



T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

MERKEZ DIŞI HİDROJENİK SAFSIZLIK BULUNDURAN KÜRESEL KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK BAĞLANMA ENERJİSİNİN PERTÜRBASYON YÖNTEMİYLE İNCELENMESİ

Fatma Betül ŞİRECİ
YÜKSEK LİSANS TEZİ
Fizik Anabilim Dalını

Ağustos-2015
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

TEZ BİLDİRİMİ

Bu tezdeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini ve tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

DECLARATION PAGE

I hereby declare that all information in this document has been obtained and presented in accordance with academic rules and ethical conduct. I also declare that, as required by these rules and conduct, I have fully cited and referenced all material and results that are not original to this work.

Fatma Betül ŞİRECİ

Tarih:

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

MERKEZ DIŞI HİDROJENİK SAFSIZLIK BULUNDURAN KÜRESEL KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK BAĞLANMA ENERJİSİNİN PERTÜRBASYON YÖNTEMİYLE İNCELENMESİ

Fatma Betül ŞİRECİ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Bekir ÇAKIR

2015, 55 Sayfa

Jüri
Danışmanın Doç. Dr. Bekir ÇAKIR
Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN
Doç. Dr. Ercan TÜRKKAN

Bu tez çalışmasında pertürbasyon yöntemi ile kuantum nokta yapılarının elektronik özellikleri safsızlığın konumuna göre incelendi. Merkezinde hidrojen tipi bir safsızlık bulunan sonsuz küresel simetrik potansiyelle sınırlandırılmış bir-elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumların enerji özdeğerlerini ve dalga fonksiyonlarını Kuantum Genetik Algoritma (KGA) metodu ile belirlendi. Enerji özdeğerleri Hartree-Fock-Roothaan metodu ile hesaplandı. Sistemin dalga fonksiyonları, STO ların lineer bileşiminden oluşan tek-elektron spin orbitallerinden oluşturuldu. Sazsızlığın merkezde olduğu durumda KGA ile belirlenen enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları kullanılarak, safsızlığın merkezden **D** kadar kayması durumunda bu enerji seviyelerine gelen katkı pertürbasyon metodu ile farklı nokta yarıçapları için hesaplandı.

Anahtar Kelimeler Hartree-Fock-Roothaan, Kuantum Genetik Algoritma, Kuantum Nokta Yapı, Merkezdışı, Pertürbasyon, Slater Tipi Orbital

ABSTRACT

MS THESIS

INVESTIGATION OF ELECTRONIC BOUNDING ENERGY OF SPHERICAL QUANTUM DOT WİTH OFF-CENTER HYDROGENIC IMPURITY USING PERTURBATION METHOD

Fatma Betül ŞİRECİ

THE GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE OF SELÇUK UNIVERSITY
THE DEGREE OF MASTER OF SCIENCE OF PHILOSOPHY
IN MECHANICAL ENGINEERING

Advisor: Assoc. Prof. Dr. Bekir ÇAKIR

2015, 55 Pages

Jury
Advisor: Assoc. Prof. Dr. Bekir ÇAKIR
Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN
Assoc. Prof. Ercan TÜRKKAN

In this thesis, electronic properties of Quantum dots was examined according to the position of impurity using perturbation method. Spherical quantum dot with one electron on-center hydrogenic impurity confined infinite spherical potential ground and some excited states energy eigenvalues and wave functions were determined by KGA method. Energy eigenvalues was calculated with Hartree-Fock-Roothaan (HFR) method. Wave functions were created the linear combination of Slater type orditals (STOs) consist of a single electron spin orbitals. The contributions of these energy levels according to impurity shiffting from the center of quantum dot to D was calculated using perturbation method for different dot radii.

Keywords: Hartree-Fock-Roothaan,Off-center, Perturbation, Quantum Genetic Algorithm, Quantum Dot Structure, 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 (kuantum kuyuları), tek boyutlu (kuantum telleri) ve sıfır boyutlu (kuantum noktaları) 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 çalışma süresince bilgi ve tecrübesiyle bana yardımcı olan kendisiyle çalışmaktan onur duyduğum danışmanım Doç. Dr. Bekir ÇAKIR'a, ayrıca bu çalışmada yardımlarını esirgemeyen Prof.Dr. Ayhan ÖZMEN'e ve Doç.Dr. Yusuf YAKAR'a çok teşekkür ederim.

Bugüne dek ve bu çalışma süresince bana her türlü maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen babam, annem ve abime sabırları için sonsuz teşekkür ederim.

Fatma Betül ŞİRECİ

KONYA-2015

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **vii**

ABSTRACT ..... **viii**

İÇİNDEKİLER ..... **x**

1. GİRİŞ **1**

2. MATERYAL VE YÖNTEM **6**

2.1. Kuantum Nokta Yapı 6
2.2. Tek Elektronlu Küresel Kuantum Kuyusu 7
2.3. Kuantum Nokta Yapının Elektronik Yapısı 10
2.4. Etkin Kütle Yaklaşımı 10

3. SAFSIZLIĞIN MERKEZDEN KAYMASININ KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNE ETKİSİ **12**

3.1. Zamandan Bağımsız Pertürbasyon Yöntemi 13
3.2. Kuantum Nokta Yapıda Safsızlık Kayması (off-center) 16
3.3. Genetik Algoritma 21
3.3.1. Yeniden Üretme 22
3.3.2. Çaprazlama (Crossover) 23
3.3.3. Mutasyon 24

4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA **26**

KAYNAKLAR **37**

ÖZGEÇMİŞ **47**

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

Z	Safsızlıktaki Pozitif Yük Sayısı
r_{ij}	Elektron ile Safsızlık Arasındaki Uzaklık
m^*	Elektronun Etkin Kütlesi
ε	Ortamın Dielektrik Sabiti
V(r)	Dış Sınırlayıcı Potansiyel
a	Nokta Yarıçapı
T_p	Kinetik enerji
V_p	Potansiyel enerji
σ	Baz seti sayısı
ζ_i	Orbital üsteli

Kısaltmalar

MOS	Metal Oxide Semiconductor
MOSFET	Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor
STO	Slater Tipi Orbital
GA	Genetik Algoritma
KGA	Kuantum Genetik Algoritma
HF	Hartree Fock
HFR	Hartree Fock Roothaan
H	Hamiltoniyen
MBE	Moleküler Demet Epitaksi
QDIP	Quantum Nokta Infrared Photo Dedektor
CI	Configurasyon Interaction
GTO	Gauss Tipi Orbital
C-aniGTO	Kartezyen anizotropik Gauss Tipi Orbital

1. GİRİŞ

Düşük boyutlu nanometre ölçekli sistemler üzerine son zamanlarda Yoğun Madde Fiziği'nde bir çok alanda çalışmalar yapılmıştır. Malzeme üretimi ve karakterizasyonu alanındaki önemli teknolojik gelişmeler, iki boyutlu (kuantum kuyuları), tek boyutlu (kuantum telleri) ve sıfır boyutlu(kuantum noktaları) 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.

Kuantum mekaniği 1947 yılında transistörün icat edilmesinden sonra, katıhal elektroniği üzerinde önemli bir etki yapmaya başladı(Bardeen ve Brattain, 1948; Shockleey, 1949). 1960'lı yılların başlarında yarı iletken lazerin icat edilmesi(Hall ve ark., 1962) ve heteroeklemlerin ortaya çıkışı(Anderson, 1962), kuantum fiziğinin katıhal elektroniğinde gittikçe artan bir öneme sahip olmasına neden oldu.

Yarı iletken aygıtlarda kuantum sınırlandırma etkileri üzerindeki tartışmalar 1957 lerde başlar. Schrieffer (1957), silisyum Metal Oksit Yarı İletken (Metal Oxide Semiconductor) (MOS) yapıdaki potansiyel kuyusunda hapsedilmiş elektronların klasik olarak davranamayacaklarını ve enerji düzeylerinin sınırlandırmanın olduğu boyutta kuantumlu hale geleceğini ileri sürmüştür. 1975 te, Cho ve Arthur (1975) tarafından Moleküler Demet Epitaksi (MBE) yönteminin bulunuşu, heteroeklem kuantum yapılarında o zamana kadar görülmemiş gelişmelere imkan sağlamıştır. MBE yönteminin ilk uygulamaları kuantum kuyularını içerir. Bu potansiyel enerji kuyuları, daha geniş band aralıklı iki tabaka arasına daha küçük band aralıklı çok ince bir tabakanın yerleştirilmesiyle oluşturulur. Esaki ve Tsu'nun(1970) çok kuantum kuyulu süperörgüler üzerindeki çalışmalarının ardından rezonans tünellemesi(Chang ve ark., 1974) transport deneyleri (Esaki ve Chang, 1974) ve optik soğurma ölçümleri(Dingle ve ark., 1974) sonucu bu tip kuyulardaki enerji seviyelerinin kesikli olduğuna ilişkin çok sayıda deneysel kanıt ortaya çıkmıştır. Kuantum kuyu lazeri (Van der Ziel ve ark., 1975) gerçekte, kuantum sınırlama etkisine dayalı olarak çalışan optoelektronik aygıtlara ilk örneklerdir. Kuantum nokta yapılar çok verimli ve tam kontrol edilebilir lazerlerin yapımında kullanıldı (Reed ,1993). Yapay atomların şekil ve boyutlarının deneysel olarak kontrol edilebilmesi uygulamada çok geniş bir alan açmıştır (Kouwenhoven ve Marcus, 1998; Ashoori, 1996).

Kuantum kuyu ve kuantum kuyu tel aygıtlarındaki ilerlemeler sınırlandırılmış sistemlerin elektronik yapılarının hesaplanmasında büyük bir ilgi odağı oluşturmuştur. Teknolojide, özellikle çok hassas litografik tekniklerdeki hızlı gelişmeler, elektronların tek boyutlu yapıda sınırlandırılmasına ve dolayısıyla kuantum tel yapıların üretilmesine imkan sağlamıştır(Petroff ve ark., 1982). Kuantum telleri, teknolojik olarak kuantum kuyusu içeren bir malzemeden çok dar şeritler halinde litografik yöntemlerle kesilerek elde edilir. Bu yapıların enine boyutları kuantum kuyusunun derinliğinden önemli ölçüde daha büyüktür (10-500 nm)(Jacak ve ark., 1998) . Paralel yüzeyler arasındaki sınırlandırmalar (Csavinszky ve Elabsy, 1985) ve kuantum kuyu telleri (Bryant,1983; Csavinszky ve Oyoko, 1991) üzerinde çalışmalar yapılmıştır. Kuantum telleri, yaygın olarak Metal Oksit Yarıiletken (MOS) ve Metal Oksit Yarıiletken elektrik Aaln Transistörü (MOSFET) yapıların üretiminde kullanılmaktadır (Lai, ve Sarma, 1986). Ayrıca bu yapılarda kuantumlu balistik direnç etkisi gözlenmiştir (Van Wees ve ark., 1988). Elektronların serbest hareketinin tüm boyutlarda sınırlandırılması, kuantum noktaları olarak adlandırılan sanki-sıfır(quassi-zero) boyutlu nanoyapıların ortaya çıkmasına yol açmıştır. İlk kuantum nokta yapı Texas Instrument Incorporated şirketindeki bilim adamları tarafından gerçekleştirilmiş olup (Reed ve ark., 1986), 250 nm kenar uzunluğu olan kare biçiminde bir geometrik yapıya sahiptir. Hidrojenik safsızlıkların bağlanma enerjileri için farklı yöntemlerle değişik hesaplamalar yapılmıştır(Tomak,1988; Szafran, 1998). 1980 li yılların sonlarında Jia-Lin Zhu ve arkadaşları(1990), küresel kuantum nokta yapılarda sınırlandırılmış elektron ve safsızlık için Schrödinger denkleminin tam çözümlerini ve kuantum seviye yapılarını belirlemişlerdir. Günümüzde üretilen kuantum noktaların boyutları birkaç nm'ye kadar düşürülebilmiştir (Reimann ve Manninen, 2002; Kouwenhoven ve ark., 2001).

Bu tür yapıların fiziksel özelliklerinin belirlenmesinde farklı yöntemler kullanılmıştır. 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.

Pfannkuche ve ark. (1993) iki elektronlu kuantum nokta yapı (yapay helyum) için Hartree-Fock hesaplamalarını yaptılar ve iki elektronlu sistemlerin tam çözümleriyle karşılaştırdılar. Tarucha ve ark.(1996;1999), birkaç elektronlu kuantum nokta yapılarda elektronların kabuklara yerleşimini ve spin etkilerini incelemişlerdir. Ezaki ve ark.

(1997-1998), n-elektron Hamiltoniyeninin, Slater determinantlarını kullanarak direkt köşegenleştirme yöntemiyle çözümlerini yapmışlardır. Lee ve ark.(1998), kuantum noktalar için yoğunluk fonksiyon teorisiyle n-elektron problemini incelemişlerdir. Sako ve ark. (2003) sınırlandırılmış kuantum sistemlerinin spektral özelliklerini incelemişler ve kartezyen anisotropik gauss tipi orbitalleri (c-aniGTO) kullanarak konfigürasyon etkileşim(CI) metodu ile HFR denklemlerini çözmüşlerdir. İlk üretildiği tarihten günümüze kadar kuantum nokta yapılar üzerinde çok sayıda teorik ve deneysel çalışmalar yapılmıştır (Ferreyra ve ark., 1997; Rontani ve ark., 1999; Nguyen ve ark., 2000; Charrour ve ark., 2000; Taut, 2000; Kainz ve ark., 2002; Kandemir ve Çetin, 2002; Holas, 2003)

Kuantum nokta yapıların fiziksel özelliklerinin analizinde değişik teorik yöntemler kullanılmaktadır. Bu yöntemlerden birisi de varyasyonel yöntemler olup, bu tür kuantum mekaniksel yapıların incelenmesinde yoğun bir şekilde kullanılmaktadır. 1980 yıllarda Bastard (1980) hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisini varyasyonel yöntemle hesaplamıştır. Marin ve Cruz (1991) direkt varyasyonel metodunu kullanarak sonsuz küresel bir kuyuda sınırlandırılmış hidrojen atomu ve harmonik salınıcı gibi sistemlerin Schrödinger denklemlerine karşılık gelen çözümlerini bularak, enerji seviyelerini belirlemiştir. Brownstein (1993) sınırlandırılmış sistemlerin enerji özdeğerlerini Gauss teoremini kullanarak lineer varyasyon yöntem ile hesaplamıştır. Varshni (1999; 2001) varyasyonel yöntemle merkezinde safsızlık olan küresel kuantum nokta yapının taban durum enerjilerini basit bir dalga fonksiyonu ile hesaplamıştır. Szafran ve ark.(1999), iki ve üç elektronlu kuantum nokta yapının elektronik yapısını Slater Tipi Orbitalleri ve çok elektronlu kuantum nokta yapının elektronik yapısını Gauss Tipi Orbitalleri (GTO) (Bednarek ve ark., 1999; 2001) kullanarak lineer varyasyonel yöntemle belirlemişlerdir. Mc Charty ve ark. (2001), n-elektronlu (18 elektronlu) kuantum nokta yapısı için Schrödinger denkleminin çözümlerini belirlemek için Gauss Tipi Orbitalleri kullanarak Rayliegh-Ritz varyasyonel yönteminden yararlanmıştır.

Bu tür yapıların elektronik özelliklerinin hesaplanmasında kullanılan bir diğer yöntem Genetik Algoritma(GA) yöntemidir. GA yöntemi de enerji minimizasyon ilkesine dayanan bir çeşit varyasyon yöntemidir. 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

kullanılmaktadır. KGA yöntemi ile hem açılım katsayıları hem de orbital üstelleri aynı anda belirlenebilir. Bu sayede sistemin elektronik yapısı daha iyi tanımlanabilir.

Bu yöntemle Kuantum nokta yapılar üzerine yapılan çalışmalardan başlıcaları Şahin (2005), Çakır (2007), Çakır ve ark. (2007; 2008; 2010; 2011; 2012), Özmen ve ark.(2009) ve Yakar ve ark. (2010; 2010; 2013) tarafından yapılmış ve bu çalışmalarda bir ve iki elektronlu sonlu ve sonsuz küresel simetrik bir kuantum nokta yapının elektronik yapısı incelenmiştir.

