



T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

Disk Biçimli Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özellikleri

Emre DOĞAN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalını

Ocak-2014
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

DİSK BİÇİMLİ KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

Emre DOĞAN

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN

2014, 50 Sayfa

Jüri
Danışman: Prof.Dr. Ayhan ÖZMEN
Üye: Prof.Dr. Ülfet ATAV
Üye: Doç.Dr. Ercan TÜRKKAN

Kuantum genetik algoritma yöntemi ile disk biçimli kuantum nokta yapısının elektronik özellikleri incelendi. Merkezinde hidrojen tipi bir safsızlık bulunan sonsuz küresel simetrik potansiyelle sınırlandırılmış disk şekilli bir-elektronlu parabolik kuantum nokta yapısı ele alındı. Dalga fonksiyonu olarak Slater tipi orbitallerin lineer bileşiminden oluşan tek-elektron spin orbitalleri alındı. Kuantum genetik algoritma tekniği ile Schrödinger denkleminin çözümleri olan dalga fonksiyonları ile birlikte yapının enerjisinin beklenen değerleri iki farklı parabolik potansiyel için hesaplandı. Ayrıca yapının bağlanma enerjisi hesaplandı.

Anahtar Kelimeler: Kuantum Nokta Yapı, Hartree Fock Roothaan Yöntemi, Slater Tipi Orbitaller, Kuantum Genetik Algoritma

ABSTRACT

MASTER THESIS

ELECTRONIC PROPERTIES OF DISC-LIKE QUANTUM DOTS

Emre DOĞAN

THE GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE OF SELÇUK UNIVERSITY

Advisor: Prof.Dr. Ayhan ÖZMEN

2014, 50 Pages

Jury

Advisor: Prof.Dr. Ayhan ÖZMEN

Prof.Dr. Ülfet ATAV

Assoc.Prof.Dr.Ercan TÜRKKAN

In this study, electronic properties of disc-like quantum dot have been investigated using Quantum Genetic Algorithm(QGA). One--electron quantum dots(QD) with on-center hydrogen impurities are considered in the calculations. We have assumed the confining potential to infinity spherically symetric with parabolic potential . The wave function of the system was defined by single-electron spin orbitals which are constracted by Slater–type orbitals(STO's). The energy expectation values were determined by using the Hartree-Fock Roothaan(HFR) method. We calculated these values over Slater type orbitals whose expansion coefficients and screening constants are determined by the Quantum Genetic Algorithm(QGA). The ground and some excited state energies of one-electron QD were calculated depending on the dot radius. In addition, we evaluated the binding energies of the same structures for the ground state.

Keywords Quantum dot, Quantum Genetik Algortihm, Hartree-Fock Roothaan Method, Slater Type orbital

ÖNSÖZ

Düşük boyutlu nanometre ölçekli sistemler son zamanlarda Yoğun Madde Fiziği'nde yeni araştırma alanları açmıştır. Malzeme üretimi ve karakterizasyonu alanındaki önemli teknolojik gelişmeler, iki boyutlu, tek boyutlu ve sıfır boyutlu kuantum mekaniksel sistemlerin (nano yapıların) üretilebilmesini mümkün hale getirmiştir. Bu tür nano ölçekli kuantum mekaniksel sistemler gerek ilginç fiziksel özellikleri, gerekse teorik olarak bilim adamlarına geniş bir ufuk açması bakımından özellikle son yıllarda büyük ilgi toplamaya başlamıştır.

Bu tür yapıların fiziksel özelliklerinin belirlenmesi için farklı yöntemler geliştirilmiştir. Kuantum mekaniksel yapı içerisinde parçacık sayısının az olması durumunda fiziksel özelliklerin salt teorik yöntemlerle belirlenebilmesi mümkün iken parçacık sayısı arttıkça çeşitli sayısal ve istatistiksel yaklaşımlara gerek duyulmaya başlanmıştır. Yaygın olarak kullanılan yöntemlerden birisi varyasyonel yöntemdir. Nano ölçekli kuantum mekaniksel sistemler, teknolojik açıdan büyük gelecek vaad eden yapılar oldukları için bu tür yapıların çeşitli fiziksel özelliklerinin daha iyi anlaşılması açısından bu çalışmanın nano yapılarla ilgili çalışmalara önemli katkısı olacağına ve bu alanda yapılan deneysel çalışmalara katkı sunacağına inanmaktayım.

Bu çalışma süresince bilgi ve tecrübeleriyle bana her konuda yardımcı olan ve yön gösteren danışman hocam Sayın Prof.Dr. Ayhan ÖZMEN'e en içten teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca çalışmamın her aşamasında bana sürekli yardımcı olan ve her konuda destek veren, çalışmalarımızda değerli zamanını ayırmaktan hiçbir zaman imtina etmeyen Doç.Dr. Bekir ÇAKIR'a teşekkürü bir borç biliyorum.

Çalışmalarım boyunca beni her zaman sabırla destekleyen ve teşvik eden sevgili eşime ve aileme teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca bu çalışmalar esnasında çalışmalarımı yapmam için beni motive eden,gerekli esnekliği sağlayan tüm mesai arkadaşlarıma saygılarımı sunarım.

Emre DOĞAN

KONYA-2014

İÇİNDEKİLER

ÖZET 1

ABSTRACT 2

ÖNSÖZ 3

İÇİNDEKİLER 4

SİMGELER VE KISALTMALAR 6

ŞEKİLLER VE TABLOLAR DİZİNİ 7

1. GİRİŞ 8

2. KUANTUM NOKTA YAPILAR 11

2.1. Kuantum Kuyuları 11
2.2. Kuantum Telleri 13
2.3. Kuantum Nokta Yapılar 14

3. KUANTUM NOKTA YAPININ ELDE EDİLİŞ YÖNTEMLERİ 15

3.1. Kendiliğinden Büyüme Yöntemi 15
3.2. Asitle Eritme Yöntemi 15
3.3. Modüle Edilmiş Elektrik Alan Yöntemi 16
3.4. Seçici Büyütme Yöntemi 18
3.5. Kuantum Kuyusu ve Engel Arası İnterdifüzyon Yöntemi 18
3.6. Yariletken Mikrokristaller 19

4. HESAPLAMA TEKNİĞİ 20

4.1. Genetik Algoritma 20
4.1.1. Yeniden oluşum(üretme) 22
4.1.2. Çaprazlama (crossover) 23
4.1.3. Mutasyon 25

5. FİZİKSEL YAKLAŞIMLAR 26

5.1. Küresel Kuantum Nokta Yapının Elektronik Özellikleri 26

5.1.1. Giriş 26

5.1.2. Tek elektronlu kuantum kuyusu 27

5.1.3. Kuantum nokta yapıların elektronik özellikleri 30

5.1.4. Etkin kütle yaklaşımı 32

5.1.5. Kuantum nokta yapılarda durum yoğunluğu 33

5.2. Disk Benzeri Kuantum Nokta Yapının Elektronik Özellikleri 35

6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER 39

KAYNAKLAR 46

ÖZGEÇMİŞ 50

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

Z	Safsızlıktaki Yük Sayısı
r_{ij}	Elektronlar Arasındaki Uzaklık
m^*	Etkin Kütle
ε	Ortamın Dielektrik Sabiti
V(r)	Dış Sınırlayıcı Potansiyel
a	Nokta Yarıçapı

Kısaltmalar

STO	Slater Tipi Orbital
GA	Genetik Algoritma
KGA	Kuantum Genetik Algoritma
HFR	Hartree Fock Roothaan
H	Hamiltoniyen

Şekiller Dizini	Açıklama
Şekil 2.1.	Bir kuantum kuyusunun şematik gösterimi
Şekil.2.2.	İki boyutta hareketi sınırlı, tek boyutta serbest olan bir kuantum telinin şematik gösterimi.
Şekil 2.3.	Kuantum nokta yapısının şematik gösterimi
Şekil 3.2.	Kuantum nokta yapısının üretim aşamalarının şematik olarak gösterimi.
Şekil 3.3.	Kuantum kuyusu üzerinde minyatür elektrotlar oluşturulması yöntemiyle kuantum noktası üretimi.
Şekil 3.4.	Seçici büyütme yöntemiyle kuantum nokta yapısının elde edilmesi
Şekil 3.5.	Kuantum kuyusunun elde edilmesi.
Şekil 4.1.	Rulet çarkının şematik gösterimi.
Şekil 4.2.	Çaprazlama işleminin şematik gösterimi.
Şekil 5.1.	Sonlu derinlikli küresel potansiyel kuyusu.
Şekil 5.2.	Kuantum noktasının durum yoğunluğunun enerji ile değişimi.
Şekil 5.3.	Kuantum telindeki durum yoğunluğunun enerji ile değişimi
Şekil 5.4.	Kuantum kuyu durum yoğunluğunun enerji ile değişimi
Şekil 5.5.	Disk-benzeri kuantum nokta yapının şematik gösterimi.
Şekil 6.1.	Safsızlığın varlığında parabolik kuantum nokta yapının enerji seviyelerinin nokta yarıçapına göre değişimi
Şekil 6.2.	Safsızlık yok iken parabolik kuantum nokta yapının enerji seviyelerinin nokta yarıçapına göre değişimi
Şekil 6.3	Parabolik kuantum nokta yapının bazı seviyelerin bağlanma enerjilerinin kuantum nokta yarıçapına göre değişimi
Şekil 6.4.	Kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış seviyelerin enerjilerinin nokta yapı yarıçapına bağlı olarak değişimi
Şekil 6.5	Kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış seviyelerin enerjilerinin nokta yapı yarıçapına bağlı olarak değişimi

Tablolar Dizini	Açıklama
Tablo 6.1	γ =0.2 değerlerinde r=4 için KGA ve HFR yöntemiyle hesaplanan dalga fonksiyonları.
Tablo 6.2	γ=0.4 değerlerinde r=4 için KGA ve HFR yöntemiyle hesaplanan dalga fonksiyonları.

1.GİRİŞ

Kuantum noktaları, üç boyutta kuantum mekaniksel olarak hapsedilmiş sıfır boyutlu sistemler olarak bilinir. Bu yapılarda doğal uzunluk ölçeği, birkaç nanometre mertebesindedir. Kuantum noktaları, doğal atomlar gibi istenildiğinde değiştirilebilen elektron sayısı içerir ve enerji seviyeleri kararlı olup kesikli spektruma sahiptir. Bu yüzden kuantum noktasında elektronlar bir merkezi yere doğru çekime uğrar. Başka deyişle, bu kuantum noktasında elektronlar aslında potansiyel bir kuyuda hapsedilmiştir.

Son yıllarda kuantum noktalarına olan ilgi iki sebepten dolayı artarak sürmektedir. Birincisi, bu yapılarda doğal uzunluk ölçeğinin birkaç nanometre mertebesinde olmasıdır. Gerçekte, kuantum noktası, kuantum mekaniğinin çalışıldığı küçük bir laboratuar gibi düşünülebilir. Bu nedenle kuantum nokta sistemleri kuantum mekaniğini test etmek için mükemmel bir saha sağlayabilir. İkincisi, belki de daha önemlisi, kuantum nokta sistemleri çok ilginç ve aynı zamanda hacimsel benzerlerinden oldukça farklı birçok yeni fiziksel etkiler göstermektedir.

Kuantum noktaları birçok teknik kullanılarak üretilebilir. Ancak, başlıca amaç elektronları küçük bir bölgeye hapsetmektir. Bu hapsi yapmanın bir yolu, örneğin metal plakayı bir yalıtıcı ile kaplayarak malzemenin sınırlarını kullanmaktır. Aynı zamanda, elektrik alan uygulayarak elektronların hareketini yarı iletken içinde küçük bir bölgeye hapsetmek de mümkündür.

Bir kuantum noktasında elektronlar üç boyutta da sınırlandırılmıştır ve elektronların de Broglie dalga boyu bu sistemlerin kuantum etkilerini şaşırtıcı yapan hapsedilme uzunluğu ile aynı uzunluk mertebesindedir. Bir kuantum noktasının hapsedilme uzunluğu üç yönde de aynı mertebede ise üç boyutlu kuantum noktası olarak adlandırılır. Eğer özel bir yönde hapsedilme uzunluğu diğer iki yön ile karşılaştırıldığında daha küçük olursa bu sistem iki boyutlu kuantum noktası olarak adlandırılır.

Özetle elektronların ince yarıiletken bir tabakaya hapsedilmesi ile sağlanan boyuttaki azalmanın, elektronların hareketinde önemli değişikliğe yol açtığı görülür. Bu temel kural elektronların etrafındaki boyutu iki boyutlu kuantum kuyusundan bir boyutlu kuantum teline ve en sonunda sıfır boyutlu kuantum noktasına azaltmakla geliştirilebilir. Bu durumda boyut, elektronların serbestlik derecesi sayısını gösterir. Genellikle, bir kuantum kuyusunda elektronlar tek yönde hapsedilmiş olduğu halde, bir kuantum telinde iki yönde hapsedilmiştir ve böylece serbestlik derecesi bire inmiştir.

Bir kuantum noktasında ise elektronlar üç yönde de hapsedilmiştir ve böylece serbestlik derecesi sıfıra inmiştir (Pehlivanoğlu,2009).

Sonlu sayıda elektron içeren kuantum nokta yapıları özellikle son zamanlarda büyük ilgi çekmektedir. Çünkü üretilen teknolojik cihazların boyutlarının küçültülmesi, ancak onu oluşturan elektronik devre elemanlarının küçültülmesi ile mümkün olabilir. Bu noktada da küçük boyutlu yapılar devreye girmektedir. Dolayısıyla bu yapılar üzerinde, hem deneysel olarak hem de teorik olarak yoğun bir şekilde çalışılmaktadır. Deneysel olarak gerçekleştirilen bu tür yapıların elektronik özelliklerinin, aynı zamanda, teorik olarak incelenmesi de son derece ilgi çekmektedir.

1999 yılında Akman ve Tomak iki boyutlu kuantum nokta yapı içerisinde 3 etkileşen elektronun yük yoğunluğunu ve çift korelasyon fonksiyonunun Hamiltoniyenini nümerik olarak köşegenleştirerek hesapladılar. Sonra parabolik potansiyel disk benzeri kuantum noktanın düşük exciton (uyarılma) seviyelerini hesaplamak için parçacık fiziği metodu uygulandı(W. Xie, 2000). Parabolik potansiyelli iki boyutlu kuantum disk yüzeyinden belli bir uzaklıkta z ekseni üzerine yerleştirilmiş pozitif bir iyondan oluşan D^- bariyerinin bağlı durumları homojen bir manyetik alan etkisinde incelendi(W.Xie ve Liu,2004). Pertürbasyon ve etkin kütle yaklaşımı kullanılarak elektrik alan içinde ki disk benzeri kuantum nokta yapının hidrojenik safsızlık durumlarının bağlanma enerjileri ve soğurma spektrumu hesaplanmıştır(W.Xie ve Q.Xie,2009). Disk benzeri kuantum nokta yapıda nonlineer optiksel soğurmaları ve korelasyon enerjilerini incelediler(Yuan ve ark,2010). Hidrostatik basınç ve sıcaklık etkileri disk benzeri kuantum nokta yapılarda elektrik alan etkisinde bir donor safsızlığının bağlanma enerjisi ve foto iyonizasyon enerjisi hesaplandı(Liang ve ark.2011). Bir manyetik alan altında disk benzeri kuantum nokta yapının nonlineer optiksel özellikleri ve uyarılmaları incelendi(Lu ve ark.2011). Statik bir manyetik alanda Liu ve ark. (2012) ters kare ve parabolik potansiyelde disk şeklinde kuantum nokta yapıda lineer ve nonlineer optiksel soğurmaları incelediler. Daha sonra dış elektrik ve manyetik alanda hidrostatik basınç etkileri ve iki boyutlu kuantum nokta yapıda hidrojenik bir safsızlığın lineer ve nonlineer özellikleri incelendi(Rezaie ve ark.2013).

