1.469919
3.6	-0.475676	0.190509	0.717965	1.301203
3.8	-0.481588	0.145996	0.626489	1.151663
4.0	-0.484739	0.111478	0.548680	1.050390
5.0	-0.496876	-7.889386e-3	0.297583	0.627955
6.0	-0.499395	-0.062944	0.165942	0.413687
8.0	-0.499963	-0.105776	0.042516	0.178614
10.0	-0.499998	-0.117046	-4.202917e-3	0.102328
15.0	-0.500000	-0.124254	-0.042107	0.022218
20.0	-0.500000	-0.124982	-0.052729	-7.683827e-3

Çizelge 7.5. Sonlu ($\chi=0.4$) küresel sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının taban ve çeşitli uyarılmış durumlarına ait enerji değerleri. Tüm enerji değerleri atomik biriminde (Hartree) verilmiştir.

$R(a^*)$	$E_{1s}(Z=1)$	$E_{2p}(Z=1)$	$E_{3d}(Z=1)$	$E_{4f}(Z=1)$
0.2	22.152468	27.132505	27.259070	27.303288
0.3	14.922496	27.123465	27.259070	27.303288
0.4	9.982589	24.283576	27.259059	27.303289
0.5	6.868290	18.371411	27.258880	27.303288
0.6	4.855537	13.995534	23.922548	27.303288
0.7	3.497488	10.875438	19.149250	27.303289
0.8	2.552933	8.625391	15.484639	23.160545
0.9	1.874928	6.964265	12.704681	19.249582
1.0	1.375819	5.709215	10.568955	16.158723
1.2	0.713725	3.981160	7.585556	11.752114
1.4	0.314173	2.885001	5.663431	8.874262
1.6	0.061174	2.150819	4.359329	6.905503
1.8	-0.105239	1.638382	3.438293	5.506286
2.0	-0.202807	1.268662	2.765316	4.478118
2.2	-0.292273	0.994191	2.260174	3.703492
2.4	-0.334088	0.809030	1.872965	3.103793
2.6	-0.390737	0.625216	1.570652	2.632602
2.8	-0.419393	0.498746	1.326497	2.255717
3.0	-0.430444	0.405144	1.151340	1.969355
3.2	-0.450807	0.316493	0.971543	1.709229
3.4	-0.463125	0.250127	0.839360	1.544408
3.6	-0.472938	0.195647	0.728312	1.378572
3.8	-0.478967	0.150154	0.637516	1.206710
4.0	-0.485833	0.112340	0.557734	1.069219
5.0	-0.496808	-6.331668e-3	0.300894	0.659654
6.0	-0.499299	-0.061499	0.168860	0.417287
8.0	-0.499966	-0.106205	0.042112	0.180879
10.0	-0.499997	-0.117414	3.198142e-4	0.111584
15.0	-0.500000	-0.124195	-0.042862	0.021323
20.0	-0.500000	-0.124962	-0.052465	-6.503718e-3



Şekil 7.2. Nokta yarıçapının fonksiyonu olarak sonlu ($x=0.1, 0.2, 0.3$ ve 0.4) sınırlandırıcı potansiyele sahip küresel kuantum nokta yapının enerji seviyeleri.

Şekil 7.2 nokta yarıçapının fonksiyonu olarak sonlu sınırlandırıcı potansiyele sahip küresel kuantum nokta yapının taban ve çeşitli uyarılmış durumlarının enerji seviyeleri dört farklı sınırlandırıcı potansiyel değeri (veya Al konsantrasyon değeri x) için çizilmiştir. Eğrilerden görüleceği gibi nokta yarıçapı artarken tüm enerjilerin azalarak belli bir değere gittiği görülmektedir. Nokta yarıçapının daha büyük değerlerinde sistem atom modeline benzeyeceği için hem sonlu hem sonsuz (tablodaki değerlerden görüleceği gibi) durumdaki enerji değerleri hidrojen atomunun enerji değerlerine gitmektedir. Bu durum çizelgelerde de açık şekilde görülmektedir. Yani çok büyük nokta yarıçaplarında, örneğin $R=20$ de, $1s$ seviyesinin enerji değeri -0.5 Hartree'ye, $2p$ seviyesinin enerji değeri -0.124 Hartree değerine yaklaştığı görülmektedir. Aynı şekilde çok daha ileri nokta yarıçaplarında

3d ve 4f seviyelerinin enerjileri de -0.0466 Hartree ve 0.0030 Hartree olarak bulunmuştur. Bu değerler hidrojen atomunun enerji değerleri ile aynıdır. Bu şekillerde aynı zamanda enerji seviyeleri üzerinde kuyu derinliğinin sınırlandırma etkisi açık olarak görülmektedir. Küçük nokta yarıçapında enerjinin maksimum değerleri kuyu derinliğine bağlı olarak değişmektedir. Yani nokta yarıçapı azalırken enerji artıyor ve kuyu yüksekliğine karşılık gelen bir limit değere (kritik nokta yarıçapına) yaklaşıyor. Enerjilerin maksimum değeri V_0 kuyu derinliği değerine kadar çıkabilmektedir. Diğer taraftan çok büyük nokta yarıçaplarında kuyu potansiyelinin sınırlandırma etkisinin çok zayıfladığı ve enerji seviyeleri üzerinde çok zayıf bir etkisinin olduğu, bu sonuçlardan söylenebilir. Bu tablolarda görülen negatif işaret elektronun safsızlığa bağlandığını göstermektedir. Yani elektron bu nokta yarıçapından sonra çekirdeğe bağlanıyor. Böylece toplam enerji negatif olmaktadır. Bu durum 1s orbitalindeki elektron için $R \approx 1.8$, 2p orbitalindeki elektronun $R \approx 5$, 3d orbitalindeki elektronun $R \approx 10$ civarlarında negatif enerjiye düştüğü görülmektedir.

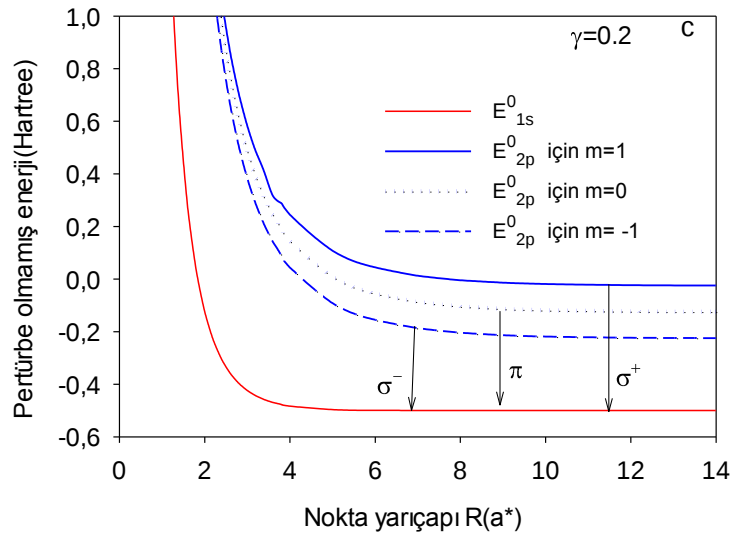
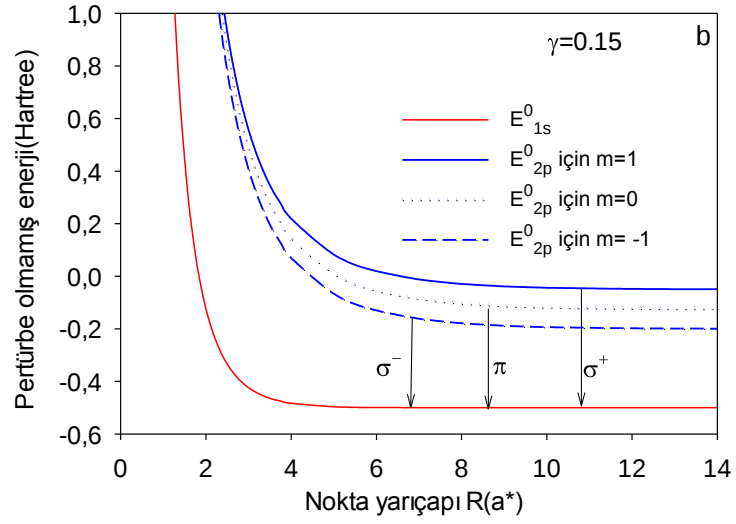
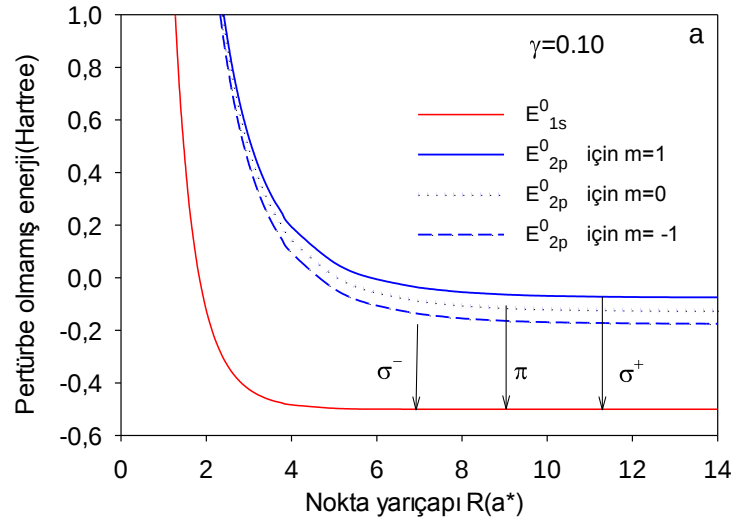
Dış pertürbasyonlar içerisindeki kuantum nokta yapıların enerji seviyelerinin incelenmesi onların fiziksel özelliklerinin anlaşılabilmesi açısından oldukça önem arz etmektedir. Elektrik ve manyetik alan gibi dış pertürbasyonların uygulanması kuantum nokta yapıların enerji seviyeleri hakkında oldukça değerli bilgiler ortaya çıkarmaktadır. Örneğin kuantum nokta yapılar bir dış manyetik alan uygulandığı zaman ilave bir sınırlandırma potansiyeli ortaya koyar ve aynı zamanda safsızlık enerji seviyelerinin simetrisini ve sistemin bağlanma enerjisindeki değişime neden olan dalga fonksiyonlarının yapısını değiştirir. Dış manyetik alanın enerji seviyeleri üzerindeki en belirgin etkisi s dışı seviyelerde yarılmalara neden olmasıdır. Bu durum enerji seviyelerinin m manyetik kuantum sayıları üzerindeki dejenereliğini de ortadan kaldırmış olur. Böylelikle enerji seviyeleri arasında Zeeman geçişleri gözlenebilir.

Bu çalışmada lineer Zeeman terimi Denk (5.3) ile verilen temel Hamiltoniye içerisinde ele alınmış olup kuadratik Zeeman terimi de pertürbasyon terimi olarak göz önüne alınmıştır. Pertürbasyon teriminin hesabında lineer Zeeman teriminin de içinde bulunduğu pertürbe olmamış özfonksiyonlar kullanılmıştır. Kuadratik terim pertürbasyon terimi olarak göz önüne alındığı için düşük manyetik alan değerlerinde (örneğin $\gamma=0.10, 0.15, 0.2$ ve 0.5 gibi) hesaplamalar yapılmıştır.

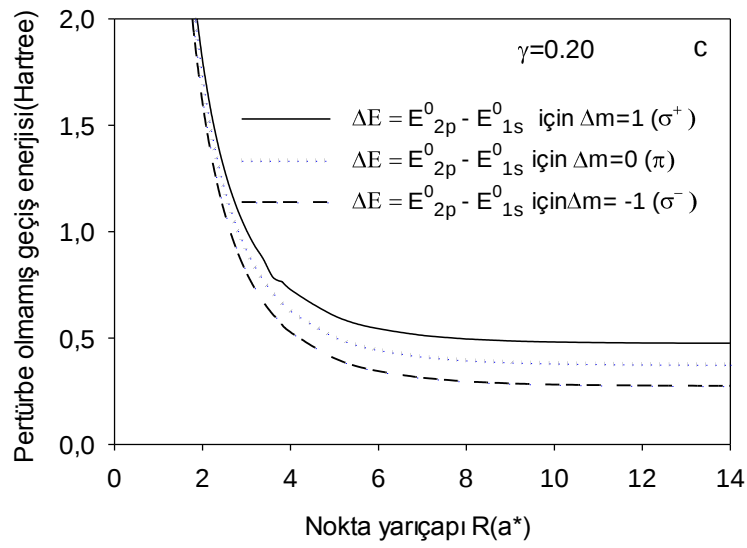
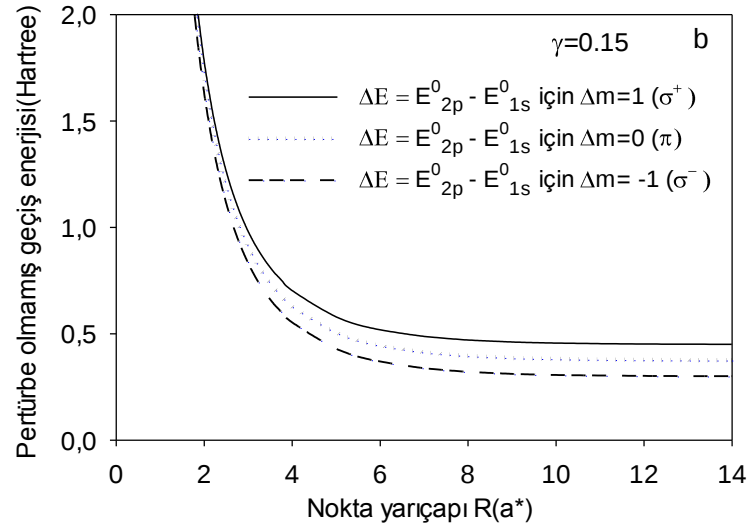
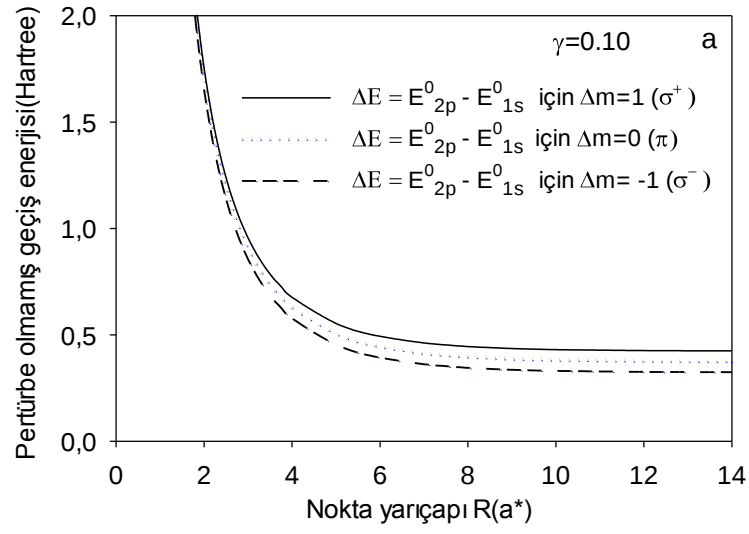
Zeeman enerji seviyeleri arasındaki elektrik dipol geişleri Zeeman geişleri olarak adlandırılır. Elektrik dipol geişleri $\Delta\ell=\pm 1$ ve $\Delta m=\pm 1,0$ seçim kuralları içerisinde gerekleşir. Geişlere karşılık gelen spektral çizgiler aynı zamanda kutuplanma (polarizasyon) etkilerini gösterir. Kutuplanmanın elektromanyetik alanın titreşim doğrultusunda olması gerekir. Elektrik dipol operatörü tek pariteli olduğu için izinli geişlerde $\Delta\ell=\pm 1$ olmalıdır. Bu durumda $\Delta m=0$ a karşılık gelen geiş π polarizasyon geişi olarak adlandırılır. Burada elektrik dipol vektörü z-ekseni boyunca lineer titreşim yapar. $\Delta m=+1(-1)$ durumuna karşılık gelen $\sigma^+(\sigma^-)$ geişlerde soğrulan yada yayılan ışık dairesel olarak kutuplanır. Bu durumda dipol vektörü (+) durum için saat yönünün tersi yönünde, (-) durum için saat yönünde z-ekseni etrafında xy düzleminde döner.