Düşük boyutlu yapılarda safsızlığın merkezden kayması(off-center) sistemin opto-elektronik özelliklerinin değişmesine sebep olmaktadır ve bu problem son zamanlarda bazı araştırmacıların ilgisini çekmiş ve çeşitli çalışmalar yapılmıştır. Zhu ve ark. (1992) varyasyonel yaklaşım kullanılarak, küresel kuantum nokta içinde negatif yüklenmiş donorun elektronik yapısı incelemiştir. Zhu ve Chen (1994) enerji seviyeleri ve GaAs-$Ga_{1-x}Al_xAs$ küresel kuantum nokta yapı içinde off-center donorun bağlanma enerjisinin lineer varyasyonel yöntem ile incelemiştir. Szafran ve ark. (1998) sınırlı küresel simetrik potansiyel yarı iletken kuantum nokta yapının elektronik özelliklerini incelediler. Xie, (2008) küresel Gaussian potansiyeli ile sınırlandırılmış merkez dışı hidrojenik donorun enerji seviyelerini matris- köşegenleştirme metodu ile farklı donor pozisyonları için nokta yapı yarıçapın fonksiyonu olarak hesaplamıştır. Movilla ve Planelles (2005) hidrojenik safsızlığın merkezden kayması durumunda küresel nanokristallerin enerji özdeğerlerini ve dalga fonksiyonlarını sayısal teknikle hesapladılar. Mikhail ve İsmail (2007) küresel kuantum nokta içinde merkez dışı hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisini varyasyonel yöntemle incelemişlerdir. Yuan ve ark.,(2009) off-center donor safsızlığı lineer ve nonlineer soğurma katsayıları pertürbasyon metodu ile çalışılmıştır. Yuan ve Liu (2008) güçlü sınırlama altında dejenere pertürbasyon metodu ile küresel kuantum nokta içinde safsızlığın merkezden kaymasının enerji seviyelerine etkilerini incelemiştir. Sadeghi ve Avazpour (2011) güçlü sınırlama içinde etkin kütle yaklaşımında genleşme metodu kullanılarak eliptik kuantum nokta yapı içinde merkez dışı hidrojenik donor safsızlığın bağlanma enerjileri araştırmıştır. Huang ve ark.(2009) hidrojen tipi safsızlığın merkezden D kadar uzaklığa yerleştirilmiş bir elektronlu küresel kuantum nokta yapının enerji seviyesinin sayısal çözümlemeleri elde etmişlerdir. Mikhail ve El Sayed (2011) çok katmanlı küresel kuantum nokta içine merkez ve merkez dışına yerleştirilmiş safsızlığın bağlanma enerjisi hesaplamışlardır. Parabolik potansiyel ile sınırlandırılmış merkezinde hidrojenik

safsızlık bulunan küresel nokta yapının taban ve bazı uyarılmış enerji seviyelerini ve taban durum bağlanma enerjisini pertürbasyon yöntemiyle incelemişlerdir (Bose, 1999). Parabolik potansiyele sahip küresel kuantum noktanın 1s-, 2p-, 3d- ve 4f- durumlarının bağlanma enerjileri pertürbasyon yöntemi kullanılarak safsızlığın konumuna göre araştırılmıştır(Yakar ve ark., 2013).

Nano ölçekli kuantum mekaniksel sistemler, özellikle sınırlandırıcı potansiyel parabolikse, günümüz teknolojisinde büyük bir öneme sahiptir ve sahip olmaya devam edecek. Ayrıca safsızlığın merkezden kayması bu yapının optoelektronik özeliklerini değiştirmesi bakımından da önemlidir. Bu tür yapıların çeşitli fiziksel özelliklerinin daha iyi anlaşılmasına yönelik bu çalışmanın nano yapılarla ilgili çalışmalara önemli katkısı olacağına ve bu alanda yapılan deneysel çalışmalara ve uygulama alanlarına katkı sunacağına inanmaktayız.

Bu tez çalışmasının II. Bölümünde Kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerini ele aldık. III. Bölümde ise safsızlığın nokta yapı merkezinden kaymasının elektronik özellikleri incelendi. Sonsuz küresel simetrik potansiyelle sınırlandırılmış bir kuantum nokta yapının enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları KGA yöntemi ile HFR methodunun birleştirilmesi ile belirlendi. Safsızlığın merkezden kayması sonucunda enerjiye gelecek katkı kinetik enerjinin yanında küçük olacağından pertürbasyon olarak ele alınabilir. KGA ile belirlenen enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları kullanılarak, safsızlığın merkezden D kadar kayması durumunda bu enerji seviyelerine katkısı pertürbasyon metodu ile hesaplandı. Nokta yapının farklı yarıçapları için safsızlığın $0 \leq D \leq a$ aralığında elektronik yapısı incelendi.

2. MATERYAL VE YÖNTEM

Yarı iletken mikrokristaller üzerindeki öncülük eden kuantum sınırlandırılması araştırmalarında Efros ve Efros (1982) sırasıyla *a*'nın kristalit yarıçapı oranı ve elektronların, deşiklerin ve elektron-deşik çiftlerinin Bohr yarıçaplarının oranına bağlı üç kuantum sınırlandırılması düzenini sundu. Çok küçük kuantum noktaları için elektron ve deliğin bireysel hareketlerin sayısal olarak belirtildiği güçlü sınırlandırma düzeninden söz edilebilir.

Eğer deliklerin etkin kütlesi elektronlarınkinden daha büyük ise bir miktar daha geniş noktalar için orta düzeyde sınırlandırma rejimi sunulabilir. Bu durumda mikrosferin yarıçapı sırasıyla elektron Bohr yarıçapına küçük oranlı delik, Bohr yarıçapına büyük oranlı olmak zorundadır. Bu şartlar altında elektron ve delik üzerindeki kuantum sınırlandıması etkisi büyük ölçüde farklıdır.

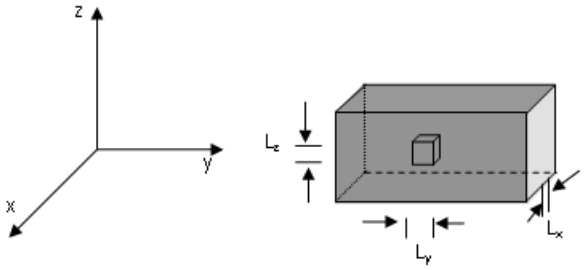
2.1. Kuantum Nokta Yapı

Elektronların serbest hareketinin üç boyutta da sınırlandırılması, kuantum nokta yapıları olarak adlandırılan sıfır boyutlu nano yapıların ortaya çıkmasına yol açmıştır. İlk kuantum nokta yapı Reed ve ark. (1986) tarafından üretilmiş olup, 250 nm kenar uzunluğu olan kare biçiminde bir geometrik yapıya sahiptir.

Tüm boyutlarda güçlü bir sınırlandırma sonucu elde edilen kuantum nokta yapıları kesikli enerji seviyelerine ve kabuk yapılarına sahip olduklarından dolayı yapay atom olarak da adlandırılırlar.

Üretilme aşamasında bu yapıların şekilleri, boyutları, enerji seviyeleri ve sınırlandırdıkları elektron sayıları kontrol edilebilir olduğundan teknolojik olarak daha ilgi çekicidir. Kuantum nokta yapıları kullanılarak kızıl ötesi foto dedektörler (QDIP), tek elektron transistörler, hafıza elemanları ve kuantum bilgisayarları gibi cihazlar geliştirilmeye başlanmıştır.

Elektron hareketlerinin üç boyutta sınırlandırıldığı hetero yapılara kuantum nokta yapıları denir. Şekil 2.1. de bir kuantum nokta yapının şematik gösterimi çizilmiştir.



Şekil 2.1. Kuantum nokta yapının şematik gösterimi.

Böyle bir kuantum nokta yapı için Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}\right)\psi(x,y,z)+V(x,y,z)\psi(x,y,z)=E\psi(x,y,z) \qquad (2.1)$$

biçiminde yazılabilir. Tüm boyutlarda sınırlandırıcı potansiyeli sonsuz alırsak, kuyu içinde V(x,y,z)=0 olur. Ayrıca sınır şartlarından dalga vektörü bileşenleri

$$k_{n_x}=\frac{n_x\pi}{L_x} \qquad (2.2a)$$

$$k_{n_y}=\frac{n_y\pi}{L_y} \qquad (2.2b)$$

$$k_{n_z}=\frac{n_z\pi}{L_z} \qquad (2.2c)$$

elde edilir. Burada $n_x,\ n_y, n_z = 1,2,\ldots$ tam sayılardır. Bu dalga vektörü bileşenleri cinsinden kuantum nokta yapının enerji özdeğerleri ise

$$E_n=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{n_x\pi}{L_x}\right)^2+\left(\frac{n_y\pi}{L_y}\right)^2+\left(\frac{n_z\pi}{L_z}\right)^2\right],\quad n=1,2,\ldots,\infty \qquad (2.3)$$

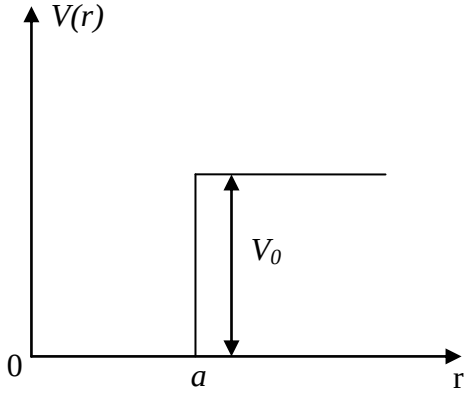
şeklinde elde edilir.

2.2. Tek Elektronlu Küresel Kuantum Kuyusu

Bir elektronlu *a* yarıçaplı sonlu küresel bir kuyu kuantum nokta yapılarının elektronik özelliklerini incelemek için iyi bir model olacaktır. İçinde bir elektron bulunduran böyle bir kuyu şematik olarak Şekil 2.2 de ki gibi gösterilebilir. Böyle bir sistem için Schrödinger denklemi küresel koordinatlarda aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi)+V(r)\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi) \qquad (2.4)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2 sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\right.$$
$$\left.\frac{1}{r^2 sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}\psi(r,\theta,\varphi)+V_{(r)}\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi) \quad (2.5)$$



Şekil 2.2. Sonlu derinlikli küresel potansiyel kuyusu.

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

$$\psi(r,\theta,\varphi)=R_{n,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta,\varphi) \quad (2.6)$$

radyal ve küresel olmak üzere iki ayrı kısımda yazabiliriz. Bu durumda küresel simetrik potansiyel için Denk.2.5 deki Schrödinger denklemi

$$\frac{1}{\mathrm{r}^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{n,\ell}(r)}{dr}\right)+\frac{2\mathrm{m}}{\hbar^2}\left\{E-V(r)-\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right\}R_{n,\ell}(r)=0 \quad (2.7)$$

biçimini alır. Buradaki sınırlandırıcı potansiyeli *V(r)* yi sonlu değilde

$$V(r)=\begin{cases}0, & r\le a\\ \infty, & r>a\end{cases} \quad (2.8)$$

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

$$\frac{1}{\mathrm{r}^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{n,\ell}(r)}{dr}\right)+\frac{2\mathrm{m}}{\hbar^2}\left\{E-\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2}\right\}R_{n,\ell}(r)=0 \quad (2.9)$$

yazılabilir. Denk. (2.9) a

$$\alpha=\sqrt{\frac{2\mathrm{mE}}{\hbar^2}} \quad (2.10a)$$

$$\rho=\alpha\mathrm{r} \quad (2.10b)$$

gibi değişken dönüşümleri uygulanırsa,

$$\frac{d^2R_{n,\ell}(\rho)}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR_{n,\ell}(\rho)}{d\rho}+\left\{1-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right\}R_{n,\ell}(\rho)=0 \qquad (2.11)$$

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

$$R_{n,\ell}(\rho)=Aj_\ell(\rho)+Bn_\ell(\rho) \qquad (2.12)$$

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

$$R_{n,\ell}(\rho)=Aj_\ell(\rho) \qquad (2.13)$$

biçiminde Bessel fonksiyonları cinsinden yazılabilir. Kuyu sınırında, yani r = *a* da sınırlayıcı potansiyel sonsuz olduğu için elektron kuyu dışına çıkamaz ve $j_\ell(\rho)=0$ olur. Bu durumda kuyu içindeki enerjinin değerleri ℓ'nin alacağı değerlere göre belirlenebilir. $\ell=0$ için,

$$j_0(\alpha a)=\frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a}=0 \qquad (2.14)$$

olur. Bu eşitlikte ancak

$$\alpha a=n\pi \ , \quad n=1,2,..,\infty \qquad (2.15)$$

olması ile sağlanır. Bu durumda elektronun kesikli enerji özdeğerleri ise

$$E_{n,0}=\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}, \quad n=1,2,\ldots,\infty \qquad (2.16)$$

bulunur. $\ell=1$ durumunda ise,

$$j_1(\alpha a)=\frac{\sin(\alpha a)}{(\alpha a)^2}-\frac{\cos(\alpha a)}{(\alpha a)}=0 \qquad (2.17)$$

olur. Bu denklemin kökleri ise sayısal analiz yöntemiyle veya grafik yöntemle belirlenebilir. Bu denklemin kökleri 4.493, 7.723, 10.904,… (Karaoğlu 1994) olarak bulunur. Bessel fonksiyonunun ilk kökü için enerji özdeğeri ;

$$E_{1,1}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{4.493}{a}\right)^2 \qquad (2.18)$$

elde edilir. Benzer şekilde ℓ'nin diğer değerleri içinde enerji özdeğerleri hesaplanabilir.

2.3. Kuantum Nokta Yapının Elektronik Yapısı

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 bağlı 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).

2.4. 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

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{2.19}$$

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

$$\vec{F}_d + \vec{F}_i = m\frac{d\vec{v}}{dt} = m\vec{a} \tag{2.20}$$

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

$$\vec{F}_D = m^* \frac{d\vec{v}}{dt} = m^* \vec{a} \tag{2.21}$$

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

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}\left(\frac{E}{\hbar}\right) = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk} \tag{2.22}$$

biçiminde yazılabilir. Denk.(2.19), Denk.(2.21) ve Denk.(2.22) birleştirilirse kristal yapı içindeki elektronun etkin kütlesi

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2} \tag{2.23}$$

bulunur. Denk.(2.23) kütle boyutunda olmakla birlikte E(k) fonksiyonunun ikinci türevine bağlıdır.

3. SAFSIZLIĞIN MERKEZDEN KAYMASININ KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİNE ETKİSİ

Son yirmi yıl içerisinde yük taşıyıcıları üç boyutta sınırlandırılmış olan kuantum nokta yapılar gibi düşük boyutlu yapıların elektronik yapısı ve optiksel özellikleri teorik ve uygulamalı fizikte önem kazanmıştır (Reed ve ark., 1988; Ozturk ve Sokmen, 2010;Yakar ve ark.,2010; Bakke ve Furtado, 2011; Karimi ve Rezaei, 2011; Datta ve ark, 2012; Ferron ve ark. , 2012; Kumar ve ark. , 2012; Mora-Ramos ve ark. , 2012; Shakur ve ark. , 2013; Kirak ve ark. , 2013). Modern teknolojinin dikkate değer ilerlemesiyle aşındırma ve moleküler demet epitaxy gibi çeşitli teknikler kullanılarak nano kuantum noktalar imal etmek mümkün olmuştur (Reed ve ark. , 1988). Kuantum noktalar mikroelektronik ve optoelektronik cihazların geliştirilmesinde çeşitli uygulama alanlarına sahiptir. Safsızlığın varlığı kuantum yapılarının performansını önemli ölçüde değiştirebildiği için onların elektriksel, optiksel ve geçiş özelliklerini de etkiler. Kuantum noktalarda safsızlık etkilerini anlamak yarı iletken fiziğindeki önemli sorunlardan biridir. Bu nedenle bazı yazarlar nanoyapılardaki safsızlık etkilerinin çeşitli yönleriyle ilgili bazı çalışmalar yapmışlardır (Çakır ve ark. , 2007; 2010; Özmen ve ark.,2009; Mikhail ve Ismail, 2010; Mikhail ve El Sayed, 2011; Sharkey ve ark. , 2011; Datta ve Ghosh, 2012; Çakır ve ark., 2012; Yakar ve ark. , 2013; Pal ve Ghosh, 2013; Yakar ve ark.,2013).

Safsızlık kuantum nokta yapı içinde veya dışından herhangi bir yerde olabilir. Bu durumda, Schrödinger denklemi tam bir çözüme sahip değildir. Safsızlığın kuantum nokta yapının merkezinden kayması dejenere enerji seviyelerinin manyetik kuantum sayısı kadar yarılmasına sebep olur (Zhu ve Chen, 1994; Boichuk ve ark. , 2011). Birçok araştırmacılar (Bose, 1999; Mikhail ve Ismail, 2007; Pan ve ark.,2011; Yakar ve ark. 2013) da çeşitli yöntemler kullanarak safsızlığın merkezden kayması durumunda kuantum noktaların bağlanma enerjisinin hesaplanmasında çeşitli çalışmalar yapmışlardır. Bose ve Sarkar, (1998); Yuan ve Liu, (2008); Sadeghi ve Avazpour, (2011); çalışmalarında, küresel kuantum noktada merkez dışı donörün enerji durumlarını ve bağlanma enerjilerini farklı sınırlandırıcı potansiyel altında hesapladılar. Küresel bir kuantum nokta da merkez dışı hidrojenik donör safsızlığın bağlanma enerjisi hem sonlu ve sonsuz sınırlandırıcı potansiyelde Mikhail ve İsmail(2007) tarafından incelenmiştir. Daha sonra, Yuan ve Liu(2008) küresel kuantum noktada merkez dışı donör için elektronik özelliklerini ve optik soğurma katsayıları hesaplamıştır. Elipsoidal

kuantum nokta yapıda merkez dışı hidrojenik donör safsızlığın bağlama enerjisi güçlü bir sınırlandırıcı bölgede (R< a_b^*) Sadeghi ve Avazpour(2011) tarafından hesaplanılmıştır. Çok yakın zamanda Boichuk(2011) merkez dışı bir alıcı safsızlığın enerji spektrumu Luttinger metoduna dayandırarak incelemiştir. Yukarıdaki çalışmalar tüm nokta boyutu ve safsızlık pozisyonu hem kuantum noktalar halinde bağlanma enerjileri üzerinde önemli bir etkiye sahip olduğunu bize gösteriyor. Şu ana kadar safsızlık pozisyonunun enerji seviyelerinin bağlanma enerjilerini ve dejenereliği nasıl etkilediği üzerinde pertürbasyon yöntemi kullanılarak yapılan yukarıda bahsedilen çalışmalar vardır. Merkez dışı kuantum noktaların sistematik çalışması hala yetersizdir. Bu nedenle, bu alandaki çalışmalar halen teorik araştırmacı ve pratik uygulamaları için önemlidir.

