



T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

KUANTUM NOKTA YAPILARDA ELEKTRİK ALAN ETKİSİNİN PERTÜRBASYON YÖNTEMİYLE İNCELENMESİ

Emine Şeyma DOĞAN

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Fizik Anabilim Dalını

Ocak-2016

KONYA

Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

KUANTUM NOKTA YAPILARDA ELEKTRİK ALAN ETKİSİNİN PERTÜRBASYON YÖNTEMİYLE İNCELENMESİ

Emine Şeyma DOĞAN

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Bekir ÇAKIR

2016, 64 Sayfa

Jüri
Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN
Doç. Dr. Bekir ÇAKIR
Doç. Dr. Yusuf YAKAR

Bu tez çalışmasında Pertürbasyon metodu ile kuantum nokta yapılarının elektronik yapısı ve elektik alan etkisi incelendi. Merkezine hidrojen tipi safsızlık yerleştirilen parabolik potansiyel ile birlikte küresel simetrik sonlu potansiyelle sınırlandırılmış bir-elektronlu kuantum nokta yapısının taban ve bazı uyarılmış seviyelerin pertürbe olmamış enerji özdeğerlerini ve dalga fonksiyonlarını KGA metodu ile Hartree-Fock-Roothaan (HFR) metodu birleştirilerek belirlendi. Dalga fonksiyonları, STO ların lineer bileşiminden kurulan tek-elektron spin orbitalleri alındı. Pertürbe olmamış KGA ile belirlenen enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları üzerinden, nokta yapının üzerine uygulanan elektrik alanının etkisi pertürbasyon teorisi ile hesaplandı. Hesaplamalarımızda elektrik alanının ve sınırlayıcı potansiyelin farklı üç değeri kullanıldı. Yine elektrik alan etkisini kuantum nokta yapının yarıçapına bağlı olarak incelendi.

Anahtar Kelimeler: Elektrik Alan, Hartree-Fock-Roothaan, Kuantum Genetik Algoritma, Kuantum Nokta Yapı, Pertürbasyon Teorisi, Sonlu Potansiyel, Parabolik Potansiyel.

ABSTRACT

MS THESIS

INVESTIGATION OF THE ELECTRIC FIELD EFFECT IN QUANTUM DOTS USING PERTURBATION METHOD

Emine Şeyma DOĞAN

THE GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCEOF SELÇUK UNIVERSITY

Advisor: Assoc. Prof. Dr. Bekir ÇAKIR

2016, 64 Pages

February

Jury
Prof.Dr. Ayhan ÖZMEN
Doç. Dr. Bekir ÇAKIR
Doç.Dr. Yusuf YAKAR

In this thesis, electronic properties and effect of electic field using perturbation method of Quantum dots was examined. Spherical quantum dot with one electron on-center hydrogenic impurity confined finite spherical potential, together with parabolic potential the non-perturbed energy eigen values and the wave functions ground and some excited states were determined by using Quantum Genetic Algorithm (KGA) method with Hartree-Fock-Rootha (HFR) selected method of combining. The wave functions were created linear combination of Slater type orditals (STOs) consist of a single electron spin orbitals. The non-perturbed energy eigen values and wave functions is determined by the KGA, the effect of the electric field applied on the electronics tructure were calculated by perturbation theory. In our computation of the electric field and the confining potential of three different values were used. The electric field effects also were studied depending on the dot radius of the quantum dot structure.

Keywords: Electirc Field, Hartree-Fock-Roothaan, Quantum Genetic Algorithm, Quantum Dot, Perturbation Theory

ÖNSÖZ

Akademisyenlik mesleğinin başlangıcı olan yüksek lisans eğitiminin sonuna gelmiş bulunuyorum. Eğitim hayatım süresince bilgisinden ve tecrübelerinden faydalandığım, ahlaki değerleriyle de örnek aldığım, göstermiş olduğu sabır ve hoşgörüden dolayı değerli hocam, sayın 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 eşim ve aileme sonsuz teşekkür ederim.

Emine Şeyma DOĞAN
KONYA-2016

İÇİNDEKİLER

ÖZET vii

ABSTRACT viii

İÇİNDEKİLER x

1. GİRİŞ 1

2.KUANTUM YARIİLETKEN YAPILAR VE ÜRETME YÖNTEMLERİ 7
2.1. Giriş 7
2.2. Kuantum Yarıiletken Yapılar 8
2.3. Kuantum Nano Yapıların Üretme Yöntemleri 12
2.3.1. Asitle Eritme Yöntemi 12
2.3.2. Module Edilmiş Elektrik Alan Yöntemi 13
2.3.3. Kendiliğinden Büyüme Yöntemi 14
2.3.4. Kuantum Kuyusu ve Bariyer Arası İç Difüzyon Yöntemi 15
2.3.5. Yarı İletken Mikro Kristaller Yöntemi 16
2.4.Düşük Boyutlu Yapıların Üstünlükleri ve Uygulama Alanları 17

3. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ 18

3.1 Kuantum Genetik Algoritma 18
3.2. Zamandan Bağımsız Pertürbasyon Yöntemi 22
3.3. Kuantum Nokta Yapıda Elektrik Alan Etkisi 25

4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA 28

ÖZGEÇMİŞ 49

KAYNAKLAR 50

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

Z	Safsızlıktaki Pozitif Yük Sayısı
r_{ij}	Elektronlar 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
λ_e	De Brogle dalga boyu

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 Dot Infrared Photo Dedektor

1. GİRİŞ

Bilim ve teknolojideki hızlı gelişim günümüzde eskiye oranla akıl almaz seviyelere ulaştı. Günümüzde devrim niteliğinde maddeyi atomik boyutlarda inceleyip işleme fikri ve uygulamaları bilim ve teknolojiye yeni bir boyut kazandırmıştır. Bu devrim niteliğinde adlandırdığımız teknoloji dönemi nano bilim ve nano teknoloji dönemidir.

Daha önceleri maddeyi nano boyutlarda görecek, inceleyecek mikroskopların olmamasından dolayı gelişmeler yavaştı. O tarihlerde mevcut olan elektron mikroskop yeterli değildi. Nano bilim ve nano teknolojideki gelişmeler son yirmi yıl içerisinde, özellikle son on yıl içinde çok hızlı olmuştur.

Elektriğin keşfinden sonra bazı malzemelerin iyi bir iletken, bazı malzemelerin de kötü bir iletken olduğu anlaşılmıştı. Malzemeler elektrik yükü taşımalarına göre; iletkenliği 10^{4}-10^{6} $(\Omega.cm)^{-1}$ aralığında olan malzemeler iletken, iletkenliği 10^{-10} $(\Omega.cm)^{-1}$ den daha az olan malzemeler de yalıtkan, iletkenliği 10^{4} -10^{-10} $(\Omega.cm)^{-1}$ aralığında olan bazı katılar da yarı iletken olmak üzere üç sınıfa ayrılmıştır. Yalıtkanlar çok yüksek sıcaklıklarda iletkenlik özelliği kazanırken, yarı iletkenler oda sıcaklığında elektriksel iletkenlik kazanırlar. 1873 yılında selenyumun fotoiletkenliğinin keşfi ile yarı iletken bilimi ortaya çıkmıştır (Smith, 1873). Daha sonra 1940'lı yılların sonunda farklı fiziksel ve kimyasal özelliklere sahip yeni bir aygıt olan transistörün ortaya çıkmasıyla yarı iletken biliminde yeni bir dönem başladı (Bardeen & Brattain, 1948; Shockley, 1949). Yarı iletken aygıtlarda kuantum sınırlandırması ile ilgili tartışmalar 1950 li yıllarda başlamıştır. (Schrieffer & Kingston, 1957) bir potansiyel kuyu içerisine hapsedilen elektronların klasik davranamayacaklarını, ayrıca bu elektronların enerji seviyelerinin sınırlandırmanın olduğu boyutta kesikli değerler alacağını ileri sürmüştür. Nanoteknoloji biliminin ortaya çıkışı, 1959 yılında ünlü fizikçi Richard Feynman'ın malzeme ve cihazların moleküler boyutlarda üretilmesiyle ilgili yapmış olduğu konuşmasına dayandırabiliriz. Bu konuşmasında Feynman minyatürize edilmiş cihazlar ile nano yapıların ölçülebileceği ve çok farklı amaçlar doğrultusunda kullanılabileceğini anlaşılmıştır.

Hall ve arkadaşları 1962 yılında yarı iletken lazerin icat edilmesi (Hall, Fenner, Kingsley, Soltys, & Carlson, 1962), birbirinden farklı iki yarı iletken kullanılarak

oluşturulan heteroeklemlerin üretilmesi (Anderson, 1988). Katıhal elektroniği üzerinde kuantum mekaniğinin daha etkin bir rol oynamasına neden olmuştur.

İletişim ve haberleşme teknolojilerinde gözlenen yoğun talep ve farklı özel uygulamaların hız kazandırdığı teorik ve deneysel çalışmalar, yaklaşık yarım yüzyıldır yarı iletken malzeme bilimindeki ve teknolojisindeki gelişmelere büyük bir ivme kazandırmıştır. Bununla birlikte hafıza ve hesaplama sistemlerine olan yoğun talep, sinyallerin iletimi ve hızlarının arttırılması yönündeki araştırmalar, yeni mikroelektronik ve optoelektronik cihazların iyileştirilmesine zemin hazırlanmıştır.

Mikroelektonik; ısısal iletkenliği yüksek, iyi bir mekanik kararlılığa sahip ve üretimi kolay olan Silisyum temelli bir bilim dalıdır. Çünkü bu tür malzemeler çok küçük yasak enerji aralığına sahip olduğundan pratik uygulamalar için oldukça elverişlidir. Sahip olduğu bu eşsiz özellikler nedeniyle günümüzde farklı elementlerle alaşım ve katkılandırılması farklı elektronik özelliklere sahip, tek-kristal, amorf ve polikristal formlarda malzemeler üretilebilmektedir. Silisyumun yaygın olarak entegre devre teknolojisinde kullanılmaktadır.

İki boyutta sınırlandırılan mezoskobik aygıtlar kuantum kuyusu olarak adlandırılır. Böyle yapılar, daha yüksek iletim enerji bandına sahip aynı iki düzlem yarı iletken katmanın arasına düşük enerji bantlıyarı iletken bir düzlem tabakanın yerleştirilmesiyle üretilebilir. Elektronların böyle ince bir yapı içinde hapsedilmesi onun elektronik özelliklerinin incelenmesi bakımından araştırmacıların dikkatini çekmiştir. Bu da yarı iletken teknolojisinin hızlı bir şekilde gelişmesine yol açmıştır.

Literatürde Kuantum kuyularının enerji yapılarının kuantumlu olduğuna dair yapılmış çok sayıda çalışma vardır (Chang, Esaki, & Tsu, 1974; Dingle, Störmer, Gossard, & Wiegmann, 1978; Dingle, Wiegmann, & Henry, 1974; Esaki & Tsu, 1970). Kuantum kuyusunun sınırlanması etkisine dayalı olarak çalışan rezonans tünelleme diyordu (Chang et al., 1974) ve kuantum kuyu lazeri (Van der Ziel, Dingle, Miller, Wiegmann, & Nordland Jr, 1975) optoelektronik cihazların ilk örnekleri olarak verilebilir.

1975 yılında tarafından moleküler demet kaplama (Molecular Beam Epitaxy (MBE)) yönteminin bulunuşu çoklu eklem kuantum yapılarında önemli gelişmelere ışık tutmuştur (Cho & Arthur, 1975).

1981 yılında Taramalı Tünelleme Mikroskobu ve dört yıl sonra Atomik Kuvvet Mikroskobunun geliştirilmesiyle nano bilim hızla gelişmeye başladı. Bu mikroskoplarla nm boyutundaki madde, atom ve moleküller incelenebiliyordu.

İnce film büyütme tekniklerindeki gelişmeler, özellikle elektron demeti ve x-ışını litografisi gibi hassas malzeme üretim ve analiz tekniklerinin gelişimi, kuantum yapılarının farklı şekillerde ve boyutlarda üretilmesine olanak sağlamıştır. Kısa zaman içerisinde bu ilerlemeler kuantum tel olarak adlandırılan tek boyutlu yapıların üretilmesine olanak sağlamıştır (Hansen et al., 1987; Petroff, Gossard, Logan, & Wiegmann, 1982; Smith et al., 1987). Kuantum kuyu ve kuantum tel aygıtlarındaki ilerlemeler, sınırlandırılmış sistemlerin elektronik yapılarının hesaplanmasında büyük bir ilgi odağı oluşturmuştur. 1990'ların başında 60 karbon atomunun simetrik biçimde sıralanmasıyla futbol topu şeklindeki "fullerene" molekülleri elde edilmiştir. Elde edilen bu molekülün boyutu 1 nanometre mertebesinde ve çok dayanıklı, plastikten daha hafif, elektrik ve ısıyı geçirgen özellik göstermektedir (Iijima, 1991).

Kuantum telleri teknolojik olarak litografik yöntemlerle kuantum kuyusu içeren bir malzemeden çok dar şeritler kesilerek veya elektromanyetik yöntemle elektron hareketi kısıtlanarak elde edildi (Khokle, 1993). Bu yapıların enine boyutları kuantum kuyusunun derinliği ile karşılaştırıldığında önemli ölçüde daha büyüktür (Jacak & Hawrylak, 1998). Kuantum telleri, yaygın olarak MOS ve MOSFET yapıların üretiminde kullanılmaktadır (Lai & Dassarma, 1986). Ayrıca bu yapılarda kuantumlu balistik direnç etkisi gözlenmiştir (Van Wees et al., 1988).

Yük taşıyıcılarının serbest hareketinin tüm doğrutularda sınırlandırılması, kuantum nokta yapıları olarak adlandırılan sıfır boyutlu nano yapıların ortaya çıkmasına yol açmıştır (Reed, 1993). Bu yapıların boyutları 250 nm olan kare biçiminde bir yapıya sahiptir. Daha sonraları boyutları dahada küçük olan (30-45 nm) kuantum nokta yapıları, farklı geometrik şekillerde (ellipsoid, kübik, piramit ve küresel) üretilmiştir (Bimberg, 1999; Cibert et al., 1986; Temkin, Dolan, Panish, & Chu, 1987). Bu dönemde sıfır boyutlu nano yapılar olarak adlandırılan kuantum nokta yapıları daha çok teorik olarak çalışılmış ve sonrasında deneysel olarak gerçekleştirilmiştir (Ashoori et al., 1992; Katari, Colvin, & Alivisatos, 1994; Murray & Bawendi, 1993). Kuantum nokta yapılar çok verimli ve tam kontrol edilebilir laserlerin yapımında kullanıldı (Reed, 1993). Böyle yapıların şekil ve boyutlarının deneysel olarak kontrol edilebilmesi teknolojik uygulamada çok geniş bir alan açmıştır (Kouwenhoven & Marcus, 1998).

Tüm boyutlarda güçlü bir sınırlandırma sonucu elde edilen kuantum nokta yapıları kesikli enerji seviyelerine ve kabuk yapılarına sahip olduklarından dolayı yapay atom olarakda adlandırılırlar (Fujito, Natori, & Yasunaga, 1996; Maksym & Chakraborty, 1990). Üretilme aşamasında bu yapıların şekilleri, boyutları, enerji seviyeleri ve sınırlandırdıkları elektron sayıları kontrol edilebilir olduğundan teknolojik olarak daha ilgi çekicidir. Böyle yapıları kullanılarak kızıl ötesi foto dedektörler (QDIP), tek elektron transistorler, kuantum bilgisayarları ve hafıza elemanları gibi cihazlar üretebilmiştir (Choi et al., 1998; Gammon, 2000; Nomoto, Ugajin, Suzuki, Taira, & Hase, 1998; Ryzhii, 1996; Sim, Kong, Lee, & Park, 2004; Yusa & Sakaki, 1999).

Kuantum nokta yapılarının fiziksel özelliklerini inceleyen çok sayıda teorik ve deneysel çalışmalar yapılmıştır. Bu çalışmalarda farklı hesaplama yöntemleri ve dalga fonksiyonları kullanılmıştır. Bu yöntemlerden birisi varyasyonel yöntem olup, bu tür kuantum mekaniksel yapıların incelenmesinde yoğun bir şekilde kullanılmaktadır. 1980 yıllarda (Bastard, 1984) hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisini varyasyonel yöntemle hesaplamıştır. (Marin & Cruz, 1991) direkt varyasyonel metodunu kullanarak sonsuz küresel bir kuyuda sınırlandırılmış hidrojen atomu ve harmonik salınıcı gibi sistemlerin Shrödinger 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 küresel kuantum nokta yapının ve merkezindeki bir safsızlığın taban durum enerjilerini basit bir dalga fonksiyonu ile hesapladı. Slater Tipi Orbitalleri kullanarak (Szafran, Adamowski, & Bednarek, 1999; Szafran, Adamowski, & Stebe, 1998) iki ve üç elektronlu kuantum nokta yapısının elektronik özelliklerini inceledi. (Bednarek, Szafran, & Adamowski, 1999, 2001; McCarthy, Wang, & Abbott, 2001) Gauss Tipi Orbitalleri kullanarak çok elektronlu kuantum nokta yapının elektronik yapısını lineer varyasyonel yöntemle incelemişlerdir. Hartree-Fock yöntemini kullanarak (Connerade, Dolmatov, & Lakshmi, 2000; Jaskolski, 1996; Reusch & Grabert, 2003), yoğunluk fonksiyonel teorisini (DFT) kullanarak (Lee, Rao, Martin, & Leburton, 1998; Sahin & Tomak, 2005a) Monte-Carlo yöntemini kullanarak (Ceperley, 1978; Sim et al., 2004) pertürbasyon yöntemini kullanarak (Bose & Sarkar, 1998) çeşitli kuantum nokta yapılarının fiziksel özelliklerini incelediler.

Son zamanlarda nano yapılı sistemlerin elektronik yapılarının ve fiziksel özelliklerinin incelenmesinde en iyileme yöntemi olan KGA tekniği kullanılmaya başlanmıştır. KGA tekniği, genetic algoritma (GA) yönteminin kuantumlu sistemlere

uygulanması sonucu oluşmuştur. Bu yöntem doğal seleksiyon yöntemi gibi kendini geliştiren bireylerin hayatta kalması ve gelişmeyen bireylerin ise elenmesi olarak tanımlanabilir. GA tekniği ilk kez (Holland, 1975) tarafından kullanılmış olup, mühendislik ve malzeme biliminde yaygın olarak kullanılmaktadır (Castro, Antonio, & Sousa, 2004; Homaifar, Lai, & Mccormick, 1994; Kulkarni, Krishnamurthy, Deshmukh, & Mishra, 2004; Sahin, Sayan, & Bulutcu, 2000; Venugopal & Narendran, 1992). Kuantumlu yapılarda kullanıldığında KGA olarak da adlandırılan bu yöntem varyasyon yönteminde olduğu gibi enerji minimizasyon ilkesine dayanır ve son zamanlarda fiziğin bir çok alanında, özellikle kuantum mekanik sistemlerin elektronik yapılarının belirlenmesinde kullanılmaya başlanılmıştır (Chaudhury & Bhattacharyya, 1998; Çakır, 28-30 August. 2006, 2007; Grigorenko & Garcia, 2000, 2001, 2002; Nakanishi & Sugawara, 2000; Safak, Sahin, Gulveren, & Tomak, 2003; Saha, Chaudhury, & Bhattacharyya, 2001; Sahin & Tomak, 2002; Şahin, 2005). Bu çalışmalardan Grigorenka ve Garcia Gaussian benzeri bir dalga fonksiyonu formunu ele alarak quantum sistemlerin taban ve birinci uyarılmış durum enerjilerini ve dalga fonksiyonunu hesapladılar. Şahin ve ark. sonsuz ve sonlu potansiyelle sınırlandırılmış küresel kuantum nokta yapısının elektronik özelliklerini tek parametreli Gauss tipi dalga fonksiyonu kullanarak incelediler. Kuantum genetik algoritma yöntemiyle HFR yönteminin birleşimini kullanarak, sonsuz derinlikli küresel simetrik sınırlayıcı potansiyele sahip merkezinde hidrojen ve helyum benzeri safsızlık bulunan bir ve iki elektronlu kuantum nokta yapısının elektronik özelliklerini Slater Tipi Orbitaller (STO) üzerinden incelediler (Çakır, 2007).

(Vázquez, del Castillo-Mussot, Mendoza, & Spector, 2004) sonsuz küresel kuantum nokta yapıda elektrik alan etkisini sonsuz sınırlandırılmış potansiyel kuyu modelini kullanarak yük taşıyıcılarının enerji taban durumları üzerine uygulanan elektrik alan etkisini incelediler. (Huangfu & Yan, 2008) dış elektrik alan altındaki küresel kuantum nokta yapıda bağ polaranlarının taban durum enerjilerini varyosyonel yöntemle incelediler.(Dane, Akbas, Minez, & Guleroglu, 2008) z yönünde düzgün bir elektrik alan uygulayarak küresel kuantum nokta yapının bağlanma enerjilerini varyasyonel yöntemle incelediler. (Zhang et al., 2010) elektik ve manyetik alan varlığında parabolik kuantum nokta yapıda optiksel soğurma katsayılarını ve kırılma indislerini yoğunluk matris yaklaşıklılığı altında incelediler. (Shao, Guo, Zhang, Li, & Peng, 2010) dış elektrik alan altında silindirik kuantum nokta yapının üçüncü harmonik jenerasyon katsayılarını yoğunluk matris yaklaşıklılığı ve iterative yöntemleri kullanarak incelediler. (He & Xie,

2010) küresel parabolik bir kuantum nokta yapıda sınırlandırılmış hidrojenik safsızlık durumları üzerine elektrik alan etkilerini pertürbasyon yöntemiyle hesapladılar. (Kasapoglu, Duque, Sari, & Sokmen, 2011) bir kuantum kuyusuna elektrik ve manyetik alan uygulayarak optiksel özelliklerini incelemişlerdir. (Sadeghi & Avazpour, 2011) üç boyutlu kuantum nokta yapısının optiksel özellikleri üzerine elektrik alan ve impurity etkilerini araştırdılar. (Karimi & Rezaei, 2011) sonlu yarı parabolik kuantum nokta yapının çizgisel (lineer) ve çizgisel olmayan (nonlineer) optiksel özellikleri üzerine dış elektrik ve manyetik alan etkilerini yoğunluk matris yaklaşıklılığı altında incelediler. (Yesilgul, Ungan, Kasapoglu, Sari, & Sokmen, 2011) V- şekilli kuantum kuyusunda çizgisel ve çizgisel olmayan optiksel soğurma katsayıları ve kırılma indisleri üzerine elektrik ve manyetik alan etkisini yoğunluk matris yaklaşıklılığı altında hesapladılar. (Rezaei, Vaseghi, & Ebrahimi, 2011) küresel parabolik kuantum nokta yapıda optiksel kırılma katsayısına dış elektrik alan etkisinin matris köşegenleştirme metodunu kullanarak hesapladılar. (Kirak, Altinok, & Yilmaz, 2013) dış bir elektrik alan altındaki küresel kuantum nokta yapıdaki bir donor safsızlığın bağlanma enerjisi ve optiksel enerjisi üzerine hidrostatik basınç ve sıcaklığın etkisini varyasyonel yöntemle incelediler. (Çakır, Yakar, & Özmen, 2013) sonsuz küresel bir kuyuda sınırlandırılmış hidrojen atomunun enerji seviyelerini, statik ve dinamik kutuplanabilirlilikleri üzerine oscillator strenght ve elektrik alan etkisini kuantum genetik algoritma yöntemiyle incelediler.