Şekil 7.3a, 7.3b ve 7.3c manyetik alan içerisindeki 1s ve 2p enerji seviyelerini göstermektedir. Şekilden de görüleceği gibi s seviyelerinde herhangi bir Zeeman yarılmaması gözlenmezken ($\ell=0$ olduğundan dolayı) p seviyesi 3 Zeeman enerji seviyesine yarılmıştır ($m=1,0,-1$). Bu şekil üzerinde $2p \rightarrow 1s$ Zeeman geişleri de gösterilmiştir. Şekilde görüleceği gibi 2p seviyesi $m=0$ enerji seviyesine göre simetrik bir yarıлма göstermektedir ve nokta yarıçapı artarken enerji seviyeleri azalmaktadır. Daha büyük nokta yarıçaplarında ise bu enerjilerin sabit enerji değerlerine gittiği görülmektedir. m değeri +1 den -1 e değışirken enerji seviyelerinin azaldığı görülmektedir. Bunun nedeni Denk 5.3 de verilen lineer Zeeman terimindeki m nin değerinden kaynaklanmaktadır. Şekil 7.3a, 7.3b, 7.3c’de görüleceği gibi manyetik alan artarken Zeeman seviyeleri arasındaki enerji farkı da artmaktadır. Bu durumda Zeeman enerji seviyeleri arasındaki σ^- polarizasyon geiş enerjisinin azaldığı, σ^+ polarizasyon geiş enerjisinin arttığı görülmüştür.

Şekil 7.4a, 7.4b ve 7.4c’de nokta yarıçapına baėlı olarak Zeeman geiş enerjileri gösterilmiştir. Burada da yine nokta yarıçapı artarken geiş enerjilerinin azaldığı görülmektedir. Çok büyük nokta yarıçaplarına giderken yarıłmanın sabit kaldığı görülmüştür.



Şekil 7.3. a.b.c. Nokta yarıçapının fonksiyonu olarak 1s ve 2p Zeeman enerji seviyeleri

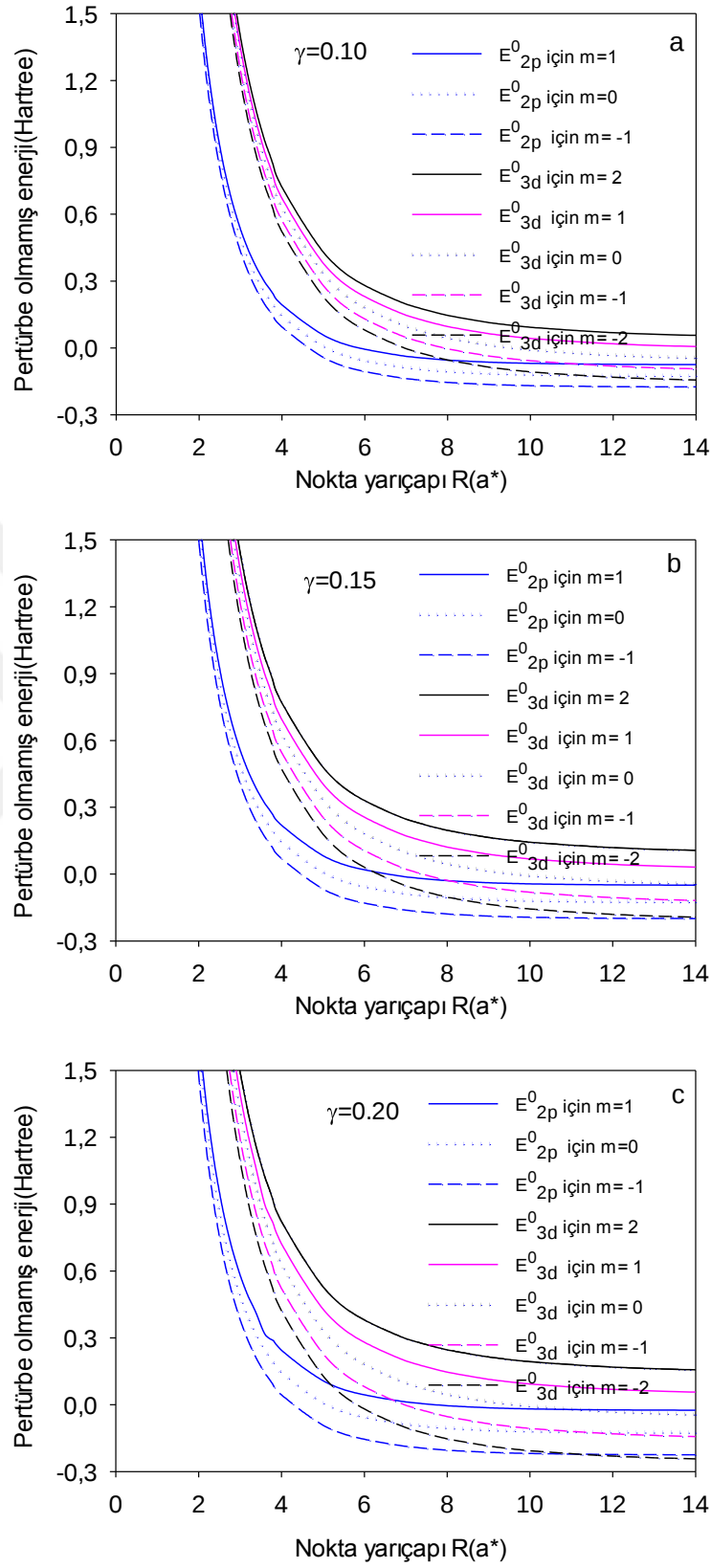


Şekil 7.4. a.b.c. Nokta yarıçapının fonksiyonu olarak 1s ve 2p Zeeman geçiş enerjileri

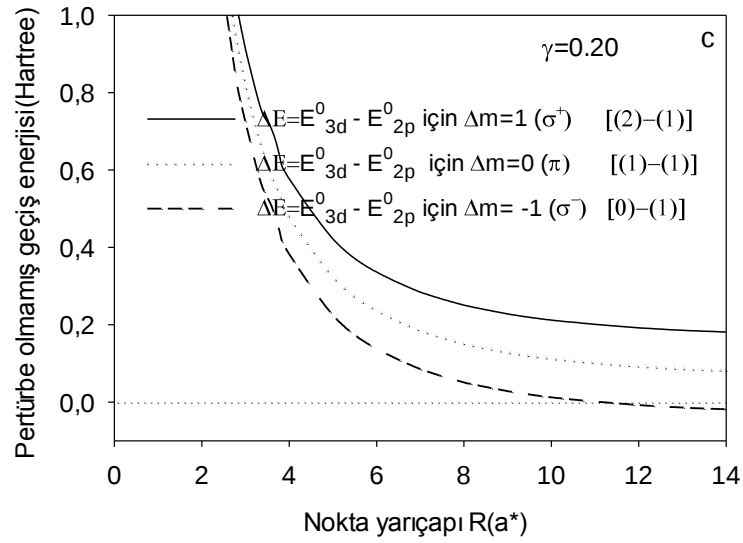
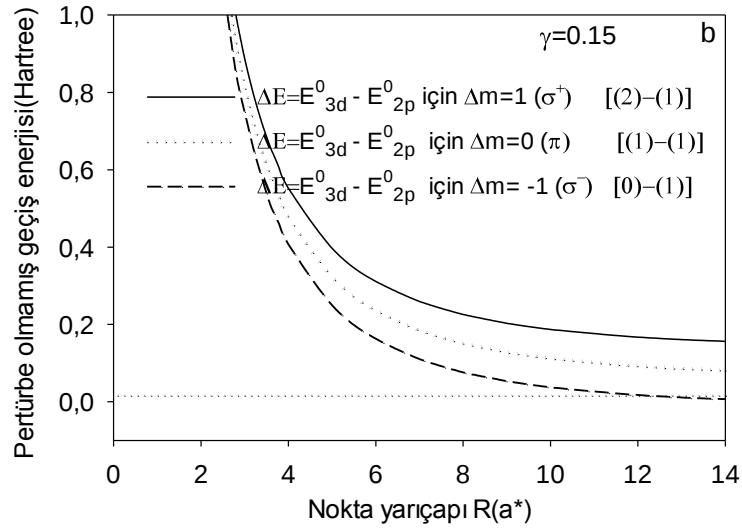
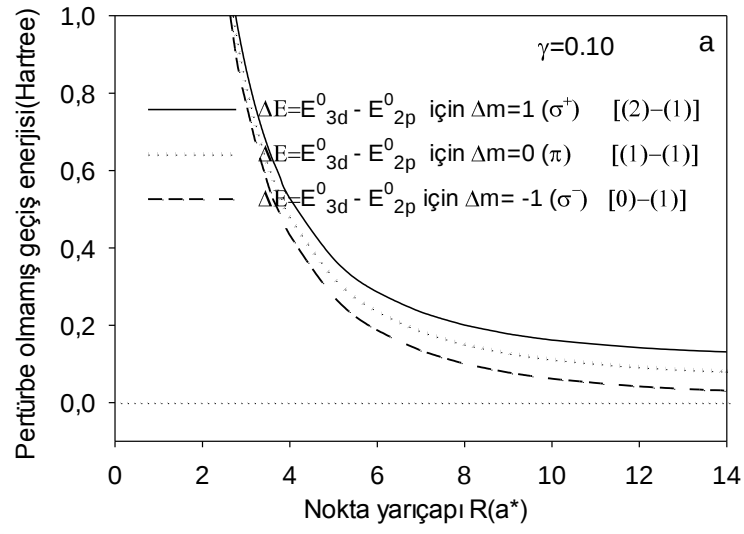
Şekil 7.5a, 7.5b ve 7.5c manyetik alanın 3 farklı değeri $\gamma = 0.1, 0.15$ ve 0.2 için 2p ve 3d Zeeman enerji seviyelerini göstermektedir. Şekilden de görüleceği gibi p seviyesi 3 Zeeman enerji seviyesine yarılrken ($m=1,0,-1$) d seviyesi de 5 enerji seviyesine yarılmıştır ($m=2,1,0,-1,-2$). Eğrilerden görüleceği gibi 2p ve 3d seviyeleri $m=0$ enerji seviyesine göre simetrik olarak yarılmalar göstermektedir. Kuantum nokta yarıçapı artarken Zeeman enerji seviyeleri azalmaktadır. Daha büyük nokta yarıçaplarında ise bu enerjilerin sabit enerji değerlerine gittiği görülmektedir. m 'in negatif değerleri için enerji seviyelerinin azaldığı görülmektedir. Bunun nedeni yukarıda da ifade edildiği gibi Denk. 5.3 de verilen lineer Zeeman terimindeki m den kaynaklanmaktadır. Şekil 7.5a, 7.5b ve 7.5c de görüleceği gibi manyetik alan artarken Zeeman seviyeleri arasındaki enerji farkı da artmaktadır.

Şekil 7.6a, 7.6b ve 7.6c'de nokta yarıçapına bağlı olarak 2p ve 3d seviyeleri arasında zeeman geçiş enerjileri gösterilmiştir. Burada da yine nokta yarıçapı artarken geçiş enerjilerinin azaldığı görülmektedir.

Şekil 7.3 ve 7.6'daki eğrilerden görüleceği üzere güçlü uzaysal sınırlandırılmış bölgede ($R < 1$) manyetik alanın enerji seviyeleri üzerinde çok zayıf bir etkisinin olduğu görülmüştür. Elektronun orta uzaysal sınırlandırma bölgesinde ($1 \leq R \leq 3$) ise s dışı seviyeler üzerinde manyetik alan etkileri görülmeye başlanmış ve böylece bu bölgede enerji seviyeleri birbirinden ayrılmaya başlamıştır. Elektronun zayıf uzaysal sınırlandırma bölgesinde ise ($R > 3$) manyetik alan etkisi enerji seviyeleri üzerinde çok açık net bir şekilde görülmektedir ve seviyelerin dejenereliği bu bölgede ortadan kalkmaktadır.

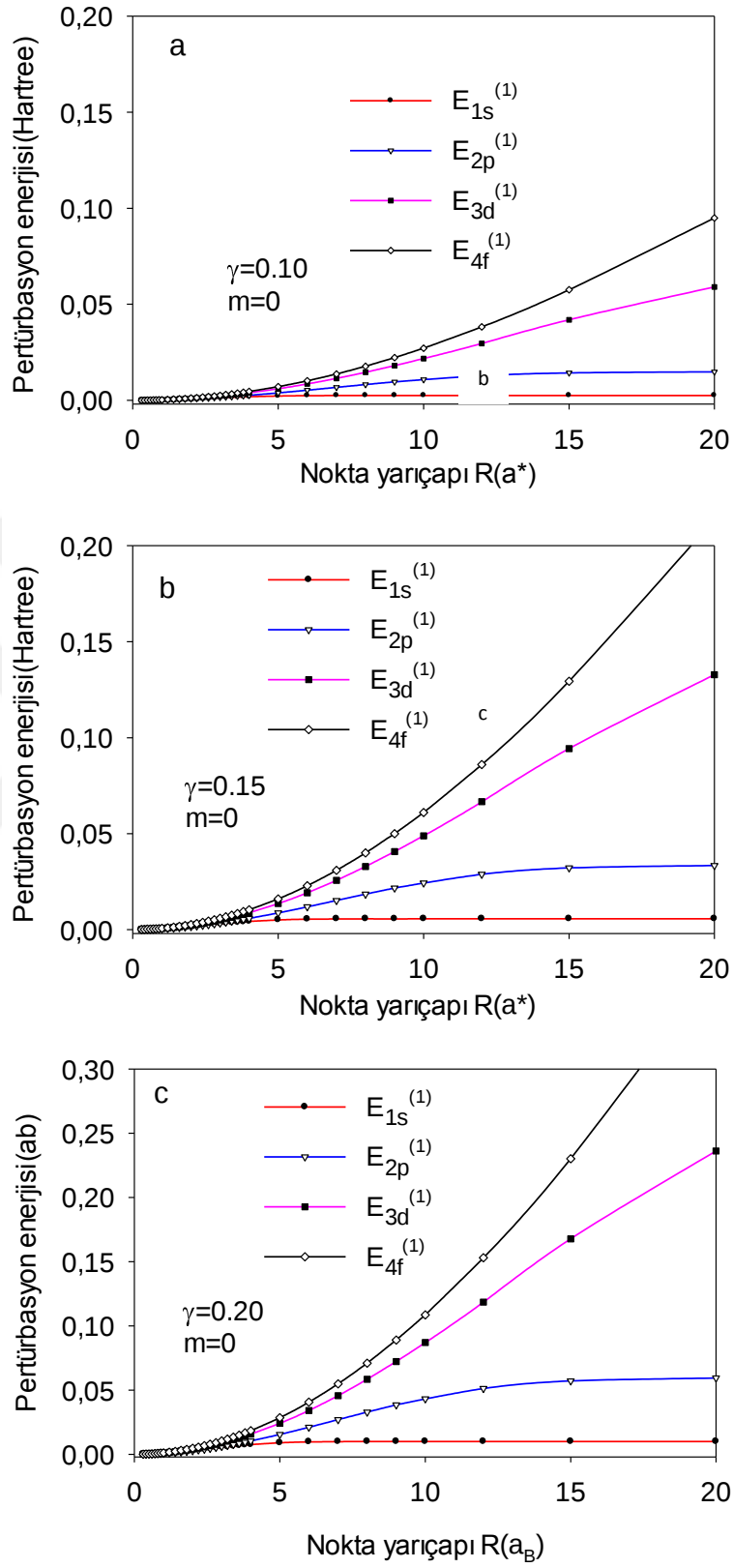


Şekil 7.5. a. b. c. Nokta yarıçapının fonksiyonu olarak 2p ve 3d Zeeman enerji seviyeleri.