3.1. Zamandan Bağımsız Pertürbasyon Yöntemi

Pertürbasyon metodu, bir sistemde 'küçük' bir değişikliğin neden olduğu etkilerle ilgilidir. Bir sistemin zamandan bağımsız *H* Hamiltoniyeninin

$$H = H_0 + \lambda H' \tag{3.1}$$

olmak üzere iki kısma ayırabildiğini varsayalım. Burada H_0 pertürbe olmamış hamiltoyen, H' ise H_0 pertürbe olmamış hamiltoniyene göre çok küçük olan pertürbe olmuş hamiltoniyendir. H_0 pertürbe olmamış hamiltoyenine karşılık gelen

$$H_0 {\psi_k}^{(0)} = E_k^{(0)} {\psi_k}^{(0)} \tag{3.2}$$

Schrödinger özdeğer denklemi çözülebilir. λ parametresi pertürbasyonun mertebesini belirten parametredir. H_0 Hamiltoniyeninin $E_k^{(0)}$ özdeğerlerine karşılık gelen ${\psi_k}^{(0)}$ özfonksiyonlarının tam bir ortanormal takımı oluşturur. Başka bir deyişle ψ_i ve ψ_j bu takımın iki üyesi iseler,

$< \psi_i | \psi_j >= \delta_{ij}$ veya δ(i-j) (3.3)

olur (Bransden ve Joachain,1989). Burada δ_{ij} kronecker deltası, δ(i-j) ise delta dirac fonksiyonudur. Çözmek istediğimiz özdeğer problemi,

$$H\psi_k = \varepsilon_k \psi_k \tag{3.4}$$

dır. Burada ε_k pertürbe enerji düzeylerini, ψ_k ise bu enerji düzeylerine karşılık gelen özfonksiyonlardır.

Pertürbe olmamış kuantumlu E_k enerji düzeylerinin dejenere olmadığını varsayalım . Eğer $\lambda H'$ pertürbasyonunun etkisi yeterince küçük ve ε_k pertürbe olmuş enerji düzeyi E_k'ya diğer pertürbe olmamış seviyelerden daha yakın olduğunu gözönüne alalım. Bu durumda hem ψ_k hem de ε_k λ' nın kuvvet serisine aşağıddaki gibi açılabilir, yani

$$\psi_k = \sum_{t=0}^{\infty} \lambda^t \psi_k{}^{(t)} \tag{3.5}$$

ve

$$\varepsilon_k = \sum_{t=0}^{\infty} \lambda^t E_k{}^{(t)} \tag{3.6}$$

yazılabilir.Buradaki *t* indisi pertürbasyonun mertebesini göstermektedir.Denk. (3.5) ve Denk.(3.6) yı Denk.(3.4) e taşırsak ve Denk. (3.1) i kullanırsak;

$$(H_0 + \lambda H')\left(\psi_k{}^{(0)} + \lambda\psi_k{}^{(1)} + \lambda^2\psi_k{}^{(2)} + \cdots\right) = \left(E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} + \lambda^2 E_k^{(2)} + \cdots\right)\left(\psi_k{}^{(0)} + \lambda\psi_k{}^{(1)} + \lambda^2\psi_k{}^{(2)} + \cdots\right) \tag{3.7}$$

elde ederiz. Bu eşitlikte λ nın eşit kuvvetlerinin katsayılarının eşitliği ile sağlanabilir. λ' nın sıfırıncı mertebesinden,

$$H_0\psi_k{}^{(0)} = E_k^{(0)}\psi_k{}^{(0)} \tag{3.8}$$

yazabiliriz. Burdan Denk.(3.2) ile özdeş olduğundan

$$\psi_k{}^{(0)} = \psi_k,\ E_k^{(0)} = E_k \tag{3.9}$$

yazılabilir. Aynı şekilde λ ′nın birinci ve ikinci mertebesindeki katsayılardan

$$H_0\psi_k{}^{(1)} + H'\psi_k = E_k\psi_k{}^{(1)} + E_k^{(1)}\psi_k \tag{3.10}$$

$$H_0\psi_k{}^{(2)} + H'\psi_k{}^{(1)} = E_k\psi_k{}^{(2)} + E_k^{(1)}\psi_k{}^{(1)} + E_k^{(2)}\psi_k \tag{3.11}$$

Eşitliklerini elde ederiz. Bu daha üst mertebeler için de devam ettirilebilir.

$E_k^{(1)}$ birinci mertebe enerji düzeltmelerini elde etmek için Denk. (3.10) ifadesini soldan ψ_k ile çarpılır ve tüm uzay üzerinden integre edilirse

$$< \psi_k|H_0 - E_k|\psi_k{}^{(1)} > + < \psi_k|H' - E_k^{(1)}|\psi_k >= 0 \qquad (3.12)$$

ifadesini verir. H_0 Hermitik olduğundan

$$< \psi_k|H_0|\psi_k{}^{(1)} >=< H_0\psi_k|\psi_k{}^{(1)} >= E_k < \psi_k|\psi_k{}^{(1)} >$$

yazılır Denk.(3.12) de Denk.(3.2) ifadesini kullanılırsa birinci mertebe $E_k^{(1)}$ enerjisi ,

$$E_k^{(1)} =< \psi_k|H'|\psi_k >\equiv H_{kk}^{'} \qquad (3.13)$$

elde edilir. Benzer biçimde Denk.(3.11) den ikinci mertebe $E_k^{(2)}$ enerji düzeltmesi için

$$< \psi_k|H_0 - E_k|\psi_k{}^{(2)} > + < \psi_k|H' - E_k^{(1)}|\psi_k{}^{(1)} > - E_k^{(2)} < \psi_k|\psi_k = 0 \qquad (3.14)$$

ifadesinden

$$E_k^{(2)} =< \psi_k|H' - E_k|\psi_k{}^{(1)} > \qquad (3.15)$$

elde edilir. $E_k^{(2)}$nin eşdeğer bir ifadesi Denk. (3.10) dan

$$E_k^{(2)} = - < \psi_k{}^{(1)}|H_0 - E_k|\psi_k{}^{(1)} > \qquad (3.16)$$

biçiminde elde edilir. $\psi_{\mathrm{k}}{}^{(1)}$ çözümünü elde etmek için önce "pertürbe olmamış" Denk.(3.2) bütün özdeğer ve özfonksiyonları için çözülür. Bilinmeyen $\psi_k{}^{(1)}$ fonksiyonu, pertürbe olmamış özfonksiyonların baz takımı cinsinden aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\psi_k{}^{(1)} = \sum_s a_s^{(1)}\psi_s \qquad (3.17)$$

dır. Burada *s* üzerinden toplam , takımın kesikli kısmı üzerinden bir toplama ve sürekli kısmı üzerinde bir integrasyon anlamına gelir. Denk.(3.10) u Denk.(3.17) ye taşırsak

$$(H_0 - E_k)\sum_s a_s^{(1)}\psi_s + (H' - E_k^{(1)})\psi_k = 0 \qquad (3.18)$$

elde ederiz. Bu ifade $\Psi_l{}^*$ ile soldan çarpılır ve tüm uzay üzerinden integre edilirse

$$a_l^{(1)}(E_l - E_k) + < \psi_l|H'|\psi_k > - E_k^{(1)}\delta_{kl} = 0 \qquad (3.19)$$

bulunur. Burada $H_0\psi_l = E_l\psi_l$ ile $< \psi_l|\psi_k >= \delta_{kl}$ ifadesi kullanılmıştır. Denk.(3.19) $l = k$ için Denk.(3.13) e indirgenir. $l \neq k$ için

$$a_l^{(1)} = \frac{<\psi_l|H'|\psi_k>}{E_k - E_l} \ , l \neq k \qquad (3.20)$$

elde ederiz. Denk.(3.10) $\psi_k{}^{(1)}$ in ψ_k boyunca olan bileşeninin katsayısı $a_k^{(1)}$ i vermez. Böylece genellikten herhangi bir şey kaybedilmiş olmaz ve

$$a_k^{(1)} =< \psi_k | \psi_k{}^{(1)} >= 0 \tag{3.21}$$

olması gerektiğini bulur ve Denk.(3.17) yi yeniden ,

$$\psi_k{}^{(1)} = \sum_{s \neq k} a_s^{(1)} \psi_s = \sum_{s \neq k} \frac{H'_{sk}}{E_k - E_s} s \tag{3.22}$$

biçiminde yazabiliriz. Bu sonucu Denk. (3.15) e taşırsak ,

$$E_k^{(2)} = \sum_{s \neq k} \frac{H'_{ks} H'_{sk}}{E_k - E_s} = \sum_{s \neq k} \frac{|H'_{ks}|^2}{E_k - E_s} \tag{3.23}$$

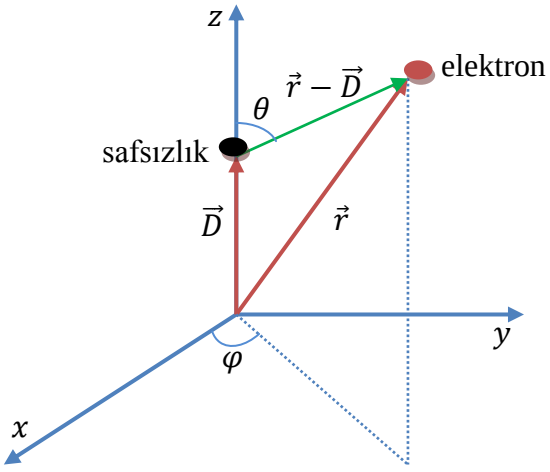
elde ederiz.

3.2. Kuantum Nokta Yapıda Safsızlık Kayması (off-center)

Merkezinden D kadar uzaklıkta z-ekseni üzerinde hidrojen tipi bir safsızlığa sahip *N* elektronlu küresel bir kuantum nokta yapının şematik gösterimi Şekil 3.1 de çizilmiştir. Böyle bir sistemin elektronik Hamiltoniyeni, etkin kütle yaklaşımı altında atomik birimlerde,

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left(-\frac{\nabla_i^2}{2m^*} - \frac{Z}{\varepsilon |\vec{r} - \vec{D}|} \right) + V_c(r) \tag{3.24}$$

şeklindedir. Burada *Z* safsızlıktaki yük sayısını, *r* elektronun merkeze olan uzaklığı, *D* safsızlığın merkeze olan uzaklığı, $|\vec{r} - \vec{D}|$ elektron ile safsızlık arasındaki uzaklığı, m^* elektronun etkin kütlesini, ε ortamın dielektrik sabitini ve *N* elektron sayısını göstermektedir. Buradaki $V_c(r)$ de dış sınırlandırıcı potansiyelidir. $V_c(r)$ sınırlandırıcı potansiyelini *a* nokta yarıçapı olmak üzere



Şekil 3.1. Safsızlığı merkezden kaymış bir kuantum nokta yapının şematik gösterimi.

$$V_c(r) = \begin{cases} 0, & r < a \\ \infty, & r \geq a \end{cases} \quad (3.25)$$

biçiminde sonsuz küresel simetrik alınabilir. Böyle bir sistem için Schrödinger denklemi

$$H\psi_n = E_n\psi_n \quad (3.26)$$

ile verilir. Burada antisimetrik ψ_n özfonksiyon tek-elektron spin fonksiyonu ϕ_p lerden oluşan Slater determinantı olarak aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\psi_n = \left(\frac{1}{N!}\right)^{1/2} \left|\phi_1(1) \dots \phi_p(p) \dots \phi_n(n)\right| \quad (3.27)$$

Burada $p \rightarrow n_i l_i m_l m_s$ kuantum sayılarını gösterir. Ayrıca ψ_n ortonormalizedir ve nokta yapı sınırlarında aşağıda verilen süreklilik şartlarını sağlar.

Kuantum nokta yapının enerjisinin beklenen değeri HFR yöntemine göre,

$$E = \langle\psi|\mathrm{H}|\psi\rangle = \sum_{p=1}^{N}\left(T_p + V_p\right) + V_c(r) \quad (3.28)$$

ile verilir. Burada T_p kinetik enerji, V_p elektron ile safsızlık arasındaki coulomb potansiyel enerjisidir. $V_c(r)$ ise küresel simetrik sınırlandırıcı potansiyeldir. Bu enerji integralleri tek-elektron spin orbitalleri üzerinden atomik birimde,

$$V_p = \int \phi_p^* \left(\frac{-Z}{\varepsilon|\vec{r}-\vec{D}|}\right) \phi_p d^3r \quad (3.29)$$

$$T_{p=} \int \phi_p^* \left(\frac{-\nabla^2}{2m^*}\right) \phi_p d^3r \quad (3.30)$$

şeklinde yazılabilir. Burada p tek-elektron spin orbitallerinin kuantum sayılarını göstermektedir. Tek-elektron spin fonksiyonu ϕ_p Slater tipi atomik orbitallerinin lineer kombinasyonundan aşağıdaki gibi

$$\phi_p = \sum_{k=1}^{\sigma} c_{pk}\chi_k \quad (3.31)$$

oluşturulabilir. Burada $k \rightarrow n_i l_i m_i$ olup, STO lar için kuantum sayılarını, σ STO ların baz seti sayısını ve c_{pk} orbitallerin lineer toplam katsayılarını göstermektedir. STO ların genel formu

$$\chi_{n_i l_i m_i}\left(\zeta_i, r\theta\phi\right) = r^{n_i-1}e^{-\zeta_i r}Y_{l_i m_i}(\theta,\varphi) \quad (3.32)$$

ile verilir (Slater 1930, 1951, 1960). Burada ζ_i orbital üsteli, $Y_{l_i m_i}(\theta,\varphi)$ de Condon-Shortly fazında kompleks küresel harmonik fonksiyonları göstermektedir. Bu durumda Denk.(3.30) deki integral,

$$V_p = -\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} {c^*}_{pn_i l_i m_i}\, c_{pn_j l_j m_j} \int_0^a \chi_{n_i l_i m_i}\left(r_i,\zeta_i\right)\frac{1}{\left|\vec{r}-\vec{D}\right|}\,\chi_{n_j l_j m_j}\left(r_j,\zeta_j\right)\,dv \qquad (3.33)$$

dır. Burada ki $\frac{1}{|\vec{r}-\vec{D}|}$ yi, safsızlık z- ekseni üzerinde konumlanmış ve (*rθφ)* de elektronun koordinatları olmak üzere küresel harmonikler cinsinden

$$\frac{1}{\left|\vec{r}-\vec{D}\right|} = \sum_{\lambda=0}^{\infty}\frac{4\pi}{2\lambda+1}\frac{{r_<}^{\lambda}}{{r_>}^{\lambda+1}}\sum_{\mu=\lambda}^{\lambda} Y^*_{\lambda\mu}(\theta',\varphi')Y_{\lambda\mu}(\theta',\varphi') \qquad (3.34)$$

$$= \sum_{\lambda=0}^{\infty}\frac{4\pi}{2\lambda+1}\frac{{r_<}^{\lambda}}{{r_>}^{\lambda+1}}\sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda}\delta_{\mu 0}\left(\frac{2\lambda+1}{4\pi}\right)^{1/2} Y_{\lambda\mu}(\theta,\varphi)$$

