



T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

TEK ELEKTRONLU KUANTUM NOKTA YAPILARDA MANYETİK ALAN ETKİSİNİN İNCELENMESİ

MUSTAFA DOĞAN SARIKAYA

YÜKSEK LİSANS TEZİ

FİZİK ANABİLİM DALI

Haziran, 2017
KONYA

Her Hakkı Saklıdır

TEZ BİLDİRİMİ

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

DECLARATION PAGE

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

Mustafa Doğan SARIKAYA

Tarih: 25.05.2017



TEZ KABUL VE ONAYI

Mustafa Doğan SARIKAYA tarafından hazırlanan " **Tek Elektronlu Kuantum Nokta Yapılarda Manyetik Alan Etkisinin İncelenmesi**" adlı tez çalışması 25.05.2017 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği / ~~oy çokluğu~~ ile Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri	**İmza**
Başkan Prof. Dr. Yusuf YAKAR	.....
Danışman Doç. Dr. Bekir GAKIR	.....
Üye Prof. Dr. Aslı KARAKAŞ	.....

Yukarıdaki sonucu onaylarım.

Prof. Dr. Mustafa YILMAZ
FBE Müdürü

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

TEK ELEKTRONLU KUANTUM NOKTA YAPILARDA MANYETİK ALAN ETKİSİNİN İNCELENMESİ

Mustafa Doğan SARIKAYA

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Bekir ÇAKIR

2017,89 Sayfa

Jüri
Doç. Dr. Bekir ÇAKIR
Prof. Dr. Yusuf YAKAR
Prof. Dr. Aslı KARAKAŞ

Bu tez çalışmasında tek elektronlu kuantum nokta yapıların dış manyetik alan etkisi pertürbasyon yöntemiyle incelendi. Sonlu derinlikli potansiyelle sınırlandırılmış merkezinde hidrojen benzeri safsızlık olan parabolik potansiyele sahip, tek elektronlu kuantum nokta yapı ele alındı. Sistemin dalga fonksiyonları Slater Tipi Orbitallerin (STO) lineer kombinasyonu şeklinde kuruldu. Kuantum Genetik Algoritma (KGA) tekniği ile bu yapı için Schrödinger denkleminin olası çözümleri bulundu. Bu çözümler kullanılarak tek elektronlu kuantum nokta yapının enerjilerinin beklenen değerleri Hartree-Fock-Roothaan (HFR) metodu kullanılarak hesaplandı. Bu nokta yapının taban ve bazı uyarılmış enerji seviyelerine paramanyetik ve diamanyetik terimden gelen katkılar kuantum nokta yarıçapına ve sınırlandırıcı potansiyel yüksekliğine bağlı olarak incelendi. Yapılan hesaplamalarda küçük nokta yarıçaplarında uzaysal sınırlandırıcı etkisi olurken, büyük nokta yarıçaplarında manyetik alanın etkisi olduğu görülmüştür. Buna ilaveten manyetik alan, seviyelerdeki enerji dejenereliğini ortadan kaldırmaktadır.

Anahtar Kelimeler: Etkin Kütle ve Durum Yoğunluğu, Kuantum Nokta Yapılar, Kuantum Genetik Algoritma, Pertürbasyon Yöntemi

ABSTRACT

YÜKSEK LİSANS TEZİ

INVESTIGATION THE EFFECT OF MAGNETIC FIELD ON THE SINGLE-ELECTRON QUANTUM DOT STRUCTURES

Mustafa Doğan SARIKAYA

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Bekir ÇAKIR

2017,89 Sayfa

Jury
Doç. Dr. Bekir ÇAKIR
Prof. Dr. Yusuf YAKAR
Prof. Dr. Aslı KARAKAŞ

In this thesis study, the effect of external magnetic field in single electron quantum dot structures was investigated by perturbation method. A single-electron quantum dot structure with parabolic potential confined infinite potential, which located is hydrogen-like impurity at its center, was addressed. The wave functions of the system were established as a linear combination of Slater Type Orbitals (STO)s. Possible solutions of the Schrödinger equation for this structure were found using Quantum Genetic Algorithm (KGA) technique. Using these solutions, the expected values of the energies of single electron quantum dots were calculated using Hartree-Fock-Roothaan (HFR) method. The contributions of this dot structure from the paramagnetic and the diamagnetic term to the base and some excited energy levels were investigated in terms of the dot radius and the confining potential height. In the calculations made, it is seen that the effect of the magnetic field in the large point radii is the effect of the spatial limiter in the small dot radii. In addition, the magnetic field removes the energy degeneracy in the levels.

ÖNSÖZ

Bu çalışma Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne Yüksek Lisans çalışması olarak sunulmuştur. Bu çalışmada günümüz teknolojisinde oldukça önemli olan kuantum nokta yapılarının manyetik özellikleri teorik olarak incelendi.

Kuantum nokta yapılar teknolojik sahada tek elektron transistorları, infrared dedektörleri, hafıza elemanları ve iletişim gibi çeşitli alanlarda teknolojik cihazların üretilmesinde kullanılmaktadır. Kuantum nokta yapılar düşük boyutlu kuantum mekaniksel sistemler oldukları ve günümüz teknolojisine uyarlanabildikleri için bilim adamlarının ilgi odağı haline gelmiştir. Bu yapıların fiziksel özelliklerinin incelenmesiyle ilgili deneysel ve teorik çalışmalar giderek ivme kazanmaktadır. Yapılan bu çalışma kuantum nokta yapılarının manyetik özelliklerinin anlaşılması için olumlu yeni katkılar sağlayacaktır.

Bu çalışmam süresince bilgi ve tecrübeleriyle bana her konuda yardımcı olan ve yön gösteren danışman hocam Doç. Dr. Bekir ÇAKIR'a en içten teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca çalışmama bir diğer katkı yapan ve yardımcı olan bölümümüz öğretim üyesi sayın Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN hocama ve Aksaray Üniversitesi Fen Fakültesi Dekanı sayın Prof. Dr. Yusuf YAKAR hocama yardımlarından dolayı teşekkür ederim.

Mustafa Doğan SARIKAYA
KONYA-2017

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **iv**

ABSTRACT ..... **v**

ÖNSÖZ ..... **vi**

İÇİNDEKİLER ..... **vii**

SİMGELER VE KISALTMALAR ..... **ix**

1. GİRİŞ VE KAYNAK ARAŞTIRMASI **1**

2. KUANTUM NOKTA YAPILAR **10**

2.1. Kuantum Nokta Yapıları 9

2.2. Kuantum Telleri 10

2.3. Kuantum Kuyuları 11

2.4. Elde Ediliş Yöntemi 12

2.4.1. Asitle Eritme Yöntemi 12

2.4.2. Modüle Edilmiş Elektrik Alan Yöntemi 13

2.4.3. Seçici Büyütme Yöntemi 14

2.4.4. Kuantum Kuyusu ve Engel Arası İç Difüzyon Yöntemi 15

2.4.5. Yarı İletken Mikrokristaller 15

2.5. Etkin Kütle Yaklaşımı 16

2.6. Durum Yoğunluğu 16

2.6.1. Sıfır Boyutlu (Kuantum Nokta) Yapılarda Durum Yoğunluğu 16

2.6.2. Bir Boyutlu (Kuantum Tel) Yapılarda Durum Yoğunluğu 17

2.6.3. İki Boyutlu (Kuantum Kuyu) Yapılarda Durum Yoğunluğu 18

2.6.4. Üç Boyutlu (Bulk Yapı) Yapılarda Durum Yoğunluğu 20

2.7. Kuantum Nokta Yapıların Teknolojik Uygulamaları 21

3. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ **23**

3.1. Kuantum Genetik Algoritma 23

3.1.1. Yeniden Üretme 23

3.1.2. Çaprazlama 24

3.1.3. Mutasyon 25

3.2. Zamandan Bağımsız Pertürbasyon Yöntemi 26

4. KUANTUM NOKTA YAPININ ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ 29

5. TEK ELEKTRONLU KUANTUM NOKTA YAPILARDA MANYETİK ALAN ETKİSİNİN İNCELENMESİ 32

6. HESAPLAMALAR VE SONUÇLAR.....39

7. ÖZGEÇMİŞ 75

8. KAYNAKLAR 76

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

m^* : Elektronun etkin kütlesi

ε : Ortamın dielektrik sabiti

r : Elektronun safsızlığa olan uzaklığı

Z : Safsızlığın pozitif sayısı

e : Elektronun yükü

χ : Slater tipi atomik orbitalleri

σ : Baz seti sayısı

c_{pk} : Orbitallerin lineer toplam katsayısı

x : Stokometri oranı

ζ : Orbital üstelleri

Kısaltmalar

DFT : Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi

MBE : Molecular Beam Epitaxy

QDIP: Kızıl Ötesi Foto Dedektörler

HFR : Hartree-Fock-Roothaan

KGA : Kuantum Genetik Algoritma

1. GİRİŞ VE KAYNAK ARAŞTIRMASI

Günümüz teknolojilerinde haberleşme ve iletişime olan yoğun talep nedeniyle ve farklı uygulamaların ivme kazandırdığı teorik ve deneysel araştırmalar, ortalama yarım yüzyıldır yarı iletken yapılar teknolojisindeki ve bilimindeki gelişmelere önemli ölçüde hız kazandırmıştır. Bunun yanı sıra kayıt ve hesaplama sistemlerine olan ihtiyaç neticesinde ortaya çıkan yoğun talep, sinyal iletim ve çalışma düzeyinin arttırılması yönündeki olumlu araştırmalar, yeni mikro elektronik ve opto elektronik cihazların geliştirilmesine ve üretilmesine zemin hazırlamıştır.

Yakın bir geçmişe kadar, mikro elektronik bütünüyle yüksek bir mekanik kararlılık taşıyan, ısısal iletkenliği yeteri kadar yüksek ve üretimi büyük oranda pratik bir malzeme olan Silisyum temelli bir bilim dalıydı. Bu tür Silisyum benzeri malzemeler çok küçük yasak enerji aralığına sahip olduğundan hızlı araştırılabilen uygulamalar kullanılış açısından çok elverişli bir yapıya sahiptir. Bu özellikleri sebebiyle değişik elementlerle alaşım ve katkılanarak çok farklı yapılarda, elektronik özelliklere sahip tek-kristal, polikristal ve amorf formlarda yarı iletken malzemelerin üretilmesi söz konusudur. Silisyum yarı iletken malzemesinin, en fazla kullanım alanı entegre devrelerin teknolojisinde kullanılmaktadır.

Kuantum kuyusu olarak bilinen elektronun hareketinin iki boyutta sınırlandırılmış elektronik yapılar, daha yüksek iletim bandı enerjisine sahip ve aynı iki düzlem yarı iletken tabaka arasına, düşük bant aralıklı bir yarı iletken düzlem tabakanın eklenmesiyle oluşturulur. Kuantum kuyusunun çok ince bir yapısının olması ve elektronun bu yapının içinde tutulması, sistemin elektronik özelliklerinin ortaya çıkarılması açısından araştırmacıların sisteme olan ilgisini çekmiş ve artırmıştır. Araştırmacıların bu ilgisi yarı iletken malzemelerin araştırılıp geliştirilmesinde ve yarı iletken teknolojisine olan talebin artmasına sebep olmuştur.

İnce film büyütme yöntemlerindeki gelişmeler, özellikle elektron demeti ve x ışını litografisi gibi hassas malzeme üretim ve analiz tekniklerinin gelişimi, farklı boyutlarda kuantum yapılarının üretilmesine olanak tanımıştır. Kısa zaman içerisinde gözle görülür oranda, bu alandaki büyük gelişmeler ve araştırmalar, kuantum tel olarak adlandırılan tek boyutlu sistemlerin üretilmesine olanak sağlamıştır. Kuantum kuyu ve kuantum tel aygıtlarındaki ilerlemeler, sınırlandırılmış sistemlerin elektronik yapılarının hesaplanmasında büyük bir ilgi odağı oluşturmuştur.

Elektriğin keşfinden sonra bazı malzemelerin iyi bir iletken, bazı malzemelerin de kötü bir iletken olduğu anlaşıldı. 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 ayrılırlar. Yalıtkanlar çok yüksek sıcaklıklara ulaştığında iletkenlik özelliği kazanırken, yarı iletkenler oda sıcaklığında elektriksel iletkenlik kazanırlar. 1873 yılında selenyumun foto-iletkenliğinin keşfedilmesiyle yarı iletken bilimi başlamış oldu (Smith, 1873). Daha sonra 1940'lı yılların sonunda farklı fiziksel ve kimyasal özelliklere sahip yeni bir aygıt olan transistörün ortaya çıkmasıyla yarı iletken biliminde yeni bir dönem başladı (Brattain. ve Shockleey., 1948).

Yarı iletken aygıtlar üzerinde kuantum sınırlandırmasının etkileri ile ilgili tartışmalar 1950'li yıllarda başlar. Bir potansiyel kuyu içerisinde hapsedilmiş elektronların klasik olarak davranamayacaklarını ve bu elektronların enerji seviyelerinin sınırlandırmanın olduğu boyutta kesikli değerler alacağını ileri sürmüştür (Schrieffer, 1957). Yarı iletken lazerin bulunması, birbirinden farklı en az iki yarı iletken malzemeyi bir araya getirerek oluşturdukları heteroeklemlerin ortaya çıkışı, 1960'lı yıllarda kuantum mekaniğinin katıhal elektroniği üzerinde daha etkin bir rol oynamasına neden olmuştur. (Anderson, 1962; Hall ve ark., 1962)

Moleküler demet kaplama Molecular Beam Epitaxy (MBE) yönteminin bulunuşu çoklu eklem kuantumlu yapıların gelişmesine büyük oranda ışık tutmuştur (Cho ve Arthur, 1975). Hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisini varyasyonel yöntemle hesapladı (Bastard, 1984). İlk kuantum nokta yapısı Reed ve ark. tarafından üretildi. Aynı zamanda bu kuantum nokta yapı 250 nm kenar uzunluğu olan kare biçiminde bir geometrik yapıya sahiptir (Reed ve ark., 1986). Kuantum nokta yapıları farklı geometrik (kübik, ellipsoid, küresel ve piramit) şekillerde 30-45 nm boyutlarına kadar üretilmiştir (Cibert ve ark., 1986; Temkin ve ark., 1987).

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. Dış bir manyetik alan etkisinde, parabolik potansiyel ile sınırlandırılmış kuantum nokta

yapıların, bir dizi modelinde toplu uyarımlarının hesabını yaptılar (Dempsey ve ark., 1990).

Tek elektronlu ya da çok elektronlu kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerini incelemek için bazı yöntemler bilim insanları tarafından yaygın olarak kullanılmaktadır. Bunlardan bazıları, varyasyon yöntemi, pertürbasyon yöntemi, matris köşegenleştirme yöntemi, yoğunluk fonksiyonel teorisi, Hartree-Fock yöntemi gibi teknikler şeklindedir. Her bir yöntemin, ele alınan probleme ve yapılmak istenen hesaplamalara bağlı olarak birbirinden daha etkin, daha başarılı olduğu durumlar vardır. Böyle durumlarda da birden çok tekniğin, problemin farklı aşamalarında ayrı ayrı veya birlikte kullanılması söz konusu olabilir. Son yıllarda nanoyapılı sistemlerin elektronik özelliklerinin ve fiziksel özelliklerinin incelenmesinde en iyileme yöntemi olan Kuantum Genetik Algoritma (KGA) tekniği kullanılmaya başlanmıştır. KGA, ortama iyi uyum sağlayan bireylerin hayatta kalması ve sağlayamayan bireylerin ise elenmesi, yani yeni oluşacak neslin uyum sağlayan sağlam bireylerden oluşmasını ortaya koyan yöntemdir. KGA tekniği ilk kez (Holland, 1975) tarafından kullanılmış olup, mühendislik ve malzeme biliminde yaygın olarak kullanılmasıyla birlikte başka alanlarda kullanılmaktadır (Venugopal ve Narendran, 1992; Homaifar ve ark., 1994; Şahin ve ark., 2000; Castro ve ark., 2004; Kulkarni ve ark., 2004).

Tüm boyutlarda güçlü bir sınırlandırma sonucu elde edilen kuantum nokta yapıları kesikli enerji seviyelerine ve kabuk yapılarına sahip olduklarından dolayı yapay atom olarak da adlandırılırlar (Maksym ve Chakraborty, 1990; Fujito ve ark., 1996). Marin ve Cruz doğrudan varyasyonel metodu kullanarak sonsuz küresel bir kuantum kuyuda, hidrojen atomunun sınırlandırılmasıyla harmonik salınıcı gibi bazı sistemlerin Schrödinger dalga denklemlerine karşılık gelen çözümlerini bularak, enerji seviyelerini tespit ettiler (Marin ve Cruz, 1991). Bir dış manyetik alan etkisinde, parabolik potansiyel ile sınırlandırılmış, kuantum noktasının taban durumdan en düşük duruma uyarılma özellikleri teorik olarak etkin kütle Hamiltoniyenini kullanarak incelendiler (Halonen ve ark., 1992). Bu çalışmada kuantum nokta yapılar, çok verimli ve tam kontrol edilebilir lazerlerin yapımında kullanıldı (Reed, 1993). Sınırlandırılmış sistemlerin enerji öz değerlerini, Gauss teoremini kullanarak lineer varyasyon yöntem ile hesaplandı (Brownstein, 1993). Hartree-Fock ile elde edilen bir manyetik alanda, kuantum nokta yapının helyum taban durum enerjilerini, çift korelasyon fonksiyonları ile tanecik yoğunluklarını karşılaştırıldı (Pfannkuche ve ark., 1993). Dış bir manyetik

alan etkisinde, çok elektronlu bir kuantum noktanın elektronik özelliklerini, Hartree yaklaşımı ele alınarak incelenmiştir (Oaknin ve ark., 1994). Manyetik alan içinde anizotropik kuantum noktalarının elektronik özelliklerini araştırdı ve aynı zamanda tek elektron enerji seviyelerinin manyetik alanın ve kimyasal potansiyelin bir fonksiyonu olarak dizilişini araştırılmıştır (Madhav ve Chakraborty, 1994). En düşük ve en yüksek enerji seviyelerinde elektron-deşik çiftleri tarafından oluşturulan manyeto-optik etkileri tartışılmıştır (Nomura ve ark., 1994). Kaotik hareket bölgesinde kuantum nokta yapılardaki dalga fonksiyonlarının genliklerinin lokal dağılımlarını incelenmiştir (Fal'ko ve Efetov, 1994). Manyetik alan etkisinde kuantum nokta yapıların taban durumu enerjileri, yoğunluk fonksiyonları teorisiyle hesaplandı (Ferconi ve Vignale, 1994). Manyetik alanın etkisinde ve mercek şeklinde kendini bir arada tutan kuantum noktaların birkaç elektron durumları incelendi. Hesaplanan şarj ve kızılötesi soğurma spektrumları elektronların etkileşimlerinin farklı durumları arasındaki manyetik alandan kaynaklı geçişleri gösterildi (Wojs ve Hawrylak, 1996). Kuantum nokta yapıları kullanılarak kızıl ötesi foto dedektörler (QDIP), tek elektron transistörler, hafıza elemanları ve kuantum bilgisayarları gibi cihazları geliştirilmeye başlandı (Ryzhii, 1996; Choi ve ark., 1998; Yusa ve Sakaki, 1999; Sim ve ark., 2004). Atomlara olan bu benzerliklerinden dolayı kuantum nokta yapılar, yapay atomlar, süper atomlar veya kuantum nokta atomları olarak da adlandırılır (Zhang ve ark., 2010). Bir dikey homojen dış manyetik alanın etkisinde, harmonik osilatör potansiyelinde etkileşen iki elektronlu sistemin enerji değerleri hesaplandı (Dineykhan ve Nazmitdinov, 1997). Merkezinde safsızlık içeren bir atomun enerji seviyeleri ve bağlanma enerjileri, elektron-fonon etkileşimlerinin varlığında ve yokluğunda pertürbasyon yöntemiyle çalışılmıştır (Chen ve ark., 1997). Bir kuantum nokta yapıda sınırlandırılmış birkaç elektronun, elektronik yapıları üzerindeki parçacık etkisi, manyetik alanın varlığında köşegenleştirme metoduyla hesaplandı (Eto, 1997). Boyutları nano mertebesindeki yarı iletken malzemelerin karakteristik özellikleri, makroskobik ölçekten tamamen farklı olup, nano ölçeğe yaklaştıkça oldukça ilginç ve yeni özellikler ortaya çıkmaktadır ve bu durumda kuantum mekaniğin kuralları devreye girmektedir (Ferry ve Goodnick, 1997). Böyle yapıların şekil ve boyutlarının deneysel olarak kontrol edilmesi teknolojik uygulamada çok geniş bir alan açmıştır (Kouwenhoven ve Marcus, 1998). Slater Tipi Orbitalleri kullanarak iki ve üç elektronlu kuantum nokta yapılarının elektronik özellikleri çalışılmıştır (Bose ve Sarkar, 1998; Szafran ve ark., 1998). Pertürbasyon yöntemini ve

yoğunluk fonksiyonel teorisini (DFT) kullanarak çeşitli kuantum nokta yapılarının fiziksel özellikleri incelendi (Lee ve ark., 1998; Şahin ve Tomak, 2005). Varyasyonel yöntemle küresel simetriye sahip kuantum nokta yapının ve merkezinde safsızlık bulunan bir sistemin, taban durum enerjilerini basit bir dalga fonksiyonu ile çalışıldı (Varshni, 1999).

Bir kuantum noktasında, elektron hareketi tüm boyutlarda sınırlıdır ve atomlardaki gibi kesikli enerji seviyeleri ile keskin durum yoğunluklarının oluşmasına yol açar. Parabolik bir kuantum nokta yapıda sınırlandırılan elektron için polaronik etkileri düzgün bir manyetik alan etkisinde elektron-bulk LO-fonon etkileşimleri hesaba katılarak incelendi (Kandemir ve Altanhan, 1999).

Üretim ve kristal büyütme teknolojisindeki son gelişmelerle birlikte, nanoyapılar olarak adlandırılan düşük boyutlu sistemler üretilmeye başlanmış ve sadece fizik veya mühendislik alanında değil, bunlara ilaveten kimya, biyoloji, tıp gibi birçok bilim dalının ortak çalıştığı, çok disiplinli bir araştırma alanı ortaya çıkmıştır. Bu alana sadece fizik açısından bakılırsa, kuantum kuyuları, kuantum telleri, kuantum noktaları gibi taşıyıcı hareketlerinin bir, iki ve üç boyutta sınırlandırıldığı nano ölçekli yarıiletken heteroyapılar üzerinde yaygın bir şekilde çalışıldığı görülür (Jacak ve ark., 1998; Bimberg ve ark., 1999). Bu yapıların boyutları, parçacıkların De Broglie dalga boyu ile kıyaslanabilecek mertebededir. Bu yüzden, bu yapılar içerisine hapsedilmiş elektronların kuantum mekaniksel davranışları ortaya çıkmakta ve dolayısıyla optik ve elektronik özellikleri üzerinde etkin rol almaktadır (Bimberg ve ark., 1999). Gauss Tipi Orbitalleri kullanarak çok elektronlu kuantum nokta yapının elektronik yapısını lineer varyasyonel yöntemle incelendi (Bednarek ve ark., 1999; 2001; Charty ve Abbott, 2001).Kuantumlu yapılarda kullanılan KGA olarak da adlandırılan bu yöntem, varyasyon yönteminde olduğu gibi enerji minimizasyon ilkesine dayanır ve son zamanlarda fiziğin birçok alanında, özellikle kuantum mekanik sistemlerin elektronik yapılarının belirlenmesinde kullanılmaya başlanılmıştır. (Nakanishi ve Sugawara, 2000; Saha ve ark., 2001; Şahin M. ve Tomak M., 2002; Şafak H. ve ark., 2003; Castro ve ark., 2004; Coley, 2001).

Teorik olarak üç boyutta yerleştirilmiş kuantum nokta yapının dikey manyetik alanın etkisi altında paralel kuantum telleri incelendi ve matris yöntemiyle elektron yoğunluğu ve iletkenlik spektrumları hesaplandı, bu manyeto iletkenlik özellikleri kuantum telleri ve gömülü kuantum nokta yapıları arasındaki saflaşmanın birbirine

kuvvetli bir şekilde bağlı olduğu bulundu (Sheng, 2001). Nguyen ve ark. sadece tek bir varyasyon parametresiyle çok basit bir deneme fonksiyonunu kullanarak, parabolik sınırlayıcı potansiyelle sınırlı kuantum nokta yapılarında hidrojenik safsızlıkların bağlanma enerjisi manyetik alanın etkisinde inceledi (Nguyen ve ark., 2000). Lee, bir kuantum nokta yapıda sınırlandırılmış üç elektronun etkileşimini dikey manyetik alan etkisi altında sayısal köşegenleştirme metodunu kullanarak inceledi (Lee, 2000). Xie, dikey manyetik alanın varlığında kuantum nokta yapının durumlarının, enerji seviyeleri üzerine etkisini birkaç parçacık fiziği metodunu kullanarak inceledi (Xie, 2001). Zhag ve ark., dikey homojen bir manyetik alanın etkisinde harmonik osilatör potansiyelinde iki elektron etkileşimini birkaç parçacık fiziği metodu kullanarak hesapladı (Zhang ve ark., 2003). Cremers ve ark., spin-yörünge saçılması ve manyetik alan etkisinde kaotik GaAs kuantum noktasının iletkenliğinin oldukça iyi bir davranış sergilediğini göstermişlerdir (Cremers ve ark., 2003). Tavernier ve ark., bir dış manyetik alanın etkisinde, harmonik potansiyel ile sınırlandırılmış, iki boyutlu dört elektronun durumu tam köşegenleştirme yaklaşımı kullanılarak elde edildi (Tavernier ve ark., 2003). KGA yöntemiyle Hartree-Fock Roothaan yöntemini birleştirerek, sonlu ve sonsuz potansiyelle sınırlandırılmış bir elektronun, küresel kuantum nokta yapının elektronik özelliklerini inceleyen birçok çalışma vardır (Şahin ve Tomak, 2005; Çakır ve ark., 2006; Çakır, 2007; Çakır ve ark., 2007).

Dikdörtgen sert bir duvar yardımı ve bir potansiyel ile sınırlandırılmış, iki-boyutlu kuantum nokta yapılarda elektronu hapsederek, dış manyetik alanın etkisinde yüklerin yeniden ayarlanmasıyla ilgili kuantum nokta yapının özelliklerini incelediler (Räsänen ve ark., 2004; Stavrou, 2007). Helbig ve ark. tarafından, dış manyetik alanın etkisinde, çok elektronlu sistemlerin tanımlanması, etkin potansiyel yöntemi çerçevesinde, kabul edilen akım-spin-yoğunluk ifadeleri fonksiyonel teorisine genişletilerek incelendi (Helbig ve ark., 2008). Xie, bir dış manyetik alanın etkisinde, disk şeklindeki parabolik kuantum nokta yapılarda, hidrojenik örneğin doğrusal ve doğrusal olmayan optik özellikleri ve köşegenleştirme yöntemi ile yoğunluk matris yaklaşımı altında inceledi (Xie, 2009). Yüksek manyetik alanlarda iki boyutlu kuantum noktaların taban durumlarının kalınlığa etkileri inceledi (Tölö ve Harju, 2009). Küresel bir kuantum nokta yapıda, osilatör gücünü, bantlar arası geçişleri ve soğurma katsayılarını hesapladılar (Özmen ve ark., 2009). Küresel bir kuantum nokta yapının çizgisel ve çizgisel olmayan optik özelliklerini incelediler. Parabolik küresel kuantum

nokta yapıda çizgisel ve çizgisel olmayan optiksel soğurma katsayılarını hesapladılar (Yakar ve ark., 2010a; Yakar ve ark., 2010b). Manyetik alanın etkisinde GaN / AlGaN kuantum nokta yapısında bir hidrojenik örneğin bağlanma enerjileri, tek parçacık etkin kütle yaklaşımı altında varyasyonel yöntemle hesapladılar (Zhang ve ark., 2010).

Manyetik alanın etkisi altında parabolik iki boyutlu kuantum nokta yapıların özellikleri Hartree-Fock yaklaşımı kullanılarak hesaplandı (Puente ve ark., 2010). Yüzey simetrisiyle ilgili çeşitli geometrik sınırlandırmalar için ($Zn_{1-x}Cd_xSe$ / ZnSe) elektronik yapısı ve optiksel anizotropi etkisinde manyetik alanın etkisini incelediler (Kumar ve Kapoor, 2010). Helyum ve helyuma benzeyen kuantum nokta yapılarda iyonizasyon enerjisini ve bazı uyarılmış seviyelerin enerjilerini hesapladılar (Yakar ve ark., 2011). Parabolik potansiyel ile sınırlandırılmış, içinde safsızlık bulunduran küresel bir kuantum nokta yapıda deşiklerin kırılma indislerini ve soğurma katsayılarını hesapladılar (Çakır ve ark., 2012). Tek elektronlu küresel kuantum nokta yapıların lineer ve lineer olmayan optiksel özelliklerini ve rölativistik düzeltme terimlerini hesapladılar (Çakır ve ark., 2013).

Silindirin simetri ekseni boyunca uygulanan bir manyetik alanın varlığında, en düşük rezonans durumlarının spektrum özelliklerinin silindirik bir kuantum nokta yapıda, özellikle foton soğurma süreçlerinde kuantum nokta yapıların rezonans ve bağ durumlarında önemli bir rol oynadığı belirlenmiştir (Ramos ve Osenda, 2014). İki elektronlu sonsuz parabolik küresel kuantum nokta yapının, taban ve bazı uyarılmış durum enerjilerini kuantum nokta yarıçapına göre değişimi KGA tekniğiyle hesaplandı (Yakar ve ark., 2015a). Sonsuz parabolik kuantum nokta yapısının taban ve bazı uyarılmış durumlar için optiksel geçişleri hesaplandı (Çakır ve ark., 2015). Sonsuz küresel kuantum nokta yapısının çizgisel ve çizgisel olmayan soğurma katsayıları hesaplandı (Yakar ve ark., 2015b).

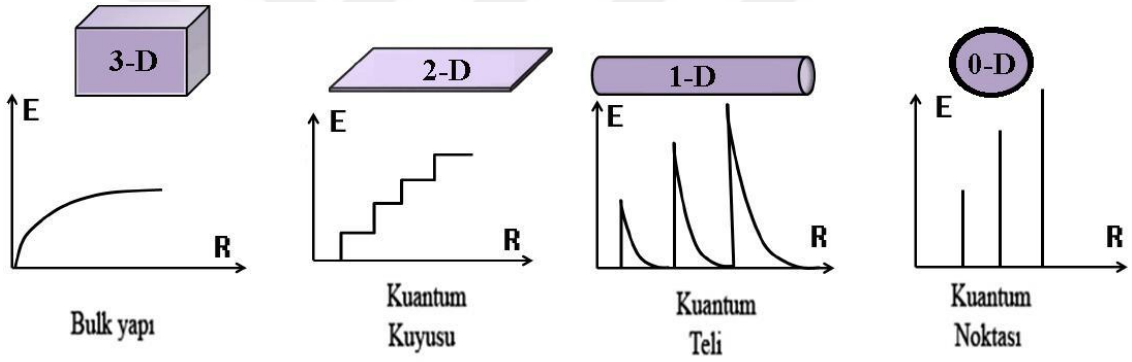
Manyetik alan etkisini inceleyen yukarıda bahsedilen bu çalışmaların çoğunda, kuantum nokta yapıların taban durumlarının elektronik özellikleri incelenmiştir. Böyle yapıların uyarılmış seviyelerinin elektronik özelliklerini dış manyetik alan varlığında inceleyen çalışmalar çok azdır. Biz bu çalışmamızda dış manyetik alan etkisinde parabolik potansiyelle sınırlandırılmış bir kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış seviyelerinin enerjilerini paramanyetik terimi de içine katarak ve dalga fonksiyonlarını kullanarak sonlu sınırlayıcı potansiyel altında KGA tekniği ile hesapladık. Bu hesaplanan enerji özdeğerlerini ve dalga fonksiyonlarını kullanarak

pertürbasyon teorisi ile diamanyetik etkiyi inceledik. Kuantum nokta yapının farklı boyutunda ve sınırlandırıcı potansiyelin farklı değerlerinde manyetik alanın şiddetini de değiştirerek elektronik özelliklerini inceledik.

2. KUANTUM NOKTA YAPILAR

Kuantum noktaları, optik ve elektronik özellikleri ile iyi bir yarı iletken olup nano kristal yapılardır. Akademik ilginin artmasıyla kuantum nokta yapılar üzerindeki çalışmalar gün geçtikçe artmakta ve gelişme göstermektedir. Nano teknoloji denince 100 nanometreden küçük yapılar aklımıza gelmektedir. Kuantum mekaniği prensiplerine göre, 100 nm sınırını aştıktan sonra malzemedeki atomlar kuantum özelliklerini göstermektedir. Kuantum noktaları, 100 nm altındaki ölçekler oluşturmaktadır.

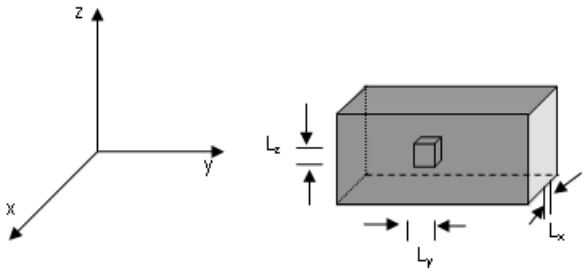
Kuantum nokta yapıların kontrol edilebilir olduğu boyutları elektronun hareketine bağlı olarak kuantum nokta yapıdaki bir sistem, bulk yapı (3-D), kuantum kuyuları (2-D), kuantum telleri (1-D), kuantum noktaları (0-D) olmak üzere dört farklı şekilde oluşturulabilir. Bu yapılar Şekil 2.1'de gösterilmiştir.



Şekil 2.1. Üç boyutlu bulk malzeme (3-D) Bir boyutta sınırlandırılmanın yapıldığı kuantum kuyusu (2-D) İki boyutta sınırlandırılmanın yapıldığı kuantum teli (1-D) Üç boyutta sınırlandırılmanın yapıldığı kuantum noktası (0-D).

2.1. Kuantum Nokta Yapıları

Kuantum nokta yapılarda, elektronun hareketi düzlemdeki x,y,z koordinatlarının tümünde engellenmiş heteroyapılardır. Şekil 2.2 kuantum nokta yapısı belirtilmiştir.



Şekil 2.2. Kuantum nokta yapının şematik gösterimi.

Kuantum nokta yapısı için Schrödinger denklemi,

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

biçiminde yazılabilir. Bütün koordinatlardaki sınırlandırıcı potansiyeli sonsuz yükseklikte alırsak, kuyu içinde $V(x,y,z)=0$ olur. Dalga fonksiyonumuza sınır şartlarını uygularsak vektör bileşenleri,

$$k_{nx}=\frac{n_x\pi}{L_x} \quad k_{n_y}=\frac{n_y\pi}{L_y} \quad ve \quad k_{n_z}=\frac{n_z\pi}{L_z} \tag{2.2}$$

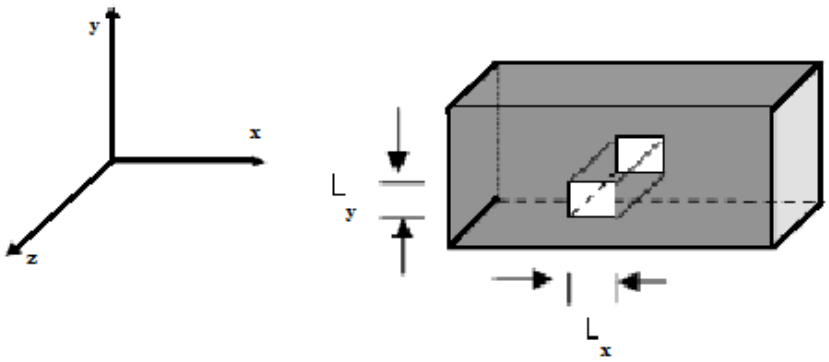
biçimindedir. Enerji özdeğerleri ise,

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{n_x\pi}{L_x}\right)^2+\left(\frac{n_y\pi}{L_y}\right)^2+\left(\frac{n_z\pi}{L_z}\right)^2\right] \tag{2.3}$$

ile ifade edilir.

2.2. Kuantum Telleri

Bu kuantum nokta yapıda elektron, x,y,z koordinatlarından herhangi birinde serbestçe hareket etmektedir. Diğer iki boyutta elektronun hareket etmesi engellenmiştir. Şekil 2.3'te x- ve y-doğrultusunda engellenmenin olduğu bir kuantum teli ifade edilmiştir.



Şekil 2.3. Kuantum telinin şematik gösterimi.