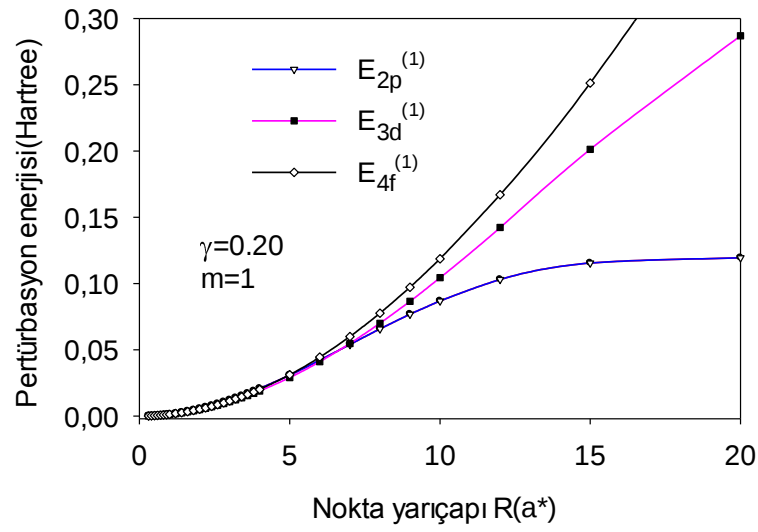
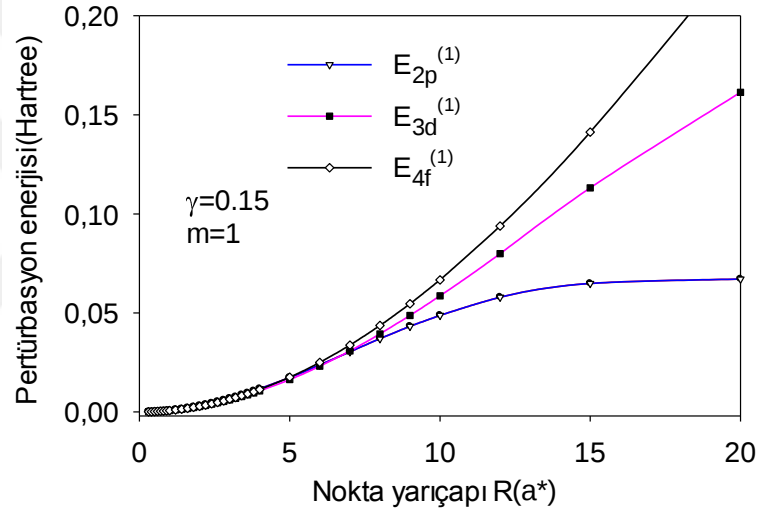
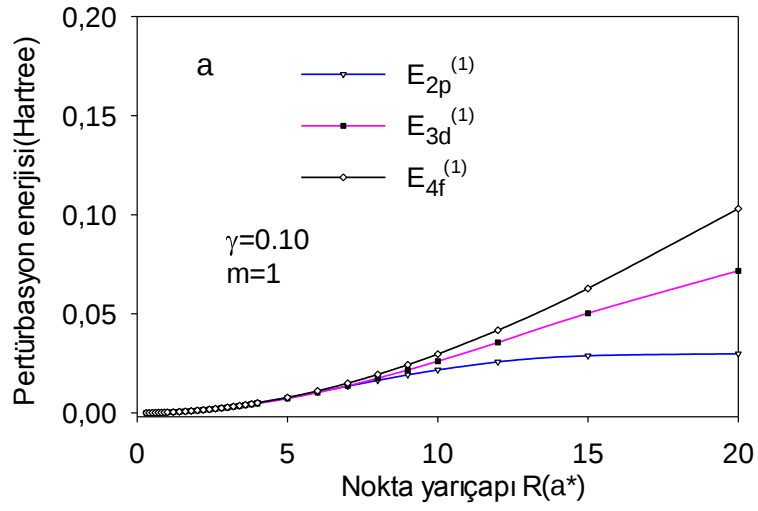


Şekil 7.6. a. b. c. Nokta yarıçapının fonksiyonu olarak 2p ve 3d Zeeman geçiş enerjileri.

Şekil 7.7 ve 7.8’de γ ’nın 3 farklı değeri için (0.10, 0.15 ve 0.20) 1s 2p 3d ve 4f seviyelerinin diyamanyetik (kuadratik) pertürbasyon enerjileri $m=0$ ve $m=1$ durumunda nokta yarıçapının fonksiyonu olarak çizilmiştir. Bu grafiklerden görüleceği gibi diyamanyetik (pertürbasyon) enerjileri hem nokta yarıçapı hem de manyetik alan artarken artmaktadır. Şekil 7.7’deki pertürbasyon enerji katkısı küçük nokta yarıçaplarında çok zayıftır. Nokta yarıçapının artmasıyla bu davranış değişir ve artmaya başlar. Pertürbasyon enerjisi kritik bir nokta yarıçapından sonra sabit bir değere gittiği görülmektedir. Bu durum 1s ve 2p orbitalleri için Şekil 7.7 ve 7.8’de açık olarak görülmektedir. Daha büyük nokta yarıçaplarına gidildiğinde yukarı 3d ve 4f seviyelerine ait eğrilerin de sabit değerlere gideceği söylenebilir. Bu limit değer elektronun hiçbir yerde sınırlandırılmadığı duruma karşılık gelir ve elektron coulomb etkileşimiyle safsızlığa bağlanmış olur. Kritik nokta yarıçapı açısız momentum ve daha sonra göz önüne alınan seviyenin uzaysal alanına bağlıdır ve ℓ ’nin artan değeri ile artmaktadır. Aynı zamanda pertürbasyon enerjisi de ℓ ’nin artan değeri ile artmaktadır. Bu durum daha büyük ℓ ’li seviyelerin dalga fonksiyonları daha büyük uzaysal mekâna sahip olduğu için diyamanyetik etkileşim enerjisinin de artmasıyla sonuçlanmaktadır şeklinde yorumlanabilir. Şekil 7.7 ve 7.8 karşılaştırılırsa $m=0$ durumundaki diyamanyetik pertürbasyon enerjilerinin $m=1$ durumundaki diyamanyetik pertürbasyon enerjilerinden daha küçük olduğu görülmektedir. Bu durumda xy düzleminde dalga fonksiyonlarının daha büyük uzaysal mekâna yayıldığı şeklinde yorumlanabilir.

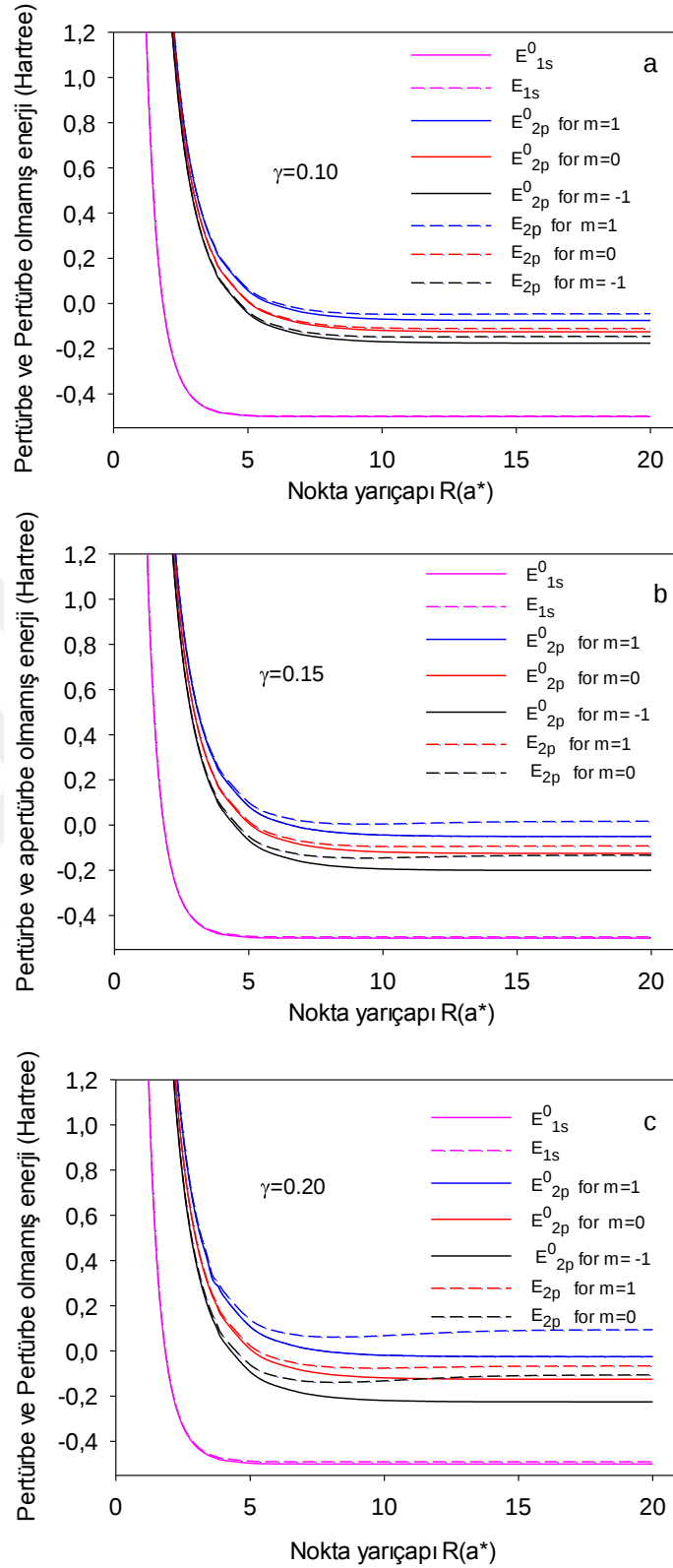


Şekil 7.7. a,b,c. γ nın 3 farklı değeri için 1s, 2p, 3d ve 4f seviyelerinin $m=0$ durumunda nokta yarıçapının fonksiyonu olarak pertürbasyon enerjileri



Şekil 7.8. a,b,c. γ nın 3 farklı değeri için 1s, 2p, 3d ve 4f seviyelerinin $m=1$ durumunda nokta yarıçapının fonksiyonu olarak pertürbasyon enerjileri

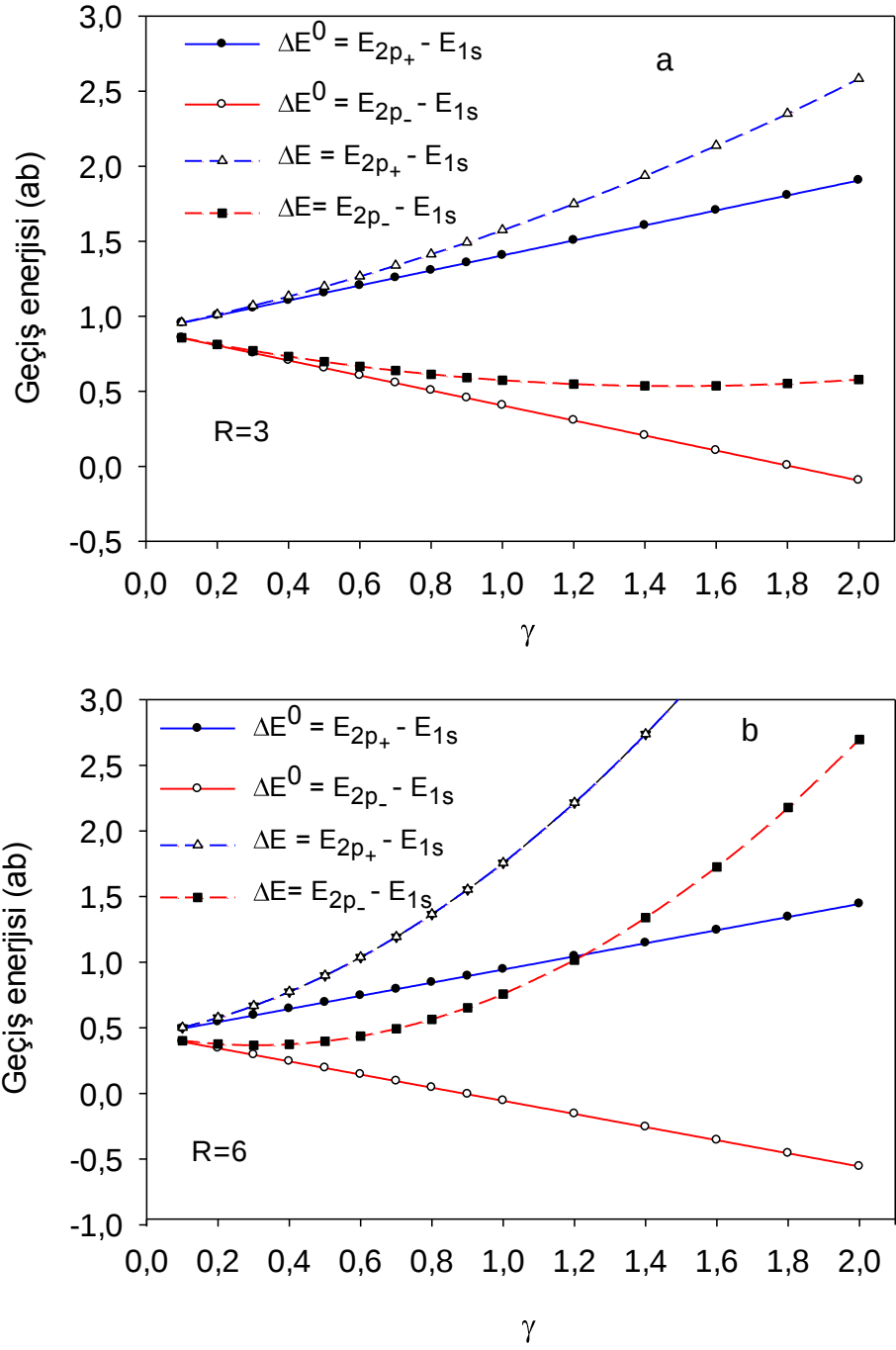
Şekil 7.9a, 7.9b ve 7.9c’de sonsuz potansiyel kuyusu içerisinde küresel kuantum nokta yapının 1s ve 2p Zeeman enerji seviyeleri nokta yarıçapının fonksiyonu olarak üç farklı manyetik alan değeri $\gamma = 0.1, 0.15$ ve 0.2 için çizilmiştir. Şekillerden görüleceği üzere s orbitallerinde herhangi bir yarıлма gözlenmezken p orbitali üç Zeeman enerji seviyesine yarılmaktadır. Burada düz çizgiler pertürbe olmamış (lineer Zeeman terimini içeren) enerji seviyelerini gösterirken, kesikli çizgiler lineer Zeeman terimi ile birlikte kuadratik Zeeman terimini de içeren pertürbe olmuş enerji seviyelerini göstermektedir. Şekilden görüleceği gibi küçük nokta yarıçaplarında manyetik alanın ve kuadratik terimin etkisinin olmadığı görülürken büyük nokta yarıçaplarında hem manyetik alanın hem de kuadratik terimin etkisi açık bir şekilde görülmektedir. Yani büyük nokta yarıçaplarında sistemin pertürbe olmuş enerjisi artmaktadır. Bu artışlarda $m=0$ olduğu seviyelerde lineer Zeeman terimi sıfır olup kuadratik terimden bir katkı gelmektedir. $m=\pm 1$ olduğu seviyelerde ise sistemin toplam enerjisine hem lineer Zeeman teriminden hem de kuadratik Zeeman teriminden katkılar gelmektedir. Böylece büyük nokta yarıçaplarında $m=\pm 1$ olduğu seviyelerdeki enerji değişimi $m=0$ olduğu seviyeye göre daha fazla olmaktadır. Küçük nokta yarıçaplarında ve küçük manyetik alan değerlerinde kuadratik terimden gelen katkı küçük olurken, büyük nokta yarıçaplarında buralardan gelen katkılar büyük olmaktadır. Yani kuadratik Zeeman terimi, sistemin toplam enerjisine bir güç yasası gibi katkıda bulunur.