Son yıllarda genetik algoritma yöntemi de kuantum mekaniksel sistemlerin elektronik özelliklerinin araştırılmasında kullanılmaya başlanmıştır. KGA methoduyla Hartree-Fock Roothaan methodu birleştirerek farklı potansiyelle sınırlandırılmış bir elektronlu kuantum nokta yapıların elektronik özellikleri gibi çeşitli çalışmalar yapılmıştır (Cakir, Ozmen, Atav, Yuksel, & Yakar, 2007, 2008; Sahin & Tomak, 2005b). Bazı yazarlar (Cakir, Yakar, Ozmen, Sezer, & Sahin, 2010; Özmen, Yakar, Çakır, & Atav, 2009; Yakar, Cakir, & Ozmen, 2010; Yakar, Çakır, & Özmen, 2010)lineer ve nonlineer optiksel özelliklerini, (Özmen, Çakır, & Yakar, 2013; Yakar, Çakır, & Özmen, 2013a) rölativistik düzeltme terimlerini, (Yakar, Çakır, & Özmen, 2013b) off-center problemini araştırmışlardır. Günümüze kadar nano teknolojideki gelişmeler giderek artmıştır.

2.KUANTUM YARIİLETKEN YAPILAR VE ÜRETME YÖNTEMLERİ

2.1. Giriş

Nano teknolojideki gelişmeler ve üretim tekniklerindeki ilerlemeler, iletişim ve haberleşme teknolojisindeki yoğun talep, çeşitli özel uygulamaların hız kazandırdığı deneysel çalışmalar ve bunlara eşlik eden teorik çalışmalar değişik yapı ve fiziksel özellikleri olan kuantum mekanik sistemlerinin üretilmesine olanak vermiştir. Hafıza ve hesaplama sistemlerine olan yoğun talep, sinyal iletme ve işleme hızlarının arttırılması yönündeki araştırmalar, yeni mikroelektronik ve optoelektronik yapıların üretilmesine uygun bir zemin hazırlamıştır (Davies, 1997; Mitin, Kochelap, & Stroscio, 1999)

Mikroelektronik alandaki temel amaç, minimum büyüklükte aygıt ve en üst düzeyde entegre elemanların üretilmesidir. Bunun için, yüksek nitelikli çok tabakalı yapay yapılara ihtiyaç vardır. Boyutlar küçüldüğü zaman aygıt, mevcut çalışma prensiplerini yitirmeye başlarken kuantum etkileri önem kazanmaya başlar. Ayrıca boyutların küçülmesi bir elektrik sinyalinin iletimini sağlayan yüklerin sayısında da önemli ölçüde bir azalmaya neden olacaktır. Günümüzde üretilen bazı nano ölçekli aygıtlar, tek elektron iletimine dayalı olarak çalışmaktadır. Bu tür tek-elektron aygıtları III. ve V. grup elementlerinin katkılanmasıyla Si/Ge gibi farklı yarı iletkenlerden yapılmış eklemler kullanılarak üretilmektedir.

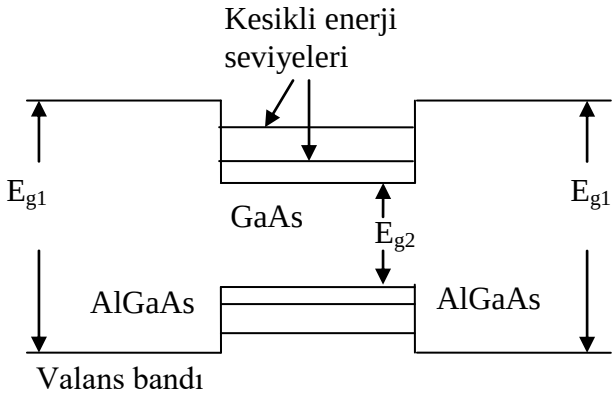
Tabiatta bulunan bütün yapılar makroskopik, mikroskopik ve mezoskopik (düşük boyutlu) olmak üzere üç sınıfa ayrılabilir. Makroskopik yapılar yapı içindeki parçacıkların hareketini istatistiksel olarak tanımlanabilecek boyutlardaki yapılardır. Atomik boyutlardaki yapılara mikroskopik yapılar denir. Büyüklükleri makroskopik ile mikroskopik yapılar arasında yer alan, boyutları yaklaşık 10-1000 $\mathring{A}$ arasındaki yapılar da mezoskopik yapılar olarak tanımlanır. Bir yapının mezoskopik bir yapı olarak adlandırılması için, sistemin boyutlarından en az birisinin, üç karakteristik uzunluk olan ortalama serbest yol, Fermi dalga boyu ve faz durulma mesafesinden küçük olmalıdır.

Ortalama serbest yol, bir elektronun yapmakta olduğu çarpışmalar arasında çarpışma yapmadan aldığı ortalama yoldur. Başka bir deyimle elektronun bir çarpışmadan sonra momentumunu değiştirmeden gidebileceği ortalama mesafedir. Bir sistemin boyutları ortalama serbest yoldan daha küçükse elektronlar bu yapı içinde çarpışma yapmadan ilerleyebilir. Faz durulma mesafesi, elektronlar arasındaki faz dengesinin bozulmaya uğradığı mesafedir. Eğer bir yapının boyutları ortalama serbest yoldan veya faz durulma mesafesinden küçükse, elektronun hareketi tek bir dalga

fonksiyonu ile ifade edilebilir. İki boyutlu elektron gazı için Fermi dalga boyu $\lambda_f = (2\pi / n_e)^{1/2}$ ile tanımlanır ve yarıiletken malzeme için değeri 10-100 nm mertebesinde, metaller için ise 1 nm den daha düşüktür. Yani yarıiletken bir yapıda elektronlar için kuantum engeli oluşturmak, metalik yapılara göre çok daha kolaydır.

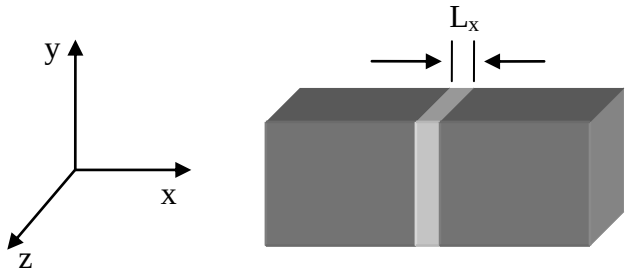
2.2. Kuantum Yarıiletken Yapılar

Mezoskopik yapılar taşıyıcıların hareketlerinin engelleyici bir potansiyel ile sınırlandırılması ile deneysel olarak oluşturulabilmektedir. Yarı iletken ve dielektrik yapıların yasak enerji aralıklarının farklılığından dolayı ara yüzeyde bir potansiyel engeli oluşur. Böyle bir potansiyel engeli yapı içerisindeki yüklü parçacıkların hareketlerini sınırlandırabilir. Kuantum kuyularına örnek olarak $Ga_{1-x}Al_xAs\ /GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ yapısı verilebilir, burada *x* alüminyum katkılanma oranıdır. Kuantum kuyularında yük taşıyıcıları farklı tabakaya doğru hareketleri bir boyutta sınırlandırılan iki boyutta serbest parçacık gibi hareket edebilir, ve bu boyutta enerjileri kuantumlu olur. Şematik olarak Şekil.2.1 de gösterildiği gibi yasak enerji aralığı (E_{g2}) düşük olan bir yarı iletken malzeme, yasak enerji aralığı (E_{g1}) nispeten büyük olan bir yarı iletken malzeme içerisine atomik boyuttaki katmanlar olarak yerleştirilmesiyle üretilebilir. Böylece yasak enerji aralıkları farklı olduğundan ara yüzeyde bir potansiyel engeli oluşur. Bu potansiyel bariyeri, elektronların ve deşiklerin bu bölgede hareketinin sınırlandırılmasına neden olur. Günümüzde teknolojinin farklı alanlarında bu şekilde üretilen birçok farklı yarı iletken malzemeler yaygın bir şekilde kullanılmaktadır. Bu yarı iletkenlere GaAs, AlAs, InAs, InSb, AlGaAs ve CdSe gibi malzemeler örnek verilebilir.



Şekil 2.1. Kuantum heteroyapısı (kuantum kuyusu) nın şematik gösterimi (Çakır, 2007)

Şekil 2.2 de gösterildiği gibi elektronların hareketinin x-yönünde sınırlandırıldığı bir kuantum kuyusunu göz önüne alalım. Elektronlar y- ve z- yönünde serbestçe hareket edebilir ve bu doğrultularda kuantum etkisi görülmezken, x-yönünde kuantum etkisi görülür.



Şekil 2.2 Bir kuantum kuyusunun şematik gösterimi(Çakır, 2007).

Bu durumda bir yapının dalga fonksiyonunu

$$\Psi(x,y,z)=e^{i(k_y y+k_z z)}\phi(x) \qquad (2.1)$$

biçiminde yazılabilir. Burada $\phi(x)$sınırlandırmanın görüldüğü doğrultuya karşılık gelen dalga fonksiyonu, k_y ve k_z ise sırası ile *y*- ve *z*-doğrultusundaki dalga vektörünün bileşkesidir. Kuantum etkisinin görüldüğü *x*-doğrultusu için Schrödinger dalga denklemi aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\frac{d^2\phi(\mathrm{x})}{dx^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E_x-V_x)\phi(\mathrm{x})=0\,. \qquad (2.2)$$

Burada E_x *x*-doğrultusundaki hareketin enerjisi ve V_x ise sınırlayıcı potansiyel olup enerji boyutundadır. Sınırlayıcı potansiyel kuyu sınırlarda sonsuz büyüklükte, kuyu içinde ise $V_x=0$ alınabilir. Bu yapıya sınır şartları uygulanırsa *x*-doğrultusundaki dalga vektörünün bileşeni

$$k_{n_x}=\frac{n_x\pi}{L_x} \qquad (2.3)$$

olur. Denk.(2.3) den görüldüğü gibi *x*-doğrultusundaki dalga vektörü bileşeni kesikli değerler aldığı için kuyu içindeki enerji özdeğerleri

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

biçiminde kesikli olur. Bu durumda parçacığın toplam enerjisi,

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_y^2 + k_z^2 + \left(\frac{n_x \pi}{L_x} \right)^2 \right) \qquad (2.5)$$

ile verilir.

Yük taşıyıcıların hareketinin iki boyutta sınırlı, tek boyutta serbest olduğu yapılar kuantum telleri olarak adlandırılır. Bu yapılara örnek olarak $Ga_{1-x}Al_xAs$ ile çevrelenmiş üçgen, kare veya silindir kesitli bir GaAs teli verilebilir. Şekil 2.3'de gösterildiği gibi x- ve y-doğrultusunda sınırlandırmanın olduğu *y*- doğrultusunda serbest olan bir kuantum teli ele alalım. Böyle bir yapı içindeki elektron, bir serbestlik derecesine sahiptir. Böyle bir yapı içinde sınırlandırılmış bir elektronun dalga fonksiyonu,

$$\Psi(x,y,z)=e^{ik_z z}\,\phi(x,y) \qquad (2.6)$$

biçiminde alınabilir. Burada $\phi(x, y)$ sınırlandırmanın olduğu doğrultularına karşılık gelen dalga fonksiyonudur. Bu yapı için Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} \right)\phi(x, y) + V(x, y)\phi(x, y) = E_{x.y}\phi(x, y) \qquad (2.7)$$

biçiminde yazılabilir. Sınırlandırmanın olduğu doğrultuda *V(x,y)* potansiyelini sonsuz yüksekte, kuyu içinde *V(x,y)=0* alabiliriz. Dalga fonksiyonuna sınır şartlarının uygulanması ile,

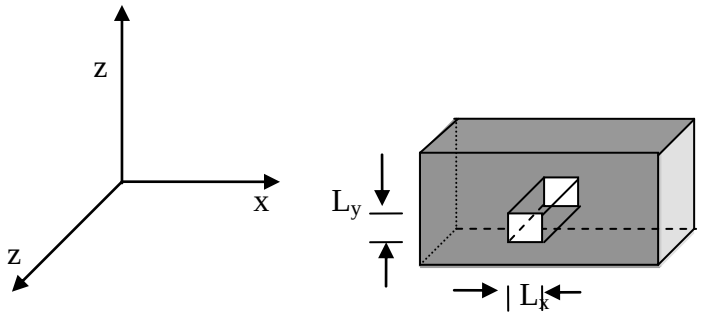
$$k_{n_x} = \frac{n_x \pi}{L_x} \qquad (2.8a)$$

$$k_{n_y} = \frac{n_y \pi}{L_y}, \qquad (2.8b)$$

elde edilir. Kuantumlu enerji özdeğerleri ise,

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_z^2 + \left(\frac{n_x \pi}{L_x} \right)^2 + \left(\frac{n_y \pi}{L_y} \right)^2 \right) \qquad (2.9)$$

Biçiminde elde edilebilir.



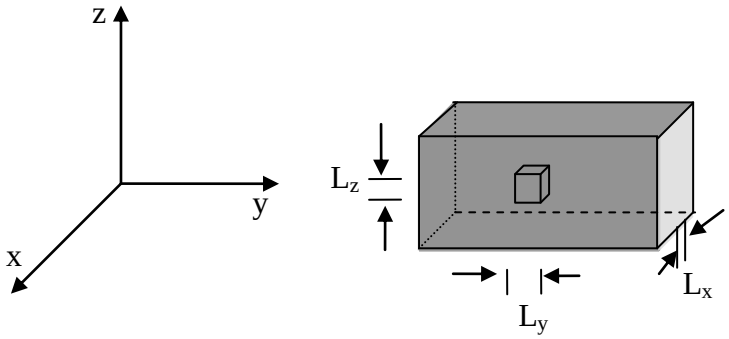
Şekil.2.3. x- ve y- doğrultusunda yük taşıyıcılarının hareketi sınırlı, z- doğrultusunda serbest olan bir kuantum telinin şematik gösterimi (Çakır, 2007).

Kuantum nokta yapılarda yük taşıyıcılarının hareketi tüm boyutta sınırlandırıldığı için üç boyutta da enerji seviyeleri kuantumlu olur.

Bir kuantum nokta yapısının şematik gösterimi Şekil (2.4) de verilmiştir. Böyle bir nokta yapı için Schrödinger denklemi

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

biçiminde yazılabilir.



Şekil 2.4. Yük taşıyıcılarının hareketinin tüm boyutlarda sınırlandırıldığı bir kuantum noktasının şematik gösterimi (Çakır, 2007).

Sınırlandırıcı potansiyeli tüm boyutlarda sonsuz alırsak, kuyu içinde V(x,y,z)=0 ve dalga fonksiyonuna sınır şartları uygulandığında dalga vektörünün 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

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

elde edilir.

2.3. Kuantum Nano Yapıların Üretme Yöntemleri

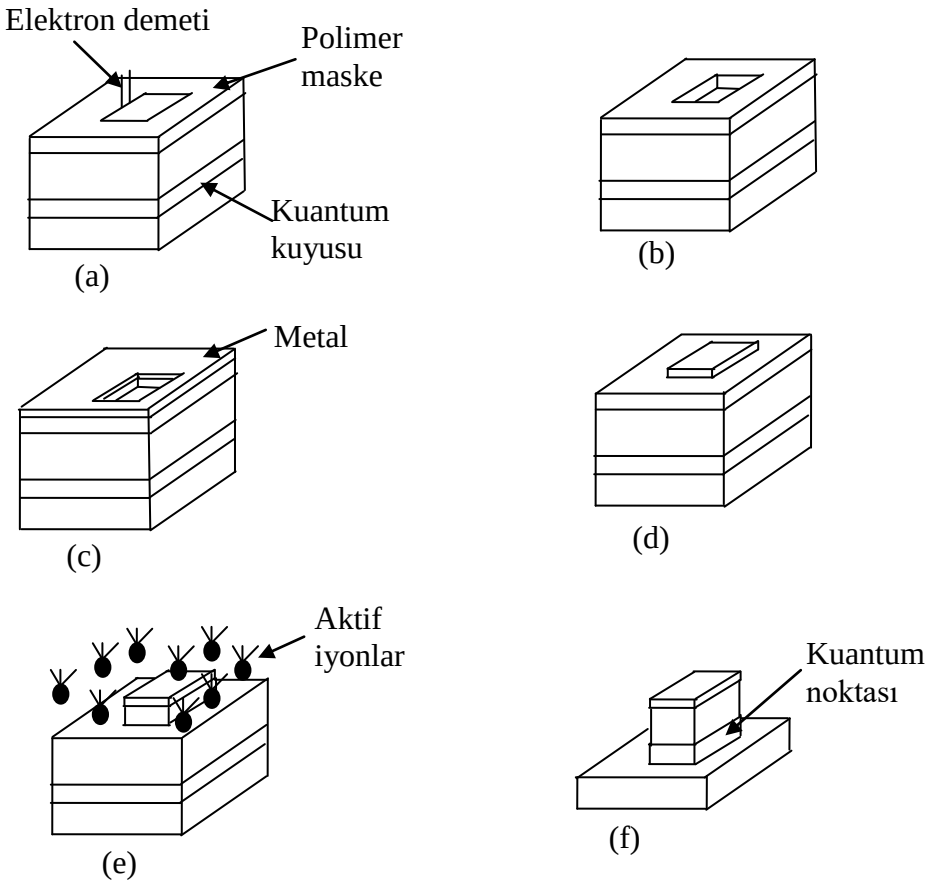
Kuantum noktalarının bir çok üretim tekniği vardır. Kuantum nokta yapıları üretmekteki temel yük taşıyıcılarını küçük bir bölgeye hapsetmektir (Jacak et al. 1998). Moleküler demet epitaksi gibi tekniklerin çıkımasıyla farklı yerı iletken yapılar kullanılarak kuantum nanoyapıları üretebilmektir.

2.3.1. Asitle Eritme Yöntemi

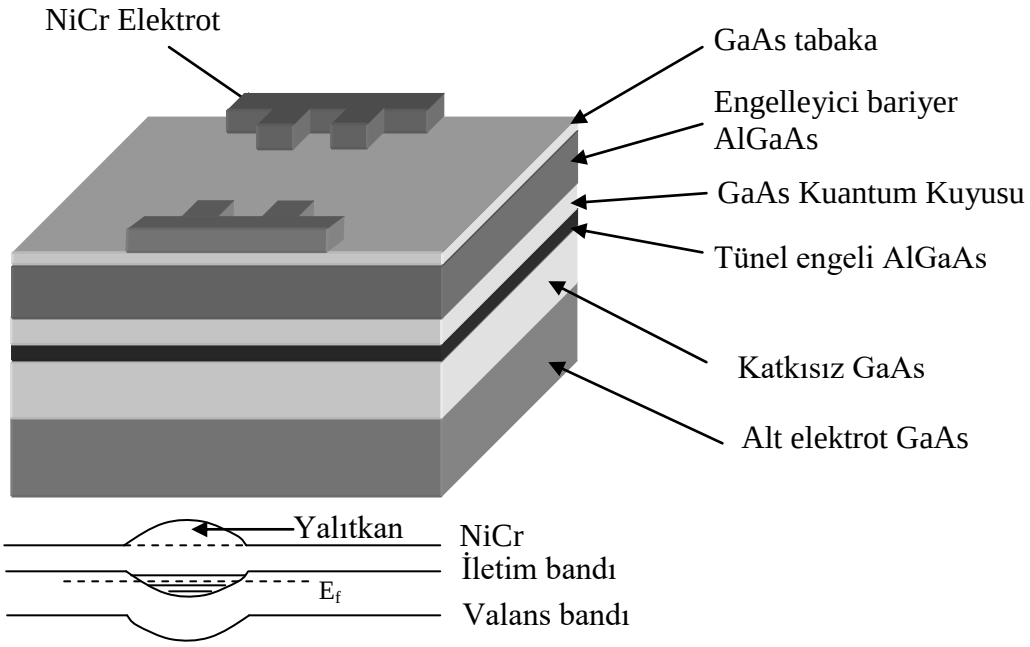
Asit eritme yöntemi kuantum nano yapılarının üretiminde kullanılan ilk yöntemdir (Reed et al., 1986). Bu yöntemin aşamaları Şekil (2.5) de gösterilmiştir. Bu yöntemde ilk önce bir ya da birden fazla kuantum kuyusuna sahip bir yapının yüzeyi polimer maskeyle kaplanır (Şekil 2.5.a). Sonra polimer maske elektron veya iyon demetine maruz bırakılarak oluşturulacak nano yapının sınırları ve şekli belirlenir (Şekil 2.5.b). Polimer tabaka yüksek çözünürlüğe sahip olduğu için yapının şekli ve sınırları belirlenirken görünür bölge elektromanyetik dalga kullanılmaz. Bir sonraki aşamada ise numunenin yüzeyi ince bir metal tabakayla kaplanır (Şekil 2.5.c). Daha sonra seçilen yüzey dışındaki tüm yüzey aktive edilmiş iyon demetine maruz bırakılarak metal ve altındaki polimer tabaka temizlenir ve basit yapı elde edilir (Şekil 2.5.d). Sınırlandırıcı bölge yüzeyi üzerinde kalan metal tabaka elektrot olarak kullanılabilir. Bundan sonra, metal maskeyle korunmamış bölgeler kimyasal olarak aktif iyonlarla aşındırılmasıyla kuantum kuyu parçaları içeren ince yapılar oluşturulur (Şekil 2.5.e) ve bu yapılar kesilerek yüzeyden ayrılır (Şekil 2.5.f) (Jacak, 2000; Jacak & Hawrylak, 1998; Reed, 1993). Böylece bu yöntemle boyutları çok küçük olan (10-100 nm mertebesinde) kuantum yapıları elde edilebilir (Demel, Heitmann, Grambow, & Ploog, 1990; Smith, Lee, Knoedler, Hong, & Kern, 1988). Bu yöntemde malzemeye bağlı olarak kuantum yapının kenarlarında kusurlar oluşabilir.

2.3.2. Module Edilmiş Elektrik Alan Yöntemi

Bu yöntem litografik bir yöntemdir. Bu yöntemde ilk önce küçük elektronlar kuantum kuyusu üzerine yerleştirilir. Elektrotlara dışardan bir potansiyel farkı uygulandığında bir elektrik alan oluşur. Böylece hem elektronların hareketi sınırlandırılır hemde elektrik alanın değeri değiştirilebilir. Bu yöntemle elde edilen kuantum nano yapılarının kenarlarında malzemeye bağlı olan sınır kusurları oluşmaz. Aynı zamanda bu yöntemle düzgün bir şekilde yan yana dizilmiş birden fazla kuantum nano yapısı oluşturulabilir (Jacak & Hawrylak, 1998). Bu yöntem Şekil (2.6)'da şematik olarak anlatılmıştır.



Şekil 2.5. Asitle eritme yöntemiyle kuantum nokta yapının üretim aşamalarının şematik olarak gösterimi (Reed, 1993).



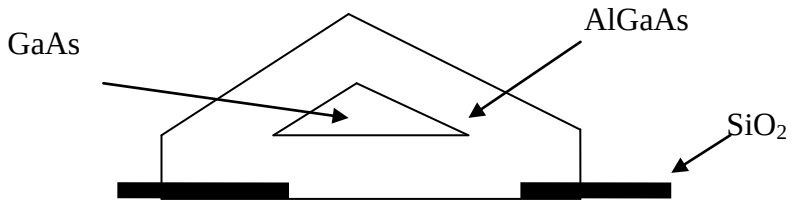
Şekil 2.6. Kuantum kuyusu üzerinde minyatür elektrotlar oluşturulması yöntemiyle kuantum noktası üretimi (Çakır, 2007).