Bu sistemdeki elektron, tek bir koordinatta serbest hareket etmesinden dolayı serbestlik derecesiyle karakterize edilir. Böyle bir kuantum nokta yapı içinde serbestçe dolanan bir elektronun dalga fonksiyonunu,

$$\psi(x,y,z)=\exp(ik_z z)\varphi(x,y) \tag{2.4}$$

biçiminde yazabiliriz. $\varphi(x,y)$ engellemenin olduğu doğrultuları ifade eden dalga fonksiyonumuzdur. Engellemenin olduğu iki boyuttaki Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}\right)\varphi(x,y)+V(x,y)\varphi(x,y)=E_{x,y}\varphi(x,y) \tag{2.5}$$

şeklinde yazılır. x- ve y-doğrultusunda uygulanan sınırlayıcı potansiyelleri sonsuz büyüklükte seçersek, kuyunun içerisinde $V(x,y)=0$ olur. Dalga fonksiyonumuza sınır şartları uygulayarak yeniden düzenlersek,

$$k_{n_x}=\frac{n_x\pi}{L_x} \quad ve \quad k_{n_y}=\frac{n_y\pi}{L_y} \tag{2.6}$$

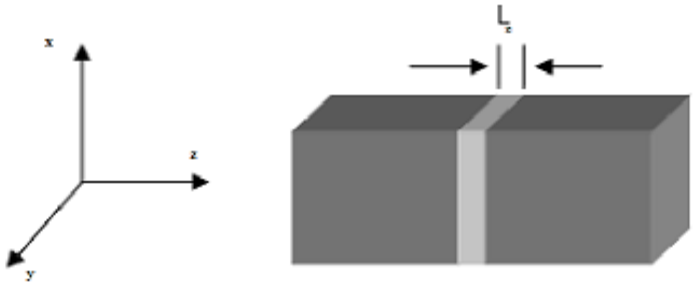
bulunur.. E enerji özdeğerleri ise,

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left[k_z^2+\left(\frac{n_x\pi}{L_x}\right)^2+\left(\frac{n_y\pi}{L_y}\right)^2\right] \tag{2.7}$$

ile ifade edilir.

2.3. Kuantum Kuyuları

Şekil 2.4'te belirtilen koordinat sisteminde gösterildiği gibi elektronun hareketi x-y,y-z veya x-z düzlemlerinde serbestçe dolanır. Kalan tek koordinatta elektronun hareketi engellenmiştir. İki koordinatta hareket edebilen bu tür kuantum nokta yapılara aynı zamanda iki boyutlu elektron gazı da denir.



Şekil 2.4. Kuantum kuyusunun şematik gösterimi.

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

$$\psi(x,y,z)=\exp(ik_x x+ik_z y)\varphi(z) \tag{2.8}$$

yazabiliriz. Burada k_x ve k_y sırasıyla x ve y yönündeki dalga vektörü bileşenleridir. $\varphi(z)$

ise elektronun hareketinin sınırlandırıldığı yöndeki dalga fonksiyonudur.Schrödinger denklemi,

$$-\frac{d^2\varphi(z)}{dz^2}+\frac{2m}{\hbar^2}(E_z-V_z)\varphi(z)=0 \tag{2.9}$$

Burada E_z ve V_z sırasıyla, z yönündeki harekete karşılık gelen enerjisi ve sınırlayıcı potansiyeli ifade eder.

Sınırlayıcı potansiyel kuyu sınırlarında sonsuz yükseklikte alınırsa, kuyu içinde V_z=0 olur. Dalga fonksiyonumuza sınır şartlarını uygularsak dalga vektörü,

$$k_{n_z}=\frac{n_z\pi}{L_z} \tag{2.10}$$

değerlerini alır. Bu durumda kuyu içindeki enerji özdeğerleri,

$$E_{n_z}=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_z\pi}{L_z}\right)^2 \tag{2.11}$$

şeklinde kesikli bileşene sahip olur. Bu durumda kuyu içerisindeki elektronun toplam enerjisi,

$$E_{n_z}=\frac{\hbar^2}{2m}\left[k_x^2+k_y^2+\left(\frac{n_z\pi}{L_z}\right)^2\right] \tag{2.12}$$

ile verilir.

2.4. Elde Ediliş Yöntemi

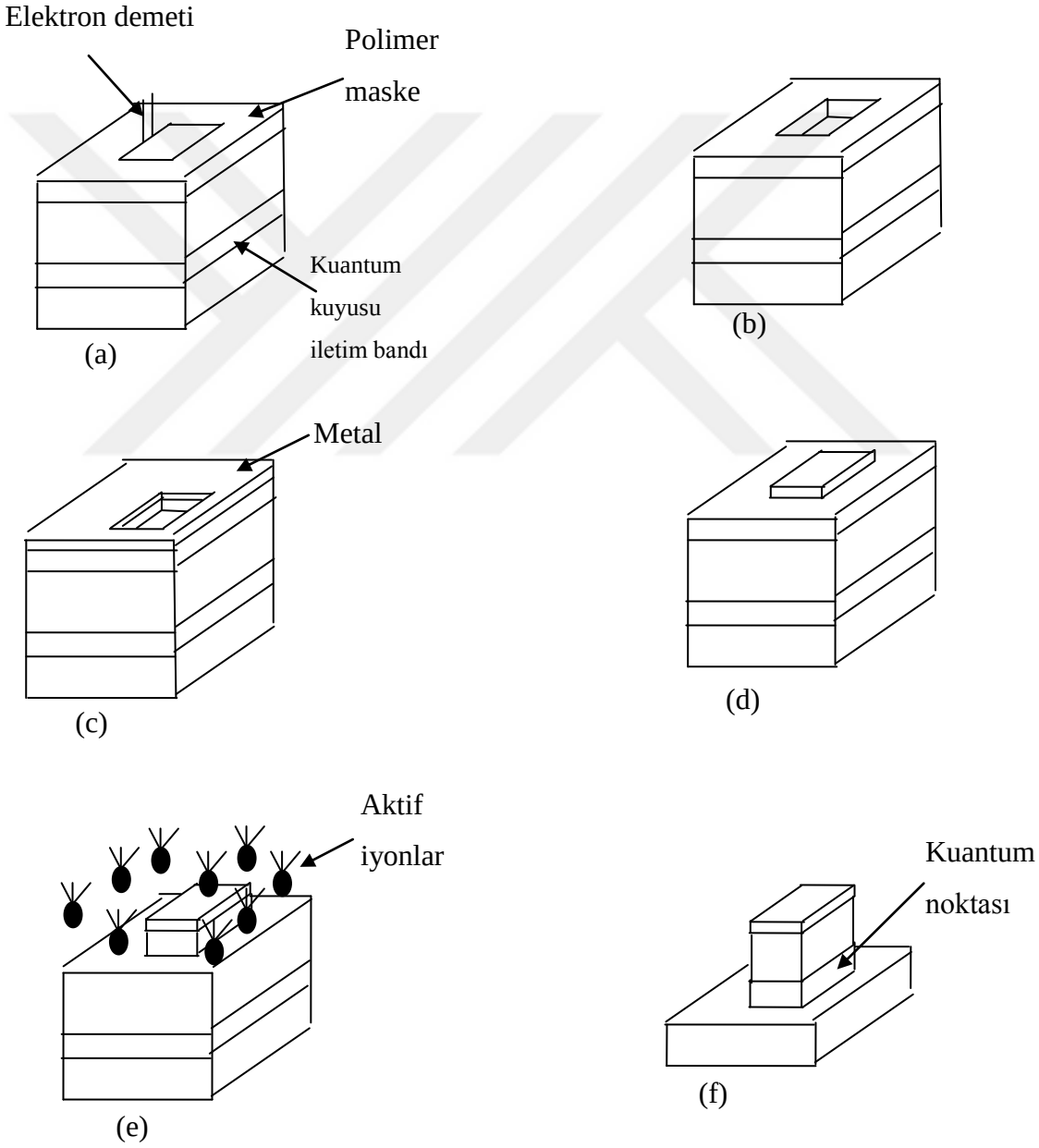
Kuantum noktaları, periyodik cetvelin II-VI, III-V grubu bileşiklerinden elde edilebilir. Yani neredeyse bütün yarı iletken – metal bileşiklerinden kuantum nokta yapının elde edilmesi söz konusudur. Bugün ise elektriksel ve optik özelliklerinden kaynaklı üretimi en fazla üretilen kuantum noktalar, CdSe, InAs, CdS,GaN, PbSe, ZnS, InGeAS, CdTe, PbS'dir. En sık kullanılan kuantum nokta yapılar yarı iletken CdSe çekirdeğin ZnS kabuğuyla kaplanması ile elde edilir. ZnS kabuk, CdSe çekirdeğin bazı özelliklerinin kararlılığı için gereklidir. Bu özellikler kimyasal ve optik özellikleri barındırır.

Kuantum noktalara, aynı zamanda birkaç atomdan binlerce atoma kadar atom barındırabilen çok büyük yapay bir atom da denebilir. Yapay atom denmelerinin bir başka sebebi ise boyutlarının değiştirilmesiyle bant boşluğunun ayarlanabiliyor özelliğe sahip olmasıdır. Bu da bize değişik şekillerde kuantum nokta yapının elde edebileceğimizi gösterir. Dört farklı şekilde bu yapılar oluşturulabilir. Bunlar asitle eritme yöntemi, modüle edilmiş elektrik alan yöntemi, seçici büyütme yöntemi ve

kuantum kuyusu ve engel arası iç difüzyon yöntemi, yarı iletken mikroksitaller şeklinde tanımlıdır.

2.4.1. Asitle Eritme Yöntemi

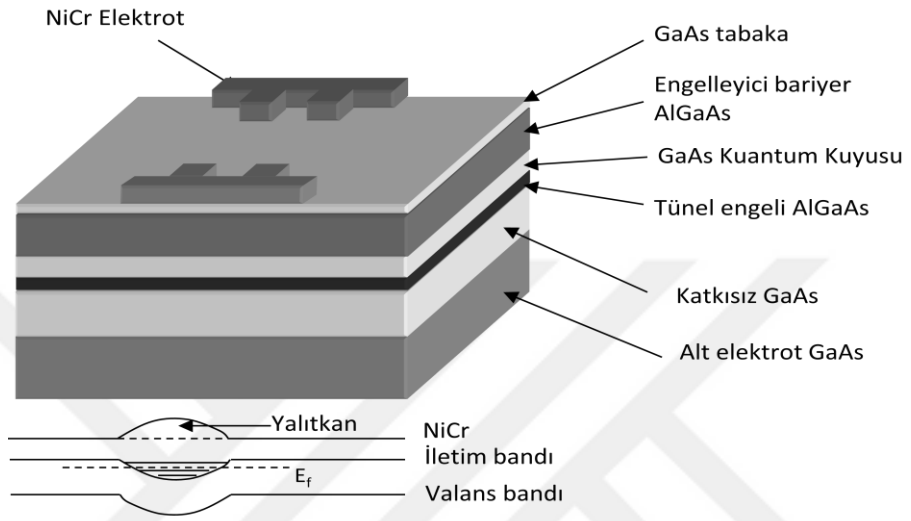
Bu yöntemde metal bir yüzey asit ile aşındırılır. Bu yüzeye istenilen düzeyde şekiller verilerek işlem sonlandırılır. Kuantum nokta yapıların elde edilişindeki ilk metot olan bu yöntemde, boyutları 10-100 nm mertebesinde sınırlandırılması ile üretimi gerçekleştirilmiş olur. Bu yöntemin dezavantajlarından biri, malzemenin köşelerinde, malzemenin özelliğine bağlı olarak ortaya çıkan hatalar olabilir.



Şekil 2.5. Asitle eritme yöntemiyle kuantum nokta yapısının üretim sürecinin şematik gösterimi.

2.4.2. Modüle Edilmiş Elektrik Alan Yöntemi

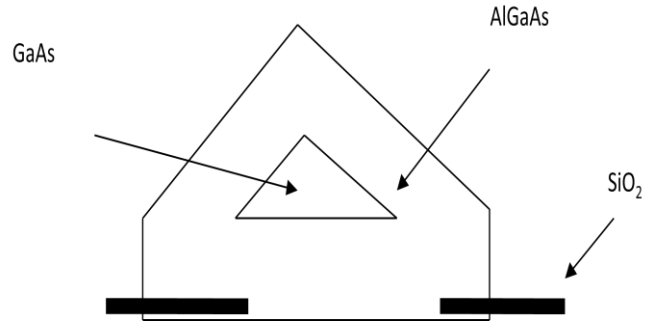
Bu yöntem çok küçük elektrotların kuantum kuyusunun yüzeyine yerleştirilerek elde edilmesi esasına dayanır. Bu yüzeye yerleştirilen elektrotlara potansiyel fark uygulanarak elektronların hareketi belli doğrultularda sınırlandırılır ve çok küçük elektrik alan oluşur. Bu yöntemde malzemenin kenarlarında herhangi bir kusur oluşmaz.



Şekil 2.6. Kuantum kuyusu üzerinde küçük elektrotlar yerleştirilerek kuantum nokta yapının üretimi.

2.4.3. Seçici Büyütme Yöntemi

Bu yöntemde iki yarı iletken malzeme kullanılır. Bunlardan biri çok dar yasak enerji aralığına sahip GaAs , bir diğer malzeme üzeri geniş ve yasak enerji aralığına sahip AlGaAs malzemesidir. Bu yöntemde GaAs malzemesinin üzerine AlGaAs malzemesi kaplanır. Daha sonra oluşturulan malzemenin üzerine de koruyucu bir katman (SiO_2) ile kaplanır. Elde edilen bu yüzey üzerinde istenilen büyütmenin uygulanacağı bölge belirlenir. Daha sonra bu bölge üzerinde eritme yapılarak küçük üçgen bölgeler oluşturulur. Bu küçük üçgen yüzeye Metal Oksit Kimyasal Buhar Biriktirme (MOCVD) tekniği uygulanır ve 700 ^{0}C-800 ^{0}C ‘ye kadar sıcaklığı arttırılır. Sıcaklığı arttırılan malzemenin hacimleri yeterli büyüklüğe ulaşarak tetrahedral yapıya dönüşür ve yöntem tamamlanıp malzeme elde edilmiş olur. Elde edilen malzemenin boyutları 100 nm mertebesinden daha küçük yapıya sahiptir.

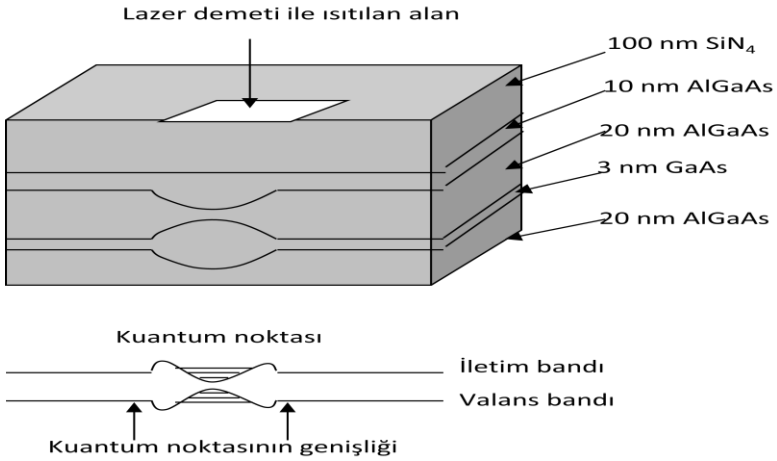


Şekil 2.7. Kuantum nokta yapısının seçici büyütme yöntemiyle elde edilmesinin şematik gösterimi.

2.4.4. Kuantum Kuyusu ve Engel Arası İç Difüzyon Yöntemi

Bu yöntemde kuantum kuyusunda belirlenen yüzey, lazer yöntemi uygulanarak ısıtılır. Isıtılan yüzeydeki elementler olan galyum ve alüminyum atomlar homojen biçimde karışırlar ve o bölgede bant yapısının görülmesine sebep olur. Bu bölgenin yasak enerji bant aralığı, ısıtılmayan diğer bölgelerin enerji aralığından çok daha düşüktür.

Eğer bu işlem dizini daha büyük boyutlardaki malzemeler için uygulanırsa, aralarında yasak enerji aralığına sahip olan ve içinde elektronların hapsedildiği kuantum noktalar elde edilmiş olur.



Şekil 2.8. Belirlenen herhangi bir yüzeyin lazer yöntemi ile ısıtılmasıyla kuantum yapının elde edilmesi.

2.4.5. Yarı İletken Mikrokristaller

Kuantum nokta yapılarının üretilmesindeki diğer bir teknik ise, yarıiletken malzemelerin mikrokristal formunun, cam benzeri dielektrik malzemeler içerisine yerleştirilerek oluşturulması şeklindedir. Bu düşünceden yola çıkarak yapılan ilk

çalışmadan, yaklaşık %1 oranında yarıiletken fazların (CdS, CuCl, CdSe, CuBr) eklendiği silikat cam, birkaç saat boyunca yüksek sıcaklıklara maruz bırakılmıştır (Ekimov ve ark., 1985). Böylece, yaklaşık birbirine yakın büyüklüklerde, uygun mikrokristal örnekleri elde edilmiştir. Ortalama kristal yarıçapının sıcaklığa ve ısıtma zamanına bağlı olması, mikrokristallerin büyüklüklerinin kontrol edilebilmesini sağlamaktadır. Bu yöntemle elde edilen kuantum noktaların yarıçapları 1,2-38 nm aralığında değişkenlik göstermektedir. Burada dielektrik malzeme olarak kloritler tercih edilmektedir.

2.5. Etkin Kütle Yaklaşımı

Kuantum kuyu yapılar farklı yarı iletken malzemeler arasında heteroeklem oluşturularak üretilmektedir. Bu yarı iletken malzemeler arasındaki farkın bazıları dielektrik katsayıları, band yapıları, örgü sabitleri ve en önemli fark olan etkin kütle değerlerine sahip olmalarıdır. Kuantum kuyu içerisinde enerji değerlerinin hesaplanmasında etkin kütle değerinin ele alınması sonuçlar açısından oldukça önemli bir yere sahiptir. Çünkü bu değerin hesaplara katılmaması sonuçların güvenilirliğini azaltır ve büyük sapmalara neden olur. Örneğin, $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$ heteroyapıyı göz önüne alalım. Bu kuantum nokta yapıda yasak enerji aralığı çok az olan GaAs kuyu, yasak enerji aralığı oldukça büyük olan AlGaAs bariyer malzemesidir. Buradaki x ifadesi stokometri oranının karşılığıdır. Burada x değerinin değişmesi yarı iletken malzemenin etkin kütle ve enerji değerini önemli oranda değiştirecektir. Dolayısıyla değişik x değerlerindeki farklı etkin kütle değerleri, farklı taban durum enerjilerinin ölçümüne neden olacaktır.

Yarı iletkeni oluşturan malzemelerin arasındaki etkin kütle farkı büyüdükçe taban durum enerjilerindeki farklılık da artacaktır. Dolayısıyla etkin kütlenin hesaba katılarak yapılması sabit kütle alınarak yapılan hesaptan çok farklı ve iyi sonuçlar verdiğinden kullanılması doğru olacaktır.

2.6. Durum Yoğunluğu

Durum yoğunluğu enerjinin bir fonksiyonudur. Herhangi bir olasılık hesabı olan sistemlerde E ile E+dE enerji aralığında mevcut girilebilir durumların sayısı olarak tanımlanır. Şimdi durum yoğunluklarının boyutlara göre, 3 boyutlu, 2 boyutlu, 1 boyutlu ve 0 boyutlu durumları vardır.

2.6.1. Sıfır Boyutlu Yapılarda (Kuantum Nokta) Durum Yoğunluğu

Elektronun hareketi üç boyutta da sınırlandırılmıştır. k_x, k_y ve k_z vektör bileşenleri dolayısıyla V_k hacmi sabittir. Bu nedenle böyle bir sistemde durum yoğunluğu tüm doğrultularda kesiklidir. Bu tip sıfır (0) boyutlu yapı için V_k hacim ifadesi,

$$V_k = k_x k_y k_z = \left(\frac{2n_x\pi}{L_x}\right).\left(\frac{2n_y\pi}{L_y}\right).\left(\frac{2n_z\pi}{L_z}\right) \tag{2.13}$$

şeklinde tanımlıdır ve sabittir. Dolayısıyla durum yoğunluğu ifademizi bulmak istersek,

$$dN = \frac{V}{(2\pi)^3} dV_k \tag{2.14}$$

Eğer V=1 birim hacim seçilecek olursa ve ayrıca spin durumları göz önünde bulundurulursa,

$$N = \frac{2}{(2\pi)^3}\left(\frac{2n_x\pi}{L_x}\right).\left(\frac{2n_y\pi}{L_y}\right).\left(\frac{2n_z\pi}{L_z}\right) = \frac{2}{L_x L_y L_z}\left(n_x n_y n_z\right) \tag{2.15}$$

yazılabilir. Görüldüğü gibi bu durum yoğunluğu ifadesinde enerji terimi doğrudan yer almaktadır. İfadenin enerjiye bağımlılığı (n_x, n_y, n_z) kuantum sayıları ile ifade edilir. Bu kuantum sayıları birer tamsayı olduklarından ve her üç doğrultuda da sınırlandırma söz konusu olduğundan, N durum yoğunluğundaki enerjiyle değişim kesikli artışlar şeklindedir ve sonuçta enerjiye bağlı durum yoğunluğu ifadesini,

$$N(E) = \frac{2}{L_x L_y L_z}\left(n_x n_y n_z\right)\sum_{L_x L_y L_z}\Theta(E - E_T) \tag{2.16}$$

ifadesi elde edilir. Buradaki E_T ifadesi sistemin toplam enerjisidir.

2.6.2. Bir Boyutlu Yapılarda (Kuantum Tel) Durum Yoğunluğu

Bir sistemde elektronun hareketi iki boyutta sınırlandırılıyorsa, tek boyutta serbestlik derecesine sahip bir sistem elde edilir. $L_x >> L_y \approx L_z$ olduğu bir sistemi göz önüne alalım. Böyle bir sistemin enerji ifadesi,

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}k_x^2 + \left[\left(\frac{2n_y\pi}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{2n_z\pi}{L_z}\right)^2\right] \tag{2.17}$$

şeklinde verilir. $\vec{k}$ uzayında hacim ve diferansiyel hacim değerleri,

$$dV_k = k_x k_y k_z = \left(\frac{2n_y\pi}{L_y}\right).\left(\frac{2n_y\pi}{L_y}\right)dk_x \tag{2.18}$$

şeklinde tanımlıdır. Diğer taraftan $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = k_x^2 + k_\perp^2$ ($k_\perp^2$ sabit) olduğundan, $kdk = k_x dk_x$ elde edilir. Sonuçta dN durum yoğunluğu, spin etkilerinin de göz önüne alınmasıyla,

$$dN = \frac{2V}{(2\pi)^3} dV_k = \frac{2V}{(2\pi)^3} \left(\frac{2n_y\pi}{L_y}\right)\left(\frac{2n_z\pi}{L_z}\right) dk_x = \frac{V}{\pi L_y L_z} n_y n_z dk_x \tag{2.19}$$

olarak bulunur. Denk. 2.17 ifadesinin türevini alırsak,

$$dk_x = \frac{2m}{\hbar^2} \frac{dE}{\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - E_\perp)}} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{dE}{\sqrt{(E - E_\perp)}} \tag{2.20}$$

elde edilir. Diğer taraftan serbestlik derecesinin olduğu *x*'e dik düzlemdeki $E_\perp$ enerjisi,

$$E_\perp = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{2n_y\pi}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{2n_z\pi}{L_z}\right)^2\right] \tag{2.21}$$

şeklinde verildiğinden, *dN* durum yoğunluğu için,

$$dN = \frac{V}{\pi L_y L_z} n_y n_z \left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{dE}{\sqrt{(E - E_\perp)}}\right) \tag{2.22}$$

ile bulunur veya birim hacimde tek boyutlu sistemde durum yoğunluğu ifadesi,

$$N(E) = \frac{n_y n_z}{\pi L_y L_z} \left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} \frac{dE}{\sqrt{(E - E_\perp)}}\right) \tag{2.23}$$

şeklinde verilir.

2.6.3. İki Boyutlu Yapılarda (Kuantum Kuyu) Durum Yoğunluğu

Elektronun hareketi tek boyutta sınırlandırılmış, diğer iki boyutta serbest hareketi olduğundan bu sınırlamanın olduğu doğrultularda kesikli enerji değerleri görülür. Bu durum doğrultular arasında $L_x = L_y >> L_z$ ile ifade edilir. Sistemin toplam enerji ifadesini,

$$E_T = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2\right) + E_z \tag{2.24}$$

ile ifade edilir. *z*- doğrultusundaki enerji ifadesi,

$$E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \tag{2.25}$$

şeklindedir. $k_z = \frac{2n_z\pi}{L_z}$ vektörün ifadesi kullanılarak $\vec{k}$ uzayında seçilen bölgenin hacmi,

$$V_k = \pi\left(k_x^2 + k_y^2\right)k_z = \pi k_\perp^2 \frac{2n_z\pi}{L_z} \tag{2.26}$$

olarak bulunur. Burada k_x ve k_y sürekli olup, $k_\perp^2 = k_x^2 + k_y^2$'dir. dN durum yoğunluğu hesaplanırsa,

$$dN = \frac{V}{(2\pi)^3} dV_k \tag{2.27}$$

ifade edilir.

$$dV_k = 2\pi k dk \frac{2n_z\pi}{L_z} \tag{2.28}$$

ifadesini Denk 2.27'de yerine yazıp düzenlersek,

$$dN = \frac{V}{\pi L_z} k dk \tag{2.29}$$

olarak bulunur.

Durum yoğunluğu için $S = L_x L_y$ ifadesini ve Denk. 2.20'yi Denk. 2.29'da yerine yazıp düzenlersek,

$$dN = \frac{V}{\pi L_z}\frac{m}{\hbar^2} dE = \frac{Sm}{\pi\hbar^2} dE \tag{2.30}$$

ile bulunur. Bunu birim hacimde yazmak istersek,

$$N(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2} \tag{2.31}$$

şeklindedir. Bu sonuç bize x-y düzleminde sınırlandırmanın olmadığı düzlemde durum yoğunluğunun sürekli olduğunu gösterir. Belirlenen bir enerji değeri için $N(E)$ durum yoğunluğu 2 boyutlu durum için sabit bir değer alır. Burada tek bir alt band göz önüne alınmıştır. Eğer iki boyutlu yapıda çok sayıda alt band mevcut ise, bu durumda herhangi bir E enerji değeri için durum yoğunluğu bütün alt bandlar üzerinden toplam şeklinde ifade edilir. Sonuç olarak iki boyutlu sistemde birim hacimdeki durum yoğunluğu ifadesini,

$$N(E)=\sum_{i=1}^{n}\frac{m}{\pi\hbar^2}\Theta(E-E_i) \tag{2.32}$$

ifadesi elde edilir. Bu ifadedeki $\Theta(E-E_i)$ terim basamak fonksiyonudur ve $E-E_i>0$ için 1, $E-E_i<0$ için 0 değerini alır.

L_Z kuyu genişliğine sahip bir sistem ve n kuantum sayısı için $N(E)$ durum yoğunluğu sabit bir değere sahiptir. n kuantum sayısı arttıkça durum yoğunluğu, basamak fonksiyonuna uygun biçimde ani yükselmeler gösterir ve n'nin tekrar artmasına kadar yine sabit bir değerde kalır. Dolayısıyla durum yoğunluğunun değeri $\frac{m}{\pi\hbar^2}$ büyüklüğünün katları şeklinde değişir.

2.6.4. Üç Boyutlu Yapılarda (Bulk Yapı) Durum Yoğunluğu

Kenar uzunlukları L_x,L_y ve L_z olan bir küp üç- boyutlu uzayda ele alalım. Burada bu kenar uzunlukları birbirine eşit olup, küp içerisinde hareket eden bir elektronun dalga fonksiyonu,

$$\psi(x,y,z)=\sin(k_x x)\sin(k_y y)\sin(k_z z) \tag{2.33}$$

şeklinde tanımlıdır. Elektronların küp içerisinde hapsedildiğini düşünürsek, yüzeylerde potansiyeli sonsuz alalım. Dalga fonksiyonumuz için sınır şartlarını ele alırsak,

$$k_x L_x=2\pi n_x,\ k_y L_y=2\pi n_y,\ k_z L_z=2\pi n_z \tag{2.34}$$

olacaktır. Şimdi izinli kuantum durumlarının sayısını bulmak için $\vec{k}$ uzayında yarıçapı *k* olan bir küre ele alalım. Bu kürenin hacmi $V_k=\frac{4}{3}\pi k^3$ ile hesaplanır. Gerçek uzayda L_x,L_y ve L_z boyutlu kübün hacmi $V=L_x L_y L_z$ olup, kenar uzunlukları birbirine eşit olduğunu göz önünde bulundurursak hacmimiz $V=L^3$ olur. $\vec{k}$ uzayında hacme karşılık gelen ters uzay hacmi,

$$V_k=\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3=\frac{(2\pi)^3}{V} \tag{2.35}$$

olur. $\vec{k}$ uzayında birim hacme düşen izinli durumların sayısı,

$$\frac{1}{V_k}=\frac{V}{(2\pi)^3} \tag{2.36}$$

halinde ifade edilir.

$V_k=\frac{4}{3}\pi k^3$ ifadesinde her iki tarafın türevini alırsak,

$$dV_k = 4\pi k^2 dk \tag{2.37}$$

şeklinde bulunur.

Şimdi k ile $k+dk$ aralığındaki izinli kuantum durumlarının sayısını,

$$N = \frac{V}{(2\pi)^3} V_k \tag{2.38}$$

şeklinde ifade ederiz. Şimdi her iki tarafın türevini alırsak,

$$dN = \frac{V}{(2\pi)^3} dV_k \tag{2.39}$$

şeklinde bulunur.

Denk. 2.37 ifadesini Denk. 2.39'de yerine yazarsak izinli durumların sayısı,

$$dN = \frac{V}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk \tag{2.40}$$

olacaktır. Bir kristalde etkin kütle yaklaşımı ile elektronların sahip olduğu enerji E ise $\vec{k}$ vektörünün büyüklüğü,

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{2.41}$$

şeklinde verilir. dk türevi hesaplanırsa,

$$2kdk = \frac{2m}{\hbar^2} dE \tag{2.42}$$

şeklindedir. Şimdi dk ifadesini yalnız bırakalım. İfade,

$$dk = \frac{m}{\hbar^2}\frac{dE}{k} = \frac{m}{\hbar^2}\frac{dE}{\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}} = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\frac{dE}{\sqrt{E}} \tag{2.43}$$

olur. Şimdi spin etkisini göz önünde bulundurarak durum yoğunluğu olan Denk. 2.43 ifadesini Denk. 2.40 ifadesinde yerine yazarsak,

$$dN = \frac{2V}{(2\pi)^3} 4\pi\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\frac{dE}{\sqrt{E}} = \frac{V}{\pi^2}\sqrt{2}\left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{E}\,dE \tag{2.44}$$

bulunur.

3- boyutta birim hacimdeki durum yoğunluğu ise aşağıdaki şekilde elde edilir.

$$N(E) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{E} \tag{2.45}$$

2.7. Kuantum Nokta Yapıların Teknolojik Uygulamaları

Kuantum nokta yapılar küçük boyutlara sahiptir ve bu boyutlar kontrol edilebilir bir parametredir. Bu özelliğinden dolayı kuantum sınırlaması (quantum confinement) etkisi ile eş zamanlı uygulanınca kuantum noktalar çok farklı optik ve elektriksel özellikler gösterirler. Çünkü kuantum sınırlandırma etkisinde, kuantum noktaların boyutlarının değişmesiyle birlikte yaptıkları ışımanın rengi (frekansı) de değişiyor. Küçük yarıçaplı noktada sistem mavi iken büyük nokta yarıçaplı sistem kırmızı ışıma yapar. Yani bir kuantum noktalara, görülebilir bütün frekanslarda ışıma yaptırabilmek ve hatta kızılötesi ışıma yaptırabilmek, kontrol edilebilir bir işlemdir. Bu sayede kuantum noktalar tıbbi görüntüleme işlemleri, LED'ler, güneş panelleri, elektronik ve bilgisayar uygulamaları için önemli bir teknolojinin var olduğunu kanıtlıyor.

Günümüzde bu gelişmeye doğan ihtiyaca cevap verebilmek için bilim insanlarının kuantum nokta yapıların sistemleri üzerine birçok araştırma ortaya çıkmıştır ve her geçen gün kuantum yapılara olan merak hızla artmaktadır. Araştırmalar doğanın kaynaklarının daha kullanılabilir ve yenilenebilir olduğunu ifade eder. İnsanların gelecek kaygısı da kuantum yapıların araştırmasının geliştirilmesi anlamını taşır.

Dünyanın önde gelen ülkeleri artık yenilenebilir enerjinin varlığının araştırılması üzerine çok fazla ar-ge çalışması yapmaktadır. Bu ihtiyaçlardan doğan kuantum nokta yapıların kullanım alanı geniş bir perspektife yayılmıştır. Kaynaklarının büyük bir kısmını bu çalışmalara harcamaktadır. Günümüzde giderek kullanımı yaygınlaşan kuantum noktalar, en çok biyoloji, sağlık ve elektronik alanında etkinlik kazanmıştır ve birçok araştırma ihtiyacı doğmuştur. Bunun sebebi bilim insanlarının düşük maliyet, yüksek kalite ve insan yaşam kalitesini artırma çabasından doğmuştur. Daha detaylandırmak gerekirse, tıbbi uygulama alanlarında, güneş panellerinde, televizyon teknolojisinde, cep telefonu teknolojisinde kısaca akla gelebilecek her türlü elektronik ürünlerde uygulanmaya başlanmıştır. Bu da bu teknolojilerin kullanımını kolaylaştırdığı gibi ekonomiklik kazandırmıştır.

Devlet ekonomilerine katkısı oldukça fazla olduğu için günümüzde yapılan araştırmalar bu yönde eğilim göstermektedir. Türkiye de bu gelişmelerden biri olan güneş panellerine enerji ihtiyacını karşılamak için oldukça fazla kaynak ayırmaktadır. Kısaca insanlara her hususta yardımcı olabilecek bu teknolojik gelişmelere yol gösteren kuantum nokta yapıların varlığı, gelecekte her alanda faaliyet göstererek yeni teknolojilerin üretimine katkı sağlayacaktır.

3. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ

3.1. Kuantum Genetik Algoritma

Genetik algoritmanın ilk hali üzerinde bazı değişiklikler yapılarak 2000 yılında önerilen kuantum genetik algoritma ile kuantum mekaniksel sistemlerin incelenmesinde genetik algoritmalar daha kullanışlı hale gelmiştir (Grigorenko ve E., 2000). Sonrasında bu yöntemle basit bazı kuantum mekaniksel sistemler çözülmüştür (Grigorenko ve E., 2001; 2002; Şahin ve ark., 2005; César O. ve ark., 2011).

Algoritmanın klasik genetik algoritmadan farkı, bazı durumlar fonksiyonların daha iyi sonuçlar vereceğinin görülmesi ve uygunluğunun gerçekleştirilebilir olmasıdır. Klasik genetik algoritmada, örneğin bir fonksiyondaki minimum durum hesabı gözlenmek isterken, ortadaki en az durumlardan oluşan elemanlar ikili olacak şekilde oluşturulur. Çiftlenme, çaprazlama ve mutasyon gibi işlemler dizini bu esnada uygulanır. Bu durumun kuantum mekaniğinde çözümü bir dalga fonksiyonunu belirtir. Bu dalga fonksiyonu enerjinin değerini en az yapan değeri ifade eder.

Genetik algoritmanın bir problemde uygulanması iki farklı şekilde yapılır. Bunlardan birincisi, dalga fonksiyonunun belirlenmesi ve genetik algoritma ile bu dalga fonksiyonunun enerjisini minimum yapan değerin hesabıdır. Diğer bir durum da, başka hiçbir işlem yapmadan doğrudan dalga fonksiyonuna genetik algoritma uygulanarak değişime uğramasıdır.

Kuantum genetik algoritma son zamanlarda kuantum mekanik sistemlerin enerji değerlerinin hesabında kullanılmaya başlanmıştır. Bu yöntem, kuantum mekaniksel sistemlerden biri olan Schrödinger denkleminin çözümlerinde kullanılmaya başlanmıştır ve varyasyonel hesap ile enerjinin en aza indirgenerek hesaplanmasına yardımcı olur. Bu açıdan kuantum genetik algoritmanın yeniden üretme, çaprazlama ve mutasyon gibi üç farklı durumda uygulanması sağlanmıştır.

3.1.1. Yeniden Üretme

Bu yöntemde bireylerin uygunluk değerinin büyüklüğüne bakılır. Oluşturulacak yeni birey için uygunluk değeri büyük olan bireylerin yeni nesle aktarılması temeline dayanan bir yöntemdir. Uygunluk değeri küçük olan bireyler yeni nesle aktarılmadan elenir. Rastgele seçilen bir i. bireyin enerjisinin beklenen değeri E_i olsun. Uygunluk değerinin hesabı yapılırken bu enerjinin beklenen değer ifadesini kullanarak,

$$F_i = e^{-\beta\left(E_i-\overline{E}\right)/\left(\overline{E}-E_{\min}\right)} \tag{3.1}$$

burada $\overline{E}$ ve $E_{\min}$ ifadeleri ortalama ve en düşük enerji değerini temsil eder. β ifadesi

ise ayar parametresidir. Bu yöntemde oluşan yeni nesildeki bireyler bir önceki nüfustaki bireylerin uygunluk durumunun en büyük olanlarından seçilir. Seçilecek bu bireylerin gelme olasılığı P_i, o bireyin uygunluk değeri olan F_i ile doğru orantılıdır. Örneğin, seçilecek bu bireylerin bulunduğu nüfus içindeki birey sayısı N_{pop} olsun. Bu durumda bireylerin gelme olasılığını,

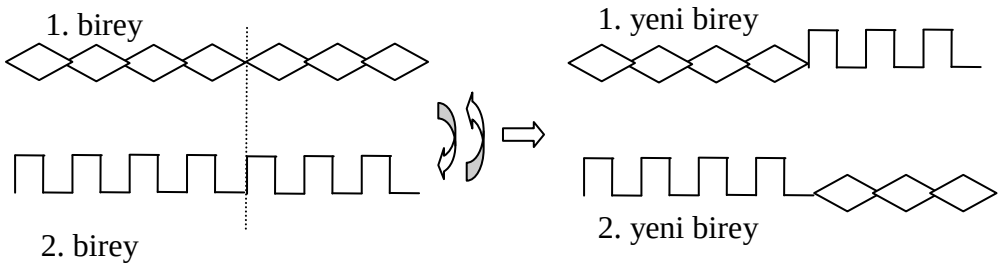
$$P_i = \frac{F_i}{\sum_{i=1}^{N_{pop}} F_i} \tag{3.2}$$

şeklinde ifade ederiz.