Şekil 7.9. a.b.c. γ nın üç farklı değeri için nokta yarıçapının fonksiyonu olarak pertürbe olmuş ve olmamış 1s ve 2p enerji seviyeleri

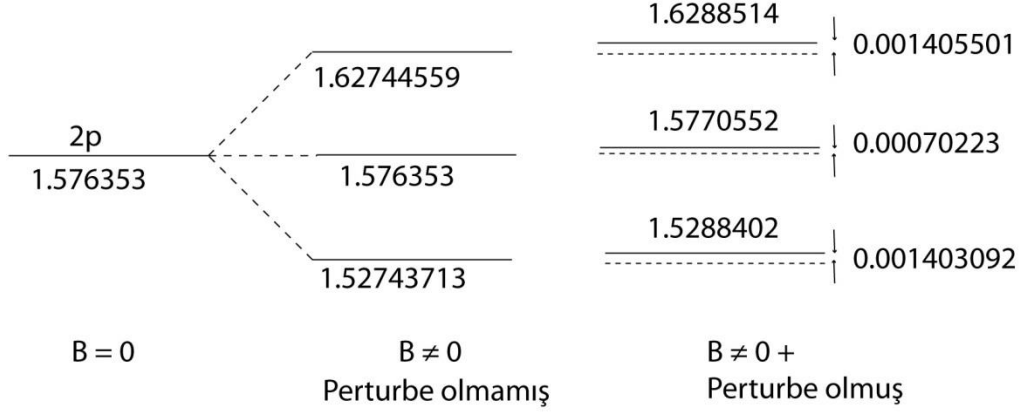
Şekil 7.10a ve 7.10b’de sonsuz potansiyel kuyusuna sahip küresel kuantum nokta yapıda pertürbe olmuş ΔE ve pertürbe olmamış ΔE^0 $2p \rightarrow 1s$ enerji seviyeleri arasında iki farklı nokta yarıçapında manyetik alanın fonksiyonu olarak Zeeman geçiş enerjileri gösterilmiştir. Burada kesikli çizgiler pertürbe olmuş (lineer Zeeman + kuadratik terim) enerji seviyelerini, düz çizgiler ise pertürbe olmamış (Lineer Zeeman terimi) enerji seviyelerini göstermektedir. $2p$ ’den $1s$ ’e olan ($2p \rightarrow 1s$) Zeeman geçişlerinde $\Delta m=0, \pm 1$ durumlarındaki geçişler gösterilmiştir. Şekillerden görüleceği gibi pertürbe olmamış Zeeman seviyelerinde manyetik alan artmasıyla $m=+1$ durumundaki enerji seviyesi lineer olarak artarken $m=-1$ durumundaki enerji seviyesi de lineer olarak azalmaktadır. Bunun nedeni Denk.(5.3)’de görüleceği gibi lineer Zeeman terimi $m=+1$ durumunda sistemin toplam enerjisine pozitif bir katkı getirirken (enerjiyi artırıyor) $m=-1$ durumunda ise sistemin toplam enerjisine negatif bir katkı getirmektedir. Böylece enerji lineer olarak azalmaktadır. Pertürbe olmuş enerji seviyelerinde; $m=+1$ durumundaki enerji seviyesi pozitif olarak artarken, $m=-1$ durumundaki enerji seviyesinde ise toplam enerji önce azalıyor bir minimum değere ulaştıktan sonra tekrar artmaya başlıyor. Bunun nedeni γ ve r ’nin büyük değerleri için kuadratik terim güç yasası gibi davranacağından sistemin toplam enerjisinde daha baskın olmasından dolayıdır. Buradan Zeeman geçişlerinde yayılan ışığın frekansının uygulanan manyetik alanın şiddetiyle ayarlanarak değişebileceği görülmektedir.

Şekil 7.11, 7.12 ve 7.13’de $2p$ enerji seviyeleri üzerinde $R=2, 4$ ve 10 kuantum nokta yarıçaplarında ve manyetik alanın $\gamma=0.1, 0.15, 0.20$ üç farklı değerinde paramanyetik ve diyamanyetik kaymaklar şematik olarak diyagram üzerinde gösterilmiştir.

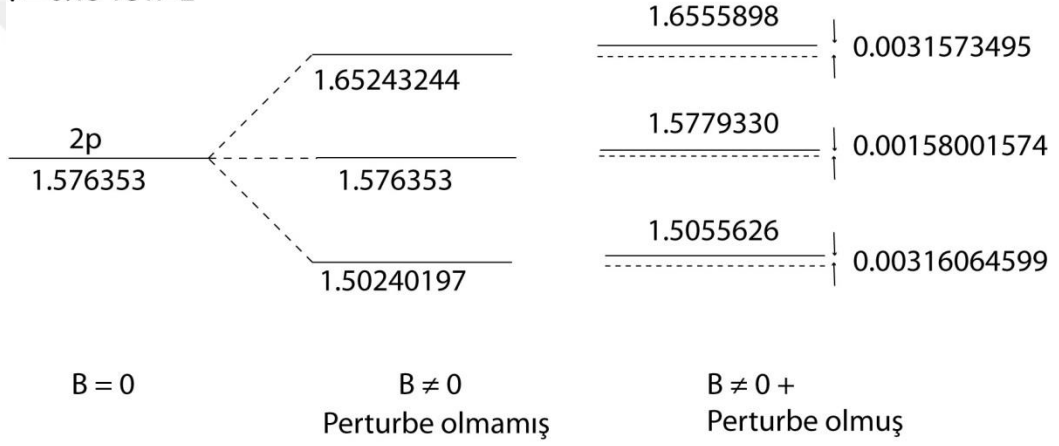


Şekil 7.10. a.b. Manyetik alanın fonksiyonu olarak R=3 ve R=6 için pertürbe olmuş ΔE ve pertürbe olmamış ΔE^0 2p ve 1s enerji seviyeleri arasındaki Zeeman geçiş enerjileri

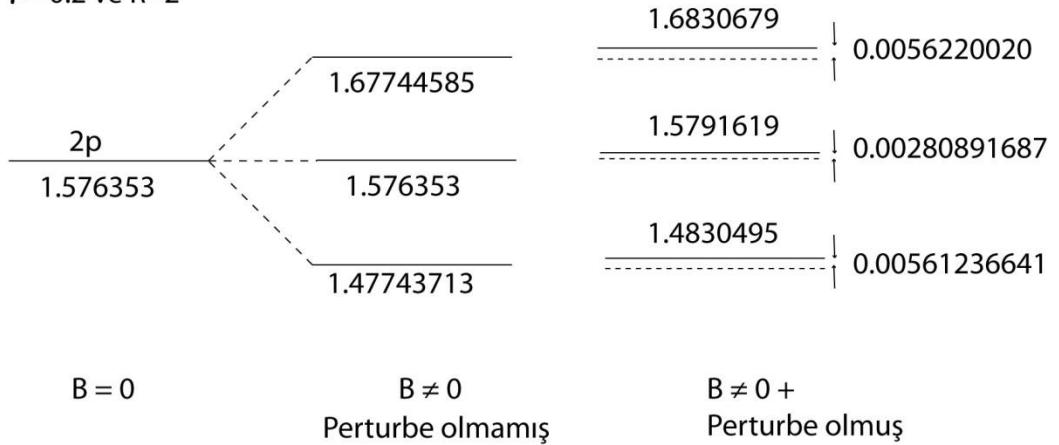
$\gamma = 0.1$ ve $R=2$



$\gamma = 0.15$ ve $R=2$

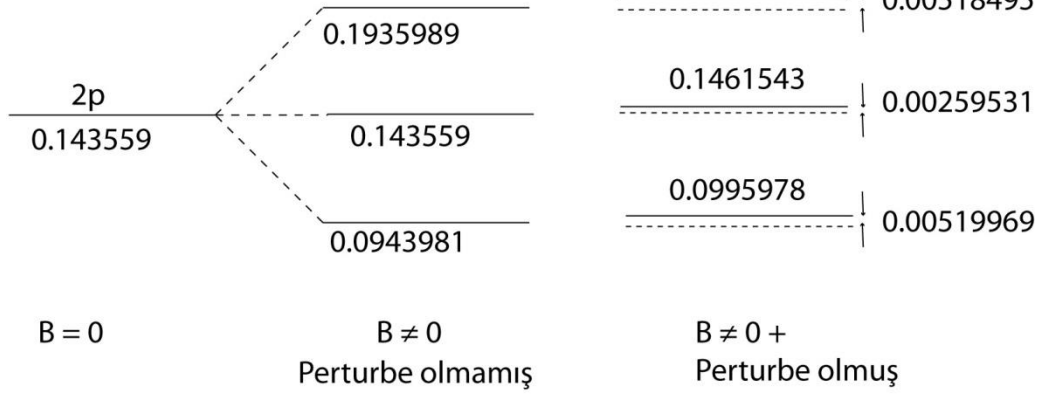


$\gamma = 0.2$ ve $R=2$

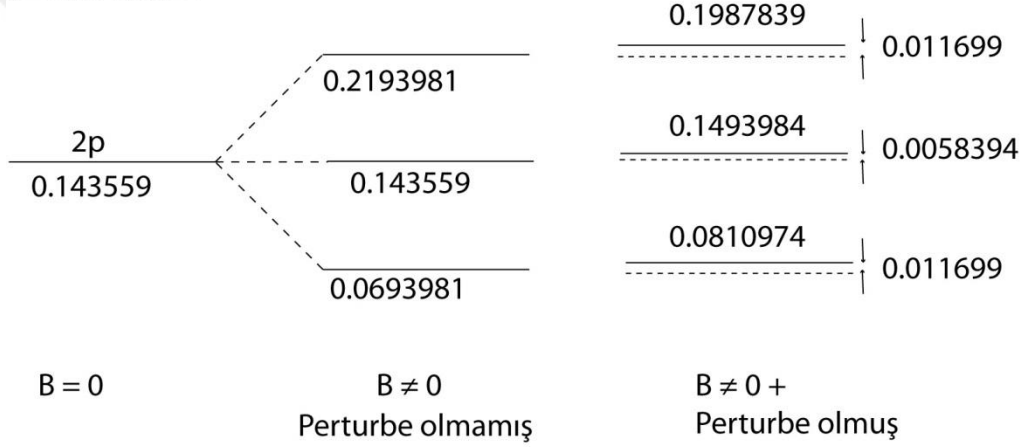


Şekil 7.11. $R=2$ nokta yarıçapında γ nın üç farklı değeri için 2p Zeeman enerji seviyesinde diamagnetik terimin etkisini gösteren diyagram.

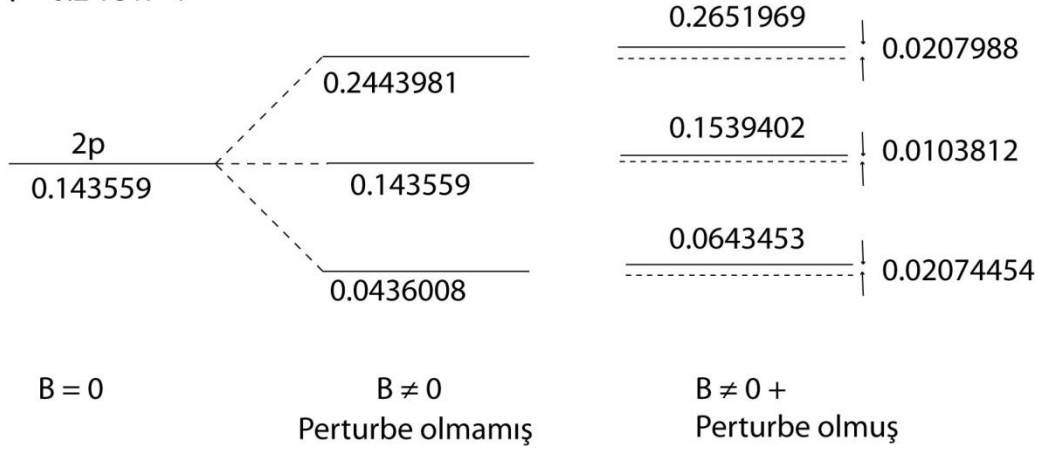
$\gamma = 0.1$ ve $R=4$



$\gamma = 0.15$ ve $R=4$

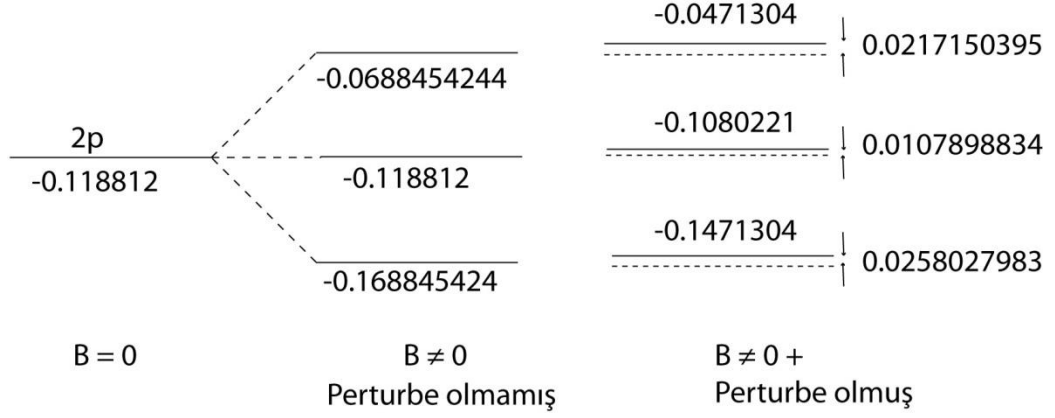


$\gamma = 0.2$ ve $R=4$

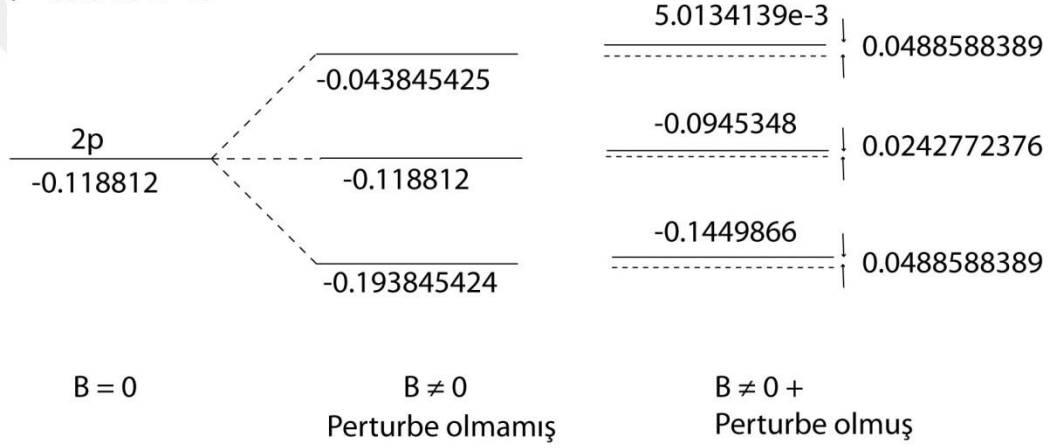


Şekil 7.12. $R=4$ nokta yarıçapında γ nın üç farklı değeri için 2p Zeeman enerji seviyesinde diamagnetik terimin etkisini gösteren diyagram