2.3.3. Kendiliğinden Büyüme Yöntemi

Bu yöntem kendiliğinden büyütme ve seçici büyütme yöntemi olarak ikiye ayrılır. Kendiliğinden Büyüme Yöntemi kuantum noktalarının kendiliğinden kristalleştirilmesi yöntemidir (Petroff & Denbaars, 1994). Bu yöntemde örgü sabitleri yeteri kadar farklı olan alt tabaka ve kristalleşen malzeme kullanılır. İlk önce örgü sabiti alt tabakanınkine eşit olan katmanlar çökeltilir ve epitaksiyel formda kristalleşir. Kritik kalınğa ulaştığında tabaka içerisinde oluşan önemli ölçüdeki gerilme, düzenli yapının bozulmasına neden olur. Böylece aynı boyutlarda düzgün şekillere sahip, rastgele dağılmış küçük odacıkları kendiliğinden oluşur. Örgü sabitlerindeki uyuşmazlıktan dolayı bu odacıkların büyüklüğü ve şekli büyütmenin olduğu sıcaklığa, tabaka içinde oluşan gerilme şiddetine, ve büyütme hızına bağlıdır. Bu yolla boyutları küçük olan ve homojen büyüklükte nano yapılar üretilmektedir. Bu yöntemle kenar kusurları olmadığı için optoelektronik ve mikro elektronik uygulamalarında büyük ümit vaad etmektedir.

Seçici Büyütme Yönteminde ise yasak enerji aralığı çok küçük olan yarı iletken bir malzeme yüzeyinin üzeri daha büyük yasak enerji aralığına sahip malzemeyle kaplanır. Onun üzeride koruyucu bir tabakayla kaplanır. Büyütmenin yapılacağı alan yüzey üzerinde belirlenir ve üzerine eritme yapmak suretiyle minyatür üçgenler

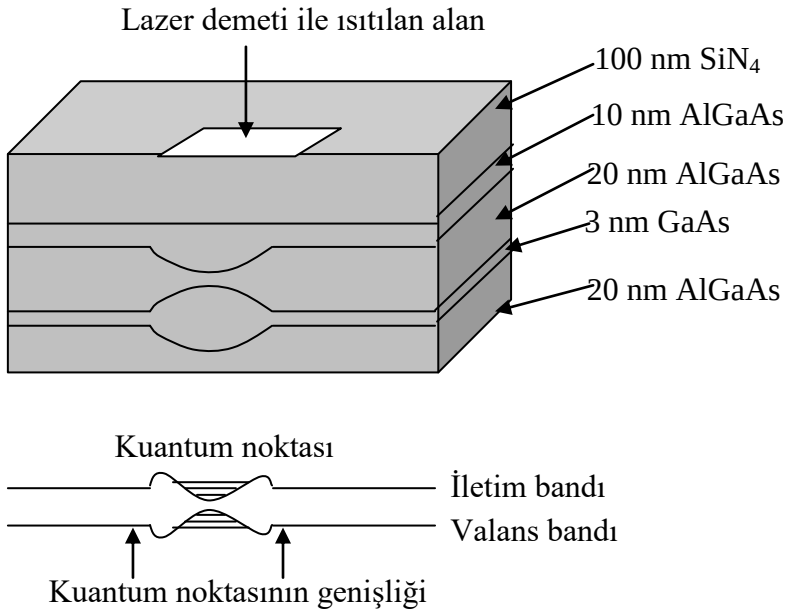
oluşturulur. Bu minyatür üçgen yüzeylere Metal-Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD) yöntemi uygulanarak sıcaklıkları 700^0C-800^0C 'ye kadar yükseltilir. Sıcaklık etkisiyle hacimleri büyüyen üçgen yüzeyler tetrahedral piramit haline dönüşür ve büyütme tamamlanmış olur. Bu yöntemle elde edilen bir kuantum nokta yapısı boyutları 100 nm den daha küçüktür ve şematik olarak Şekil 2.7 de gösterilmiştir. (Grundmann, Stier, & Bimberg, 1995; Raymond, Fafard, & Charbonneau, 1996).



Şekil 2.7. Seçici büyütme yöntemiyle kuantum nokta yapısının elde edilmesi (Fukui, Ando, Tokura, & Toriyama, 1991)

2.3.4. Kuantum Kuyusu ve Bariyer Arası İç Difüzyon Yöntemi

Bu yöntemde ilk önce kuantum kuyusunun belirlenen bir bölgesinin lazer demeti ile ısıtılır. Kalınlığı düşük olan (3nm) bir malzeme (GaAs) kalınlığı nispeten büyük olan (20nm) iki adet malzeme $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ arasına yerleştirilmesiyle bir kuantum kuyusu oluşturulabilir. Sonra kalınlığı 10 nm olan GaAs tabakası, AlGaAs tabakası üzerine yerleştirilir. Daha sonra Lazer demetinin sebep olacağı erimeleri veya oksitlenmeleri engellemek amacı için en üst yüzey 100 nm kalınlıklı SiN_4 tabakası ile kaplanır. Seçilen belirli bir yüzey lazer demetiyle ısıtılır. Isıtılan yüzeyin altında kalan kısımlarda galyum ile alüminyum atomları birbirine karışır ve bölgesel bant yapısının oluşmasına neden olur. Isıtılmak için seçilen alanın altında kalan yasak enerji aralığı daha büyüktür. Böyle bir işlemde büyük boyutlu malzemeler kullanılırsa, aralarında yasak enerji aralığı bulunan ve içinde elektron veya elektronların sınırlandığı kuantum noktaları elde edilir (Jacak & Hawrylak, 1998)



Şekil 2.8. Seçilen bir yüzeyin lazer demeti ile ısıtılmasıyla kuantum kuyusunun elde edilmesi (Çakır, 2007).

2.3.5. Yarı İletken Mikro Kristaller Yöntemi

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

$$a^{-3} = te^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \qquad (2.13)$$

Bağıntısıyla üretilen kuantum nokta yapısının genişliği kontrol edilebilir. Bu yöntem ile 1, 2 nm ile 18 nm genişliğinde kuantum nokta yapıları üretilebilir (Ekimov, Efros, & Onushchenko, 1985; Jacak & Hawrylak, 1998).

2.4.Düşük Boyutlu Yapıların Üstünlükleri ve Uygulama Alanları

Yük taşıyıcıları negetif yük (elektron) ve pozitif yük (deşik) uzayın belli noktasında hapsedildiğinde taşıyıcıların dalgafonksiyonları örtüşebilir. Bu örtüşme, elektron-deşik çiftlerini birleştirerek verimi arttırır. Bu da yayınlanan fotonun kuantum verimliliğini arttırır.

Kuantum sınırlandırılmış sistemlerde durum yoğunluğunun kesikli olması yük taşıyıcıların enerji bandı içinde ısıl enerjilerinin artmasını engeller. Böylece bant genişliği azalır ve monokromatik bir yapıya daha çok yaklaşılır. Kuantum kuyusunun sınırlandırma yapıldığı doğrultudaki boyutları ayarlanabilir. Böylece enerji seviyeleri, dolayısı ile yayınlanacak ışığın frekansı ayarlanabilir. Fotonlar uzayın belli bir bölgesinde hapsedildiği için, optik verimde arttırılmıştır. Kuantum kuyu içerisindeki yük yoğunluğu dış elektrik alan ile ayarlanabilir (*yük modülasyonu*). Negatif yüklü elektronlar, (+) yüklü iyonlardan ayrılarak, hızlarının daha büyük olduğu bölgeye hareket ederler.

Kuantum kuyusunun boyutları elektronların de Broglie dalga boyu mertebesinde olduğundan kuantum etkileri görülür. Kuantum etkileri, bant genişliğinde iyileşmelere neden olur. Işık üretiminde kullanılan düşük boyutlu yapılar eşik akımın düşmesine ve kuantum verimliliğinin artmasına yol açar. Ayrıca bu yapıların özelliklerinden dolayı hızlı elektronik uygulamalarında kullanılır.

Doğada nanoyapıların birçoğu bulunmaktadır. Nanoparçacık üreten doğal süreçler; deniz serpintisi, erozyon gibi süreçlerdir. Nanomalzemelerle üretilen bu aygıtlar hızlı bağlantı elemanlarında yeni transistörlerde, ve bilgisayar yongaları gibi elektronik aygıtlarda, otomobil, konut, ve enerjiyi verimli kullanan yakıt hücrelerinin yapımında, içme suyunun arıtılmasında, pil ve güneş paneli üretiminde, çevresel atık ve hasarların saptanması ve temizlenmesinde enerji tüketimini ve atık üretimini düşürmektedir.

Ayrıca kompozitlerde, elektrikte, biyolojik analizlerde, enerji üretiminde, optikte, güneş hücrelerinde, geleceğin bilgisayarlarında yaygın kullanım potansiyeline sahiptirler.

3. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ

3.1 Kuantum Genetik Algoritma

Genetik algoritma (GA), doğal seleksiyon yöntemi gibi ortama iyi uyum sağlayan bireylerin hayatta kalması, sağlayamayan bireylerin ise elenmesi olarak tanımlanabilen bir araştırma ve sayısal optimizasyaon methodudur (Coley, 2001). GA tekniğini ilk kez (Holland, 1975) kullanılmış olup, mühendislik ve malzeme biliminde kullanılmaktadır (Castro et al., 2004; Homaifar et al., 1994; Kulkarni et al., 2004; Samanta, 2004; Sen, Oztopal, & Sahin, 2001; Venugopal & Narendran, 1992; Yang & Gen, 1994). Son zamanlarda fiziğin bir çok alanında, özellikle kuantum mekanik sistemlerin taban durum enerjisinin belirlenmesinde kullanılmaya başlanılmıştır (Aydin & Yildirim, 2004; Judson, Jaeger, & Treasurywala, 1994; Kariuki, Serrano-Gonzalez, Johnston, & Harris, 1997; Kim, Oh, Lee, Lee, & Yun, 2001; Kudla, 2004; Liu, Gao, McCaffrey, Wasilewski, & Fafard, 2001; Pullan, 1997; Sahin et al., 2000; Wanschura, Coley, & Migowsky, 1996; Zacharias, Lemes, & Pino, 1998). Kuantum Genetik Algoritma (KGA) olarak da adlandırılan bu yöntem kuantumlu yapılarda kullanıldığında varyasyon yönteminde olduğu gibi enerji minimizasyon ilkesine dayanır ve kuantum mekaniksel sistemleri temsil eden Schrödinger denkleminin çözümleri için de kullanılmaya başlanmıştır (Chaudhury & Bhattacharyya, 1998; Grigorenko & Garcia, 2000, 2001; Nakanishi & Sugawara, 2000; Safak et al., 2003; Saha et al., 2001; Sahin & Tomak, 2002, 2005b).

KGA metodu yeniden üretme, çaprazlama ve mutasyon olmak üzere üç aşamadan oluşur (Coley, 2001). Yeniden üretme sürecinde her bir bireyin hayatta kalma olasılığı belirlenir hayatta kalma olasılığı yüksek olan bireyler ise bir sonraki kuşağa aktarılırken, hayatta kalma olasılığı düşük olan bireyler ise elenir. Bu işlem için her nesilde seçim işlemlerinin uygulanması gerekir. Çaprazlama (Crossover) aşamasında biyolojide olduğu gibi doğal çaprazlama işlemine benzer bir işleme yeniden oluşumda elde edilen bireyler üzerine tabi tutulur. Bu bireyler içinden rastgele iki birey seçilir ve onların rastgele bir noktadan genetik bilgileri kesilerek, birinci bireyin kesilen noktanın sağında kalan bilgiler ikinci bireyin kestiğimiz noktanın solunda kalan bilgilerle, birinci bireyin kesilen noktanın solunda kalan bilgiler ikinci bireyin kestiğimiz noktanın sağında kalan bilgilerle yerleştirilir. Böylece her iki bireyin genetik bilgileri bir sonraki nesille birlikte taşınır. Mutasyon işlemi, yerel minimumlardan kurtulmak için nesil içinden rastgele seçilen bir birey üzerinden uygulanan bir süreçtir. Çaprazlama ve mutasyon süreçlerinin uygulanmasında bir gerçekleştirme olasılığı belirlenir. Çaprazlama sürecinde

gerçekleştirme olasılığı nüfus içinden çeşitliliği artırmak için yüksek seçilirken mutasyon sürecinde gerçekleştirme olasılığı yanlış çözümlere gitmemek için düşük seçilir. Yani olasılık büyük seçilirse yakınsama güçleşir ve rastgelelik çok artar (Çakır, 2007).

Yeniden üretme sürecinde herhengi bir bireyin uygunluk değeri F_i, her i. bireyin enerji beklenen değeri E_i olmak üzere dönüştürülebilir.

$$F_i = exp[(-\beta(E_i - \bar{E})/(\bar{E} - E_{min})] \quad (3.1)$$

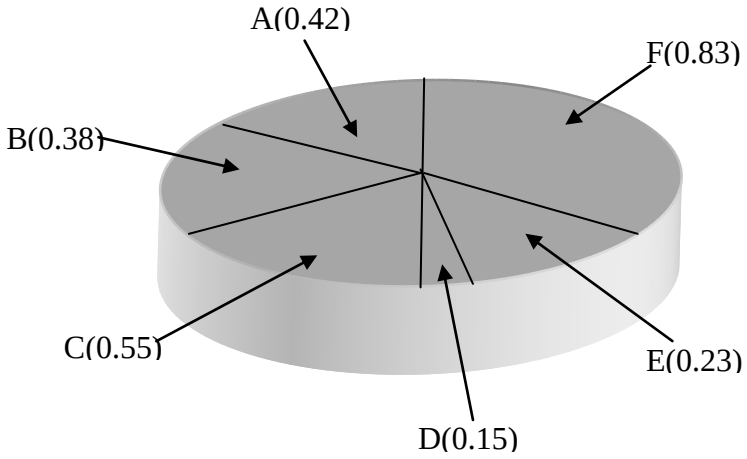
Burada E_{min} ve $\bar{E}$ sırasıyla minimum ve ortalama enerjileri gösterir ve β ayar parametresidir. Bu süreçte yeni kuşak bireyleri bir önceki kuşaktan seçilir. Herhangi bir bireyin gelme olasılığı P_i o bireyin gerçekleştirme (fitness) değeri olan F_i ile orantılıdır. Bir şekilde aşağıdaki gibi bir işleme tabi tutulur (Bir nüfus içindeki birey sayısı N_{pop} olmak üzere).

$$P_i = \frac{F_i}{\sum_{i=1}^{N_{pop}} F_i} \quad (3.2)$$

Bu işlem ile bazı bireylerin gelme olasılığı birden fazla olurken bazı bireylerin de az veya gelmeme olasılığı vardır. Yani P_i değeri büyük olan bireyler yeni nesle daha çok aktarılırken olasılığı küçük olan bireyler daha az aktarılacaktır. Bunun için *uygunluk-oranı* ve *rulet çarkı* yöntemi gibi işlemler uygulanmaktadır (Coley, 2001; Golberg, 1989).

Rulet çarkı yöntemiyle seçim yapmak için öncelikle Denk.(3.2) den elde edilen uygunluk değerleri kullanılarak bir rulet çarkı oluşturulur. Bu uygunluk değerleri kullanılarak oluşturulan rulet çarkı şematik olarak Şekil 3.1 de gösterilmiştir (Çakır, 2007).

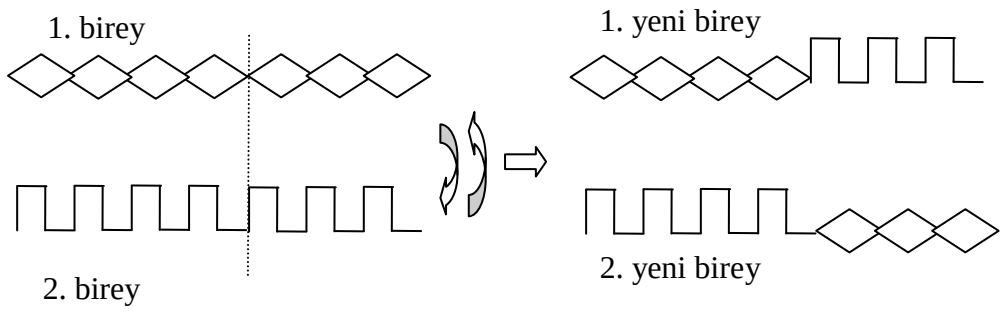
Bu şekillerden görüleceği gibi uygunluk değeri 0.83 olan bireylerin gelme olasılığı fazla olurken uygunluk değeri 0.15 olan bireylerin gelme olasılığı çok az olacaktır. Böylece uygunluk değerleri büyük olan bireyler yeni kuşağa birden fazla aktarılırken uygunluk değeri küçük olan birey çok az veya hiç aktarılmayacaktır. Rulet birey sayısı kadar çevrilerek yeni kuşak elde edilir.



Şekil 3.1 Rulet çarkının şematik gösterimi.

Çaprazlama süresince gerçekleşen iki bireyin kromozom genlerinin birbiriyle değiştirilmesiyle gerçekleştirilen bir işlemdir. Bu işlemi yeniden oluşturma işleminden sonra üretilen yeni bireyleri üzerine uygulanarak yeni nesil için iyi bir nesil oluşturmak için yapılır. Bunun için kuşak içinden iki birey rastgele seçilerek, bu iki birey arasında çaprazlama işlemi yürütülür. Çaprazlama işlemini şematik olarak Şekil (3.3)'de gösterilmiştir.

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



Şekil 3.2. Çaprazlama işleminin şematik gösterimi.

Genetik algoritmanın son süreci olan mutasyon işlemi, çaprazlama işleminden sonra uygulanan bir işlemdir. Çaprazlama işlemiyle oluşturulan yeni nesil içinden rastgele seçilen bir bireye uygulanır. Mutasyon işlemi sistemi yerel minimumlardan kurtarılması sağlar. İki kodlama sisteminde rastgele oluşturulmuş başlangıç nüfusundan tüm bireylerinin ilk rakamı sıfır olabilir. Böyle bir durumda çaprazlama işlemiyle ilk rakamı sıfır olan bir bireyin ilk rakamın 1 olan bir birey elde etmek mümkün değildir. Başka bir deyimle çaprazlama işlemiyle ikilik kodlamada 12 rijitlik bir sayının değeri 0111 1111 1111=2047 olacaktır. Oysa ikilik kodlamada 12 rijitlik bir sayının en büyük değeri 1111 1111 1111= 4095 tir. Mutasyon işlemi sistemini böyle bir minimumdan çıkmasını sağlar. Mutasyon işleminin anlamı; ikilik kodlamada, değeri 1 olan bir kromozomu 0, değeri 0 olan bir kromozomu 1 yapmak demektir (Çakır, 2007; Şahin, 2005)

Dalga fonksiyonu en iyilemesinde çok şiddetli bir mutasyon işlemini kullanmak dalga fonksiyonunda istenmeyen kırılmalara veya yanlış çözümlere gitmesine sebep olabilir. O yüzden mutasyon şiddetini küçük seçilmesi gerekir. Eğer rastgele seçilmiş bir $\psi_1(c_i,\zeta_i)$ dalga fonksiyonuna mutasyon uygulanırsa,

$$\psi_1'(c_i,\zeta_i) = \psi_1(c_i,\zeta_i) + \psi_m(c_i,\zeta_i) \qquad (3.3)$$

biçiminde bir mutasyon işlemi uygulanabilir. Kuantum mekanik sistemlerde Gauss tipi veya arttırma ve azaltma fonksiyonları gibi farklı mutasyon fonksiyonları kullanılmıştır (Chaudhury & Bhattacharyya, 1999; Grigorenko & Garcia, 2000).

KGA tekniğini uygulanırken iki farklı yöntemden bahsedilebilir. Bunlardan birisi dalga fonksiyonu en iyilemesi, ikincisi parametre en iyilemesidir. Bu çalışmada biz dalga fonksiyonu en iyilemesi tekniğini kullandık. Kuantum mekanik sistemin dalga fonksiyonu $\psi(c_1,c_2,...,c_n,\zeta_1,\zeta_2,...,\zeta_n)$ olsun. Dalga fonksiyonu en iyilemesi, c_i ve ζ_i 'lerin rastgele belirlenen değerleri ile her bir bireye karşılık gelen dalga fonksiyonunun değerlerinden oluşan başlangıç nüfusu oluşturulur. Hesaplamalar bu dalga fonksiyonu üzerinden yapılır. Böylece analitik ifade, c_i ve ζ_i ler bir kez kullanılmış olur. Toplam birey sayısına nüfus büyüklüğü veya sayısı denir.

KGA uygulanırken önce belli bir sayıda başlangıç nüfusu oluşturulur. Oluşturulan başlangıç nüfusunun her bir bireyi, A_n herhangi bir bireyin normalizasyon sabiti olmak üzere bireylere karşılık gelen dalga fonksiyonları

$$A_n^2\langle\psi_n|\psi_n\rangle = A_n^2 \int_{\text{tümuzay}} \psi_n^*\psi_n dV = 1 \qquad (3.4)$$

ifadesiyle normalize edilir. Normalize edilmiş bu dalga fonksiyonları kullanılarak her birey için enerjinin beklenen değeri ayrı ayrı hesaplanır. Elde edilen bu enerji öz değerleri kullanılarak, her bir bireyin gerçekleştirme değerine bakılır ve genetik işlemler bu gerçekleştirme değeri üzerinden yürütülür.

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

$$\begin{aligned}\psi_1'(c_i,\zeta_i) &= \psi_1(c_i,\zeta_i)S(c_i,\zeta_i)+\psi_2(c_i,\zeta_i)(1-S(c_i,\zeta_i))\\ \psi_2'(c_i,\zeta_i) &= \psi_2(c_i,\zeta_i)S(c_i,\zeta_i)+\psi_1(c_i,\zeta_i)(1-S(c_i,\zeta_i))\end{aligned} \tag{3.5}$$

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 & Garcia, 2002) ya da değerini (0,1) arasında rastgele bir sayı seçilmelidir. Böylece dalga fonksiyonundaki istenmeyen kırılmalar önlemmiş olur.

3.2. Zamandan Bağımsız Pertürbasyon Yöntemi

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

$$H = H_0 + \lambda H' \tag{3.6}$$

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

$$H_0\psi_k = E_k\Psi_k \tag{3.7}$$

Schrödinger özdeğer denklemi çözülebilir. λ parametresi pertürbasyonun mertebesini belirten parametredir. H_0 Hamiltoniyeninin E_k özdeğerlerine karşılık gelen Ψ_k özfonksiyonlarının (kısmen sürekli olabilen) tam bir ortanormal takımı oluşturur. Yani ψ_i ve ψ_j bu takımın iki üyesi iseler,

$$<\psi_i|\psi_j>=\delta_{ij} \text{ veya } \delta(\text{i-j}) \tag{3.8}$$

olur (Bransden, 1983; Joachain, 1975). Burada δ_{ij} kronecker deltası, δ(i-j) ise delta dirac fonksiyonudur. Çözmek istediğimiz özdeğer problemi,

$$H\Psi_k = \varepsilon_k \Psi_k \tag{3.9}$$

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 aşağıdaki gibi açılabilir,

$$\Psi_k = \sum_{t=0}^{\infty} \lambda^t \, \psi_k{}^{(t)} \tag{3.10}$$

$$\varepsilon_k = \sum_{t=0}^{\infty} \lambda^t \, E_k{}^{(t)} \tag{3.11}$$

yazılabilir. Buradaki *t* indisi pertürbasyonun mertebesini göstermektedir. Denk. (3.10) ve Denk.(3.11) i Denk.(3.9) a taşırsak ve Denk. (3.6) yı kullanırsak;

$$(H_0 + \lambda H')\left(\psi_k{}^{(0)} + \lambda\psi_k{}^{(1)} + \lambda^2\psi_k{}^{(2)} + \cdots\right) = \left(E_k^{(0)} + \lambda E_k^{(1)} + \lambda^2 E_k^{(2)} + \cdots\right)\left(\psi_k{}^{(0)} + \lambda\psi_k{}^{(1)} + \lambda^2\psi_k{}^{(2)} + \cdots\right) \tag{3.12}$$

elde ederiz. Bu eşitlik ancak λ nın eşit kuvvetlerinin katsayılarının eşitliği ile sağlanabilir. λ nın sıfırıncı mertebesinden,

$$H_0\psi_k{}^{(0)} = E_k^{(0)}\psi_k{}^{(0)} \tag{3.13}$$

yazabiliriz. Burdan Denk.(3.7) ile özdeş olduğundan

$$\psi_k{}^{(0)} = \psi_k, \quad E_k^{(0)} = E_k \tag{3.14}$$

yazılabilir. Sonra λ ın birinci ve ikinci mertebesindeki katsayılardan

$$H_0\psi_k{}^{(1)} + H'\psi_k = E_k\psi_k{}^{(1)} + E_k^{(1)}\psi_k \tag{3.15}$$

$$H_0\psi_k{}^{(2)} + H'\psi_k{}^{(1)} = E_k\psi_k{}^{(2)} + E_k^{(1)}\psi_k{}^{(1)} + E_k^{(2)}\psi_k \tag{3.16}$$

elde ederiz. Bu daha üst mertebeler içinde devam ettirilebilir.