Bu işlemde uygunluğu yüksek olan bireylerin gelme olasılığı yüksek iken, uygunluğu küçük olan bireylerin gelme olasılığı oldukça düşüktür. Yani P_i değeri yüksek olan bireyler yeni nesle aktarılırken, bu değeri küçük olan bireylerin yeni nesle aktarılması söz konusu değildir. Sağlıklı yeni nesillerin uygunluğu yüksek olan bireylerden seçilmesi doğrudur.

3.1.2. Çaprazlama

Bu yöntem, iki kromozomun genlerinin birbirleri ile değişmesi ve yeni neslin oluşması esasına dayalı bir işlemdir. Bu işlemde nüfus içinden rastgele iki birey seçilir ve bu bireylerin kromozomlarının birbirleri ile değiştirilmesi sağlanır. Bu işlem yeniden oluşturma işlemi yapılan kuşak üzerinden yapılarak oluşturulacak yeni neslin daha iyi bir nesil olması amaçlanır. Bu rastgele seçilen bireylerin şematik gösterimi Şekil 3.1'de gösterilmiştir.



Şekil 3.1 Çaprazlama işleminin şematik gösterimi.

Bu çaprazlanan iki birey de birbirlerinin bilgilerini farklı oranlarda taşımaktadır. Belirlenen bu iki yeni birey belirlenen en az bir noktadan kesilerek oluşturulur. Şimdi bunu kuantum mekanik bir sistemin dalga fonksiyonu için işlemi uygularsak,

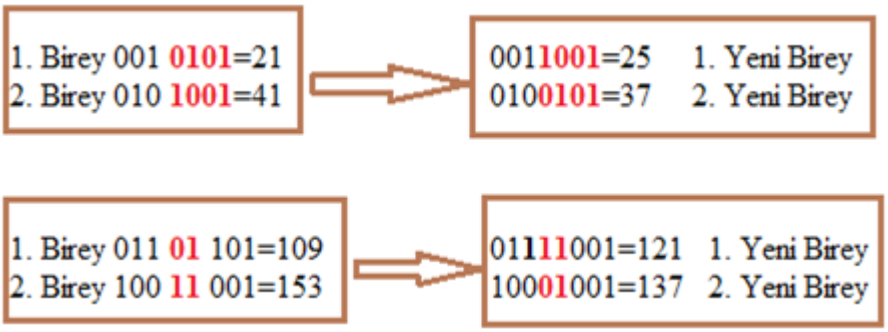
$\psi_1(c_i,\zeta_i)$ve$\psi_2(c_i,\zeta_i)$ gibi rastgele iki dalga fonksiyonu seçelim. Bu iki dalga fonksiyonuna içlerinde aralarında çaprazlama işlemi uygularsak,

$$\psi_1(c_i,\zeta_i)=\psi_1(c_i,\zeta_i)S(c_i,\zeta_i)+\psi_2(c_i,\zeta_i)(1-S(c_i,\zeta_i)) \quad (3.3)$$

$$\psi_2(c_i,\zeta_i)=\psi_2(c_i,\zeta_i)S(c_i,\zeta_i)+\psi_1(c_i,\zeta_i)(1-S(c_i,\zeta_i)) \quad (3.4)$$

biçiminde bir işlem uygulanarak iki farklı birey elde edilmesi sağlanır. Böylece, iki bireyde de birbirlerinin bilgilerini taşıyan değerler vardır.

Şekil 3.2'de gösterilen durum, 2 farklı bireyin çaprazlanarak hem tek bir yerden hem de iki noktadan kesilerek yeni bireylerin oluşturulması işlemini anlatmaktadır.



Şekil 3.2 İkilik kodlama ile yapılan çaprazlama yönteminin şematik gösterimi.

3.1.3. Mutasyon

Bu yöntem çaprazlama sonrası oluşturulan yeni neslin içinden rastgele seçilen bireyler üzerinde uygulanır. Bu işlem sistemin düştüğü yerel minimumları düzeltmek için kullanılan iyi bir yöntemdir. Kodlama sisteminde oluşturulan bireylerin tümünün ilk rakamı 0 olabilir. Böyle bir durumda yeni bireylerin ilk rakamının 1 olması beklenilemez. Bu durumda ikilik kodlamada çaprazlama işlemini rakamlandırırsak 12 hanelik bir sayının değeri 0111 1111 1111=2047 bulunur. Halbuki ikilik kodlamada 12 hanelik bir sayının değeri en fazla 1111 1111 1111=4095 dir. Karşılaşılan bu durumu düzeltmek maksadı ile bu yöntem kullanılır ve sonuçlar daha verimli elde edilir. Mutasyon işleminin yapılması, değeri 0 olan bir kromozomun değerini 1 ya da 1 olan kromozomun değerini 0 yapmak maksadı ile kullanılır. Dalga fonksiyonunun seçiminde bu yöntemin çok etkili kullanılması fonksiyonda çözümün çok fazla sapmasına ve yanlış neticelenmesine neden olur. Bu yüzden mutasyonun şiddetinin çok küçük seçilmesi gerekir. Rastgele seçilmiş bir $\psi_1(c_i,\zeta_i)$ dalga fonksiyonu için,

$$\psi_1(c_i,\zeta_i)=\psi_1(c_i,\zeta_i)+\psi_m(c_i,\zeta_i) \quad (3.5)$$

şeklinde bir mutasyon uygulanabilir. Buradaki $\psi_m(c_i, \zeta_i)$ fonksiyonu, mutasyon fonksiyonudur.

3.2. Zamandan Bağımsız Pertürbasyon Yöntemi

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

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

olmak üzere iki kısma ayrılabilir. 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. μ parametresi pertürbasyonun mertebesini belirten parametredir. H_0 Hamiltoniyeninin E_k özdeğerlerine karşılık gelen Ψ_k özfonksiyonlarının (kısmen sürekli olabilen) tam bir ortanormal takımı oluşturur. Başka bir deyişle 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. 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 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 ve $\mu \leq 1$ olmak üzere kuvvet serisine aşağıdaki gibi açılabilir.

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

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

ile verilir. 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,

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

$$(\psi_k{}^{(0)} + \mu\psi_k{}^{(1)} + \mu^2\psi_k{}^{(2)} + \cdots) \tag{3.12}$$

elde ederiz. Bu eşitlik ancak μ 'nün eşit kuvvetlerinin katsayılarının eşitliği ile sağlanabilir. μ nün sıfırıncı mertebesinden,

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

yazabiliriz. Bu ifade, Denk. (3.7) ile özdeş olduğundan,

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

yazılabilir. Sonra μ 'nün 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,

$$< \psi_k|H_0|\psi_k{}^{(1)} > = < H_0\psi_k|\psi_k{}^{(1)} >= E_k < \psi_k|\psi_k{}^{(1)} > \tag{3.18}$$

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

$$E_k^{(1)} = < \psi_k|H'|\psi_k > \equiv H'_{kk} \tag{3.19}$$

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

$$< \psi_k|H_0 - E_k|\psi_k{}^{(2)} > + < \psi_k|H' - E_k^{(1)}|\psi_k{}^{(1)} > - E_k^{(2)} < \psi_k|\psi_k = 0 \tag{3.20}$$

ifadesinden,

$$E_k^{(2)} = < \psi_k|H' - E_k|\psi_k{}^{(1)} > \tag{3.21}$$

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

$$E_k^{(2)} = - < \psi_k{}^{(1)}|H_0 - E_k|\psi_k{}^{(1)} > \tag{3.22}$$

$\psi_k{}^{(1)}$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.

$$\psi_k{}^{(1)} = \sum_{m \neq k} a_m^{(1)}\psi_m \tag{3.23}$$

dır. Burada m üzerinden toplam, takımın kesikli kısmı üzerinden bir toplama ve sürekli kısmı üzerinde bir integrasyon anlamına gelir. Denk. (3.15)'i Denk.(3.23) 'e taşırsak,

$$(H_0 - E_k)\sum_m a_m^{(1)}\psi_m + (H' - E_k^{(1)})\psi_k = 0 \quad (3.24)$$

elde ederiz. Bu ifade Ψ_l^* ile soldan çarpılır ve tüm uzay üzerinden integre edilirse,

$$a_l^{(1)}(E_l - E_k) + < \psi_l|H'|\psi_k > -E_k^{(1)}\delta_{kl} = 0 \quad (3.25)$$

bulunur. Burada $H_0\psi_l = E_l\psi_l$ ile $< \psi_l|\psi_k >= \delta_{kl}$ ifadesi kullanılmıştır. Denk.(3.25) $l = k$ için Denk.(3.19) a indirgenir. $l \neq k$ için,

$$a_l^{(1)} = \frac{<\psi_l|H'|\psi_k>}{E_k - E_l} \quad ,l \neq k \quad (3.26)$$

elde ederiz. Denk.(3.16) ${\psi_k}^{(1)}$ in ψ_k boyunca olan bileşeninin katsayısı $a_k^{(1)}$ i vermez. Böylece genellikten herhangi bir şey kaybedilmiş olmaz ve

$$a_k^{(1)} =< \psi_k|{\psi_k}^{(1)} >= 0 \quad (3.27)$$

olması gerektiğini belirlenir. Denk.(3.23) 'i yeniden,

$${\psi_k}^{(1)} = \sum_{m\neq k} a_m^{(1)}\psi_m = \sum_{m\neq k}\frac{H'_{mk}}{E_k - E_m}\psi_m \quad (3.28)$$

biçiminde yazabiliriz. Bu sonucu Denk.(3.21) 'e taşırsak,

$$E_k^{(2)} = \sum_{m\neq k}\frac{H'_{km}H'_{mk}}{E_k - E_m} = \sum_{m\neq k}\frac{|H'_{km}|^2}{E_k - E_m} \quad (3.29)$$

elde ederiz.

4. KUANTUM NOKTA YAPININ ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

Etkin kütle yaklaşımında sonlu küresel bir potansiyel ile sınırlı, tek elektronlu merkezinde safsızlık bulunduran bir sistemin rölativistik olmayan elektronik Hamiltoniyeni aşağıdaki gibi,

$$H = \left(\frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{\varepsilon r} \right) + V(r) \tag{4.1}$$

yazılır. Burada Z safsızlığın yükü, e elektronun yükü, r elektronun safsızlığa olan uzaklığı, m^* elektronun etkin kütlesi, ε ise ortamın dielektrik sabitidir. $V(r)$ sınırlandırıcı potansiyeli aşağıdaki gibi,

$$V(r) = \begin{cases} \frac{1}{2} \alpha r^2 & , \quad 0 \le r \le R \\ V_0 & , \quad r > R \end{cases} \tag{4.2}$$

olur. H Hamiltoniyeni atomik birimlerde,

$$H = \left(-\frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{Z}{\varepsilon r} \right) + V(r) \tag{4.3}$$

şeklinde yazılır. Böyle bir sistemin Schrödinger denklemi $H\psi = E\psi$ olur. Burada ψ tek elektron spin orbitalleri ϕ'lerden oluşan Slater determinantı şeklinde oluşturulabilir. Küresel bir kuantum nokta yapıda enerjinin beklenen değeri,

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle \tag{4.4}$$

dir.Tek elektron orbitallerinin ortonormallik özelliklerini kullanırsak,

$$E = \left\langle \psi \left| -\frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{Z}{\varepsilon r} + V(r) \right| \psi \right\rangle \tag{4.5}$$

biçiminde yazılır. Tek elektron dalga fonksiyonu ϕ'ler, STO'nun (slater tipi atomik orbitalleri) lineer kombinasyonu şeklinde aşağıdaki gibi,

$$\begin{aligned} \phi_p &= \Theta(R-r)\phi_p^{r \le R} + [1 - \Theta(R-r)]\phi_p^{r>R} \\ &= \Theta(R-r) \sum_{k=1}^{\sigma^{r \le R}} c_{pk}^{r \le R} \chi_k \left(\zeta_{pk}^{r \le R}, \vec{r} \right) + [1 - \Theta(R-r)] \sum_{k=1}^{\sigma^{r>R}} c_{pk}^{r>R} \chi_k \left(\zeta_{pk}^{r>R}, \vec{r} \right) \end{aligned} \tag{4.6}$$

olur. Burada χ_k k. STO, $k \longrightarrow n_i \ell_i m_i$ Slater Tipi Atomik Orbitalleri için manyetik kuantum sayılarını, σ baz seti sayısını ve c_{pk} orbitallerin lineer katsayılarının toplamını ifade etmektedir. Normalize olmamış kompleks STO'ların genel formu,

$$\chi_{n\ell m}(\zeta, r\theta\phi) = r^{n-1}e^{-\zeta r}Y_{\ell m}(\theta,\phi) \tag{4.7}$$

şeklinde verilir (Slater, 1930; 1951; 1960). Burada $Y_{\ell m}(\theta,\phi)$ Condon-Shortly fazında kompleks küresel harmonik fonksiyonları göstermektedir.

Çekirdek elektron potansiyel ve kinetik enerji integralleri,

$$V_p = \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c^*_{pn_i\ell_i m_i} c_{pn_j\ell_j m_j} \left\{ \frac{\zeta_i+\zeta_j}{n_i+n_j} S^{r\le R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j) - \frac{e^{-(\zeta_i+\zeta_j)R}R^{n_i+n_j}}{n_i+n_j} \right\}$$
$$+ \sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta} d^*_{pn_i\ell_i m_i} d_{pn_j\ell_j m_j} \left\{ \frac{\zeta_i+\zeta_j}{n_i+n_j} S^{r>R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j) - \frac{e^{-(\zeta_i+\zeta_j)R}R^{n_i+n_j}}{n_i+n_j} \right\} \tag{4.8}$$

$$T_p = \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} \frac{c^*_{pn_i\ell_i m_i} c_{pn_j\ell_j m_j}}{m_1} \times \left\{ \left[\frac{\left[\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)\right](\zeta_i+\zeta_j)^2}{2(n_i+n_j)(n_i+n_j-1)} \right] \times S^{r\le R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j) \right.$$
$$+ \left\{ \frac{\left[\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)\right]e^{-(\zeta_i+\zeta_j)R}R^{n_i+n_j-1}}{2(n_i+n_j-1)} \right\} \times \left(1 + \frac{(\zeta_i+\zeta_j)R}{n_i+n_j} \right)$$
$$+ \frac{n_j\zeta_j(\zeta_i+\zeta_j)}{n_i+n_j} S^{r\le R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j) + \frac{n_j\zeta_j(\zeta_i+\zeta_j)}{n_i+n_j} e^{-(\zeta_i+\zeta_j)R}R^{n_i+n_j}$$
$$\left. - \frac{(\zeta_i)^2}{2} S^{r\le R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j) \right\} + \sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta} \frac{d^*_{pn_i\ell_i m_i} d_{pn_j\ell_j m_j}}{m_2}$$
$$\times \left\{ \left[\frac{\left[\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)\right](\zeta_i+\zeta_j)^2}{2(n_i+n_j)(n_i+n_j-1)} \right] \times S^{r>R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j) \right.$$
$$+ \left\{ \frac{\left[\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)\right]e^{-(\zeta_i+\zeta_j)R}R^{n_i+n_j-1}}{2(n_i+n_j-1)} \right\} \times \left(-1 - \frac{(\zeta_i+\zeta_j)R}{n_i+n_j} \right)$$
$$+ \frac{n_j\zeta_j(\zeta_i+\zeta_j)}{n_i+n_j} S^{r>R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j) - \frac{n_j\zeta_j}{n_i+n_j} e^{-(\zeta_i+\zeta_j)R}R^{n_i+n_j}$$
$$\left. - \frac{(\zeta_i)^2}{2} S^{r>R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j) \right\} \tag{4.9}$$

yazılabilir. $V(r)$sınırlandırıcı potansiyeli,

$$V(r) = \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c^*_{pn_i\ell_i m_i} c_{pn_j\ell_j m_j} \frac{\alpha}{2} \left\{ \frac{(n_i+n_j+2)(n_i+n_j+1)}{(\zeta_i+\zeta_j)^2} S^{r\le R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j) \right.$$
$$\left. - \frac{e^{-R(\zeta_i+\zeta_j)}R^{n_i+n_j+1}\left[n_i+n_j+2+R(\zeta_i+\zeta_j)\right]}{(\zeta_i+\zeta_j)^2} \right\}$$

$$+\sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta} d^{*}_{pn_i\ell_i m_i} d_{pn_j\ell_j m_j} V_{0,} S^{r>R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right) \tag{4.10}$$

tanımlanırsa, Denk. (4.8) ve Denk. (4.9)'daki $S^{r\le R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right)$ ve $S^{r>R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right)$ sırasıyla R yarıçaplı sonlu potansiyelle sınırlandırılmış bir kuantum yapısının içindeki ve dışındaki örtüşme integralleri olup, tamamlanmamış (Incomplete) gama fonksiyonları cinsinden sırasıyla,

$$S^{r\le R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right) = \int_0^R \chi^{*}_{n_i\ell_i m_i}\left(\zeta_i, R\theta\varphi\right)\chi_{n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_j, R\theta\varphi\right) d^3r$$

$$= \frac{\gamma\left(n_i+n_j+1,\left(\zeta_i+\zeta_j\right)R\right)}{\left(\zeta_i+\zeta_j\right)^{n_i+n_j+1}}\delta_{\ell_i\ell_j}\delta_{m_i m_j} \tag{4.11}$$

ve

$$S^{r>R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right) = \int_R^{\infty} \chi^{*}_{n_i\ell_i m_i}\left(\zeta_i, R\theta\varphi\right)\chi_{n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_j, R\theta\varphi\right) d^3r$$

$$= \frac{\Gamma\left(n_i+n_j+1,\left(\zeta_i+\zeta_j\right)R\right)}{\left(\zeta_i+\zeta_j\right)^{n_i+n_j+1}}\delta_{\ell_i\ell_j}\delta_{m_i m_j} \tag{4.12}$$

şeklinde tanımlanabilir. Burada δ_{ij}'ler Kronecker delta fonksiyonları $\gamma\left(R+1,x\right)$ ve $\Gamma\left(R+1,x\right)$'lar tamamlanmamış (Incomplete) gama fonksiyonlarıdır (Arfken, 1985).

5. TEK ELEKTRONLU KUANTUM NOKTA YAPILARDA MANYETİK ALAN ETKİSİNİN İNCELENMESİ

Merkezinde hidrojenik safsızlık bulunduran, tek elektronlu bir sistem üzerine dışarıdan bir manyetik alan uygulandığında elektronik Hamiltoniyeni,

$$H = \frac{1}{2m^*}\left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^2 - \frac{Ze^2}{\varepsilon r} + V(r) \tag{5.1}$$

ile yazılır. Burada m^*, $\vec{p}$ ve e sırasıyla elektronun etkin kütlesi, çizgisel momentumu ve yüküdür. c ışık hızı, Z çekirdeğin yükü, $\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r}$ olup vektör potansiyelini ifade eder. Öyle ki $\vec{B}$ manyetik alanı $\vec{B} = \vec{\nabla}\times\vec{A}$ 'dir. ε ortamın dielektrik katsayısını ve $\vec{r}$ elektronun safsızlığa göre yer vektörüdür. Burada $V(r)$ sınırlandırıcı potansiyel olup Denk. (4.2)'deki gibi sonlu parabolik potansiyel alındı. Bu durumda Hamilytoniyen,

$$H = \frac{1}{2m^*}\left[-\hbar^2\nabla^2 + 2\left(i\hbar\frac{e}{c}\vec{\nabla}.\vec{A} + i\hbar\frac{e}{c}\vec{A}.\vec{\nabla}\right) + \frac{e^2}{c^2}\left(\vec{A}\right)^2\right] - \frac{Ze^2}{\varepsilon r} + V(r) \tag{5.2}$$

olur. $\vec{\nabla}.\vec{A}$ ifadesinin küresel koordinatlardaki değeri,

$$\vec{\nabla}.\vec{A} = \left(\frac{\partial}{\partial r}\hat{r} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}\hat{\theta} + \frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\hat{\varphi}\right).\left(\frac{1}{2}B_0 r\sin\theta\hat{\varphi}\right) \tag{5.3}$$

olup, bu da,

$$\vec{\nabla}.\vec{A} = 0 \tag{5.4}$$

dır. $\vec{A}.\vec{\nabla}$ ifadesinin küresel koordinatlardaki değeri,

$$\vec{A}.\vec{\nabla} = \frac{1}{2}B_0\left(r_x\hat{j} - r_y\hat{i}\right).\left(\frac{\partial}{\partial x}\hat{i} + \frac{\partial}{\partial y}\hat{j} + \frac{\partial}{\partial z}\hat{k}\right) = \frac{1}{2}B_0\left(r_x\frac{\partial}{\partial y} - r_y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{5.5}$$

biçiminde yazılabilir. Dış manyetik alan z yönünde $\vec{B} = B_0\hat{k}$ seçilirse ve lineer momentum operatörünün küresel koordinatlardaki x ve y düzlemindeki bileşenleri,

$$P_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\ ,\ P_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \tag{5.6}$$

ile tanımlı olduğu için açısal momentumun tanımı $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{P}$ bağıntısından hareketle, vektörel çarpım özelliğini kullanarak,

$$L_z = r_x P_y - r_y P_x = -r_x i\hbar\frac{\partial}{\partial y} - + r_y i\hbar\frac{\partial}{\partial x} = -i\hbar\left(r_x\frac{\partial}{\partial y} - r_y\frac{\partial}{\partial x}\right) \tag{5.7}$$

$$r_x\frac{\partial}{\partial y} - r_y\frac{\partial}{\partial x} = -\frac{L_z}{\hat{i}\hbar} \tag{5.8}$$

olur. Denk. (5.8)'i Denk. (5.5)'te yerine yazılıp tekrar düzenlenirse,

$$\vec{A}.\vec{\nabla} = -\frac{1}{2i\hbar} B_0 L_z \tag{5.9}$$

elde edilir. $\left(\vec{A}\right)^2$ ifadesinin küresel koordinatlardaki değeri,

$$\left(\vec{A}\right)^2 = \left(\frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r}\right)^2 \tag{5.10}$$

olur ve $\vec{r}$ 'nin kartezyen koordinatlardaki karşılığı Denk. (5.10)'da yazılırsa,

$$\left(\vec{A}\right)^2 = \left[\frac{1}{2}B_0\hat{k}\times\left(r_x\hat{\imath}+r_y\hat{\jmath}+r_z\hat{k}\right)\right]^2 = \left[\frac{1}{2}B_0\left(r_x\hat{\jmath}-r_y\hat{\imath}\right)\right]^2 \tag{5.11}$$

elde edilir. Küresel koordinatlardaki,

$$r_x = r\sin\theta\cos\varphi\,,\; r_y = r\sin\theta\sin\varphi \tag{5.12}$$

$$\hat{\imath} = \sin\theta\cos\varphi\,\hat{r} + \cos\theta\cos\varphi\,\hat{\theta} - \sin\varphi\,\hat{\varphi} \tag{5.13}$$

$$\hat{\jmath} = \sin\theta\sin\varphi\,\hat{r} + \cos\theta\sin\varphi\,\hat{\theta} + \cos\varphi\,\hat{\varphi} \tag{5.14}$$

$$\hat{k} = \cos\theta\,\hat{r} - \sin\theta\,\hat{\theta} \tag{5.15}$$

ifadeler Denk. (5.11)'de yerine yazılırsa,

$$\left(\vec{A}\right)^2 = \frac{1}{4}B_0^2\Big[r\sin\theta\cos\varphi\left(\sin\theta\sin\varphi\,\hat{r}+\cos\theta\sin\varphi\,\hat{\theta}+\cos\varphi\,\hat{\varphi}\right)$$
$$-\,r\sin\theta\sin\varphi\left(\sin\theta\cos\varphi\,\hat{r}+\cos\theta\cos\varphi\,\hat{\theta}-\sin\varphi\,\hat{\varphi}\right)\Big]^2 \tag{5.16}$$

olur ve

$$\left(\vec{A}\right)^2 = \frac{1}{4}B_0^2\left[r\sin\theta\left(\sin^2\varphi+\cos^2\varphi\right)\hat{\varphi}\right]^2 = \frac{1}{4}B_0^2 r^2\sin^2\theta \tag{5.17}$$

dır. Elde edilen Denk. (5.4), (5.9) ve (5.17) ifadeleri, Denk. (5.2) Hamiltoniyen ifadesinde yazılarak ve $\gamma = \dfrac{e\hbar B_0}{2m^* cR_y^*}$ manyetik alanın boyutsuz niceliği göz önüne alınırsa atomik birimlerde,

$$H = -\frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{Z}{\varepsilon r} + \frac{1}{2}\gamma L_z + \frac{1}{8}\gamma^2 r^2\sin^2\theta + V(r) \tag{5.18}$$

elde edilir. Bu denklemdeki 3. terim paramanyetik terim, 4. terim diamanyetik terim olarak adlandırılır. Burada Denk. (5.18)'den pertürbe olmamış Hamiltoniyenini,

$$H_0 = -\frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{Z}{\varepsilon r} + \frac{1}{2}\gamma L_z + V(r) \tag{5.19}$$

ve pertürbasyon terimini,

$$H' = \frac{1}{8}\gamma^2 r^2 \sin^2\theta \tag{5.20}$$

şeklinde iki kısıma ayırabiliriz. H', H_0'a göre çok küçük olduğu için pertürbasyon terimi olarak düşünülebilir. Bu durumda Hamiltoniyen ifadesini,

$$H = H_0 + H' \tag{5.21}$$

biçiminde pertürbe olmamış ve pertürbe olmuş iki Hamiltoniyenin toplamı olarak yazabiliriz. Pertürbe olmamış Hamiltoniyenin beklenen değeri atomik birimlerde,

$$\left\langle \psi^{(0)} \middle| H_0 \middle| \psi^{(0)} \right\rangle = \left\langle \psi^{(0)} \middle| -\frac{\nabla^2}{2m^*} \middle| \psi^{(0)} \right\rangle + \left\langle \psi^{(0)} \middle| -\frac{Z}{\varepsilon r} \middle| \psi^{(0)} \right\rangle + \left\langle \psi^{(0)} \middle| \frac{1}{2}\gamma L_z \middle| \psi^{(0)} \right\rangle + \left\langle \psi^{(0)} \middle| V(r) \middle| \psi^{(0)} \right\rangle \tag{5.22}$$

olur. Burada $\psi^{(0)}$ pertürbe olmamış H_0 hamiltoniyenin öz fonksiyonları olup tek elektron spin dalga fonksiyonları $\phi_i^{(0)}$'den oluşmuş slater determinant dalga fonksiyonu alınabilir. Tek elektron dalga fonksiyonu ise slater tipi orbitallerinin lineer kombinasyonu şeklinde aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\begin{aligned}\phi_i &= \Theta(R-r)\phi_i^{r\le R} + [1-\Theta(R-r)]\phi_i^{r>R} \\ &= \Theta(R-r)\sum_{k=1}^{\sigma^{r\le R}} c_{ik}^{r\le R}\chi_k\left(\zeta_{ik}^{r<\le R}, \vec{r}\right) + [1-\Theta(R-r)]\sum_{k=1}^{\sigma^{r>R}} c_{ik}^{r>R}\chi_k\left(\zeta_{ik}^{r>R}, \vec{r}\right)\end{aligned} \tag{5.23}$$

Burada $\Theta(x)$ Heviside step fonksiyonudur ve χ_k,

$$\chi_{n\ell m}(\zeta_k, r\theta\varphi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta\varphi) \tag{5.24}$$

şeklindedir. Denk. (4.8), (4.9), (4.10), (5.23) ve (5.24)'ü kullanarak, Denk. (5.22)'deki her bir terim düzenlenirse, kinetik enerjinin beklenen değeri,

$$\begin{aligned}\left\langle \psi^{(0)} \middle| -\frac{\nabla^2}{2m^*} \middle| \psi^{(0)} \right\rangle = \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} \frac{c^*_{pn_i\ell_i m_i} c_{pn_j\ell_j m_j}}{m_1} \times \Bigg\{ & \frac{\left[\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)\right](\zeta_i+\zeta_j)^2}{2(n_i+n_j)(n_i+n_j-1)} \times S^{r\le R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j) \\ & + \left[\frac{\left[\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)\right]e^{-(\zeta_i+\zeta_j)R}R^{n_i+n_j-1}}{2(n_i+n_j-1)}\right] \times \left[1 + \frac{(\zeta_i+\zeta_j)R}{n_i+n_j}\right] \\ & + \frac{n_j\zeta_j(\zeta_i+\zeta_j)}{n_i+n_j} S^{r\le R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j) + \frac{n_j\zeta_j(\zeta_i+\zeta_j)}{n_i+n_j} e^{-(\zeta_i+\zeta_j)R}R^{n_i+n_j} \\ & - \frac{(\zeta_i)^2}{2} S^{r\le R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j)\Bigg\} + \sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta} \frac{d^*_{pn_i\ell_i m_i} d_{pn_j\ell_j m_j}}{m_2} \\ & \times \left\{\frac{\left[\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)\right](\zeta_i+\zeta_j)^2}{2(n_i+n_j)(n_i+n_j-1)} S^{r>R}_{n_i\ell_i m_i, n_j\ell_j m_j}(\zeta_i,\zeta_j)\right.\end{aligned}$$

$$+\frac{\left[\ell_j\left(\ell_j+1\right)-n_j\left(n_j-1\right)\right]e^{-\left(\zeta_i+\zeta_j\right)R}R^{n_i+n_j-1}}{2\left(n_i+n_j-1\right)}\left(-1-\frac{\left(\zeta_i+\zeta_j\right)R}{n_i+n_j}\right)$$
$$\frac{+n_j\zeta_j\left(\zeta_i+\zeta_j\right)}{n_i+n_j}S^{r>R}_{n_i\ell_i m_i,n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right)-\frac{n_j\zeta_j\left(\zeta_i+\zeta_j\right)}{n_i+n_j}e^{-\left(\zeta_i+\zeta_j\right)R}R^{n_i+n_j}$$
$$-\frac{\left(\zeta_i\right)^2}{2}S^{r>R}_{n_i\ell_i m_i,n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right)\Bigg\} \tag{5.25}$$

olur. Elektronla safsızlık arasındaki coulomb etkileşim teriminin beklenen değeri,

$$\left\langle\psi^{(0)}\right|-\frac{Z}{\varepsilon r}\left|\psi^{(0)}\right\rangle=\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma}c^*_{pn_i\ell_i m_i}c_{pn_j\ell_j m_j}\left[\frac{\zeta_i+\zeta_j}{n_i+n_j}S^{r\le R}_{n_i\ell_i m_i,n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right)-\frac{e^{-\left(\zeta_i+\zeta_j\right)R}R^{n_i+n_j}}{n_i+n_j}\right]$$
$$+\sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta}d^*_{pn_i\ell_i m_i}d_{pn_j\ell_j m_j}\left[\frac{\zeta_i+\zeta_j}{n_i+n_j}S^{r>R}_{n_i\ell_i m_i,n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right)-\frac{e^{-\left(\zeta_i+\zeta_j\right)R}R^{n_i+n_j}}{n_i+n_j}\right] \tag{5.26}$$

olur. Paramanyetik terimin beklenen değeri,

$$\left\langle\psi^{(0)}\right|\frac{1}{2}\gamma\hat{L}_z\left|\psi^{(0)}\right\rangle=\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma}c^*_{pn_i\ell_i m_i}c_{pn_j\ell_j m_j}\left[\frac{1}{2}\gamma m_\ell S^{r\le R}_{n_i\ell_i m_i,n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right)\right]$$
$$-\sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta}d^*_{pn_i\ell_i m_i}d_{pn_j\ell_j m_j}\times\Bigg\{\frac{1}{2}\gamma m_\ell$$
$$\times S^{r>R}_{n_i\ell_i m_i,n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right) \tag{5.27}$$

olur. Sınırlandırıcı potansiyel $V(r)$'nin beklenen değeri,

$$\left\langle\psi^{(0)}\right|V(r)\left|\psi^{(0)}\right\rangle=\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma}c^*_{pn_i\ell_i m_i}c_{pn_j\ell_j m_j}\frac{\alpha}{2}\Bigg\{\frac{\left(n_i+n_j+2\right)\left(n_i+n_j+1\right)}{\left(\zeta_i+\zeta_j\right)^2}S^{r\le R}_{n_i\ell_i m_i,n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right)$$
$$-\frac{e^{-R\left(\zeta_i+\zeta_j\right)}R^{n_i+n_j+1}\left[n_i+n_j+2+R\left(\zeta_i+\zeta_j\right)\right]}{\left(\zeta_i+\zeta_j\right)^2}\Bigg\}$$
$$+\sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta}d^*_{pn_i\ell_i m_i}d_{pn_j\ell_j m_j}.V_0.S^{r>R}_{n_i\ell_i m_i,n_j\ell_j m_j}\left(\zeta_i,\zeta_j\right) \tag{5.28}$$

elde edilir. Pertübasyon terimimizin beklenen değer ifadesini atomik birimlerde,

$$\left\langle\psi^{(0)}\right|\Delta E\left|\psi^{(0)}\right\rangle=\left\langle\psi^{(0)}\right|\frac{1}{8}\gamma^2r^2\sin^2\theta\left|\psi^{(0)}\right\rangle=\frac{1}{8}\gamma^2\left\langle\psi^{(0)}\right|r^2\sin^2\theta\left|\psi^{(0)}\right\rangle \tag{5.29}$$

yazılır. Burada Denk. (5.23) ve Denk. (5.24) ifadeleri kullanılarak yeniden düzenlenirse,

$$\left\langle\psi^{(0)}\right|\Delta E\left|\psi^{(0)}\right\rangle=\frac{1}{8}\gamma^2\Bigg[\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma}c^*_{pn_i\ell_i m_i}c_{pn_j\ell_j m_j}\int R^*_{n_i}Y^*_{\ell_i m_i}(\theta\varphi)r^2\sin^2\theta R_{n_j}Y_{\ell_j m_j}(\theta\varphi)d^3r$$
$$+\sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta}d^*_{pn_i\ell_i m_i}d_{pn_j\ell_j m_j}\int R^*_{n_i}Y^*_{\ell_i m_i}(\theta\varphi)r^2\sin^2\theta R_{n_j}Y_{\ell_j m_j}(\theta\varphi)d^3r\Bigg] \tag{5.30}$$

olur. Denk. (5.30)'daki ifadeyi radyal ve küresel olarak iki kısma ayırırsak,

$$\left\langle \psi^{(0)} \left| \Delta E \right| \psi^{(0)} \right\rangle = \frac{1}{8}\gamma^2 \left[\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c^*_{pn_i\ell_i m_i} c_{pn_j\ell_j m_j} \int_0^R R^*_{n_i}\, r^2\, R_{n_i}\, dr \int_\Omega Y^*_{\ell_i m_i}(\theta\varphi) \sin^2\theta\, Y_{\ell_j m_j}(\theta\varphi) d\Omega \right.$$

$$\left. + \sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta} d^*_{pn_i\ell_i m_i} d_{pn_j\ell_j m_j} \int_0^R R^*_{n_i}\, r^2\, R_{n_i}\, dr \int_\Omega Y^*_{\ell_i m_i}(\theta\varphi) \sin^2\theta\, Y_{\ell_j m_j}(\theta\varphi) d\Omega \right] \tag{5.31}$$

olur.