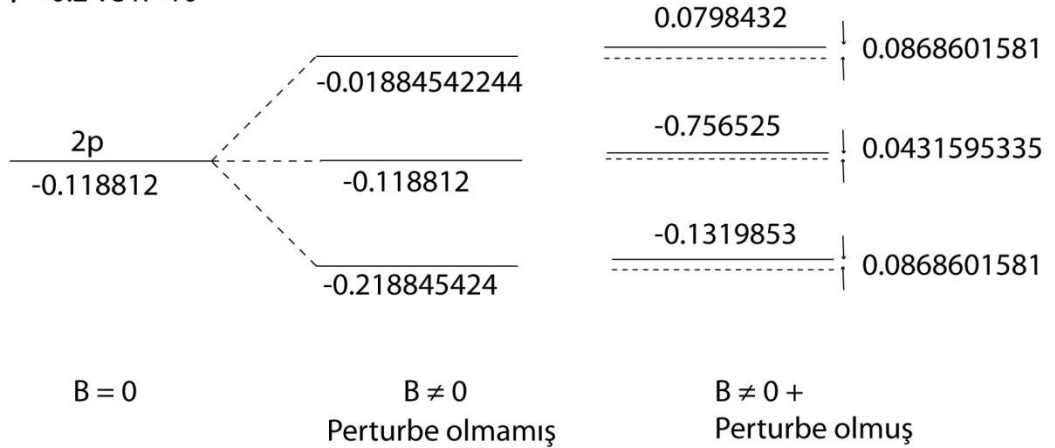
$\gamma = 0.1$ ve $R=10$



$\gamma = 0.15$ ve $R=10$

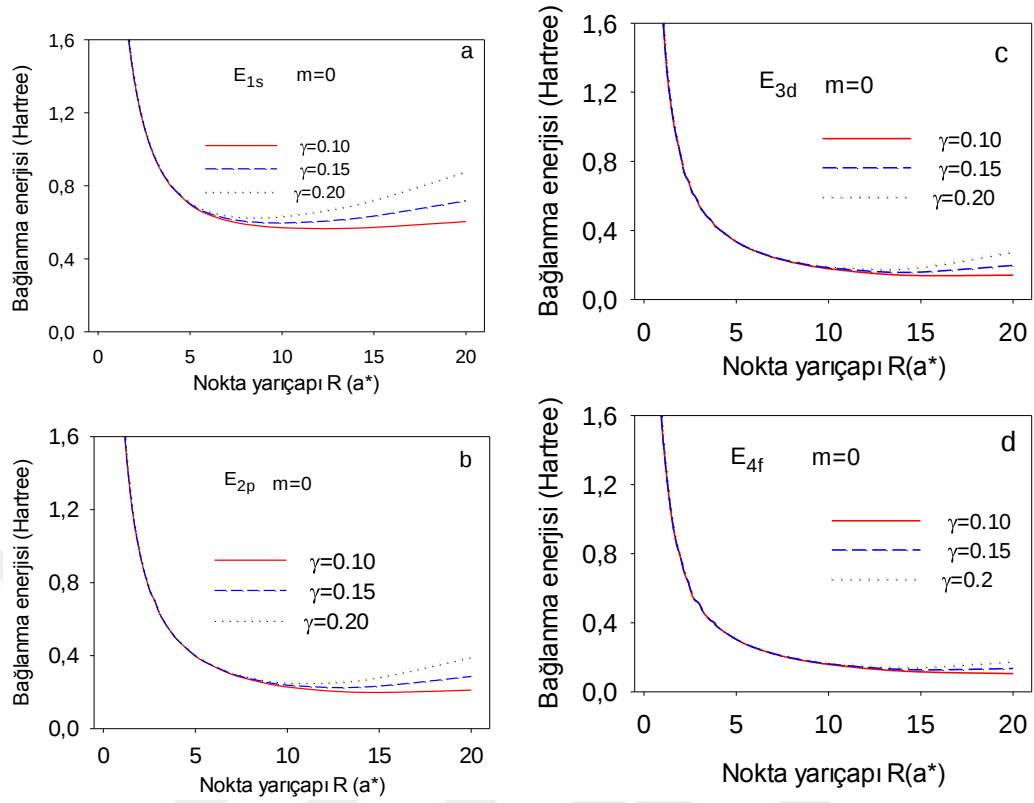


$\gamma = 0.2$ ve $R=10$



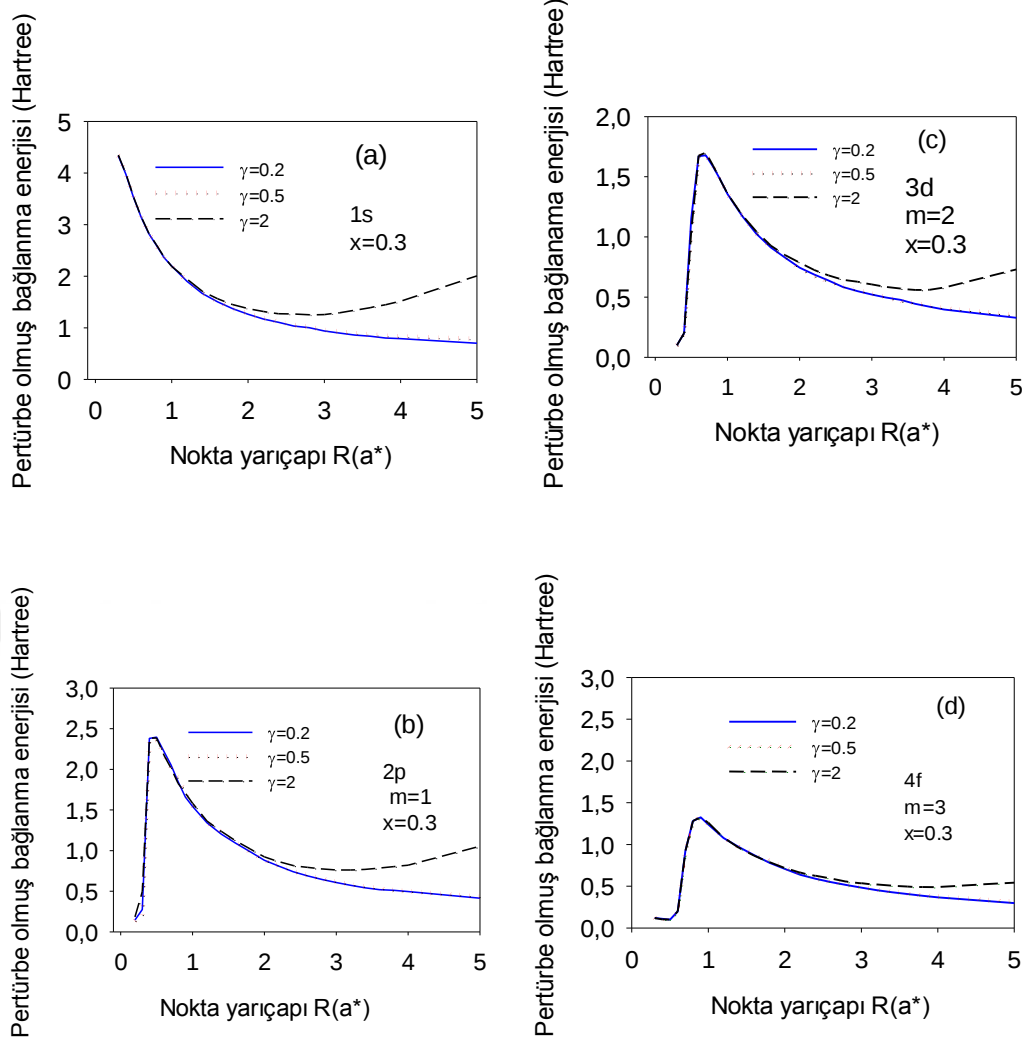
Şekil 7.13. $R=10$ nokta yarıçapında γ nın üç farklı değeri için 2p Zeeman enerji seviyesinde diamagnetik terimin etkisini gösteren diyagram.

Şekil 7.14a, 7.14b, 7.14c ve 7.14d’de sonsuz potansiyel kuyuya sahip kuantum nokta yapının bağlanma enerjileri üç farklı manyetik alan değeri için nokta yarıçapına bağlı olarak çizilmiştir. Şekillerden görüleceği gibi tüm seviyelerde nokta yarıçapı artarken bağlanma enerjisi önce monotonik olarak hızlı bir şekilde azalıyor ve bir minimum değere ulaştıktan sonra tekrar artmaya başlıyor. Küçük nokta yarıçaplarında (güçlü uzaysal sınırlandırmanın olduğu bölgelerde) çeşitli manyetik alan değerleri için bağlanma enerji seviyelerinde herhangi bir ayrışma görülmezken büyük nokta yarıçaplarına (zayıf uzaysal sınırlandırmanın olduğu bölgelere) doğru gidildikçe bağlanma enerji seviyeleri üzerinde manyetik alan etkisi açıkça görülmektedir. Yani büyük nokta yarıçaplarında manyetik alan artarken bağlanma enerjisi de artmaktadır. Bunun fiziksel nedeni şu şekilde açıklanabilir. Zayıf uzaysal sınırlandırmanın olduğu bölgelerde (büyük nokta yarıçaplarında) manyetik alan elektronun dalga fonksiyonunu bükerek ve elektronu safsızlığa daha yakın olmaya doğru iter. Yani elektronu safsızlığa yaklaştırır. Böylece elektron safsızlık arasındaki mesafe azalacağından dolayı elektronun bağlanma enerjisi tekrar artmaya başlar. Manyetik alanın değeri ne kadar çok artırılsa elektron büyük nokta yarıçaplarında manyetik alanın sınırlandırma etkisi daha fazla artar. Diğer taraftan eğrilerden görüleceği gibi yukarı seviyeler için büyük nokta yarıçaplarında bağlanma enerjilerinin daha yavaş arttığı görülmektedir. Küçük nokta yarıçaplarında yani güçlü sınırlandırma bölgesinde ($R < 1$) tüm seviyeler için elektronun uzaysal sınırlandırmasının manyetik alan sınırlandırmasından daha güçlü olduğu görülmektedir. Orta sınırlandırma bölgelerinde ($1 \leq R \leq 3$) ise uzaysal sınırlandırma ile manyetik sınırlandırma birbiri ile yarışırken zayıf sınırlandırma bölgesinde ($R > 3$) manyetik alan sınırlandırmasının bağlanma enerjisi üzerinde daha baskın olduğu görülmektedir. Bu durum ℓ ’si küçük olan orbitallerde (1s ve 2p) açık bir şekilde görülmektedir. Bağlanma enerji eğrilerinden görüleceği gibi nokta yarıçapının daha büyük değerlerinde manyetik alanın artışıyla bağlanma enerjilerinin de arttığı görülmektedir.



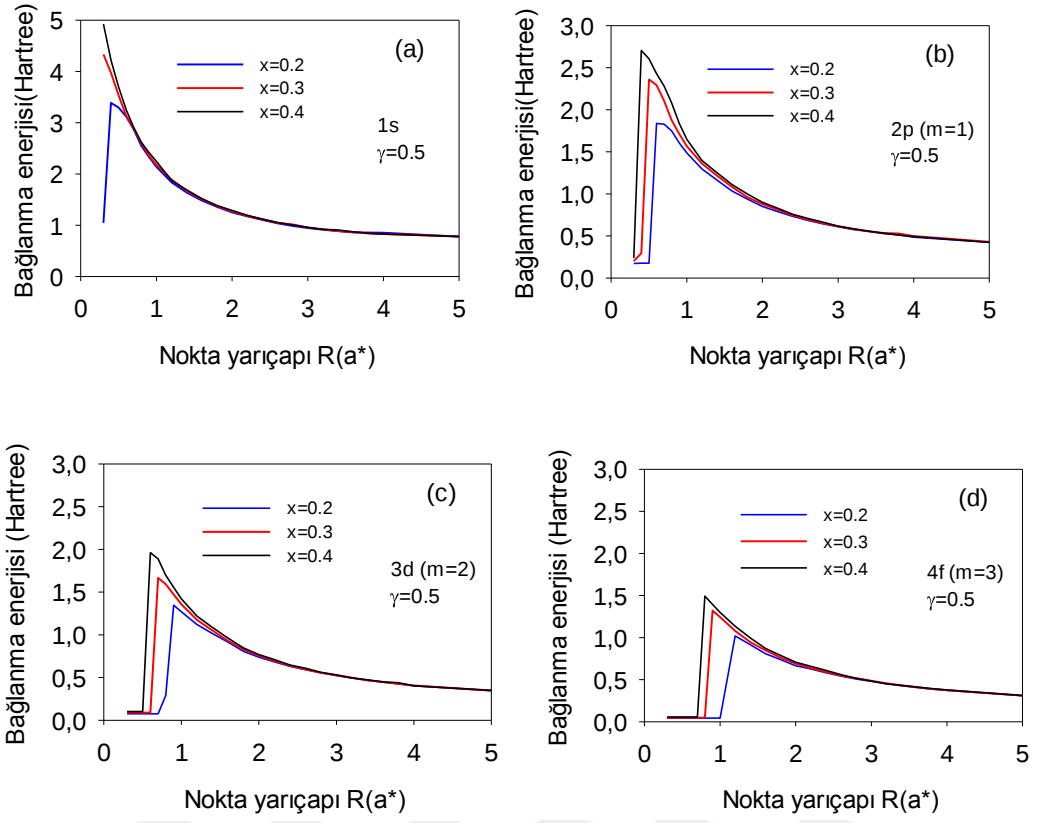
Şekil 7.14. a.b.c.d. γ nın üç farklı değeri için sonsuz sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum noktanın 1s,2p,3d ve 4f seviyelerinin bağlanma enerjileri

Şekil 7.15a, 7.15 b, 7.15c ve 7.15d’de sonlu sınırlandırıcı potansiyele sahip küresel kuantum nokta yapının manyetik alan içerisindeki 1s, 2p, 3d ve 4f seviyelerinin bağlanma enerjileri ($E_B = E_{(Z=0)} - E_{(Z)}$) çizilmiştir. Şekillerden görüleceği gibi nokta yarıçapı azalırken tüm seviyelerin bağlanma enerjileri monotonik olarak artmaktadır ve bir maksimum değere ulaştıktan sonra hızlı bir şekilde düşmektedir. Nokta yarıçapının daha büyük değerlerine gidildiğinde (zayıf sınırlandırıcı bölge) bağlanma enerjilerinin tekrar arttığı görülmektedir. Bunun fiziksel nedeni yukarıda açıklanmıştır. Manyetik alan değerleri artırılırken büyük nokta yarıçaplarında bağlanma enerjisinin arttığı görülmektedir. Bunun nedeni Denklem (5.3)’te görüleceği gibi pertürbasyon enerjisi r^2 ve γ^2 ile orantılı olmasından dolayı hem büyük nokta yarıçaplarında hem de büyük manyetik alan değerlerinde güç yasası gibi davranmasından kaynaklanmaktadır. Böylece pertürbasyon enerjisi sistemin toplam enerjisi üzerinde büyük nokta yarıçaplarında daha baskın olduğu görülmektedir.



Şekil 7.15. a.b.c.d. γ nın üç farklı değeri için sonlu sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum noktanın 1s,2p,3d ve 4f seviyelerinin bağlanma enerjileri

Şekil 7.16a, 7.16b, 7.16c ve 7.16d’de görüleceği gibi sabit bir x değeri için yine nokta yarıçapı azalırken bağlanma enerjilerinin arttığı görülüyor ve bir maksimuma ulaştıktan sonra tekrar düşüyor. Bağlanma enerji eğrilerinde görüleceği gibi küçük nokta yarıçaplarında sınırlandırma potansiyelinin etkisi açık bir şekilde görülmektedir. Katkılanma oranı (veya alüminyum konsantrasyonu) x ’in değerleri artarken sınırlandırma potansiyelinin değeri de artmaktadır. Buna bağlı olarak bağlanma enerjisi de artmaktadır. Yani sınırlandırma potansiyeli artarken bağlanma enerjilerinin maksimumları daha küçük nokta yarıçaplarına doğru kaydığı görülmektedir. bu durumda bize sınırlandırma potansiyeli artarken daha küçük nokta yarıçaplarında sistemin daha kararlı olduğunu göstermektedir.



Şekil 7.16. a.b.c.d. x 'in üç farklı değeri için sonlu sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum noktanın 1s,2p,3d ve 4f seviyelerinin bağlanma enerjileri.

8. SONUÇ VE ÖNERİLER

Sonsuz ve sonlu küresel sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının taban durum ve çeşitli uyarılmış seviyelerine ait enerji grafikleri nokta yarıçapına bağlı olarak çizildi. Bu grafiklerden nokta yarıçapı arttıkça enerji değerlerinin azaldığı görüldü. Aynı zamanda bu grafiklerde daha büyük nokta yarıçaplara gidildikçe sistem atom modeline benzeyeceğinden enerji değerleri hidrojen atomunun enerji değerlerine gittiği görülmüştür. Ayrıca bu grafiklerde sonlu küresel sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının enerji seviyeleri üzerinde kuyu derinliğinin sınırlandırma etkisi açık olarak görülmektedir.

Dış manyetik alan içindeki sonsuz sınırlandırıcı potansiyele sahip küresel kuantum nokta yapının Zeeman enerji seviyelerinin ve Zeeman geçiş enerjilerinin grafikleri nokta yarıçapının fonksiyonu olarak çizilmiştir. Bu grafiklerde s seviyesinde herhangi bir yarılmaya gözlemlenmezken ($\ell=0$ olduğundan) p seviyesi 3, d seviyesi 5 Zeeman enerjisine yarıldığı görülmüştür. Ayrıca nokta yarıçapı artarken enerji seviyelerinin azaldığı ve daha büyük nokta yarıçaplarında sabit bir değere gittiği görülmüştür. Aynı zamanda grafiklerde manyetik alan artarken Zeeman seviyeleri arasındaki enerji farkının arttığı görülmüştür. Yine nokta yarıçapı artarken Zeeman geçiş enerjilerinin azaldığı ve çok büyük nokta yarıçaplarına giderken yarılmamanın sabit kaldığı görülmüştür.