Laplace açılımı biçiminde yazılabilir. Bu durumda Coulomb potansiyel enerji integrali

$$V_p = \sum\sum c^*_{in_i l_i m_i} c_{in_j l_j m_j}\int_0^a {\chi^*}_{n_i l_i m_i}(\zeta,\vec{r})\sum_{\lambda=0}^{\infty}\frac{4\pi}{2\lambda+1}\frac{{r_<}^{\lambda}}{{r_>}^{\lambda+1}} \times\sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda}\delta_{\mu 0}\left(\frac{2\lambda+1}{4\pi}\right)^{1/2} Y_{\lambda\mu}(\theta,\varphi)\chi_{n_j l_j m_j}(\zeta',\vec{r})dv \qquad (3.35)$$

biçiminde yazılabilir. Denk. (3.35) biraz daha düzenlersek,

$$V_p = \sum\sum c^*_{in_i\lambda_i m_i} c_{in_j\lambda_j m_j}\sum_{\lambda=0}^{\infty}\left(\frac{4\pi}{2\lambda+1}\right)^{1/2}\int_0^a r^{n_i-1}e^{-\zeta r}Y^*_{\lambda_i m_i}(\theta,\varphi) \times\frac{{r_<}^{\lambda}}{{r_>}^{\lambda+1}}Y_{\lambda 0}(\theta,\varphi)r^{n_j-1}e^{-\zeta' r}Y_{\lambda_j m_j}(\theta,\varphi)r^2 dr d\Omega \qquad (3.36)$$

elde edilir. Denk.(3.36) Gaunt katsayıları cinsinden

$$V_p = \sum\sum c^{*}_{in_i\lambda_i m_i} c_{in_j\lambda_j m_j} \sum_{\lambda=max\{|l_i-l_j|,|m_i-m_j|\}}^{l_i+l_j} \left(\frac{4\pi}{2\lambda+1}\right)^{1/2} \times \langle l_i m_i | l_j m_j | \lambda 0\rangle \int_0^R r^{n_i+n_j} e^{-(\zeta+\zeta')r} \frac{\mathrm{r}_<{}^{\lambda}}{\mathrm{r}_>{}^{\lambda+1}}\,\mathrm{dr} \tag{3.37}$$

yazılabilir. Burada $r_< = min(r, D)$ ve $r_> = max(r, D)$ olarak tanımlanır. Burada $\langle l_i m_i | l_j m_j | \lambda 0\rangle$ Steinborn'un Gaunt katsayıları

$$\langle l_i m_i | l_j m_j | \lambda 0\rangle = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l_i+1)(2l_j+1)}{4\pi(2\lambda+1)}}\, C^{l_i l_j \lambda}_{m_i m_j \mu} C^{l_i l_j \lambda}_{000} \tag{3.38}$$

şeklinde tanımlanır (Gaunt,1929). Denk.(3.37) deki integrali

$$\mathrm{R^{İNT}} = \int_0^R r^{n_i+n_j} e^{-(\zeta+\zeta')r} \frac{\mathrm{r}_<{}^{\lambda}}{\mathrm{r}_>{}^{\lambda+1}}\,\mathrm{dr}$$

$$= \int_0^D r^{n_i+n_j} e^{-(\zeta+\zeta')r} \frac{\mathrm{r}^{\lambda}}{\mathrm{D}^{\lambda+1}}\,\mathrm{dr} + \int_D^a r^{n_i+n_j} e^{-(\zeta+\zeta')r} \frac{\mathrm{D}^{\lambda}}{\mathrm{r}^{\lambda+1}}\,\mathrm{dr} \tag{3.39}$$

biçiminde iki kısma ayırabiliriz. Bu integralin ikinci kısmı ise

$$\int_D^a r^{n_i+n_j} e^{-(\zeta+\zeta')r} \frac{\mathrm{D}^{\lambda}}{\mathrm{r}^{\lambda+1}}\,\mathrm{dr}$$

$$= \mathrm{D}^{\lambda}\left[\int_D^{\infty} r^{n_i+n_j} e^{-(\zeta+\zeta')r} \frac{1}{\mathrm{r}^{\lambda+1}}\,\mathrm{dr} - \int_a^{\infty} r^{n_i+n_j} e^{-(\zeta+\zeta')r} \frac{1}{\mathrm{r}^{\lambda+1}}\,\mathrm{dr}\right]$$

biçiminde iki integralin toplamı şeklinde yazılabilir. Ayrıca incomplette gama fonksiyonlarının

$$\gamma(n,x) = \int_0^x t^{n-1} e^{-t}\,\mathrm{dt} = (\mathrm{n}-1)!\,(1 - \mathrm{e}^{-\mathrm{x}} \textstyle\sum_{s=0}^{n-1} \frac{x^s}{s!}) \tag{3.40a}$$

$$\Gamma(n,x) = \int_x^{\infty} t^{n-1} e^{-t}\,\mathrm{dt} = (\mathrm{n}-1)!\,\mathrm{e}^{-\mathrm{x}} \textstyle\sum_{s=0}^{n-1} \frac{x^s}{s!} \tag{3.40b}$$

tanımları kullanılırsa (Arfken1985), V_p potansiyelinin ifadesi

$$V_p = \frac{1}{\mathrm{D}^{\lambda+1}}\gamma(n_i+n_j+\lambda, D, \zeta+\zeta') + D^{\lambda}\{\Gamma(n_i+n_j-\lambda-1, D, \zeta+\zeta') - \Gamma(n_i+n_j-\lambda-1, R, \zeta+\zeta')\} \tag{3.41}$$

elde edilir. Burada

$$\gamma\left(n_i+n_j+\lambda, D, \zeta+\zeta'\right)=\int_0^D r^{n_i+n_j+\lambda}e^{-(\zeta+\zeta')r}dr$$
$$=\frac{\left(n_i+n_j+\lambda\right)!}{(\zeta+\zeta')^{n_i+n_j+\lambda+1}}\left(1-e^{-(\zeta+\zeta')D}\sum_{k=0}^{n_i+n_j+\lambda}\frac{[(\zeta+\zeta')D]^k}{k!}\right) \quad (3.42)$$

ve

$$\Gamma\left(n_i+n_j+\lambda, D, \zeta+\zeta'\right)=\int_D^\infty r^{n_i+n_j-\lambda-1}e^{-(\zeta+\zeta')r}dr$$
$$=\frac{\left(n_i+n_j-\lambda-1\right)!}{(\zeta+\zeta')^{n_i+n_j-\lambda}}\left(e^{-(\zeta+\zeta')D}\sum_{k=0}^{n_i+n_j-\lambda-1}\frac{[(\zeta+\zeta')D]^k}{k!}\right) \quad (3.43)$$

dir. Denk. (3.31) deki kinetik enerjinin beklenen değeri ise benzer şekilde

$$T_p=\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma}c^*_{pn_i\lambda_i m_i}c_{pn_j\lambda_j m_j}\left\{\left[\frac{\left[l_j\left(l_j+1\right)-n_j\left(n_j-1\right)\right]\left(\zeta_i+\zeta_j\right)^2}{2\left(n_i+n_j\right)\left(n_i+n_j-1\right)}\right.\right.$$
$$\left.+\quad\frac{n_j\zeta_j\left(\zeta_i+\zeta_j\right)}{\left(n_i+n_j\right)}-\frac{\left(\zeta_j\right)^2}{2}\right]S_{n_i\lambda_i m_i,n_j\lambda_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right) \quad (3.44)$$
$$+\quad\frac{\left[l_j\left(l_j+1\right)-n_j\left(n_j-1\right)\right]}{2\left(n_i+n_j-1\right)}e^{-\left(\zeta_i+\zeta_j\right)a}a^{n_i+n_j-1}\left(1\right.$$
$$\left.\left.+\frac{\left(\zeta_i+\zeta_j\right)a}{n_i+n_j}\right)+\quad\frac{n_j\zeta_j}{n_i+n_j}e^{-\left(\zeta_i+\zeta_j\right)a}a^{n_i+n_j}\right\}$$

elde edilir. Burada

$$S_{n_i\lambda_i m_i,n_j\lambda_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right)=\int_0^a\chi_{n_i l_i m_i}\left(\zeta_i,a\theta\varphi\right)\chi_{n_j l_j m_j}\left(\zeta_i,a\theta\varphi\right)d^3r \quad (3.45)$$

$$= \frac{(n_i+n_j)!}{(\zeta_i+\zeta_j)^{n_i+n_j+1}}\left(1 - e^{-(\zeta_i+\zeta_j)a}\sum_{s=0}^{n_i+n_j}\frac{(\zeta_i+\zeta_j)^s}{s!}\right)\delta_{l_i l_j}\delta_{m_i m_j}$$

olup, örtüşme (overlap) integralidir.

Elektronun hidrojenik safsızlığa bağlanma enerjisi safsızlığın olduğu durumla olmadığı durumdaki enerji farkına eşittir. Yani

$$E_{bağ} = E - E_{safsızlık} \tag{3.46}$$

yazılır. Buradan bağlanma enerjisi için,

$$E_{bağ} = \int \psi_i^* \frac{1}{|\vec{r} - \vec{D}|}\psi_i d^3r \tag{3.47}$$

İfadesi elde edilir. Buradaki $\frac{1}{|\vec{r}-\vec{D}|}$ nin açık ifadesi denk. (3.35) de verilmiştir.

1. mertebeden pertürbasyon teoremine göre bağlanma enerjisinin ifadesi

$$E_{bağ}^{(1)} = \int \psi_i^* \frac{1}{|\vec{r} - \vec{D}|}\psi_i d^3r \tag{3.48}$$

$$E_{bağ}^{(1)} = \sum\sum c^*_{in_i\lambda_i m_i} c_{in_j\lambda_j m_j} \sum_{\lambda=max\{|l_i-l_j|,|m_i-m_j|\}}^{l_i+l_j} \left(\frac{4\pi}{2\lambda+1}\right)^{1/2} \times \langle l_i m_i | l_j m_j | \lambda 0\rangle \int_0^R r^{n_i+n_j} e^{-(\zeta+\zeta')r} \frac{r_<^{\lambda}}{r_>^{\lambda+1}} dr \tag{3.49}$$

yazılabilir(Yakar ve ark. 2013).

3.3. Genetik Algoritma

Genetik algoritma (GA) metodu bir doğal seleksiyon metodur. Bu metodda ortama iyi uyum sağlayan bireylerin hayatta kalması, sağlayamayan bireylerin ise elenmesi olarak tanımlanabilen bir araştırma ve sayısal optimizasyon yöntemidir (Coley,2001). Son zamanlarda mühendislik ve fiziğin birçok alanında, özellikle nano ölçekli kuantum sistemlerin elektronik yapısının belirlenmesinde kullanılmaya başlanılmıştır. Küçük boyutlu kuantumlu yapılarda kullanıldığında Kuantum Genetik Algoritma (KGA) olarak da adlandırılan bu yöntem enerji minimizasyon ilkesine dayanır ve kuantum mekaniksel sistemleri temsil eden Schrödinger denkleminin çözümlerini bulmak için de kullanılmaktadır.

KGA metodu tamamen rastgeleliğe dayanır. Bunlar; yeniden üretme, çaprazlama ve mutasyondur.

3.3.1. Yeniden Üretme

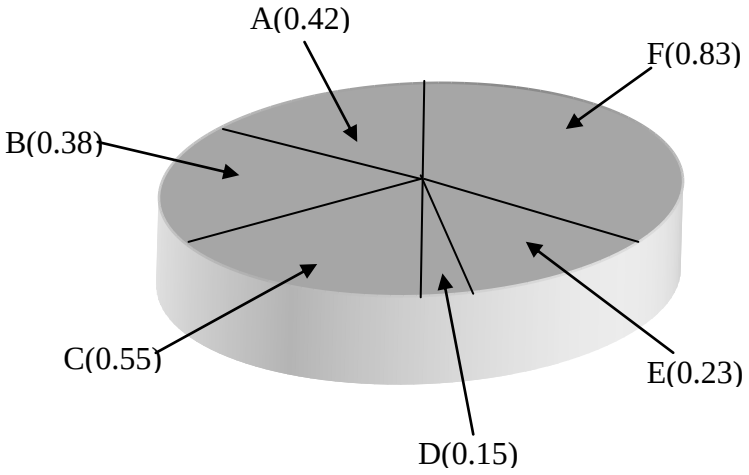
Bu süreçte yeni nesillerin oluşturulması sağlanır. Yeniden üretme sürecinde yeni nesil oluşturmak için her bireyin uygunluk değerlerine bakılır ve uygunluk değeri büyük olan bireyler yeni nesle aktarılırken uygunluk değeri küçük olan bireyler elenir. Herhangi bir i. bireyin enerji beklenen değeri E_i aşağıdaki gibi eşitlikle uygun bir F_i değerine dönüştürülür (Goldberg,1999, Coley,2001, Çakır, 2007).

$$F_i = e^{-\beta(E_i-\bar{E})/(\bar{E}-E_{min})} \tag{3.50}$$

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

$$P_i = \frac{F_i}{\sum_{i=1}^{N_{pop}} F_i} \tag{3.51}$$

bu işlemde bazı bireylerin gelme olasılığı birden fazla olurken bazı bireylerin de gelmeme olasılığı vardır. Yani P_i değeri büyük olan bireyin yeni nesle aktarılma olasılığı daha çok, küçük olan bireyin yeni nesle aktarılma olasılığı daha az olacaktır veya hiç olmayacaktır. Bunun için bir seçim işlemi uygulanır. Bu işlem için farklı yöntemler uygulanabilir. Bunlardan en yaygın olarak kullanılanları *rulet çarkı* yöntemidir (Goldberg,1999, Coley,2001, Çakır 2007). Denk.(3.51) den elde edilen uygunluk değerleri kullanılarak bir rulet çarkı modeli Şekil 3.2. de çizilmiştir.

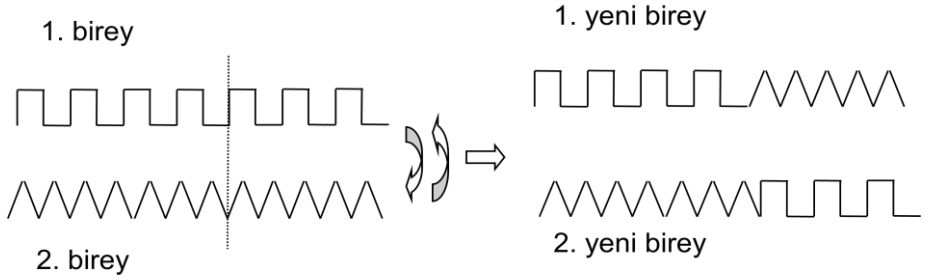


Şekil 3.2. Rulet çarkının şematik gösterimi.

Şekil 3.2. den de görüleceği gibi uygunluk değeri 0.83 olan bireylerin gelme olasılığı fazla iken uygunluk değeri 0.15 olan bireylerin gelme olasılığı çok az olacaktır veya hiç olmayacaktır. Böylece uygunluk değerleri yüksek olan bireyler yeni nesle daha çok aktarılırken, uyumluluk değeri küçük olan bireyler çok az aktarılacak veya hiç aktarılmayacaktır. Çark nüfus sayısı kadar çevrilerek yeni bireyler elde edilir.

3.3.2. Çaprazlama (Crossover)

Biyolojik süreçte gerçekleşen çaprazlama işlemi, iki kromozomun genlerinin birbiriyle değiştirmelerini 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 işlemini rastgele seçilen iki birey arasında nasıl gerçekleştirildiği şematik olarak Şekil 3.3. deki gibi gösterilebilir (Şahin, 2005, Çakır,2007).



Şekil 3.3. Çaprazlama İşleminin Şematik Gösterimi(Çakır, 2007).

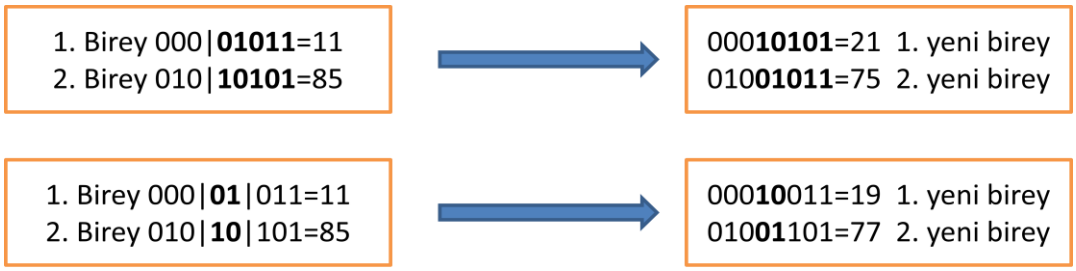
Seçilen iki birey rastgele belirlenen bir noktadan kesilerek birbiriyle yer değiştirilir. Böylece iki yeni birey elde edilmiş olur. Belirlenen iki yeni birey, farklı oranlarda hem birinci bireyin hem de ikinci bireyin bilgilerini taşımaktadır. Rastgele kesme işlemi sadece bir noktadan yapılacağı gibi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

Dalga fonksiyonları için çaprazlama işlemi şöyle yapılır: Rastgele seçilen iki dalga fonksiyonu $\psi_1(c_i, \zeta_i)$ ve $\psi_2(c_i, \zeta_i)$ kendi aralarında çaprazlama işlemi

$$\psi_1'(c_i, \zeta_i) = \psi_1(c_i, \zeta_i)S(c_i, \zeta_i) + \psi_2(c_i, \zeta_i)(1 - S(c_i, \zeta_i))$$
$$\psi_2'(c_i, \zeta_i) = \psi_2(c_i, \zeta_i)S(c_i, \zeta_i) + \psi_1(c_i, \zeta_i)(1 - S(c_i, \zeta_i)) \quad (3.52)$$

biçiminde bir işlemle yapılabilir (Şahin, 2005, Çakır,2007). Böylece elde edilen yeni bireylerin her biri, bir önceki iki bireyin bilgisini taşımış olur.