Tek elektronlu ya da çok elektronlu kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerini araştırmak için varyasyon yöntemi, pertürbasyon yöntemi, matris

köşegenleştirme yöntemi, yoğunluk fonksiyonel teorisi, Hartree-Fock yöntemi gibi birçok değişik teknik kullanılmaktadır. Her bir yöntemin, ele alınan probleme ve yapılmak istenen hesaplamalara bağlı olarak birbirinden daha etkin, daha başarılı olduğu durumlar vardır. Benzer durumlarda da birden çok tekniğin, problemin farklı aşamalarında ayrı ayrı veya birlikte kullanılması gerekebilir. Son yıllarda genetik algoritma yöntemi de kuantum mekaniksel sistemlerin elektronik özelliklerinin araştırılmasında kullanılmaya başlanmıştır (Şahin,2005). Kuantum genetik algoritma yöntemiyle Hartree-Fock Roothaan yöntemini birleştirerek sonlu ve sonsuz potansiyelle sınırlandırılmış bir elektronlu küresel kuantum nokta yapının elektronik yapısı da incelendi(Çakır ve ark.,2007-2008). Bazı yazarlar (Özmen ve ark.2009,Yakar ve ark.2010,Yakar ve ark. 2010,Çakır ve ark.2010) bir elektronlu küresel kuantum nokta yapıların lineer ve nonlineer optiksel özelliklerini, rölativistik düzeltme terimlerini (Yakar ve ark. 2013, Özmen ve ark.2013), off-center problemini (Yakar ve ark.2013) ve elektrik alan etkilerini(Çakır ve ark. 2013) araştırmışlardır.

2. KUANTUM NOKTA YAPILAR

Teknolojideki gelişmeler ve yarıiletken malzeme bilimindeki ilerlemeler, çok değişik yapı ve özelliklere sahip kuantum heteroyapıların üretilmesine imkan sağlamıştır. Bunun en önemli nedenlerinden birisi, haberleşme ve iletişim teknolojilerinde gözlenen aşırı talep, diğeri ise değişik özel uygulamaların ivme kazandırdığı deneysel ve teorik çalışmalardır. Hafıza ve hesaplama sistemlerine olan yoğun ve sürekli talep ve bunun yanı sıra sinyal iletim ve işleme hızlarının yükseltilmesi yönündeki araştırmalar, özellikli ve yeni mikroelektronik ve optoelektronik aygıtların geliştirilmesine zemin hazırlamıştır (Ünlü, 2005).

Tabiattaki bütün yapılar makroskobik, mikroskobik ve düşük boyutlu olmak üzere üç grupta ele alınabilir. Parçacıkların hareketini istatistiksel olarak tanımlayamayan yapılara mikroskobik yapılar denir. Bu yapıların boyutları 10A°-1000A° arasındadır. Düşük boyutlu yapıların deneysel olarak oluşturulabilmesi için, bu yapılar içindeki taşıyıcıların hareketlerinin potansiyel engeli yardımıyla sınırlandırılması gerekir. Boyuta bağlı olarak taşıyıcı hareketlerinin sınırlandırıldığı nano yapılar; kuantum kuyuları, kuantum telleri ve kuantum noktaları olarak üç ayrı grupta ele alabiliriz (Pehlivanoğlu,2009). Şimdi bu yapıların boyutlarındaki sınırlandırmalarla nasıl değişkenlik gösterdiğini ve matematiksel olarak nasıl ifade edildiğini inceleyelim.

2.1. Kuantum Kuyuları

Kuantum kuyuları elektronun hareketinin sadece bir boyutta sınırlandığı, diğer iki boyutta serbestçe hareket edebildiği yapılardır. Bu yapıların elde ediliş yönteminde yasak enerji aralığı büyük olan bir malzemenin arasına, yasak enerji aralığı küçük olan bir malzemenin ince bir tabaka halinde yerleştirilmesidir. **Şekil 2.1** de elektronların hareketinin y-doğrultusunda sınırlandırıldığı bir kuantum kuyusu verilmiştir. Elektronlar sadece iki boyutta serbest hareket edebildiği böyle yapılara iki boyutlu elektron gazı (2BEG) da denir. Sınırlandırma sadece y-doğrultusunda olduğu için kuantum etkisi sadece bu doğrultuda görülür.

Elektron y-doğrultusunda sadece L_y aralığında hareket edebilirken, x- ve z-doğrultusunda herhangi bir sınırlandırmanın olmadığı böyle bir yapı için dalga fonksiyonu

$$\psi(x,y,z) = \exp(ik_x x + ik_z z)\varphi(y) \qquad (2.1)$$

yazılabilir. Burada k_x ve k_z, *x*- ve z-doğrultusundaki dalga vektörünün bileşenleridir. $\varphi(y)$ ise sınırlandırmanın olduğu doğrultuya karşılık gelen dalga fonksiyonudur. Kuantum etkisinin görüldüğü y-doğrultusu için Schrödinger dalga denklemi aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\frac{\partial^2\varphi(y)}{\partial y^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E_y - V_y)\varphi(y) = 0 \qquad (2.2)$$

Burada E_y ve V_y sırasıyla, y-doğrultusundaki hareketin enerjisi ve enerji boyutunda sınırlayıcı potansiyeldir. Sınırlayıcı potansiyel sınırlarda sonsuz yükseklikte alınırsa, kuyu içinde V_y=0 olur. Kuyu sınırlarında sınır şartları uygulandığında dalga vektörünün y-doğrultusundaki bileşeni

$$k_{n_y} = \frac{n_y\pi}{L_y} \qquad n_y=1,2,3\ldots \qquad (2.3)$$

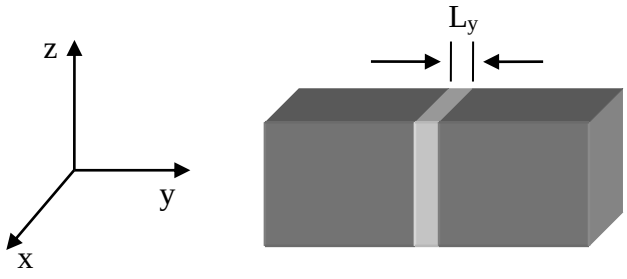
değerlerini alır. Görüldüğü gibi dalga vektörü bileşeni kesikli değerleri aldığı için kuyu içinde kesikli enerji özdeğerleri

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

olur. Bu durumda parçacığın toplam enerjisi,

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

ile verilir (Karaoğlu,2003).



Şekil 2.1. Bir kuantum kuyusunun şematik gösterimi

2.2 Kuantum Telleri

Kuantum telleri elektronların hareketlerinin iki boyutta sınırlı, tek boyutta serbestçe hareket edebildiği sistemlerdir. Böyle bir sistemde elektronların hareketlerinin sınırlandığı iki boyutta kuantum etkisi görülür. y- ve z-doğrultusunda sınırlandırmanın olduğu bir kuantum telinin şematik gösterimi **Şekil 2.2**'de verilmiştir. Böyle bir sistem içindeki elektron, tek serbestlik derecesiyle karakterize edilir. Bu yapı içinde hareket eden bir elektrona eşlik eden dalga fonksiyonu,

$$\psi(x,y,z) = \exp(ik_x x)\varphi(y,z) \tag{2.6}$$

biçiminde yazılabilir. Burada $\varphi(y,z)$ sınırlandırmanın olduğu doğrultulara karşılık gelen dalga fonksiyonudur. Sınırlandırmanın olduğu iki boyut için Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\varphi(y,z)+V(y,z)\varphi(y,z)=E_{y,z}\varphi(y,z) \tag{2.7}$$

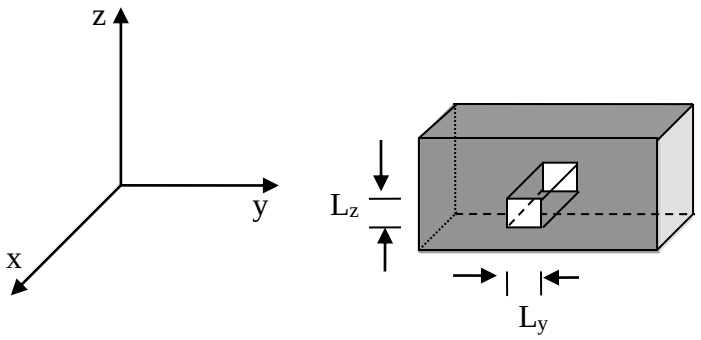
biçiminde yazılır. y- ve z-doğrultusunda uygulanan sınırlayıcı potansiyelleri sonsuz yüksek alırsak, kuyu içinde V(y,z)=0 olur. Bu durumda dalga fonksiyonuna sınır şartları uygulanırsa,

$$k_{n_y}=\frac{n_y\pi}{L_y},\quad \text{ve}\quad k_{n_z}=\frac{n_z\pi}{L_z} \qquad n_y=1,2,3,\ldots\ n_z=1,2,3,\ldots \tag{2.8}$$

elde edilir ve kesikli enerji özdeğerleri ise,

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

şeklinde ifade edilebilir (Karaoğlu,2003).



Şekil.2.2. İki boyutta hareketi sınırlı, tek boyutta serbest olan bir kuantum telinin şematik gösterimi.

2.3. Kuantum Nokta Yapılar

Kuantum nokta yapılar elektron hareketlerinin üç boyutta (tüm boyutlarda) sınırlandığı hetero yapılardır. **Şekil 2.3**'de bir kuantum nokta yapısı gösterilmiştir. Böyle bir sistemde her üç boyutta da kuantum etkisi görülür. Kuantum nokta yapısı için Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\varphi(x,y,z)+V(x,y,z)\varphi(x,y,z)=E\varphi(x,y,z) \qquad (2.10)$$

biçiminde yazılabilir.

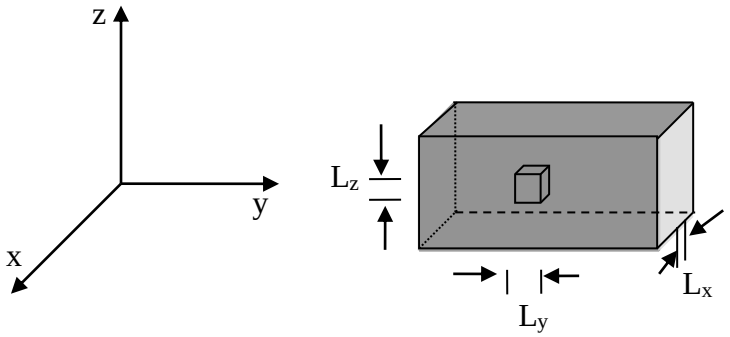
Tüm boyutlardaki sınırlandırıcı potansiyeli sonsuz alırsak, kuyu içinde V(x,y,z)=0 olur. Sınır şartlarından dalga vektörü bileşenleri

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

dir. Enerji özdeğerleri ise

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

elde edilir(Karaoğlu,2003).



Şekil 2.3. Kuantum nokta yapısının şematik gösterimi

3.KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELDE EDİLİŞ YÖNTEMLERİ

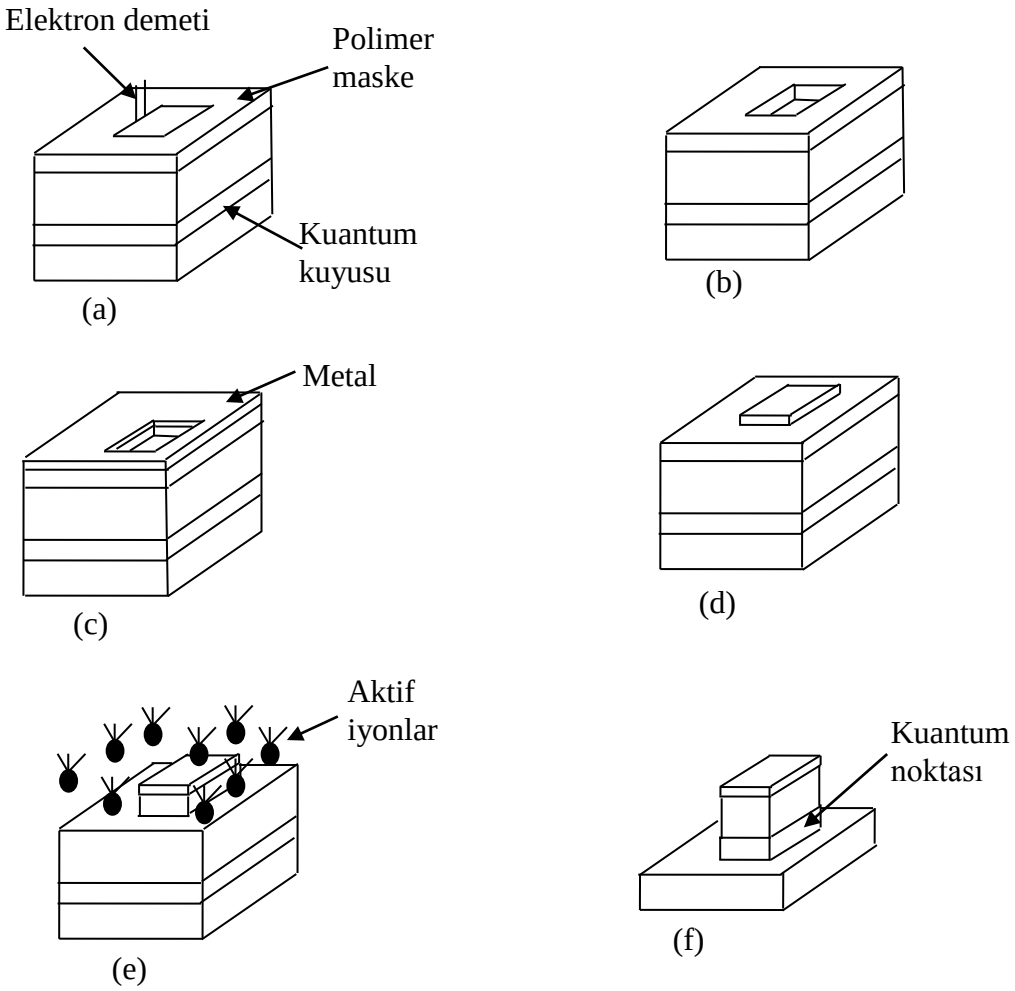
Nokta yapıların deneysel olarak oluşturulabilmesi, bu yapıların içindeki taşıyıcıların hareketlerinin belirli bölgelerde potansiyel engeli yardımı ile sınırlandırılması esasına dayanır. Bir dielektrik malzeme içerisine bir yarıiletken mikrokristal yerleştirilir. Dielektrik ve yarıiletken malzemenin E_g yasak enerji aralıklarının farklılığından dolayı ara yüzeyde bir potansiyel engeli meydana gelir. Bu potansiyel engeli nedeniyle de yarıiletken içerisindeki elektronların ve deşiklerin hareket bölgesi sınırlandırılabilir. Bu sınırlandırmalar yardımıyla kuantum noktaları deneysel olarak elde edilmiştir (Ünlü,2005).