Tamamlanmamış (Incomplete) gama fonsiyonu,

$$\gamma^{(\zeta_i+\zeta_j)}_{n_i+n_j+2} = \int_0^R r^{n_i+n_j+2} e^{-(\zeta_i+\zeta_j)r} dr = \frac{n_i+n_j+2}{(\zeta_i+\zeta_j)^{n_i+n_j+3}} \left\{ 1 - e^{R(\zeta_i+\zeta_j)} \sum_{s=0}^{n_i+n_j+2} \left[\frac{R(\zeta_i+\zeta_j)^s}{s!} \right] \right. \tag{5.32}$$

şeklinde tanımlı olup (Arfken, 1985), Denk. (5.31)'de yerine yazılırsa,

$$\left\langle \psi^{(0)} \left| \Delta E \right| \psi^{(0)} \right\rangle = \frac{1}{8}\gamma^2 \left[\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c^*_{pn_i\ell_i m_i} c_{pn_j\ell_j m_j} \int_0^R r^{n_i+n_j+2} e^{-(\zeta_i+\zeta_j)r} dr \int_\Omega Y^*_{\ell_i m_i}(\theta\varphi) \sin^2\theta\, Y_{\ell_j m_j}(\theta\varphi) d\Omega + \right.$$

$$+ \sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta} d^*_{pn_i\ell_i m_i} d_{pn_j\ell_j m_j} \int_0^R r^{n_i+n_j+2} e^{-(\zeta_i+\zeta_j)r} dr$$

$$\left. \times \int_\Omega Y^*_{\ell_i m_i}(\theta\varphi) \sin^2\theta\, Y_{\ell_j m_j}(\theta\varphi) d\Omega \right] \tag{5.33}$$

elde edilir. Burada $\sin^2\theta$ ifadesi,

$$\sin^2\theta = 1 - \cos^2\theta \tag{5.34}$$

yazılabilir. Diğer taraftan Y_{20} küresel harmoniği,

$$Y_{20} = \left(\frac{5}{16\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \left(3\cos^2\theta - 1 \right) \tag{5.35}$$

şeklinde tanımlıdır. Denk. (5.34) ve Denk. (5.35) birleştirilirse,

$$\cos^2\theta = \frac{1}{3}\left(\sqrt{\frac{16\pi}{5}} Y_{20} + 1 \right) \tag{5.36}$$

olur. Denk. (5.36), Denk. (5.34)'te yerine yazılırsa,

$$\sin^2\theta = \frac{2}{3} - \sqrt{\frac{16\pi}{45}} Y_{20} \tag{5.37}$$

olur. Denk. (5.37) , Denk. (5.33)'teki pertürbasyon teriminde yerine yazılırsa,

$$\left\langle \psi^{(0)} \left| \Delta E \right| \psi^{(0)} \right\rangle = \frac{1}{8}\gamma^2 \left[\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c^{*}_{pn_i\ell_i m_i} c_{pn_j\ell_j m_j} \int_0^R r^{n_i+n_i+2} e^{-(\zeta_i+\zeta_i)r} dr \int_\Omega Y^{*}_{\ell_i m_i}(\theta\varphi) \left(\frac{2}{3} - \sqrt{\frac{16\pi}{45}} Y_{20} \right) \right.$$

$$\left. \times Y_{\ell_j m_j}(\theta\varphi) d\Omega \right) + \sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta} d^{*}_{pn_i\ell_i m_i} d_{pn_j\ell_j m_j} \int_0^R r^{n_i+n_j+2} e^{-(\zeta_i+\zeta_j)r} dr \int_\Omega Y^{*}_{\ell_i m_i}(\theta\varphi)$$

$$\left. \times \left(\frac{2}{3} - \sqrt{\frac{16\pi}{45}} Y_{20} \right) \times Y_{\ell_j m_j}(\theta\varphi) d\Omega \right] \tag{5.38}$$

elde edilir. Bu denklem tamamlanmamış gama fonksiyonu cinsinden yazılırsa,

$$\left\langle \psi^{(0)} \left| \Delta E \right| \psi^{(0)} \right\rangle = \frac{1}{8}\gamma^2 \left\{ \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c^{*}_{pn_i\ell_i m_i} c_{pn_j\ell_j m_j} \gamma_{n_i+n_j+2}(\zeta_i+\zeta_j) \left[\frac{2}{3}\delta_{\ell_i\ell_j}\delta_{m_i m_j} \right. \right.$$

$$- \sqrt{\frac{16\pi}{45}} \int_\Omega Y^{*}_{\ell_i m_i}(\theta\varphi) Y_{20} Y_{\ell_j m_j}(\theta\varphi) d\Omega + \sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta} d^{*}_{pn_i\ell_i m_i} d_{pn_j\ell_j m_j} \gamma_{n_i+n_j+2}(\zeta_i+\zeta_j)$$

$$\left. \left. \times \left[\frac{2}{3}\delta_{\ell_i\ell_j}\delta_{m_i m_j} - \sqrt{\frac{16\pi}{45}} \int_\Omega Y^{*}_{\ell_i m_i}(\theta\varphi) Y_{20} Y_{\ell_j m_j}(\theta\varphi) d\Omega \right] \right\} \right. \tag{5.39}$$

olur. İki küresel harmoniğin çarpımı Clebsch-Gordan katsayısı cinsinden,

$$Y^{*}_{\ell_i m_i}(\theta,\phi) Y_{\ell_j m_j}(\theta,\phi) = \sum_{L=mak\left(|\ell_j-\ell_i|,|m_j-m_i|\right)}^{\ell_i+\ell_j} \left\langle \ell_i m_i \left| \ell_i m_i \right| L m_j - m_i \right\rangle Y^{*}_{Lm_j-m_i}(\theta,\phi) \tag{5.40}$$

şeklinde tanımlıdır (Arfken, 1985). Denk. (5.40) ifadesi kullanılarak Denk. (5.39)'daki pertürbasyon terimi yeniden düzenlenirse,

$$\left\langle \psi^{(0)} \left| \Delta E \right| \psi^{(0)} \right\rangle = \frac{1}{8}\gamma^2 \left\{ \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c^{*}_{pn_i\ell_i m_i} c_{pn_j\ell_j m_j} \gamma_{n_i+n_j+2}(\zeta_i+\zeta_j) \right.$$

$$\times \left[\frac{2}{3}\delta_{\ell_i\ell_j}\delta_{m_i m_j} - \sqrt{\frac{16\pi}{45}} \sum_{L=mak\left(|\ell_j-\ell_i|,|m_j-m_i|\right)}^{\ell_i+\ell_j} \left\langle \ell_j m_j \left| \ell_i m_i \right| L m_j - m_i \right\rangle \right]$$

$$+ \sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta} d^{*}_{pn_i\ell_i m_i} d_{pn_j\ell_j m_j} \gamma_{n_i+n_j+2}(\zeta_i+\zeta_j) \left[\frac{2}{3}\delta_{\ell_i\ell_j}\delta_{m_i m_j} \right.$$

$$\left. \left. - \sqrt{\frac{16\pi}{45}} \sum_{L=mak\left(|\ell_j-\ell_i|,|m_j-m_i|\right)}^{\ell_i+\ell_j} \left\langle \ell_j m_j \left| \ell_i m_i \right| L m_j - m_i \right\rangle \right\} \right. \tag{5.41}$$

olur. Atomik birimlerde Denk. (5.41) ifadesi düzenlenirse,

$$\left\langle \psi^{(0)} \left| \Delta E \right| \psi^{(0)} \right\rangle = \frac{1}{8}\gamma^2 \left\{ \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c^{*}_{pn_i\ell_i m_i} c_{pn_j\ell_j m_j} \frac{(n_i+n_j+2)!}{(\zeta_i+\zeta_i)^{n_i+n_j+3}} \right.$$

$$\times\left\{1-e^{R(\zeta_i+\zeta_j)}\sum_{t=0}^{n_i+n_j+2}\frac{\left[R(\zeta_i+\zeta_j)\right]^t}{t!}\right\}\cdot\left(\frac{2}{3}\delta_{\ell_i\ell_j}\delta_{m_im_j}\right.$$

$$\left.-\sqrt{\frac{16\pi}{45}}\sum_{L=mak\left(\left|\ell_j-\ell_i\right|,\left|m_j-m_i\right|\right)}^{\ell_i+\ell_j}\left\langle\ell_j m_j\left|\ell_i m_i\right|Lm_j-m_i\right\rangle\delta_{L2}\delta_{m_j-m_i,0}\right)$$

$$+\sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta}d^*_{pn_i\ell_im_i}d_{pn_j\ell_jm_j}\frac{(n_i+n_j+2)!}{(\zeta_i+\zeta_i)^{n_i+n_j+3}}\left\{1-e^{R(\zeta_i+\zeta_j)}\sum_{t=0}^{n_i+n_j+2}\frac{\left[R(\zeta_i+\zeta_j)\right]^t}{t!}\right\}$$

$$\times\left(\frac{2}{3}\delta_{\ell_i\ell_j}\delta_{m_im_j}\right.$$

$$\left.\left.-\sqrt{\frac{16\pi}{45}}\sum_{L=mak\left(\left|\ell_j-\ell_i\right|,\left|m_j-m_i\right|\right)}^{\ell_i+\ell_j}\left\langle\ell_j m_j\left|\ell_i m_i\right|Lm_j-m_i\right\rangle\delta_{L2}\delta_{m_j-m_i,0}\right)\right\} \tag{5.42}$$

olur. Bu denklemi örtüşme (overlap) integralini kullanarak,

$$\left\langle\psi^{(0)}\right|\Delta E\left|\psi^{(0)}\right\rangle=\frac{1}{8}\gamma^2\left\{\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma}c^*_{pn_i\ell_im_i}c_{pn_j\ell_jm_j}S^{r\le R}_{n_i\ell_im_i,n_{j+2}\ell_jm_j}(\zeta_i,\zeta_j)\right.$$

$$\times\left(\frac{2}{3}\delta_{\ell_i\ell_j}\delta_{m_im_j}\right.$$

$$\left.-\sqrt{\frac{16\pi}{45}}\sum_{L=mak\left(\left|\ell_j-\ell_i\right|,\left|m_j-m_i\right|\right)}^{\ell_i+\ell_j}\left\langle\ell_j m_j\left|\ell_i m_i\right|Lm_j-m_i\right\rangle\delta_{L2}\delta_{m_j-m_i,0}\right)$$

$$+\sum_{i=1}^{\beta}\sum_{j=1}^{\beta}d^*_{pn_i\ell_im_i}d_{pn_j\ell_jm_j}S^{r>R}_{n_i\ell_im_i,n_{j+2}\ell_jm_j}(\zeta_i,\zeta_j)$$

$$\times\left(\frac{2}{3}\delta_{\ell_i\ell_j}\delta_{m_im_j}\right.$$

$$\left.\left.-\sqrt{\frac{16\pi}{45}}\sum_{L=mak\left(\left|\ell_j-\ell_i\right|,\left|m_j-m_i\right|\right)}^{\ell_i+\ell_j}\left\langle\ell_j m_j\left|\ell_i m_i\right|Lm_j-m_i\right\rangle\delta_{L2}\delta_{m_j-m_i,0}\right)\right\} \tag{5.43}$$

şeklinde elde edilir.

6. HESAPLAMA VE SONUÇLAR

Son yıllarda, küçük boyutlu yapılara olan ilgi teknolojik gelişmelere paralel olarak hızlı bir şekilde artmıştır ve artmaya devam etmektedir. Kuantum nokta yapılar düşük boyutlu yapılara iyi bir örnektir. Bu çalışmada hidrojen benzeri bir kuantum nokta yapının elektronik özelliklerini ve elektronik özelliklerinin dış manyetik alandan nasıl etkilendiğini inceledik.

Merkezinde hidrojen benzeri safsızlık bulunan sonlu potansiyelle sınırlandırılmış tek elektronlu, parabolik GaAs/$Al_xGa_{1-x}As$ yapısı ele alındı. Bu yapı için etkin Bohr yarıçapı $a^* = 100\,\dot{A}$, etkin Rydberg enerjisi R_y=5.72 meV alındı. Malzeme parametreleri olarak kuyu içinde GaAs' ın kuyu dışında ise Al_xGa_{1-x} As'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 (Shunji A. ve ark., 1994). Burada m_0 serbest elektron kütlesi ve x stokometri oranıdır. Potansiyel engeli yüksekliği ise GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$ enerji bant yapılarını birbirlerine göre durumunu düzenleyen stokometri oranı x bağlı olarak $V = 0.6(1.155x + 0.37x^2)$ eV şeklinde alınmıştır. Ayrıca basitlik olması bakımından GaAs ve $Al_xGa_{1-x}As$'ın 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 potansiyel parametresi $\alpha = \frac{2V_0}{m^* r^2}$ alındı. Böylece sınırlı parabolik potansiyel V_0 eşitlenmiş oldu. Hesaplamalarımızda dört farklı stokometri (katkılanma) oranı x'in 0.1, *0.2, 0.3* ve *0.4* değerleri alındı. Dış manyetik alandan dolayı enerji seviyelerine gelen katkı pertürbasyon yöntemiyle hesaplandı. Dış manyetik alanın çok küçük olduğu iki farklı 0.66 T ve 1.324 T değerleri tercih edildi.

Denk. 5.22'de verilen pertürbe olmamış Schrödinger denkleminin olası çözümlerini ve Bölüm 3.1'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 atomik birimlerde Hartree-Fock-Roothan metoduyla hesaplandı. Bu pertürbe olmamış dalga fonksiyonları ve enerji seviyeleri kullanılarak pertürbe terime manyetik alandan gelen Denk. 5.43'teki katkı atomik birimlerde pertürbasyon yöntemi kullanılarak hesaplandı.

Biz bu çalışmamızda, ilk önce kuantum nokta yapının pertürbe olmamış elektronik yapısını (çekirdek potansiyel, kinetik enerji, paramanyetik terim ve sınırlandırıcı potansiyel) kuantum genetik algoritma yöntemiyle belirlendi. Yörünge manyetik kuantum sayısını m_ℓ'nin 0,1,-1,2,-2 olduğu durumlar göz önüne alındı. Buna ilave olarak potansiyel bariyerinin yüksekliğini stokometri oranı (potansiyel kuyu yüksekliği) 0.1 için 71 meV, 0.2 için 148 meV, 0.3 için 228 meV ve 0.4 için 312 meV olarak alındı. Aynı zamanda hesaplamalarımızda kuantum nokta yapı yarıçapının değerini 0.5-20 a^* aralığında değiştirdik. Pertürbe olmamış H_0 Hamiltoniyenin özdeğerleri ve dalga fonksiyonları belirlendikten sonra pertürbe terimi olan diyamagnetik teriminin etkisi yukarıda bahsedilen her bir durum için pertürbasyon yöntemiyle hesaplandı.

Kuantum Genetik Algoritma sürecinde ise herbir popülasyon olan 100 birey alındı. Bu 100 tane birey Grant-Shmith yöntemiyle ortanormalize yapıldı. Çaprazlama olasılığı 0.85-0.95 aralığında, mutasyon olasılığı ise 0.05-0.15 aralığında seçildi. Herhangi bir değer için 25000 iterasyon yapıldı. Salınımları anlamak için en iyi iki birey genetik sürece tabi tutulmadan bir sonraki nesle aktarılmıştır.

Tek elektron spin orbitalleri STO'ların lineer toplamdan oluşturulurken STO'lar için baz seti sayısı 7, açılım katsayıları farklı atomik (p'ler farklı p tipi, d'ler farklı d tipi gibi) orbitallerden oluşturulurken, orbital üsteli ζ'lar aynı tip atomik orbitallerden seçildi.

Şekil 6.1 ile şekil 6.4 arasındaki grafiklerde yörünge manyetik kuantum sayısının m_ℓ'nin 0 değerinde, manyetik alan şiddeti 0.66 T ve dört farklı potansiyel kuyu yüksekliği için hesaplanan pertürbe olmayan seviyelerin enerji değerlerinin kuantum nokta yarıçapına göre değişimleri çizilmiştir. Bu şekillerden görüleceği gibi kuantum nokta yarıçapı arttıkça tüm seviyelerin enerjisi düşmektedir ve enerji seviyeleri arasındaki fark azalmaktadır. Sınırlandırıcı potansiyel kuyu yüksekliğini arttırdığımızda enerji seviyeleri arasındaki fark artar ve tüm seviyelerin enerjileri de üst enerji seviyelerine doğru kaymaktadır. $m_\ell = 0$ olduğu için paramanyetik terimden gelen katkı sıfır olacağından bu seviyeler manyetik alan şiddetinin değerlerinden bağımsızdır.

Şekil 6.5 ve şekil 6.8 arasındaki grafikler manyetik kuantum sayısının m_ℓ'nin 0, manyetik alan şiddeti 1.324 T ve dört farklı potansiyel kuyu yüksekliği için hesaplanan pertürbe olmayan seviyelerin enerji değerlerinin kuantum nokta yarıçapına göre

değişimleri çizilmiştir. Bu şekillerden görüleceği gibi kuantum kuyu yüksekliği küçükken seviyelerin enerjileri arasındaki açıklık artarken, kuantum kuyu yüksekliğini arttırdıkça seviyelerin enerjileri birbirinden uzaklaştığı gözlendi. Diğer taraftan kuantum kuyu yüksekliğinin artması ile seviyelerin enerjileri de artmaktadır. Bu artış küçük nokta yarıçaplarında fazla olurken, büyük nokta yarıçaplarında az olmaktadır. Kuantum kuyu yüksekliği artarken, elektronun çekirdeğe bağlanma yarıçapı da artmaktadır. Örneğin x=0.2 iken 1s seviyesi $5a^*$'da bağlanırken x=0.3 için bu yarıçap $10a^*$'a çıkmaktadır. Çizelge 6.1 ve çizelge 6.2'de sırasıyla manyetik alan şiddetinin 0.66 T ve 1.324 T değerleri için sınırlandırıcı potansiyelin x=0.2 (148 meV) ve x=0.3 (228 meV) değerlerinde hesaplanan seviyelerin pertürbe olmamış enerji değerleri verilmiştir. Bu tablolardan görüleceği gibi pertürbe olmamış enerji içerisindeki paramanyetik terim m_ℓ 'ye bağlı olduğu için manyetik alanın varlığı, yani paramanyetik terimin değeri $m_\ell = 0$ için sıfır olmasından dolayı enerji seviyelerinde herhangi bir etkisi görülmemiştir. Yani enerji seviyeleri dejenereliğini korumuştur. Ayrıca bu tablolardan açıkça görüleceği gibi sınırlandırıcı potansiyelin artması seviyelerin enerjilerini de arttırmaktadır.

Çizelge 6.3 ve çizelge 6.4'te 1s ve 1p seviyelerine dış manyetik alan şiddetinin 0.66 T ve 1.324 T değerleri için sırasıyla pertürbe olmamış ve pertürbe enerji değerlerinin dot yarıçapına göre değişimi verilmiştir. Bu tablolardan görüleceği gibi 1s seviyesinin $m_\ell = 0$ olduğu için paramanyetik terimden herhangi bir katkı görülmemektedir, fakat diamanyetik terimin etkisiyle 1s seviyesinin pertürbe enerji seviyesi yüksek enerji seviyelerine kaydığı görülmektedir. Yine bu tablolardan görüleceği gibi 1p seviyesi için $m_\ell = 0, \pm 1$ değerleri aldığı için paramanyetik terimden dolayı üç seviyeye ayrılmıştır. Paramanyetik terim $m_\ell = 0$ seviyesi için gelen katkı 0 olurken, $m_\ell = 1$ için pozitif katkı getirirken $m_\ell = -1$ için negatif katkı getirmektedir. Yani $m_\ell = 1$ seviyenin enerjisini arttırırken $m_\ell = -1$ seviyenin enerjisini azaltmaktadır. Diamanyetik terim (pertürbe terim) ise m_ℓ'nin tüm değerleri için pozitif bir katkı getirmektedir. Ayrıca manyetik alan şiddetinin değerinin artması hem 1s hem de 1p tüm enerji seviyelerini daha üst enerji seviyelerine kaydırmaktadır.

Çizelge 6.1: 1s,1p,1d,1f seviyelerinin manyetik kuantum sayısı $m_\ell = 0$ için, manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokometri oranı 0.2 ve 0.3 için kuantum nokta yapının bazı pertürbe olmamış enerji seviyelerinin kuantum nokta yarıçapına göre hesaplanan değerleri. Enerjiler Hartree, nokta yapı yarıçapı etkin Bohr yarıçapı a* cinsinden verilmiştir.

X=0.2, $m_\ell = 0$					X=0.3, $m_\ell = 0$			
R(a*)	$E_{1s}^{(0)}$	$E_{1p}^{(0)}$	$E_{1d}^{(0)}$	$E_{1f}^{(0)}$	$E_{1s}^{(0)}$	$E_{1p}^{(0)}$	$E_{1d}^{(0)}$	$E_{1f}^{(0)}$
0.5	5.65557131	6.68723475	6.76880557	6.79729125	15.50533216	19.73299676	19.84211399	19.88059129
0.6	5.19317189	6.68661621	6.76880591	6.79729124	13.46734591	19.73064199	19.84212320	19.88059130
0.7	4.68755711	6.68508501	6.76880621	6.79729124	12.26635345	19.71771683	19.84213848	19.88059138
0.8	4.17256694	6.68133342	6.76880591	6.79729125	10.59332930	19.36158962	19.84215577	19.88059140
0.9	3.71256226	6.67079120	6.76880309	6.79729125	9.33294566	17.78099649	19.84219643	19.88059152
1.0	3.29829832	6.63014975	6.76879738	6.79729126	8.33635181	16.61694113	19.84217807	19.88059173
1.2	2.68955013	6.20967566	6.76875781	6.79729132	6.56791629	13.63330201	19.82061509	19.88059275
1.4	2.19524470	5.49566395	6.76858020	6.79729124	5.29136265	11.57422947	17.03490158	19.88059532
1.6	1.77284079	4.89356068	6.76687459	6.79729106	4.43667123	10.06647475	15.02264282	19.88046770
1.8	1.49674614	4.32572312	6.46088677	6.79729009	3.69967344	8.72000012	13.16925847	17.43830949
2.0	1.23381486	3.85872288	5.92392350	6.79728648	3.20141228	7.75645296	11.79951164	15.61975764
3.0	0.48243770	2.36147648	3.86569889	5.25786751	1.75495407	4.96162844	7.68766929	10.26728006
4.0	0.15907722	1.66230633	2.81571216	3.88311399	1.05611745	3.55822251	5.63446329	7.61005354
5.0	-0.02105097	1.25235774	2.19175145	3.06009678	0.66182331	2.75058351	4.44451610	6.01903281
8.0	-0.26482981	0.66072321	1.27944448	1.85304868	0.11001979	1.53792830	2.65698290	3.68913529
10.0	-0.33544476	0.46979698	0.98175428	1.43535857	-0.05699962	1.11865726	2.06051550	2.88919506
14.0	-0.40628823	0.26078498	0.64655295	0.98004347	-0.23485300	0.68628063	1.35075395	1.96366717
20.0	-0.44984057	0.11374260	0.40330625	0.64498705	-0.35014426	0.37844980	0.86547866	1.29742274

Çizelge 6.2: 1s,1p,1d,1f seviyelerinin manyetik kuantum sayısı $m_\ell = 0$ için, manyetik alan şiddeti 1.324 T, stokometri oranı 0.2 ve 0.3 için kuantum nokta yapının bazı pertürbe olmamış enerji seviyelerinin kuantum nokta yarıçapına göre hesaplanan değerleri. Enerjiler Hartree, nokta yapı yarıçapı etkin Bohr yarıçapı a* cinsinden verilmiştir.

X=0.2, $m_\ell = 0$					X=0.3, $m_\ell = 0$			
R(a*)	$E_{1s}^{(0)}$	$E_{1p}^{(0)}$	$E_{1d}^{(0)}$	$E_{1f}^{(0)}$	$E_{1s}^{(0)}$	$E_{1p}^{(0)}$	$E_{1d}^{(0)}$	$E_{1f}^{(0)}$
0.5	10.49812165	12.72048858	12.81559438	12.84884947	24.66359617	35.39763596	35.52132616	35.56552573
0.6	9.43852210	12.71911164	12.81559630	12.84884949	20.81975931	35.36921378	35.52135201	35.56552576
0.7	8.37267879	12.71388202	12.81559911	12.84884948	17.60814194	32.92388137	35.52139716	35.56552586
0.8	7.42879465	12.68931670	12.81560200	12.84884950	15.18406563	29.30324285	35.52146068	35.56552606
0.9	6.57120636	12.44064366	12.81560146	12.84884951	13.29226098	26.07745950	35.52139862	35.56552655
1.0	5.89664268	11.72786783	12.81559405	12.84884955	11.77129353	23.41483297	33.91919274	35.56552785
1.2	4.62233765	10.09265574	12.81544803	12.84884970	9.48059110	19.34589523	28.37591645	35.56552981
1.4	3.81963823	8.79337341	12.77820709	12.84884993	7.88742726	16.43236387	24.23834020	31.84721052
1.6	3.20205612	7.60053438	11.19713853	12.84885054	6.69597609	14.24771215	21.12087848	27.71043719
1.8	2.69705337	6.67920546	10.04028291	12.84882704	5.74271218	12.57370396	18.68501959	24.63702302
2.0	2.17418834	5.79614006	8.87131512	11.80427589	5.02219765	11.21714375	16.69820198	22.11914172
3.0	1.10454588	3.65398764	5.78903746	7.78415889	2.89417861	7.17740269	10.91695351	14.52272886
4.0	0.59708740	2.61487732	4.23032451	5.76063106	1.88208040	5.22720326	8.05767839	10.77663224
5.0	0.30956561	1.99813936	3.31815113	4.55663863	1.30223098	4.05982934	6.36960973	8.54612560
8.0	-0.15303311	0.93828629	1.71331020	2.42108907	0.46755890	2.33744110	3.82969170	5.21673778
10.0	-0.24506837	0.70937431	1.36146598	1.95057696	0.21127838	1.78123624	2.98969033	4.12156455
14.0	-0.32596955	0.49566710	1.02283863	1.49013654	-0.06080871	1.16007235	2.05087501	2.87042253
20.0	-0.40406240	0.26841336	0.65789529	0.99542904	-0.24311774	0.71015722	1.36094076	1.94863255

Çizelge 6.3. 1s seviyesi için manyetik kuantum sayısı $m_\ell = 0$, 1p seviyesi için $m_\ell = 0,\pm 1$ değerlerinde manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokometri oranı 0.3 olduğunda kuantum nokta yapının pertürbe olmamış ve pertürbe olmuş enerji değerlerinin kuantum nokta yarıçapına göre hesaplanan değerleri. Enerjiler Hartree, nokta yapı yarıçapı etkin Bohr yarıçapı a* cinsinden verilmiştir.

	$E_{1s}^{(0)}$	$E_{1p}^{(0)}$			E_{1s}	E_{1p}		
R(a*)	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 1$	$m_\ell = -1$	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 1$	$m_\ell = -1$
0.5	15.50533216	19.73299676	19.78305860	19.68305860	15.50547286	19.74001523	19.79688093	19.69688093
0.6	13.46734591	19.73064199	19.78072907	19.68072907	13.46747139	19.73742256	19.79419238	19.69419238
0.7	12.26635345	19.71771683	19.76089046	19.66089046	12.26653491	19.72289735	19.76348420	19.67125150
0.8	10.59332930	19.36158962	19.26894895	19.16894895	10.59360693	19.36288649	19.27154268	19.17154268
0.9	9.33294566	17.78099649	17.76339617	17.66339617	9.33312364	17.78122205	17.76384729	17.66384729
1.0	8.33635181	16.61694113	16.18914932	16.08914932	8.33654225	16.61811138	16.18952900	16.09148982
1.2	6.56791629	13.63330201	13.53025173	13.43025173	6.56809078	13.63350924	13.53066827	13.43066620
1.4	5.29136265	11.57422947	11.52374271	11.42374271	5.29156832	11.57446274	11.52419360	11.42420925
1.6	4.43667123	10.06647475	9.98076848	9.88076848	4.43691065	10.06672363	9.98125666	9.88126623
1.8	3.69967344	8.72000012	8.80424573	8.70424573	3.69992378	8.72028043	8.80483466	8.70480905
2.0	3.20141228	7.75645296	7.82507859	7.72507859	3.20168501	7.75676525	7.82566669	7.72574089
3.0	1.75495407	4.96162844	5.01522935	4.91522935	1.75534868	4.96209598	5.01615855	4.91623485
4.0	1.05611745	3.55822251	3.62607631	3.52607631	1.05661315	3.55882356	3.62728830	3.52742546
5.0	0.66182331	2.75058351	2.79965484	2.69965484	0.66241302	2.75134561	2.80113871	2.70128264
10.0	-0.05699962	1.16385403	1.21865726	1.11520282	-0.05602243	1.17009018	1.22142277	1.11812170
20.0	-0.35014426	0.42591754	0.47844980	0.37844980	-0.34865524	0.42849059	0.48362139	0.38362139

Çizelge 6.4. 1s seviyesi için manyetik kuantum sayısı $m_\ell = 0$, 1p seviyesi için $m_\ell = 0,\pm 1$ değerlerinde manyetik alan şiddeti 1.324 T, stokometri oranı 0.3 olduğunda kuantum nokta yapının pertürbe olmamış ve pertürbe olmuş enerji değerlerinin kuantum nokta yarıçapına göre hesaplanan değerleri. Enerjiler Hartree, nokta yapı yarıçapı etkin Bohr yarıçapı a* cinsinden verilmiştir.

	$E_{1s}^{(0)}$	$E_{1p}^{(0)}$			E_{1s}	E_{1p}		
R(a*)	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 1$	$m_\ell = -1$	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 1$	$m_\ell = -1$
0.5	15.50533216	19.73299676	19.78305860	19.68305860	15.50547286	19.74001523	19.79688093	19.69688093
0.6	13.46734591	19.73064199	19.78072907	19.68072907	13.46747139	19.73742256	19.79419238	19.69419238
0.7	12.26635345	19.71771683	19.76089046	19.66089046	12.26653491	19.72289735	19.76348420	19.67125150
0.8	10.59332930	19.36158962	19.26894895	19.16894895	10.59360693	19.36288649	19.27154268	19.17154268
0.9	9.33294566	17.78099649	17.76339617	17.66339617	9.33312364	17.78122205	17.76384729	17.66384729
1.0	8.33635181	16.61694113	16.18914932	16.08914932	8.33654225	16.61811138	16.18952900	16.09148982
1.2	6.56791629	13.63330201	13.53025173	13.43025173	6.56809078	13.63350924	13.53066827	13.43066620
1.4	5.29136265	11.57422947	11.52374271	11.42374271	5.29156832	11.57446274	11.52419360	11.42420925
1.6	4.43667123	10.06647475	9.98076848	9.88076848	4.43691065	10.06672363	9.98125666	9.88126623
1.8	3.69967344	8.72000012	8.80424573	8.70424573	3.69992378	8.72028043	8.80483466	8.70480905
2.0	3.20141228	7.75645296	7.82507859	7.72507859	3.20168501	7.75676525	7.82566669	7.72574089
4.0	1.05611745	3.55822251	3.62607631	3.52607631	1.05661315	3.55882356	3.62728830	3.52742546
5.0	0.66182331	2.75058351	2.79965484	2.69965484	0.66241302	2.75134561	2.80113871	2.70128264
8.0	0.11001979	1.55025976	1.63792830	1.50696660	0.11088163	1.55140268	1.64037580	1.50951409
10.0	-0.05699962	1.16385403	1.21865726	1.11520282	-0.05602243	1.17009018	1.22142277	1.11812170
20.0	-0.35014426	0.42591754	0.47844980	0.37844980	-0.34865524	0.42849059	0.48362139	0.38362139

Şekil 6.9 ile şekil 6.20 arasındaki grafiklerde yörünge manyetik kuantum sayısının m_ℓ 'nin $0,\mp1,\mp2$ değerleri, manyetik alan şiddeti 0.66 T ve 1.324 T olduğunda hesaplanan pertürbe diamanyetik terimden gelen enerji katkılarının kuantum nokta yarıçapına göre değişimi dört farklı potansiyel kuyu yüksekliği için çizilmiştir. Bu şekillerden görüleceği gibi kuantum nokta yarıçapı arttıkça pertürbe terimden enerji seviyelerine gelen katkı artmaktadır. Aynı zamanda potansiyel kuyu yüksekliği arttığı zaman pertürbe terimden gelen katkı azalmaktadır. Potansiyel kuyu yüksekliği arttıkça dış orbitaldeki azalma (ℓ'si büyük olan orbitaller) iç orbitaldekine göre daha fazla olmaktadır. Büyük manyetik alanda nokta yarıçapı artarken enerji seviyelerine pertürbasyon teriminden gelen katkı artmaktadır ve bu artış ℓ'si büyük olan seviyeler orbitallerde daha fazla olmaktadır. Pertürbe terimden gelen katkı küçük nokta yarıçaplarında az olurken, nokta yarıçapı büyüdükçe artmaktadır. Pertürbe terim yörünge manyetik kuantum sayısı m_ℓ'ye bağlı olduğundan m_ℓ'nin büyük değerleri için dış orbitaller, yani ℓ'si büyük olan seviyeler için pertürbe terimden gelen katkılar büyük olurken, ℓ 'si küçük olan seviyelere gelen katkılardan daha az olmaktadır. ℓ 'si aynı olan seviyelerde $|m_\ell|$'nin büyük olduğu seviyelere gelen katkı daha fazla olmaktadır.

Şekil 6.21 ile şekil 6.32 arasında pertürbe olmamış ve pertürbe olmuş p, d ve f seviyelerinin enerjilerinin yörünge manyetik kuantum sayısı m_ℓ'nin $0,\mp1,\mp2$, manyetik alan şiddetinin 0.66 T ve 1.324 T ve dört farklı stokometri oranı (potansiyel kuyu yüksekliği) için grafikleri verilmiştir. Kuantum kuyu yüksekliği arttıkça, tüm enerji seviyeleri daha üst seviyelere kaymaktadır. Manyetik alan şiddetinin artmasıyla tüm seviyelerin enerjileri de kaymaktadır. Bu kayma m_ℓ'nin pozitif değerleri için üst enerji seviyelerine doğru olurken, m_ℓ'nin negatif değerleri için daha düşük enerji seviyelerine doğru olmaktadır. Bunun sebebi ise paramanyetik terim m_ℓ'ye bağlı olduğu için yani m_ℓ'nin pozitif değerleri için enerji seviyelerini arttırırken, negatif değeri için enerji seviyelerini azaltmaktadır. Diamanyetik terim ise tüm seviyelerin enerjilerini arttırmaktadır. Ayrıca diamanyetik terimden gelen bu artış paramanyetik terimden gelen artışın yanında küçük kalmaktadır.

Çizelge 6.5 ve çizelge 6.6'da manyetik alan şiddetinin 0.66 T ve 1.324 T olduğu değerleri için 1d seviyesinin sırasıyla pertürbe olmamış ve pertürbe enerji değerleri, çizelge 6.7 ve çizelge 6.8'de manyetik alan şiddetinin 0.66 T ve 1.324 T olduğu değerler için 1f seviyesinin sırasıyla pertürbe olmamış ve pertürbe enerji değerlerini nokta yarıçapına göre değişimleri verilmiştir. d seviyesinde $m_\ell = 0,\pm1,\pm2$ değerleri aldığı için beş farklı seviyeye

yarılmaktadır, f seviyesinde ise $m_\ell = 0,\pm1,\pm2,\pm3$ değerlerini aldığı için yedi farklı seviyeye yarılmaktadır. Paramanyetik terim $m_\ell = 0$ değeri için 0, m_ℓ'nin negatif değerleri için negatif katkı getirirken, m_ℓ'nin pozitif değerleri için pozitif katkı getirmektedir. Diamanyetik terim ise m_ℓ'nin tüm değerleri için bir pozitif katkı getirdiği görülmektedir. Manyetik alan şiddetinin artması ile d ve f seviyelerinin enerjilerinin üst enerji seviyelerine kaydığı görülmektedir.

Şekil 6.33 ile şekil 6.36 arasındaki grafikler, s ve p seviyelerinin paramanyetik ve hem paramanyetik hem de diamanyetik terimden gelen katkının, yörünge manyetik kuantum sayısı m_ℓ'nin $0,\mp1$ değerlerine bağlı olarak enerji seviyelerinin kuantum nokta yarıçapına göre değişim grafiği verilmiştir. Bu grafiklerde hem paramanyetik terim hem de pertürbasyon terimi olan diamanyetik terimden gelen toplam katkı gösterildi. Yine bu grafiklerden görüleceği gibi p orbitali için açısal momentum kuantum sayısı $\ell=1$ olacağından yörünge manyetik kuantum sayısı $m_\ell = 0,\mp1$ değerlerini aldığından üç farklı Zeeman seviyesine yarılmaktadır. Küçük nokta yarıçaplarında bu dejenerelik ortadan kalkmaktadır. Paramanyetik terim enerji seviyelerindeki dejenereliği ortadan kaldırırken, diamanyetik terim tüm enerji seviyelerini daha üst enerjilere kaydırmaktadır.

Şekil 6.37 ve şekil 6.40 arasındaki grafikler, p ve d seviyelerinin paramanyetik ve hem paramanyetik hem diamanyetik terimden gelen katkının, yörünge manyetik kuantum sayısı m_ℓ'nin $0,\mp1,\mp2$, değerlerine bağlı olarak enerji seviyelerinin kuantum nokta yarıçapına göre değişim grafiği verilmiştir. Bu grafiklerden görüleceği gibi d orbitali için açısal momentum kuantum sayısı $\ell=2$ olacağından yörünge manyetik kuantum sayısı $m_\ell = 0,\mp1,\mp2$ değerlerini aldığından beş farklı seviyeye yarılmaktadır. Küçük nokta yarıçaplarında bu dejenerelik ortadan kalkmaktadır. Paramanyetik terim enerji dejenereliği ortadan kaldırırken diamanyetik terim tüm enerji seviyelerini daha üst enerjilere kaydırmaktadır.

Çizelge 6.5. 1d seviyesinin manyetik kuantum sayısı $m_\ell = 0,\pm1,\pm2$ için, manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokometri oranı 0.3 olduğunda kuantum nokta yapının pertürbe olmamış ve pertürbe olmuş enerji değerlerinin kuantum nokta yarıçapına göre hesaplanan değerleri. Enerjiler Hartree, nokta yapı yarıçapı etkin Bohr yarıçapı a^* cinsinden verilmiştir.