Parametre eniyilemesi yönteminde çaprazlama işlemi, 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 Şekil 3.4. te gösterilmiştir. (Şahin, 2005, Çakır,2007).



Şekil 3.4. Çaprazlama işleminin ikilik sayı sisteminde gösterimi

3.3.3. Mutasyon

Genetik algoritmanın diğer bir süreci olan mutasyon işlemi, çaprazlama işleminden sonra oluşturulmuş yeni nesil içinden rastgele seçilen bir bireye uygulanır. Mutasyon işlemi sistemi düştüğü yerel minimumlardan kurtarılması açısından önemli bir rol oynar. İki 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 (Şahin, 2005, Çakır,2007).

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,

$$\psi_1'(c_i,\zeta_i)=\psi_1(c_i,\zeta_i)+\psi_m(c_i,\zeta_i) \tag{3.53}$$

biçiminde bir mutasyon uygulanabilir. Burada $\psi_m(c_i,\zeta_i)$ mutasyon fonksiyonudur.

Bu Kuantum Genetik Algoritma (KGA) yöntemi ile kuantum nokta yapılarının elektronik özellikleri incelendi. Merkezinde hidrojen tipi bir safsızlık bulunan sonsuz küresel simetrik potansiyelle sınırlandırılmış bir-elektronlu kuantum nokta yapısının enerji özdeğerlerini ve dalga fonksiyonlarını Kuantum Genetik Algoritma metodu ile belirlendi. Dalga fonksiyonları, STO ların lineer bileşiminden oluşan tek-elektron spin orbitalleri alındı.

$$\frac{|\vec{D}|}{a_b^*} < 1 \tag{3.54}$$

olmak şartıyla, safsızlığın merkezden kayması sonucunda enerjiye gelecek katkı küçük olacağından pertürbasyon olarak ele alınabilir. KGA ile belirlenen enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları kullanılarak, safsızlığın merkezden $\vec{D}$ kadar kayması durumunda bu enerji seviyelerine katkısı pertürbasyon metodu ile hesaplandı.

4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

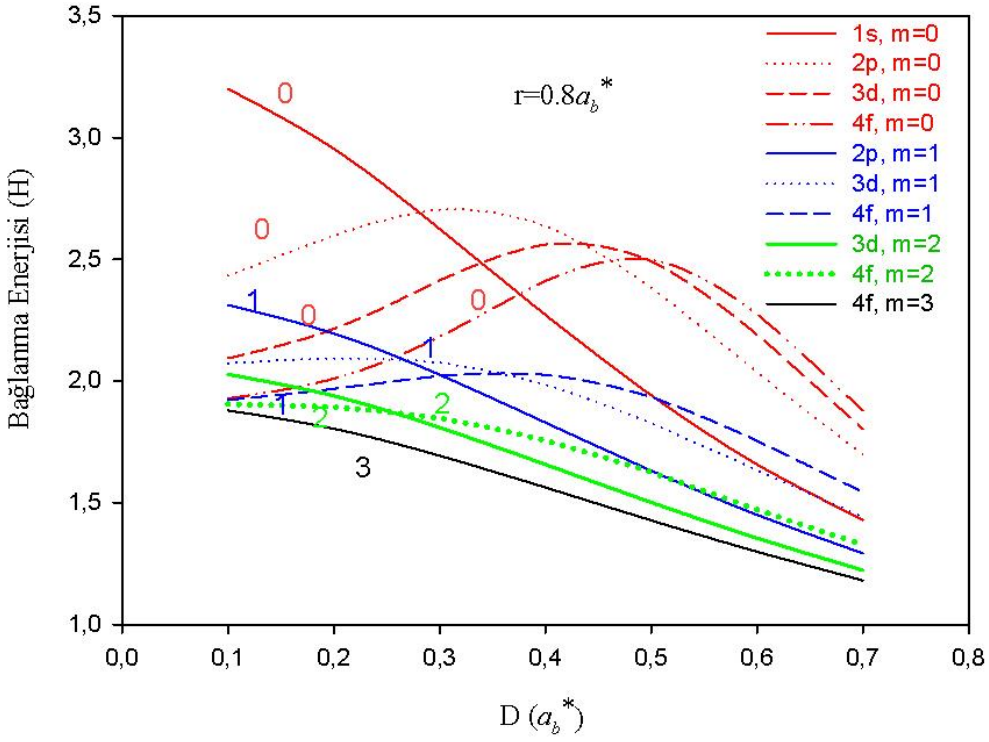
Sonsuz sınırlayıcı potansiyel ile sınırlandırılmış merkezinde hidrojen benzeri safsızlık bulunduran bir sistem için Denk.(3.26) da verilen Schrödinger denkleminin çözümlerini bulmak için Bölüm III te ayrıntıları verilen bir sayısal eniyilemesi yöntemi olan KGA ile HFR yönteminin birleşimi olan bir yöntem kullanıldı. Başlangıçta tek elektron spin orbitalleri, kuantum mekaniğinde atomik ve moleküler sistemlerin elektronik yapısının incelenmesinde gerçek dalga fonksiyonu davranış özelliği gösteren STO ların lineer toplamından oluşturuldu. Her bir atomik orbitaller kendi tipinde STO lardan oluşturuldu. Aynı tip atomik orbitallerin ζ ları ortak olan STO lardan oluşturuldu. Baz fonksiyonu sayısı 5 seçildi. Bu çalışmada atomik birimleri kullandık. Malzeme parametresi olarak etkin Rydberg enerjisi $\mathrm{R_y}^* = \frac{\hbar^2}{\mathrm{m}^* a_b{}^*}$, etkin Bohr yarıçapını $a_b{}^* = \frac{\hbar^2 \varepsilon}{\mathrm{m}^* e^2}$ aldık. Burada ε ortamın dielektrik sabitidir. GaAs için elektronun etkin kütlesi $\mathrm{m_{GaAs}} = 0.067\mathrm{m_0}$, $\varepsilon_{\mathrm{GaAs}} = 13.8$ alındı.

Bölüm III te bahsettiğimiz gibi KGA yöntemi tamamen rastgeleliğe dayanan Denk (3.26) nın olası çözümlerini oluşturan başlangıç nüfus ile başlar. Başlangıç nüfusu 100 bireyden oluşturuldu. Başlangıç nüfusu $r = a$ da sınır şartlarını sağlayacak şekilde Denk.(3.26) nın olası çözümleri olan ve rastgele belirlenen Denk.(3.31) ve Denk.(3.32) deki c_i ve ζ_i değerlerinden oluşturulduktan sonra her bir birey normalize edildi. Normalize edilen bu başlangıç bireyleri kullanılarak her bir birey için enerjinin beklenen değeri HFR yöntemiyle elde edilen Denk.(3.28) den hesaplandı. Aynı tip atomik orbitallerin dikleştirilmesinde Gram-Schmidt yöntemi kullanıldı (Arfken 1985). Enerjinin beklenen değeri bir nesil için hesaplanırken hızı artırmak amacıyla $\mathrm{S}_{\mathrm{n_i}\ell_\mathrm{i}\mathrm{m_i},\mathrm{n_j}\ell_\mathrm{j}\mathrm{m_j}}(\zeta_\mathrm{i},\zeta_\mathrm{j})$ değerleri bir kere hesaplanıp bir diziye yerleştirildi. Ayrıca Gaunt katsayıları, binom katsayıları cinsinden hesaplanıp diziye yerleştirildi (Guseinov ve ark. 1995). Bu da hesaplamada artı bir hız kazandırdı. Buna ilaveten her nesilde enerjisi en düşük iki birey bir sonraki nesle aktarıldı ve böylece çalkantılar engellendi.

Genetik süreçteki her bir adımda yeniden oluşturma, çaprazlama ve mutasyon işlemleri rastgeleliğe dayanmaktadır. Genetik süreç sonunda oluşturulan yeni nüfusun her bir bireyi normalize edilir. Her bir bireyin atomik orbitalleri dikleştirme işlemi yapıldı ve sınır şartı sağlandı. Bu işlemler en iyi yakınsama elde edilene kadar sürdürülür.

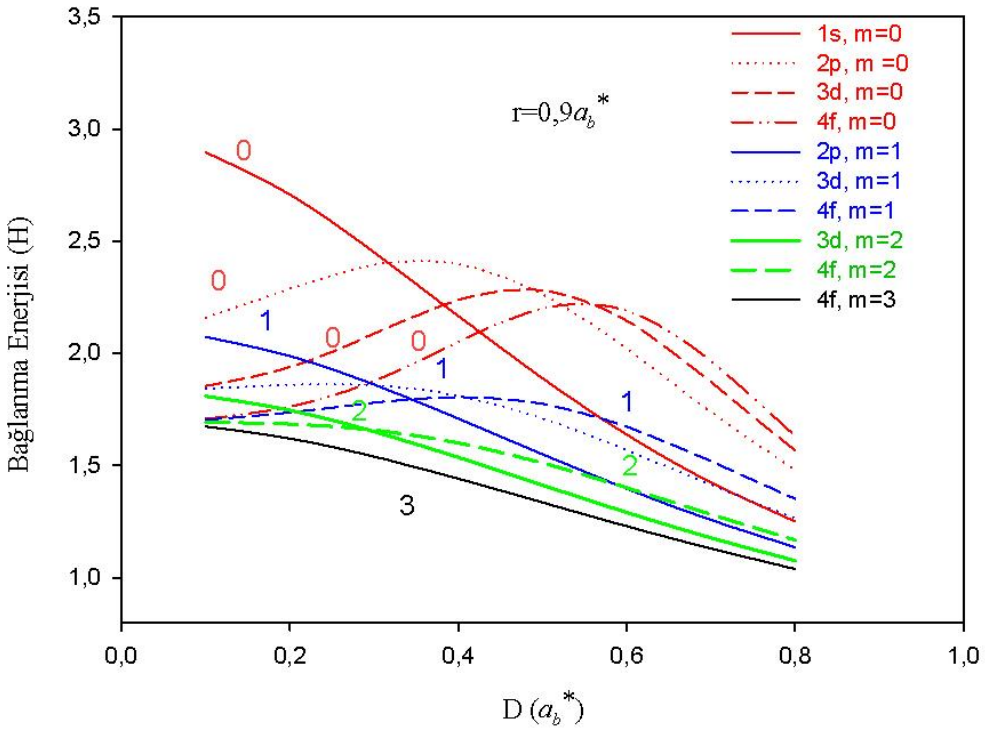
Yukarıda bahsedilen KGA yöntemi kullanılarak STO lar üzerinden sonsuz sınırlandırıcı bir potansiyel altında merkezinde safsızlık olan bir-elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durum enerjileri ve dalga fonksiyonları farklı nokta yarıçapı $0.5 \leq r \leq 15\ a_b^*$ aralığında hesaplandı. Hesaplanan bu enerji değerleri ve dalga fonksiyonları kullanılarak safsızlığın merkezden kaymasının bu enerji seviyelerine etkisi pertürbasyon yöntemiyle hesaplandı. Başka bir deyişle bağlanma enerjileri hesaplandı. Hesaplamalar belirli bir nokta yarıçapında safsızlığın merkezden kaymasının farklı değerleri için hesaplandı. Yani safsızlık merkezden $0.1 \leq a_b^* < R$ kadar herbir nokta yarıçapı için hesaplandı. Hesaplamalarda atomik birimler kullanıldı. Atomik birimlerde etkin 1 Bohr yarıçapı $a_b^* = 100$ Å ve etkin Rydberg enerjisi $R_y=5.72$ meV alındı. Materyal parametreleri olan etkin kütle $m^*=0.067m_0$ ve $\varepsilon=13.18$ olarak alındı. Burada m_0 serbest elektron kütlesidir.

Şekil 4.1 de nokta yarıçapı $r=0.8\ a_b^*$ve magnetik kuantum sayısı m=0,1,2,3 değerleri için bağlanma enerjisinin safsızlığın konumuna göre değişim grafiği verilmiştir. Şekilden de görüldüğü gibi magnetik kuantum sayısı m=0 için safsızlığın küçük kaymalarında 1s seviyesinin bağlanma enerjisi uyarılmış seviyelerin (p, d ve f) bağlanma enerjisine göre daha büyük olduğu görülmektedir. Safsızlığın merkezden kayması arttıkça, 1s seviyesinin bağlanma enerjisi azalırken uyarılmış seviyelerin (p, d ve f) bağlanma enerjileri artmaktadır. Safsızlığın $D/a_b^* = 0.4$ değerine kadar bu durum devam ederken, bu değerden sonra uyarılmış seviyelerinin bağlanma enerjileri de azalmaya başlamaktadır. Safsızlık merkezden uzak iken (büyük kaymalarda) aşağı seviyelerin bağlanma enerjisi yukarı seviyelerin bağlanma enerjilerinden küçük olmaktadır. Magnetik kuantum sayısı m=1 değeri için safsızlık merkeze yakın iken (küçük kaymalarda) baş kuantum sayısı n'si küçük olan seviyenin bağlanma enerjisi, baş kuantum sayısı büyük olan seviyenin bağlanma enerjisinden büyüktür. Safsızlık merkezden uzaklaştıkça tüm seviyelerin bağlanma enerjisi giderek azalmakta ve baş kuantum sayısı büyük olan seviyenin bağlanma enerjisi baş kuantum sayısı küçük olan seviyenin bağlanma enerjisinden büyük olmaktadır. m=2 için safsızlığın merkeze yakın iken d seviyesinin bağlanma enerjisi f seviyesininkinden büyük olurken, safsızlık merkezden uzaklaştıkça durum tersine dönmektedir. m=3 değeri için safsızlığın f seviyesinin bağlanma enerjisi safsızlığın merkezden kayması arttıkça azalmaktadır.



Şekil 4.1: r=0.8 a_b^* için safsızlığın kaymasına karşılık bağlanma enerji değerleri.

Şekil 4.2 de nokta yarıçapı r=0.9 a_b^*ve magnetik kuantum sayısı *m*=0,1,2,3 değerleri için küresel kuantum nokta yapının bağlanma enerjisinin safsızlığın konumuna göre değişim grafiği verilmiştir. Şekil 4.2 den görüleceği gibi *m*=0 değeri için safsızlık merkeze yaklaştıkça 1s taban seviyesinin bağlanma enerjisi artmaktadır. Uyarılmış seviyelerin (p, d ve f) bağlanma enerjisi safsızlık merkezden uzaklaştıkça artıyor ve 2p 0.3 a_b^*, 3d 0.4 a_b^* ve 4f 0.5 a_b^*da pik yapıyor. Bu pik değerinden sonra D'nin artması ile bağlanma enerjisi azalıyor ve yörüngesel momentum kuantum sayısı *l* 'si küçük olan seviyelerin bağlanma enerjisi daha küçük olmaktadır. Büyük kaymalarda *l* 'si küçük olan seviyelerdeki bağlanma enerjisi *l* 'si büyük olan seviyelerin bağlanma enerjilerinden küçük olmaktadır. *m*=1 değeri için safsızlığın küçük kaymalarında 2p seviyesinin bağlanma enerjisi d ve f seviyelerinin bağlanma enerjilerinden büyük olmaktadır. Safsızlığın daha büyük kaymalarında her seviyenin bağlanma enerjisi giderek azalmakta ve baş kuantum sayısı büyük olan seviyenin bağlanma enerjisi baş kuantum sayısı küçük olan seviyenin bağlanma enerjisinden büyük olmaktadır. *m*=2 için safsızlığın küçük kaymalarında d seviyesinin bağlanma enerjisi f seviyesininkinden büyük olurken, safsızlığın büyük kaymalarında durum tersine dönmektedir. *m*=3 değeri için safsızlık kayması arttıkça f seviyesinin bağlanma enerjisi giderek azalmaktadır.