$E_k^{(1)}$ birinci mertibe enerji düzeltmelerini elde etmek için Denk. (3.15) ifadesini soldan ψ_k ile çarpılır ve tüm uzay üzerinden integre edilirse;

$$< \psi_k|H_0 - E_k|\psi_k{}^{(1)} > + < \psi_k|H' - E_k^{(1)}|\psi_k >= 0 \tag{3.17}$$

ifadesini verir. Burada 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.(3.17) de Denk.(3.7) ifadesini kullanılırsa birinci mertebe $E_k^{(1)}$ enerjisi ,

$$E_k^{(1)} =< \psi_k|H'|\psi_k >\equiv H'_{kk} \quad (3.18)$$

elde edilir. Benzer biçimde Denk.(3.16) dan ikinci mertebe $E_k^{(2)}$ enerji düzeltmesi için

$$< \psi_k|H_0 - E_k|\psi_k{}^{(2)} > +< \psi_k|H' - E_k^{(1)}|\psi_k{}^{(1)} > -E_k^{(2)} < \psi_k|\psi_k = 0 \quad (3.19)$$

ifadesinden

$$E_k^{(2)} =< \psi_k|H' - E_k|\psi_k{}^{(1)} > \quad (3.20)$$

elde edilir. $E_k^{(2)}$nin eşdeğer bir ifadesi Denk. (3.15) den çıkartılabilir.

$$E_k^{(2)} = -< \psi_k{}^{(1)}|H_0 - E_k|\psi_k{}^{(1)} > \quad (3.21)$$

$\psi_k{}^{(1)}$ çözümünü elde etmek için önce "pertürbe olmamış" Denk.(3.7) bütün özdeğer ve özfonksiyonları için çözülür. Bilinmeyen $\psi_k{}^{(1)}$ fonksiyonu, pertürbe olmamış özfonksiyonların baz takımı cinsinden aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\psi_k{}^{(1)} = \sum_m a_m^{(1)}\psi_m \quad (3.22)$$

dır. Burada m üzerinden toplam, takımın kesikli kısmı üzerinden bir toplama ve sürekli kısmı üzerinde bir integrasyon anlamına gelir. Denk.(3.15) u Denk.(3.22) ye taşırsak

$$(H_0 - E_k)\sum_m a_m^{(1)}\psi_m + (H' - E_k^{(1)})\psi_k = 0 \quad (3.23)$$

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

$$a_l^{(1)}(E_l - E_k)+< \psi_l|H'|\psi_k > -E_k^{(1)}\delta_{kl} = 0 \quad (3.24)$$

bulunur. Burada $H_0\psi_l = E_l\psi_l$ ile $< \psi_l|\psi_k >= \delta_{kl}$ ifadesi kullanılmıştır. Denk.(3.24) $l = k$ için Denk.(3.18) e indirgenir. $l \neq k$ için

$$a_l^{(1)} = \frac{<\psi_l|H'|\psi_k>}{E_k - E_l} \quad ,l \neq k \quad (3.25)$$

elde ederiz. Denk.(3.15) $\psi_k{}^{(1)}$ in ψ_k boyunca olan bileşeninin katsayısı $a_k^{(1)}$ i vermez. Böylece genellikten herhangi bir şey kaybedilmiş olmaz ve

$$a_k^{(1)} =< \psi_k|\psi_k{}^{(1)} >= 0 \quad (3.26)$$

olması gerektiğini belirlenir. Denk.(3.22) i yeniden,

$$\psi_k{}^{(1)} = \sum_{m\neq k} a_m^{(1)}\psi_m = \sum_{m\neq k}\frac{H'_{mk}}{E_k - E_m}\psi_m \quad (3.27)$$

biçiminde yazabiliriz. Bu sonucu Denk.(3.20) ye taşırsak,

$$E_k^{(2)} = \sum_{m\neq k}\frac{H'_{km}H'_{mk}}{E_k - E_m} = \sum_{m\neq k}\frac{|H'_{km}|^2}{E_k - E_m} \quad (3.28)$$

elde ederiz.

3.3. Kuantum Nokta Yapıda Elektrik Alan Etkisi

Etkin kütle yaklaşımında, *z*- yönünde elektrik alanının varlığında merkezinde safsızlık bulunan, sonlu küresel kuyu içinde sınırlandırılmış bir elektronun için elektronik Hamiltoniyeni etkin kütle altında SI biriminde ,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{e^2}{\varepsilon r} + V_c(r) + |e|Fr\cos\theta \qquad (3.29)$$

dır. Burada m^* elektronun etkin kütlesi, ε ortamın statik dielektrik sabiti e de elektronun yüküdür. $\boldsymbol{F}$ ise *z*-yönünde uygulanan elektrik alan büyüklüğü, $\boldsymbol{r}$ ise elektronun safsızlığa göre konumunu belirleyen yer vektörüdür, $\boldsymbol{\theta}$ ise $\boldsymbol{r}$ yer vektörü ile $\boldsymbol{F}$ elektrik alan arasındaki açı, $\boldsymbol{V_c(r)}$ ise sınırlandırıcı ve harmonik potansiyeli içerip,

$$V_c(r) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\alpha r^2 & r < R \\ V_0 & r \geq R \end{pmatrix} \qquad (3.30)$$

şeklinde kuyu içinde parabolik, dışında ise sabit V_0 seçilebilir. Buradaki R nokta yapının yarıçapı, α ise kuvvet sabiti olup r=R de $\alpha = \frac{2V0}{m^*}$ ifadesi ile verilir. V_0 ise sınırlandırıcı sonlu potansiyel olup, stokometre oranı x göre $V_0 = 0.6(1.155x + 0.37x^2)$ bağıntısıyla belirlenebilir (Adachi, 1994).

Denk.(3.29)'da dördüncü terim diğer terimlerle karşılaştırıldığında nisbeten küçük olacağından pertürbe hamiltoniyen olarak alınabilir ve pertürbasyon metoduyla hesaplanabilir. Bu durumda Denk.(3.29)'u şu şekilde yazabiliriz,

$$H = H_0 + H' \qquad (3.31)$$

burada H_0 pertürbe olmamış hamiltoniyen, H' ise pertürbe hamiltoniyendir.

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{e^2}{\varepsilon r} + V_c(r) \qquad (3.32)$$

ve

$$H' = |e|Fr\cos\theta \qquad (3.33)$$

Pertürbe olmamış Hamiltoniyen H_0 için Shrödinger denklemi;

$$H_0\psi_i^{(0)} = E_i^{(0)}\psi_i^{(0)} \qquad (3.34)$$

ile verilir burada $\psi_i^{(0)}$ ve $E_i^{(0)}$ i. duruma karşılık gelen pertürbe olmamış hamiltoniyenin özfonksiyonu ve özdeğeridir. Hartree-Fock Roothaan yaklaşımında normalize

özfonksiyonların uzaysal kısmı Slater tip orbitallerinin lineer kombinasyonu şeklinde aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$\psi_i^{(0)} = \sum_{k=1}^{\omega} c_{ik}\chi_{q_k}(\zeta_k, \vec{r}) \qquad (3.35)$$

burada i ve q_k sırasıyla atomik orbitaller ve baz setlerinin kuantum sayısıdır. ω baz seti sayısı, c_{ik} açılım katsayısı ve ζ_k baz setlerinin perdeleme sabitidir. χ_{q_k} nın baş yörünge ve manyetik kuantum sayıları sırasıyla n_k , l_k ve m_k dır. Pertürbasyon teorisinde birinci derece enerji düzeltmesi için shördinger denklemi

$$H'\Psi_i^{(0)} = E_S^{(1)}(i)\Psi_i^{(0)} \qquad (3.36)$$

ile verilir. Burada $E_S^{(1)}(i)$ *i*. durum için enerji düzeltmesidir ve bu Stark enerjisi olarak adlandırılır. Denk.(3.33) ve Denk.(3.35), Denk.(3.36) da kullanıldığında uyarılmış durumlar için birinci derece Stark enerji düzeltme terimi,

$$E_s^{(1)}(i) = |e|F\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\sum_{k}^{\omega}\sum_{k'}^{\omega'} c^*_{i\,n_k l_k m_k} c_{i n'_k l'_k m'_k} \sum_{L_{min}}^{L_{max}} {}^{(2)}\langle l_k m_k | l'_k m'_k | LM\rangle \times \left\{ Q^{r<R}_{n_k+n'_k,n}\left(\zeta_{\boldsymbol{k}}\zeta'_{\boldsymbol{k}}, R\right) + Q^{r>R}_{n_k+n'_k,n}\left(\zeta_{\boldsymbol{k}}\zeta'_{\boldsymbol{k}}, R\right)\right\} \qquad (3.37)$$

ile verilir. Burada $L_{min} = max\{|l-l'|, |m-m'|\}$, $L_{max}=l+l'$, $<lm|l'm'|LM>$, $L \geq M$ ve $M=|m-m'|$ dır. Ayrıca burada ,

$$Q_n^{r<R}(\alpha, R) = \int_0^R r^n e^{-\alpha r}\, dr \qquad (3.38a)$$

$$Q_n^{r>R}(\alpha, R) = \int_R^\infty r^n e^{-\alpha r}\, dr \qquad (3.39b)$$

olup, incomplette gamma integralleridir (Arfken, 2013).

Paritenin korunumundan dolayı dejenere olmayan taban durum için birinci derece enerji düzeltmesi sıfırdır.

$$E_S^{(1)}(1s) = |e|F\left\langle \psi_{100}^{(0)}|r\cos\theta|\psi_{100}^{(0)}\right\rangle = 0 \qquad (3.40)$$

Diğer taraftan 1s taban durumunu ikinci dereceden bir Stark düzeltmesine sahiptir. Buda aşağıdaki şekilde bulunur.

$$E_S^{(2)}(1s) = e^2F^2\sum_{n>1}\frac{\left|\left\langle \psi_{np}^{(0)}(\vec{r})|r\cos\theta|\psi_{100}^{(0)}(\vec{r})\right\rangle\right|^2}{E_{100}^{(0)} - E_{np}^{(0)}} \qquad (3.41)$$

Uyarılmış $E_{nl}^{(1)}(i)$ seviyesine *F* dış elektrik alandan gelecek birinci mertebe Stark enerji düzeltme terimi ise

$$E_{nl}^{(1)}(i) = |e|F\sqrt{\frac{4\pi}{3}}\sum_{k}^{\omega}\sum_{k'}^{\omega'} c_{i\,n_k l_k m_k}^{*} c_{i n_k' l_k' m_k'} \sum_{L_{min}}^{L_{max}} {}^{(2)}\langle l_k m_k | l_k' m_k' | LM\rangle\, x$$
$$\times \left\{ Q_{n_k+n_{k,}'n}^{r<R}\left(\zeta_{k}\,\zeta_{k}^{'}, R\right) + Q_{n_k+n_{k,}'n}^{r>R}\left(\zeta_{k}\,\zeta_{k}^{'}, R\right)\right\} \tag{3.42}$$

bağıntısı ile verilir.

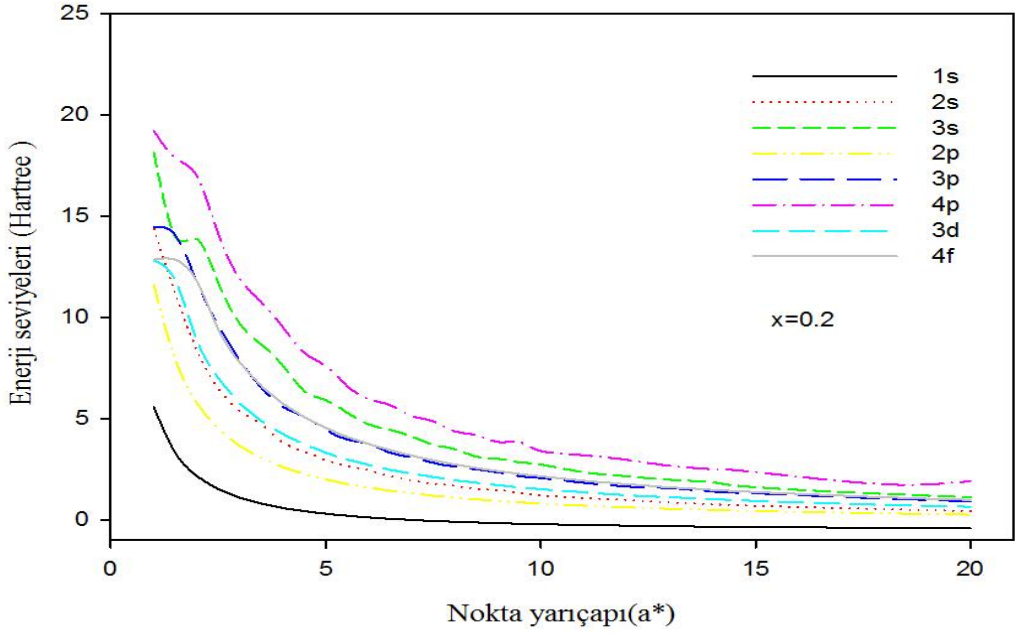
4. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

Merkezinde safsızlık bulunan parabolik potansiyelli sonlu sınırlandırıcı potansiyel altında tek elektronlu GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ yapısının enerji özdeğerleri ve öz fonksiyonları Bölüm 3.1 de bahsettiğimiz yöntemle hesaplandı. Hesaplamalarımızda atomik birimleri kullanıldı. Atomik orbitaller STO ların lineer birleşiminden oluşturuldu ve her bir atomik orbital kendi tipindeki STO lardan oluşturuldu. Atomik orbitallerinin dikleştirme işlemi Gram- Schmidt yöntemiyle yapıldı. Aynı atomik orbitallerin (1s, 2s, ...) ζ ları ortak alındı. GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ yapısının taban ve bazı uyarılmış durum enerjileri nokta yarıçapına ve katkılanma (stokometre) oranına bağlı olarak hesaplandı. GaAs için etkin Bohr yarıçapı $a^* = 100\overset{0}{A}$, etkin Rydberg enerjisi R_y=5.72 meV dır. Malzeme parametreleri olarak kuyu içinde GaAs ın kuyu dışında ise AlGaAs'ın parametreleri alındı. Bu materyal parametreleri $m_{GaAs} = 0.0665m_0$, $\varepsilon_{GaAs} = 13.18$ ve $m_{AlGaAs} = 0.0665 + 0.0835x$, $\varepsilon_{AlGaAs} = 13.18 - 3.12x$ olarak alındı (Adachi, 1994). Burada m_0 serbest elektron kütlesi ve x katkılanma oranıdır. Potansiyel engeli yüksekliği ise GaAs ve AlGaAs enerji bant yapılarını birbirlerine göre durumunu düzenleyen katkılanma oranı x bağlı olarak $V = 0.6(1.155x + 0.37x^2)$ eV alınmıştır (Adachi, 1994). Ayrıca basitlik olması bakımından GaAs ve AlGaAs nin içerisinde elektronların etkin kütlesini sırasıyla m_1 ve m_2, dielektrik sabitlerini de ε_1 ve ε_2 aldık.

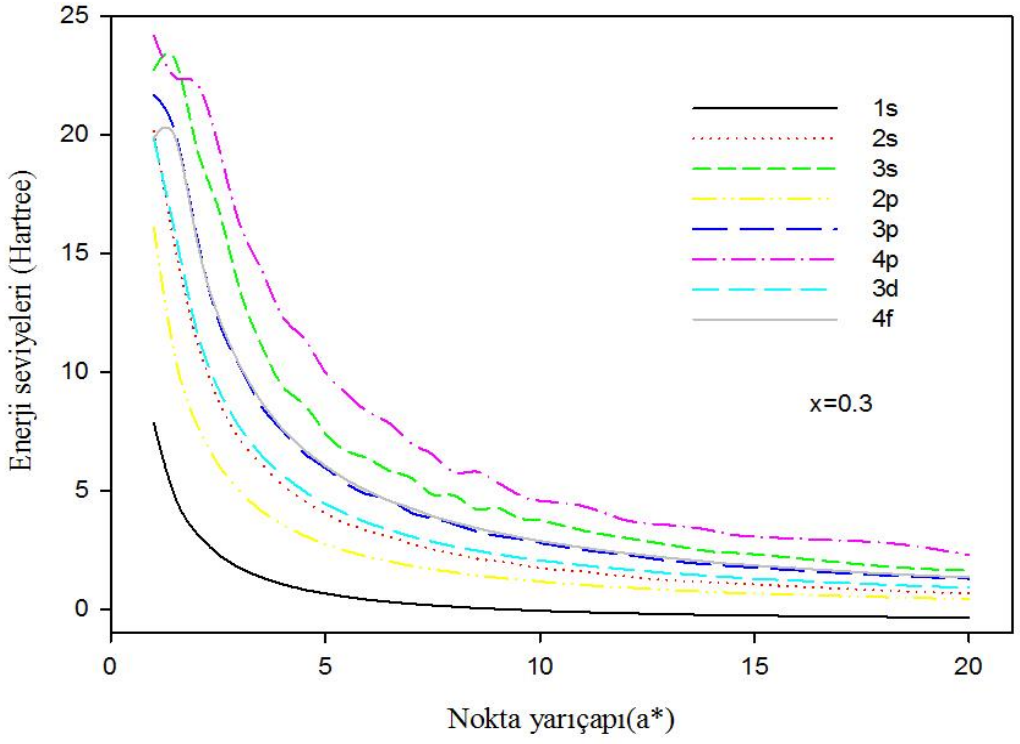
Sınırda bariyer yüksekliği ile parabolik potansiyel arasındaki sürekliliği sağlamak için parabolik poatansiyel parametresi $\alpha = \frac{2.V_0}{m^* R^2}$ alındı. Hesaplamalarımızda üç farklı katkılanma oranı (stokometre) x'in *0.2, 0.3* ve *0.4* değerleri alındı. Dış elektrik alandan dolayı enerji seviyelerine gelen katkı pertürbasyon yöntemiyle hesaplandı. Dış elektrik alanı için *50, 100* ve *150 kV/cm* değerleri alındı.

Denk. (3.34) da verilen pertürbe olmamış Schrödinger denkleminin olası çözümlerini veren Denk. (3.8) 'de anlatılan kuantum genetik algoritma yöntemi ile belirlendi. Belirlenen bu dalga fonksiyonları sınır şartı sağladıktan sonra Grant-Smith yöntemiyle ortanormalize edildi. Bu dalga fonksiyonları kullanılarak pertürbe olmamış enerji seviyeleri belirlendi. Bu pertürbe olmamış dalga fonksiyonları ve enerji seviyeleri kullanılarak Bölüm 3.2 de bahsedilen zamandan bağımsız pertürbasyon yöntemiyle enerji seviyelerine elektrik alandan gelen katkılar farklı sınırlandırıcı potansiyel ve farklı elektrik alan değerleri için dot yarıçapına göre hesaplanmıştır.

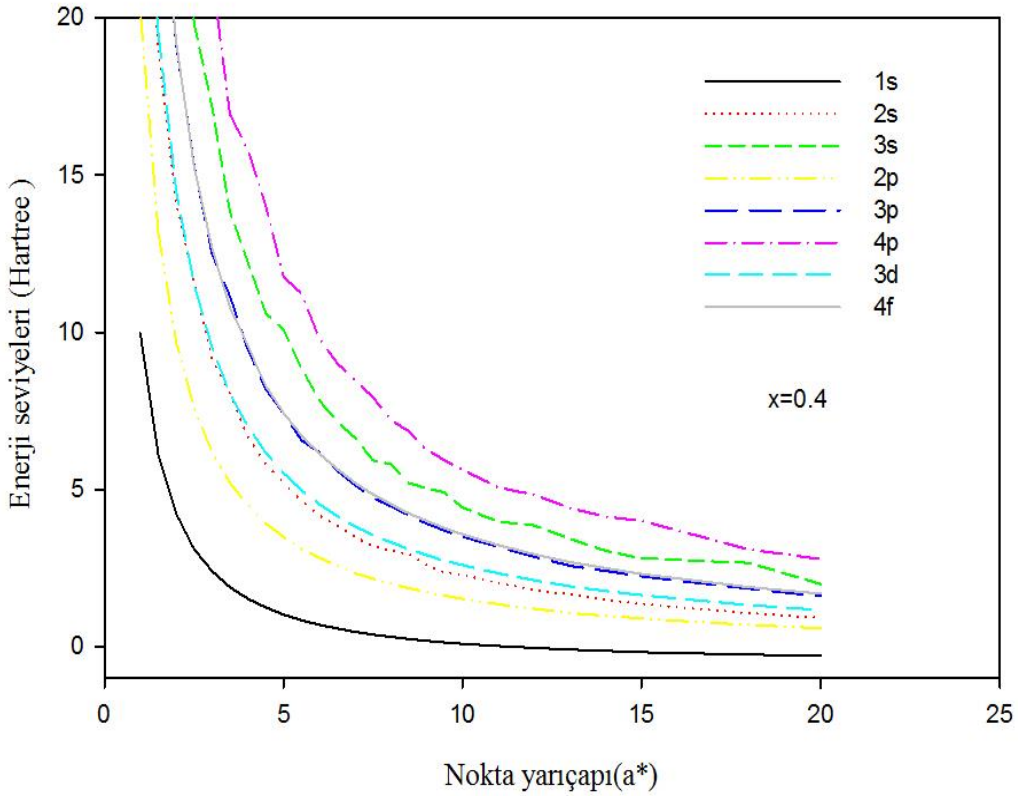
Şekil 4.1, Şekil 4.2 ve Şekil 4.3. de sırasıyla *x=0.2, x=0.3* ve *x=0.4* için merkezinde safsızlık bulunduran kuantum nokta yapısının taban ve bazı uyarılmış durumların enerjilerinin nokta yarı çapına bağlı değişim grafikleri verilmiştir. Ayrıca bu değerler için enerji değerleri de Tablo 4.1, Tablo 4.2 ve Tablo 4.3 de verilmiştir. Bu şekillerden de görüleceği gibi nokta yarıçapı artıkça enerji düzeyleri azalmakta ve belli bir dot yarıçapından sonra sabit kalmaktadır. Güçlü sınırlandırma bölgesinde enerji seviyeleri arasındaki fark artarken, zayıf sınırlandırma bölgesinde enerji seviyeleri arasındaki fark azalmakta ve nerdeyse sabit kalmaktadır. Güçlü sınırlandırma bölgesinde, yani safsızlığa yakın bölgelerde elektronun kinetik enerjisi artar çekim potansiyel enerjisi azalır ve bu da enerji seviyeleri arasındaki farkı arttırır. Tablolardan görüleceği gibi katkılanma (stokometre) oranı artıkça enerji seviyeleri dahada yukarıya çıkmaktadır. Stokometre oranını artırmakla $\alpha = \frac{2V_0}{m^* R^2}$ bağıntısına göre V_0 arttığı için parabolik potansiyelin değerini artırmış oluruz. Bu da enerji seviyelerini yukarıya kaydırır. *x=0.2* için taban durum enerjisi dot yarıçapının büyük değerlerinde *(r=20a*) -0.4042 H* gitmektedirki bu da hidrojen atomunun taban durumuna (-0.5 H) yaklaşmaktadır. Benzer şekilde taban durum enerjisi aynı dot yarı çapı için *x=0.3* değerinde *-0.3504 H* ve *x=0.4* için ise *-0.2933 H* gitmektedir. Hidrojen atomuyla bu değerler arasındaki fark sınırlandırıcı potansiyelden, dolayısıyla parabolik potansiyelden kaynaklanmaktadır.