3.1.Kendiliğinden Büyüme Yöntemi

Bu yolla elde edilen kuantum nokta yapıları boyutları küçük ve homojen büyüklükte, kenar kusurları olmayan ve oldukça elverişli büyüme süreçlerine sahip olduğu için optoelektronik ve mikroelektronik uygulamalarında büyük ümit vaad etmektedir. Bu yöntem kuantum noktalarının kendiliğinden kristalleştirilmesi yöntemidir(Petroff ve Denbaars,1994). Bu yöntemde alt tabaka ve kristalleşen malzemenin örgü sabitleri önemli ölçüde farklılık gösteriyorsa sadece ilk çökeltilen tek tabakalar, örgü sabiti alt tabakanınkine 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, rastgele dağılmış küçük odacıkların kendiliğinden oluşmasına neden olur. Bu odacıkların şekli ve büyüklüğü örgü sabitleri arasındaki uyuşmazlığa bağlı olarak tabaka içinde oluşan gerilme şiddetine, büyütmenin olduğu sıcaklığa ve büyütme hızına bağlıdır (Çakır,2007).

3.2. Asitle Eritme Yöntemi

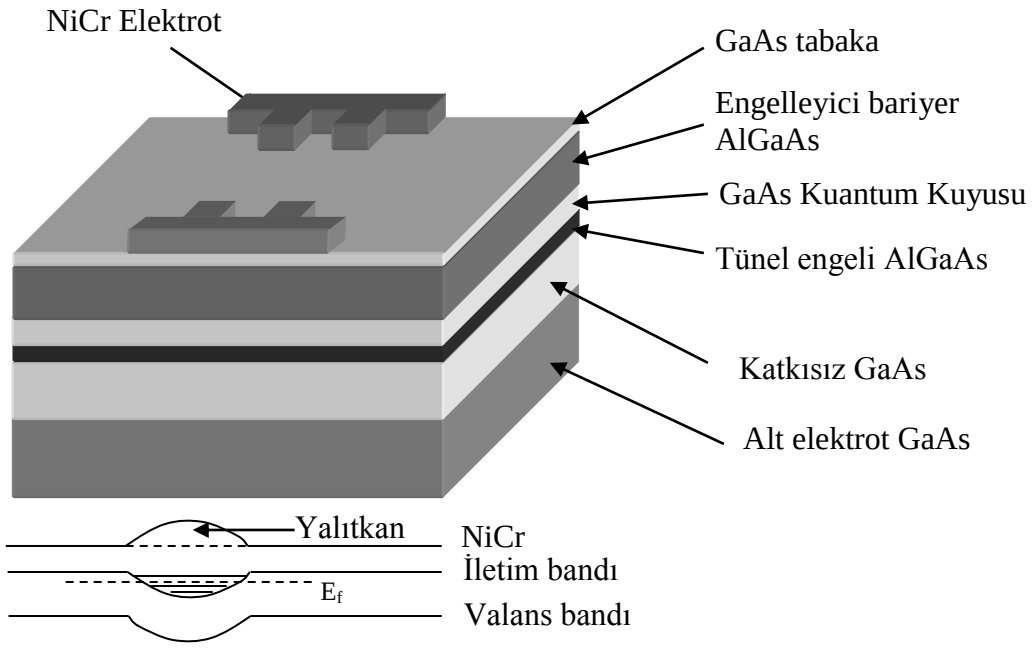
Bu yöntemde, bir veya daha fazla kuantum kuyudan oluşan örnek yüzey, polimer bir maske ile kaplanır ve nokta oluşturulacak yüzey elektron ve iyon ışını ile belirlenir. Belirlenen yüzeyden maske ayrılır ve yüzey ince metal tabaka ile kaplanır. Özel bir çözelti kullanarak polimer film ve koruyucu metal yüzey ayrılır ve metal yüzeyin kaldığı eritilen alanların dışında temiz örnek yüzey elde edilir(**Şekil3.2**).Burada boyutları 10-100 nm mertebesinde sınırlandırılmış kuantum yapıları elde edilir. Bu yöntemle elde edilen kuantum kuyularının kenarlarında malzemeye bağlı olan kusurlar oluşabilir (Jacak, 2000).



Şekil 3.2. Kuantum nokta yapısının üretim aşamalarının şematik olarak gösterimi.

3.3. Modüle Edilmiş Elektrik Alan Yöntemi

Asitle eritme sistemine göre bu yöntemin üstünlüğü elde edilen kuantum kuyularının kenarlarında eritme yönteminde oluşan malzemeye bağlı olan kenar kusurları oluşmaz. Benzer yönü ise bu yöntemle eritme yönteminde olduğu gibi yan yana düzgün dizilmiş birden fazla kuantum noktası oluşturulabilir. Bu yöntemle kuantum kuyusunun elde edilişi **Şekil 3.3.** de şematik olarak gösterilmiştir.



Şekil 3.3. Kuantum kuyusu üzerinde minyatür elektrotlar oluşturulması yöntemiyle kuantum noktası üretimi.

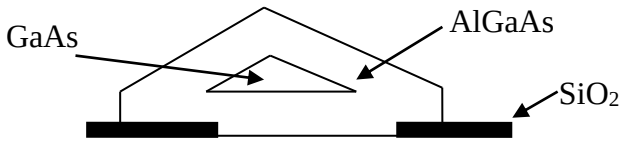
Kuantum kuyusu yüzeyi üzerine çok küçük elektrotlar yerleştirilmesi esasına dayanan litografik bir yöntemdir. Bu tekniğin uygulanmasında elektrotlara belli bir büyüklükte potansiyel farkı uygulanması ile elektronların hareketini sınırlandıran çok küçük bir elektrik alanı oluşur. Bu elektrik alan uygulanan gerilim ile ayarlanabilir. Litografi tekniği ile önce malzeme yüzeyi üzerinde küçük GaAs odacıkları üretilir. Daha sonra bu odacıkların üzeri elektrot olarak kullanılması için metal bir tabaka ile kaplanır. Metal tabakaya gerilim uygulandığında bir elektriksel potansiyel ve elektrik alanı oluşur. Bu potansiyel ve elektrik alanı yardımıyla kuantum kuyusunun yüzeyi ve elektrot arasındaki mesafe ayarlanabilir. Uygulanan elektriksel potansiyelden dolayı malzemenin iletkenlik ve valans bant yapısı değişime uğrar. Diğer taraftan kuantum kuyusu ile elektrot arasındaki modülasyonu yerine **Şekil 3.3.** 'de gösterildiği gibi malzemenin alt kısmında elde edilen n^+GaAs elektrot olarak kullanılır(Alsmeier ve ark.1990, Ashoori ve ark. 1993). Böylece malzemenin hem alt hem de üst kısmına gerilim uygulanmış olur. Oluşan potansiyeller yardımı ile kuyunun iletkenlik bandının derinliği ve genişliği ayarlanabilir. Aynı zamanda kuantum noktası içinde hareketi sınırlandırılabilecek elektron sayısı da ayarlanabilir.

3.4. Seçici Büyütme Yöntemi

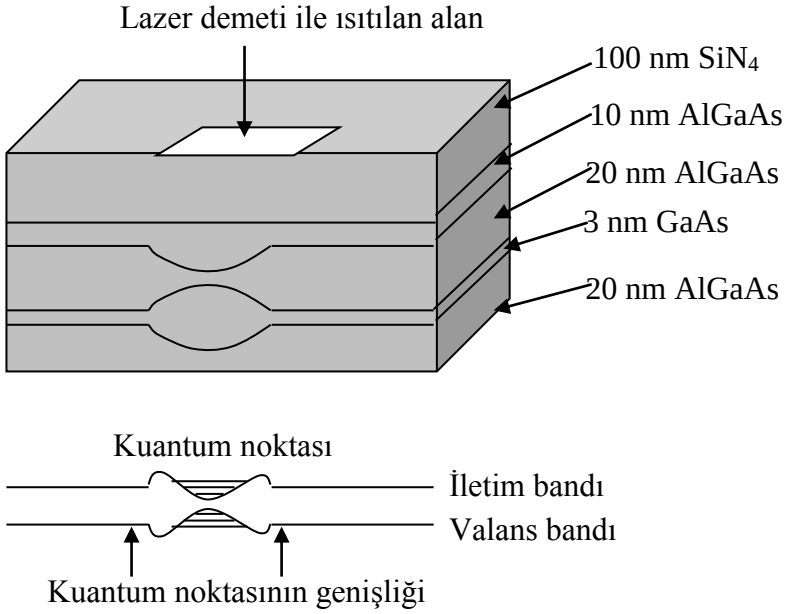
Bu yöntemle elde edilen bir kuantum nokta yapısının boyutları 100 nm den daha küçüktür. Bu yöntemde, yasak enerji aralığı çok dar olan GaAs gibi yarı iletken bir malzeme yüzeyinin üzeri daha geniş yasak enerji aralığına sahip AlGaAs gibi malzemeyle kaplanır. Sonra bu tabakanın üzeride koruyucu bir tabaka ile (SiO_2) ile kaplanır. Yüzey üzerinde büyütmenin yapılacağı alan belirlenir ve bu alan üzerinde eritme yapmak suretiyle minyatür üçgenler oluşturulur. Bu minyatür üçgen yüzeylere MOCVD tekniği uygulanarak sıcaklıkları 700 ^{0}C-800 ^{0}C 'ye kadar çıkarılır. Sıcaklık etkisiyle hacimleri büyüyen üçgen yüzeyler tetrahedral piramit haline dönüşür ve büyütme tamamlanmış olur(Raymond ve ark.,1996, Grundmann ve ark.,1995). Bu yöntemle elde edilen bir kuantum nokta yapısı **Şekil 3.4.**' de gösterilmiştir.

3.5. Kuantum Kuyusu ve Engel Arası İnterdifüzyon Yöntemi

Bu yöntem kuantum kuyusunun belirlenen bir bölgesinin lazer demeti ile ısıtılmasına dayanan bir yöntemdir. Elde ediliş yöntemi; kalınlığı yaklaşık olarak 3 nm olan GaAs kuantum kuyusu, yaklaşık olarak 20 nm kalınlığına sahip iki adet $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ yapıları 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. **Şekil 3.5.** da görüldüğü gibi seçilen belirli bir yüzey lazer demetiyle ısıtmaya tabi tutulur. Isıtılan yüzeyin altında kalan kısımlarda galyum ile alüminyum atomları birbirine karışır ve bölgesel bant yapısının oluşmasına neden olur. Seçilen bölgenin altında kalan yasak enerji aralığı, ısıtılmayan bölgelerin yasak enerji aralığından daha küçüktür. Böyle bir işlem büyük boyutlu malzemelerde kullanılırsa, aralarında yasak enerji aralığı bulunan ve içinde elektron veya elektronların sınırlandığı kuantum noktaları elde edilir (Jacak ve ark.,1998).



Şekil 3.4. Seçici büyütme yöntemiyle kuantum nokta yapısının elde edilmesi



Şekil 3.5. Kuantum kuyusunun elde edilmesi

3.6. Yarı İletken Mikrokristaller

Diğer bir teknik ise, yarıiletkenlerin mikrokristal formunun, cam gibi dielektrik malzemeler içerisine yerleştirilmesi şeklinde kuantum noktalarının üretilmesidir. Bu düşünceden yola çıkarak yapılan ilk çalışmada (Ekimov ve ark., 1985), yaklaşık %1 oranında yarıiletken fazların (CdS, CuCl, CdSe, CuBr) eklendiği silikat cam, birkaç saat boyunca yüksek sıcaklıklara maruz bırakılmıştır. Böylece, yaklaşık eşit büyüklüklerde, uygun mikrokristal formları elde edilmiştir. Ortalama kristal yarıçapının sıcaklığa ve ısıtma zamanına bağlı olması, mikrokristallerin büyüklüklerinin kontrol edilebilmesini sağlamaktadır. Bu yöntemle elde edilen noktaların yarıçapları 1,2-38 nm aralığında değişmektedir. Dielektrik malzeme olarak cam yerine kloritler kullanılmaktır.

4. HESAPLAMA TEKNİĞİ

Kuantum nokta yapıların elektronik ve fiziksel özelliklerinin anlaşılabilmesi için çok farklı teorik yöntemler kullanılmaktadır. Bunlara örnek olarak, varyasyonel yöntemler, matris köşegenleştirme teknikleri, kuantum Monte Carlo teknikleri, yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT) ve genetik algoritma yöntemi (GA) verilebilir.

Araştırmamız da genetik algoritma yöntemini kullanacağız. GA tekniği ile Schrödinger denkleminin olası çözümleri olan dalga fonksiyonları ve enerjileri belirlenecek ve bu dalga fonksiyonları kullanılarak yapının çeşitli fiziksel niceliklerinin beklenen değerleri hesaplanabilir.

Kuantumlu yapılarda kullanıldığında Kuantum Genetik Algoritma (KGA) olarak da adlandırılan bu yöntem varyasyon yönteminde olduğu gibi enerji minimizasyon ilkesine dayanır ve kuantum mekaniksel sistemleri temsil eden Schrödinger denkleminin çözümlerini bulmak için de kullanılır.

4.1. Genetik Algoritma

Biyolojik dünyadaki genetik süreçlerden ilham alan genel bir araştırma ve sayısal optimizasyon (eniyileme) yöntemidir. Ortama iyi uyum sağlayan bireylerin hayatta kalması, sağlayamayan bireylerin ise elenmesi olarak tarif edebiliriz (Coley,2001). Bu yöntem günümüzde mühendislik ve malzeme biliminde yaygın olarak kullanılmaktadır (Holland,1975). Kuantum mekanik sistemlerin taban durum enerjisinin belirlenmesinde kullanılan bu sistem ayrıca fiziğin birçok alanında da kullanılmaktadır. Kuantumlu yapılarda kullanıldığında Kuantum Genetik Algoritma (KGA) olarak da adlandırılan bu yöntem varyasyon yönteminde olduğu gibi enerji minimizasyon ilkesine dayanır ve kuantum mekaniksel sistemleri temsil eden Schrödinger denkleminin çözümlerini bulmak için de kullanılmaya başlanmıştır (Şahin ve Tomak 2002, Şafak ve ark. 2003, Şahin ve Tomak, 2005).

Genel bir araştırma ve optimizasyon yöntemi olan KGA, varyasyon tekniğinden oldukça farklıdır. Varyasyon yöntemi bazı kurallara bağlı iken, KGA tekniği rastgeleliğe dayanır. Varyasyon yöntemi çözüme tek bir noktadan (analitik ifadeden elde edilen bir sonuçtan) başlarken, KGA tekniği problemin olası çözümlerini oluşturan noktalar topluluğu (başlangıç popülasyon) ile işe başlar. Varyasyonel yöntemde

parametreler sıralı bir biçimde değiştirilirken, KGA da belirli bir sıra yoktur. Tüm parametreler aynı anda değiştirilebilir. Varyasyonel yöntemde genelde ikilik kodlama sistemi kullanılırken, KGA parametreler farklı şekillerde kodlanabilir(Çakır,2007).