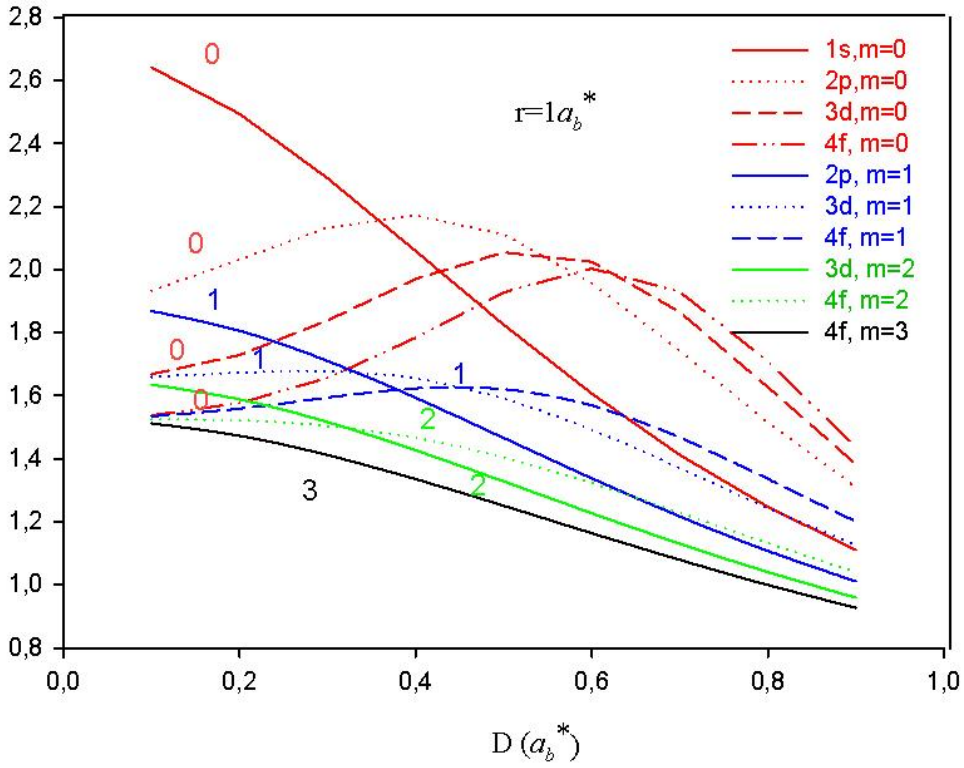
Şekil 4.2: r=0,9 a_b^* için safsızlığın kaymasına karşılık bağlanma enerji değerleri.

Şekil 4.3- 4.13 te nokta yarıçapı r=1a_b^*-2a_b^*ve magnetik kuantum sayısı *m*=0,1,2,3 değerleri için bağlanma enerjisinin safsızlığın konumuna göre değişim grafikleri verilmiştir. Şekillerden görüleceği gibi bağlanma enerjileri Şekil 4.1 ile 4.2 'ye benzer özellik göstermektedir. Nokta yarıçapı arttıkça tüm seviyelerin bağlanma enerjilerinin azaldığı görülmektedir. Yine nokta yarıçapı arttıkça *m*=0 için *l* 'si büyük olan seviyelerin (p, d ve f) bağlanma enerjilerinin pikleri safsızlığın merkezden daha uzak noktalarda olduğu görülmektedir. Nokta yarıçapı büyüdükçe elektronun kinetik enerjisi azalmakta ve kolay bir şekilde safsızlığa bağlanmaktadır. Safsızlığın merkeze yakın olduğu yerlerde bağlanma enerjisinin büyük olmasının nedeni diğer yukarı seviyelerin perdelemesinden kaynaklanmaktadır. Nokta yarıçapının küçük olması demek, güçlü sınırlanmanın olduğu bölgeler demektir. Güçlü sınırlanmanın olduğu bölgelerde elektronun kinetik enerjisi çok yüksek olmaktadır ve bağlanması daha zor olmaktadır. Dolayısıyla bağlanma enerjisi daha büyük olmaktadır.

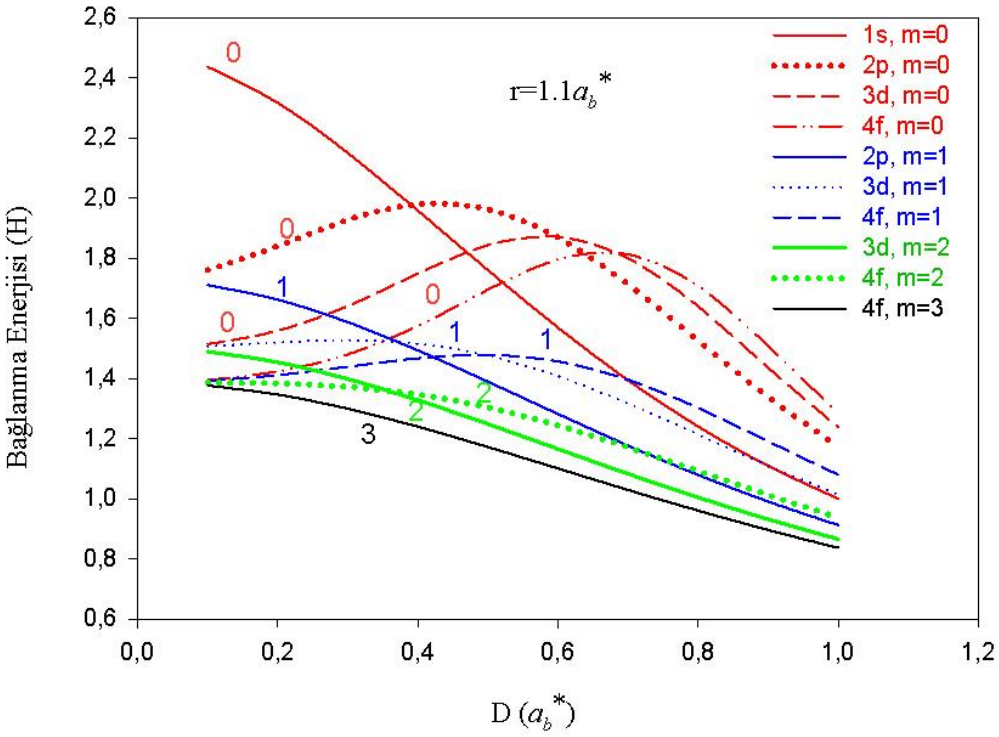
Bağlanma enerjisinin büyüklüğü nokta yarıçapının artması ile azalmaktadır. Nokta yarıçapındaki artış, elektronun olasılık yoğunluğunun artmasına bu da bağlanma enerjisinin azalmasına neden olmaktadır. s seviyeleri için bağlanma enerjisi safsızlık

merkezde iken maksimum olmaktadır. Safsızlık merkezden uzaklaştıkça bağlanma enerjisi monoton olarak azalmaktadır. Böylece s seviyelerinin toplam enerjileri safsızlık merkezde iken minimum olmaktadır. Çünkü burada küresel simetrik yük dağılımına sahiptir. Diğer p, d ve f seviyeleri için safsızlık merkezden uzaklaşırken ilk önce artarak bir maksimum değere ulaşıyor ve sonra monoton olarak azalmaktadır. Yani safsızlığın yeri noktanın kenarı ile merkezi arasında bir yerlerde iken p, d ve f seviyelerinin bağlanma enerjilerinin maksimumu safsızlığın merkez dışında bir yerde iken olmaktadır. s dışı orbitaller küresel simetrik özelliğe sahip olmadıkları için maksimumları da merkez dışı pozisyonunda olmaktadır. Başka bir deyimle p, d ve f seviyelerinin toplam enerjileri safsızlık merkezden uzakta iken minimum olmaktadır.

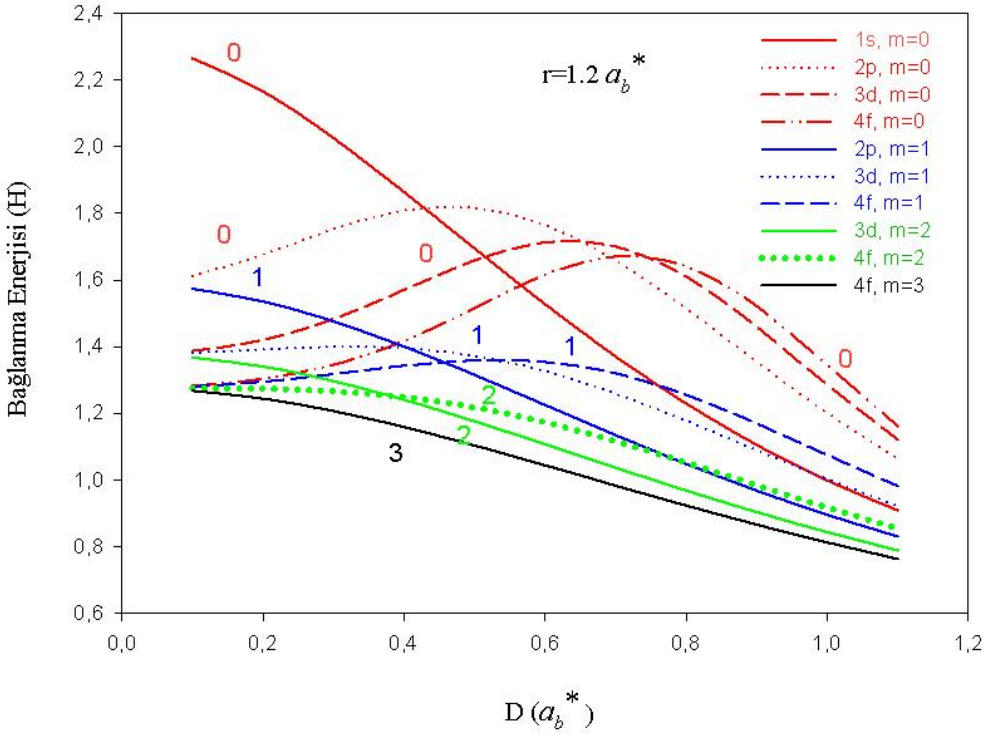
Bu şekillerden görüldüğü gibi bağlanma enerjileri safsızlık merkezde iken dejeneredir. Fakat bu dejenerasyon safsızlık merkezden uzaklaştığında dejenere seviyelerde yarılmaya başlar. Dejenerasyon sistemin küresel simetrisi ile yakından ilgilidir. Safsızlık merkezden uzaklaşırken yük simetrisi bozulacağından dejenerasyon ortadan kalkar. s seviyeleri için herhangi bir yarılma yokken p, d ve f seviyeleri magnetik kuantum sayısı *m*' nin alacağı değerlere göre yarılmalara uğrayacaktır. Yani her bir p, d ve f enerji seviyesi (l+1) kez yarılmaya uğrayacaktır. Bağlanma enerjileri sabit *n* ve *l* değerleri için *m* azalırken artmaktadır. Yani magnetik kuantum sayısı *m* ne kadar küçükse bağlanma enerjisi okadar büyüktür. Bunun sebebi *m*' nin sıfır olmasına karşılık gelen durumlar z-ekseni boyunca dağılmaktadır. Diğer durumlarda *m*' nin artmasıyla git gide z-ekseninden uzaklaşmaktadır. Yine bu şekiller gösteriyor ki $l=m$ durumuna karşılık gelen seviyelerin bağlanma enerjileri safsızlık merkezden uzaklaştıkça azalmaktadır. Sabit bir n değeri için *m*'si küçük olan seviyeler arasındaki yarılmaların büyüklüğü *m*'si büyük olan seviyeler arasındaki yarılmalardan büyüktür. 2p seviyesinin bağlanma enerjisinin maksimumu nokta yarıçapı artarken diğer seviyelere göre daha çok etkilenmektedir. Bunun sebebi 2p seviyesinin elektron yoğunluğu diğer seviyelerin elektron yoğunluklarından safsızlığa daha yakın olmasından kaynaklanabilir.



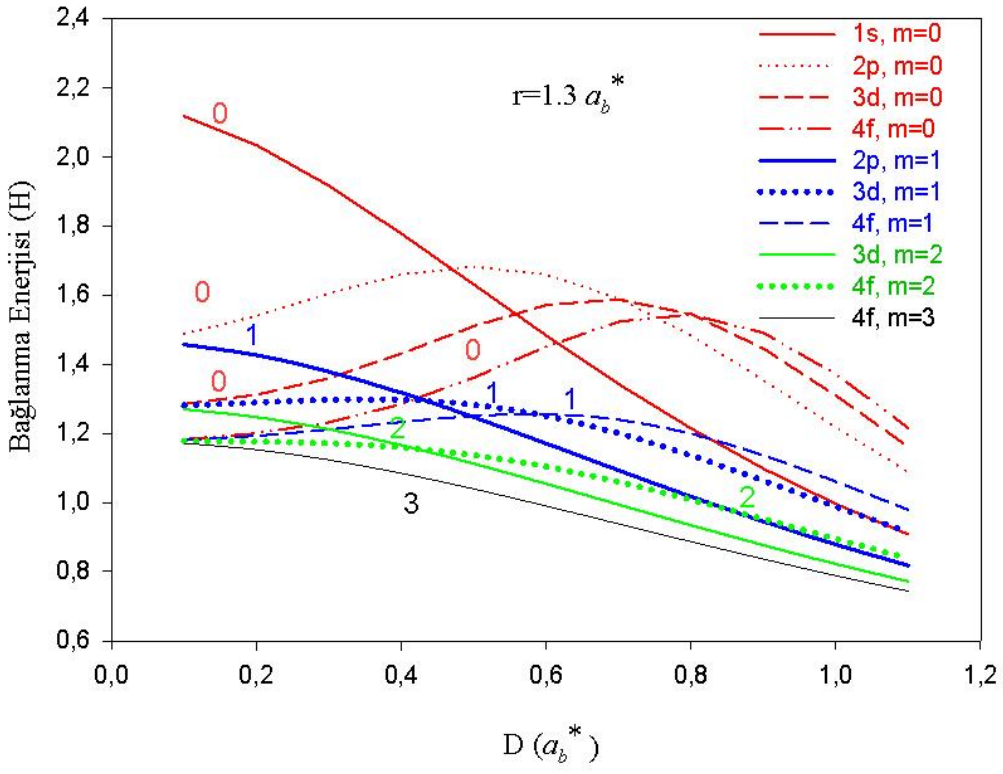
Şekil 4.3: r=1 a_b* için safsızlığın kaymasına karşılık bağlanma enerji değerleri.



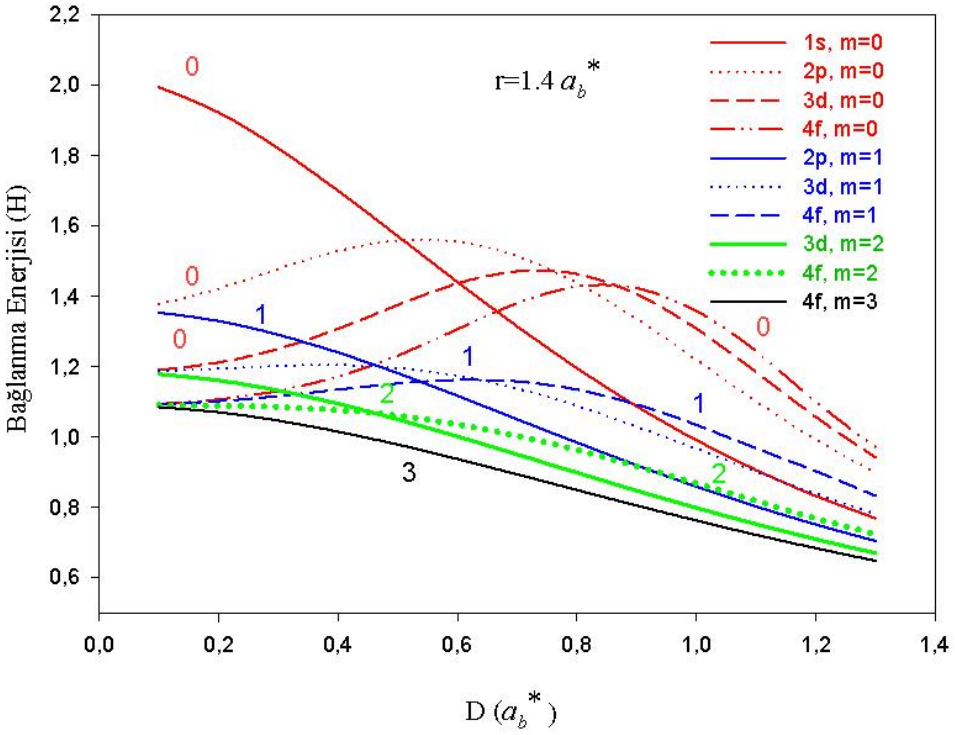
Şekil 4.4: r=1.1a_b* için safsızlık kaymasına karşılık bağlanma enerji değerleri.