Şekil 4.1: x=0.2 için sonlu küresel parabolik kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumların enerjilerinin nokta yarıçapına göre değişim



Şekil 4.2: x=0.3 için sonlu küresel parabolik kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumların enerjilerinin nokta yarıçapına göre değişim



Şekil 4.3: x=0.4 için sonlu küresel parabolik kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumların enerjilerinin nokta yarıçapına göre değişim.

Tablo 4.1: Kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumlar için stokometre oranı *x=0.2* değerinde hesaplanan enerji değerleri. Tüm değerler atomik birimde verilmiştir.

R	1s	2s	3s	2p	3p	4p	3d	4f
1.00	5.5634	14.3729	18.1312	11.5945	14.4492	19.2114	12.8164	12.8493
1.50	3.3113	11.1482	13.9778	7.9010	14.0631	17.8715	11.8052	12.8493
2.00	2.1763	8.3680	13.8787	5.7724	11.7551	16.9854	8.8777	11.7962
2.50	1.5229	6.4871	11.6890	4.4946	9.6069	14.1105	7.0085	9.4026
3.00	1.1052	5.3733	9.6883	3.6526	7.8885	11.9027	5.7677	7.7776
3.50	0.8134	4.7160	8.6578	3.0693	6.5229	10.7391	4.8931	6.6207
4.00	0.5966	3.8148	7.6170	2.6109	5.5885	9.5186	4.2402	5.7574
4.50	0.4397	3.3793	6.3684	2.2684	5.0798	8.2446	3.7399	5.0817
5.00	0.3092	2.9525	5.9068	2.0020	4.4434	7.6001	3.3200	4.5487
5.50	0.2110	2.6633	5.2892	1.7796	3.9664	6.6085	2.9847	4.1048
6.00	0.1265	2.4463	4.7103	1.5978	3.7495	5.9470	2.7177	3.7543
6.50	0.0593	2.1610	4.4439	1.4394	3.3250	5.6700	2.4774	3.4476
7.00	3.5678×10^{-3}	1.9474	4.1229	1.3138	3.0840	5.1307	2.2880	3.1839
7.50	-0.0459	1.7910	3.7114	1.1962	2.8177	4.8663	2.1169	2.9456
8.00	-0.0859	1.6817	3.4915	1.1065	2.6248	4.3745	1.9611	2.7478
8.50	-0.1217	1.5361	3.1295	1.0202	2.4971	4.1889	1.8360	2.5718
9.00	-0.1529	1.4772	3.0151	0.9421	2.3524	3.8469	1.7167	2.4201
9.50	-0.1800	1.3436	2.8502	0.8712	2.1608	3.8468	1.6077	2.2789
10.0	-0.2050	1.2232	2.7390	0.8156	2.0700	3.4014	1.5196	2.1596
11.0	-0.2455	1.0803	2.3576	0.7084	1.8319	3.1888	1.3590	1.9433
12.0	-0.2773	0.9811	2.1536	0.6247	1.6490	2.9628	1.2239	1.7690
13.0	-0.3044	0.8677	1.9829	0.5536	1.5676	2.6701	1.1172	1.6181
14.0	-0.3263	0.7770	1.8579	0.4950	1.3993	2.5079	1.0348	1.4891
15.0	-0.3449	0.6965	1.6102	0.4414	1.3077	2.3581	0.9379	1.3797
18.0	-0.3853	0.5305	1.2819	0.3249	1.0523	1.7530	0.7479	1.1219
20.0	-0.4042	0.4446	1.1253	0.2672	0.9267	1.9134	0.6545	0.9920

Tablo 4.2: Kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumlar için stokometre oranı *x=0.3* değerinde hesaplanan enerji değerleri. Tüm değerler atomik birimde verilmiştir.

R	1s	2s	3s	2p	3p	4p	3d	4f
1.0	7.8509	20.1652	22.7390	16.1048	21.6837	24.1819	19.8431	19.8811
1.50	4.7197	15.2078	23.1610	10.6044	20.0853	22.4235	15.8448	19.8811
2.00	3.2080	11.3491	19.4809	7.7992	15.7787	22.1818	11.7653	15.6215
2.50	2.3188	8.8204	16.9488	6.0972	12.2023	19.5777	9.3060	12.4054
3.00	1.7471	7.1423	13.4855	4.9826	10.2292	16.2575	7.6751	10.3043
3.50	1.3563	6.1316	11.1739	4.1522	8.5654	14.3466	6.5135	8.7648
4.00	1.0622	5.2265	9.3928	3.5771	7.5243	12.3471	5.6662	7.6092
4.50	0.8347	4.5848	8.6300	3.1074	6.5797	11.4072	4.9828	6.7343
5.00	0.6654	4.0423	7.4157	2.7463	5.9535	9.9740	4.4441	6.0433
5.50	0.5244	3.6096	6.6555	2.4512	5.2848	9.0716	4.0034	5.4445
6.00	0.4074	3.2991	6.3389	2.2093	4.8336	8.2983	3.6330	4.9724
6.50	0.3131	3.0517	5.8264	2.0052	4.6091	7.8265	3.3464	4.5645
7.00	0.2357	2.7539	5.5303	1.8293	4.0673	6.9986	3.0645	4.2602
7.50	0.1681	2.5308	4.8357	1.6810	3.8476	6.5116	2.8388	3.9233
8.00	0.1105	2.3365	4.8010	1.5584	3.5846	5.7765	2.6470	3.6667
8.50	0.0578	2.1356	4.2289	1.4347	3.2910	5.8039	2.4793	3.4379
9.00	0.0153	2.0276	4.2653	1.3338	3.0924	5.3509	2.3145	3.2331
9.50	-0.0257	1.8868	3.8339	1.2487	2.9710	4.8361	2.1846	3.0481
10.00	-0.0597	1.7283	3.7425	1.1698	2.8038	4.5700	2.0614	2.8855
11.00	-0.1171	1.5951	3.3164	1.0244	2.4963	4.3461	1.8487	2.6031
12.00	-0.1641	1.3835	2.9995	0.9158	2.2916	3.7517	1.6759	2.3676
13.00	-0.2036	1.2295	2.7140	0.8157	2.0380	3.5477	1.5216	2.1688
14.00	-0.2348	1.1389	2.4253	0.7353	1.8778	3.3215	1.4013	1.9928
15.00	-0.2620	1.0533	2.3122	0.6641	1.7481	3.0510	1.2869	1.8500
18.00	-0.3225	0.7877	1.8061	0.5067	1.4257	2.8026	1.0370	1.5094
20.00	-0.3504	0.6801	1.6343	0.4259	1.2963	2.2821	0.9117	1.3461

Tablo 4.3: Kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumlar için stokometre oranı *x=0.4* değerinde hesaplanan enerji değerleri. Tüm değerler atomik birimde verilmiştir.

R	1s	2s	3s	2p	3p	4p	3d	4f
1.00	9.9596	28.5053	36.5771	20.1886	28.6455	34.3988	27.0681	27.1116
1.50	6.1097	18.9308	30.8793	13.1507	25.8521	29.1560	19.5235	25.7168
2.00	4.2297	14.1257	26.2967	9.6911	19.1595	28.7551	14.4931	19.2368
2.50	3.1004	11.6024	19.8428	7.6008	15.3274	25.9273	11.5283	15.2910
3.00	2.4006	9.1342	17.1691	6.1861	12.4805	21.4053	9.5103	12.6752
3.50	1.8849	8.0511	13.8199	5.2123	11.1471	16.9330	8.0374	10.7903
4.00	1.5236	6.6747	12.2383	4.4960	9.4451	15.7912	7.0145	9.5795
4.50	1.2408	5.8050	10.6076	3.9245	8.1935	14.0302	6.1664	8.3036
5.00	1.0168	5.2195	10.0826	3.4836	7.4165	11.7647	5.5295	7.4372
5.50	0.8325	4.6311	8.8400	3.1005	6.5598	11.2273	4.9790	6.7159
6.00	0.6944	4.1803	7.8275	2.8156	6.1875	9.7951	4.5312	6.1351
6.50	0.5729	3.8533	7.1579	2.5585	5.5995	9.0150	4.1523	5.6527
7.00	0.4698	3.4958	6.6387	2.3308	5.1402	8.4726	3.8270	5.2074
7.50	0.3809	3.1785	5.9268	2.1540	4.7372	7.9313	3.5509	4.8433
8.00	0.3055	3.0567	5.8051	1.9894	4.4702	7.2048	3.3047	4.5351
8.50	0.2405	2.9270	5.2036	1.8472	4.1891	6.8510	3.0938	4.2387
9.00	0.1850	2.5825	5.0430	1.7238	3.9150	6.2606	2.8985	4.0010
9.50	0.1309	2.3601	4.9075	1.6115	3.6891	5.9296	2.7262	3.7752
10.00	0.0894	2.2762	4.4240	1.5095	3.4972	5.6321	2.5818	3.5734
11.00	0.0137	2.0161	3.9836	1.3371	3.1618	5.0674	2.3194	3.2245
12.00	-0.0444	1.7891	3.8590	1.1945	2.8576	4.8340	2.1029	2.9322
13.00	-0.0981	1.6609	3.4270	1.0683	2.5608	4.4091	1.9102	2.6833
14.00	-0.1404	1.4776	3.0404	0.9709	2.4012	4.1365	1.7606	2.4940
15.00	-0.1762	1.3525	2.8046	0.8851	2.2286	4.0070	1.6273	2.3041
18.00	-0.2557	1.0544	2.6543	0.6823	1.8343	3.0823	1.3166	1.8876
20.00	-0.2933	0.9049	1.9817	0.5814	1.5924	2.7737	1.1621	1.6802

Şekil 4.4 den Şekil 4.9 a kadar olan grafiklerde stokometre oranı *x=0.2* için ve elektrik alanın *50,100* ve *150 kV/cm* değerleri için nokta yapının taban ve bazı uyarılmışenerji seviyelerine Stark enerji düzeltme teriminin nokta yarıçapına göre değişim grafikleri çizilmiştir.

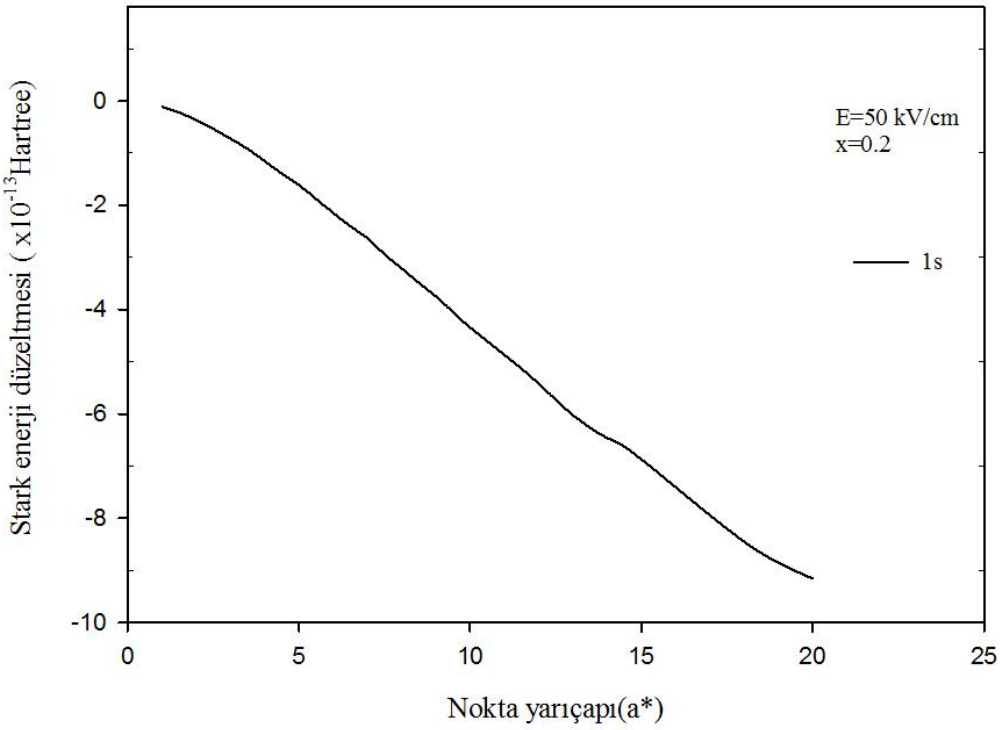
Uyarılmış durumlar 2p,3d ve 4f için Stark enerji düzeltme terimi nokta yarıçapı arttıkça artmaktadır. Dışardan uygulanan elektrik alan değeri arttıkçada Stark enerji düzeltme terimi artmaktadır. Stark enerji düzeltme teriminden uyarılmış durumlarda 3d'ye en fazla katkı gelirken, 4f seviyesine en az katkı gelmektedir. Uyarılmış durumlara gelen Stark enerji düzeltme teriminin değeri ~$10^{-6}H$ mertebesindedir.

Şekil 4.10 dan Şekil 4.15 e kadar olan grafiklerde stokometre oranı x=0.3 için ve elektrik alanın 50-100-150 kV/cm değerleri için nokta yapının taban ve bazı uyarılmış enerji seviyelerine Stark enerji düzeltme teriminin nokta yarıçapına göre değişim grafikleri çizilmiştir. Bu şekillerden görüleceği gibi taban durumuna gelen ikinci mertebe Stark enerji düzeltmesi dot yarıçapı arttıkça negatif yönde artmaktadır. Taban duruma ikinci mertebeden katkılar geldiği için çok küçük katkı gelmektedir.

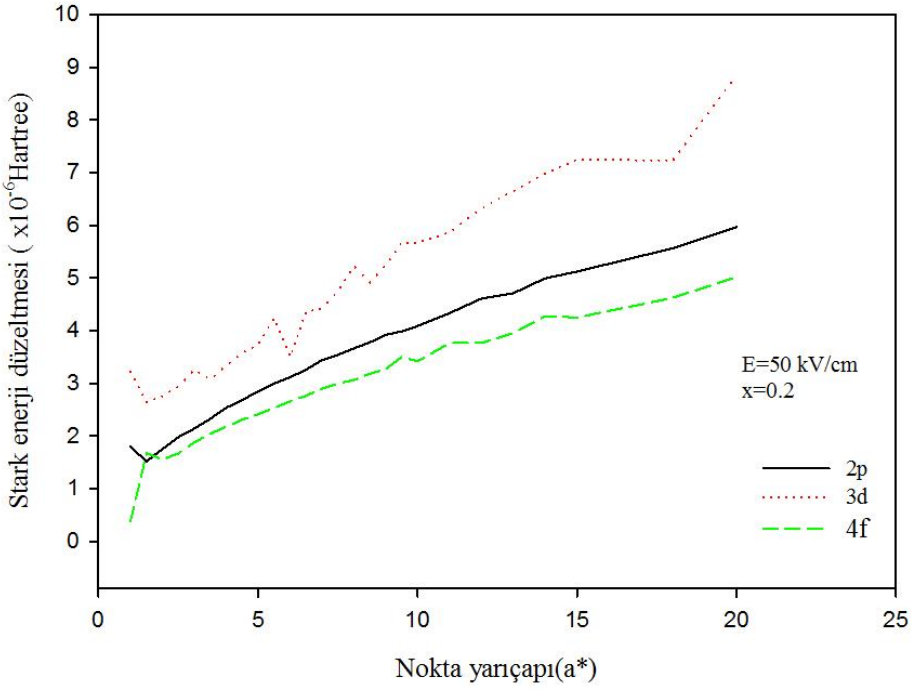
Şekil 4.16 ile Şekil 4.21' e kadar olan grafiklerde stokometre oranı x=0.4 için ve elektrik alanın 50-100-150 kV/cm değerleri için nokta yapının taban ve bazı uyarılmış enerji seviyelerine Stark enerji düzeltme teriminin nokta yarıçapına göre değişim grafikleri çizilmiştir.

Bu şekillerden görüleceği gibi taban durumuna gelen ikinci mertebe Stark enerji düzeltmesi dot yarıçapı arttıkça negatif yönde artmaktadır. Ama çok küçük bir katkı gelmektedir.

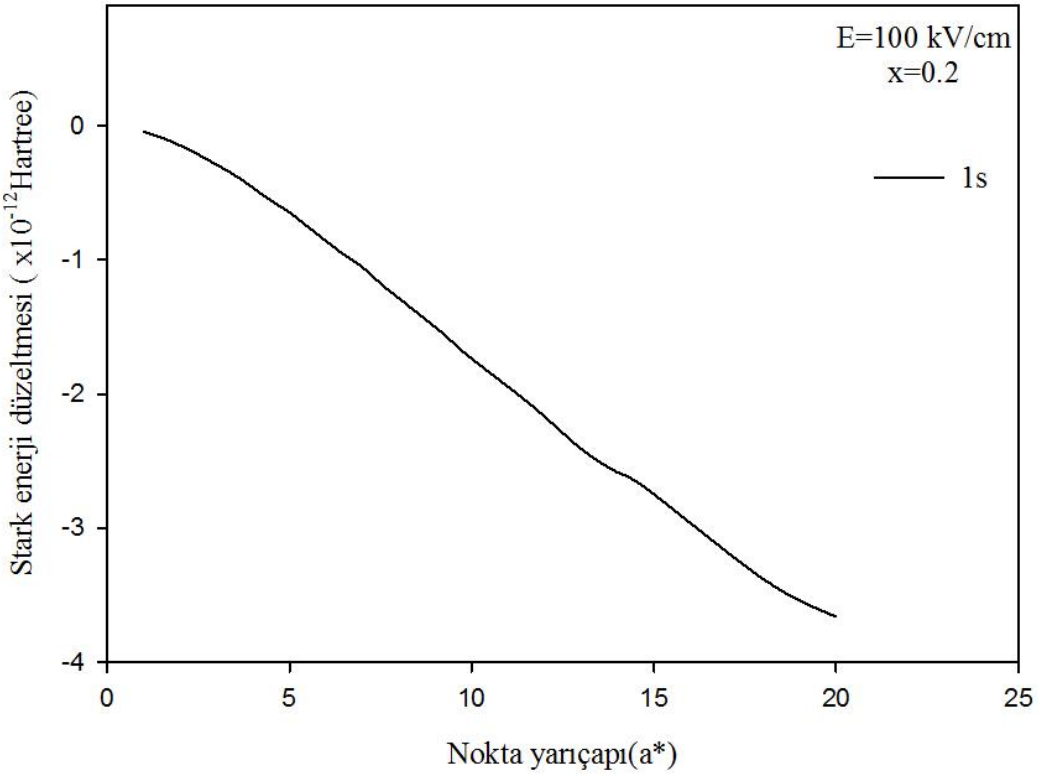
Farklı sınırlandırıcı potansiyellerde uyarılmış durumlara gelen stak enerji düzeltmesi kırmızı ötesi bölgeye düşmektedir ($\lambda \sim 10^{-4}m$).