Manyetik alanın farklı değerleri için taban durum ve çeşitli uyarılmış seviyelerin pertürbasyon enerjileri $m=0$ ve $m=1$ durumunda nokta yarıçapının fonksiyonu olarak çizilmiştir. Grafiklerden pertürbasyon enerjilerinin hem nokta yarıçapı hem de manyetik alan artarken arttığı görülmüştür. Pertürbasyon enerjilerinin kritik bir nokta yarıçapından sonra sabit bir değere gittiği görülmektedir. Bu limit değeri elektronun hiçbir yerde sınırlandırılmadığı duruma karşılık gelmektedir. Ayrıca grafiklerde $m=0$ durumundaki pertürbasyon enerjilerinin $m=1$ durumundaki pertürbasyon enerjilerinden daha küçük olduğu görülmektedir. Bu durumda xy düzleminde dalga fonksiyonlarının daha büyük uzaysal mekana yayıldığı şeklinde yorumlanabilir.

Manyetik alanın farklı değerleri için sonsuz potansiyel kuyuya sahip kuantum nokta yapının bağlanma enerjilerinin grafikleri nokta yarıçapına bağlı olarak çizilmiştir. Grafiklerde nokta yarıçapı artarken bağlanma enerjilerinin önce monotonik olarak hızlı bir şekilde azaldığı ve bir minimum değere ulaştıktan sonra tekrar artmaya

başladığı görülmüştür. Ayrıca büyük nokta yarıçaplarında yani zayıf uzaysal sınırlandırmanın olduğu bölgelerde manyetik alanın artışıyla bağlanma enerjilerinin arttığı görülmektedir. Çünkü bu bölgelerde manyetik alan elektronun dalga fonksiyonunu büzer ve elektronu safsızlığa doğru iter. Böylece elektron safsızlığa yaklaşmış olur ve bağlanma enerjisi tekrar artar.

Manyetik alan içerisindeki sonlu sınırlandırıcı potansiyele sahip küresel kuantum nokta yapının taban durum ve çeşitli uyarılmış seviyelerinin bağlanma enerjileri nokta yarıçapının fonksiyonu olarak çizilmiştir. Grafiklerden nokta yarıçapı azalırken tüm seviyelerin bağlanma enerjilerinin monotonik olarak arttığı ve bir maksimum değere ulaştıktan sonra hızlı bir şekilde düştüğü görülmektedir. Manyetik alan değeri arttıkça ve büyük nokta yarıçaplarında bağlanma enerjisinin arttığı görülmektedir. Çünkü pertürbasyon enerjisi bu durumlarda bir güç yasası gibi davranıp sistemin toplam enerjisi üzerinde daha baskın olur.

Sonlu sınırlandırıcı potansiyele sahip küresel kuantum nokta yapının taban durum ve çeşitli uyarılmış seviyelerinin bağlanma enerjileri farklı alüminyum katkı oranı değerleri için nokta yarıçapına bağlı olarak çizilmiştir. Grafiklerde nokta yarıçapı azalırken bağlanma enerjilerinin arttığı ne bir maksimuma ulaştıktan sonra tekrar düştüğü görülüyor. Ayrıca bu grafiklerde küçük nokta yarıçaplarında sınırlandırma potansiyelinin bağlanma enerjileri üzerindeki etkisi açık bir şekilde görülüyor. Katkı oranının değeri artarken sınırlandırma potansiyeli buna bağlı olarak da bağlanma enerjileri artmaktadır. Yani sınırlandırıcı potansiyel artarken daha küçük nokta yarıçaplarında sistemin daha kararlı olduğu görülüyor.

KAYNAKLAR

- Adachi, S., 1994. GaAs and Relati Materials, World Scientific, Singapore.
- An, X. T. ve Liu, J.J., 2006. Hydrogenic impurities in parabolic quantum-well wires in a magnetic field, Journal of Applied Physics, 99:123713.
- Anderson, R. L., 1962. Experiments on Ge-GaAs heterojunctions. Solid-State Electron, 5:341-344.
- Arfken, G., 1985. Mathematical methods for physics, Third Edition. Acedemic Press Inc, Orlando.
- Bardeen, J. ve Brattain, W.H., 1948. The transistor, a semi-conductor triode, Physical Review, 74:230-231.
- Bose C. ve Sarkar C.K., 1998. Effect of a parabolic potential on the impurity binding energy in spherical quantum dots, Physica B 253:238-241.
- Clementi, E. ve Raimondi D.L., 1963. Atomic screening constants from SCF functions. Journal of Chemical Physics. 38:2686.
- Clementi, E. ve Raimondi D.L., 1967. Atomic screening constants from SCF functions. II. Atoms with 37 to 86 elements. J.Chem. Phys., 47:1300.
- Coley, D.A., 2001, An introduction to genetic algorithms for scientists and engineers, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd. Singapore.
- Condon, E. U. ve Shortly, G. H., 1970. The theory of atomic spectra. Cambridge University.
- Çakır, B., 2007. Çok elektronlu kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerinin incelenmesi, Doktora Tezi, Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya.
- Çakır, B., Özmen, A., Atav, Ü., Yüksel, H. ve Yakar, Y., 2007. Investigation of electronic structure of a quantum dot using slater-type orbitals and quantum genetic algorithm, International Journal of Modern Physics C 18:61.
- Çakır, B., Özmen, A., Atav, Ü., Yüksel, H. ve Yakar, Y., 2008. Calculation of the electronic structure of a spherical quantum dot using a combination of quantum genetic algorithm and Hartree-Fock Roothaan method, International Journal of Modern Physics C 19:599.
- Çakır, B., Yakar, Y. ve Özmen, A., 2015. Linear and nonlinear optical absorption coefficients of two-electron spherical quantum dot with parabolic potential, Physica B: Physics of Condensed Matter 458:138.
- Çakır, B., Atav, Ü., Yakar, Y. ve Özmen, A., 2016. Calculation of zeeman splitting and zeeman transition energies of spherical quantum dot in uniform magnetic field, Chemical Physics, 475:61.
- Çakır, B., Özmen, A. ve Yakar, Y., 2016. Computation of hyperfine energies of hydrogen, deuterium and tritium quantum dots, Physica B: Physics of Condensed Matter 481:32.
- Çakır, B., Yakar, Y. ve Özmen, A., 2017. Investigation oj magnetic field effects on binding energies in spherical quantum dot with finite confinement potential, Chemical Physics Letters 684:250.

- Çakır, B., Yakar, Y.ve Özmen, A., 2017. Linear and nonlinear absorption coefficients of spherical quantum dot inside external magnetic field, *Physica B: Physics of Condensed Matter* 510:86.
- Demel, T., Heitmann, D., Grambow, P. ve Ploog, G., 1990. Nonocal dynamic response and level crossing in quantum dot structures, *Physical Review Letters*, 64:788-791.
- Drexler, K., 1990. Canlı motorlar, Furth Estate, London, pp. 296.
- Ekimov, A.I., Efros, A.L. ve Onushchenko, A.A., 1985. Quantum size effect in semiconductor microcrystals, *Solid State Communication*, 56:921-924.
- Gasiorowicz, S., 1996. *Quantum Physics*. Second Edition, John Wiley and Sons, New York.
- Ghazi, H., Jorio, A. ve Zorkani, I., 2013. Magnetic field-dependent of binding energy in GaN/InGaN/GaN spherical QDQW nanoparticles, *Physics, B*. 427:106.
- Goldberg, D.E., 1999, *Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning*, Addison Wesley Longman, Inc.USA, Press, Cambridge.
- Grigorenko I. ve Garcia M. E., 2002. Calculation of the partition function using quantum genetic algorithms, *Physica A*, 313:463-470.
- Grundmann, M., Stier, O. ve Bimberg, D., 1995. InAs/GaAs Pyramidal quantum dots: strain distribution, on optical phonons and electronics structure, *Physical Review B*, 52:11969-11981.
- Guillemin, J. V. ve Zener, C., 1930. Über eine einfache eigenfuction für den grundzustand des Li- atoms und der ionen mit drei electron. *Z. Physic*, 61:199.
- Guseinov, I.I., 1995. On the evaluation of multielectron molecular integrals over Slater-type orbitals using binomial coefficients, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM* 336:17-20.
- Guseinov, I.I., Özmen, A., Atav, Ü. ve Yüksel, H., 1995. Computation of clebschgordon and gaunt coefficients using binomial coefficients, *Journal of Computainal Physics*, 122:343-347.
- Hall, R. N., Fenner, G. E., Kingsley, J. D., Soltys, T. J. ve Carlson, R. O., 1962. Coherent light elemission from GaAs junctions, *Physical Review Letters*, 58:2586-2589.
- Jacak, L., 2000. Semiconductor quantum dots-towards a new generation of semiconductor devices, *European Journal of Physics*, 21:487-497.
- Jacak, L., Hawrylak, P. ve Wojs, A., 1998. *Quantum dots*, Springer Verlag, Berlin, Hiedelberg.
- Mandal, A., Sarkar, S., Ghosh, A. P. ve Ghosh, M., 2015. Analyzing total optical absorption coefficient of impurity doped quantum dots in presence of noise with special emphasis on electric field, magnetic field and confinement potential. *Chemical Physics*, 463:149-158.
- Marin J.L. ve Cruz. S.A.,1991. Enclosed quantum systems: use of the direct variational method, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.*, 24:2899.
- Messiah, A., 1961. *Quantum mechanics* (North-Holland, Amsterdam) appendix BIV.

- Niculescu, E. C. ve Bejean, D., 2015. Nonlinear optical properties of GaAs pyramidal quantum dots: Effects of elliptically polarized radiation, impurity, and magnetic applied fields, *Physics*, E. 74:51-58.
- Özmen, A., Yakar, Y., Çakır, B. ve Atav, Ü., 2009. Computation of the oscillator strength and absorption coefficients for the intersubband transitions of the spherical quantum dot., *Optics Communications*, 282:3999.
- Pauling, L. ve Wilson, E.B., 1935. Introduction to quantum mechanics with applications to Chemistry. New York: McGraw-Hill.
- Peter, A. J., Gnanasekar, K. ve Navaneethakrishnan, K., 2005. Binding energy of impurity states in a parabolic quantum dot in a strong magnetic field, *Physica Status Solutions(b)* 242:2480.
- Petroff, P.M. ve Denbaars, S.P., 1994. MBE and MOCVD growth and properties of self-assembling quantum dot arrays in III-V semiconductor structures, *Superlattices and Microstructures*, 15:15-21.
- Pople, J.A. ve Nesbet, R.K., 1954. Self-consistent orbitals for radicals. *J.Chem.Phys.*, 22:571.
- Raymond, S., Fafard, S., Poole P.J., Wojs, A., Hawrylak, P. ve Charbonneau, S., 1996. State filling and time-resolved photoluminescence of excited state in $\text{In}_x\text{Ga}_{12-x}\text{As}/\text{GaAs}$ self-assembled quantum dot, *Physical Review B*, 54:11548-11554.
- Reed, M.A., 1993. Quantum dots, *Scientific American*, 268:118-123.
- Reed, M.A., Bate, R.T., Bradshaw, K., Duncan, W. M., Frensley, W.M., Lee, J.W. ve Smith, H.D., 1986. Spatial quantization in GaAs-AlGaAs multiple quantum dots, *Journal of Vacuum Science & Technology*, B 4:358-360.
- Reed, M.A., Hornbeck, E.S., Deshpande, M.R., Wheeler, R.G., Bowen, R.C., Randal J.N. ve Frensley, W.R., 1993, "Quantum Dots," *Scientific American*, Vol. 268, No. 1, 1993, pp. 118-123. doi:10.1038/scientificamerican0193-118.
- Roothaan, C.C.J., 1951. New developments in molecular orbital theory, *Review of Modern Physics*, 23: 69.
- Roothaan, C.C.J., 1960. Self-consistent field theory for open shells of electronic systems. *Review of Modern Physics.*, 32:179.
- Rose, M.E., 1957. Elementary theory of angular momentum; John Wiley& Sons Inc. Chapter 4. New York.
- Seddik, A. D. ve Zorkani, I., 2005. Optical properties of a magneto-donor in a quantum dot, *Physica E.*, 28:339.
- Shockleey, W., 1949. *Bell System, Technical Journal*, 28:435.
- Slater, J.C., 1930. Atomic shilding constants, *Physics Review B*, 36:57-64.
- Smith, T.P., Lee, K.Y., Knoedler, C.M., ve Kern, D.P., 1988. Electronic spectroscopy of zero-dimensionals systems, *Physical Review B*, 38:2172-2175.
- Smith, W., 1873. Art Education, Scholastic and Industrial, *Journal society telegraph engineers.*, 2:31.

- Wu S. ve Wan L., 2012. Electronic structures in a CdSe spherical quantum dot in a magnetic field: Diagonalization method and variational method, *Journal of Applied Physics J. Appl. Phys.*, 111:063711 1-10.
- Xiao, Z., Zhu, J. ve He, F., 1996, Magnetic field dependence of the binding energy of a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot. *Journal of Applied Physics*, 79:9181.
- Yakar, Y., 2002. Bazı atomların aşırı ince yapı çiftlenim sabitlerinin hesaplanması, Doktora Tezi, Selçuk Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya.
- Yakar, Y., Özmen, A. ve Atav, Ü., 2006. Evaluation of two-center one- and two-electron integrals over slater type orbitals. *Chinese Journal of Chemistry*, 24:603-608.
- Yakar, Y., Özmen, A., Çakır, B. ve Yüksel, H., 2007. Computation of rotation matrices making lined-up to the local cartesian coordinates. *Journal of Chinese Chemical Society*, 54:1139-1144.
- Yakar, Y., 2007. Evaluation of orbital- and ground state energies of some open- and closed-shell atoms over integer and noninteger slater type orbitals. *Chinese Journal of Chemistry*, 25: 25-31.
- Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2010. Calculation of linear and nonlinear optical absorption coefficients of a spherical quantum dot with parabolic potential, *optics Communications*, 283:1795.
- Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2010. Linear and nonlinear optical properties in spherical quantum dots, *Communication in Theoretical Physics*, 53:1185.
- Yakar, Y., Çakır, B., Özmen, A., 2012. Refractive index changes and absorption coefficients in a spherical quantum dot with parabolic potential, *Journal of Luminescence*, 132:2659.
- Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2013. Electronic structure and relativistic Terms of one-electron spherical quantum dot, *Journal of Luminescence*, 137:259.
- Yakar, Y., Çakır, B., Özmen, A., 2013. Computation of relativistic terms in a spherical quantum dot, *Journal of Luminescence*, 134:778.
- Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2015. Linear and nonlinear absorption coefficients of spherical two electron quantum dot, *Computer Physics Communications*, 188:88.
- Yakar, Y., Çakır, B., Yilmazer, F. ve Özmen, A., 2017. Zeeman transitions in spherical quantum dot, *AIP Conference Proceedings* 1815, 030018; doi: 10.1063/1.4976366.
- Yeşilgül, U., Ungan, F., Şakiroğlu, S., Duque, C., Mora-Romos, M., Kasapoğlu, E., Sari, H. ve Sökmen, I., 2012. *Nanoscale Research Letters*. 7:586.
- Zhang, Z. H., Guo, K. X., Chen, B., Wang, R.Z. ve Kuang, M.W., 2010. *Superlattices Microstructure*, 47:325.