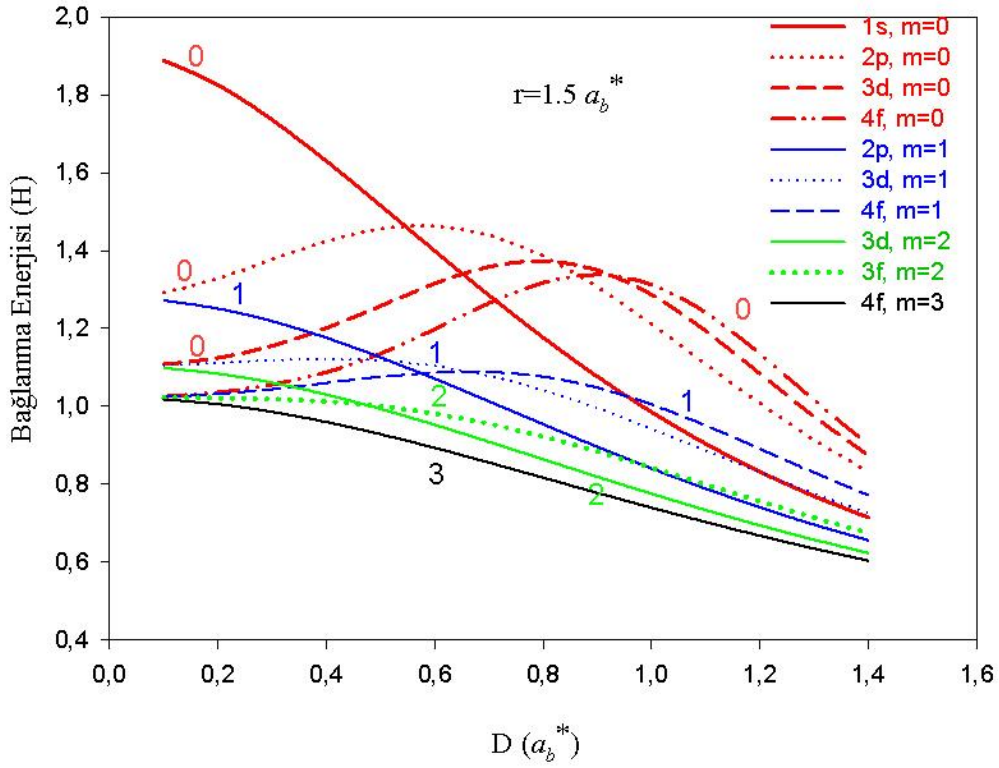
Şekil 4.5: r=1.2 a_b^* için safsızlığın kaymasına karşılık bağlanma enerji değerleri.



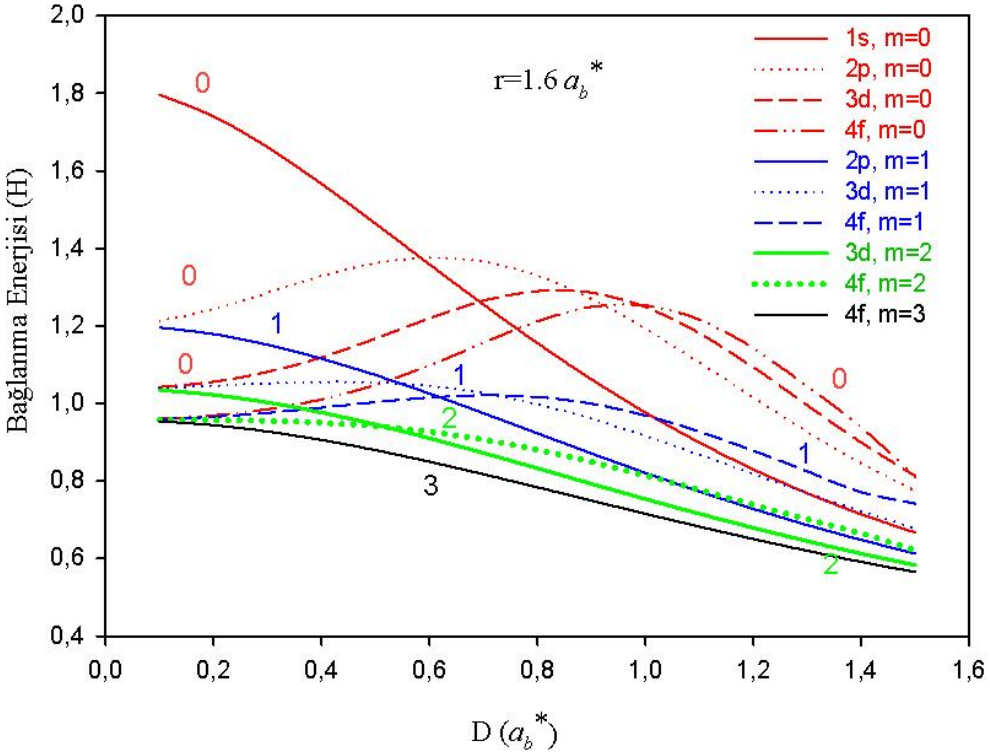
Şekil 4.6: r=1.3 a_b^* için safsızlığın kaymasına karşılık bağlanma enerji değerleri.



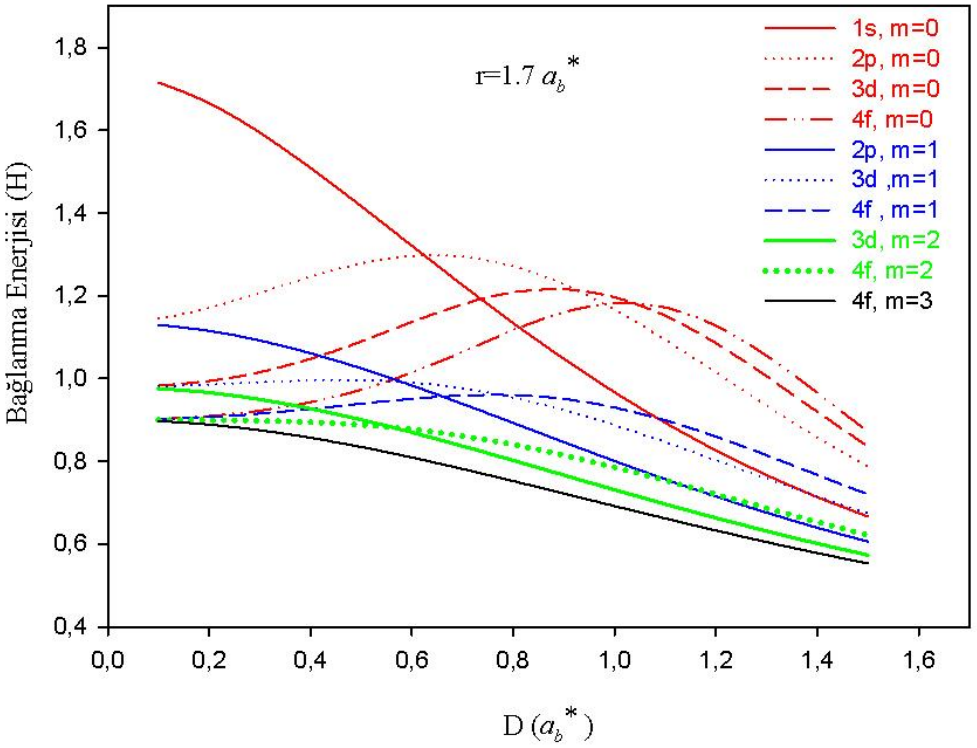
Şekil 4.7: r=1.4 a_b^* için safsızlığın kaymasına karşılık bağlanma enerji değerleri.



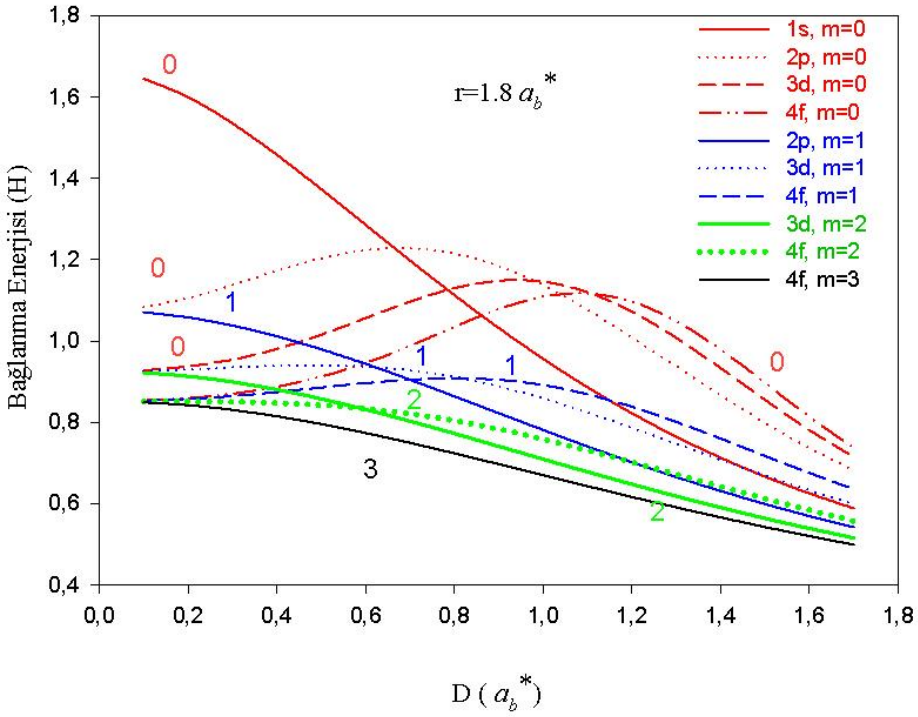
Şekil 4.8: r=1.5 a_b^* için impuriti kaymasına karşılık hesaplanan enerji değerleri.



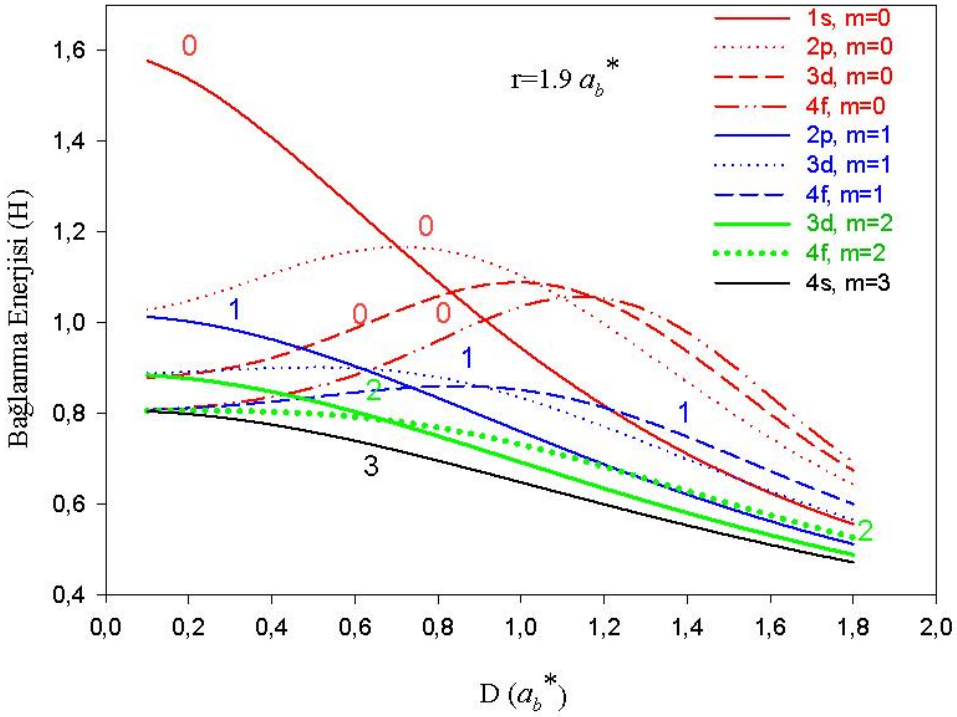
Şekil 4.9: r=1.6 a_b*için safsızlığın kaymasına karşılık bağlanma enerji değerleri.



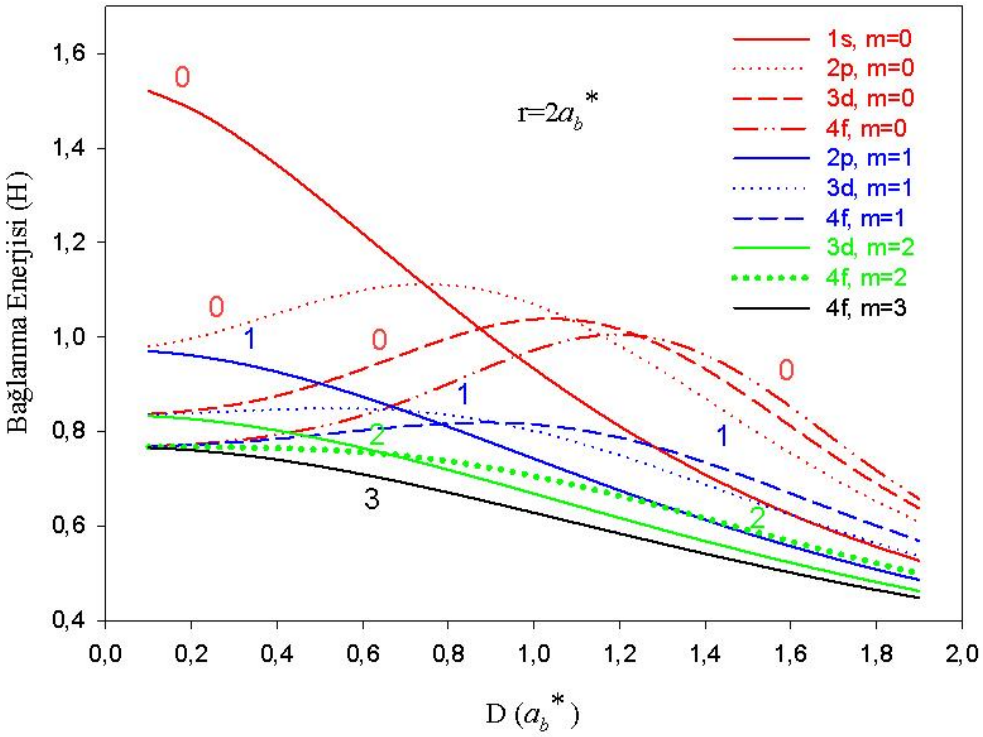
Şekil 4.10: r=1.7 a_b*için safsızlığın kaymasına karşılık bağlanma enerji değerleri.



Şekil 4.11: r=1.8 a_b^* için safsızlığın kaymasına karşılık bağlanma enerji değerleri.



Şekil 4.12: r=1.9 a_b^* için safsızlığın kaymasına karşılık bağlanma enerji değerleri.



Şekil 4.13: r=2 a_b* için safsızlığın kaymasına karşılık bağlanma enerji değerleri.

Bağlanma enerjisinin maksimum değerleri nokta yarıçapının azalmasıyla artar ve bu maksimuma karşılık gelen nokta merkezine doğru hareket eder. Bağlanma enerjileri üzerinde nokta yarıçapı ve safsızlık kayması D arasında doğrusal bir ilişkinin var olduğu görülmektedir. Baş kunatum sayısı *n* nin sabit değeri için manyetik kuantum sayısı *m* arttığında bağlanma enerjisi daima azalır. Bütün seviyeler $l \neq 0$ iken bağlanma enerjileri sıfıra eşit olmayan D'nin farklı değerlerinde maksimuma ulaşır ve bu enerjiler safsızlık konumunun artmasıyla azalır. Ayrıca sabit *n* için safsızlığın konumu nokta yapı merkezinden uzaklaştığında dejenerelik artar ve *m*'ye göre durumlar arasındaki yarılma boyutu *m*'nin artmasıyla küçülür. Merkez dışı kuantum nokta yapının taban ve uyarılmış seviyeleriyle ilgili giriştede bahsettiğimiz gibi birkaç teorik çalışma vardır. Bu çalışmamız merkez dışı kuantum nokta yapının daha yüksek enerji durumlarının teorik araştırması kuantum noktanın elektronik yapısının daha iyi anlaşılmasına katkıda bulunacaktır.

KAYNAKLAR

Abramowitz, M. And Stegun, I., 1970, Handbook Mathematical Functions, *Dover Publications Inc.*, New York.

Anderson, R. L., 1962, Experiments on Ge-GaAs heterojunctions, *Solid-State Electron*, 5, 341-344.

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

Ashoori, R.C., 1996, Electrons in Artifitial Atoms ,*Nature*, 379, 413-419.

Bakke, K., Furtado, C.,2011, The Analogue of The Aharonov–Bohm Effect For Bound States For Neutral Partıcles, *Modern Physics Letters A*,26 ,1331-1342.

Bardeen, J., Brattain, W. H., 1948, The transistor, a semi-conductor triode, *Physical Review*, 74: 230-231.

Bastard, G. ,1980, Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model, *Physical Review B*, 24, 4714-4722.

Bednarek, S., Szafran, B., Adamowski, J., 1999, Many-electron artificial atoms, *Physical Review B*, 59, 13036-13042.

Bednarek, S., Szafran, B., Adamowski, J., 2001, Theorical Description of electronic properties of vertical gated quantum noktas, *Physical Review B*, 64, 195303-195315.

Boichuk, V.I., Bilynskyi, I.V., Leshko, R.Ya., Turyanska, L.M., 2011, The effect of the polarization charges on the optical properties of a spherical quantum nokta with an off-central hydrogenic impurity,*Physica E*, 44, 476 -482.

Bose, C.C., Sarkar, C.K.,1998, Perturbation calculation of donor states in a spherical quantum nokta,*Solid- State Electron*, 42, 1661-1663 .

Bose, C., 1999, Perturbation calculation of impurity states in spherical quantum noktas with parabolic confinement, *Physica E*,4, 180-184 .

Bransden, B.H., Joachain, C.J., 1989, Atom ve Molekül Fiziği, Köksal F., Gümüş H.,*Ondokuz Mayıs Üniversitesi Yayınları* ,Samsun,106-109.

Brownstein, K. R., 1993, Variational principle for confined quantum systems, *Physical Rewiev Letters*, 71, 1227-1230.