	$E_{1d}^{(0)}$					E_{1d}				
R(a*)	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 1$	$m_\ell = 2$	$m_\ell = -1$	$m_\ell = -2$	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 1$	$m_\ell = 2$	$m_\ell = -1$	$m_\ell = -2$
0.5	19.84211399	19.89211424	19.94211480	19.79211424	19.74211480	19.87678828	19.93372584	20.00453220	19.83372584	19.80453220
0.6	19.84212320	19.89212282	19.94212394	19.79212282	19.74212394	19.87683451	19.93365371	20.00442027	19.83365371	19.80442027
0.7	19.84213848	19.89213937	19.94213848	19.79213937	19.74213848	19.87686309	19.93377677	20.00464279	19.83380891	19.80464279
0.8	19.84215577	19.89217012	19.94215577	19.79217012	19.74215577	19.87685360	19.93380752	20.00461187	19.83380752	19.80461187
0.9	19.84219643	19.89220144	19.94219643	19.79220144	19.74219643	19.87700598	19.93397290	20.00485363	19.83397290	19.80485363
1.0	19.84217807	19.89217093	19.94217807	19.79217093	19.74217807	19.87682829	19.93384682	20.00454846	19.83375118	19.80454846
1.2	19.82061509	19.63506989	19.92061509	19.53506989	19.72061509	19.83849140	19.63555504	19.95279245	19.55652147	19.75279245
1.4	17.03490158	17.07624192	17.13490158	16.97624192	16.93490158	17.03532242	17.07673087	17.13565909	16.97674692	16.93565909
1.6	15.02264282	14.92482552	15.12264282	14.82482552	14.92264282	15.02311482	14.92534692	15.12349242	14.82539193	14.92349242
1.8	13.16925847	13.23683423	13.28683423	13.13683423	13.07957006	13.16974824	13.23742152	13.28771516	13.13741088	13.08045191
2.0	11.79951164	11.82405176	11.87405176	11.72405176	11.68185866	11.80005535	11.82472270	11.87505817	11.72472701	11.68282644
3.0	7.68766929	7.71562332	7.76562332	7.61562332	7.71723245	7.68857597	7.71659393	7.76707923	7.61668801	7.71882950
4.0	5.63446329	5.71349534	5.76349534	5.61349534	5.68279904	5.63552490	5.71476215	5.76539556	5.61484711	5.68482669
5.0	4.44451610	4.47728589	4.55025290	4.37728589	4.45474518	4.44585745	4.47888801	4.55262815	4.37892837	4.45720888
8.0	2.64283356	2.75698290	2.75016334	2.59457585	2.60698290	2.64492946	2.75961245	2.75384384	2.59720539	2.61092722
10.0	2.11051550	2.16051550	2.15460068	2.00846289	2.01051550	2.11303474	2.16375403	2.15919619	2.01170142	2.01521736
20.0	0.91247018	0.96547866	1.01281868	0.86547866	0.81547866	0.91741994	0.97129870	1.02149958	0.87129870	0.82420873

Çizelge 6.6. 1d seviyesinin manyetik kuantum sayısı $m_\ell = 0,\pm1,\pm2$ için, manyetik alan şiddeti 1.324 T, stokometri oranı 0.3 olduğunda kuantum nokta yapının pertürbe olmamış ve pertürbe olmuş enerji değerlerinin kuantum nokta yarıçapına göre hesaplanan değeri. Enerjiler Hartree, nokta yarıçapı etkin Bohr yarıçapı a^* cinsinden verilmiştir.

	$E_{1d}^{(0)}$					E_{1d}				
R(a*)	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 1$	$m_\ell = 2$	$m_\ell = -1$	$m_\ell = -2$	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 1$	$m_\ell = 2$	$m_\ell = -1$	$m_\ell = -2$
0.5	19.84211480	19.94211440	20.04211424	19.74211480	19.64211480	19.98082014	20.10850325	20.29244759	19.90856121	19.89178441
0.6	19.84212394	19.94212215	20.04212282	19.74212394	19.64212394	19.98056023	20.10881608	20.29164863	19.90824749	19.89130927
0.7	19.84213848	19.94213650	20.04213937	19.74213848	19.64213848	19.98103694	20.10866500	20.29166122	19.90881663	19.89215571
0.8	19.84215577	19.94215635	20.04217012	19.79215577	19.64215577	19.98094710	20.10891626	20.29336949	19.95870537	19.89198016
0.9	19.84219643	19.94218004	20.04220144	19.74219643	19.64219643	19.98143465	20.10938884	20.29119781	19.90928229	19.89282522
1.0	19.84217807	19.94218948	20.04217093	19.74217807	19.64217807	19.85297317	20.10930087	20.29222630	19.90849910	19.89165962
1.2	19.82061509	19.65720007	19.78506989	19.72061509	19.62061509	19.89212034	19.66154572	19.78957198	19.80642139	19.74932455
1.4	17.02070497	17.13490158	17.22624192	16.93490158	16.83490158	17.02238832	17.13692161	17.22917563	16.93692161	16.83793162
1.6	14.88210240	14.97482552	15.07482552	14.92264282	14.82264282	14.88388640	14.97711027	15.07795392	14.92490843	14.82604123
1.8	13.16925847	13.28683423	13.38683423	13.20974433	13.10974433	13.17121755	13.28918337	13.39035794	13.21205093	13.11320423
2.0	11.79951164	11.87405176	11.97405176	11.76994340	11.58185866	11.80168646	11.87673552	11.97807740	11.77264440	11.58572978
3.0	7.68766929	7.76562332	7.86562332	7.56562332	7.56240382	7.69077196	7.76950576	7.87144698	7.56950576	7.56845352
4.0	5.63446329	5.76349534	5.86349534	5.68279904	5.58279904	5.63870975	5.76856259	5.87160594	5.68820611	5.59090964
5.0	4.44451610	4.52728589	4.62728589	4.32728589	4.35474518	4.44988152	4.53369437	4.63678690	4.33369437	4.36441504
8.0	2.64283356	2.80698290	2.90698290	2.54457585	2.50698290	2.65121717	2.81750108	2.92170492	2.55445755	2.52223919
10.0	2.11051550	2.21051550	2.31051550	2.01051550	1.85734113	2.12131060	2.22305381	2.32932296	2.02305381	1.87572675
20.0	0.91247018	1.01547866	1.11547866	0.81547866	0.72076637	0.93187032	1.03875884	1.15039892	0.83875884	0.75448980

Çizelge 6.7. 1f seviyesinin manyetik kuantum sayısı $m_\ell = 0,\pm1,\pm2$ için, manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokometri oranı 0.3 olduğunda kuantum nokta yapının pertürbe olmamış ve pertürbe olmuş enerji değerlerinin kuantum nokta yarıçapına göre hesaplanan değerleri. Enerjiler Hartree, nokta yapı yarıçapı etkin Bohr yarıçapı a^* cinsinden verilmiştir.

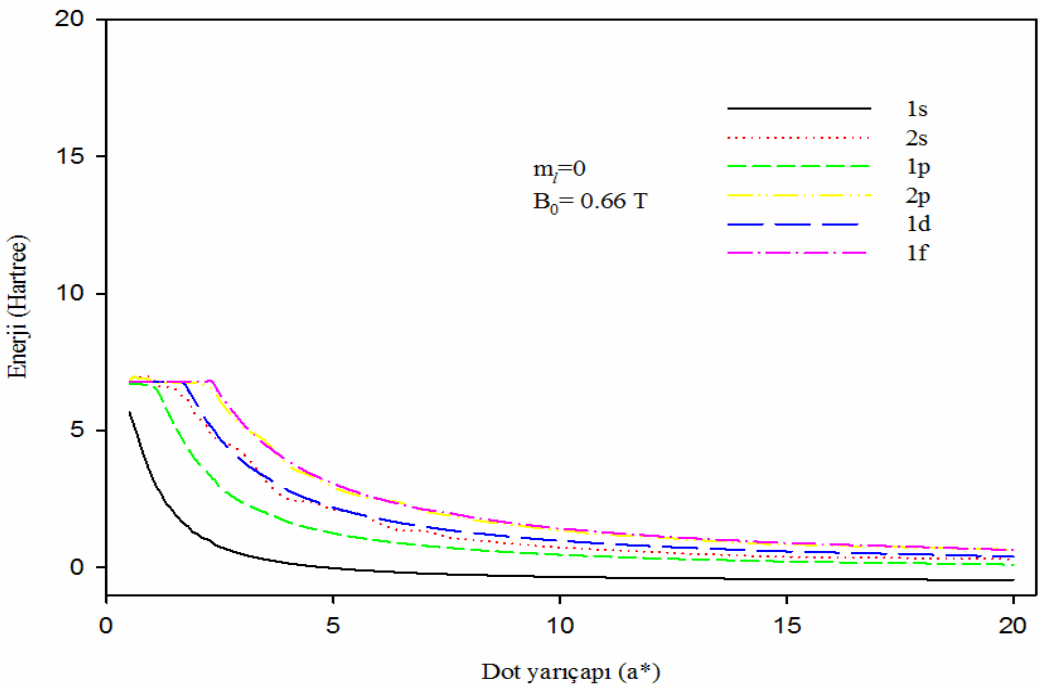
	$E_{1f}^{(0)}$					E_{1f}				
R(a*)	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 1$	$m_\ell = 2$	$m_\ell = -1$	$m_\ell = -2$	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 1$	$m_\ell = 2$	$m_\ell = -1$	$m_\ell = -2$
0.5	19.88059129	19.93059129	19.98059130	19.83059129	19.78059130	19.98228055	20.04149758	20.11922416	19.94149758	19.91922416
0.6	19.88059130	19.93059130	19.98059131	19.83059130	19.78059131	19.98228204	20.04152119	20.11925367	19.94152119	19.91925367
0.7	19.88059138	19.93059133	19.98059138	19.83059133	19.78059138	19.98219535	20.04150600	20.11914224	19.94143202	19.91914224
0.8	19.88059140	19.93059138	19.98059140	19.83059138	19.78059140	19.98226318	20.04150605	20.11923474	19.94150605	19.91923474
0.9	19.88059152	19.93059148	19.98059152	19.83059148	19.78059152	19.98231842	20.04156628	20.11931003	19.94156628	19.91931003
1.0	19.88059173	19.93059168	19.98059173	19.83059168	19.78059173	19.98230286	20.04151080	20.11928872	19.94154927	19.91928872
1.2	19.88059275	19.93059280	19.98059275	19.83059280	19.78059275	19.98229231	20.04153439	20.11927397	19.94153778	19.91927397
1.4	19.88059532	19.93059456	19.98059532	19.83059456	19.78059532	19.98218589	20.04145948	20.11912792	19.94142064	19.91912792
1.6	19.88046770	19.63080093	19.98046770	19.53080093	19.78046770	19.98324960	19.63155324	20.12062484	19.64292664	19.92062484
1.8	17.43830949	17.48972071	17.53972071	17.38972071	17.33914531	17.43897279	17.49045333	17.54063649	17.39058975	17.34006013
2.0	15.61975764	15.70809072	15.75809072	15.60809072	15.56346645	15.62048636	15.70888790	15.75908719	15.60903209	15.56447031
3.0	10.26728006	10.33427711	10.38427711	10.23427711	10.31926052	10.26838192	10.33549743	10.38580250	10.23551091	10.32080277
4.0	7.61005354	7.65711030	7.70711030	7.55711030	7.67030381	7.61145067	7.65866376	7.70905213	7.55874989	7.67235330
5.0	6.01903281	6.07694396	6.12828105	5.97694396	6.09944486	6.02074779	6.07893369	6.13068363	5.97901369	6.10203203
8.0	3.66847906	3.78913529	3.76888093	3.62375455	3.63913529	3.67128316	3.79220169	3.77272803	3.62682096	3.64296829
10.0	2.93919506	2.98919506	2.97488320	2.83528724	2.83919506	2.94266553	2.99297189	2.97960424	2.83922833	2.84412142
20.0	1.34998448	1.39742274	1.44510426	1.29742274	1.24742274	1.35670733	1.40503825	1.45440789	1.30503825	1.25694213

Çizelge 6.8. 1f seviyesinin manyetik kuantum sayısı $m_\ell = 0,\pm1,\pm2$ için, manyetik alan şiddeti 1.324 T, stokometri oranı 0.3 olduğunda kuantum nokta yapının pertürbe olmamış ve pertürbe olmuş enerji değerlerinin kuantum nokta yarıçapına göre hesaplanan değerleri. Enerjiler Hartree, nokta yapı yarıçapı etkin Bohr yarıçapı a^* cinsinden verilmiştir.

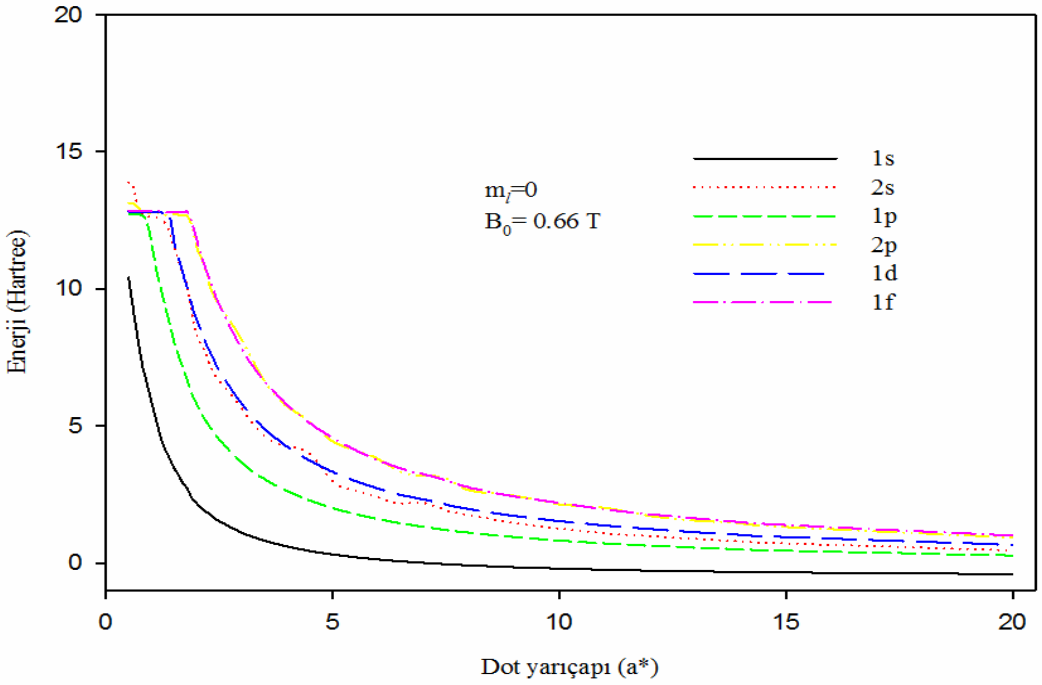
	$E_{1f}^{(0)}$					E_{1f}				
R(a*)	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 1$	$m_\ell = 2$	$m_\ell = -1$	$m_\ell = -2$	$m_\ell = 0$	$m_\ell = 1$	$m_\ell = 2$	$m_\ell = -1$	$m_\ell = -2$
0.5	19.88059130	19.98059130	20.08059129	19.78059130	19.68059130	20.28724769	20.42430532	20.63525742	20.22421645	20.23512274
0.6	19.88059131	19.98059134	20.08059130	19.78059131	19.68059131	20.28733423	20.42447638	20.63522906	20.22431086	20.23524075
0.7	19.88059138	19.98059133	20.08059133	19.78059138	19.68059138	20.28700726	20.42430145	20.63524216	20.22395415	20.23479485
0.8	19.88059140	19.98059138	20.08059138	19.83059140	19.68059140	20.28727853	20.42435254	20.63530500	20.27425008	20.23516476
0.9	19.88059152	19.98059198	20.08059148	19.78059152	19.68059152	20.28749913	20.42476010	20.63522866	20.22449073	20.23546553
1.0	19.88059173	19.98059211	20.08059168	19.78059173	19.68059173	19.89504239	20.42526640	20.63518732	20.22442212	20.23537972
1.2	19.88059275	19.98059252	20.08059280	19.78059275	19.68059275	20.28739101	20.42431582	20.63513918	20.22437267	20.23531766
1.4	19.88059421	19.98059532	20.08059456	19.78059532	19.68059532	20.28695650	20.42389964	20.63491914	20.22389964	20.23472572
1.6	19.56612244	19.68080093	19.78080093	19.78046770	19.68046770	19.56896868	19.68399824	19.78456244	20.22897053	20.24109624
1.8	17.43830949	17.53972071	17.63972071	17.35194984	17.25194984	17.44096271	17.54265121	17.64338384	17.35542600	17.25629504
2.0	15.61975764	15.75809072	15.85809072	15.77685022	15.46346645	15.62267251	15.76127941	15.86207659	15.78061569	15.46748189
3.0	10.26728006	10.38427711	10.48427711	10.18427711	10.19741484	10.27160122	10.38915836	10.49037867	10.18915836	10.20342498
4.0	7.61005354	7.70711030	7.80711030	7.67030381	7.57030381	7.61564206	7.71332415	7.81530826	7.67686217	7.57850177
5.0	6.01903281	6.12694396	6.22694396	5.92694396	5.99944486	6.02589272	6.13490290	6.23655429	5.93490290	6.00957883
8.0	3.66847906	3.83913529	3.93913529	3.57375455	3.53913529	3.67969545	3.85140091	3.95452366	3.58569464	3.55470313
10.0	2.93919506	3.03919506	3.13919506	2.83919506	2.68255628	2.95364572	3.05430240	3.15807923	2.85430240	2.70173743
20.0	1.34998448	1.44742274	1.54742274	1.24742274	1.14637928	1.37790803	1.47788479	1.58550031	1.27788479	1.18312932

Şekil 6.41 ile şekil 6.44 arasındaki grafikler, d ve f seviyelerinin paramanyetik ve hem paramanyetik hem diamanyetik terimden gelen katkının, yörünge manyetik kuantum sayısı m_ℓ'nin $0,\mp1,\mp2,\mp3$, değerlerine bağlı olarak enerji seviyelerinin kuantum nokta yarıçapına göre değişim grafiği verilmiştir. Bu grafiklerden görüleceği gibi f orbitali için açısal momentum kuantum sayısı $\ell=3$ olacağından yörünge manyetik kuantum sayısı $m_\ell = 0,\mp1,\mp2,\mp3$ değerlerini aldığından yedi farklı seviyeye yarılmaktadır. Biz hesaplamalarımızda beş farklı yarılmayı göz önünde bulundurduk. Küçük nokta yarıçaplarında bu dejenerelik ortadan kalkmaktadır. Bu grafiklerde hem paramanyetik terim hem de pertürbasyon terimi olan diamanyetik terimden gelen toplam katkı gösterildi. f seviyelerinde de paramanyetik terim enerji dejenereliği ortadan kaldırırken diamanyetik terim tüm enerji seviyelerini daha üst enerjilere kaydırmaktadır.

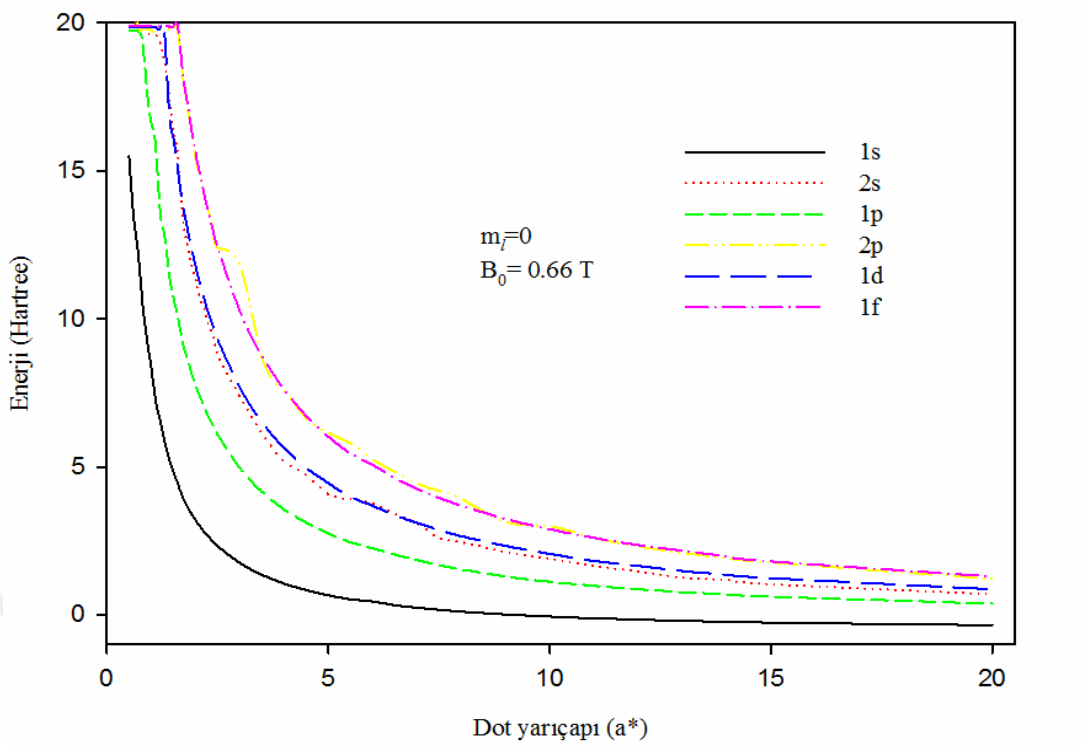
Sonuç olarak kuantum nokta yarıçapı artarken, seviyelerin enerjileri düşmekte ve seviyeler arasındaki fark azalmaktadır. Sınırlandırıcı potansiyeli arttırdığımızda enerji seviyeleri üst seviyelere doğru kaymaktadır ve seviyeler arasındaki fark artmaktadır. Manyetik alan arttıkça enerji seviyeleri arasındaki fark da artmakta ve seviyeler üst enerji seviyelerine doğru kaymaktadır. Manyetik alanın etkisiyle özellikle büyük kuantum nokta yarıçaplarında enerji seviyeleri yarılmaktadır. Paramanyetik terim herhangi bir ℓ seviyesini $2\ell+1$ kez yarmaktadır. Diamanyetik terim ise tüm enerji seviyelerini üst seviyelere kaydırmaktadır. Küçük nokta yarıçaplarında uzaysal sınırlandırmalar etkili olurken, büyük nokta yarıçaplarında manyetik alanın etkisi baskın olmaktadır. Manyetik alan özellikle üst seviyeleri çok etkilemektedir.



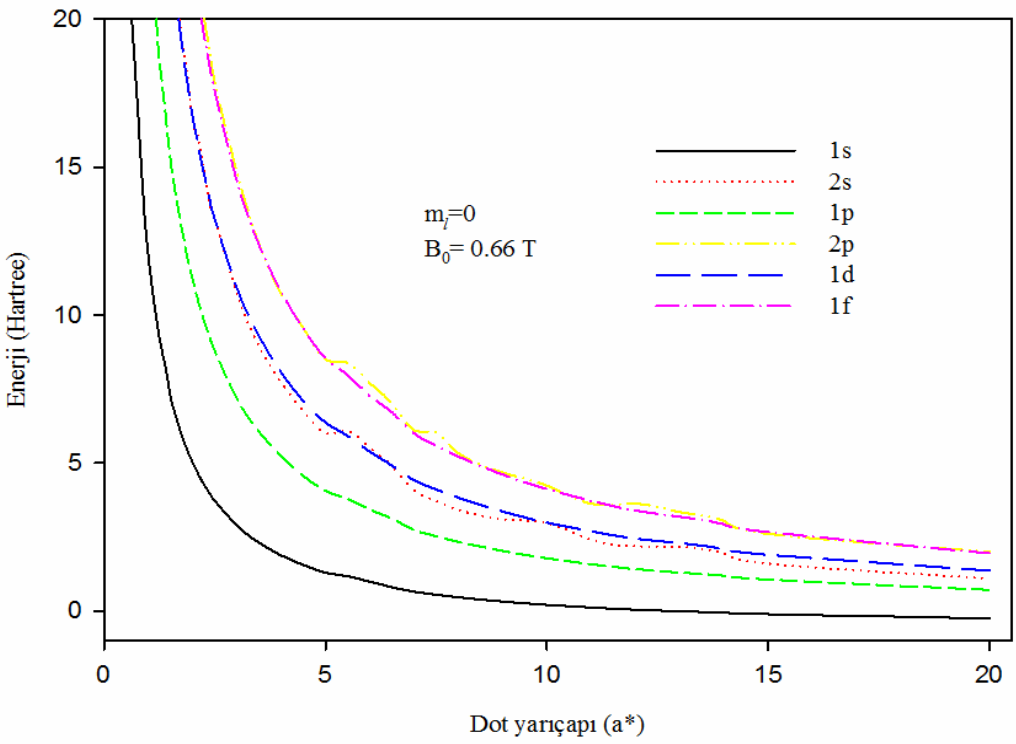
Şekil 6.1. Kuantum nokta yapının enerji seviyelerinin nokta yarıçapına göre değişimi. (manyetik kuantum sayısı m=0, manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokometri oranı x=0.1)



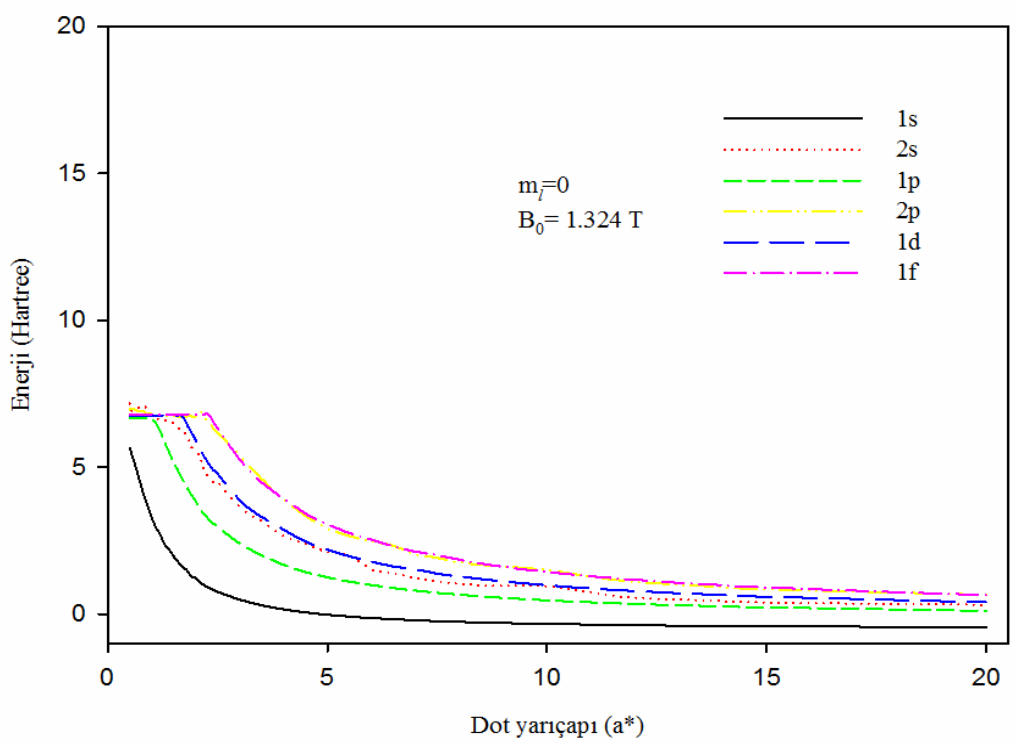
Şekil 6.2. Kuantum nokta yapının enerji seviyelerinin nokta yarıçapına göre değişimi. (manyetik kuantum sayısı m=0, manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokometri oranı x=0.2)



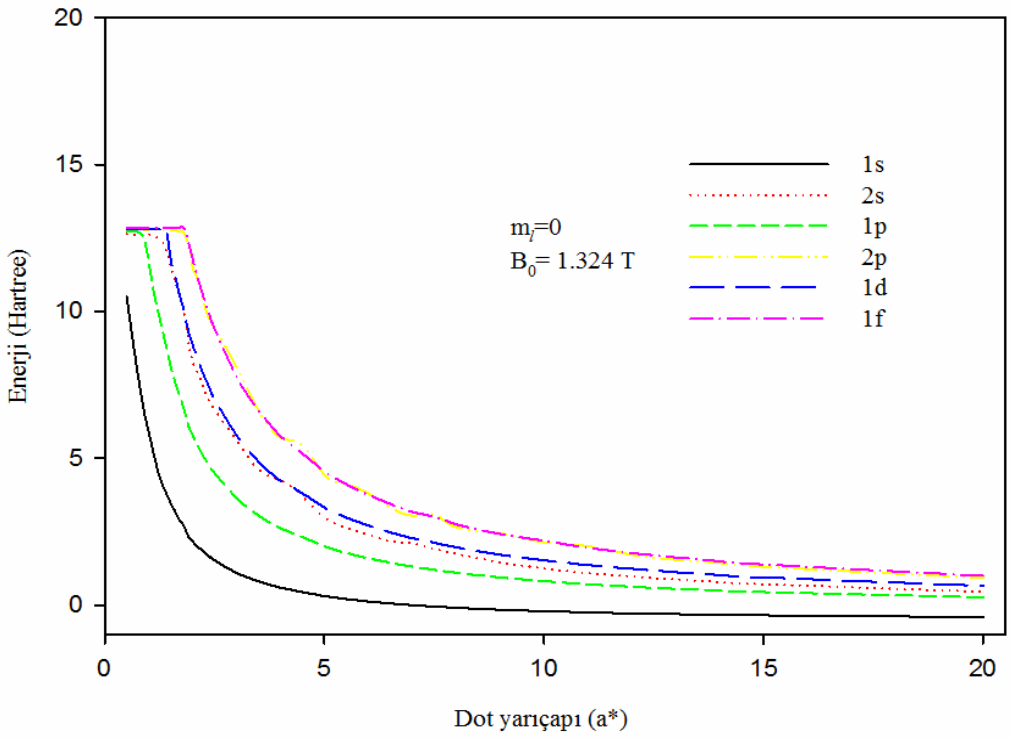
Şekil 6.3. Kuantum nokta yapının enerji seviyelerinin nokta yarıçapına göre değişimi. (manyetik kuantum sayısı m=0, manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokometri oranı x=0.3)



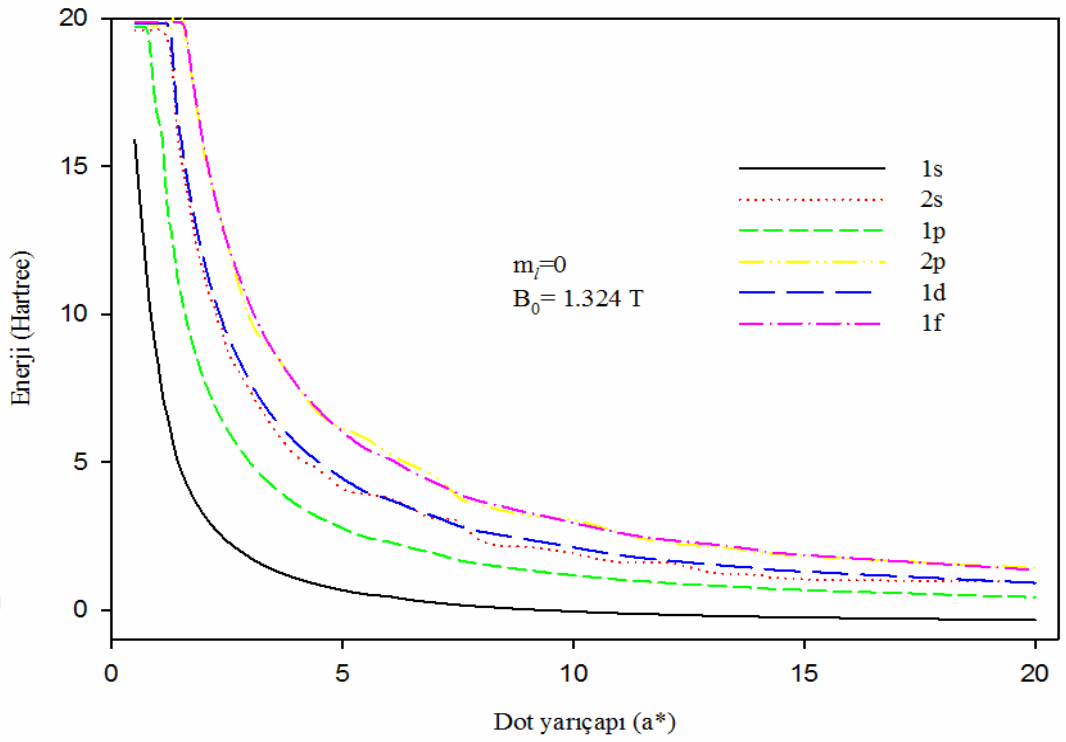
Şekil 6.4. Kuantum nokta yapının enerji seviyelerinin nokta yarıçapına göre değişimi. (manyetik kuantum sayısı m=0, manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokometri oranı x=0.4)



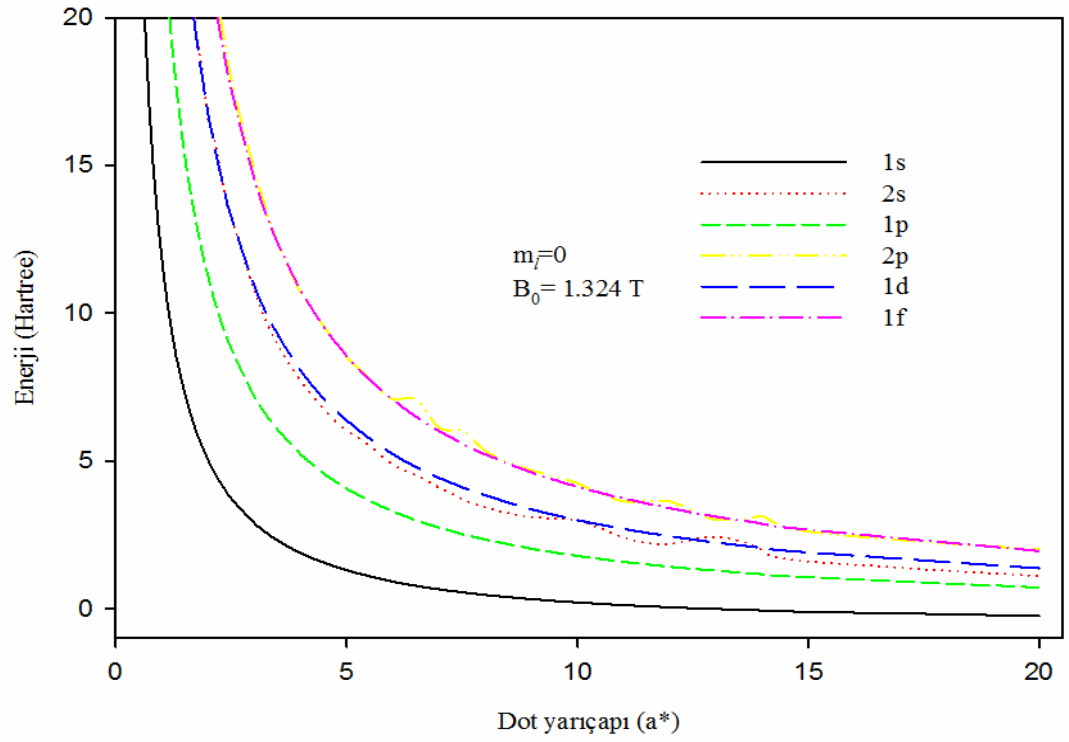
Şekil 6.5. Kuantum nokta yapının enerji seviyelerinin nokta yarıçapına göre değişimi. (manyetik kuantum sayısı m=0, manyetik alan şiddeti 1.324 T, stokometri oranı x=0.1)



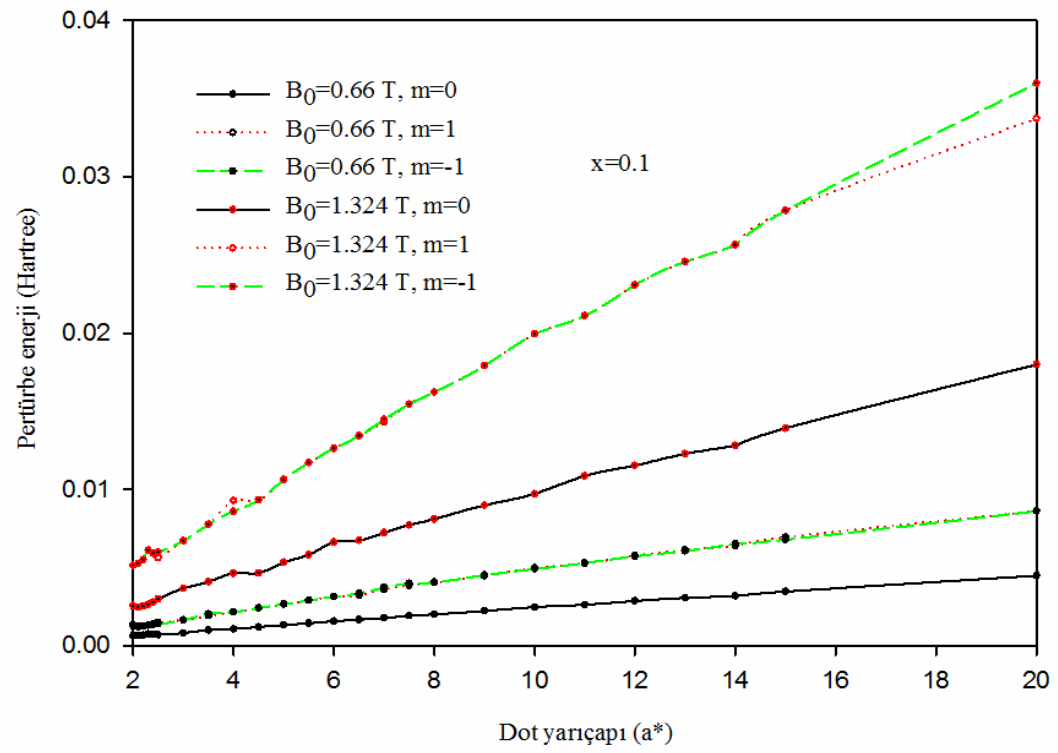
Şekil 6.6. Kuantum nokta yapının enerji seviyelerinin nokta yarıçapına göre değişimi. (manyetik kuantum sayısı m=0, manyetik alan şiddeti 1.324 T, stokometri oranı x=0.2.)