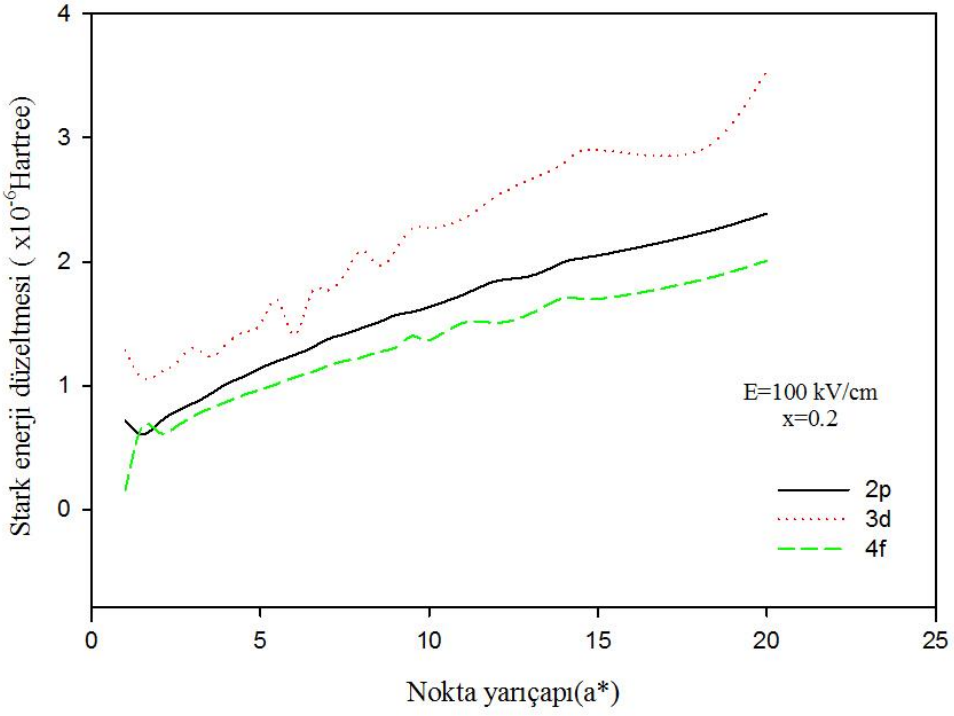
Şekil 4.4: Taban durum (1s) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



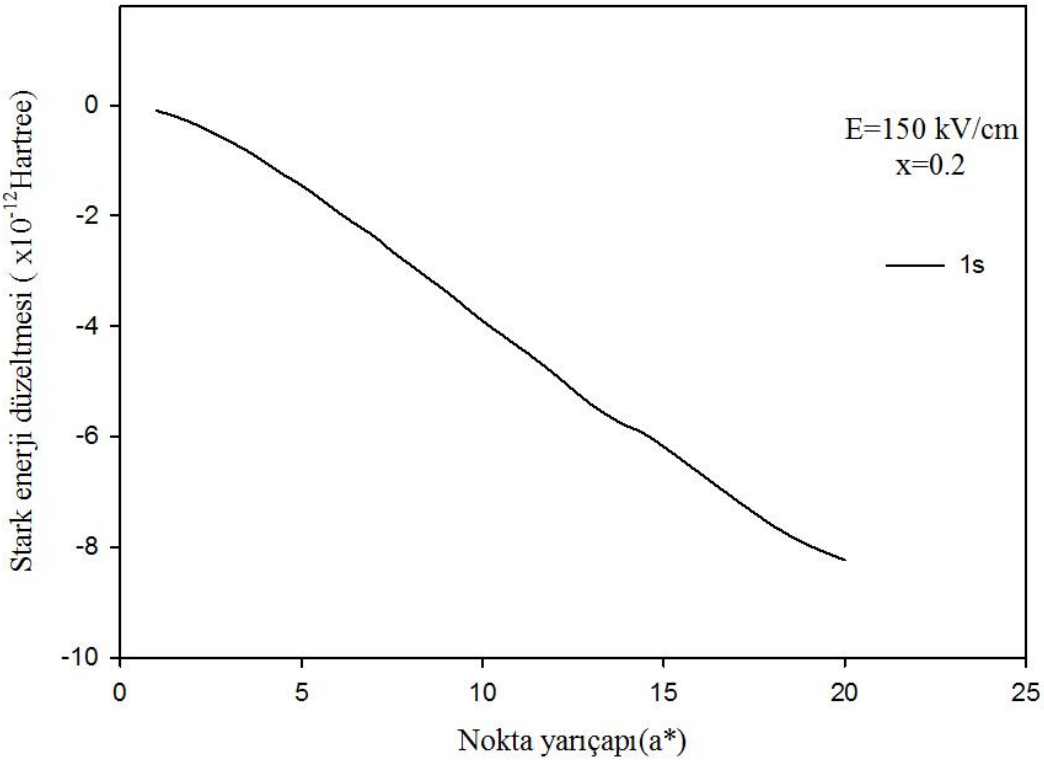
Şekil 4.5: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, 4f,) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



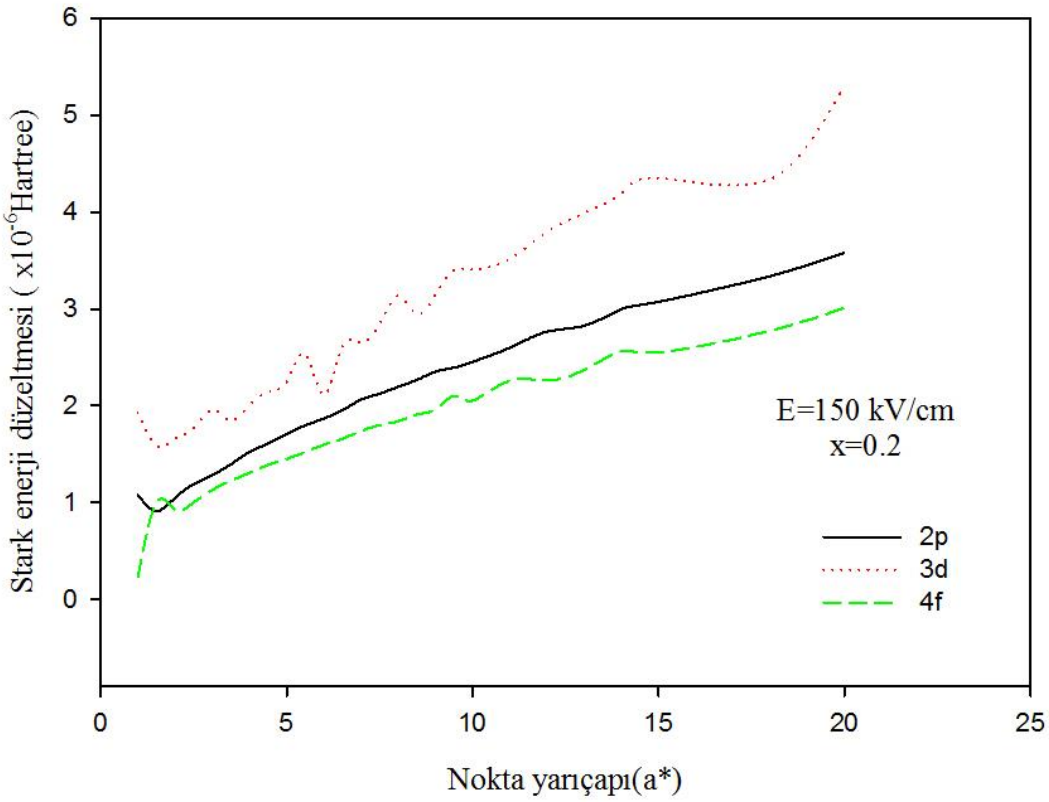
Şekil 4.6: Taban durum (1s) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



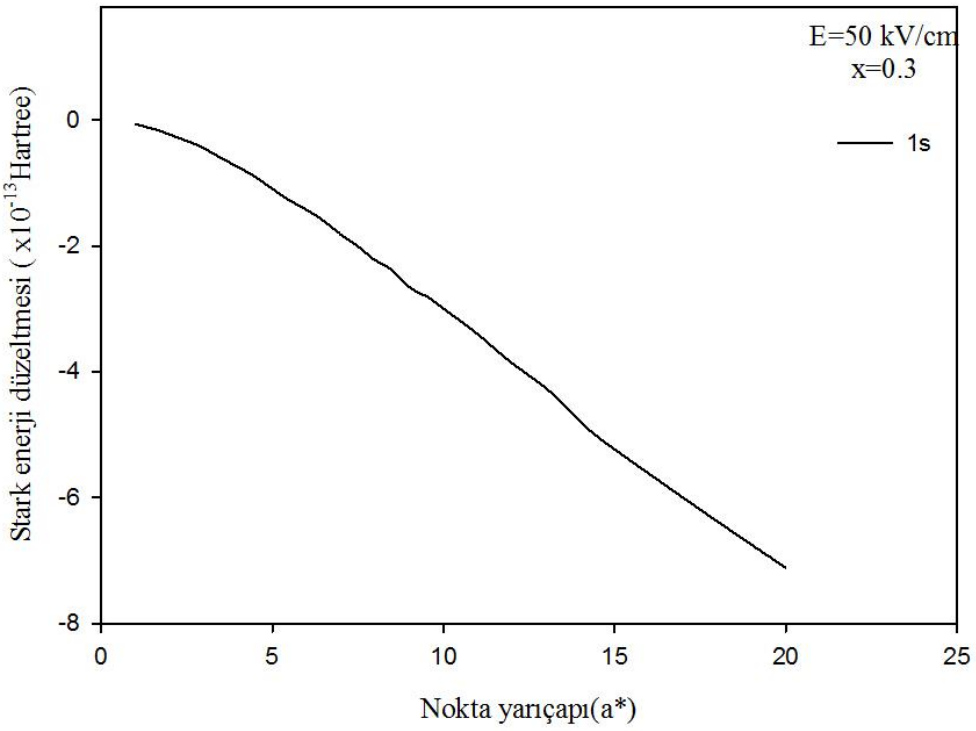
Şekil 4.7: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, ve 4f) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



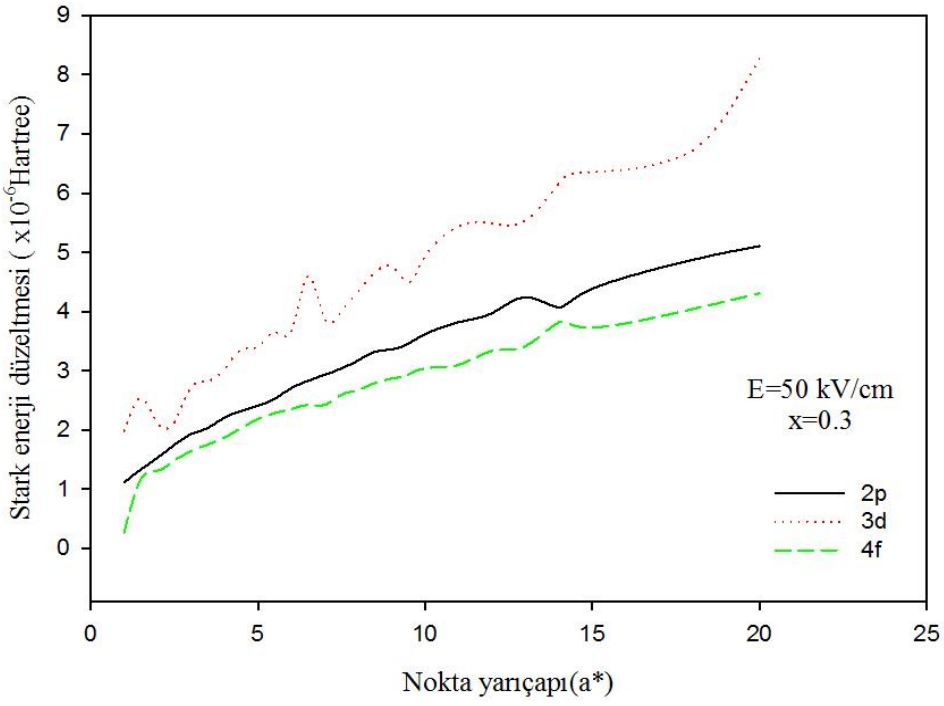
Şekil 4.8: Taban durum (1s) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



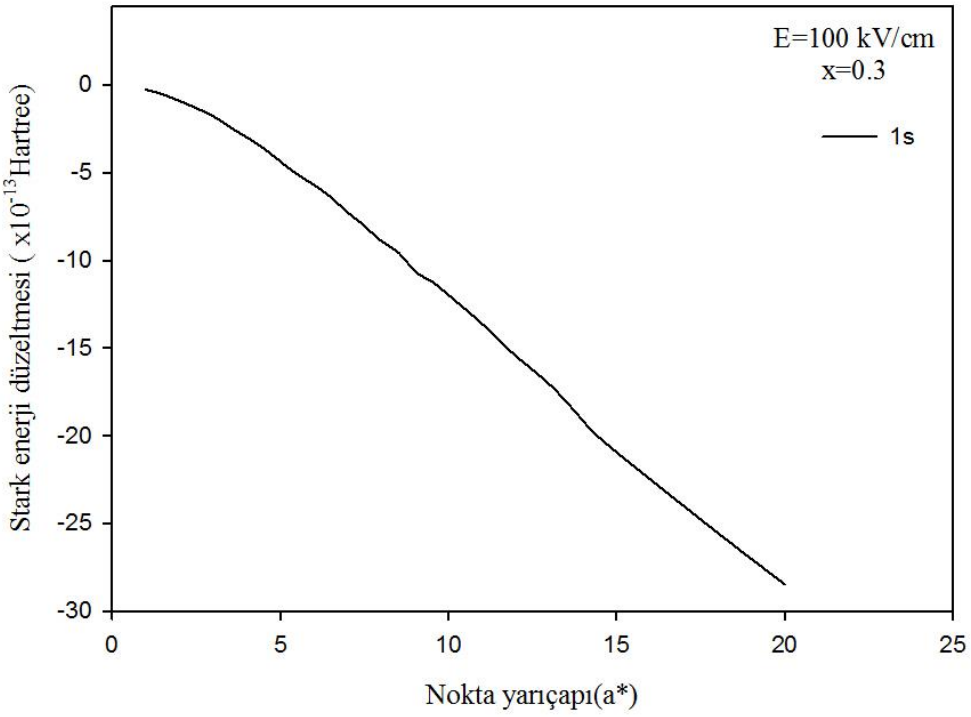
Şekil 4.9: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, 4f,) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



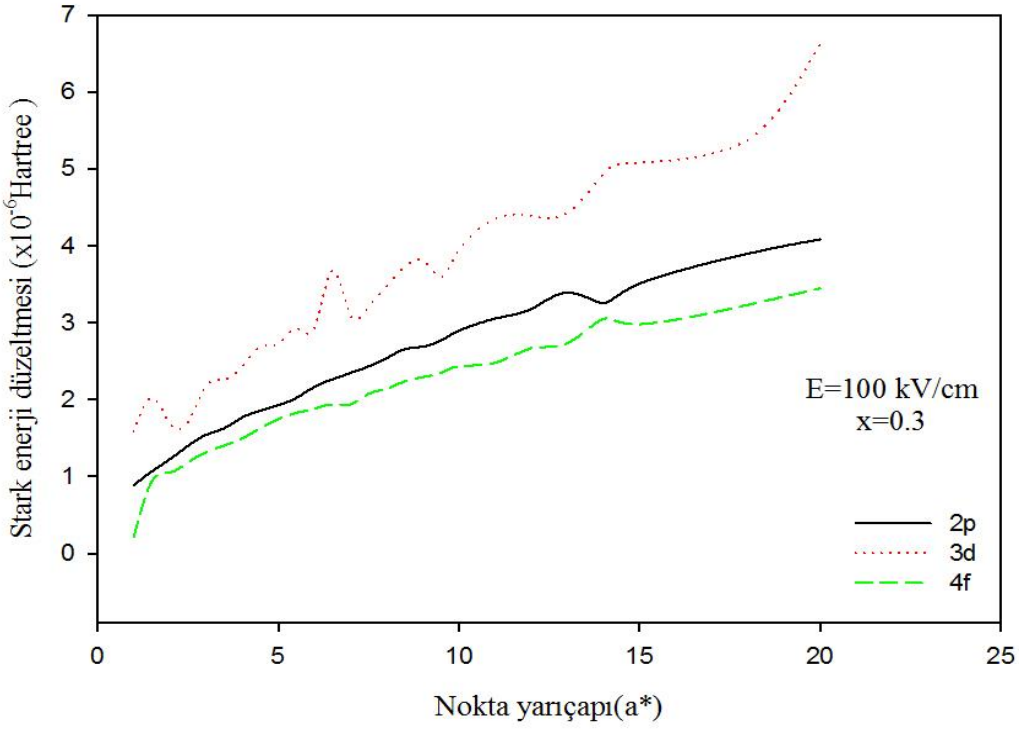
Şekil 4.10: Taban durum (1s) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



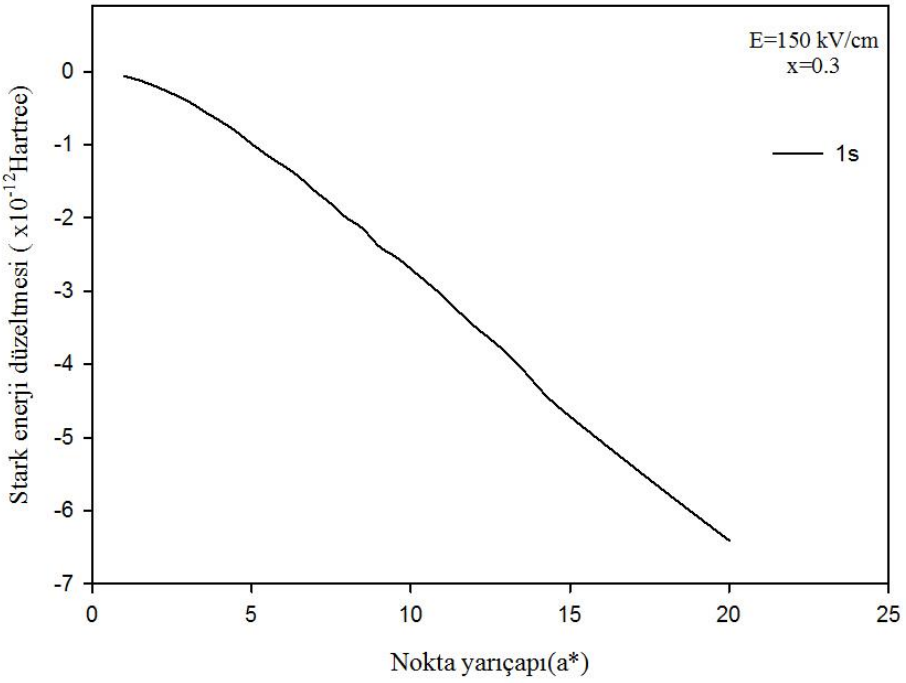
Şekil 4.11: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, 4f,) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



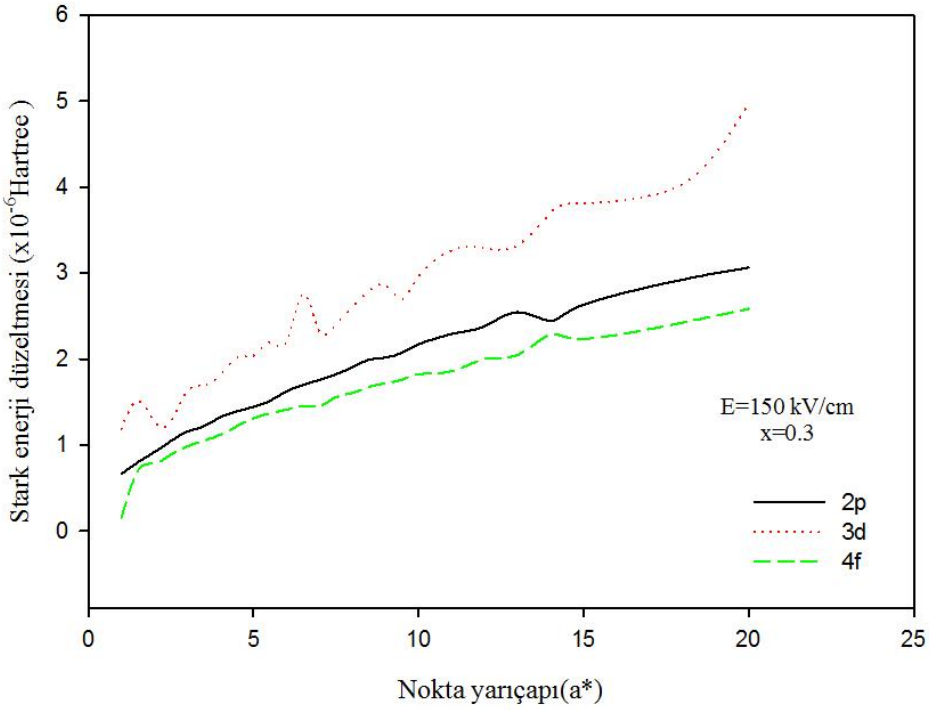
Şekil 4.12: Taban durum (1s) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



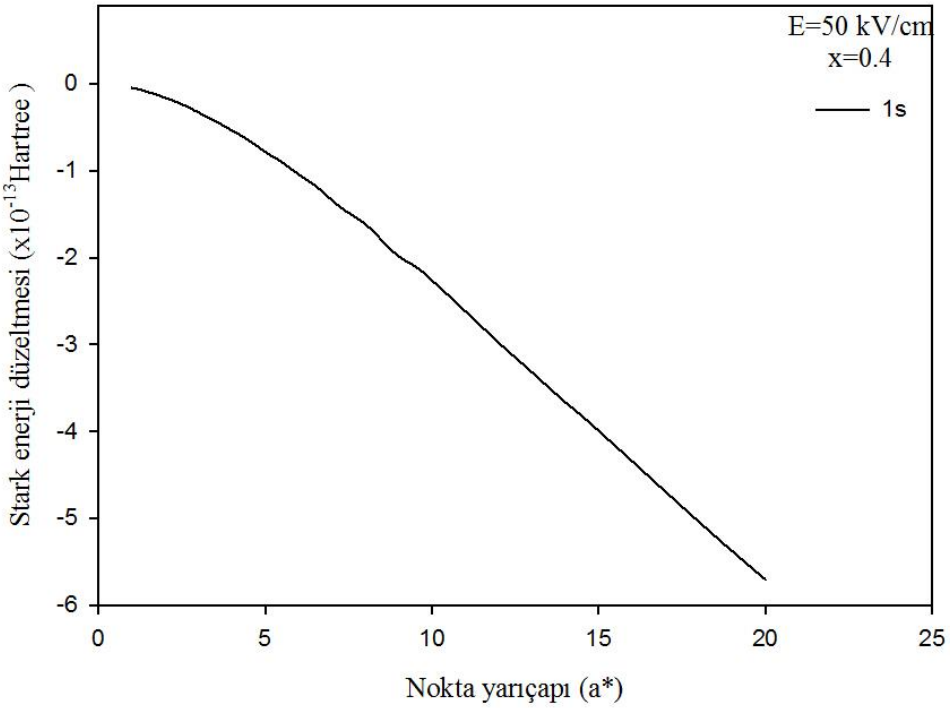
Şekil 4.13: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, 4f,) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



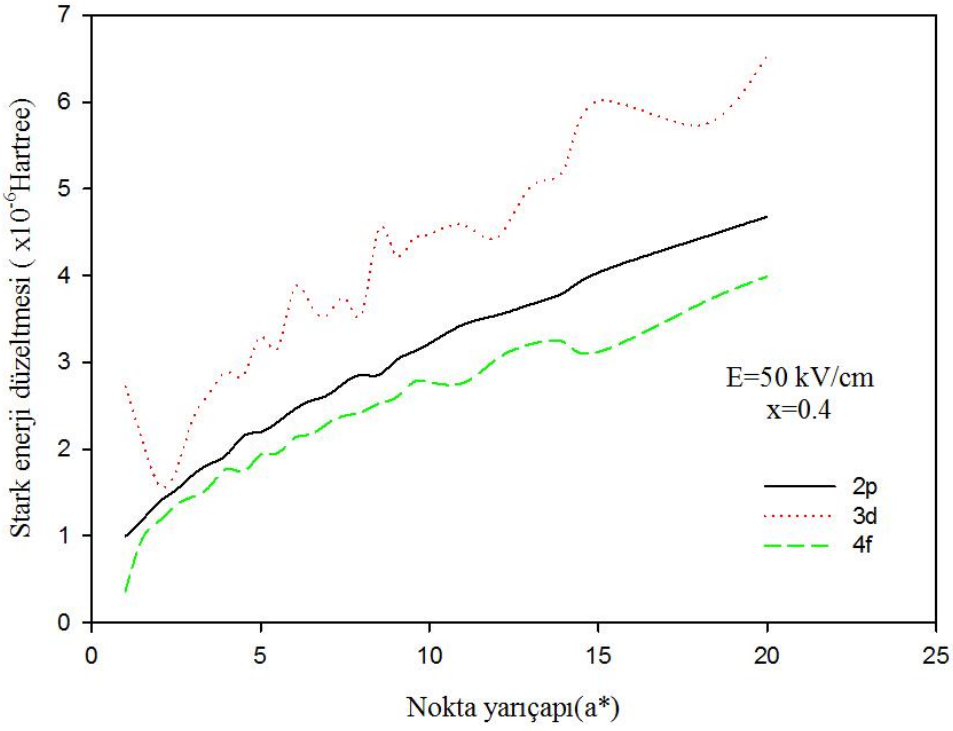
Şekil 4.14: Taban durum (1s) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



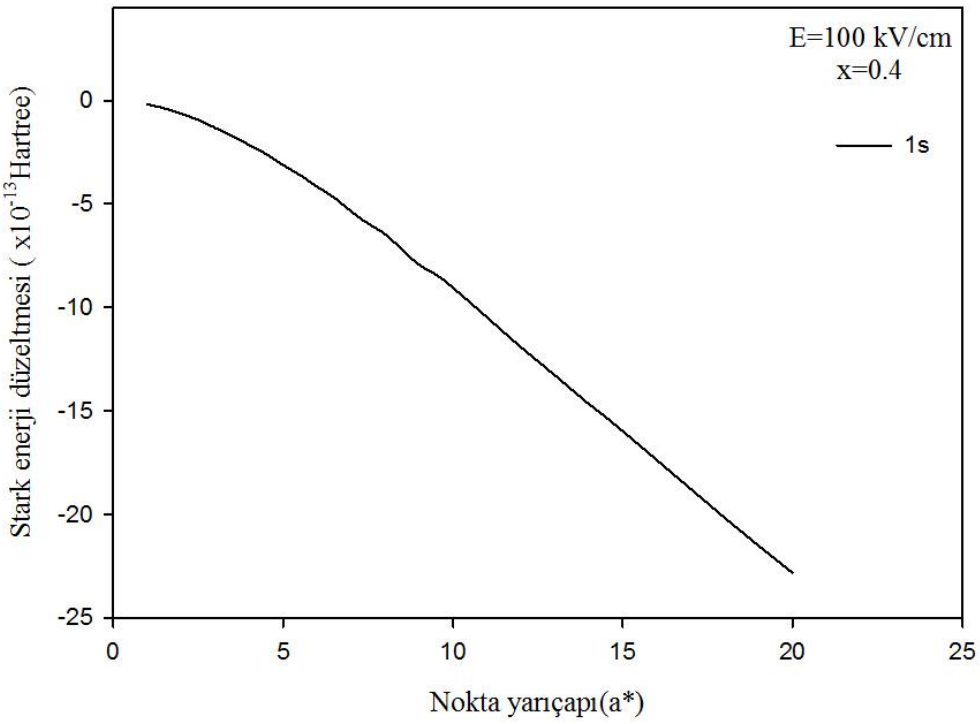
Şekil 4.15: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, 4f,) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