Bryant, G.W., 1983, Hydrogenic impurity states in quantum-well wires, *Physical Review B,* 29, 6632-6639.

Chang, L. L., Esaki, L., Tsu, R., 1974, Resonant tunneling in semiconductor double barriers, *Applied Physics Letters*, 24,593-595.

Charrour, R., Bouhassoune, M., Fliyou, M., and Nougaoui, A., 2000, Magnetic field effect on the binding energy of a hydrogenic impurity in cylindrical quantum nokta, *Physica B*, 293, 137-143.

Cho, A. Y., Arthur, J. R., 1975, Molecular beam epitaxy, *Progress in Solid State Chemistry*, 10, 157-191.

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

Csavinszky, P. and Elabsy, A.M. ,1985, Dielectric response to a donor ion in a $Ga_{1-x}Al_xAs$-GaAs-$Ga_{1-x}Al_x$,As quantum well of infinite depth,*Physical Review B,* 32, 6498-6502.

Csavinszky, P., and Oyoko,H., 1991, Binding energy of on-axis hydrogenic and nonhydrogenic donors in a GaAs/Ga 1−x Al x As quantum-well wire of circular cross section, *Physical Review B,* 43,9262-9264.

Çakır, B., 2007, Çok Elektronlu Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi, Doktora Tezi, *Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya

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

Çakir, B., Özmen, A., Atav, Ü., Yüksel, H., Yakar, Y., 2008, Calculatıon Of Electronıc Structure Of A Spherıcal Quantum Nokta Usıng A Combınatıon Of Quantum Genetıc Algorıthm And Hartree Fock Roothaan Method,*International Journal of Modern Physics C*, 19(4) ,599-609.

Çakır, B., Yakar, Y., Özmen, A., Sezer, M. Ö., Şahin, M.,2010, Linear and nonlinear optical absorption coefficients and binding energy of a spherical quantum nokta, *Superlattices and Microstructures* ,47, 556-566 .

Çakır, B., Yakar, Y. And Özmen, A., 2011, Lınear And Nonlınear Refractıve Index Changes In Spherıcal Quantum Nokta, *Progress In Electromagnetics Research M*, 21, 77-92.

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

Datta, N.K., Ghosh, M., 2012, The randomly fluctuating impurity strength initiated excitation in doped quantum noktas, *Superlattices and Microstructures*,51, 690-698.

Datta, N.K., Ghosh, S.,2012, Excitations in doped quantum nokta insisted by discontinuous reversals of static electric field: Interplay between pulse and dopant site, *Superlattices and Microstructures*, 51, 163-176 .

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

Dingle, R., Wiegmann, W., Henry, C. H., 1974, Quantum states of confined carriers in very thin $Al_xGa_{1-x}As$-GaAs-$Al_xGa_{1-x}As$ heterostructures, *Physical Review Letters*, 33, 827-830.

Efros A.L., Efros A.L., 1982, İnterband absorption of light in a semiconductor sphere, *Soviet Physics Semiconductors*,USSR,16,772-775.

Esaki, L., Tsu, R., 1970, Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors, *IBM Journal of Research and Development*, 14, 61-65.

Esaki, L. , Chang, L. L.,1974, New Transport Phenomenon in a Semiconductor "Superlattice"*, *Physical Review Letters* ,33, 495-498.

Ezaki, T., Mori, N., and Hamaguchi, C., 1997, Electronic structures in circular, elliptic, and triangular quantum noktas, *Physical Review B*, 56, 6428-6431.

Ezaki, T., Sugimoto, Y., Mori, N., and Hamaguchi, C.,1998, Electronic structures in a quantum nokta with asymmetric confining potential, *Physica B*,249-251, 238-242.

Ferreyra, J.M., Bosshard, P. and Proetto, C.R.,1997, Strong-confinement approach for impurities in parabolic quantum noktas, *Physical Review B*,55,13682-13688.

Ferron A., Serra P., Osenda O., 2012, Near-threshold properties of the electronic density of layered quantum noktas , *Physical Rewiev B* ,85, 165322- 165322.

Gaunt,J.,1929,The Triples of Helium, *Phil. Trans. Roj. Search,A*,228, 151-196.

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

Guseinov, I.I., Özmen, A., Atav, Ü., Yüksel, H., 1995, Computation of clebsch-gordan and gaunt coefficients using binomial coefficients, *Jounal of Computainal Physics*, 122, 343-347.

Hall, R. N., Fenner, G. E., Kingsley, J. D., Soltys, T. J., Carlson, R. O., 1962, Coherent light elemission from GaAs junctions, *Physical Review Letters*, 9, 366-368.

Harrison, P., 1999, Quantum wells, wires and noktas: Theoretical and computational physics, *John Wiley & Sons, Inc*., New York.

Holas, A., Howard, I.A. and March, N.H., 2003, Wave functions and low-order density matrices for a class of two-electron ‘artificial atoms’ embracing Hookean and Moshinsky models, *Physics Letters A*,310, 451-456.

Huang, Y.S., Huang, J.S., Lee, K.W., Chang, F.L., 2009, Quantum Size Effects of Hydrogen Impurity at Off-Center Donor Atom in Spherıcal Quantum Noktas, *International Journal of Modern Physics B*, 23,639-650.

Jacak, L., Hawrylak, P., Wojs, A., 1998, Quantum Dots, *SpringerVerlag*, Berlin, Hiedelberg.

Kainz, J. , Mikhailov, S.A., Wensauer, A., and Rossler, U.,2002, Quantum noktas in high magnetic fields: Calculation of ground-state properties, *Physical Review B*,65, 115305-115309.

Kandemir, B.S. and Çetin, 2002, Ground- and first-excited state energies of impurity magnetopolaron in an anisotropic quantum nokta, *Physical Rewiev B*, 65, 054303-054313.

Karaoğlu, B., 1994, Kuantum Mekaniğine Giriş, *BilgiTek Yayıncılık*, İstanbul.

Karimi, M. J., Rezaei, G.,2011, Effects of external electric and magnetic fields on the linear and nonlinear intersubband optical properties of finite semi-parabolic quantum noktas,*Physica B*, 406 , 4423-4428.

Kirak,M., Altınok, Y., Yılmaz,S.,2013, The effects of the hydrostatic pressure and temperature on binding energy and optical properties of a donor impurity in a spherical quantum nokta under external electric field,*Journal of Luminescence*,136,415-421.

Kouwenhoven, L., Marcus, C., 1998, Quantum noktas, *Physics World* ,11, 35-39.

Kouwenhoven, L. P., Austing, D.G., and Tarucha, S.,2001, Few-electron quantum noktas, *Reports on progress in physics* ,64,701-736.

Kumar, K.M., Peter, A.J., Lee, C.W., 2012, Optical properties of a hydrogenic impurity in a confined $Zn_{1-x}Cd_xSe/ZnSe$ spherical quantum nokta, *Superlattices and Microstructures*, 51, 184-193.

Lai, W. Y., Das Sarma, S., 1986, Ground-state variational wave function for the quasi-one-dimensional semiconductor quantum wire, *Physical Review B*, 33, 8874-8877.

Lee, I-H., Rao, V., Martin, R.M., Leburton, J-P., 1998, Shell filling of artificial atoms within density-functional theory, *Physical Review B*, 57, 9035-9041.

Marin, J. L., Cruz, S. A., 1991, On the use of direct variational methods to study confined quantum systems, *American Journal of Physics*, 59, 931-935.

McCharty, S. A., Wnag, J.B., Abbott, P.C., 2001, Electronic structure calculation for N-electron quantum noktas, *Computer Physics Communications*, 141, 175-204.

Mikhail, I. F. I. , Ismail, I.M.M. ,2007, Binding energy of an off-centre hydrogenic donor impurity in a spherical quantum nokta, *Physica Status Solidi*,244**,**3647-3659.

Mikhail, I.F.I., Ismail, I.M.M.,2010, Hydrogenic impurity in a quantum nokta: Comparison between the variational and strong perturbation methods, *Superlattices and Microstructures*, 48,388-400 .

Mikhail, I. F. I. El sayed, S.B.A.,2011, Exact and variational calculations of a hydrogenic impurity binding energy in a multilayered spherical quantum nokta , *Physica E*,43,1371-1378.

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

Mora-Ramos, M.E., Duque, C.A., Kasapoglu, E., Sari, H., Sökmen, I.,2012, Linear and nonlinear optical properties in a semiconductor quantum well under intense laser radiation: Effects of applied electromagnetic fields, *Journal of Luminescence*, 132, 901-913.

Movilla, J.L., PLanelles, J.,2005, Image charges in spherical quantum noktas with an off-centered impurity: algorithm and numerical results, *Computer Physics Communications*, 170,144-152.

Nguyen, V. L., Nguyen, M. T., and Nguyen, T.D.,2000, Magnetic field effects on the binding energy of hydrogen impurities in quantum noktas with parabolic confinements, *Physica B*, 292, 153-159.

Ozturk, E., Sokmen, I., 2010, Effect of magnetic fields on the linear and nonlinear intersubband optical absorption coefficients and refractive index changes in a

square and graded quantum wells, *Superlattices and Microstructures*, 48,312-320.

Özmen, A., Yakar, Y., Cakır B., Atav, U., 2009, Computation of the oscillator strength and absorption coefficients for theintersubband transitions of the spherical quantum nokta, *Optics Communications*, 282, 3999–4004.

Pal, S., Ghosh, M.,2013, Influence of pulse shape in modulating excitation kinetics of impurity doped quantum noktas, *Superlattices and Microstructures*, 55, 118-130.

Pan, J.H., Liu, L.Z., 2011, Hydrogenic-Donor Impurity States in GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ Quantum Noktas in the Presence of an Electric Field , *Chinese Physics Letters*, 28, 086201-086204.

Petroff, P. M., Gossard, A. C., Logan, R. A., Wiegmann, W., 1982, Toward quantum well wires: Fabrication and optical properties, *Applied Physics Letters*, 41, 635-638.

Pfannkuche, D., Gudmundsson, V. , and Maksym, P. A.,1993, Comparison of a Hartree,a Hartree-Fock, and an exact treatment of quantum-nokta helium , *Physical Review B*, 47, 2244-2250.

Reed, M.A., Bate, R. T., Bradshaw, K., Duncan, W. M., Frensley, W. M., Lee, J. W., Smith, H. D., 1986, Spatial quantization in GaAs-AlGaAs multiple quantum noktas, *Journal of Vacuum Science & Technology B*, 4, 358-360.

Reed, M.A., Randall, J.N., Aggarwal, R.J., Matyi, R.J., Moore, T.M., Wetsel, A.E.,1988, Observation of discrete electronic states in a zero-dimensional semiconductor nanostructure, *Physical Review Letters*, 60**,** 535-537.

Reed, M.A., 1993, Quantum noktas, *Scientific American*, 268, 118-123.

Reimann S.M. and M. Manninen,2002, Electronic structure of quantum noktas, *Reviews of Modern Physics*,74,1283-1341.

Rontani, M., Rossi, F., Manghi, F., and Molinari, E., 1999, Multiple quantum phases in artificial double-nokta molecules, *Solid State Communications*,112,151-155.

Sadeghi, E., Avazpour, A., 2011, Binding energy of an off-center donor impurity in ellipsoidal quantum nokta with parabolic confinement potential, *Pyhsica B*,406,241-244.

Sako, T., and Diercksen, G.H.F., 2003, Confined quantum systems: a comparison of the spectral properties of the two-electron quantum nokta, the negative hydrogen ion and the helium atom, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 36,1681-1702.

Schrieffer, J. R., 1957, In Semiconductor Surface Physics, Kingston, R. H. (ed), p.55, *University of Pennsylvania Press*, Philadelphia.

Shakur, H.R., Darzi, M.A.T., 2013, Simulation of high energy intersubbands optical absorption coefficients in a polymeric capped spherical quantum nokta, *Journal of Luminescence*, 134, 806-812.

Sharkey, J.J., Peter, A.J., Lee, C.W., IEEE J. ,2011, Interband Absorption Coefficients of the Electronic States Calculated for CdZnS Nanocrystals Grown by Sol-Gel Method, *Quantum Electron*, 47,1451-1457.

Shockleey, W., 1949, Bell System, *Technical Journal*, 28, 435-489.

Slater, J. C., 1930, Atomic shilding constants, *Physics Review B*, 36, 57-64.

Slater, J. C., 1951, A simplifaciation of the Hartree-Fock mothod, , *Physics Review B*, 81, 385-390.

Slater, J. C., 1960, The quantum theory of atomic structure, *McGraw-Hill, Vol. 1*, New York.

Szafran, B., Adamowski, J., Stebe, B., 1998, Energy spectrum of D^- centres in spherical quantum noktas, *Journal of Physics: Condensed Matters*, 10, 7575-7586.

Szafran, B., Adamowski, J., Bednarek, S., 1999, Ground and excited states of few-electron systems in spherical quantum noktas, *Physica E*, 4, 1-10

Şahin, M.,2005, Yarı iletken Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Olarak İncelenmesi, Doktora Tezi, *Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya.

Tarucha, S., Austing, D.G., Honda, T., van der Hage, R.J., and Kouwenhoven, L.P.,1996, Shell Filling and Spin Effects in a Few Electron Quantum Nokta *Physical Review Letters* , 77, 3613-3616.

Tarucha, S., Austing, D.G., Tokura, Y., van der Wiel, W.G., and Kouwenhoven, L.P., 1999, Direct Coulomb and Exchange Interaction in Artificial Atoms, *Physical Review Letters*, 84, 2485-2488.

Taut, M.,2000, Special analytical solutions of the Schrodinger equation for 2 and 3 electrons in a magnetic field and ad hoc generalizations to N particles, *Physica E*, 6, 479-481.

Tomak, M.,1988, D^- center in GaAs, *Physical Review B*, 37, 7102-7104.

Van der Ziel, J. P., Miller, R. C., Wiegmann, W., Nordland, W. A., 1975, Laser oscillation from quantum states in very thin GaAs–$Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ multilayer structures, *Applied Physics Letters* ,26, 463-465.

Van Wees, B. J., van Houten, H. Beenakker, C. W., Williamson, J. G., Kouwenhoven, L. P, van der Marel, D., Foxon, C. T., 1988, Quantized conductanceof point contacts a two-dimensional electron gas, *Physics Review Letters*, 60, 848-850.

Varshni, Y. P., 1999, Accurate wavefunctions for hydrogenic donors in GaAs-(GaAl)As quantum noktas, *Physics Letters A*, 252, 248-250.

Varshni, Y. P., 2001, Binding energy of a screened donor in a spherical quantum nokta with a parabolic potential, *Superlattices and microstructures*, 29, 233-238.

Xie, W., 2008, Binding energy of an off-center hydrogenic donor in a spherical Gaussian quantum nokta, *Pyhsica B*, 403, 2828-2831.

Yakar, Y., Çakır, B., Özmen, A., 2010, Calculation of linear and nonlinear optical absorption coefficients of a spherical quantum nokta with parabolic potential, *Optics Communications*, 283, 1795–1800.

Yakar, Y., Cakır, B., Ozmen, A., 2010, Linear and Nonlinear Optical Properties in Spherical Quantum Noktas, *Communications in Theoretical Physics*, 53, 1185–1189.

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

Yakar, Y., Çakır, B., Özmen, A., 2013,Off-center hydrogenic impurity in spherical quantum nokta with parabolic potential, *Superlattices and Microstructures* ,60, 389-397.

Yuan, J.H., Liu, C.,2008, Binding energy of an off-center hydrogenic donor in a spherical quantum nokta with strong parabolic confinement, *Physica E*, 41**,**41-44.

Yuan, J., Xie, W., He, L.,2009, An off-center donor and nonlinear absorption spectra of spherical quantum noktas, *Physica E*, 41**,**779-785.

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

Zhu L., J., Zhao, J.H., Gu, B.L.,1992, D^- centers in spherical quantum noktas, *Physical Review B*,46**,**7546-7550.

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

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı	**:**	Fatma Betül ŞİRECİ
Uyruğu	**:**	T.C.
Doğum Yeri ve Tarihi	**:**	KADINHANI- 02/03/1983
Telefon	**:**	
Faks	**:**	
e-mail	**:**	fbetulsireci@hotmail.com

EĞİTİM

Derece		**Adı, İlçe, İl**	**Bitirme Yılı**
Lise	:	**Konya Lisesi, Selçuklu, KONYA**	**2000**
Üniversite	:	**Selçuk Üniversitesi Eğitim Fakültesi Fizik Öğretmenliği, Meram, KONYA**	**2006**
Yüksek Lisans	:	**Selçuk Üniversitesi F.E.F. Fizik Bölümü, Selçuklu, KONYA**	**Devam ediyor**
Doktora	:	**-**	

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	**Kurum**	**Görevi**
2006-2009	Konya Sistem Dershanesi	Öğretmen
2009-2010	Konya Ekol Dershanesi	Öğretmen
2010-2011	Konya Sistem Dershanesi	Öğretmen
2013-…	M.E.B	Öğretmen

YABANCI DİLLER

İngilizce