Kuantum genetik algoritma (KGA) yeniden oluşum (veya kopyalama), çaprazlama ve mutasyon olmak üzere üç temel üzerine kurulmuştur (Coley, 2001). Yeniden oluşum sürecinde bireylerin hayatta kalma olasılıkları belirlenir. Hayatta kalma olasılığı yüksek olan bireyler bir sonraki nesle aktarılırken hayatta kalma olasılığı düşük olan bireyler ise elenir. Bu işlem için her nesilde bazı seçim operasyonunun uygulanması gerekir. Çaprazlama (Crossover) sürecinde biyolojide kullanılan doğal çaprazlama işlemine benzer bir sürece tabi tutulur. Çaprazlama işlemi, yeniden oluşumda elde edilen bireyler üzerine uygulanır. Bu bireyler içinden rastgele seçilen iki birey üzerinden yürütülür. Bu iki bireyin genetik bilgileri rastgele bir noktadan kesilerek, birinci bireyin kesilen noktanın solunda kalan bilgiler ikinci bireyin kestiğimiz noktanın sağında kalan bilgilerle, birinci bireyin kesilen noktanın sağında kalan bilgiler ikinci bireyin kestiğimiz noktanın solunda kalan bilgilerle eşleştirilir. Böylece her iki bireyde birbirlerinin genetik bilgilerini taşımış olurlar. Mutasyon işlemi yerel minimumlardan kurtulmak için uygulanan bir süreçtir. Mutasyon işlemi nüfus içinden rastgele seçilen bir birey üzerinden gerçekleştirilir. Çaprazlama ve mutasyon süreçlerinin uygulanmasında bir gerçekleştirme olasılığı belirlenir. Çaprazlama sürecinde gerçekleştirme olasılığı çeşitliliği artırmak için yüksek seçilir. Mutasyon sürecinde gerçekleştirme olasılığı yanlış çözümlere gitmemek için düşük seçilir. Yani olasılık büyük seçilirse yakınsama güçleşir ve rastgelelik çok artar.

KGA tekniği uygulanırken iki farklı yöntemden bahsedilebilir. Bunlardan birincisi parametre eniyilemesi, ikincisi ise dalga fonksiyonu en iyilemesidir. $\psi_n(c_1, c_2, ..., c_n, \zeta_1, \zeta_2, ..., \zeta_n)$ kuantum mekanik sistemi temsil eden Schrödinger denkleminin olası çözümü olsun. Buradaki c_i ve ζ_i ler sırasıyla açılım katsayısı ve orbital üstelleridir. Eğer varyasyon tekniğinde olduğu gibi parametre eniyilemesi yapılıp 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 en iyilemesi 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 c_i ve ζ_i ler bir kez kullanılmış olur. Toplam birey sayısı nüfus büyüklüğü veya sayısı olarak adlandırılır (Çakır,2007).

Oluşturulan başlangıç nüfusu içindeki her bir birey, A_n herhangi bir bireyin normalizasyon sabiti olmak üzere

$$A_n^2 \langle \psi_n | \psi_n \rangle = A_n^2 \int_{tümuzay} \psi_n^* \psi_n dV = 1 \tag{4.1}$$

ifadesiyle normalize edilir. Normalize olmuş bu dalga fonksiyonu nüfusu kullanılarak her bir birey için enerjinin beklenen değeri hesaplanır. Elde edilen bu enerji değerleri kullanılarak her bir bireyin uygunluk değerine bakılır ve genetik işlemler bu uygunluk değeri üzerinden yürütülür.

4.1.1. Yeniden Oluşum (Üretme)

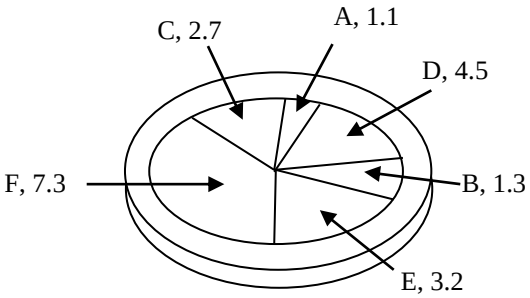
Yeniden üretme sürecinde yeni nesil oluşturmak için her bir bireyin uygunluk değerlerine bakılır ve uygunluk değeri büyük olan bireyler yeni nesle aktarılırken uygunluk değeri küçük olan bireyler elenir. Herhangi bir i. bireyin enerjisinin beklenen değeri E_i aşağıdaki gibi eşitlikle uygun (fitness)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

$$F_i = e^{-\beta(E_i - \bar{E})/(\bar{E} - E_{\min})} \tag{4.2}$$

Burada $\bar{E}$ ve E_{min} sırasıyla ortalama ve minimum enerjileri gösterir ve β ayar parametresidir. Yeniden oluşumda yeni nüfus bireyleri bir önceki nesilden seçilir. Her bir bireyin gelme olasılığı P_i o bireyin uygunluk(fitness) değeri olan F_i ile orantılıdır. Örneğin, bir nüfus içindeki birey sayısı N_{pop} olmak üzere

$$P_i = \frac{F_i}{\sum_{i=1}^{N_{pop}} F_i} \tag{4.3}$$

Bu işlemde bazı bireylerin gelme olasılığı büyük olurken bazı bireylerin gelme olasılığı küçük olur. Bu durumda olasılığı büyük olan bireyler birden fazla gelirken, olasılığı düşük olan bireyler hiç gelmeyebilir. Yani P_i değeri büyük olan bireyin yeni nesle aktarılma olasılığı daha çok, küçük olan bireyin yeni nesle aktarılma olasılığı daha az olacaktır. Bunun için bir seçim işlemi uygulanır. Bu işlem için farklı yöntemler uygulanabilir.



Şekil 4.1. Rulet çarkının şematik gösterimi.

Bunlardan en yaygın olarak kullanılanları *uygunluk- oranı* ve *rulet çarkı* yöntemidir (Goldberg 1999, Coley 2001).

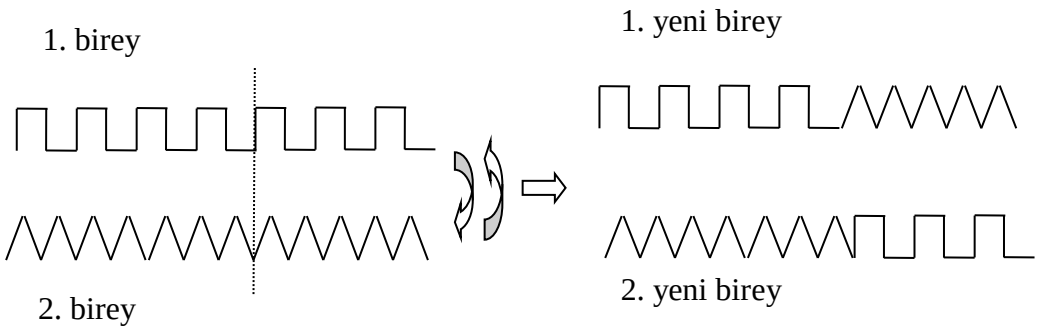
Rulet çarkı yöntemiyle seçim yapmak için öncelikle Denk.(4.3) dan elde edilen uygunluk değerleri kullanılarak bir rulet çarkı oluşturulur. Bu uygunluk değerleri kullanılarak oluşturulan rulet çarkı şematik olarak **Şekil 4.1.** de gösterilmiştir.

Şekil 4.1. den de görüleceği gibi uygunluk değeri örneğin 7.3 olan bireylerin gelme olasılığı fazla iken uygunluk değeri 1.1 olan bireylerin gelme olasılığı çok az olacaktır. Böylece uygunluk değerleri yüksek olan bireyler yeni nesle daha çok aktarılacaktır. Çark nüfus sayısı kadar çevrilerek yeni bireyler elde edilir.

4.1.2. Çaprazlama (Crossover)

Biyolojik süreçte gerçekleşen çaprazlama işlemi, iki kromozomun genlerinin birbiriyle değiştirilmelerini sağlayan bir işlemdir. Çaprazlama işlemi yeniden oluşturma işlemiyle oluşturulan yeni bireyler üzerinden yapılarak yeni kuşak için çok daha iyi bir nesil oluşturmak için yapılır. Bunun için nüfus içinden rastgele iki birey seçilerek, bu iki birey arasında biyolojik süreçteki çaprazlama işlemine benzer bir işlem yürütülür. Çaprazlama işleminin rastgele seçilen iki birey arasında nasıl gerçekleştirildiği şematik olarak **Şekil 4.2.** deki gibi gösterilebilir.

Seçilen iki birey rastgele belirlenen bir noktadan kesilerek birbiriyle yer değiştirilir. Böylece iki yeni birey elde edilmiş olur. Belirlenen iki yeni birey, farklı oranlarda hem birinci bireyin hem de ikinci bireyin bilgilerini taşımaktadır. Rastgele kesme işlemi sadece bir noktadan yapılacağı gibi birden fazla noktadan da kesilebilir.



Şekil 4.2. Çaprazlama işleminin şematik gösterimi.

Dalga fonksiyonu eniyilemesi yönteminde çaprazlama işlemi, dalga fonksiyonunu oluşturan sayısal değerler üzerinden yürütülür. Rastgele seçilen iki dalga fonksiyonu $\psi_1(c_i,\zeta_i)$ ve $\psi_2(c_i,\zeta_i)$ kendi aralarında çaprazlama işlemi

$$\begin{aligned}\psi_1'(c_i,\zeta_i) &= \psi_1(c_i,\zeta_i)S(c_i,\zeta_i) + \psi_2(c_i,\zeta_i)(1-S(c_i,\zeta_i)) \\ \psi_2'(c_i,\zeta_i) &= \psi_2(c_i,\zeta_i)S(c_i,\zeta_i) + \psi_1(c_i,\zeta_i)(1-S(c_i,\zeta_i))\end{aligned} \tag{4.5}$$

biçiminde bir işlemle yapılabilir. Böylece elde edilen yeni bireylerin her biri, bir önceki iki bireyin bilgisini taşımış olur. Böyle bir işlem yapılırken $S(c_i,\zeta_i)$ çok iyi seçilmelidir. Çünkü dalga fonksiyonlarının belirli ağırlıkları alınıp, birleştirilerek yeni dalga fonksiyonları elde edilirken, fonksiyonlarının türevlerinde bir süreksizliğe neden olabilir. Bu da kuantum mekaniğinin postülalarına ters düşen bir durumdur ve yanlış çözümlere götürebilir. Bunu önlemek için çaprazlama işleminde $S(c_i,\zeta_i)$ ya yumuşak geçişli bir fonksiyon (Grigorenko ve Garcia 2002) ya da değerini (0,1) arasında rastgele bir sayı seçilmelidir. Böylece dalga fonksiyonundaki istenmeyen kırılmalar önlenmiş olur.

Parametre eniyilemesi yönteminde çaprazlama işlemi dalga fonksiyonu eniyilemesi yönteminin tersine, parametrelerin sayısal değerlerine karşılık gelen ikilik kodlar üzerinden gerçekleştirilir. İkilik kodlar üzerinden hem tek noktadan hem de iki ayrı noktadan kesilerek yapılan bir çaprazlama işlemi:

1. Birey 11010/1100100=3428 $\rightarrow$ 11010**0010111** =3351 1. yeni birey
2. Birey 01010/0010111=1303 $\rightarrow$ 01010**1100100**=1380 2. yeni birey

veya

1. Birey 11010/110/0100=3428 $\rightarrow$ 11010**0010100** =3348 1. yeni birey
2. Birey 01010/001/0111=1303 $\rightarrow$ 01010**1100111**=1383 2. yeni birey

biçiminde yapılabilir.

4.1.3. Mutasyon

Genetik algoritmanın diğer bir süreci olan mutasyon işlemi, çaprazlama işleminden sonra oluşturulmuş yeni nesil içinden rastgele seçilen bir bireye uygulanır. Mutasyon işlemi sistemin düştüğü yerel minimumlardan kurtarılması açısından önemli bir rol oynar. İkili kodlama sisteminde rastgele üretilmiş bir başlangıç popülasyonun tüm bireylerinin ilk rakamı sıfır olabilir. Böyle bir durumda çaprazlama işlemiyle ilk rakamı 1 olan bir birey elde etmek mümkün değildir. Yani çaprazlama işlemiyle ikilik kodlamada 12 hanelik bir sayının değeri 0111 1111 1111=2047 olacaktır. Oysa ikilik kodlamada 12 hanelik bir sayının en büyük değeri 1111 1111 1111= 4095 tir. Böyle bir minimumdan kurtulmak için mutasyon işlemi uygulanır. Mutasyon işleminin anlamı; ikilik kodlamada, değeri 1 olan bir kromozomu 0, değeri 0 olan bir kromozomu 1 yapmak demektir.

Dalga fonksiyonu eniyilemesinde çok şiddetli bir mutasyon uygulamak dalga fonksiyonunda istenmeyen kırıklıklara veya yanlış çözümlere neden olabilir. O yüzden mutasyon şiddetini küçük seçmek gerekir. Eğer rastgele seçilmiş bir $\psi_1(c_i,\zeta_i)$ dalga fonksiyonuna mutasyon uygulanırsa,

$$\psi_1'(c_i,\zeta_i) = \psi_1(c_i,\zeta_i) + \psi_m(c_i,\zeta_i) \tag{4.6}$$

biçiminde bir mutasyon uygulanabilir. Burada $\psi_m(c_i,\zeta_i)$ mutasyon fonksiyonudur. Çeşitli mutasyon fonksiyonları kullanılabilir. Kuantum mekanik sistemlerin taban durum enerjisinin belirlenmesinde Gaussian tipi bir fonksiyon kullanmışlardır (Grigorenko ve Garcia 2000). Çok boyutlu yüzeylerdeki yerel kritik noktaların belirlenmesinde dalga fonksiyonunun değerini belli oranlarda rastgele artırarak veya azaltarak uygulamışlardır (Chaudhury ve Bhattacharyya, 1999).

5.FİZİKSEL YAKLAŞIMLAR

Kuantum mekaniksel bir sistemin fiziksel özelliklerini belirlemek için, öncelikle bu sistemin yeterince iyi bir şekilde modellenmesi ve Schrödinger denkleminin yazılması gerekmektedir. Bunun için de ele alınan sistemin özelliklerine bağlı olarak etkin kütle yaklaşımı gibi bazı fiziksel yaklaşımlar kullanılarak Schrödinger denklemi yazılır. Ayrıca, göz önüne aldığımız sistem tek parçacıklı ya da çok parçacıklı oluşuna göre yine bir takım yaklaşıklıklar yapmak kaçınılmaz hale gelir. Sistemin sınır şartlarının da iyi tanımlanması gerekir. Göz önüne alınan problemin matematiksel modelini oluştururken kuantum mekaniğinin temel varsayımlarına dikkat edilmeli ve bu varsayımlara aykırı bir yaklaşım yapılmamalıdır. Aksi halde yapılan hesaplamalar yanlış sonuçlara neden olabilir. Bu tür yaklaşımlar altında oluşturulan Schrödinger denklemi, varyasyon yöntemi, kuantum genetik algoritma, matris köşegenleştirme tekniği ya da başka teknikler kullanılarak çözülür (Şahin,2005).