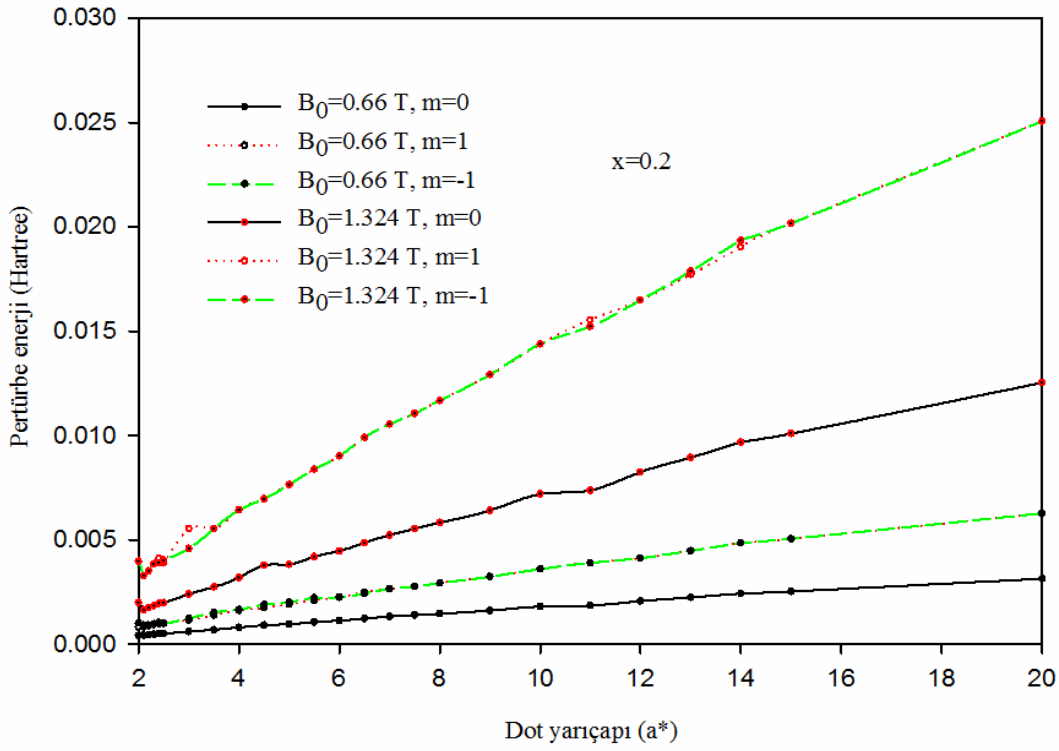
Şekil 6.7. Kuantum nokta yapının enerji seviyelerinin nokta yarıçapına göre değişimi. (manyetik kuantum sayısı m=0, manyetik alan şiddeti 1.324 T, stokometri oranı x=0.3)



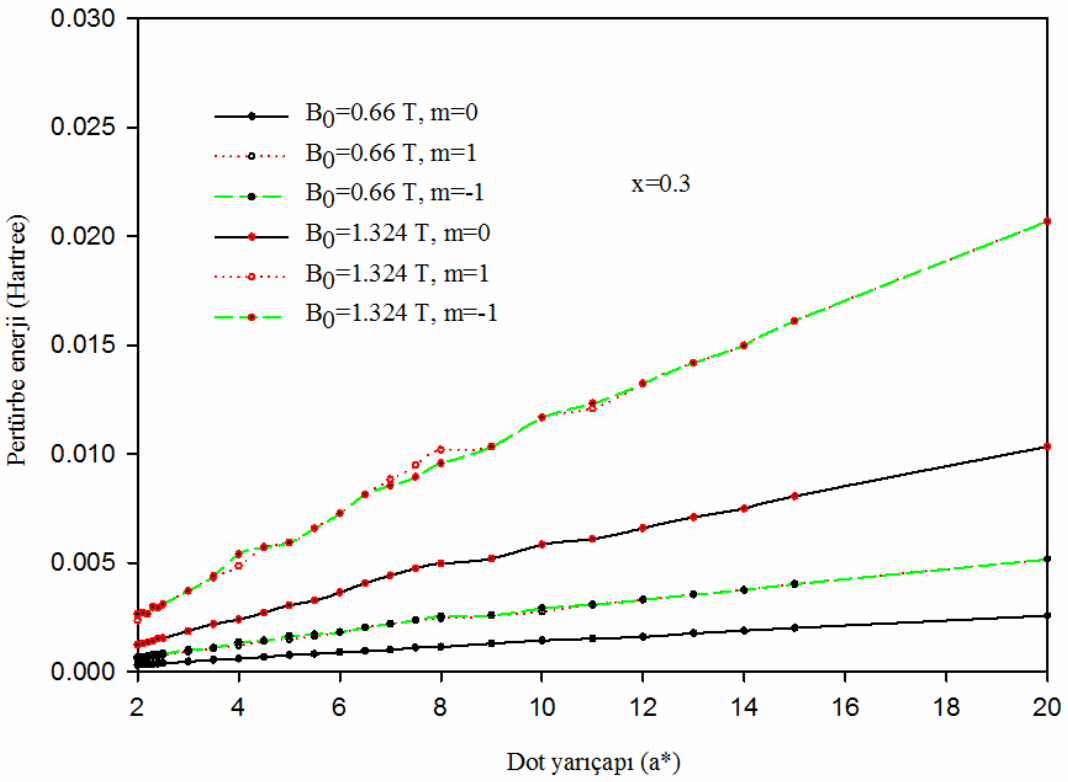
Şekil 6.8. Kuantum nokta yapının enerji seviyelerinin nokta yarıçapına göre değişimi. (manyetik kuantum sayısı m=0, manyetik alan şiddeti 1.324 T, stokometri oranı x=0.4)



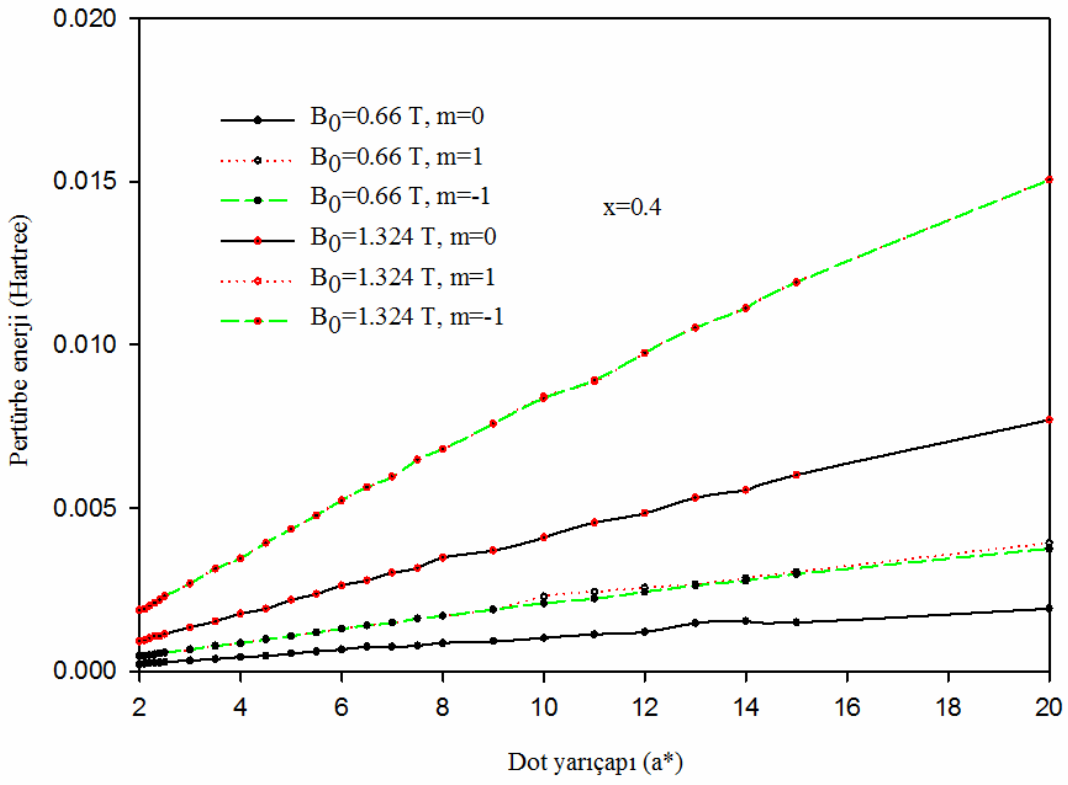
Şekil 6.9. 1p seviyesinin pertürbe enerji değerlerinin dot yarıçapına göre değişimi.



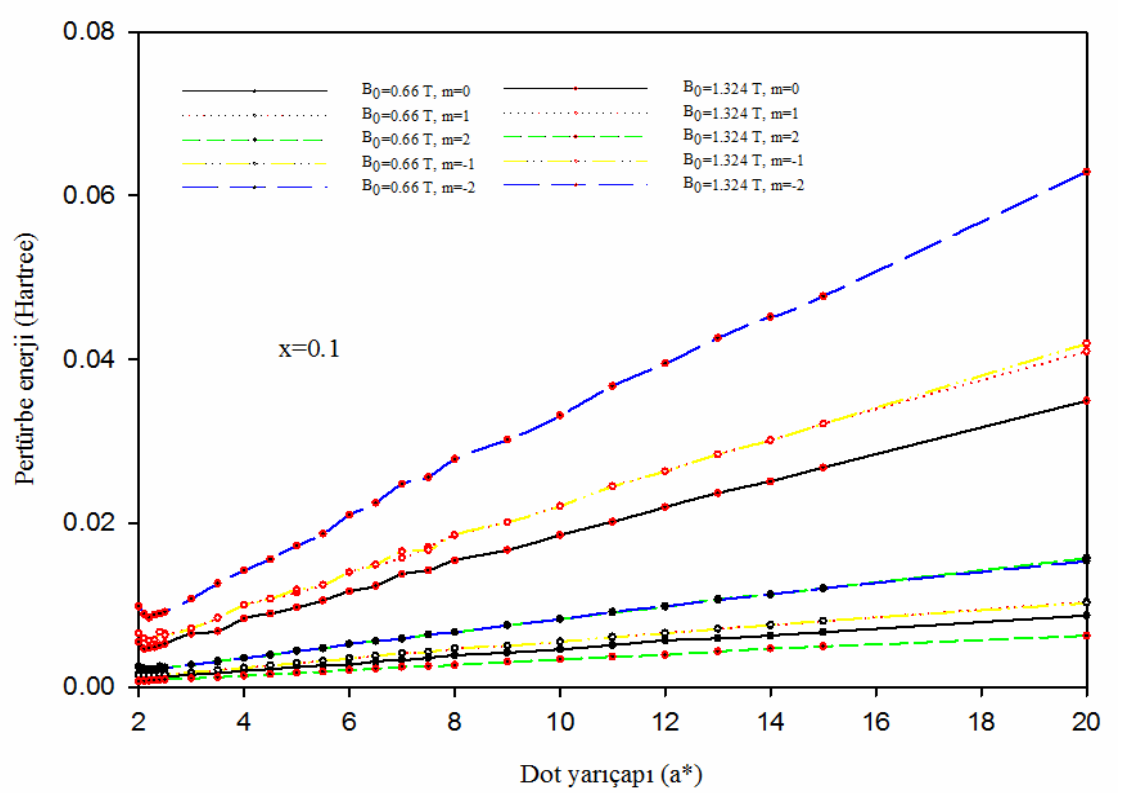
Şekil 6.10. 1p seviyesinin pertürbe enerji değerlerinin dot yarıçapına göre değişimi.



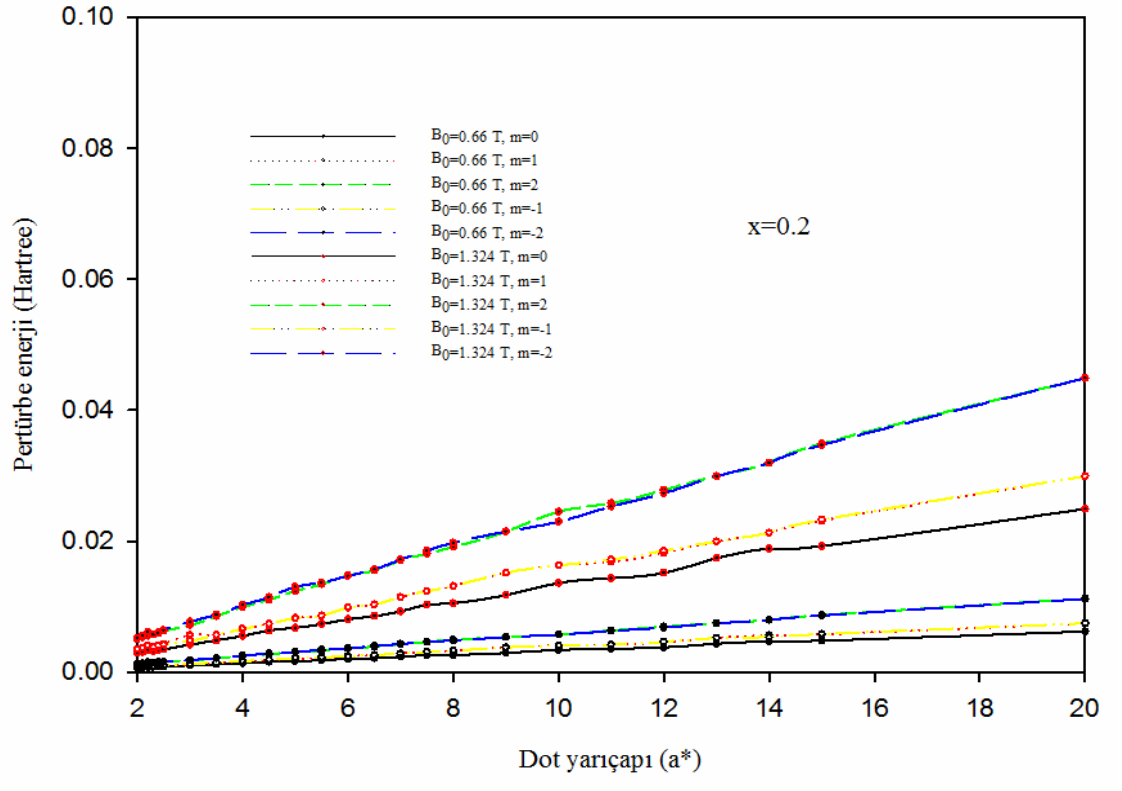
Şekil 6.11. 1p seviyesinin pertürbe enerji değerlerinin dot yarıçapına göre değişimi.



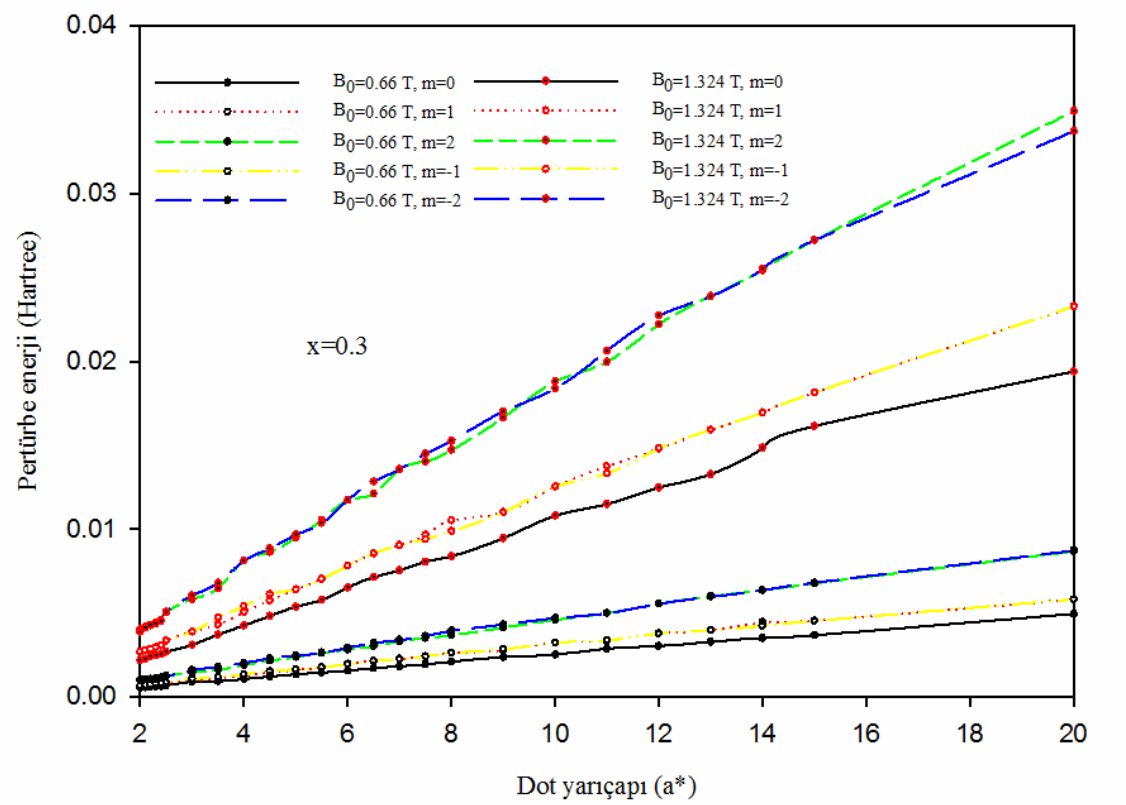
Şekil 6.12. 1p seviyesinin pertürbe enerji değerlerinin dot yarıçapına göre değişimi.



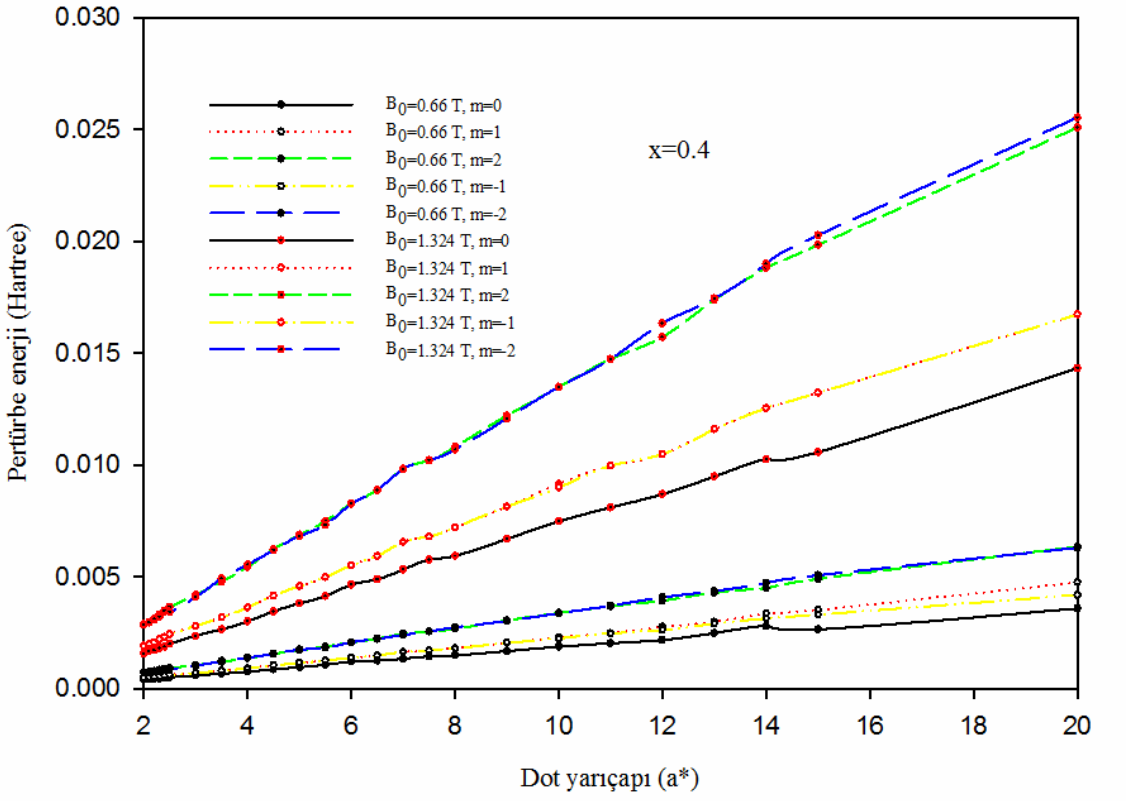
Şekil 6.13. 1d seviyesinin pertürbe enerji değerlerinin dot yarıçapına göre değişimi.



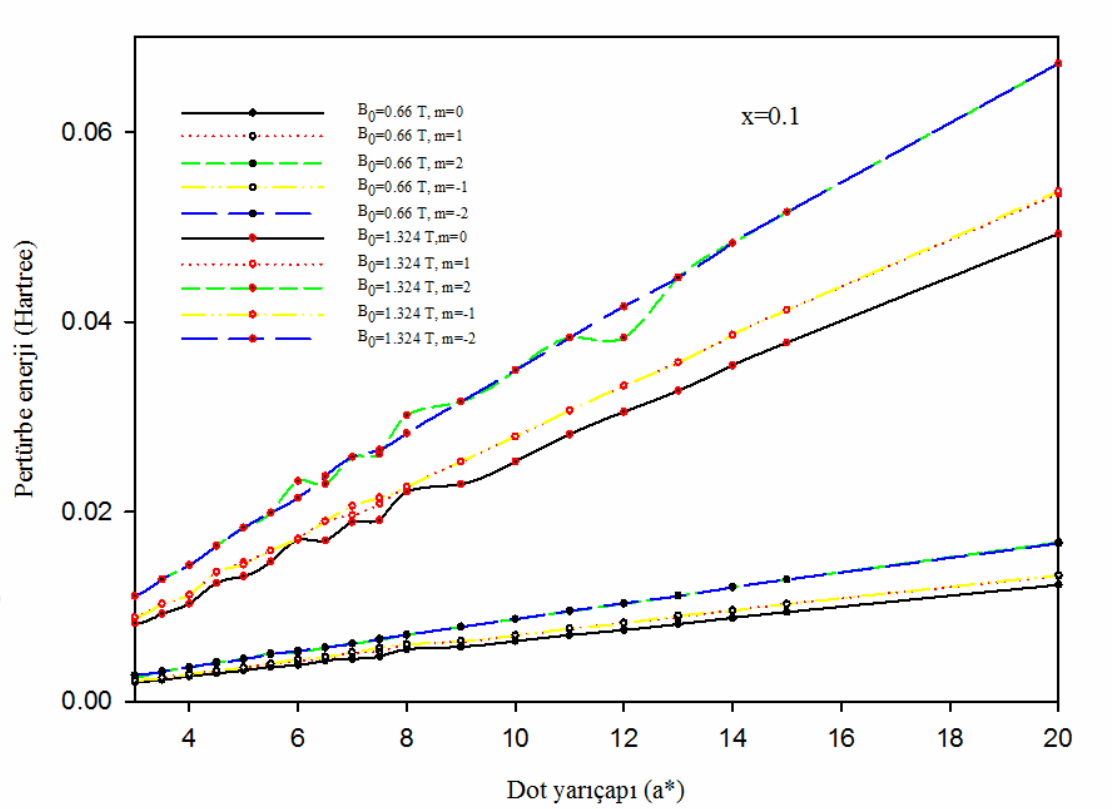
Şekil 6.14. 1d seviyesinin pertürbe olmuş enerji değerlerinin dot yarıçapına göre değişimi.



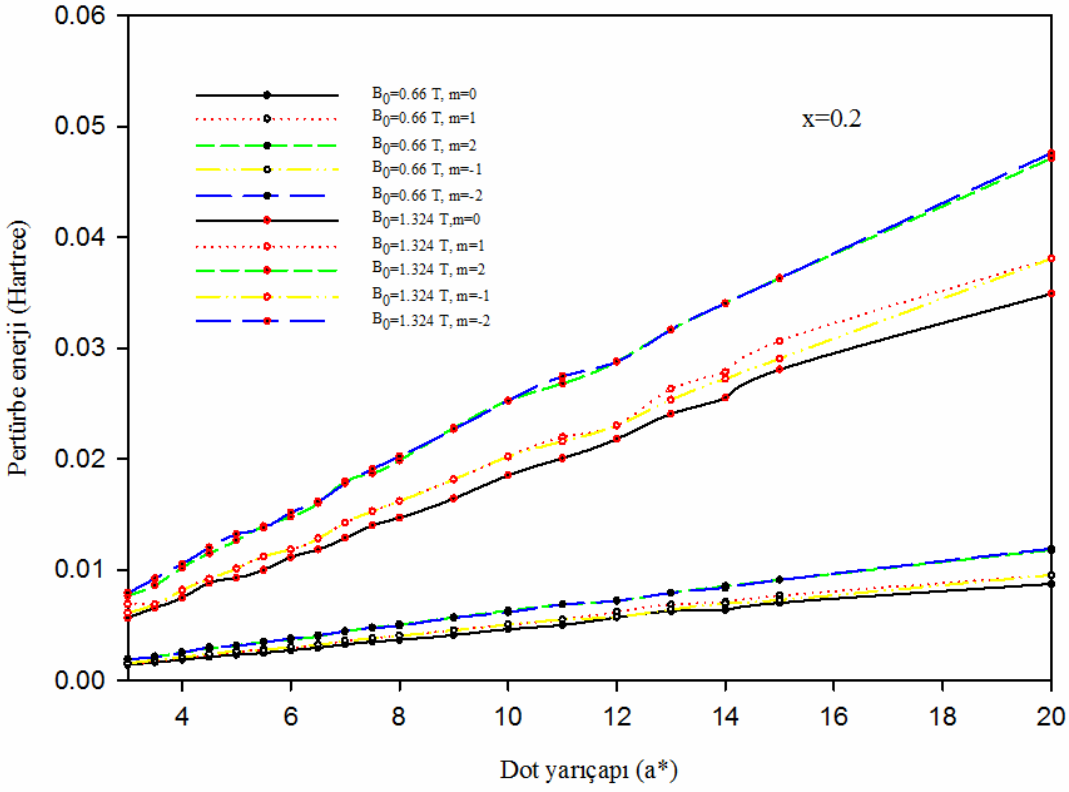
Şekil 6.15. 1d seviyesinin pertürbe enerji değerlerinin dot yarıçapına göre değişimi.



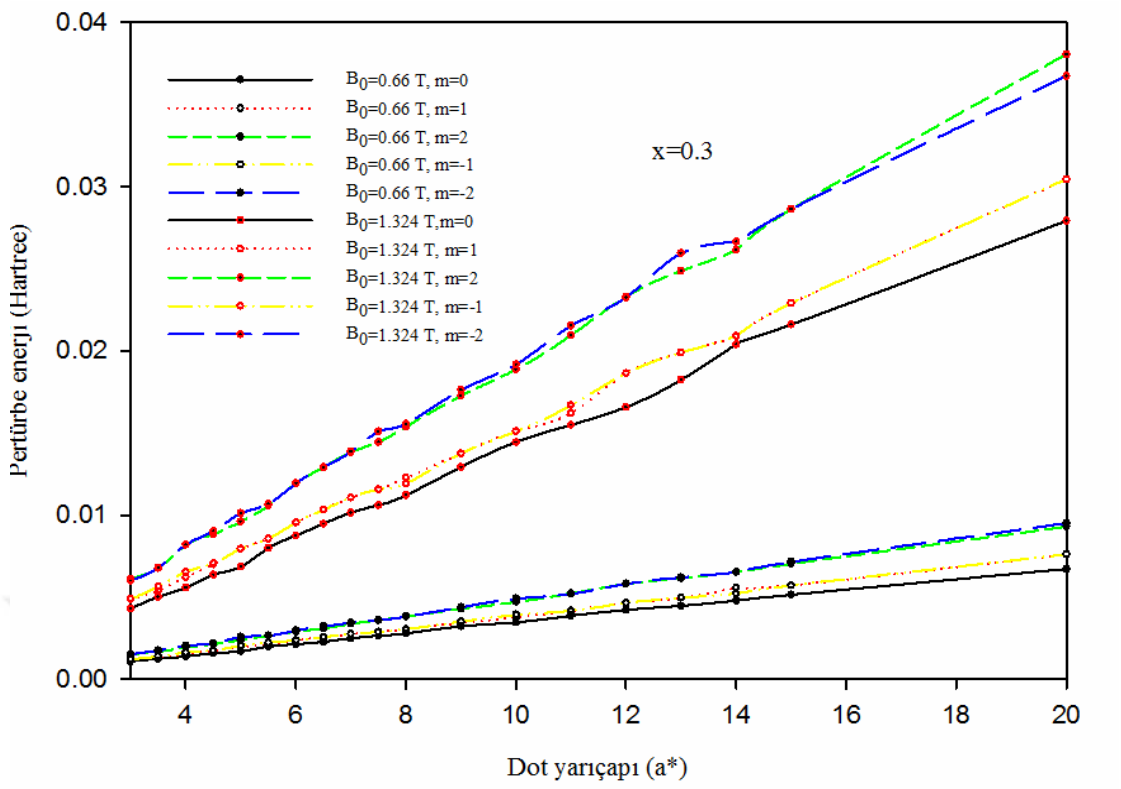
Şekil 6.16. 1d seviyesinin pertürbe enerji değerlerinin dot yarıçapına göre değişimi.



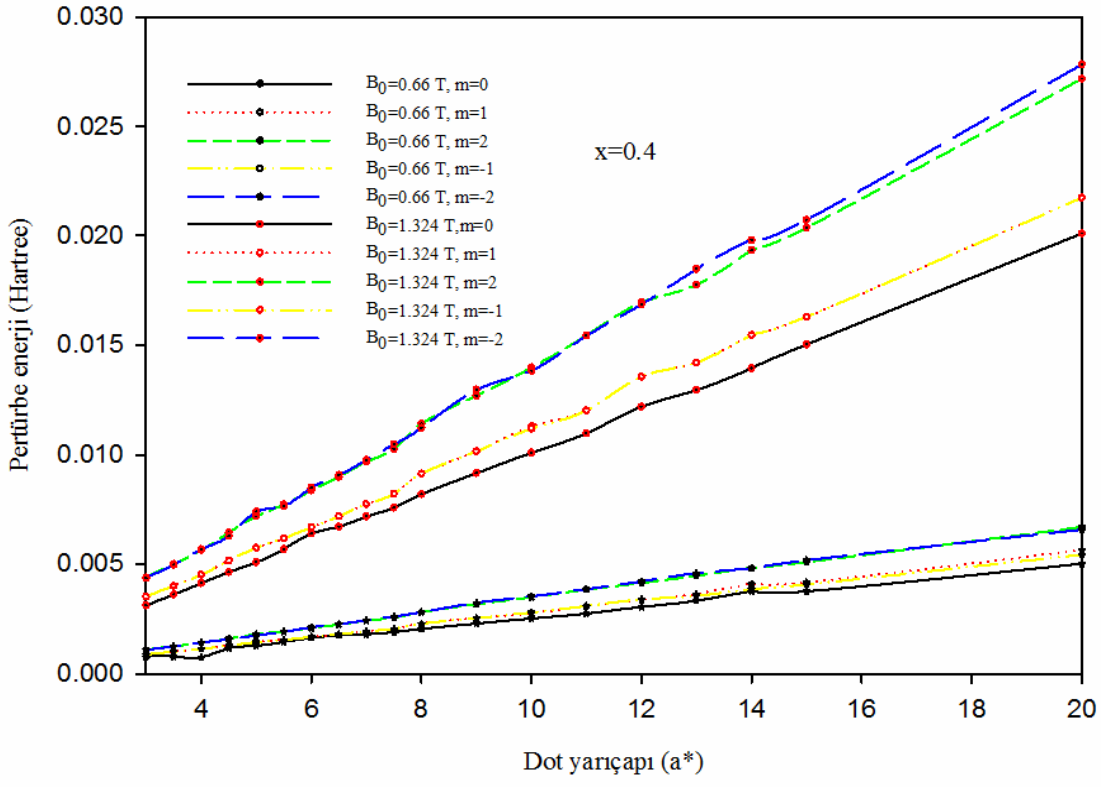
Şekil 6.17. 1f seviyesinin pertürbe enerji değerlerinin dot yarıçapına göre değişimi.



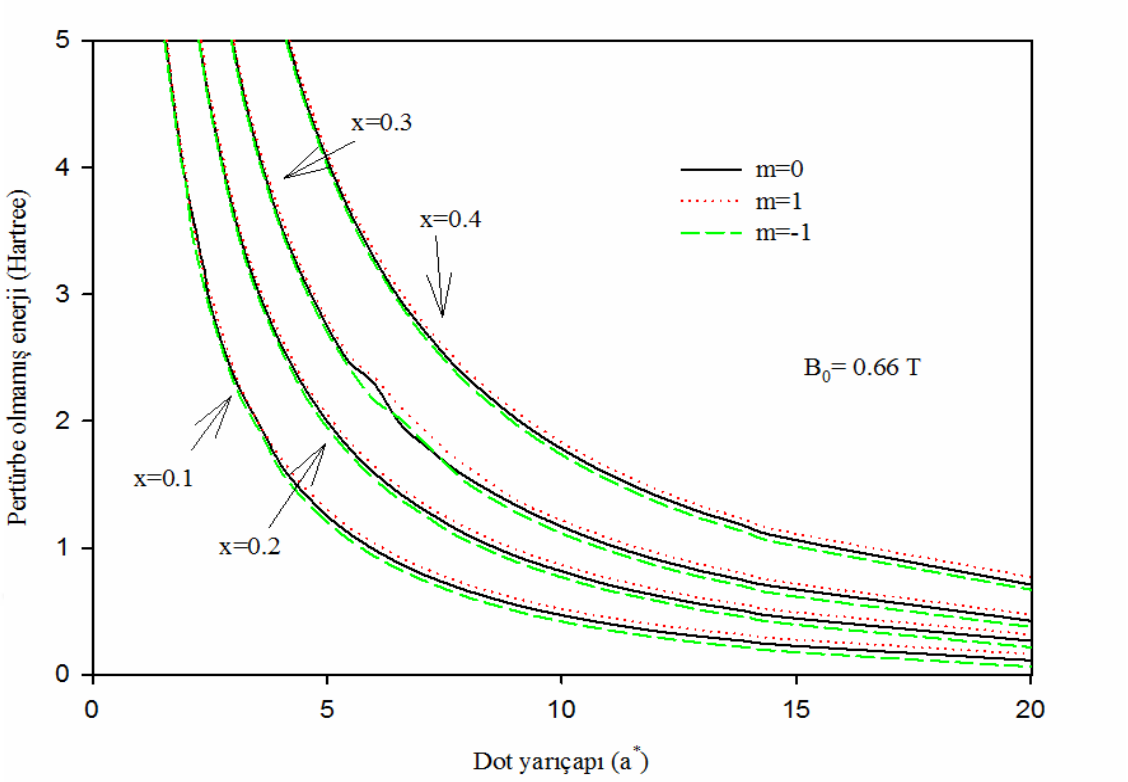
Şekil 6.18. 1f seviyesinin pertürbe enerji değerlerinin dot yarıçapına göre değişimi.



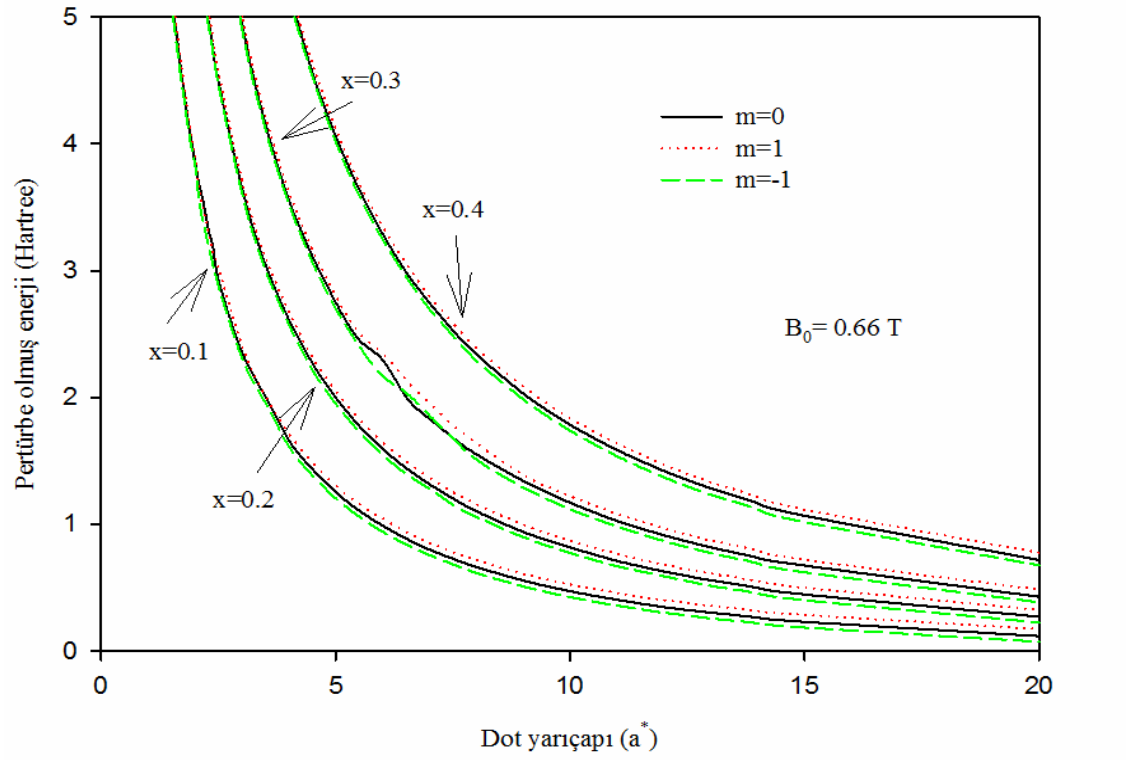
Şekil 6.19. 1f seviyesinin pertürbe enerji değerlerinin dot yarıçapına göre değişimi.