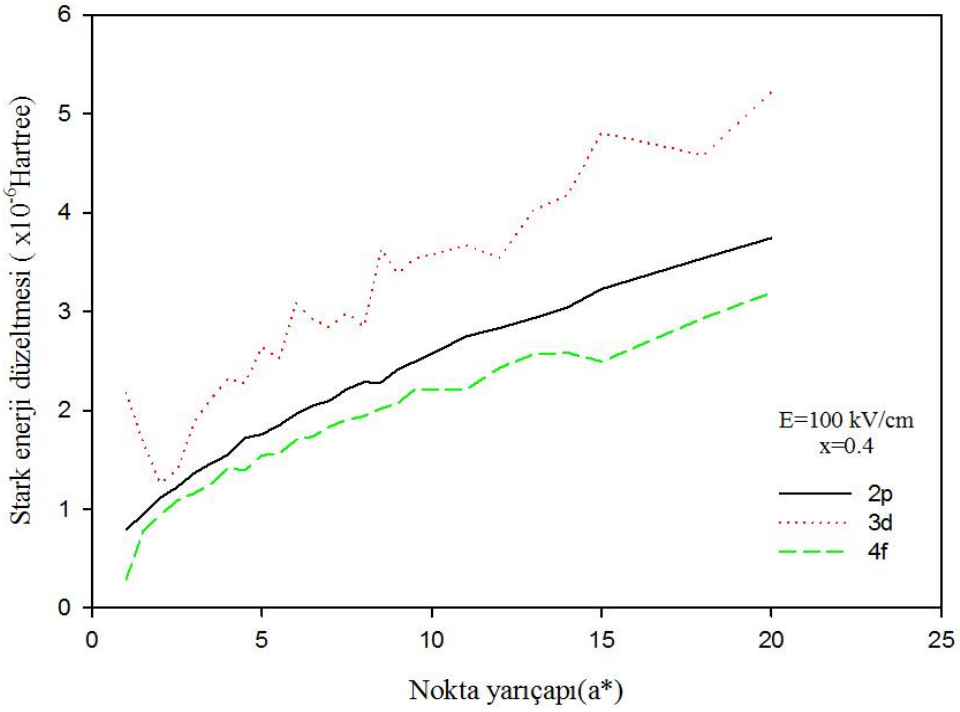
Şekil 4.16: Taban durum (1s) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



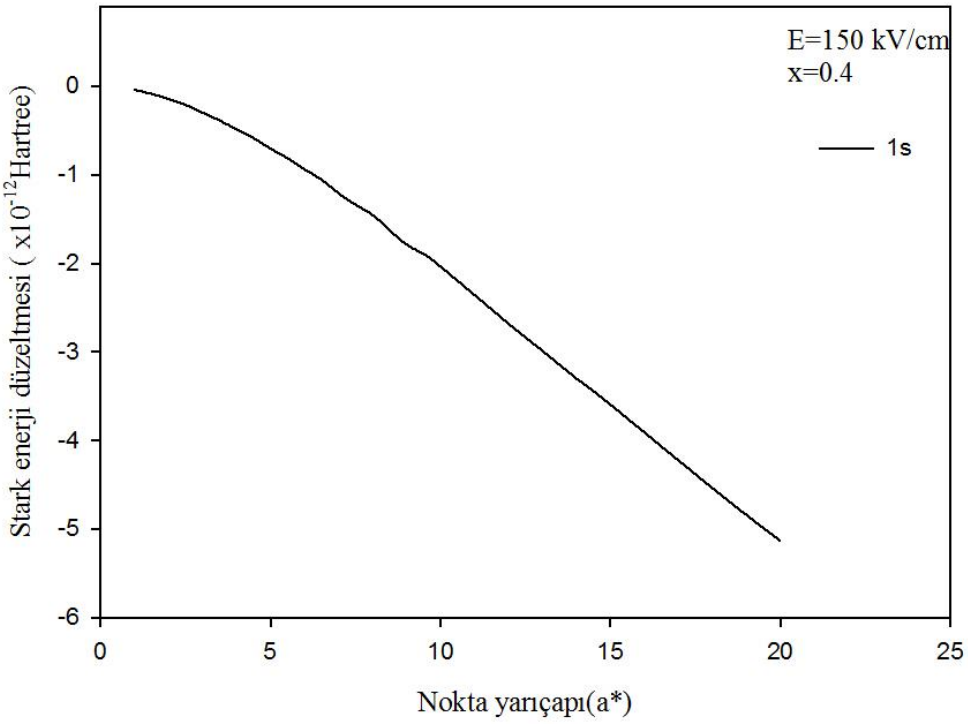
Şekil 4.17: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, 4f,) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



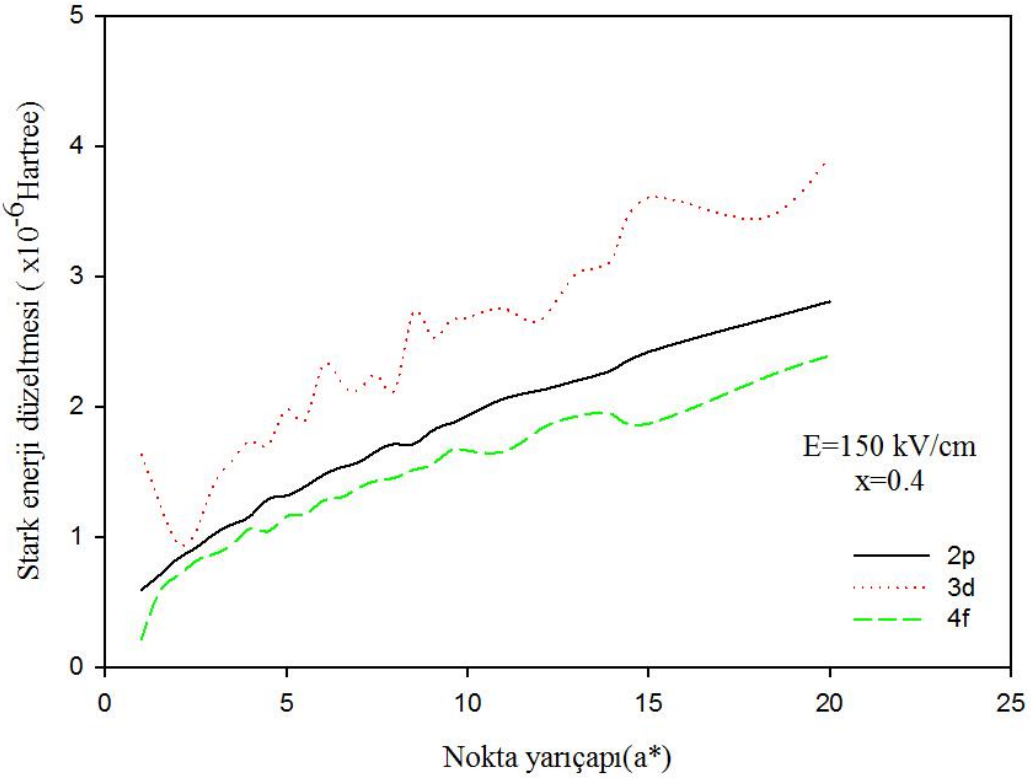
Şekil 4.18: Taban durum (1s) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



Şekil 4.19: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, 4f,) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



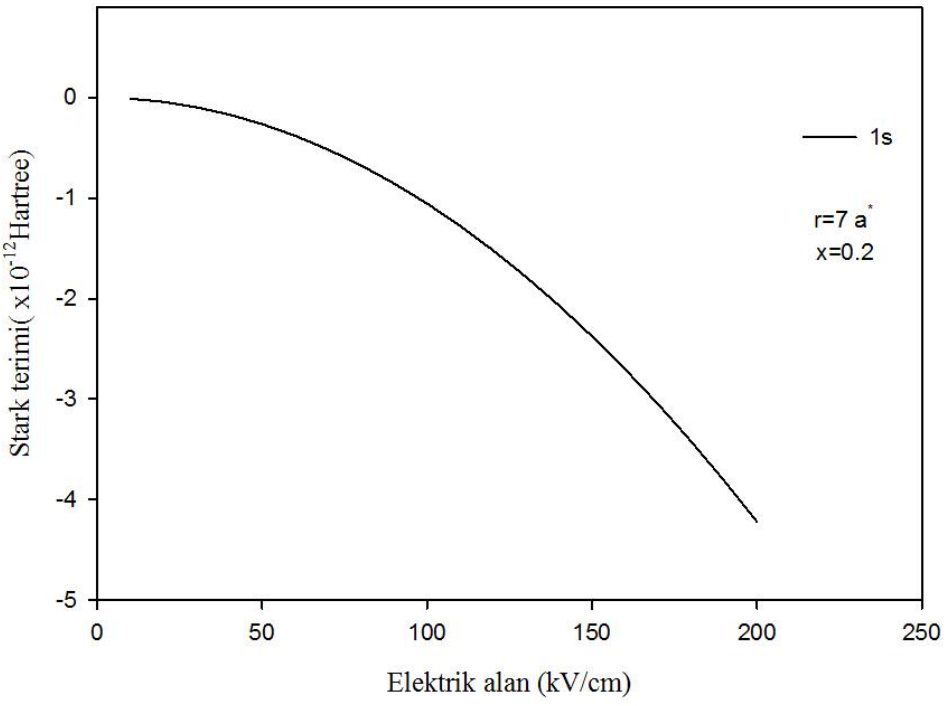
Şekil 4.20: Taban durum (1s) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



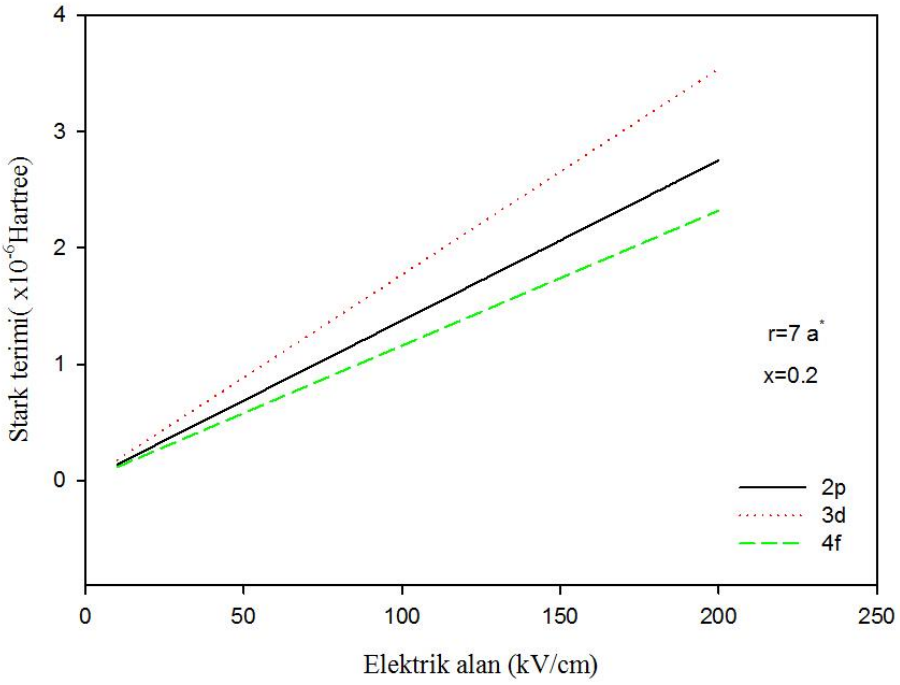
Şekil 4.21: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, 4f,) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.

Şekil 4.22 ile Şekil 4.27 arasında dot yarıçapı r=7a^* da stokometre oranları *x*'in farklı değerleri için elektrik alanına göre seviyelere gelen Stark enerji düzeltme teriminin grafiği çizilmiştir. Denk.(3.40) de görüldüğü gibi taban duruma ikinci mertebeden elektrik alannın karesi ile orantılı olacak şekilde katkı gelmektedir. Bu grafiklerden görüleceği gibi taban durumda negatif yönde bir katkı olup elektrik alanın karesi ile değişmektedir. Buda taban durum enerjisini dahada negatif yapacaktır. Dot yarıçapı artıkça gelen katkılar da negatif artmaktadır. Taban duruma gelen bu katkıların mutlak değeri Stokometre oranı artıkça azalmaktadır. Ayrıca taban duruma gelen katkılar ikinci mertebenden olduğu için çok küçük olmaktadır. Bunun sebebi ise yukarı seviyelerin elektrik alanı perdelemesinden katnaklanmaktadır.

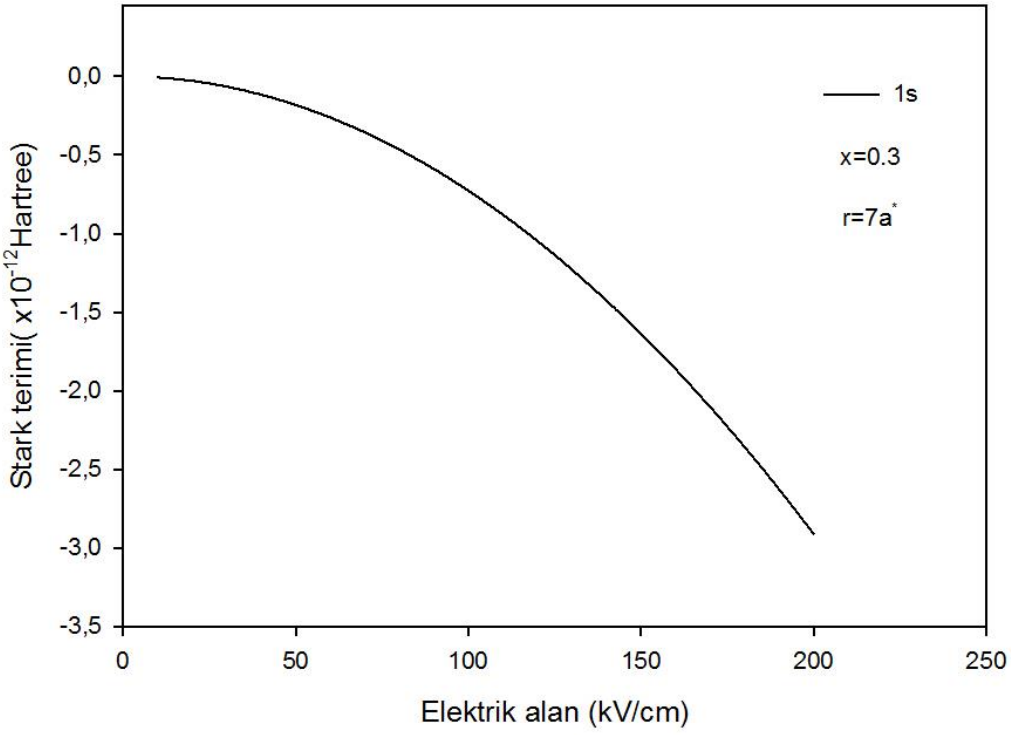
Uyarılmış seviyelere gelen katkı ise Denk.(3.42) den görüleceği gibi elektrik alan ile lineer bağıntılı bir katkı gelmektedir. Şekillerden görüleceği gibi elektrik alanı artıkça Stark enerji teriminden gelen katkı elektrik alanla doğru orantılı olacak şekilde artmaktadır. 3d seviyesi elektrik alandan daha çok etkilenmkete ve gelen katkı çok olmaktadır. Yani elektrik alanı içinde iken nokta yapının 3d seviyesindeki kayma diğer p ve f seviyelerine göre daha fazla olmaktadır. Uyarılmış seviyeler arasında dış elektrik alandan en az etkilenen seviye ise 4f seviyesidir.



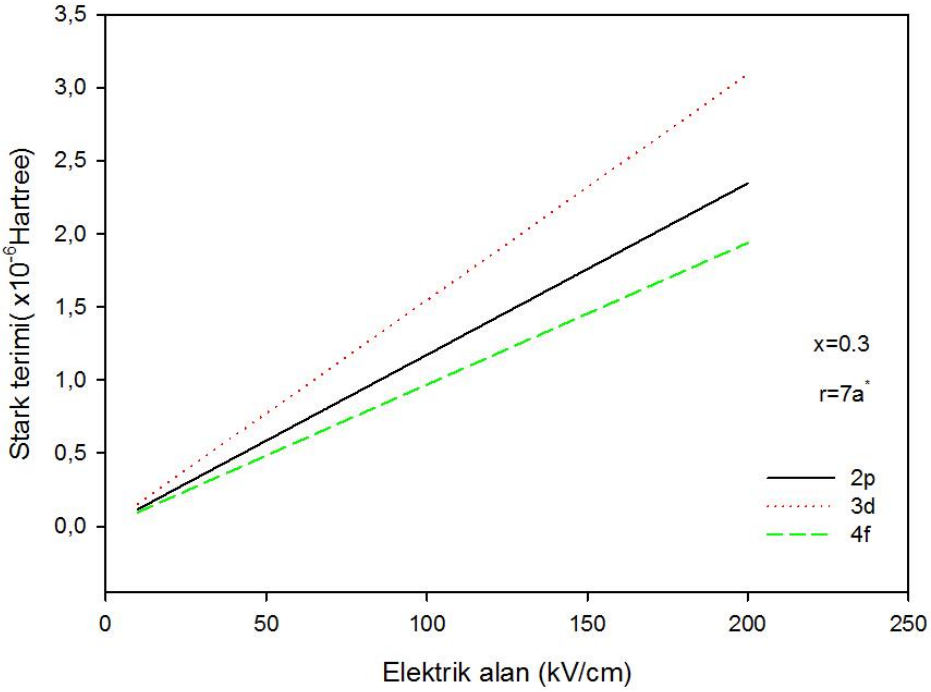
Şekil 4.22: Taban durum(1s) için Stark teriminin elektrik alana göre değişimi.



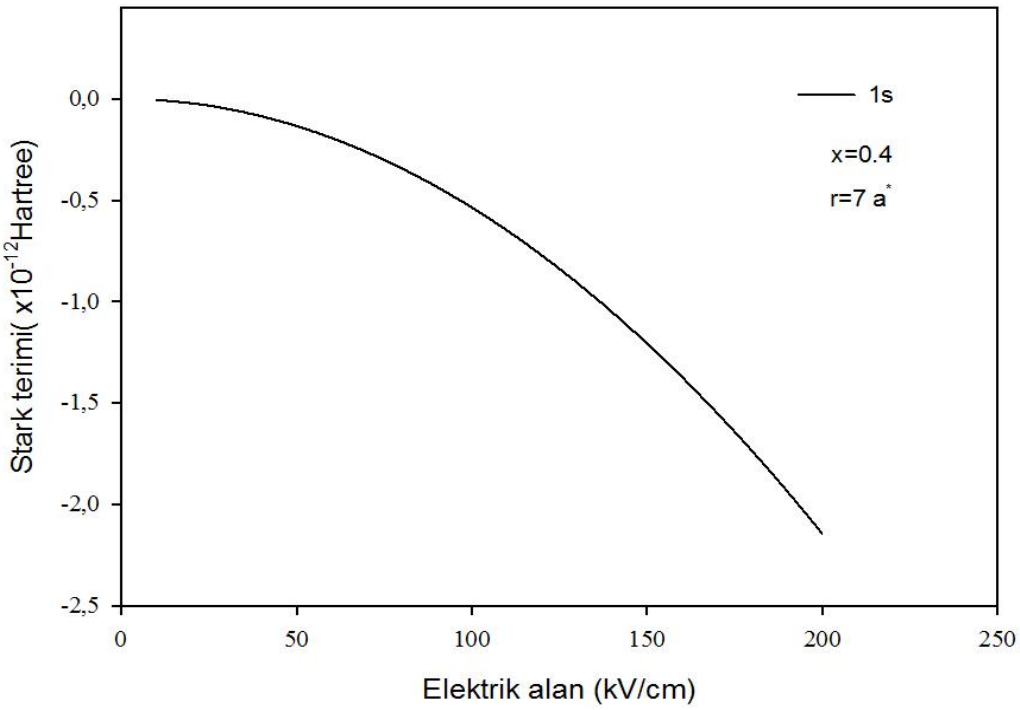
Şekil 4.23: Uyarılmış seviyeler (2p, 3d ve 4f) için Stark teriminin elektrik alana göre değişim grafiği.



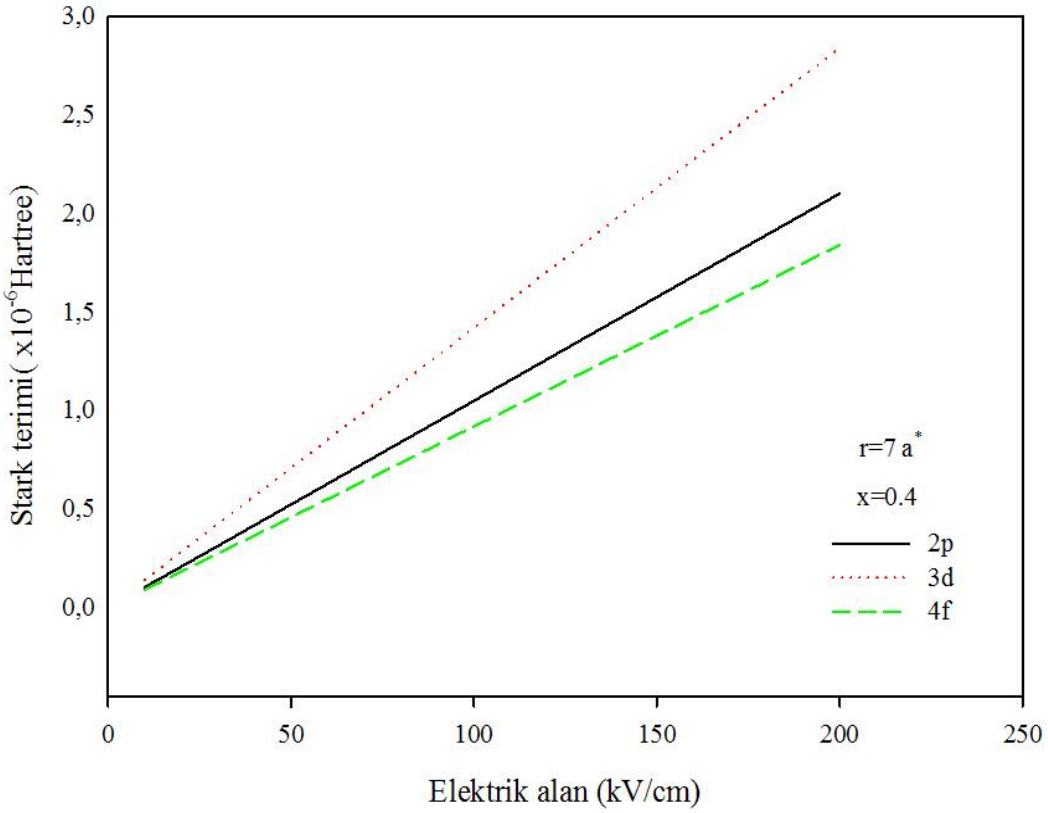
Şekil 4.24: Taban durum(1s) için Stark teriminin elektrik alana göre değişimi.