5.1. Küresel Kuantum Nokta Yapının Elektronik Özellikleri

5.1.1.Giriş

İletim bandı ile valans bandı arasında sonlu bir yasak enerji aralığı bulunan malzemelere yarı iletken malzemeler denir. Valans bandında üç veya beş elektron bulunan atomlardan oluşan yarı iletken malzemelere III-V bileşikli yarı iletkenler (GaAs, InSb), iki veya altı elektronlu atomlardan oluşan yarı iletken malzemeler ise II-VI bileşikli yarı iletkenler (CdS, ZnS) ve valans bandında dört elektron bulunan Si ve Ge gibi elementlerden oluşan yarı iletkenlere ise IV-IV bileşikli yarı iletkenler denir. Yarı iletken malzemeler içine safsızlık atomları yerleştirilir ve herhangi bir uyarılmaya maruz bırakılırsa, bir elektron iletim bandına çıkarılabilir. Bu durumda malzeme serbest hareket edebilen bir elektron kazanmış olur ve yarı iletken malzeme uyarılmış olur. Bu da safsızlık elektron sistemi için taban enerji durumdur. Eğer katkılanan atomun valans elektron sayısı, yarı iletken malzemeyi oluşturan atomların valans elektron sayısından fazla ise iletim bandının hemen altında yasak enerji aralığında donor seviyesi denilen yeni enerji seviyeleri oluşur. Eğer katkılanan atomun valans bandındaki elektron sayısı yarı iletken malzemeyi oluşturan atomlarınkinden az ise bu kez valans bandının hemen üzerinde akseptör seviyesi denilen yasak enerji aralığında tuzak seviyeleri oluşur.

Yarı iletken malzemelerin fiziksel özelliklerinin inceleyebilmek için iyi bir teorik model oluşturmak gerekir. Teorik model oluşturduktan sonra bu yapılar için Schrödinger denkleminin oluşturulması ve çözülmesi gerekir. Schrödinger denkleminin iyi çözümlerinin elde edilebilmesi için, elektronlar bir malzeme içinde bulunduğundan dolayı etkin kütle yaklaşımı gibi bazı yaklaşımlar yapılması gerekir. Ayrıca kuantum mekaniğinin varsayımlarına uygun sınır şartlarının oluşturulması ve sisteme uygun hesaplama tekniğinin seçilmesi gerekir.

5.1.2.Tek Elektronlu Kuantum Kuyusu

Kuantum nokta yapılarının elektronik özelliklerini incelemek için a yarıçaplı bir küresel kuyu içinde serbest hareket edebilen bir elektronu göz önüne almak uygun olacaktır. Böyle bir kuyunun şematik gösterimi **Şekil 5.1.** de gösterilmiştir. Kuantum nokta yapılarında elektronlar sınırlayıcı bir potansiyel tarafından hapsedilir. Küresel sonlu bir V(r) potansiyeli tarafından sınırlandırılmış küresel nokta yapısında hareket eden bir elektron için Schrödinger denklemi küresel koordinatlarda

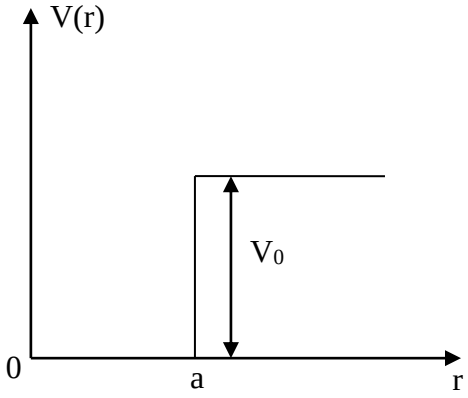
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$$

olmak üzere aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$H\psi = E\psi \tag{5.1}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi) + V(r)\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}\psi(r,\theta,\varphi) + V(r)\psi(r,\theta,\varphi) = E\psi(r,\theta,\varphi) \tag{5.2}$$



Şekil 5.1. Sonlu derinlikli küresel potansiyel kuyusu.

Buradaki $\psi(r,\theta,\varphi)$ dalga fonksiyonunu

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R_{n,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \tag{5.3}$$

radyal ve küresel ve olmak üzere iki ayrı kısımda yazabiliriz. $Y_{\ell,m}(\theta,\varphi)$ iyi bilinen küresel harmonik fonksiyonlardır. Bu durumda küresel simetrik potansiyel için Denk.5.2 deki Schrödinger denklemi

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R_{n,\ell}(r)}{\partial r}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left\{E - V(r) - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right\}R_{n,\ell}(r) = 0 \tag{5.4}$$

biçimini alır.

Buradaki V(r) sınırlandırıcı potansiyeli , a nokta yarıçapı olmak üzere

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \le a \\ \infty, & r > a \end{cases} \tag{5.5}$$

biçiminde sonsuz küresel bir potansiyel olduğunu kabul edersek, o zaman Schrödinger denkleminin radyal kısmı

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial R_{n,\ell}(r)}{\partial r}\right)+\frac{2m}{\hbar^2}\left\{E - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right\}R_{n,\ell}(r) = 0 \tag{5.6}$$

olur. Burada,

$$\alpha = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{ve} \quad \rho = \alpha r, \tag{5.7}$$

dönüşümleri uygulanırsa, Denk.(5.6)

$$\frac{\partial^2 R_{n,\ell}(\rho)}{\partial \rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{\partial R_{n,\ell}(\rho)}{\partial \rho} + \left\{1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right\} R_{n,\ell}(\rho) = 0 \tag{5.8}$$

biçiminde küresel Bessel diferansiyel denklemi formunu alır. Böyle bir denklemin genel çözümü

$$R_{n,\ell}(\rho) = Aj_\ell(\rho) + Bn_\ell(\rho) \tag{5.9}$$

olur. Buradaki $j_\ell(\rho)$ ve $n_\ell(\rho)$ fonksiyonları sırasıyla küresel Bessel ve Küresel Neumann fonksiyonlarıdır(Abromowitz and Stegun 1970, Arfken 1985). Bu dalga fonksiyonunda r = 0 da Neumann fonksiyonları ıraksak olduğu için B = 0 seçilir. Bu durumda kuyu içinde dalga fonksiyonu

$$R_{n,\ell}(\rho) = Aj_\ell(\rho) \tag{5.10}$$

elde edilir. r = R da ise sınırlayıcı potansiyel sonsuz olduğu için elektron kuyu dışına çıkamaz ve $j_\ell(\rho) = 0$ olur. Bu durumda ℓ'nin alacağı değerlere göre parçacığın kuyu içindeki enerji değerleri belirlenebilir. $\ell = 0$ için,

$$j_0(\alpha a) = \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} = 0 \tag{5.11}$$

olur. Bu eşitlikte ancak

$$\alpha a = n\pi \ , \quad n=1,2,..,\infty \tag{5.12}$$

olması ile sağlanır. Elektronun kesikli enerji özdeğerleri ise

$$E_{n,0} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad n=1,2,\ldots,\infty \tag{5.13}$$

bulunur. $\ell = 1$ durumunda ise,

$$j_1(\alpha a) = \frac{\sin(\alpha a)}{(\alpha a)^2} - \frac{\cos(\alpha a)}{(\alpha a)} = 0 \tag{5.14}$$

olur. Bu denklemin kökleri ise sayısal analiz yöntemiyle veya grafik yöntemle belirlenebilir. Bu denklemin kökleri 4.493, 7.723, 10.904,… olarak bulunur. Bessel fonksiyonunun ilk kökü için enerji özdeğeri;

$$E_{1,1} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{4.493}{a}\right)^2 \tag{5.15}$$

elde edilir. Benzer şekilde ℓ'nin diğer değerleri içinde enerji özdeğerleri hesaplanabilir(Karaoğlu, 2003).

Disk benzeri kuantum nokta yapı için (θ=π/2 de) küresel harmonikleri aşağıdaki gibi ifade edilebilir. Küresel harmonikler,

$$Y_\ell^{\,m}(0,\phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}$$

biçimindedir.Burada $P_l^m(\cos\theta)$ Legendre polinomudur. θ=π/2 için küresel harmonikler,

$$Y_\ell^{\,m}(0,\phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} (-1)^{(\ell-m)/2} \frac{(\ell+m)!}{2^\ell (\frac{\ell-m}{2})!(\frac{\ell+m}{2})!} e^{im\phi} \quad , \qquad \ell+\text{m çiftse}$$

$$Y_\ell^{\,m}(0,\phi) = 0 \ , \qquad \ell+\text{m tekse}$$

elde edilir.

Disk biçimli yapılar küresel noktaların limit durumuna karşılık gelir.Bu durumda ℓ+m tek değerleri yasaklanmıştır. Z doğrultusunda enerji seviyesi tek seviye ile sınırlandırılmış ve X ve Y yönünde enerji kuantumlaşmıştır. Dolasıyla 1s , 2s , $2p_{\pm}$, 3s , $3p_{\pm}$, $3d_0$, $3d_{\pm 2}$ durumları izinlidir.

5.1.3. Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özellikleri

Bir noktanın disk şeklinde dairesel bir şekli varsa ve sınırlayıcı potansiyeli harmonik ise bu sistem yüksek dereceli bir simetri sistemi demektir. Bu simetri kabuk yapısını oluşturan tek parçacıklı dejenere setler oluşturur. İki boyutlu potansiyel için böyle bir kabuk yapısı istikrarlı hesaplamalarla tahmin edilebilir. Atomların kuantum seviyelerini elektronla doldurmada, Pauli dışarlama ilkesi yetersiz kalır. Pauli ilkesi ile birlikte fiziğin temel ilkelerinden birisi olan, öncelikle küçük enerjili seviyelerin doldurulması, yani küçük enerjiye öncelik ilkesi de göz önüne alınmalıdır. Sonuç olarak atomun kuantum seviyelerini elektronlarla doldururken bu iki ilke birlikte kullanılmalıdır. İlkeleri bir kez daha ifade edecek olursak:

** Bir atomda iki elektron aynı kuantum sayılarına sahip olamazlar.

** Bir kuantum seviyesinin enerjisi ne kadar negatif ise seviye o kadar kararlıdır.

Atomlarda kuantum seviyelerini elektronlarla doldururken Pauli ilkesi göz önüne alınacağından baş kuantum sayısı,

n=1,2,3,4,...,∞

yörünge açısal momemtum kuantum sayısı,

l=0,1,2,3,4,…,(n-l)

yörünge magnetik kuantum sayısı,

m_l =-l ,…,0,…,+ l $\longrightarrow$ $(2l+1)$ tane farklı değerler alır.

Spin kuantum sayısı

s=1/2,

spin magnetik kuantum sayısı

m_s =1/2,-1/2 $\longrightarrow$ (2s+1)=2 farklı değer alır.

Baş kuantum sayısı n aynı elektronlar bir kabuk oluştururlar. Baş kuantum sayısı n ile birlikte yörünge kuantum sayısı l'si de aynı olan elektronlar ise bir alt kabuk oluşturlar. Kuantum sayılarının yukarda verilen değişim sınırlarını göz önüne alarak, bir alt kabuğa ya da o kabuğa kaç elektron yerleşebileceğini belirleyebiliriz. Bir alt kabuğa konabilecek elektron sayısı m_l ve m_s kuantum sayılarının belirlediği durum sayılarının çarpımı ile bulunur. Bir kabuğa yerleştirilebilecek toplam elektron sayısı N olmak üzere;

$$N = \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) = 2[1+3+5+.....+(2n-1)] = 2n^2$$

olur. Bir kabuk tam dolu ise dolu kabuk ya da kapalı kabuk denir. Kabuk tam dolu değilse, açık kabuk ya da kısmen dolu kabuk denir.

Bir spektral terimin sembolü belirlendiğinde, alt bileşenlerin enerji bakımından sıralanışı Hund Kuralı ile belirlenir. Hund Kuralı;

I.Terimler, spin kuantum sayısı S'nin değerlerine göre sıralanırlar. S'si büyük olan terim daha kararlıdır. Kararlılık S ile aynı yönde değişir. Buna göre, taban enerji seviyesinin çok katlılığı yani (2S+1) değeri, en büyüktür. Bunun anlamı $S = \sum_i S_i$ ile belirlenecektir.

II. S'leri aynı olan terimler durumunda L'si en büyük olan seviye en kararlıdır yani en aşağıdadır. Bunun anlamı ise $L = \sum_i (m_l)_i$ ile belirlenecektir.

III. Verilen bir S ve L çifti için elektron alt kabuğa yarıdan az ise, J si en küçük olan seviye en kararlı olup, alt kabuk yarıdan fazla dolu ise J'si en büyük olan seviye en kararlıdır. Yarı dolu alt kabuklar ise yarıdan fazla dolular gibi işlem görür(Aygün ve Zengin,1994).

Atomlarda elektronlar çekirdeğin çekici Coulomb potansiyelinden dolayı atoma bağlı olduğu bilinmektedir. Dolayısıyla yörünge açısal momentum sayısı ℓ hiçbir

zaman baş kuantum sayısı n den büyük olamaz. Atomlarda kabuk yapısı n ve ℓ nin alacağı değerlere bağlı olarak 1s, 2s, 2p,… şeklinde oluşur. Kuantum nokta yapıda böyle bir çekici potansiyeline ihtiyaç duyulmadan sadece sınırlayıcı bir potansiyel engelinin olması elektronları kuantum noktası içinde tutmaya yetecektir. Küresel kuantum noktasındaki bir elektron çekici bir Coulomb potansiyelinde hareket etmediği için yörünge açısal kuantum sayısında herhangi bir kısıtlama söz konusu değildir. Bundan dolayı küresel bir kuantum noktasındaki bağıl durumların kabuk yapısı 1s, 1p, 1d, 2s, 1f,…şeklinde oluşur. (Zhu ve ark. 1990, Zhu ve Chen 1994). Enerji seviyeleri ise $E_{n,\ell}$ biçiminde etiketlenir.

Kuantum nokta yapılarının kabuk yapılarının gösterilmesinde kullanılan diğer bir gösterim ise, baş kuantum sayısı n yi $n+\ell$ şeklinde ifade edilmesidir. Bu durumda 1s kabuğu aynı kalırken 1p kabuğu 2p olarak ve 1d kabuğu da 3d olarak adlandırılmaktadır. Bu durumda küresel kuantum noktasındaki bağlı durumlar için kabuk yapısı 1s, 2p, 3d, 2s, 4f, 3p, … şeklinde gösterilmektedir. Enerji seviyeleri ise $E_{n+\ell,\ell}$ şeklinde etiketlenir (Zhu ve ark. 1990).

5.1.4. 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

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{5.16}$$

dir. Kristal yapı içindeki bir elektron periyodik bir potansiyel altında hareket ettiği için parçacığın momentumu serbest parçacığın momentumundan farklı olur. Bu momentuma kristal momentumu denir. Kristal yapıda örgü noktalarının periyodik potansiyeli altında hareket eden bir elektrona dışarıdan bir $\vec{F}_d$ kuvvet uygulanırsa, elektron

$$\vec{F}_d + \vec{F}_i = m\frac{d\vec{v}}{dt} = m\vec{a} \tag{5.17}$$

kuvveti altında ivmelenecektir. Buradaki $\vec{F}_i$, kristal yapının hareketli elektrona uyguladığı kuvvettir. $\vec{F}_i$ iç kuvvetini de kapsayacak şekilde yeni bir dış kuvvet tanımlanırsa elektronun hareket denklemi

$$\vec{F}_D = m^* \frac{d\vec{v}}{dt} = m^*\vec{a} \tag{5.18}$$

olur. Buradaki m^*, iç kuvveti de içine alan elektronun kristal yapı içindeki kütlesidir ve etkin kütle olarak tanımlanır (Harrison 1999, Mitin ve ark. 1999, Davies 1999).