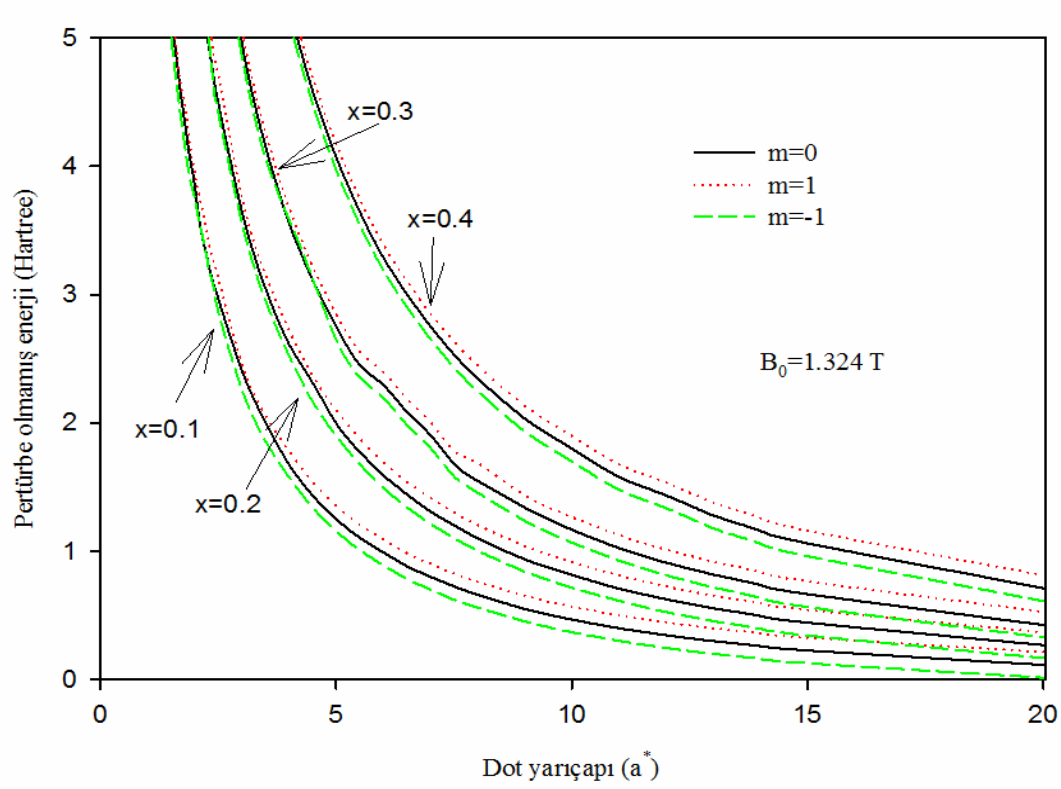
Şekil 6.20. 1f seviyesinin pertürbe enerji değerlerinin dot yarıçapına göre değişimi.



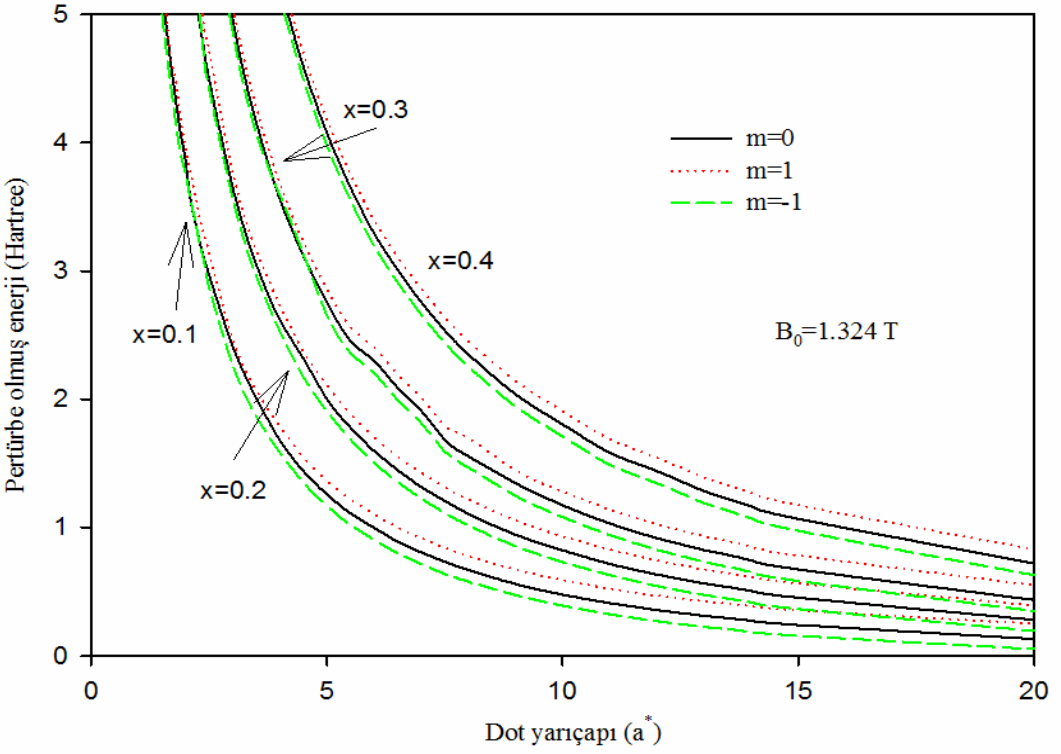
Şekil 6.21. 1p seviyesinin pertürbe olmamış enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyel kuyu yüksekliğinde dot yarıçapına göre değişimi.



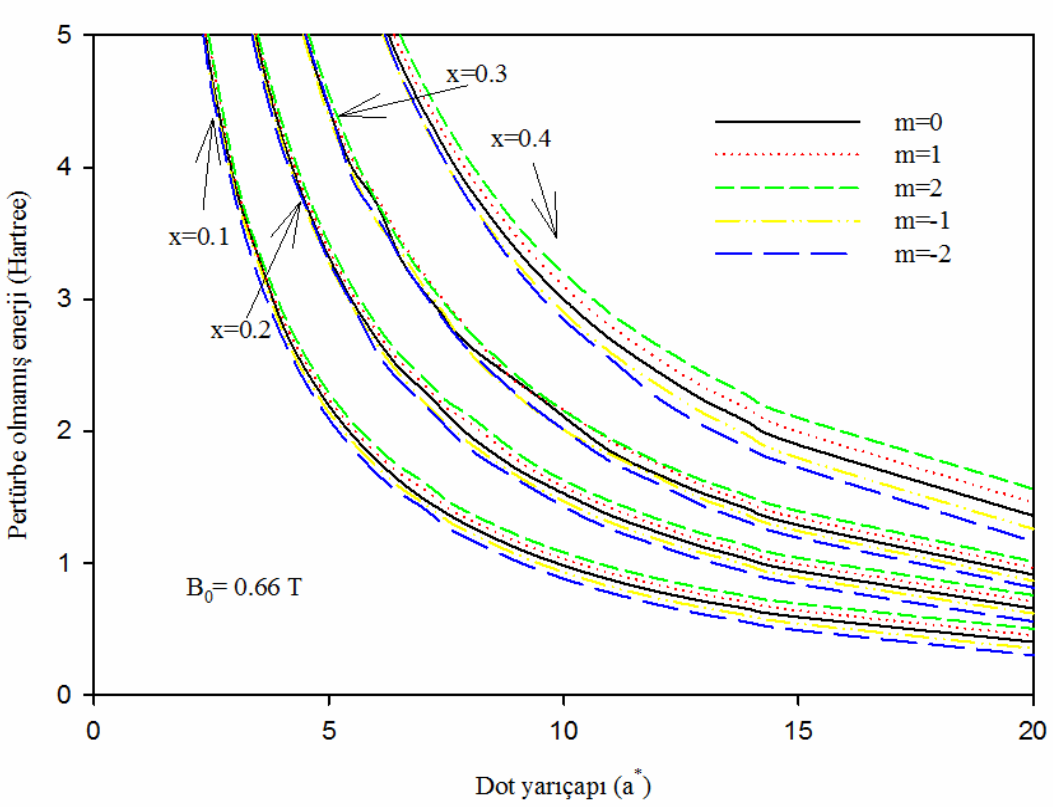
Şekil 6.22. 1p seviyesinin pertürbe enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyel kuyu yüksekliğinde dot yarıçapına göre değişimi.



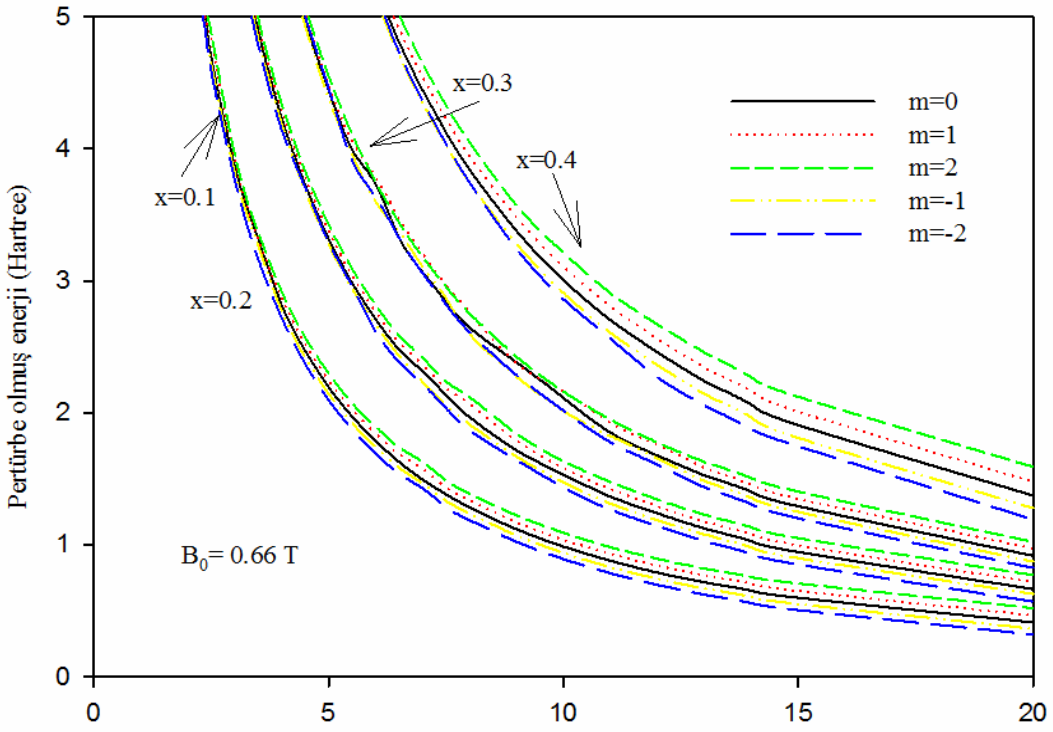
Şekil 6.23. 1p seviyesinin pertürbe olmamış enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyel kuyu yüksekliğinde dot yarıçapına göre değişimi.



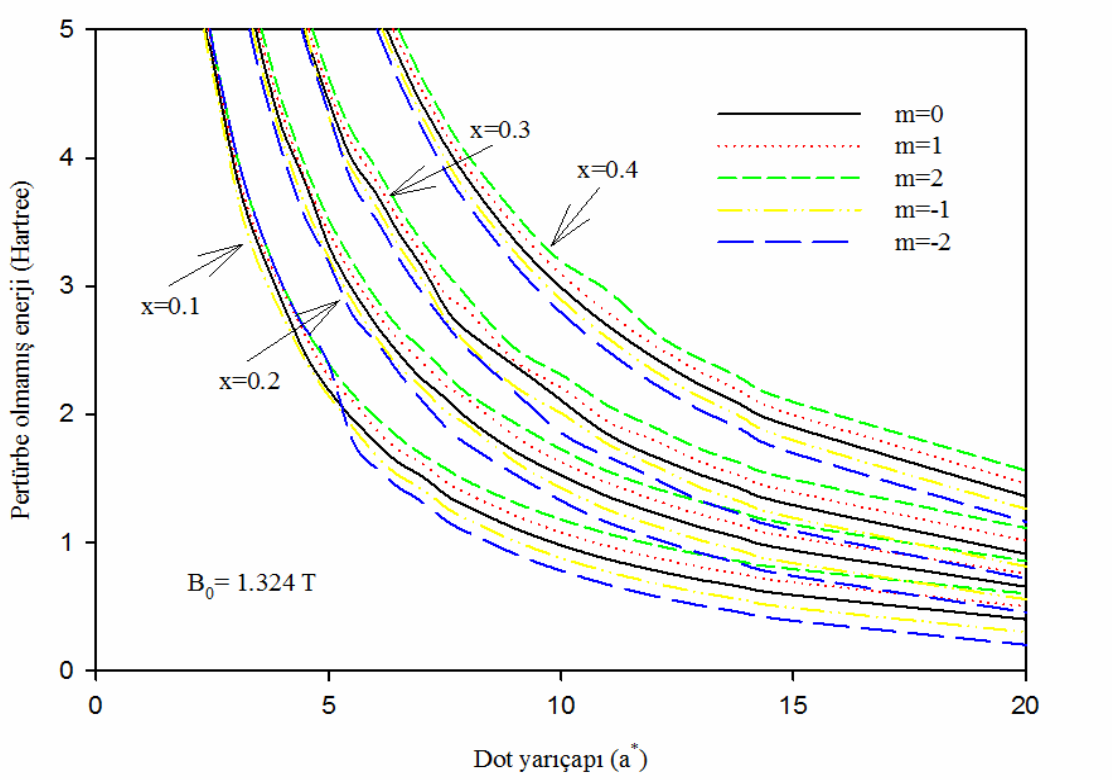
Şekil 6.24. 1p seviyesinin pertürbe enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyel kuyu yüksekliğinde dot yarıçapına göre değişimi.



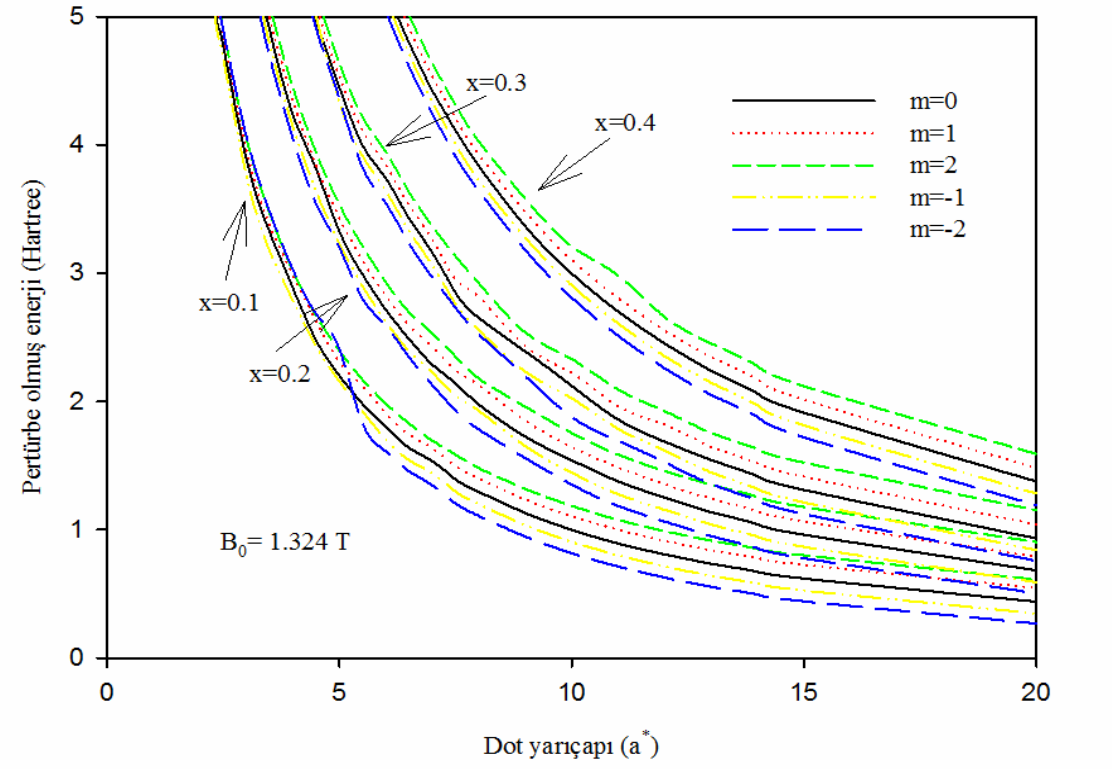
Şekil 6.25. 1d seviyesinin pertürbe olmamış enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyel kuyu yüksekliğinde dot yarıçapına göre değişimi.



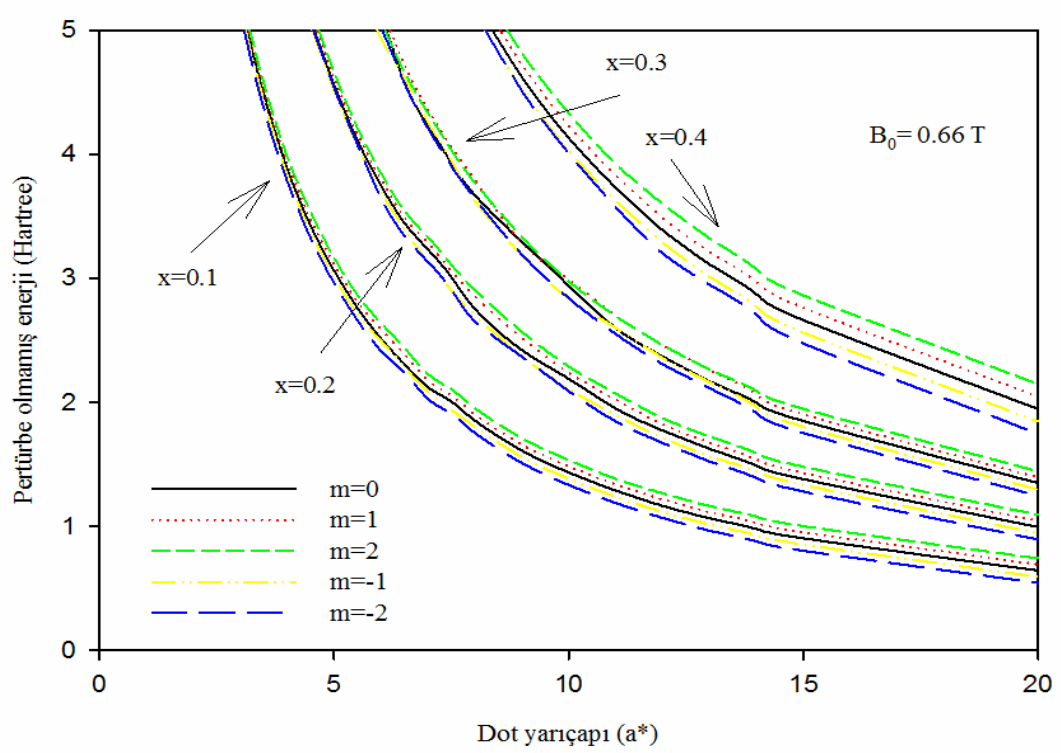
Şekil 6.26. 1d seviyesinin pertürbe enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyel kuyu yüksekliğinde dot yarıçapına göre değişimi.



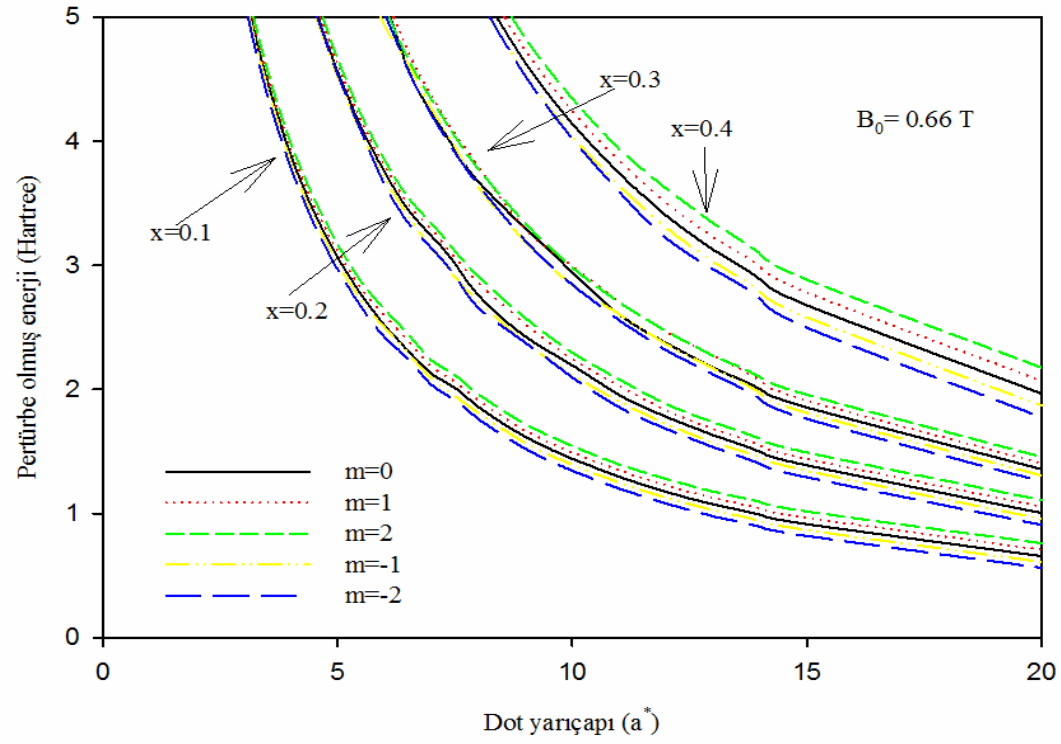
Şekil 6.27. 1d seviyesinin pertürbe olmamış enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyel kuyu yüksekliğinde dot yarıçapına göre değişimi.



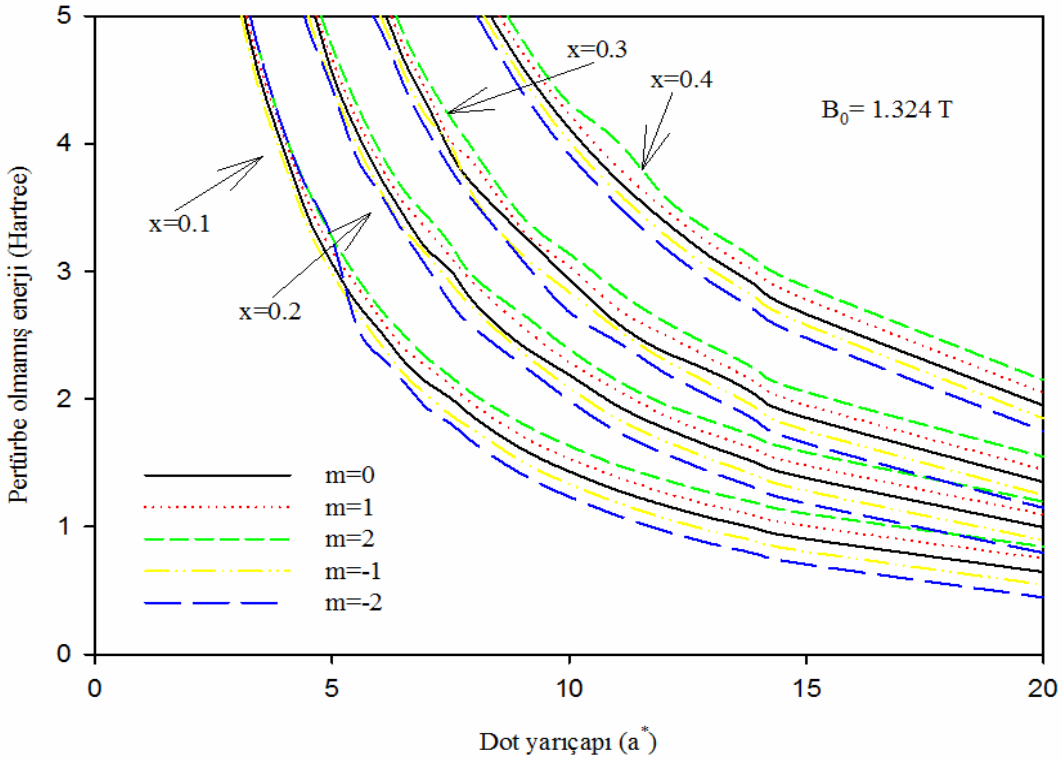
Şekil 6.28. 1d seviyesinin pertürbe enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyel kuyu yüksekliğinde dot yarıçapına göre değişimi.



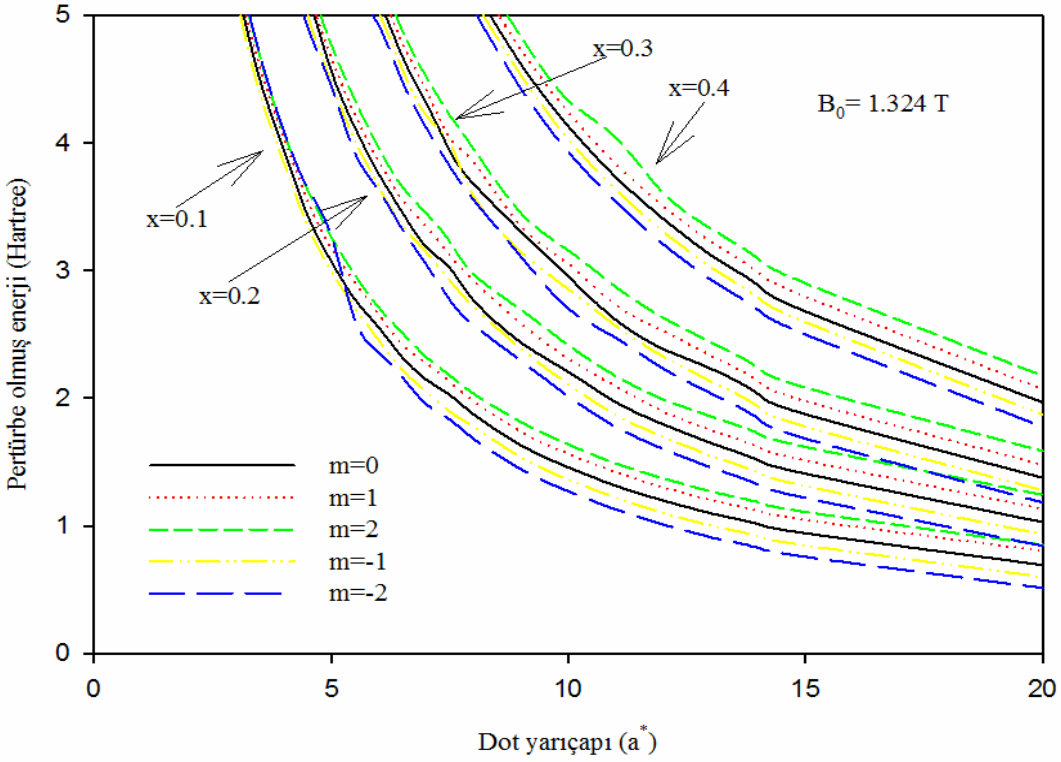
Şekil 6.29. 1f seviyesinin pertürbe olmamış enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyel kuyu yüksekliğinde dot yarıçapına göre değişimi.



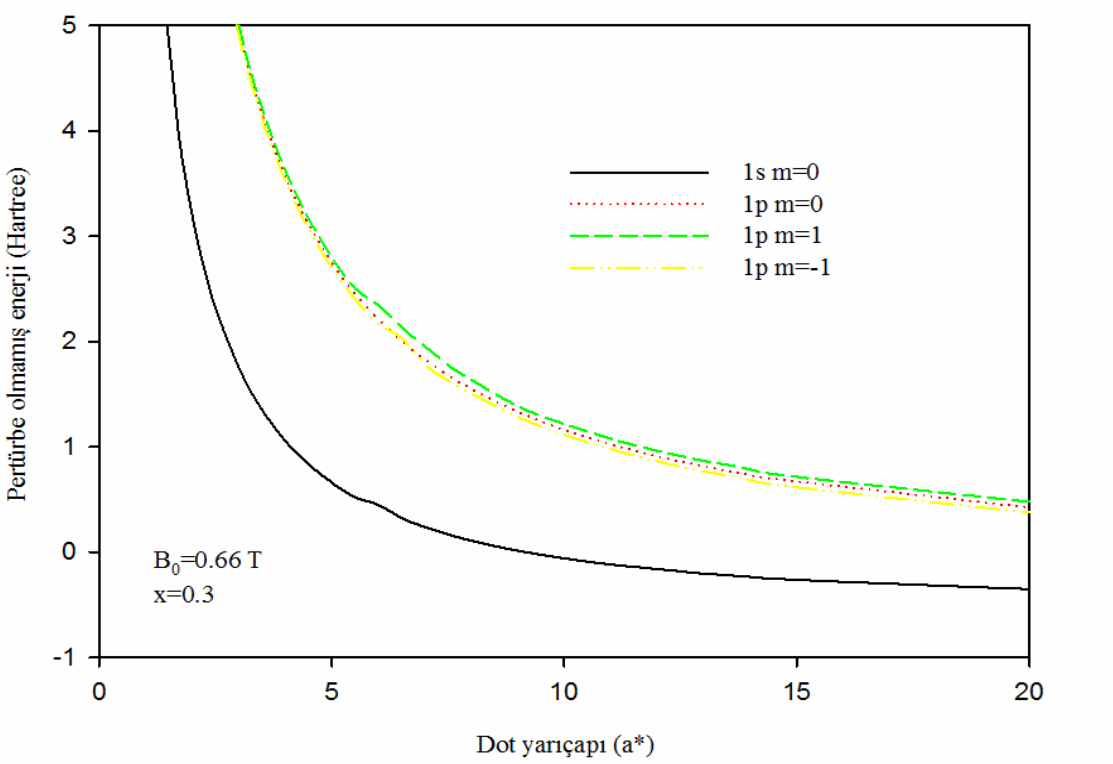
Şekil 6.30. 1f seviyesinin pertürbe enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyel kuyu yüksekliğinde dot yarıçapına göre değişimi.



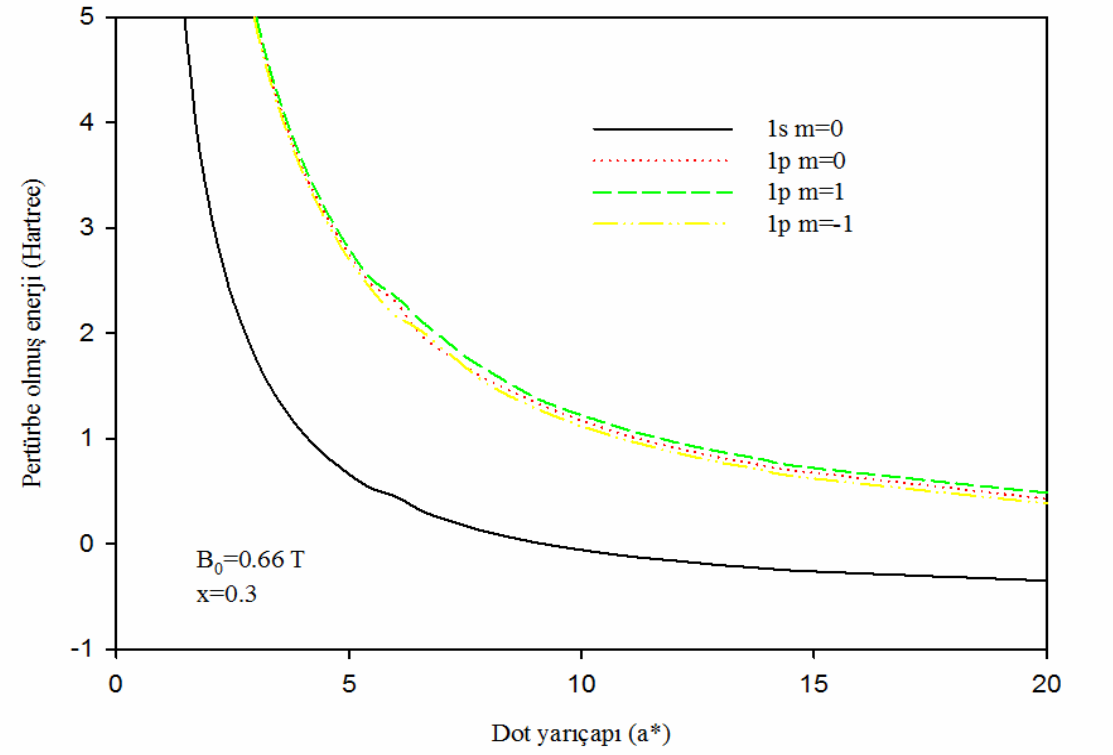
Şekil 6.31. 1f seviyesinin pertürbe olmamış enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyel kuyu yüksekliğinde dot yarıçapına göre değişimi.



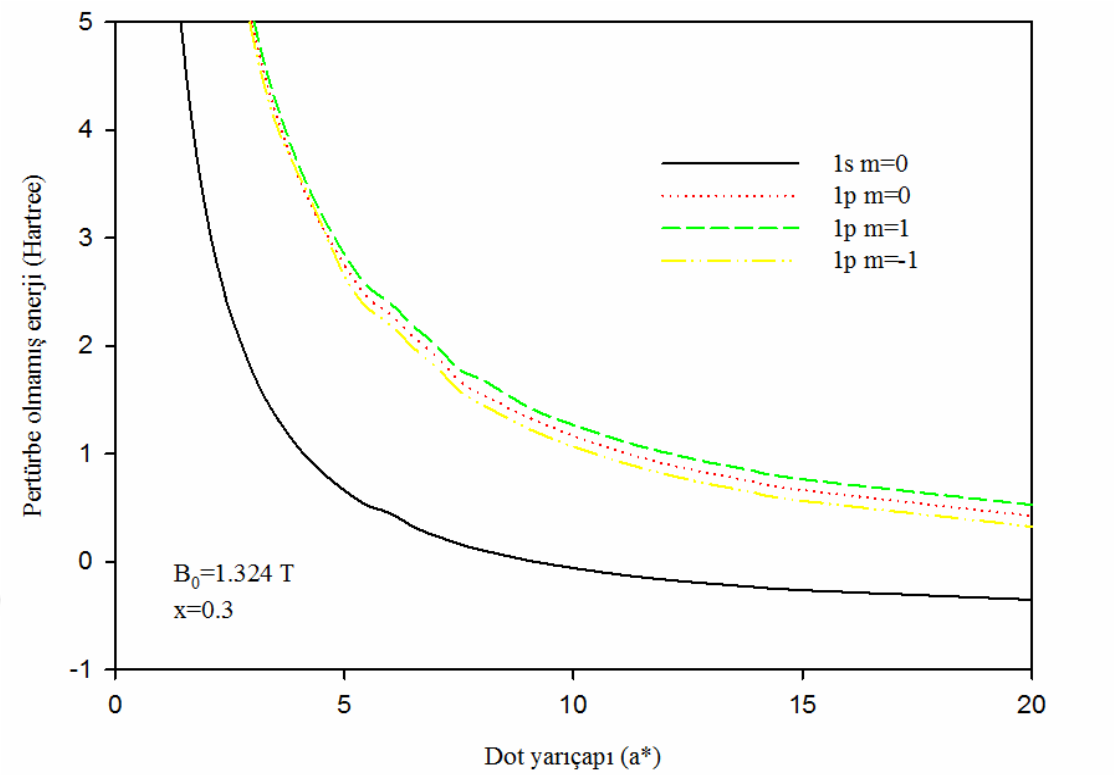
Şekil 6.32. 1f seviyesinin pertürbe enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyel kuyu yüksekliğinde dot yarıçapına göre değişimi.



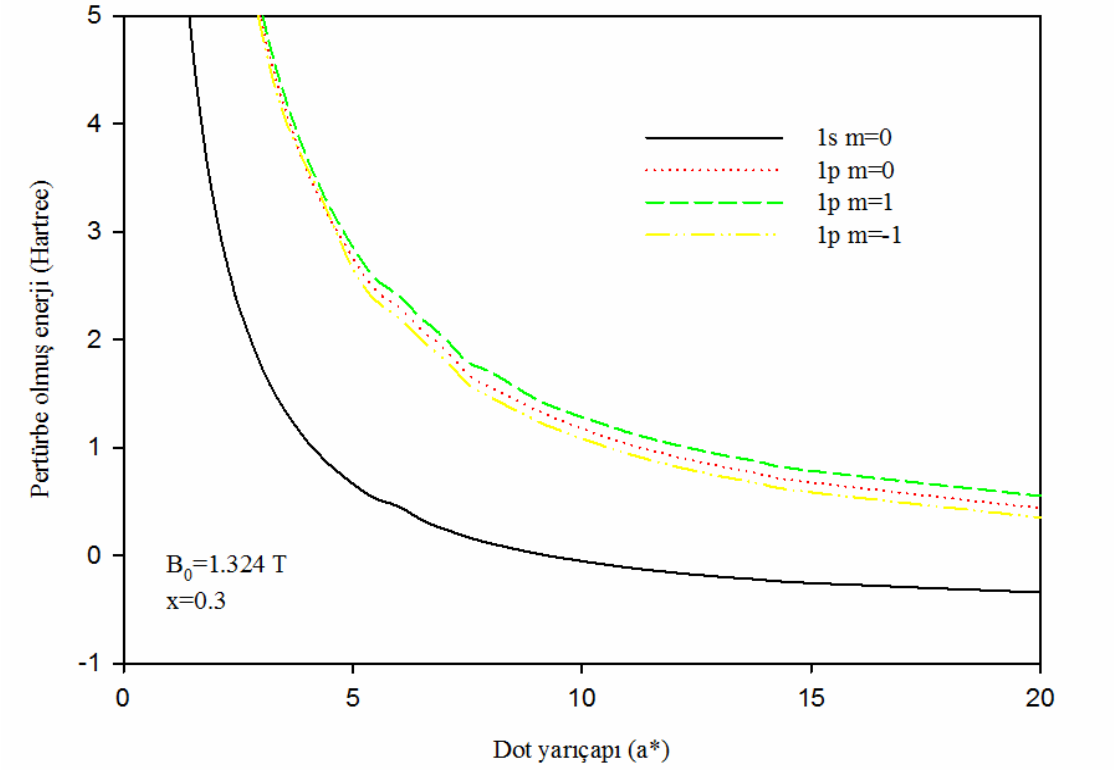
Şekil 6.33. 1s-1p seviyelerinin pertürbe olmamış enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyellerinin dot yarıçapına göre değişimi. (s-p gösterimi.)