Şekil 4.25: Uyarılmış durumlar(2p,3d ve 4f) için Stark teriminin elektrik alana göre değişimi.



Şekil 4.26: Taban durum(1s) için Stark teriminin elektrik alana göre değişimi.



Şekil 4.27: Uyarılmış durumlar(2p,3d ve 4f) için Stark teriminin elektrik alana göre değişimi.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı	**:**	Emine Şeyma DOĞAN
Uyruğu	**:**	T.C.
Doğum Yeri ve Tarihi	**:**	KONYA- 28/05/1988
Telefon	**:**	05070083760
e-mail	**:**	eseymaalkan@gmail.com

EĞİTİM

Derece		**Adı, İlçe, İl**	**Bitirme Yılı**
Lise	:	**Konya Lisesi, Selçuklu, KONYA**	**2006**
Üniversite	:	**Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü, Selçuklu, KONYA**	**2008**
Yüksek Lisans	:	**Selçuk Üniversitesi F.E.F. Fizik Bölümü, Selçuklu, KONYA**	**Devam ediyor**
Doktora	:	-	

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	**Kurum**	**Görevi**
2011-2012	Uğur Dershanesi	Stajer Öğretmen
2012-2013	Uğur Dershanesi	Öğretmen
2013-2014	Tudem Dershanesi	Öğretmen
2014-2015	Tudem Dershanesi	Öğretmen

YABANCI DİLLER

İngilizce

KAYNAKLAR

Adachi, S. 1994. ***GaAs and Related Materials: Bulk semiconducting and superlattice properties***: World Scientific.

Anderson, R. L. 1988. Experiments on ge-gaas heterojunctions, ***Electronic Structure of Semiconductor Heterojunctions***: 35-48: Springer.

Arfken, G. B. 2013. ***Mathematical methods for physicists***: Academic press.

Ashoori, R. C., Stormer, H. L., Weiner, J. S., Pfeiffer, L. N., Pearton, S. J., Baldwin, K. W., & West, K. W. 1992. Single-Electron Capacitance Spectroscopy of Discrete Quantum Levels. ***Physical Review Letters***, 68(20): 3088-3091.

Aydin, E., & Yildirim, R. 2004. Optimizing the performance of single-mode laser diode system using genetic algorithm. ***Optics and lasers in engineering***, 42(1): 41-46.

Bardeen, J., & Brattain, W. H. 1948. The transistor, a semi-conductor triode. ***Physical Review***, 74(2): 230.

Bastard, G. 1984. Self-Consistent Variational Calculations and Alloy Scattering in Semiconductor Heterojunctions. ***Surface Science***, 142(1-3): 284-289.

Bednarek, S., Szafran, B., & Adamowski, J. 1999. Many-electron artificial atoms. ***Physical Review B***, 59(20): 13036-13042.

Bednarek, S., Szafran, B., & Adamowski, J. 2001. Theoretical description of electronic properties of vertical gated quantum dots. ***Physical Review B***, 64(19).

Bimberg, D. 1999. Quantum dots: Paradigm changes in semiconductor physics. ***Semiconductors***, 33(9): 951-955.

Bose, C., & Sarkar, C. K. 1998. Perturbation calculation of donor states in a spherical quantum dot. ***Solid-State Electronics***, 42(9): 1661-1663.

Bransden, B. H. 1983. ***Atomic collision theory***: Benjamin-Cummings Publishing Company.

Brownstein, K. R. 1993. Variational Principle for Confined Quantum-Systems. ***Physical Review Letters***, 71(9): 1427-1430.

Cakir, B., Ozmen, A., Atav, U., Yuksel, H., & Yakar, Y. 2007. Investigation of electronic structure of a Quantum Dot using Slater-Type Orbitals and Quantum Genetic Algorithm. ***International Journal of Modern Physics C***, 18(1): 61-72.

Cakir, B., Ozmen, A., Atav, U., Yuksel, H., & Yakar, Y. 2008. Calculation of electronic structure of a spherical quantum dot using a combination of quantum genetic algorithm and Hartree-Fock-Roothaan method. ***International Journal of Modern Physics C***, 19(4): 599-609.

Cakir, B., Yakar, Y., Ozmen, A., Sezer, M. O., & Sahin, M. 2010. Linear and nonlinear optical absorption coefficients and binding energy of a spherical quantum dot. ***Superlattices and Microstructures***, 47(4): 556-566.

Castro, C. F., Antonio, C. A. C., & Sousa, L. C. 2004. Optimisation of shape and process parameters in metal forging using genetic algorithms. ***Journal of Materials Processing Technology***, 146(3): 356-364.

Ceperley, D. 1978. Ground state of the fermion one-component plasma: A Monte Carlo study in two and three dimensions. ***Physical Review B***, 18(7): 3126.

Chang, L. L., Esaki, L., & Tsu, R. 1974. Resonant tunneling in semiconductor double barriers. ***Applied Physics Letters***, 24(12): 593-595.

Chaudhury, P., & Bhattacharyya, S. 1998. Numerical solutions of the Schrödinger equation directly or perturbatively by a genetic algorithm: test cases. ***Chemical Physics Letters***, 296(1): 51-60.

Chaudhury, P., & Bhattacharyya, S. 1999. Locating critical points on multi-dimensional surfaces by genetic algorithm: test cases including normal and perturbed argon clusters. ***Chemical physics***, 241(3): 313-325.

Cho, A., & Arthur, J. 1975. Molecular beam epitaxy. ***Progress in solid state chemistry***, 10: 157-191.

Choi, B. H., Hwang, S. W., Kim, I. G., Shin, H. C., Kim, Y., & Kim, E. K. 1998. Fabrication and room-temperature characterization of a silicon self-assembled quantum-dot transistor. ***Applied Physics Letters***, 73(21): 3129-3131.

Cibert, J., Petroff, P. M., Dolan, G. J., Pearton, S. J., Gossard, A. C., & English, J. H. 1986. Optically Detected Carrier Confinement to One and Zero Dimension in Gaas Quantum-Well Wires and Boxes. ***Applied Physics Letters***, 49(19): 1275-1277.

Coley, D. A. 2001. The Kyoto diet. ***New Scientist***, 171(2303): 52-52.

Connerade, J. P., Dolmatov, V. K., & Lakshmi, P. A. 2000. The filling of shells in compressed atoms. ***Journal of Physics B-Atomic Molecular and Optical Physics***, 33(2): 251-264.

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

Çakır, B., Özmen, A., Şahin, M., Yakar, Y., Atav, Ü. and Yüksel, H.,. 28-30 August. 2006. Determination of wave functions of a quantum dot using the genetic algorithm, . ***Proceedings of the international conference on modeling and simulation , Konya, Turkey***: B032.

Çakır, B., Yakar, Y., & Özmen, A. 2013. Calculation of oscillator strength and the effects of electric field on energy states, static and dynamic polarizabilities of the confined hydrogen atom. ***Optics Communications***, 311: 222-228.

Dane, C., Akbas, H., Minez, S., & Guleroglu, A. 2008. Electric field effect in a GaAs/AlAs spherical quantum dot. ***Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures***, 41(2): 278-281.

Davies, J. H. 1997. ***The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction***: Cambridge university press.

Demel, T., Heitmann, D., Grambow, P., & Ploog, K. 1990. Nonlocal Dynamic-Response and Level-Crossings in Quantum-Dot Structures. ***Physical Review Letters***, 64(7): 788-791.

Dingle, R., Störmer, H., Gossard, A., & Wiegmann, W. 1978. Electron mobilities in modulation-doped semiconductor heterojunction superlattices. ***Applied Physics Letters***, 33(7): 665-667.

Dingle, R., Wiegmann, W., & Henry, C. H. 1974. Quantum states of confined carriers in very thin Al x Ga 1− x As-GaAs-Al x Ga 1− x As heterostructures. ***Physical Review Letters***, 33(14): 827.

Ekimov, A. I., Efros, A. L., & Onushchenko, A. A. 1985. Quantum Size Effect in Semiconductor Microcrystals. ***Solid State Communications***, 56(11): 921-924.

Esaki, L., & Tsu, R. 1970. Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. ***IBM Journal of Research and Development***, 14(1): 61-65.

Fujito, M., Natori, A., & Yasunaga, H. 1996. Many-electron ground states in anisotropic parabolic quantum dots. ***Physical Review B***, 53(15): 9952-9958.

Fukui, T., Ando, S., Tokura, Y., & Toriyama, T. 1991. Gaas Tetrahedral Quantum Dot Structures Fabricated Using Selective Area Metalorganic Chemical Vapor-Deposition. ***Applied Physics Letters***, 58(18): 2018-2020.

Gammon, D. 2000. Semiconductor physics - Electrons in artificial atoms. ***Nature***, 405(6789): 899-900.

Golberg, D. E. 1989. Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning. ***Addion wesley***, 1989.

Grigorenko, I., & Garcia, M. E. 2000. An evolutionary algorithm to calculate the ground state of a quantum system. ***Physica A***, 284(1-4): 131-139.

Grigorenko, I., & Garcia, M. E. 2001. Ground-state wave functions of two-particle systems determined using quantum genetic algorithms. ***Physica A***, 291(1-4): 439-448.

Grigorenko, I., & Garcia, M. E. 2002. Calculation of the partition function using quantum genetic algorithms. ***Physica a-Statistical Mechanics and Its Applications***, 313(3-4): 463-470.

Grundmann, M., Stier, O., & Bimberg, D. 1995. Inas/Gaas Pyramidal Quantum Dots - Strain Distribution, Optical Phonons, and Electronic-Structure. ***Physical Review B***, 52(16): 11969-11981.

Hall, R. N., Fenner, G., Kingsley, J., Soltys, T., & Carlson, R. 1962. Coherent light emission from GaAs junctions. ***Physical Review Letters***, 9(9): 366.

Hansen, W., Horst, M., Kotthaus, J., Merkt, U., Sikorski, C., & Ploog, K. 1987. Intersubband resonance in quasi one-dimensional inversion channels. ***Physical review letters***, 58(24): 2586.

He, L., & Xie, W. 2010. Effects of an electric field on the confined hydrogen impurity states in a spherical parabolic quantum dot. ***Superlattices and Microstructures***, 47(2): 266-273.

Holland, J. 1975. Adaption in natural and artificial systems. ***Ann Arbor MI: The University of Michigan Press***.

Homaifar, A., Lai, H. Y., & Mccormick, E. 1994. System Optimization of Turbofan Engines Using Genetic Algorithms. ***Applied Mathematical Modelling***, 18(2): 72-83.

Huangfu, Y. F., & Yan, Z. W. 2008. Bound polaron in a spherical quantum dot under an electric field. ***Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures***, 40(9): 2982-2987.

Iijima, S. 1991. Helical Microtubules of Graphitic Carbon. ***Nature***, 354(6348): 56-58.

Jacak, L. 2000. Semiconductor quantum dots-towards a new generation of semiconductor devices. ***european Journal of Physics***, 21(6): 487.

Jacak, L., & Hawrylak, P. 1998. A. Wójs, Quantum Dots: Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg.

Jaskolski, W. 1996. Confined many-electron systems. ***Physics Reports-Review Section of Physics Letters***, 271(1): 1-66.

Joachain, C. J. 1975. Quantum collision theory.

Judson, R. S., Jaeger, E. P., & Treasurywala, A. M. 1994. A Genetic Algorithm-Based Method for Docking Flexible Molecules. ***Journal of Molecular Structure-Theochem***, 114: 191-206.

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 dots. ***Physica B-Condensed Matter***, 406(23): 4423-4428.

Kariuki, B. M., Serrano-Gonzalez, H., Johnston, R. L., & Harris, K. D. M. 1997. The application of a genetic algorithm for solving crystal structures from powder diffraction data. ***Chemical Physics Letters***, 280(3-4): 189-195.

Kasapoglu, E., Duque, C. A., Sari, H., & Sokmen, I. 2011. Intense laser field effects on the linear and nonlinear intersubband optical properties of a semi-parabolic quantum well. ***European Physical Journal B***, 82(1): 13-17.

Katari, J. E. B., Colvin, V. L., & Alivisatos, A. P. 1994. X-Ray Photoelectron-Spectroscopy of Cdse Nanocrystals with Applications to Studies of the Nanocrystal Surface. ***Journal of Physical Chemistry***, 98(15): 4109-4117.

Khokle, W. 1993. ***Patterning of material layers in submicron region***: * Halsted Press.

Kim, E. S., Oh, C., Lee, S., Lee, B., & Yun, I. 2001. Modeling and optimization of process parameters for GaAs/AlGaAs multiple quantum well avalanche photodiodes using genetic algorithms. ***Microelectronics Journal***, 32(7): 563-567.

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

Kouwenhoven, L., & Marcus, C. 1998. Quantum dots. ***Physics World***, 11(6): 35-39.

Kudla, A. 2004. Application of the genetic algorithms in spectroscopic ellipsometry. ***Thin Solid Films***, 455: 804-808.

Kulkarni, A. J., Krishnamurthy, K., Deshmukh, S. P., & Mishra, R. S. 2004. Microstructural optimization of alloys using a genetic algorithm. ***Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing***, 372(1-2): 213-220.

Lai, W. Y., & Dassarma, S. 1986. Ground-State Variational Wave-Function for the Quasi-One-Dimensional Semiconductor Quantum Wire. ***Physical Review B***, 33(12): 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(15): 9035-9042.

Liu, H. C., Gao, M., McCaffrey, J., Wasilewski, Z. R., & Fafard, S. 2001. Quantum dot infrared photodetectors. ***Applied Physics Letters***, 78(1): 79-81.

Maksym, P. A., & Chakraborty, T. 1990. Quantum Dots in a Magnetic-Field - Role of Electron-Electron Interactions. ***Physical Review Letters***, 65(1): 108-111.

Marin, J. L., & Cruz, S. A. 1991. On the Use of Direct Variational-Methods to Study Confined Quantum-Systems. ***American Journal of Physics***, 59(10): 931-935.

McCarthy, S., Wang, J., & Abbott, P. 2001. Electronic structure calculation for N-electron quantum dots. ***Computer physics communications***, 141(1): 175-204.

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

Murray, C. B., & Bawendi, M. G. 1993. Synthesis and Physical Characterization of Ii-Vi-Semiconductor Nanocrystallites (Quantum Dots). ***Abstracts of Papers of the American Chemical Society***, 205: 136-Phys.

Nakanishi, H., & Sugawara, M. 2000. Numerical solution of the Schrodinger equation by a microgenetic algorithm. ***Chemical Physics Letters***, 327(5-6): 429-438.

Nomoto, K., Ugajin, R., Suzuki, T., Taira, K., & Hase, I. 1998. Quantum-dot based opto-electronic device. ***Ieice Transactions on Electronics***, E81c(1): 8-15.

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

Özmen, A., Yakar, Y., Çakır, B., & Atav, Ü. 2009. Computation of the oscillator strength and absorption coefficients for the intersubband transitions of the spherical quantum dot. ***Optics Communications***, 282(19): 3999-4004.

Petroff, P. M., & Denbaars, S. P. 1994. Mbe and Mocvd Growth and Properties of Self-Assembling Quantum-Dot Arrays in Iii-V Semiconductor Structures. ***Superlattices and Microstructures***, 15(1): 15-21.

Petroff, P. M., Gossard, A. C., Logan, R. A., & Wiegmann, W. 1982. Toward Quantum Well Wires - Fabrication and Optical-Properties. ***Applied Physics Letters***, 41(7): 635-638.

Pullan, W. J. 1997. Genetic operators for the atomic cluster problem. ***Computer Physics Communications***, 107(1-3): 137-148.

Raymond, S., Fafard, S., & Charbonneau, S. 1996. Temperature dependence of ultrasharp luminescence lines in AlyIn1-yAs/AlxGa1-xAs self-assembled quantum dots. ***Canadian Journal of Physics***, 74: S216-S219.

Reed, M. A. 1993. Quantum Dots. ***Scientific American***, 268(1): 118-123.

Reed, M. A., Bate, R. T., Bradshaw, K., Duncan, W. M., Frensley, W. R., Lee, J. W., & Shih, H. D. 1986. Spatial Quantization in Gaas-Algaas Multiple Quantum Dots. ***Journal of Vacuum Science & Technology B***, 4(1): 358-360.

Reusch, B., & Grabert, H. 2003. Unrestricted Hartree-Fock for quantum dots. ***Physical Review B***, 68(4).

Rezaei, G., Vaseghi, B., & Ebrahimi, J. 2011. External electric field effects on the electronic and hydrogenic impurity states in ellipsoidal and semi-ellipsoidal quantum dots. ***Superlattices and Microstructures***, 49(6): 591-598.

Ryzhii, V. 1996. The theory of quantum-dot infrared phototransistors. ***Semiconductor Science and Technology***, 11(5): 759-765.

Sadeghi, E., & Avazpour, A. 2011. Binding energy of an off-center donor impurity in ellipsoidal quantum dot with parabolic confinement potential. ***Physica B-Condensed Matter***, 406(2): 241-244.

Safak, H., Sahin, M., Gulveren, 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(6): 775-784.

Saha, R., Chaudhury, P., & Bhattacharyya, S. P. 2001. Direct solution of Schrodinger equation by genetic algorithm: test cases. ***Physics Letters A***, 291(6): 397-406.

Sahin, M., & Tomak, M. 2002. Self-consistent calculation of semiconductor heterojunctions using quantum genetic algorithm. ***International Journal of Modern Physics B***, 16(26): 3883-3893.

Sahin, M., & Tomak, M. 2005a. Electronic structure of a many-electron spherical quantum dot with an impurity. ***Physical Review B***, 72(12).

Sahin, M., & Tomak, M. 2005b. The self-consistent calculation of a spherical quantum dot: A quantum genetic algorithm study. ***Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures***, 28(3): 247-256.

Sahin, O., Sayan, P., & Bulutcu, A. N. 2000. Application of genetic algorithm for determination of mass transfer coefficients. ***Journal of Crystal Growth***, 216(1-4): 475-482.

Samanta, B. 2004. Artificial neural networks and genetic algorithms for gear fault detection. ***Mechanical Systems and Signal Processing***, 18(5): 1273-1282.

Schrieffer, J., & Kingston, R. 1957. Semiconductor surface physics. ***U. of Penn. Press, Philadelphia, Penn***: 55.

Sen, Z., Oztopal, A., & Sahin, A. D. 2001. Application of genetic algorithm for determination of Angstrom equation coefficients. ***Energy Conversion and Management***, 42(2): 217-231.

Shao, S., Guo, K.-X., Zhang, Z.-H., Li, N., & Peng, C. 2010. Studies on the third-harmonic generations in cylindrical quantum dots with an applied electric field. ***Superlattices and Microstructures***, 48(6): 541-549.

Shockley, W. 1949. The Theory of p-n Junctions in Semiconductors and p-n Junction Transistors. ***Bell System Technical Journal***, 28(3): 435-489.

Sim, J. S., Kong, J., Lee, J. D., & Park, B. G. 2004. Monte Carlo simulation of single-electron nanocrystal memories. ***Japanese Journal of Applied Physics Part 1-Regular Papers Short Notes & Review Papers***, 43(4b): 2041-2045.

Smith, T. P., Arnot, H., Hong, J. M., Knoedler, C. M., Laux, S. E., & Schmid, H. 1987. Capacitance Oscillations in One-Dimensional Electron-Systems. ***Physical Review Letters***, 59(24): 2802-2805.

Smith, T. P., Lee, K. Y., Knoedler, C. M., Hong, J. M., & Kern, D. P. 1988. Electronic Spectroscopy of Zero-Dimensional Systems. ***Physical Review B***, 38(3): 2172-2175.

Smith, W. 1873. The action of light on selenium. ***Telegraph Engineers, Journal of the Society of***, 2(4): 31-33.

Szafran, B., Adamowski, J., & Bednarek, S. 1999. Ground and excited states of few-electron systems in spherical quantum dots. ***Physica E-Low-Dimensional Systems & Nanostructures***, 4(1): 1-10.

Szafran, B., Adamowski, J., & Stebe, B. 1998. Energy spectrum of D(-) centres in spherical quantum dots. ***Journal of Physics-Condensed Matter***, 10(34): 7575-7586.

Şahin, M. 2005. Yarıiletken Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Olarak İncelenmesi, Doktora Tezi. ***Selcuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü,Konya***.

Temkin, H., Dolan, G. J., Panish, M. B., & Chu, S. N. G. 1987. Low-Temperature Photoluminescence from Ingaas/Inp Quantum Wires and Boxes. ***Applied Physics Letters***, 50(7): 413-415.

Van der Ziel, J., Dingle, R., Miller, R., Wiegmann, W., & Nordland Jr, W. 1975. Laser oscillation from quantum states in very thin GaAs− Al0. 2Ga0. 8As multilayer structures. ***Applied Physics Letters***, 26(8): 463-465.

Van Wees, B., Van Houten, H., Beenakker, C., Williamson, J. G., Kouwenhoven, L., Van der Marel, D., & Foxon, C. 1988. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. ***Physical Review Letters***, 60(9): 848.

Varshni, Y. P. 1999. Accurate wavefunctions for hydrogenic donors in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots. ***Physics Letters A***, 252(5): 248-250.

Varshni, Y. P. 2001. Binding energy of a hydrogenic impurity in a 2D circular quantum dot. ***Superlattices and Microstructures***, 30(5): 253-259.

Vázquez, G. J., del Castillo-Mussot, M., Mendoza, C. I., & Spector, H. N. 2004. Spherical quantum dot under an electric field. ***physica status solidi (c)***, 1(S1): S54-S57.

Venugopal, V., & Narendran, T. T. 1992. A Genetic Algorithm Approach to the Machine-Component Grouping Problem with Multiple Objectives. ***Computers & Industrial Engineering***, 22(4): 469-480.

Wanschura, T., Coley, D. A., & Migowsky, S. 1996. Ground-state energy of the +/-j spin glass with dimension greater than three. ***Solid State Communications***, 99(4): 247-248.

Yakar, Y., Cakir, B., & Ozmen, A. 2010. Linear and Nonlinear Optical Properties in Spherical Quantum Dots. ***Communications in Theoretical Physics***, 53(6): 1185-1189.

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***, 283(9): 1795-1800.

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

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

Yang, X. F., & Gen, M. 1994. Evolution Program for Bicriteria Transportation Problem. ***Computers & Industrial Engineering***, 27(1-4): 481-484.

Yesilgul, U., Ungan, F., Kasapoglu, E., Sari, H., & Sokmen, I. 2011. The linear and nonlinear intersubband optical absorption coefficients and refractive index changes in a V-shaped quantum well under the applied electric and magnetic fields. ***Superlattices and Microstructures***, 50(4): 400-410.

Yusa, G., & Sakaki, H. 1999. InAs quantum dot field effect transistors. ***Superlattices and Microstructures***, 25(1-2): 247-250.

Zacharias, C. R., Lemes, M. R., & Pino, A. D. 1998. Combining genetic algorithm and simulated annealing: a molecular geometry optimization study. ***Theochem-Journal of Molecular Structure***, 430: 29-39.

Zhang, Z.-H., Guo, K.-X., Chen, B., Wang, R.-Z., Kang, M.-W., & Shao, S. 2010. Theoretical studies on the optical absorption coefficients and refractive index changes in parabolic quantum dots in the presence of electric and magnetic fields. ***Superlattices and Microstructures***, 47(2): 325-334.