Diğer taraftan kristal yapı içinde dış kuvvetin etkisi altında hareket eden elektronun grup hızı

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}\left(\frac{E}{\hbar}\right) = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk} \tag{5.19}$$

biçiminde yazılabilir. Denk.(5.16), Denk.(5.18) ve Denk.(5.19) birleştirilirse kristal yapı içindeki elektronun etkin kütlesi

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2} \tag{5.20}$$

bulunur. Denk.(5.20) kütle boyutunda olmakla birlikte E(k) fonksiyonunun ikinci türevine bağlıdır.

5.1.5 Kuantum Nokta Yapılarda Durum Yoğunluğu

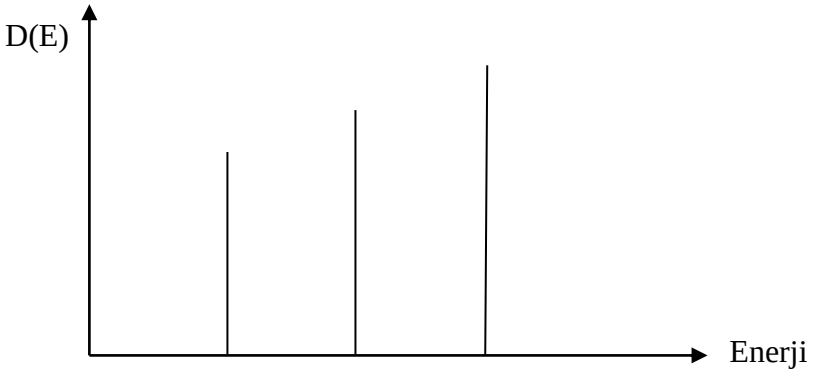
Bir kuantum noktası kadar küçük bir alana hapsedilen bir elektronun enerjisi kuantumlu olur. Yani enerji spektrumu farklılaşır. Boyutları 10-100 nm arasında olan yapılar için komşu enerji seviyeleri arasındaki fark birkaç meV kadardır. Bu enerji;

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{5.21}$$

şeklinde olur. Enerji kesikliliği ya da sistemin boyutsallığının azaltılması doğrudan doğruya enerji üzerindeki durum yoğunluğuna bağlıdır. Durum yoğunluğu birim hacimdeki birim enerji başına düşen enerji seviyesi sayısıdır ve E ile E+dE enerji aralığında girilebilir mevcut kuantum durumlarının miktarı hakkında bilgi verir. Bu nedenle durum yoğunluğu enerjinin bir fonksiyonudur. Parçacığın üç boyutta hareketinin sınırlandığı (0 boyutlu) bir sistem için durum yoğunluğu, kartezyen koordinatlarda L_x ,$L_y$ve L_z büyüklükler olmak üzere;

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{2}{L_x L_y L_z}\sum_{n_x n_y n_z}\delta(E - E_{n_x n_y n_z}) \tag{5.22}$$

şeklinde olur. Enerji ile değişimi **Şekil 5.2** de gösterilmiştir. (Dragoman,1999.Mitin ve ark 1999, Davies,1999).

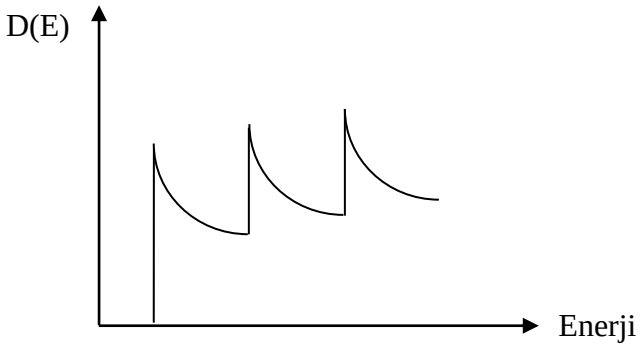


Şekil 5.2 Kuantum noktasının durum yoğunluğunun enerji ile değişimi.

Parçacığın iki boyutta hareketinin sınırlandırıldığı (1 boyutlu) bir sistem için (kuantum teli) durum yoğunluğu,

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{2}{\pi L_y L_z}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\sum_{n_y n_z}\frac{1}{\sqrt{E - E_{n_y n_z}}} \tag{5.23}$$

Şeklinde olur. D(E) nin enerji ile değişimi **Şekil 5.3** de gösterilmiştir.

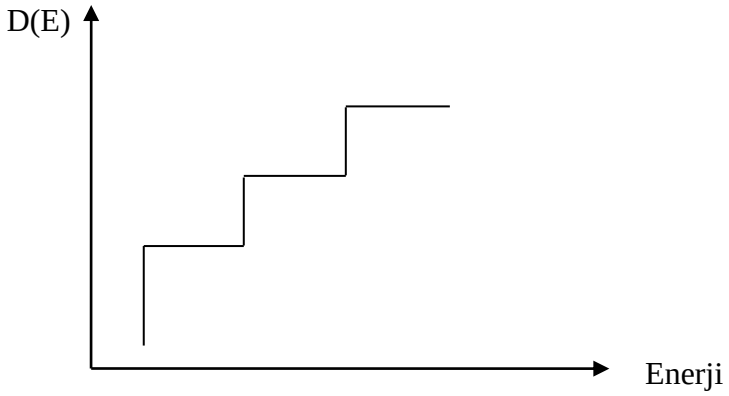


Şekil 5.3 Kuantum telindeki durum yoğunluğunun enerji ile değişimi

Parçacığın hareketinin bir boyutta sınırlandırıldığı (iki boyutlu) bir sistem için, yani bir kuantum kuyusu için,

$$D(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{m}{\pi\hbar^2 L_y}\sum_{n_y}\Theta(E - E_{n_y}) \tag{5.24}$$

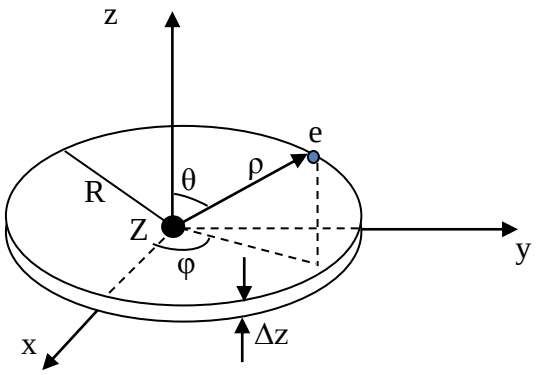
yazılabilir. Burada Θ heaviside fonksiyonunu gösterir. Kuantum kuyu durum yoğunluğunun enerji ile değişimi **Şekil 5.4** de gösterilmiştir.



Şekil 5.4 Kuantum kuyu durum yoğunluğunun enerji ile değişimi

5.2 Disk Benzeri Kuantum Nokta Yapının Elektronik Özellikleri

Disk benzeri bir kuantum nokta yapısı **Şekil 5.5** deki gibi tasarlanabilir. Küresel koordinatlarda θ=π/2 (Δz=0) ve $0 \le \rho \le \infty$, $0 \le \varphi \le 2\pi$ değerlerini alırsa bir disk tanımlanabilir. Bu durumda dalga fonksiyonu sadece ρ ve φ bağlı olacaktır. Böyle bir kuantum yapısının merkezinde safsızlık olması durumunda V_c sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış yani elektronik Hamiltoniyeni etkin kütle yaklaşımı altında



Şekil 5.5: Disk-benzeri kuantum nokta yapının şematik gösterimi.

$$H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} - \frac{Ze^2}{\rho} + V_C \tag{5.25}$$

ifadesiyle verilir. Böyle bir sistem için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi

$$\mathrm{H}\psi_{\mathrm{i}} = \mathrm{E}_i \psi_{\mathrm{i}} \tag{5.26}$$

olup, burada E_i enerji, ψ_i Yukarıda verilen sistemin i.durum için dalga fonksiyonudur. Ayrıca ψ_i ortonormalizedir ve süreklilik şartını sağlar;

$$\psi_i^{\rho\langle R}\Big|_{\rho=\mathrm{R}} = \psi_i^{\rho>R}\Big|_{\rho=\mathrm{R}} \quad , \frac{1}{m^*_{\rho\langle R}} \frac{\partial \psi_i^{\ \rho\langle R}}{\partial \rho}\Big|_{\rho=R} = \frac{1}{m^*_{\rho>R}} \frac{\partial \psi_i^{\ \rho>R}}{\partial \rho}\Big|_{\rho=R} \tag{5.27}$$

Etkin kütle yaklaşımı altında merkezinde safsızlık bulunan disk biçimli tek elektronlu kuantum nokta yapısının elektronik Hamiltoniyeni atomik birimlerde

$$H = -\frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{Z}{\varepsilon\rho} + V_c(\rho) \tag{5.28}$$

ψ_i dalga fonksiyonu;

$$\psi_i = \sum_s c_s \chi_s = \sum_s c_s \rho^{n_s\text{-}1} e^{-\zeta_s \rho} Y_{l_s m_s}(\theta, \varphi) \tag{5.29}$$

biçiminde Slater orbitalleri χ nin lineer kombinasyonu şeklinde yazılabilir.

Bu nokta yapı için sınırlandırıcı potansiyel

$$V_c(\rho) = \begin{cases} \alpha\rho^2 , & \rho < R \\ \infty, & \rho \geq R \end{cases} \tag{5.30}$$

şeklinde sonlu bir potansiyel olsun. Burada R nokta yarıçapıdır. Sistemin zamandan bağımsız Schrödinger denklemi denk.5.26 de verilmiştir. Sistemin özdurumları varyasyonel prensibinden sistemin enerjisini minimize ederek, ψ_i dalga fonksiyonu ile belirlenebilir. Sistemin i. duruma ait enerji özdeğeri,

$$E_i = \langle \psi_i | H | \psi_i \rangle \tag{5.31}$$

olur. Bunu da

$$E_i = \langle T_i \rangle + \langle V_i(\rho) \ \rangle + \langle V_{i\,c} \ \rangle \tag{5.32}$$

biçiminde yazabiliriz. Bu ifadeleri atomik birimlerde yazarsak, m^* bağıl etkin kütle olmak üzere;

$$\langle T_i \rangle = \int_0^R \phi_i^* (-\frac{\nabla_i^2}{2m^*_{\rho\langle R}})\phi_i d\tau \tag{5.33}$$

kinetik enerjinin beklenen değeri,

$$\langle V_i(\rho) \rangle = \int_0^R \phi_i^* (-\frac{Z}{\varepsilon\rho})\phi_i d\tau \tag{5.34}$$

çekim potansiyelinin beklenen değeri, ve

$$\langle V_{ic}(\rho) \rangle = \int_0^R \phi_i^* \alpha\rho^2 \phi_i d\tau \tag{5.35}$$

parabolik potansiyelin beklenen değeridir. Bu Denklemleri daha açık bir şekilde ifade edecek olursak, Denk. 5.33-35 yi sırasıyla;

$$\begin{aligned}
\langle T_i \rangle = & \frac{1}{2}\sum_{s=1}^{N}\sum_{t=1}^{N} c_s^* c_t \{\int_0^R \int_0^{2\pi} \chi^* (\nabla^2)\chi dV \\
= & -\frac{1}{2}\sum_{s=1}^{N}\sum_{t=1}^{N} c_s^* c_t \{\int_0^R \rho^{n_s-1} e^{-\alpha_s\rho}[(n_t-1)^2\rho^{-2} - \alpha_t(2n_t-1)\rho^{-1} \\
& + \alpha_t^2 - \frac{m_t^2}{\rho^2}]\rho^{n_s-1}e^{-\alpha_t\rho}\rho d\rho\}\delta_{m_s m_t}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle T_i \rangle = & -\frac{1}{2}\sum_{s=1}^{N}\sum_{t=1}^{N} c_s^* c_t \{\frac{[m_t^2 - (n_t-1)]\alpha_T^2}{2(n_T-1)(n_T-2)} S_{n_s n_t 1}(R,\alpha) + \frac{[m_t^2 - (n_t-1)^2]\alpha_T R^{n_T-1}}{2(n_T-2)(n_T-1)} e^{-\alpha_T R} \\
& \times (1 + \frac{n_T-1}{R\alpha_T}) + \frac{\alpha_t(2n_t-1)\alpha_T}{2.(n_T-1)} S_{n_s n_t - 1}(R,\alpha) + \frac{\alpha_t(2n_t-1)}{2.(n_s+n_t-1)} R^{n_T-1} e^{-\alpha_T R} \\
& - \frac{\alpha_t^2}{2} S_{n_s n_t 1}(R,\alpha)\}\delta_{m_s m_t}
\end{aligned} \tag{5.36}$$

$$\begin{aligned}
\langle V_i(\rho) \rangle = & \int_0^R \int_0^{2\pi} \sum_{s=1}^{N} c_s^* \rho^{n_s-1} e^{-\alpha_s\rho} e^{-sm\phi}(-\frac{z}{\rho}).\sum_{t=1}^{N} c_t \rho^{n_t-1} e^{-\alpha_t\rho} e^{sm\phi} \rho d\rho d\varphi \\
= & Z\sum_{s=1}^{N}\sum_{t=1}^{N} c_s^* c_t \{\frac{\alpha_s+\alpha_t}{n_T-1}.S_{n_s l_s m_s n_{t-1} l_t m_t}(R,\alpha) + \frac{\alpha_T}{n_T-1}.R^{n_T-1}e^{-\alpha_T R}\}
\end{aligned} \tag{5.37}$$

$$\begin{aligned}\langle V_{ic}(\rho)\rangle &= \sum_{s=1}^{N}\sum_{t=1}^{N} c_s^* c_t \int_0^R \rho^{n_s-1} e^{-\alpha_s\rho}\alpha\rho^2\rho^{n_t-1}e^{-\alpha_t\rho}\rho d\rho\delta_{m_s m_t} \\ &= \sum_{s=1}^{N}\sum_{t=1}^{N} c_s^* c_t \{\frac{(n_s+n_t+1).(n_s+n_t)}{(\alpha_s+\alpha_t)^2} S_{n_s l_s m_s, n_{t-1} l_t m_t}(R,\alpha) \\ &\quad -(R(\alpha_s+\alpha_t)+n_s+n_t+1)\frac{R^{n_s+n_t}e^{-(\alpha_s+\alpha_t)R}}{(\alpha_s+\alpha_t)^2}\}\end{aligned} \tag{5.38}$$

şeklinde ifade edilir. Burada N baz seti sayısı , $S^{\rho<R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j,\rho)$ kuantum nokta yapının içindeki ve dışındaki Overlap(örtüşme) integralleridir ve ifadesi

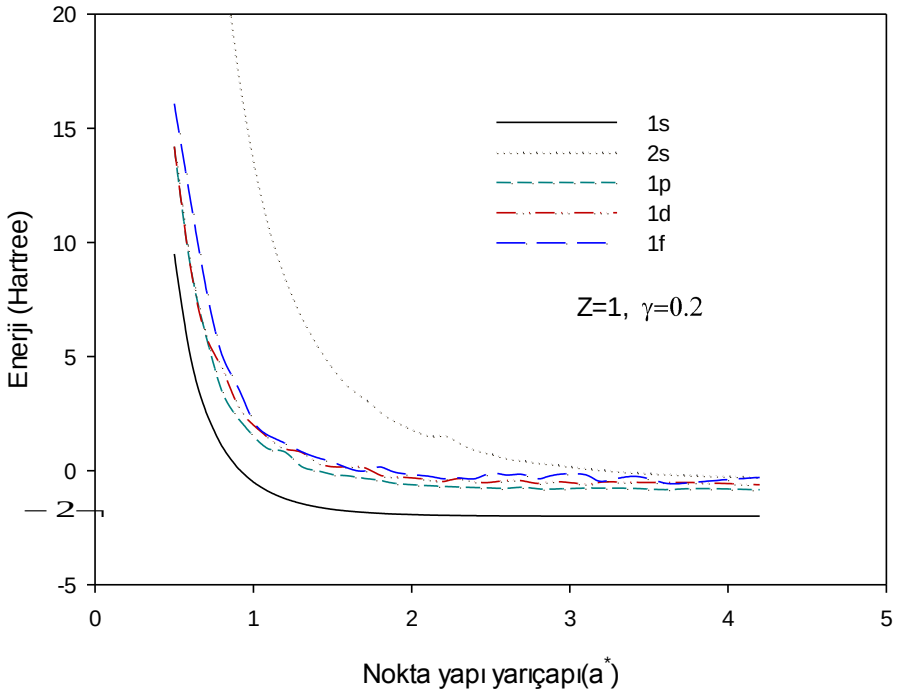
$$\begin{aligned}S^{\rho<a}_{n_i l_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j,\rho) &= \int_0^R \rho^{n_i+n_j} e^{-(\zeta_i+\zeta_j)} d\rho\delta_{l_i l_j}\delta_{m_i m_j} \\ &= \frac{(n_i+n_j)!}{(\zeta_i+\zeta_j)^{n_i+n_j+1}}(1-e^{-(\zeta_i+\zeta_j)R}\sum_{s=0}^{n_i+n_j}\frac{(\zeta_i+\zeta_j)^s R^s}{s!})\delta_{l_i l_j}\delta_{m_i m_j}\end{aligned} \tag{5.39}$$

biçimindedir.