EKLER

Ek A: Kuyu içi ve kuyu dışı sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının örtme (overlap) ve enerji integralleri:

Ek B: Dış manyetik alan içerisindeki küresel kuantum nokta yapının atomik birimlerdeki Hamiltoniyenin elde edilişi

Ek C : Gaunt katsayılarının binom katsayıları cinsinden ifade edilişi ve rekörsif bağıntıdan hesaplanan sonuçlar (Yakar vd., 2007)

EK Ç: R=1 ve R=2 nokta yarıçaplarında sonlu kuyu içinde ve dışında, sonsuz kuyu içinde Z=1, $\chi=0.3$, $\gamma=0.2$, m=0123 için elde edilen enerji değeri, STO'ların açılım ve üstel katsayıları

Ek A: Kuyu içi ve kuyu dışı sınırlandırıcı potansiyele sahip kuantum nokta yapının örtme (overlap) ve enerji integralleri:

Ek A1 Kuyu içi örtme (overlap) integrali:

$$\begin{aligned}
 S_{n_i \ell_i m_i n_j \ell_j m_j}^{r \leq R} &= \langle \phi_i | \phi_j \rangle^{r \leq R} = \int_0^R \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{i=1}^{\sigma} c_{i_p}^* \chi_p^*(\vec{r}) \sum_j^{\sigma} c_{j_p} \chi_p(\vec{r}) r^2 \text{drsin } \theta d\theta d\phi \\
 &= \sum_{ij} c_{n_i \ell_i m_i}^* c_{n_j \ell_j m_j} \int_0^R r^{n_i+n_j} e^{-(\zeta_i+\zeta_j)R} dr \int_{\Omega} Y_{\ell_i m_i}^*(\theta\phi) Y_{\ell_j m_j}(\theta\phi) d\Omega \\
 &= \sum_{ij} c_{n_i \ell_i m_i}^* c_{n_j \ell_j m_j} \frac{(n_i+n_j)!}{(\zeta_i+\zeta_j)^{n_i+n_j+1}} \left(1 - e^{-(\zeta_i+\zeta_j)R} \sum_{k=0}^{n_i+n_j} \frac{[R(\zeta_i+\zeta_j)]^k}{k!} \right) \delta_{\ell_i \ell_j} \delta_{m_i m_j}
 \end{aligned}$$

Burada n, ℓ, m baz fonksiyonunun kuantum sayılarını, σ baz seti sayısı, c_{pk} ve ζ_k 'lar açılım katsayıları ve orbital üstelleri (perdeleme sabitini) göstermektedir.

Ek A2 Kuyu dışı overlap integrali:

$$\begin{aligned}
 S_{n_i \ell_i m_i n_j \ell_j m_j}^{r > R} &= \langle \phi_i | \phi_j \rangle^{r > R} = \int_R^{\infty} \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{i=1}^{\sigma} d_{i_p}^* \chi_p^*(\vec{r}) \sum_{j=1}^{\sigma} d_{j_p} \chi_p(\vec{r}) r^2 \text{drsin } \theta d\theta d\phi \\
 &= \sum_{ij} d_{n_i \ell_i m_i}^* d_{n_j \ell_j m_j} \int_R^{\infty} r^{n_i+n_j} e^{-(\zeta_i+\zeta_j)R} dr \int_{\Omega} Y_{\ell_i m_i}^*(\theta\phi) Y_{\ell_j m_j}(\theta\phi) d\Omega \\
 &= \sum_{ij} d_{n_i \ell_i m_i}^* d_{n_j \ell_j m_j} \frac{(n_i+n_j)!}{(\zeta_i+\zeta_j)^{n_i+n_j+1}} \left(e^{-(\zeta_i+\zeta_j)R} \sum_{k=0}^{n_i+n_j} \frac{[R(\zeta_i+\zeta_j)]^k}{k!} \right) \delta_{\ell_i \ell_j} \delta_{m_i m_j}
 \end{aligned}$$

Ek A3 Kuyu içinde elektron-safsızlık etkileşim enerjisi (nüclear attraction):

$$\begin{aligned}
 V^{r \leq R} &= \int_0^R \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{2\pi} \phi_{n_i \ell_i m_i}^* (\vec{r}) \left(\frac{-Z}{\epsilon_r r} \right) \phi_{n_j \ell_j m_j} (\vec{r}) r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \\
 &= \int_0^R \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{2\pi} \sum c_{i_p}^* \chi_{n_i \ell_i m_i}^* (\vec{r}) \left(\frac{-Z}{\epsilon_r r} \right) c_{j_p} \chi_{n_j \ell_j m_j} (\vec{r}) r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \\
 &= -\frac{1}{\epsilon_r} \sum_{ij} c_{n_i \ell_i m_i} c_{n_j \ell_j m_j} \left\{ \frac{\zeta_i + \zeta_j}{n_i + n_j} S_{n_i \ell_i m_i n_j \ell_j m_j}^{r \leq R} + \frac{R^{n_i + n_j}}{n_i + n_j} e^{-(\zeta_i + \zeta_j)R} \right\}
 \end{aligned}$$

Ek A4 Kuyu dışında elektron-safsızlık etkileşim enerjisi (nüclear attraction):

$$\begin{aligned}
 V^{r > R} &= \int_R^\infty \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{2\pi} \phi_{n_i \ell_i m_i}^* (\vec{r}) \left(\frac{-Z}{\epsilon_r r} \right) \phi_{n_j \ell_j m_j} (\vec{r}) r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \\
 &= \int_R^\infty \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{2\pi} \sum d_{i_p}^* \chi_{n_i \ell_i m_i}^* (\vec{r}) \left(\frac{-Z}{\epsilon_r r} \right) d_{j_p} \chi_{n_j \ell_j m_j} (\vec{r}) r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \\
 &= -\frac{1}{\epsilon_r} \sum_{ij} d_{n_i \ell_i m_i}^* d_{n_j \ell_j m_j} \left\{ S_{n_i \ell_i m_i n_j \ell_j m_j}^{r > R} - \frac{R^{n_i + n_j}}{n_i + n_j} e^{-(\zeta_i + \zeta_j)R} \right\}
 \end{aligned}$$

Ek A5 Kuyu içinde kinetik enerji:

$$T_{n_i \ell_i m_i n_j \ell_j m_j}^{r \leq R} = \int_0^R \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{2\pi} \phi_{n_i \ell_i m_i}^* (\vec{r}) \left(\frac{-\nabla^2}{2m_i^*} \right) \phi_{n_j \ell_j m_j} (\vec{r}) r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{m_{i\zeta}^*} \sum_{ij} c_{n_i \ell_i m_i}^* c_{n_j \ell_j m_j} \left\{ \left(\frac{\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)(\zeta_i + \zeta_j)^2}{2(n_i + n_j - 1)(n_i + n_j)} + \zeta_j n_j \frac{\zeta_i + \zeta_j}{n_i + n_j} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{\zeta_j^2}{2} \right) S_{n_i \ell_i m_i n_j \ell_j m_j}^{r \leq R} \right. \\
&\quad + \frac{\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)}{2(n_i + n_j - 1)} R^{n_i + n_j - 1} e^{-(\zeta_i + \zeta_j)R} \left(1 + \frac{(\zeta_i + \zeta_j)R}{n_i + n_j} \right) \\
&\quad \left. + \frac{\zeta_j n_j}{n_i + n_j} R^{n_i + n_j} e^{-(\zeta_i + \zeta_j)R} \right\}
\end{aligned}$$

Ek A6 Kuyu dışında kinetik enerji ifadesi:

$$\begin{aligned}
T_{n_i \ell_i m_i n_j \ell_j m_j}^{r > R} &= \int_R^\infty \int_{-\pi}^\pi \int_0^{2\pi} \phi_{n_i \ell_i m_i}^*(\vec{r}) \left(\frac{-\nabla^2}{2m_{d\zeta}^*} \right) \phi_{n_j \ell_j m_j}(\vec{r}) r^2 dr \sin \theta d\theta d\phi \\
&= \frac{1}{m_{d\zeta}^*} \sum_{ij} d_{n_i \ell_i m_i}^* d_{n_j \ell_j m_j} \left\{ \left(\frac{\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)(\zeta_i + \zeta_j)^2}{2(n_i + n_j - 1)(n_i + n_j)} + \zeta_j n_j \frac{\zeta_i + \zeta_j}{n_i + n_j} - \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \frac{\zeta_j^2}{2} \right) S_{n_i \ell_i m_i n_j \ell_j m_j}^{r > R} + \frac{\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)}{2(n_i + n_j - 1)} R^{n_i + n_j - 1} e^{-(\zeta_i + \zeta_j)R} \left(-1 - \frac{(\zeta_i + \zeta_j)R}{n_i + n_j} \right) - \right. \\
&\quad \left. \frac{\zeta_j n_j}{n_i + n_j} R^{n_i + n_j} e^{-(\zeta_i + \zeta_j)R} \right\}
\end{aligned}$$

Ek B: Dış manyetik alan içerisindeki küresel kuantum nokta yapının atomik birimlerdeki Hamiltoniyeinin elde edilişi

$$H = \frac{1}{2m_e} [\vec{p} - q\vec{A}]^2 + V(r)$$

$$\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A} \text{ da } \vec{B} \text{ düzgün homojen ise yani } \vec{B} = B\hat{k} \text{ ise } \vec{A} = -\frac{1}{2}(\vec{r} \times \vec{B}) = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r})$$

$$\left[\vec{p} + \frac{q}{2}(\vec{r} \times \vec{B}) \right]^2 = \vec{p}^2 + \frac{q}{2}[\vec{p}(\vec{r} \times \vec{B}) + (\vec{r} \times \vec{B})\vec{p}] + \frac{q^2}{4}(\vec{r} \times \vec{B})^2$$

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = -(\vec{p} \times \vec{r}) \text{ olduğundan}$$

$$\begin{aligned} \left[\vec{p} + \frac{q}{2}(\vec{r} \times \vec{B}) \right]^2 &= \vec{p}^2 + \frac{q}{2}[\vec{B}(\vec{p} \times \vec{r}) - (\vec{r} \times \vec{p})\vec{B}] + \frac{q^2}{4}(\vec{r} \times \vec{B})^2 \\ &= \vec{p}^2 - q\vec{L} \cdot \vec{B} + \frac{q^2}{4}[r^2 B^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{q^2}{4}(\vec{r} \times \vec{B})^2 \right. &= \frac{q^2}{4}(\vec{r} \times \vec{B})(\vec{r} \times \vec{B}) = \frac{q^2}{4}(rB \sin \theta)(rB \sin \theta) = \frac{q^2}{4}r^2 B^2 \sin^2 \theta \\ &= \frac{q^2}{4}r^2 B^2(1 - \cos^2 \theta) = \frac{q^2}{4}r^2 B^2 \left[1 - \left(\frac{\vec{r} \cdot \vec{B}}{rB} \right)^2 \right] \\ &= \frac{q^2}{4}r^2 B^2 \left[1 - \frac{(\vec{r} \cdot \vec{B})^2}{r^2 B^2} \right] = \frac{q^2}{4}[r^2 B^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2] \left. \right\} \end{aligned}$$

elde edilmiş olur.

$$H = \frac{(\vec{p})^2}{2m_e} - \frac{q}{2m_e}\vec{L} \cdot \vec{B} + \frac{q^2}{8m_e}[r^2 B^2 - (\vec{r} \cdot \vec{B})^2] + V(r)$$

$$H = \frac{(\vec{p})^2}{2m_e} - \frac{q}{2m_e}\vec{L} \cdot \vec{B} + \frac{q^2}{8m_e}B^2 r^2 \sin^2 \theta + V(r)$$

Şimdi Hamiltoniyein operatörünü $V(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + V_c$ için yaparsak;

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \psi - \frac{e}{2m} \vec{L} \cdot \vec{B} \psi + \frac{e^2}{8m} B^2 r^2 \sin^2 \theta \psi + eV(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

$$\psi_r = \frac{\psi}{\psi_0} \text{ ve } [\psi_0] = a_0^{3/2} = \frac{(4\pi\epsilon_0)^{3/2} \hbar^3}{me^{3/2} e^3} \text{ tanımlaması yapılırsa}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{a_0^{-\frac{3}{2}}}{a_0^2} \frac{\partial^2 \psi_r(r)}{\partial r_r^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{a_0^{-\frac{3}{2}} e^2}{a_0} \frac{\psi_r}{r_r} - \frac{e}{2m} \hbar \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{a_0^{-\frac{3}{2}}}{a_0^2 \alpha c} L_r B_r \psi_r \\
& + \frac{e^2}{8m} \frac{e^2 a_0^{-\frac{3}{2}} a_0^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 (\alpha c)^2 a_0^4} B_r^2 r_r^2 \sin^2 \theta \psi_r + \frac{e}{e} \frac{e^2 a_0^{-\frac{3}{2}}}{4\pi\epsilon_0 a_0^4} V(r) \psi(r) \\
& = \frac{e^2 a_0^{-\frac{3}{2}}}{4\pi\epsilon_0 a_0} E_r \psi_r
\end{aligned}$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} = \frac{\hbar}{m_e \alpha c} \text{ yi kullanırsak; } \alpha c = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{m e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2} \frac{\partial^2 \psi_r}{\partial r_r^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} e^2 \frac{Z \psi_r}{r_r} - \frac{e^2}{2m} \frac{\hbar}{4\pi\epsilon_0} \frac{m \alpha c}{\hbar \alpha c} L_r B_r \psi_r \\
& + \frac{e^2}{8m} \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m \alpha c}{\hbar (\alpha c)^2} B_r^2 r_r^2 \sin^2 \theta \psi_r + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} V_r \psi_r = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} E_r \psi_r \\
& -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi_r}{\partial r_r^2} - \frac{Z}{r_r} \psi_r - \frac{1}{2} L_r B_r \psi_r + \frac{e^2}{8\hbar} \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar}{4\pi\epsilon_0 e^2} B_r^2 r_r^2 \sin^2 \theta \psi_r + V_r \psi_r = E_r \psi_r \\
& -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{Z}{r} \psi - \frac{1}{2} L_r B_r \psi + \frac{1}{8} B_r^2 r^2 \sin^2 \theta \psi + V_r \psi = E_r \psi_r
\end{aligned}$$

Ek C : Gaunt katsayılarının binom katsayıları cinsinden ifade edilişi ve rekörsif bağıntıdan hesaplanan sonuçlar (Yakar vd., 2007)

Ek C1 $\langle \ell m | \ell' m' | LM \rangle$ ile verilen Gaunt katsayıları Yakar ve ark (2007) tarafından binom katsayıları cinsinden aşağıdaki gibi ifade edilmiştir.

$$\begin{aligned} \langle \ell m | \ell' m' | LM \rangle &= (-1)^{\frac{\ell' - \ell - L}{2}} \frac{F_{(\ell' - \ell + L)/2}(L) F_L(\ell' + \ell + L)/2}{(\ell' + \ell + L + 1) F_{2L}(\ell' + \ell + L)} \\ &\times \left[\frac{(2L + 1)(2\ell + 1)(2\ell' + 1)}{4\pi} \right. \\ &\times \left. \frac{F_{\ell+m}(\ell' + \ell + M) F_{\ell'+\ell+M}(\ell' + \ell + 2L + M)}{F_{\ell-m}(\ell' + \ell - M) F_{L-M}(2L) F_{L+M}(2L + 2M) F_{\ell'+\ell-M}(2L + \ell' + \ell + M)} \right]^{1/2} \\ &\times \sum_q (-1)^q \frac{F_{L-m-q}(\ell' - m' + L - M - q) F_q(\ell + m + q) F_{\ell-m-q}(\ell' + \ell - L) F_{\ell'+\ell-L}(\ell' + \ell + M)}{F_{\ell+m}(\ell' + \ell + M)} \end{aligned}$$

$\max\{0, L - m - \ell'\} \leq q \leq \min\{\ell - |m|, L - M, L + \ell' - m\}, |\ell - \ell'| \leq L \leq \ell + \ell', L \geq |M|$ ve $M = m - m'$.