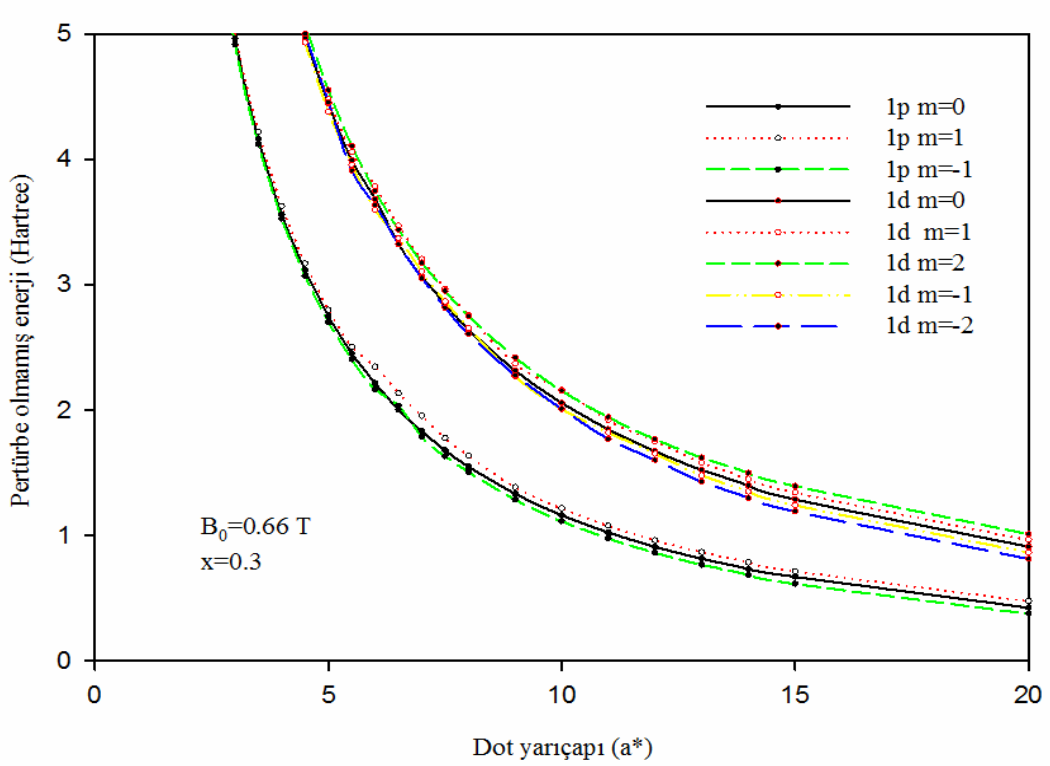
Şekil 6.34. 1s-1p seviyelerinin pertürbe enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyellerinin dot yarıçapına göre değişimi. (s-p gösterimi.)



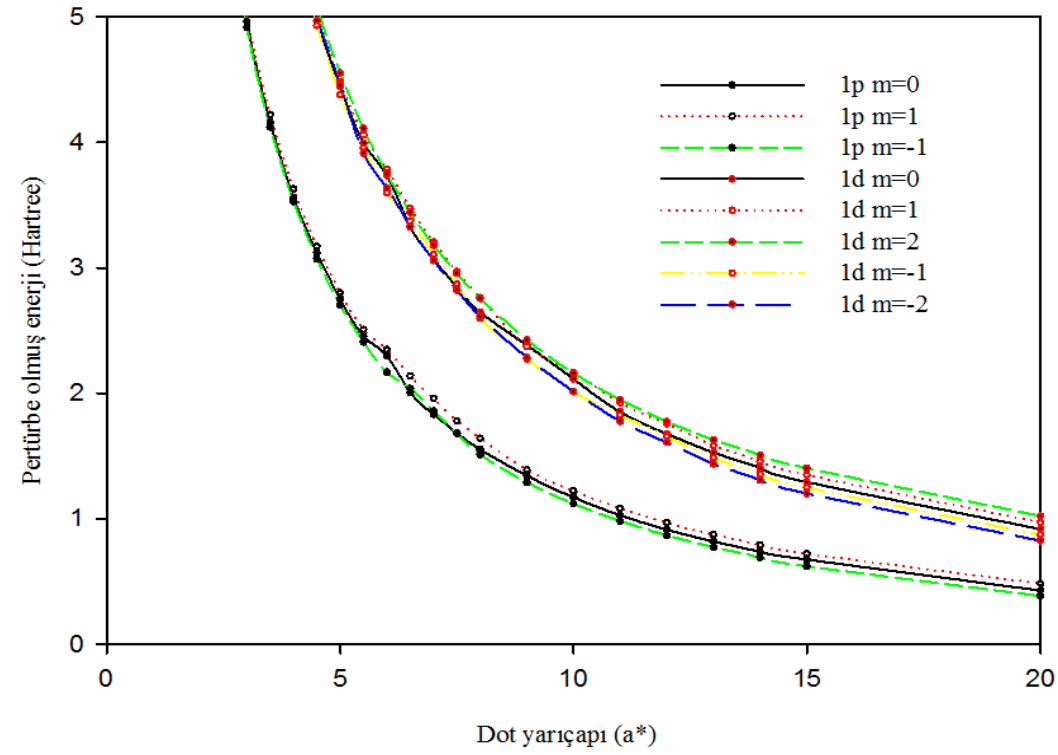
Şekil 6.35. 1s-1p seviyelerinin pertürbe olmamış enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyellerinin dot yarıçapına göre değişimi. (s-p gösterimi.)



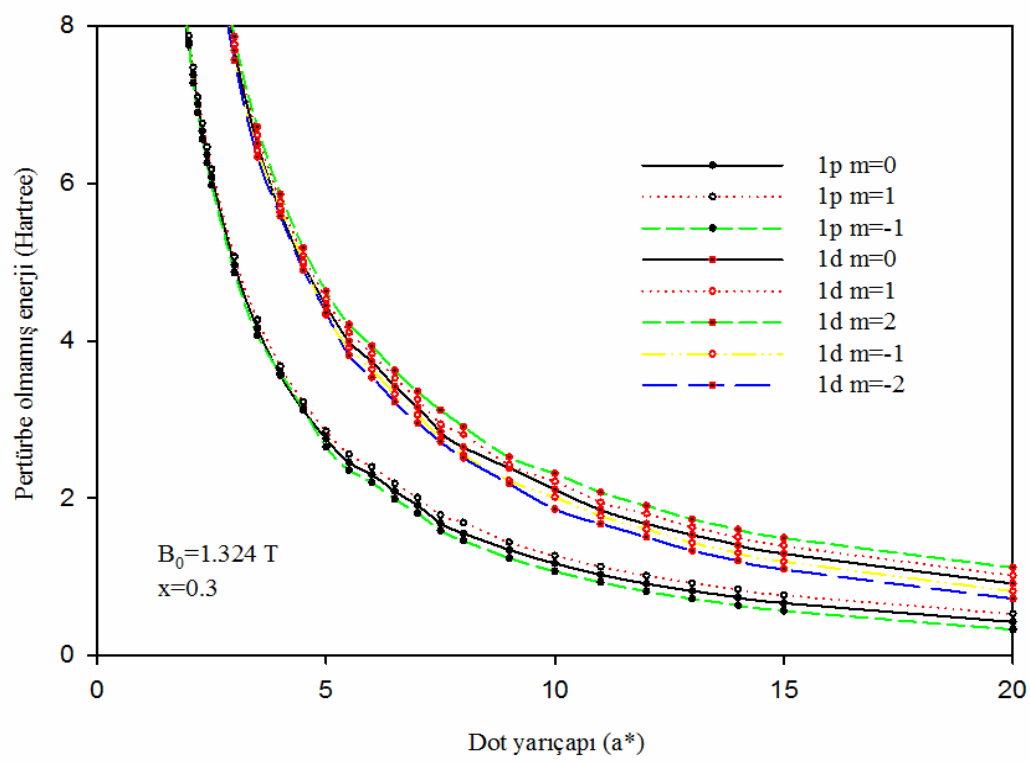
Şekil 6.36. 1s-1p seviyelerinin pertürbe enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyellerinin dot yarıçapına göre değişimi. (s-p gösterimi.)



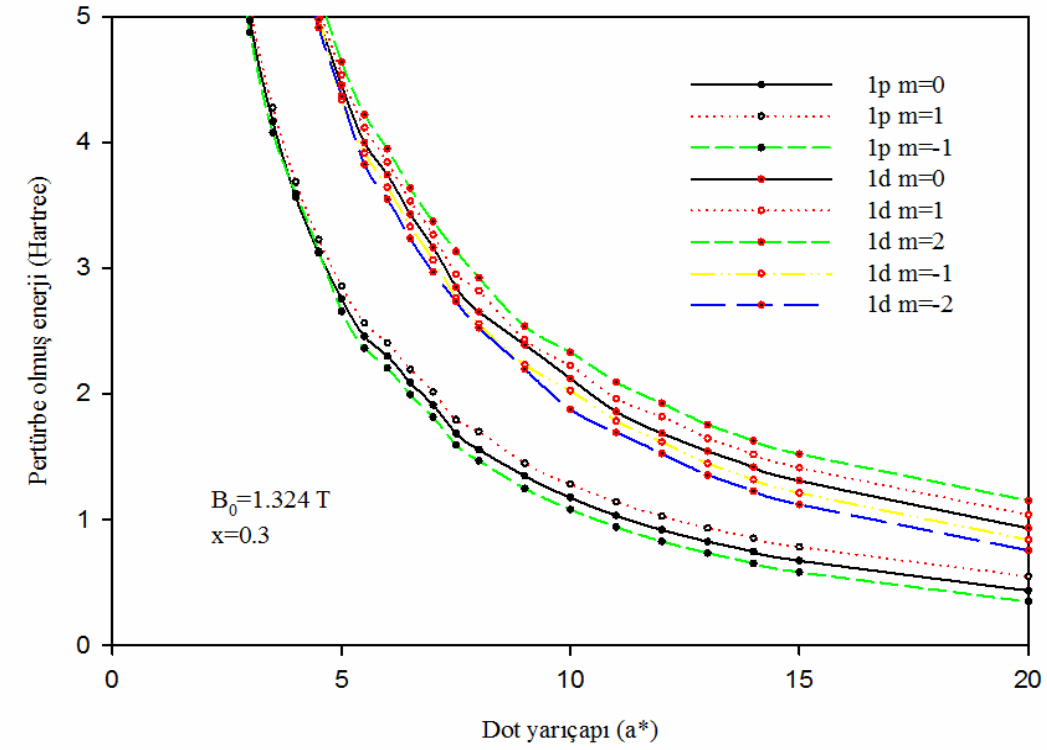
Şekil 6.37. 1p-1d seviyelerinin pertürbe olmamış enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyellerinin dot yarıçapına göre değişimi. (p-d gösterimi.)



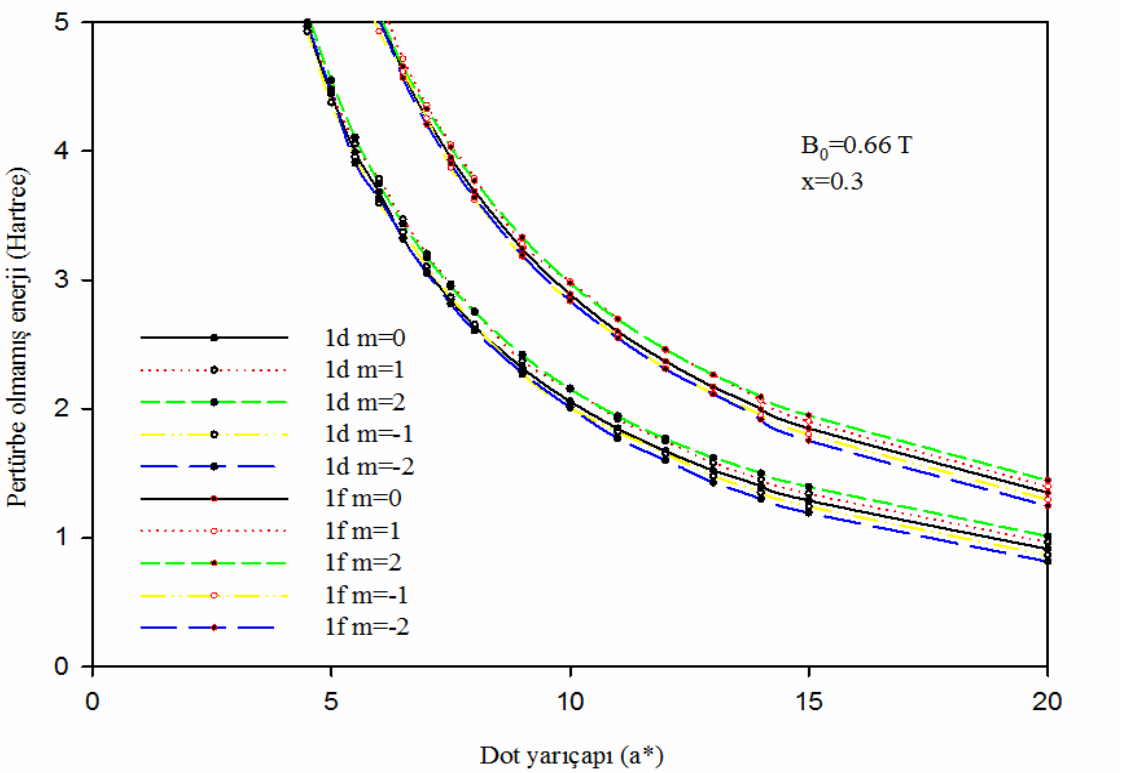
Şekil 6.38. 1p-1d seviyelerinin pertürbe enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyellerinin dot yarıçapına göre değişimi. (p-d gösterimi.)



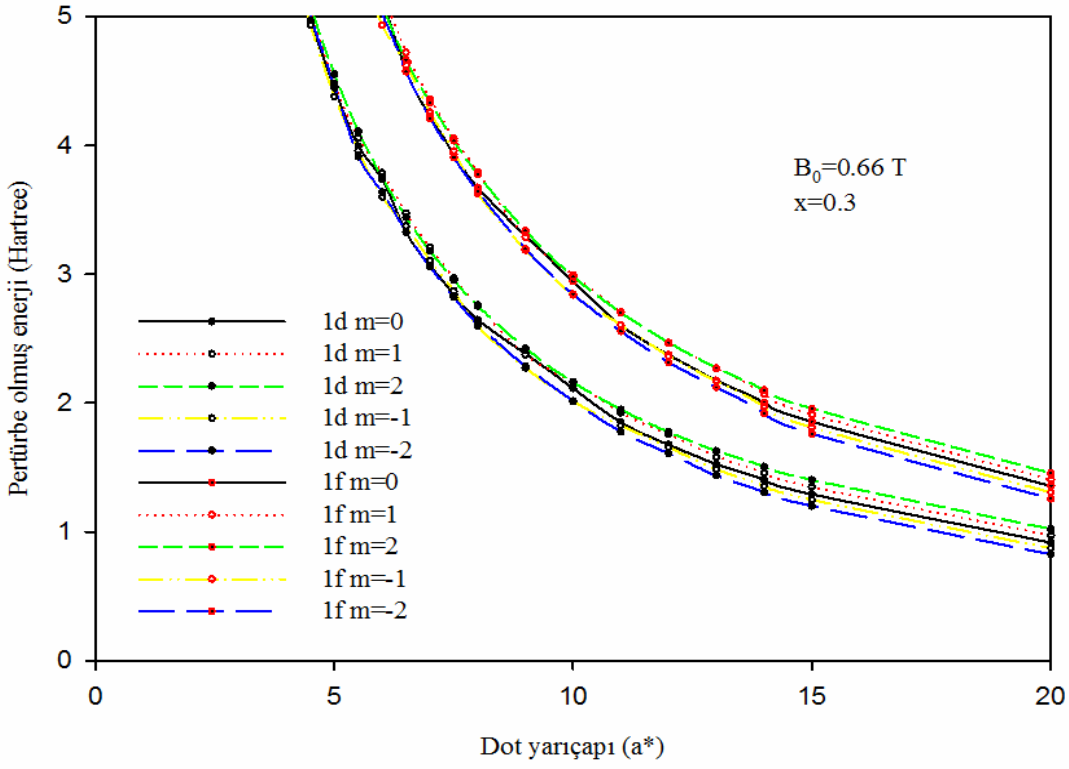
Şekil 6.39. 1p-1d seviyelerinin pertürbe olmamış enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyellerinin dot yarıçapına göre değişimi. (p-d gösterimi.)



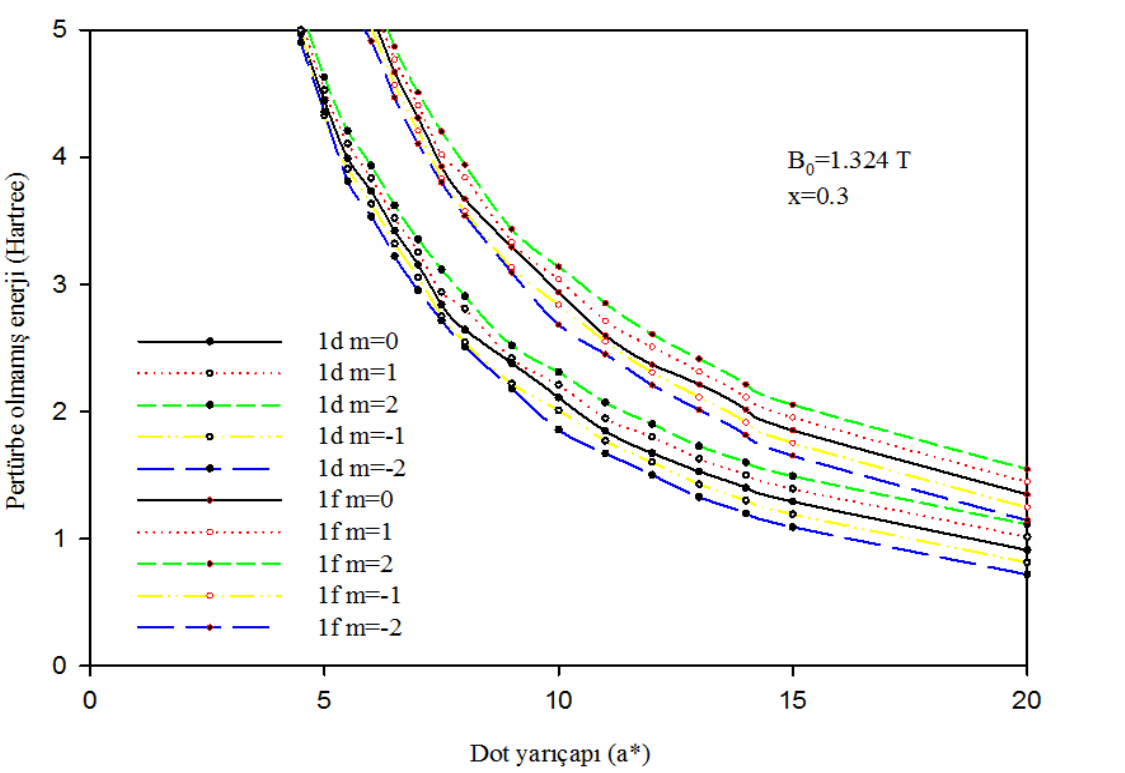
Şekil 6.40. 1p-1d seviyelerinin pertürbe enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyellerinin dot yarıçapına göre değişimi. (p-d gösterimi.)



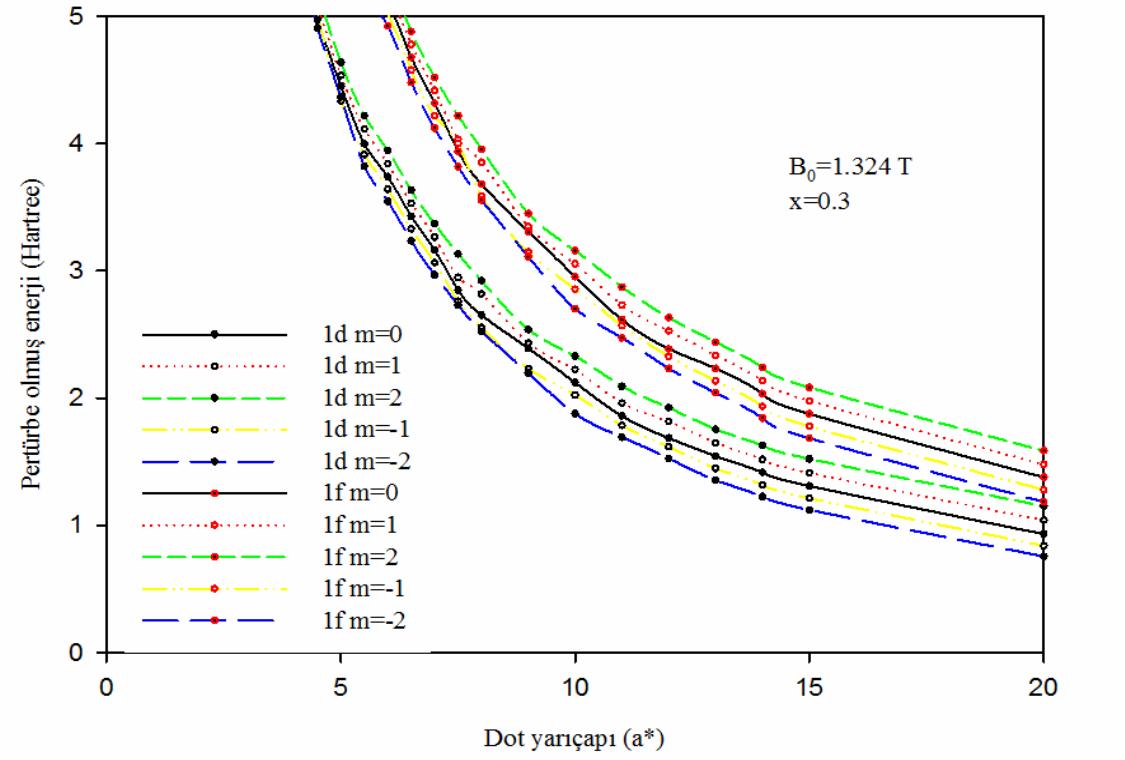
Şekil 6.41. 1d-1f seviyesinin pertürbe olmamış enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyellerinin dot yarıçapına göre değişimi. (d-f gösterimi.)



Şekil 6.42. 1d-1f seviyesinin pertürbe enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyellerinin dot yarıçapına göre değişimi. (d-f gösterimi.)



Şekil 6.43. 1d-1f seviyelerinin pertürbe olmamış enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyellerinin dot yarıçapına göre değişimi. (d-f gösterimi.)



Şekil 6.44. 1d-1f seviyelerinin pertürbe olmamış enerjisinin farklı sınırlandırıcı potansiyellerinin dot yarıçapına göre değişimi. (d-f gösterimi.)

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Adı Soyadı	**:**	Mustafa Doğan SARIKAYA
Uyruğu	**:**	T.C.
Doğum Yeri ve Tarihi	**:**	BEYŞEHİR/ 23.03.1990
Telefon	**:**	-
Faks	**:**	-
e-mail	**:**	must1890@hotmail.com

EĞİTİM

Derece		**Adı, İlçe, İl**	**Bitirme Yılı**
Lise	:	Cumhuriyet,Selçuklu/KONYA	2007
Üniversite	:	Selçuk/Selçuklu/KONYA	2013
Yüksek Lisans	:	Selçuk/Selçuklu/KONYA	2017

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	**Kurum**	**Görevi**
2014	Sistem Dershanesi	Asistan
2015	Özel Enderun Fen ve Anadolu Lisesi	Öğretmen
2016	Özel Bilgi Dünyası Etüt Merkezi	Öğretmen

UZMANLIK ALANI

Kuantum Nokta Yapıların Optiksel Özellikleri
Kuantum Nokta Yapıların Teknolojik Uygulamaları

YAYINLAR

Sarıkaya M.D., Çakır B., Özmen A., Yakar Y., 2017, Tek Elektronlu Kuantum Nokta Yapılarda Manyetik Alan Etkisinin Pertürbasyon Yöntemiyle İncelenmesi, *Fen Fakültesi Dergisi, DergiPark,*43(1): 75-90.

KAYNAKLAR

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

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

Bastard, G., 1984, Self-Consistent variational calculations and alloy scattering in semiconductor heterojunctions, *Surface Science*, 142: 284-289.

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

Bednarek, S., Szafran, B. ve Adamowski, J., 2001, Theorical Description of electronic properties of vertical gated quantum dots, *Physical Review B*, 64: 195303 (1-13).

Bimberg, D., Grundmann, M. ve Ledentsov, N. N., 1999, Quantum dot heterostructures, *John Wiley & Sons Ltd*.

Bose, C. ve Sarkar, C. K., 1998, Effect of a parabolic potetial on the impurity binding energy in spherical quantum dots, *Pyhsica B*, 253: 238-241.

Brattain., B. v. ve Shockleey., 1948, The transistor, a semi-conductor triode, *Physical Review A*, 230-231 (74).

Brownstein, K. R., 1993, Variational principle for confined quantum systems, *Physical Rewiev Letters*, 71: 1427-1230.

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

César O., Stoico., C., Danilo, M. C. ve G., R., 2011, Genetic algorithm for the pair distribution function of the electron gas, *Interdisciplinary Sciences: Computational Life Sciences*, 283.

Charty, M. ve Abbott, P. C., 2001, Electronic structure calculation for N-electron quantum dots, *Computer Physics Communications*, 141: 175-204.

Chen, C. Y., Jin, P. W., Li, W. S. ve Lin, D. L., 1997, Thickness effect on impurity-bound polaronic energy levels in a parabolic quantum dot in magnetic field, *Physical Review B*, 56: 14913-14916.

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

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

Cibert, J., Petroff, P. M., Dolan, G. J., Pearton, S. J., Gossard, A. C. ve English, J. H., 1986, Optically detected carrier confinement to one and zero dimension in GaAs quantum well wires and boxes, *Journal Applied Physics Letters*, 49: 1275-1277.

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

Cremers, J.-H., Brouwer, P. W. ve Fal'ko, V. I., 2003, Weak localization and conductance fluctuations in a quantum dot with parallel magnetic field and spin-orbit scattering, *Physical Review B*, 68 (12).

Çakır, B., Özmen, A., Şahin, M., Yakar, Y., Atav, Ü. ve Yüksel, H., 2006, Determination of wave functions of a quantum dot using the genetic algorithm, Proceedings of the international conference on modeling and simulation, *Konya,Turkey, paper No:B032*.

Çakır, B., 2007, Çok Elektonlu Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi, *Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*.

Çakır, B., Özmen A., Atav Ü., Yüksel , H. ve Y., Y., 2007, Investıgatıon Of Electronıc Structure Of A Quantum Dot Usıng Slater-Type Orbıtals And Quantum Genetıc Algorıthm *International Journal Of Modern Physics, C*, 18: 61-72.

Çakır, B., Yakar, Y. ve Özmen, A., 2012, Refractive index changes and absorption coefficients in a spherical quantum dot with parabolic potential, *Journal of Luminescence*, 132: 26-59.

Çakır, B., Yakar, Y. ve Özmen, A., 2013, Calculation of oscillator strength and the effect sofelectric field on energy states, static and dynamic polarizabilities of the confined hydrogen atom, *Optics Communications*, 311, 222–228.

Çakır, B., Yakar, Y. ve Özmen, A., 2015, Linear and nonlinear optical absorption coefficients of two-electron spherical quantum dot with parabolic potential, *Physica, B*, 458: 138–143.

Dempsey, J., Johnson, N. F., Brey, L. ve Halperin, B. I., 1990, Collective modes in quantum-dot arrays in magnetic fields, *Physical Review B*, 42 (18), 11708-11713.

Dineykhan, M. ve Nazmitdinov, R. G., 1997, Two-electron quantum dot in a magnetic field: Analytical results, *Phyical Review B*, 55: 13707-13714.

Ekimov, A. I., Efros, A. L. ve Onushchenko, A. A., 1985, Quantum size effect in semiconductor microcrystals, *Solid State Communications*, 921-924.

Eto, M., 1997, Electronic structures of few electrons in a quantum dot under magnetic field, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 36: 3924-3927.

Fal'ko, V. I. ve Efetov, K. B., 1994, Statistics of fluctuations of wave functions of chaotic electrons in a quantum dot in an arbitrary magnetic field, *Physical Review B*, 50 (15), 11267-11270.

Ferconi, M. ve Vignale, G., 1994, Current-density-functional theory of quantum dots in a magnetic field, *Physical Review B*, 50 (19), 14722-14725.

Ferry, D. K. ve Goodnick, S. M., 1997, Transport in Nanostructures, *Cambridge University Press*.

Fujito, M., Natori , A. ve Yasunaga, H., 1996, , Many-electron ground states in anisotropic parabolic quantum dots, *Physical Rewiev B*, 53: 9952-9958.

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

Grigorenko, I. ve E., G. M., 2001, Ground-state wavefunctions of two-particle systems determined using quantum genetic algorithms, *Physica A*, 291: 439-448.

Grigorenko, I. ve E., G. M., 2002, Calculation of the parttition function using quantum genetic algorithms, *Physica A*, 313: 463-470.

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

Halonen, V., Chakraborty, T. ve Pietiläinen, P., 1992, Excitons in a parabolic quantum dot in magnetic fields, *Physical Review B*, 45 (11), 5980-5985.

Helbig, N., Kurth, S., Pittalis, S., Räsänen, E. ve Gross, E. K. U., 2008, Exchange-correlation orbital functionals in current-density functional theory: Application to a quantum dot in magnetic fields, *Physical Review B*, 77 (24).

Holland, J. H., 1975, Adaptation in Natural and Artificial Systems, *University of Michigan Ann Arbor*.

Homaifar, A., Lai, H. Y. ve Mc. Cormick, E., 1994, System optimization of turbofan engines using genetic algorithms, *Applied Mathematical Modelling*, 18: 72-83.

Jacak, L., Hawrylak, P. ve Wojs, A., 1998, Quantum dots, *Springer Verlag*.

Kandemir, B. S. ve Altanhan, T., 1999, Polaron effects on an anisotropic quantum dot in a magnetic field, *Physical Review B*, 60: 4834-4849.

Kouwenhoven, L. ve Marcus, C., 1998, Quantum dots, *Physics World*, 11:35-39.

Kulkarni, A. J., Krishnamurthy, K., Deshmukh, S. P. ve S., M. R., 2004, Microstructural optimization of alloys using a genetic algorithm, , *Materials Science and Engineering A,*, 372: 213-220.

Kumar, J. ve Kapoor, S., 2010, Effect of magnetic field on optical anisotropy of CdZnSe quantum dots, *Journal of Physics: Conference Series*, 245, 012036.

Lee, C. M., 2000, Polaron effect on the low-lying states of a three-electron quantum dot in a magnetic field, *Physical Review B*, 62: 4661-4665.

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

Madhav, A. V. ve Chakraborty, T., 1994, Electronic properties of anisotropic quantum dots in a magnetic field, *Physical Review B*, 49 (12), 8163-8168.

Maksym, P. A. ve Chakraborty, T., 1990, Quantum dots in a magnetic field: Role of electron-electron interactions, *Phys Rev Lett*, 65 (1), 108-111.

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

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

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

Nomura, S., Segawa, Y. ve Kobayashi, T., 1994, Confined excitons in a semiconductor quantum dot in a magnetic field, *Physical Review B*, 49 (19), 13571-13582.

Oaknin, J. H., Palacios, J. J., Brey, L. ve Tejedor, C., 1994, Self-consistent Hartree description ofNelectrons in a quantum dot with a magnetic field, *Physical Review B*, 49 (8), 5718-5721.

Özmen, A., Yakar Y., Çakır, B. ve Atav, Ü., 2009, Computation of the oscillator strength and absorption coefficients for the intersubband transitions of the spherical quantum dot, *Optics Communications*, 282, 3999–4004.

Pfannkuche, D., Gudmundsson, V. ve Maksym, P. A., 1993, Comparison of a Hartree, a Hartree-Fock, and an exact treatment of quantum-dot helium, *Physical Review B*, 47 (4), 2244-2250.

Puente, A., Pons, M. ve Nazmitdinov, R. G., 2010, Interaction effects in quantum dots in a vertical magnetic field, *Journal of Physics: Conference Series*, 248, 012017.

Ramos, A. Y. ve Osenda, O., 2014, Resonance states in a cylindrical quantum dot with an external magnetic field, *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 47 (1), 015502.

Räsänen, E., Harju, A., Puska, M. J. ve Nieminen, R. M., 2004, Rectangular quantum dots in high magnetic fields, *Physical Review B*, 69 (16).

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

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

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

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

Schrieffer, J. R., 1957, In Semiconductor Surface Physics, *University of Pennsylvania Press, Philadelphia*, 55.

Sheng, W., 2001, Properties of magnetotransport in three-dimensional quantum dot structures, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 13:1247-1257.

Shunji A., Masami C., Tachishige H., Shojiro N., Yuki N., Toshiyuki S. ve Y., T., 1994, Precise measurements of e+e− annihilation at rest into four photons and the search for exotic particles, *Phys. Rev. A*, 3201.

Sim, J. S., Kong, J., Lee, J. D., ve Park, B. G., 2004, Monte Carlo simulation of single-electron nanocrystal memories, *Japanese Journal of Applied Physics*, 43: 2041-2045.

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

Slater, J. C., 1951, A simplification of the Hartree-Fock method, *Phyical Review B*, 81: 385-390.

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

Smith, T. P., 3rd, 1873, Effect of light on selenium during the passage of an electric current, *Nature 7(173)*): 303.

Stavrou, V. N., 2007, Suppression of electron relaxation and dephasing rates in quantum dots caused by external magnetic fields, *J Phys Condens Matter*, 19 (18), 186224.

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

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

Şahin, M., Atav, Ü. ve M., T., 2005, Quantum genetic algorithm method in self-consistent electronic structure calculations of a quantum dot with many electrons, *International Journal of Modern Physics C*, 16:1379-1393

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

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

Şahin, Ö., Sayan, P. ve Bulutcu, A. N., 2000, Application of genetic algorithm for determination of mass transfer coefficients, *Journal of Crystal Growth*, 216: 475-482.

Tavernier, M. B., Anisimovas, E., Peeters, F. M., Szafran, B., Adamowski, J. ve Bednarek, S., 2003, Four-electron quantum dot in a magnetic field, *Physical Review B*, 68 (20).

Temkin, H., Dolan, G. J., Panish, M. B. ve Chu, S. N. G., 1987, Low-temperature photoluminescence from InGaAs/InP quantum wires and boxes, *Applied Physics Letters*, 50: 413-415.

Tölö, E. ve Harju, A., 2009, Effects of thickness in quantum dots in strong magnetic fields, *Physical Review B*, 79 (7).

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

Venugopal, V. ve Narendran, T. T., 1992, A genetic algorithm approach to the machine-component grouping problem with multiple objectives, *Computers & Industrial Engineering*, 22: 469-480.

Wojs, A. ve Hawrylak, P., 1996, Charging and infrared spectroscopy of self-assembled quantum dots in a magnetic field, *Physical Review B*, 53: 10841-10845.

Xie, W. F., 2001, Off-center D- centers in a quantum dot in the presence of a perpendicular magnetic fields, *Commun. Theor. Phys.*, 35: 497-500.

Xie, W. F., 2009, Linear and nonlinear optical absorptions of a hydrogenic donor in a quantum dot under a magnetic field, *Commun. Theor. Phys.*, 51:923-926.

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

Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2010b, Linear and Nonlinear Optical Properties in Spherical Quantum Dots, *Commun. Theor. Phys.*, 53: 1185–1189.

Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2011, Computation of Ionization and Various Excited State Energies of Helium and Helium-Like Quantum Dots, *International Journal of Quantum Chemistry*, 111: 4139-4149.

Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2015a, Electronic structure of two-electron quantum dot with parabolic potential, *Philosophical Magazine*, 95: 311–325.

Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2015b, Linear and nonlinear absorption coefficients of spherical two-electron quantum dot, *Computer Physics Communications* 188: 88–93.

Yusa, G. ve Sakaki, H., 1999, InAs quantum dot field effect transistors, *Superlattices and Microstructures*, 25: 247-250.

Zhang, C., Wang, Z., Gu, M., Liu, Y. ve Guo, K., 2010, *Phyical Review B*, 405, 4366.

Zhang, P., Xue, Q. K. ve Xie, X. C., 2003, Spin current through a quantum dot in the presence of an oscillating magnetic field, *Phys Rev Lett*, 91 (19), 196602.