6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

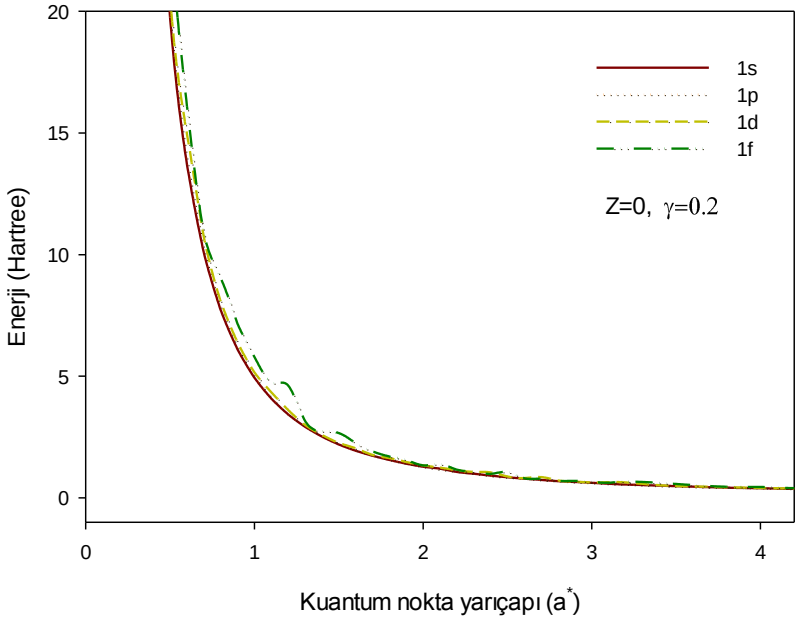
Bu bölümde KGA yöntemi ile HFR yöntemini birleştirerek kuantum nokta yapılarının elektronik özelliklerini inceledik. Merkezinde hidrojen tipi bir safsızlık bulunan sonsuz küresel simetrik potansiyelle sınırlandırılmış parabolik potansiyelli disk-benzeri kuantum nokta yapısını ele aldık. Dalga fonksiyonu olarak STO ların lineer bileşiminden oluşan tek-elektron spin orbitalleri alındı. s atomik orbitaller farklı s tipi, p atomik orbitaller farklı p tipi ve d atomik orbitaller ise farklı d tipi STO lardan oluşturuldu. Aynı tip atomik orbitaller aynı ζ lara sahip STO lardan oluşturuldu. Dalga fonksiyonlarının dikleştirilmesinde Gram-Schmidt yöntemi kullanıldı (Arfken 1985). KGA tekniği ile Schrödinger denkleminin olası çözümleri olan dalga fonksiyonları belirlendi ve bu dalga fonksiyonları kullanılarak HFR metoduyla bu yapının enerji beklenen değeri hesaplandı. Kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durum enerjilerinin nokta yarıçapına bağlı olarak değişimi incelendi. Ayrıca taban ve bazı uyarılmış durumların bağlanma enerjisi nokta yarıçapına bağlı olarak hesaplandı.

Merkezinde safsızlık bulunan parabolik potansiyele sahip disk şeklindeki kuantum nokta yapının taban ve çeşitli uyarılmış enerji seviyelerinin nokta yarıçapına göre değişimi **Şekil 6.1** de gösterilmiştir. Hesaplamalarda nokta yarıçapı 0 ile 5 a^* aralığında değiştirilmiştir. Parabolik potansiyelin değeri γ=0.2 a.b. alınarak hesaplanmıştır. Şekilden de görüleceği gibi nokta yarıçapı artarken taban ve uyarılmış enerji seviyeleri hızlı bir şekilde azalmaktadır ve nokta yarıçapının daha da büyüdüğü değerlerde enerji seviyeleri sabit değerlere gitmektedir. γ=0.2 değerinde, r=1a^* için E_{1s}=-0.5 au, r=1.5 a^* için E_{1p}=-0.169 au, r=1.8 a^* için E_{1d}=-0.1945 au, r=1.9 a^* için E_{4f}=-0.0788 au ve r=3.4 a^* için E_{2s}=-0.0753 au nokta yarıçaplarında enerji değerleri elde edilmiştir. Bu nokta yarıçapları bu enerji seviyeleri için kritik nokta yarıçapları olarak adlandırılır. Çünkü bu nokta yarıçaplarından büyük nokta yarıçapı değerlerinde elektronun enerjisi negatif değerlere düşmektedir. Bunun fiziksel anlamı elektronun safsızlığa bağlandığını göstermektedir. Beklenildiği gibi çok büyük nokta yarıçaplarında sistemin taban durumun enerjisi yaklaşık -2 au değerine gitmektedir.



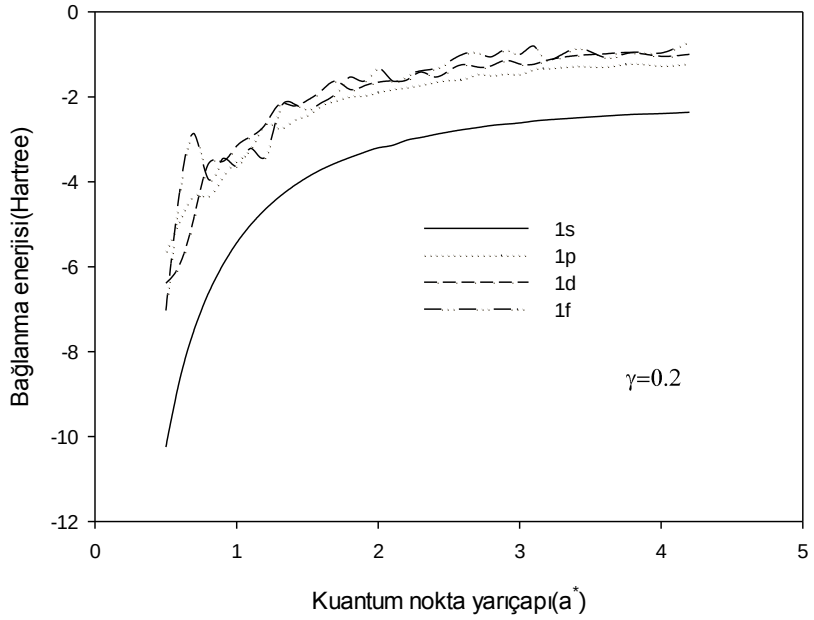
Şekil 6.1 Safsızlığın varlığında parabolik kuantum nokta yapının enerji seviyelerinin dot yarıçapına göre değişimi.

Şekil 6.2 de merkezinde safsızlık olmayan parabolik potansiyele sahip disk şeklindeki nokta yapının taban ve uyarılmış enerji seviyelerini göstermektedir. Hesaplamalarda nokta yarıçapının 0 ile $4a^*$ aralığında değiştirilmiştir. Parabolik potansiyelin değeri γ=0.2 a.b. alınmıştır. Safsızlığın olduğu durumdaki gibi (**Şekil 6.1**) nokta yarıçapı artarken enerji seviyeleri azalmaktadır. **Şekil 6.1** ile **Şekil 6.2** karşılaştırıldığında safsızlığın enerji seviyeleri üzerine olan etkisi açık bir şekilde görülmektedir. Özellikle taban durum enerji seviyesi, safsızlığın olduğu durumda diğer seviyelerden daha aşağı duruma düşmektedir. Aynı şekilde yukarı seviyelerde birbirinden ayrıldığı görülmektedir. Safsızlığın olmadığı durumda 2s elektronu kuyu içerisinde girmediği için enerji seviyesi elde edilememiştir.



Şekil 6.2. Safsızlık yok iken parabolik kuantum nokta yapının enerji seviyelerinin dot yarıçapına göre değişimi.

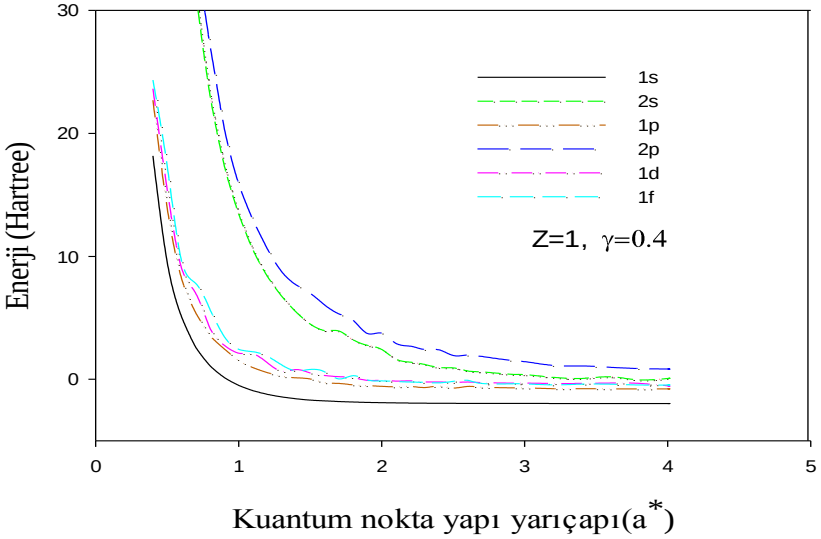
Bir kuantum nokta yapının bağlanma enerjisi E_b, merkezinde safsızlığın olmadığı durum ile merkezinde safsızlığın olduğu durum arasındaki farkla ifade edilir. Yani, $E_b = E_{nlm}(Z=0) - E_{nlm}(Z)$ dir.Bir disk şeklindeki kuantum nokta yapıda bulunan elektronun bağlanma enerjisini nokta yarıçapına göre değişimini **Şekil 6.3** te gösterildi. Şekilden görüleceği gibi, nokta yarıçapı azalırken tüm seviyelerin bağlanma enerjisi negatif olarak artmaktadır. Bunun nedeni nokta yarıçapı azalırken, impuritili durumun enerjisi impuritisiz durumun enerjisinden daha baskın olmasından kaynaklanır. Yani nokta yarıçapı azalırken elektronun kinetik enerjisi potansiyel enerjisine göre daha baskın olur ve sistemin toplam enerjisi artmış olur. Diğer taraftan, nokta yarıçapının büyük olduğu durumda bu fark aşağı yukarı sabit kalır ve bağlanma enerjisinin değerleri de her bir *l*-seviyesi için sabit değerlere gittiği görülür. Taban durum 1s küçük yarıçapta safsızlığa bağlanırken, uyarılmış durum 2p daha büyük nokta yarıçaplarında bağlanmaktadır. 1s deki elektron yaklaşık 1a* da safsızlığa bağlanırken, 2p seviyesi 4.2a* da bile safsızlığa bağlanmamaktadır.



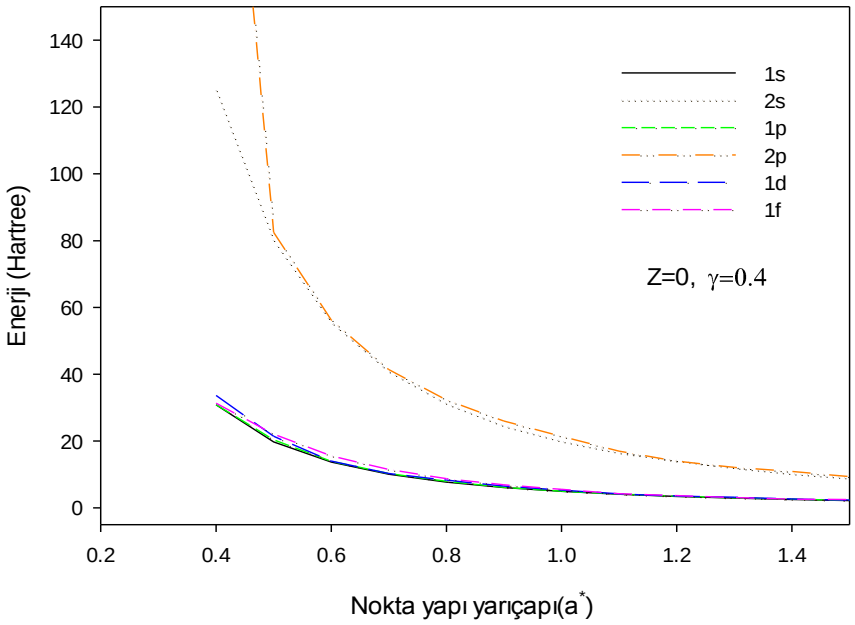
Şekil 6.3 Parabolik kuantum nokta yapının bazı seviyelerin bağlanma enerjilerinin kuantum nokta yarı çapına göre değişimi.