Ek C2 Rastgele seçilmiş kauntum sayıları için hesaplanan Gaunt katsayıları

L	l_1	m_1	l_2	m_2	Eq.(4)
0	2	1	2	1	0.282094791773878E+00 0.282094791773878E+00 ^b
4	2	1	2	1	-0.161197023870788E+00 -0.161197023870788E+00 ^b
2	3	2	1	1	-0.261169028265409E+00 -0.261169028265409E+00 ^b
1	2	0	3	-1	0.202300659403421E+00 0.202300659403421E+00 ^b
3	2	0	3	-1	0.126156626101008E+00 0.126156626101008E+00 ^b
8	5	-3	3	-2	-0.577179416122379E-01 -0.577179416122379E-01 ^b
6	5	-3	3	-2	0.166435054107857E+00 0.166435054107857E+00 ^b
4	2	1	6	4	0.246389008389718E+00 0.246389008389718E+00 ^b
20	10	10	10	10	0.124000989596611E-05 0.124000989596611E-05 ^b
10	10	10	10	10	-0.220569655086274E-01 -0.220569655086274E-01 ^b
8	2	1	8	4	0.146978734884738E+00 0.146978734884738E+00 ^b
4	5	-1	3	1	-0.106334650671765E+00 -0.106334650671765E+00 ^b
13	8	7	5	3	-0.629313205158472E-02 -0.629313205158472E-02 ^b
9	8	7	5	3	-0.131589326317861E+00 -0.131589326317861E+00 ^b
27	20	15	9	7	0.132387381565477E-02 0.132387381565477E-02 ^b
17	20	15	9	7	-0.456832005985146E-01 -0.456832005985146E-01 ^b
11	3	-2	10	-5	-0.159852949232758E+00 -0.159852949232758E+00 ^b
6	4	4	4	4	-0.284505520638337E-01 -0.284505520638337E-01 ^b
29	9	9	20	20	-0.228141063914733E-07 -0.228141063914733E-07 ^b
13	6	6	7	7	0.134702006343087E-03 0.134702006343087E-03 ^b
12	11	9	5	-3	-0.150385940825138E+00 -0.150385940825138E+00 ^b
18	10	0	10	0	0.123588851112340E+00 0.123588851112340E+00 ^b
4	3	-1	5	-3	0.144235946147335E+00 0.144235946147335E+00 ^b

EK Ç: R=1 ve R=2 nokta yarıçaplarında sonlu kuyu içinde ve dışında, sonsuz kuyu içinde Z=1, $x=0.3$, $\gamma=0.2$, $m=0123$ için elde edilen enerji değeri, STO'ların açılım ve üstel katsayıları

Çizelge Ç.1 R=1 nokta yarıçapında sonlu kuyu içinde ve dışında Z=1, $x=0.3$, $\gamma=0.2$, $m=0123$ için elde edilen enerji değeri, STO'ların açılım ve üstel katsayıları

Enerji(ab)(E _{1s})		0.0149308390374	
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	1s	4.643054957558320	-0.146105783084842E+03
	1s	2.981401547087605	0.974140904688170E+03
	1s	4.728776920039579	0.419582503519410E+02
	1s	2.931051654283672	-0.160455452213478E+03
	1s	2.345043740952533	0.206683164549191E+03
	1s	4.188633229982269	0.941775062307761E+02
	1s	2.803184689246878	-0.101594388312514E+04
Kuyu dışında	1s	6.835527065818807	-0.365541678477713E+04
	1s	6.458382661325253	-0.700219748915913E+04
	1s	6.127283327683765	0.371124886109057E+04
	1s	6.788715653904264	-0.579571249151806E+03
	1s	6.298388521579385	-0.145652551528584E+04
	1s	7.042776489845846	-0.399450350313331E+05
	1s	6.998071345946654	0.487121000750279E+05
Enerji(ab)(E _{2p})		0.0641731517849	

Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	2p	5.286017182859633	-0.125786706208272E+03
	2p	2.784349623487510	0.134389478801725E+03
	2p	5.197382120928983	0.610751094568953E+03
	2p	4.098522793701495	0.646842264912042E+03
	2p	5.825272381368794	-0.455311025819995E+03
	2p	5.269459164107722	0.209800179286912E+02
	2p	3.680195321377918	-0.847298038915758E+03
Kuyu dışında	2p	5.209889864590167	0.129398320715942E+04
	2p	6.135786176502101	-0.660190212271351E+03
	2p	4.931353530790197	-0.306807067283438E+04
	2p	4.998704804256475	-0.361872848814677E+04
	2p	4.796555866821574	0.689277298924026E+03
	2p	5.339851618512110	-0.501211597185896E+04
	2p	5.103880739961916	0.962274931124079E+04

Çizelge Ç.1 (Devam) R=1 nokta yarıçapında sonlu kuyu içinde ve dışında Z=1, $x=0.3$, $\gamma=0.2$, $m=0.123$ için elde edilen enerji değeri, STO'ların açılım ve üstel katsayıları

Enerji(ab)(E _{3d})		0.1176504905133	
Baz seti sayısı	ζ_{ik}	c_{ik}	
Kuyu içinde	3d	3.558542477439886	-0.848950870773065E+03
	3d	3.595497384354026	-0.925745948373301E+03
	3d	4.485674716226181	0.216663583978530E+02
	3d	2.298790829419449	0.118219972820293E+03
	3d	4.646360448360309	-0.162998005819069E+04
	3d	4.435092244155390	0.566388000016627E+03
	3d	4.078484608847938	0.267663293476669E+04
Kuyu dışında	3d	5.977304491409809	0.266034497900034E+03
	3d	5.385155313606877	0.579428491493444E+02
	3d	6.507974927031206	0.123616172623078E+05
	3d	5.472184995383594	-0.125314126623431E+04
	3d	4.677923255415171	0.118054197893296E+03
	3d	6.454588576667156	-0.183333157523270E+04
	3d	6.864707327431317	-0.128408979447179E+05
Enerji(ab)(E _{4f})		0.1785596113876	

Baz seti sayısı	ζ_{ik}	c_{ik}	
Kuyu içinde	4f	1.408440769055955	-0.197514232165428E+02
	4f	5.428167229395761	0.138882297091812E+03
	4f	3.837559976132456	0.236522075645885E+03
	4f	3.555227755907112	0.123258495091200E+04
	4f	5.306210859191797	0.834816993824389E+02
	4f	6.941999442719693	-0.940600015090879E+02
	4f	3.813137850896449	-0.159158706521199E+04
Kuyu dışında	4f	5.154830284895899	-0.113414973318758E+03
	4f	5.171466923935185	0.524722119135729E+02
	4f	6.217680593003902	0.402685280520283E+04
	4f	6.759616327908340	-0.176367108097747E+05
	4f	5.482564480371863	0.232847758645604E+03
	4f	5.708809859684085	-0.147354307979421E+03
	4f	7.240853278068601	0.189494824096153E+05

Çizelge Ç.2 R=2 nokta yarıçapında sonlu kuyu içinde ve dışında Z=1, $x=0.3$, $\gamma=0.2$, $m=0123$ için enerji değeri, STO'ların açılım ve üstel katsayıları

Enerji(ab)(E _{1s})		-0.0026022706971	
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	1s	5.675786613214588	-0.279167191819557E+00
	1s	8.648161486610865	0.140157204024258E+01
	1s	0.224868795824282	0.108282909225270E+01
	1s	1.733926625354060	0.805806632663453E+00
	1s	8.407149966860507	-0.124970200724093E+01
	1s	1.509891338736171	-0.853857817903392E-02
	1s	0.872120418190822	-0.460568882662983E+01
Kuyu dışında	1s	8.196795805114396	-0.104742567704385E+02
	1s	9.639314455392533	0.321747084020413E+01
	1s	2.399553755480347	0.536329494504766E+00
	1s	8.905818920224357	0.170923099593767E+01
	1s	4.914540098602542	0.870217482076754E+01
	1s	3.111584349042177	0.363725542209187E+00
	1s	7.386681004806187	-0.248221677043809E+06
Enerji(ab)(E _{2p})		0.0152825168232	
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	2p	5.773099596734349	-0.143778057491085E+02
	2p	2.282889915946047	-0.312591358517694E+01
	2p	0.360021054969221	0.109325069183906E+01
	2p	2.853201770430894	0.185064223160910E+02
	2p	5.787427853588930	0.194917874593850E+02
	2p	3.973723994226226	-0.161884523040591E+02
	2p	1.212034652461389	-0.720396288651136E+01
Kuyu dışında	2p	4.418027490895443	0.566780752045518E+02
	2p	6.718321787708275	0.199015052514895E+03
	2p	10.095507472189148	0.832261989123601E+01
	2p	4.903990000252447	-0.998090659785866E+02
	2p	4.296030423687387	0.572656324953614E+02
	2p	4.128853197725944	-0.593866786112160E+02
	2p	8.235851853385004	-0.115084091708318E+07

Çizelge Ç.2 (Devam) R=2 nokta yarıçapında sonlu kuyu içinde ve dışında Z=1, $x=0.3$, $\gamma=0.2$, $m=0.123$ için enerji değeri, STO'ların açılım ve üstel katsayıları

Enerji(ab)(E _{3d})		0.0334539223094	
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	3d	4.738594178377467	-0.113064660528891E+03
	3d	1.589637181930681	-0.104877065956304E+02
	3d	4.498968923883558	-0.106558953165224E+03
	3d	3.277311687950673	-0.708617105082337E+03
	3d	3.960165673139358	0.706272478099422E+03
	3d	4.159430661770731	-0.534598083441105E+02
	3d	2.709460978427817	0.288156234907946E+03
Kuyu dışında	3d	5.069637771204206	-0.218294987424839E+05
	3d	4.398964331554972	0.232631863766001E+04
	3d	4.131549572988503	0.634702621120503E+04
	3d	5.380802142804972	0.814596720690344E+05
	3d	4.188318343326603	-0.830380736840331E+04
	3d	5.807093453663958	-0.149769686941335E+05
	3d	5.338762871710927	-0.326249022359216E+05
Enerji(ab)(E _{4f})		0.0535749721926	
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	4f	2.294464475203582	0.769056114538134E+02
	4f	5.068733413825871	-0.137000042434710E+02
	4f	3.733907706585554	0.559555844470760E+03
	4f	4.453824590817787	-0.435515828063041E+02
	4f	3.468667349204475	-0.548211841636609E+03
	4f	5.613410412765772	-0.118721192889336E+02
	4f	1.679445151378285	-0.151749944650661E+02
Kuyu dışında	4f	5.182522866033011	-0.772872435097425E+03
	4f	5.197753556421503	-0.963066377036943E+03
	4f	5.412127258430768	0.693582823833503E+04
	4f	5.571009746077531	-0.418847167009932E+05
	4f	3.766365500873023	-0.270773467139930E+02
	4f	4.272395292199549	0.358344238965559E+03
	4f	5.889958108678016	0.655805417617305E+05

Çizelge Ç.3 R=1 nokta yarıçapında sonsuz kuyu içinde Z=1, $x=0.3$, $\gamma=0.2$, $m=0.123$ için enerji değeri, STO'ların açılım ve üstel katsayıları

Enerji(ab)(E _{1s})		0.0271634962	
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	1s	5.720926753898663	-0.360751857711E+01
	1s	1.748386928072556	-0.209122299345E+02
	1s	11.599766282174546	-0.703790499830E-01
	1s	0.312476500643129	0.443758622181E+01
	1s	3.536330391874470	0.139081389988E+02

Enerji(ab)(E _{2p})		0.095337481	
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	2p	57.442551599026132	-0.430456888472E-02
	2p	1.895032633433436	0.230781396153E+03
	2p	50.874780064698356	-0.262267896295E-02
	2p	3.350529289229958	-0.612700314386E+02
	2p	1.596182309756163	-0.160562780530E+03

Enerji(ab)(E _{3d})		0.173761357	
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	3d	4.149051854990039	0.778166220382E+03
	3d	2.930026942315004	0.461369619400E+03
	3d	5.219132793926557	-0.143234545482E+03
	3d	2.810650202256157	0.108977902938E+04
	3d	3.067515177508485	-0.218551167394E+04

Enerji(ab)(E _{4f})		0.265400732	
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	4f	3.746058002408961	-0.150709040059E+04
	4f	7.542338863192025	-0.117382746697E+04
	4f	1.986273133100385	0.879467182221E+03
	4f	5.589746458014304	0.215226023656E+04
	4f	1.693049177654420	-0.502849889593E+03

Çizelge Ç.4. R=2 nokta yarıçapında sonsuz kuyu içinde Z=1, $\alpha=0.3$, $\gamma=0.2$, m=0123 için enerji değeri, STO'ların açılım ve üstel katsayıları

		Enerji(ab)(E _{1s})	-0.00142999942
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	1s	2.466182404342958	-0.226869694931E+00
	1s	2.131226372661700	0.620703938341E+00
	1s	0.700250666945850	-0.597879526107E+01
	1s	2.226982147203455	-0.231347822679E+00
	1s	0.310545168579007	0.273410954825E+01
		Enerji(ab)(E _{2p})	0.0191899806
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	2p	56.341904662505698	-0.627619400555E+00
	2p	1.441533901708723	0.326532051603E+02
	2p	130.861692096132460	-0.142353956921E+01
	2p	1.127590947701715	-0.671368780231E+02
	2p	0.913396657045857	0.323884646461E+02
		Enerji(ab)(E _{3d})	0.0403979395
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	3d	1.414969033051170	0.398366153637E+02
	3d	1.768659359156914	-0.449623682503E+02
	3d	1.359621308589739	0.383657357919E+02
	3d	0.769028321412173	0.104228550378E+02
	3d	0.998188510413729	-0.427830069866E+02
		Enerji(ab)(E _{4f})	0.0645695733
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	4f	0.792303020270732	0.276336724125E+01
	4f	4.819069584337679	0.379787858728E+02
	4f	1.397925931084631	-0.619126472818E+02
	4f	3.284562790018917	-0.499005202267E+02
	4f	1.607539979980507	0.817273894302E+02

Çizelge Ç.5.R=1 nokta yarıçapında sonsuz kuyu içinde $Z=1$, $x=0.3$, $\gamma=2$, $m=0.123$ için enerji değeri, STO'ların açılım ve üstel katsayıları

Enerji(ab)(E_{1s})		0.0271634955	
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	1s	5.720926753898588	-0.362303857460E+01
	1s	1.748386928071629	-0.209177887594E+02
	1s	11.599766288411569	-0.641801799909E-01
	1s	0.312476500643128	0.443838316821E+01
	1s	3.536330391811947	0.139230862339E+02

Enerji(ab)(E_{2p})		0.106006415	
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	2p	0.022758814733060	-0.742389219192E+04
	2p	0.063115224676321	0.265161545268E+05
	2p	28.391897624902239	-0.295113281515E+00
	2p	86.009888494510975	-0.101114403324E+02
	2p	0.080101020350917	-0.191083628664E+05

Enerji(ab)(E_{3d})		0.194371788	
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	3d	3.663339506650494	0.784626655099E+03
	3d	4.409657803797010	0.564123017558E+00
	3d	2.244386427866946	0.106229477167E+00
	3d	2.579422247155640	0.558740548894E+03
	3d	3.068684177905690	-0.134467804217E+04

Enerji(ab)(E_{4f})		0.296334578	
Baz seti sayısı		ζ_{ik}	c_{ik}
Kuyu içinde	4f	8.841042083275319	-0.885784632323E+03
	4f	3.655785367296179	-0.166411269634E+04
	4f	5.798279875174870	0.163753517714E+04
	4f	2.450939538186677	0.147259583784E+04
	4f	2.159655332734594	-0.769659682479E+03

ÖZGEÇMİŞ

Adı ve Soyadı : Fatma YILMAZER
Doğum Yeri ve Tarihi : Seydişehir, 1979
E-posta adresi : fatma.durgut@gmail.com

EĞİTİM BİLGİLERİ (Kurum ve Yıl)

Lisans : Akdeniz Üniversitesi/Fizik, 2002
Yüksek Lisans : Aksaray Üniversitesi/İş Sağlığı ve Güvenliği, 2014
Yüksek Lisans : Aksaray Üniversitesi/Fizik, 2018

MESLEKİ DENEYİM VE ÖDÜLLERİ

2018- Servet Altınsoy Temel Lisesi, Fizik Öğretmeni
2004-2012 Gazi Üniversitesi Vakfı Özel Okulları Anadolu Lisesi, Fizik Öğretmeni
2003-2004 Ankara Başarfen Dershanesi, Fizik Öğretmeni
2002-2003 Ankara Seçkinler Dershanesi, Fizik Öğretmeni

TEZDEN ÜRETİLEN YAYINLAR, SUNUMLAR VE PATENTLER

Uluslararası Hakemli Dergilerde Yayımlanan Makaleler

1. Yılmaz, F., Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2017. Electronic Structure and Binding Energy of Spherical Quantum Dot, Aksaray University Journal of Science and Engineering, 1(1), 41-50.

Kongrelerde Sunulan Makaleler

1. Yakar, Y., Çakır, B., Yılmaz, F. ve Özmen, A., 2016. Zeeman Transition Energies in Spherical Quantum Dot, Turkish Physical Society 32th International Physics Congress, September 6-9 Bodrum/Turkey.
2. Yakar, Y., Çakır, B., Yılmaz, F., Özmen, A., 2017. Zeeman transitions in spherical quantum dot, AIP Conference Proceedings 1815, 030018; doi: 10.1063/1.4976366.