Şekil 6.4 te safsızlığın olduğu durumda parabolik potansiyel γ=0.4 için disk şeklindeki kuantum nokta yapının taban ve uyarılmış durumların enerjileri nokta yarıçapının fonksiyonu olarak çizilmiştir. Beklenildiği gibi parabolik potansiyel değeri γ artarken, enerji seviyelerinin değerinde büyümektedir. **Şekil 6.4** ten görüleceği gibi, çok küçük nokta yarıçaplarında r <0.8a^* ki bu bölge güçlü sınırlandırmanın olduğu bölgedir, γ nın değeri enerji seviyeleri üzerine olan etkisi önemsizdir. Bir başka ifadeyle, büyük nokta yarıçapı bölgelerinde, γ nın değeri ne kadar büyük olursa enerjide o kadar büyük olur. Yani, r=3.8a^* için, γ=0.4 de E_{1s}=-1.9706 au, E_{1p}=-0.7784 au, E_{1d}=-0.3358 au ve E_{1f}=-0.4679 au iken, γ=0.2 de E_{1s}=-1.9923 au, E_{1p}=-0.7818 au, E_{1d}=-0.5218 au ve E_{4f}=-0.4941 au enerji değerleri elde edilmiştir. γ= 0.2 iken elektron r=0.5a^* için E_{1s}=-0.5000 au, r=1.6 a^* için E_{1p}=-0.2768 au, r=1.9 a^* için E_{1d}= -0.0952 au ve r=1.9 a^* için E_{1f}= -0.0664 au değeri ile safsızlığa bağlanmaktadır.

Şekil 6.5 te γ=0.4 impuritisiz durumda enerji seviyelerinin nokta yarıçapına göre değişimi çizilmiştir. **Şekil 6.2** deki gibi nokta yarıçapı artarken enerji seviyeleri azalmaktadır. İmpuritili durumda Seviyeler birbirine daha yakın iken impuritisiz durumda seviyeler arası biraz daha açılmaktadır. Bu da impuritisiz durumda sadece kinetik enerjinin baskın olduğunu göstermektedir.



Şekil 6.4 Kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış seviyelerin enerjilerinin nokta yapı yarıçapına bağlı olarak değişimi



Şekil 6.5 Kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış seviyelerin enerjilerinin nokta yapı yarıçapına bağlı olarak değişimi

Tablo 6.1 de γ=0.2 ve γ=0.4 için r=4 au değerinde hesaplanmış 1s,2s,3s,.. Dalga fonksiyonu parametreleri verilmiştir. Tabloda STO 'ların c_i açılımı katsayıları ve üstel katsayıları verilmiştir.

Tablo 6.1 γ =0.2 değerlerinde r=4 için Kuantum Genetik Algoritma ve Hartree-Fock-Roothaan yöntemiyle hesaplanan dalga fonksiyonları.

γ=0.2			Slater tipi atomik orbitallerin açılım katsayıları c_i ve ζ_i				
n	*l*	m	ζ_s	c_i 1s	2s	3s	4s
1	0	0	2.34907845	-3.32926456	-3688.729968	20535.4113	-34232.04
1	0	0	2.14268437	9.09694281	500.53069168	-2483.8519	3770.563
1	0	0	2.37641008	-0.20958145	3203.9318841	-18076.4291	30517.89
1	0	0	0.64826230	-0.06198097	4.35986413	-8.9701	8.6586
1	0	0	0.95702825	0.17431603	-16.98334840	37.1172	-37.2991
			ζ_p	2p	3p	4p	
2	1	0	30.39152497	125.25854969	154.40114135	336.1232	
2	1	0	0.44877817	$-7.61002\text{x}10^{-3}$	0.04646609	-0.0326	
2	1	0	6.88874817	27.57026215	12.08197267	190.9046	
2	1	0	2.08728892	-4.81410862	644.95871614	-545.6001	
2	1	0	2.06551371	11.15997368	-629.9066233	526.8932	
			ζ_d	3d			
3	2	0	24.50884218	-1404.643896			
3	2	0	7.16368733	-175.7768008			
3	2	0	2.44589168	-8.26596442			
3	2	0	7.19031664	59.04821464			
3	2	0	0.36389824	$1.31722\text{x}10^{-3}$			
			ζ_f	4f			
4	3	0	1.54808958	-1.48439685			
4	3	0	1.82640370	0.17563610			
4	3	0	0.96111725	0.03383082			
4	3	0	1.34022369	0.43209404			
4	3	0	3.67758361	-21.15691786			

Tablo 6.2 γ=0.4 değerlerinde r=4 için Kuantum Genetik Algoritma ve Hartree- Fock-Roothaan yöntemiyle hesaplanan dalga fonksiyonları.

γ=0.2			Slater tipi atomik orbitallerin açılım katsayıları c_i ve ζ_i			
n	*l*	m	ζ_s	c_i		
				1s	2s	3s	4s
1	0	0	1.01690884	29.47617519	70.09278022		
1	0	0	2.94285549	94.94924145	432.13541940		
1	0	0	1.78041388	-28.10436745	-101.251211		
1	0	0	3.12608625	-79.27711164	-365.3191539		
1	0	0	0.88270489	-16.47198129	-38.25235778		
			ζ_p	2p	3p	4p	
2	1	0	1.74806832	15.44864831	68.35787702		
2	1	0	4.68264283	-121.0160461	-1398.718511		
2	1	0	4.75120517	113.91743180	1400.5515705		
2	1	0	1.34824422	-27.41122358	-82.60967795		
2	1	0	1.19288037	13.04769646	36.95636654		
			ζ_d	3d			
3	2	0	1.46349867	4.30449364			
3	2	0	5.91411562	37.83070099			
3	2	0	11.97425454	453.17714661			
3	2	0	10.80356606	-332.2978158			
3	2	0	1.21763868	-1.60997672			
			ζ_f	4f			
4	3	0	16.85745225	7526.1291116			
4	3	0	16.91606258	-9098.295407			
4	3	0	1.10618590	0.06072280			
4	3	0	5.85302969	-72.14885855			
4	3	0	2.12855544	-3.62565651			

Kaynaklar

Abramowitz,M.And Stegun,I.,1970,Handbook Mathematical Functions, Dover Publications Inc.,Newyork

Akman ,N.,Tomak,M.,1999, The Wigner molecule in a 2D quantum dot, Physica E **4** : 277-285.

Alsmeier,J.,Batke,E.,Kotthaus,J.P.,1990,Voltage-tunable quantum dots on silicon ,Physical Review B,**41**:1699-1702

Arfken, G., 1985, Mathematical Methods for Physics , Third Edition, Academic Press Inc . , Orlando.

Ashoori,R.C.,Stommer,H.L.,Weiner,J.S.,Pfieffer,L.N.,Pearton,S.L.,Baldwin,K. W. and West,K.W,1993,N-electron ground Energies of quantum dots in maagnetic field, Physical review letters,**71**:613-616

Aygün, E., Ve Zengin, M.,1994.Kuantum Fiziği.Ankara Üniversitesi,Ankara

Chaudhury,P. And Bhattacharyya,S.P.,1999 Locating critical points on multi-dimensional surfaces by genetic algorithm:test cases including normal and perturbed argon clusters,Chemical Physics,**241**:313-325

Coley,D.A.,2001,An lntroduction to genetic Algorithms for Scientists and Engineers , World Scientific Publishing Co.Pte.Ltd.,Singapore

Çakır,B.,2007, Çok Elektronlu Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi,Doktora Tezi,30-37, Konya.

Çakır,B.,Özmen ,A.,Atav,Ü.,Yüksel,H. And Yakar ,Y.,2007,lnvestigation of electronic structure of a quantum dot using Slater-type orditals and quantum genetic algorithm , lnternational Journal of Modern Physics C.,**18**:61-72

Çakır,B.,Özmen,A.,Atav,Ü., And Yuksel,H., 2008, Calculatıon Of Electronıc Structure Of A Spherıcal Quantum Dot Usıng A Combınatıon Of Quantum Genetıc Algorıthm And Hartree Fock Roothaan method, International Journal of Modern Physics C,Vol. 19, **4:** 599-609.

Çakır,B.,Yakar ,Y,,Özmen, A., Sezer, Ö.,Şahin, M., 2010, "Linear and nonlinear absorption coefficients and binding energy of a spherical quantum dot", Supperlattices and Microstruct., **47**, 556-566.

Çakır,B.,Yakar,Y.,Ozmen,A., 2012, Refractive index changes and absorption coefficients in a spherical quantum dot with parabolic potential , Journal of Luminescence **132** :2659–2664.

Çakır,B.,Yakar,Y.,Ozmen,A., 2013, Calculation of Oscillator strength and the effects of electiric field on energy states, static and dinamic polarizabilities of the confined hydrogen atom, Optics Communications, **311**:222-228

Davies.,J.H.,1999,The Physics of Low-Dimensional Semiconductors:An lntroduction , Cambridge University Press,Cambridge

Dragoman D.,Dragoman M.,1999,Optical analogue Structure to Mesoscopic Devices Progress in Quantum Electronics,**23**:131-188

Ekimov,A.l.,Efros,A.L.,Onushchenko,A.A.,1985,Quantum size effect in semiconductors ,IBM Journal of Research and Development,**14**:61-65

Goldberg,D.E.,1999,Genetic Algorithms in Search,Optimization,and Machine Learning ,Addison Wesley Longman,Inc.Reading,MA

Grigorenko,I.,Garcia,M.E.,2000,An evolutionary algorithm to calculate the ground State of a quantum system ,Physica A,**284**:131-139

Grigorenko,I.,Garcia M.E,2002,Calculation of the parttion functions using quantum genetic algorithms , Physica A,**313**:463-470

Grundman,M.,Stier,O.and Bimberg,D.,1995,InAs/GaAs Phramidal quantum dots:Strain distribution,on optical phonons and electronics Structure , Physical Review B ,**52**:11969-11981

Harrison ,P.,1999,Quantum wells,wires and dots : Theoretical and computattional physics,John Wiley &Sons, Inc.,Newyork

Holland,J.H.,1975,Adaptation in Natural and Artifical Systems,University of Michigan

Jacak,L.,Hawrylak,P.,Wojs,A.,1998,Quantum dots , Springer Verlag , Berlin , Hiedelberg

Jacak,L.,2000,Semiconductor quantum dots-towards a new generation of semiconductor devices,european Journal of Physics,**21**:487-497

Karaoğlu,B.,2003,Kuantum Mekaniğine Giriş ,Seyir Yayıncılık,İstanbul.

Liang ,S.,Xie ,W.,Li ,X.,Shen ,H., 2011 , Photoionization and binding energy of a donor impurity in a quantum dot under an electric field: Effects of the hydrostatic pressure and temperature , Superlattices and Microstructures **49** :623–631

Liu, G.,Guo ,K.,Wang ,C., 2012 , Linear and nonlinear intersubband optical absorption in a disk-shaped quantum dot with a parabolic potential plus an inverse squared potential in a static magnetic field, Physica B **407** :2334–2339

Lu ,L.,Xie,W.,2011, Impurity and exciton effects on the nonlinear optical properties of a disc-like quantum dot under a magnetic field , Superlattices and Microstructures **50 :** 40–49

Mitin,V.V.,Kochelap,V.A.,Stroscio,M.A.,1999, Quantum heterostructures : Microelectronics and optoelektronics,Cambridge University Press,Cambridge.

Özmen, A., Yakar ,Y.**,** Çakır ,B., Atav, Ü., 2009, "Computation of the Oscillator Strenght and Absorption Coefficients for the Intersubband Transitions of the Spherical Quantum Dot", Opt. Commun.**, 282**: 3999-4004

Özmen,A.,Çakır ,B.,Yakar,Y.,2013,Electronic structure and relativistic terms of one-electron spherical quantum dot, Journal of Luminescence **137** :259–268

Pehlivanoğlu,C.,2009,Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi , Selçuk Üniversitesi,Yüksek Lisans Tezi, Konya.

Petroff, P.M.,Denbars ,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

Raymond P.J.,Wojs,A.,Hawrylak,P. And Charbonneau ,S. , 1996 , State filling and time-resolved photoluminescence of excited state in InxGa12xAs/GaAs self-assembled quantum dot,Physical Review B,**54**:11548-11554,S.,Fafard,S.,Poole,

Rezaei , G. , Kish, S., 2013,Linear and nonlinear optical properties of a hydrogenic impurity confined in a two dimensional quantum dot: Effects of hydrostatic pressure, external electric and magnetic fields ,Superlattices and Microstructures **53** :99–112,

Şahin,M.,Tomak,M.,2002,Self-consistent Calculation of semiconductor heterojunctions using quantum genetic algorithm,International Journal of Modern Physics B,**16**:3883-3893

Şahin,M. ve Tomak,M.,2005,Electronic Structure of a many-electron spherical quantum dot with an impurity ,Physical Rewiev B,**72**:125323(1-6)

Şahin.,M.,2005,Yarıiletken Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi,Selçuk Üniversitesi,Doktora Tezi,Konya.

Şafak,H.,Şahin,M.,Gülveren,B.,Tomak,M.,2003,Efficiency of genetic algorithm and determination of ground State energy of impurity in a spherical quantum dot, International Journal of Modern Physics C,**14**:775-784.

Ünlü,S.,2005,Kuantum Dot Yapılarda Optik Geçişlerin Hesaplanması,Selçuk Üniversitesi,Doktora Tezi,Konya.

Xie,W. ,Xie ,Q., 2009, Electric field effects of hydrogenic impurity states in a disc-like quantum dot, Physica B **404** :1625–1628,

Xie,W., Liu,C., 2004, Barrier D2 centers in a quantum disc, Solid State Communications **131** :7–10

Xie,W., 2000, Exciton states in a disk-like quantum dot, Physica B **279** :253-256

Yakar ,Y.,Çakır ,B.,Özmen,A., 2010, Calculation of linear and nonlinear optical absorption coefficients of a spherical quantum dot with parabolic potential ,Optics Communications, Phys. in press .

Yakar,Y.,Çakır,B.,Özmen,A., 2010, Linear and nonlinear optical properties in spherical quantum dots., Commun. Theor. Phys. In press.

Yakar,Y.,Çakır,B.,Özmen,A., 2013, Off-Center Hydrogenic Impurity in Spherical Quantum Dot with Parabolic Potential, Journal of Luminescence, **134**: 778-783.

Yakar,Y.,Çakır,B., Özmen,A., 2013, Computation of relativistic terms in a spherical quantum dot , Journal of Luminescence **134**: 778–783

Yuan ,J. , Huang, J. , Yin, M. , Zeng, Q. ,Zhang, J. , 2010,The correlation energies and nonlinear optical absorptions of an exciton in a disc-like quantum dot, Optics Communications **283** :3529–3532

Zhu,J-L.,Xiong,J-J.,Gu,B-L.,1990,Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$,Physical Review B,**41**:6001-6007

Zhu ,J-L.,Chen,X.,1994,Spectrum and binding of an oo-center donor in a spherical quantum dot,Physical Review B,**50**:4497-4502.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Emre DOĞAN
Uyruğu : T.C
Doğum Yeri ve Tarihi : ANKARA – 13/03/1985
Telefon : 05308489221
Faks : --------
e-mail : gencpegasus@hotmail.com

EĞİTİM

Derece		**Adı, İlçe, İl**	**Bitirme Yılı**
Lise	:	Bahçelievler Deneme Lisesi Çankaya/ANKARA	2003
Üniversite	:	Gazi Üniversitesi F.E.F Fizik Bölümü Beşevler/Ankara	2007
Yüksek Lisans	:	Selçuk Üniversitesi F.B.A.B.D Fizik Bölümü Selçuklu/Konya	Devam ediyor
Doktora	:		

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	**Kurum**	**Görevi**
2009-2010	Hava Teknik Okullar Komutanlığı-İzmir	Teğmen
2010-2013	3.Ana Jet Üs Komutanlığı-Konya	Üsteğmen