

KUANTUM NOKTA YAPILARDA ELEKTRİK ALAN ETKİSİNİN PERTÜRBASYON YÖNTEMİYLE İNCELENMESİ

Emine Şeyma DOĞAN¹, Bekir ÇAKIR², Ayhan ÖZMEN², Yusuf YAKAR³

¹ Selçuk Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya-TÜRKİYE

² Selçuk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Konya-TÜRKİYE

³ Aksaray Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Aksaray-TÜRKİYE

e-mail: e-seymaalkan@gmail.com
bcakir@selcuk.edu.tr

(Geliş: 15 Aralık 2015; Düzeltme: 21 Aralık 2015; Kabul: 21 Aralık 2015)

Özet: Bu çalışmada Pertürbasyon metodu ile kuantum nokta yapılarının elektronik yapısına dış elektrik alan etkisi incelendi. Merkezinde hidrojen tipi bir safsızlık bulunan sonlu küresel simetrik sonlu potansiyelle sınırlandırılmış bir-elektronlu kuantum nokta yapısının taban ve bazı uyarılmış seviyelerin pertürbe olmamış enerji öz değerlerini ve dalga fonksiyonlarını KGA metodu ile Hartree-Fock-Roothaan (HFR) metodu birleştirilerek belirlendi. Dalga fonksiyonları, STO ların lineer bileşiminden oluşan tek-elektron spin orbitalleri alındı. Pertürbe olmamış enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları kullanılarak, nokta yapısının elektronik yapısı üzerine dış elektrik alanının etkisi farklı nokta yarıçapı ve sınırlandırıcı potansiyel değerleri için pertürbasyon teorisi ile hesaplandı.

Anahtar Kelimeler: Elektrik Alan, Kuantum Genetik Algoritma, Kuantum Nokta Yapı, Pertürbasyon Teorisi.

INVESTIGATED OF THE ELECTRIC FIELD EFFECT ON QUANTUM DOTS WITH PERTURBATION METHOD

Abstract: In this thesis, electronic properties of Quantum dots was examined according to the position of impurity using perturbation method. Spherical quantum dot with one electron on-center hydrogenic impurity confined finite spherical potential the non-perturbed energy eigenvalues and the wave functions ground and some excited states were determined by a method consisting of a combination of the KGA method with Hartree-Fock-Roothaan (HFR) method. Wave functions were created a single electron spin orbitals that consist of the linear combination of Slater type orbitals (STOs). The effect of the external electric field applied on the electronic structure for different dot radius and confining potential were calculated by perturbation theory using the energy eigenvalues and wave functions unperturbed

Keywords: Electric Field, Quantum Genetic Algorithm, Quantum Dot, Perturbation Theory

Giriş

Günümüzde devrim niteliğinde maddeyi atomik boyutlarda inceleyip işleme fikri ve uygulamaları bilim ve teknolojiye yeni bir boyut kazandırmıştır. 1873 yılında selenyumun fotoiletkenliğinin 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 (Bardenn ve Brattain 1948, Shockleey 1949). Yarı iletken aygıtlar üzerinde kuantum sınırlandırmasının etkileri ile ilgili tartışmalar 1950 li yıllarda başlar (Schrieffer (1957). Hall ve arkadaşları (1962) tarafından yarı iletken lazerin icat edilmesi, birbirinden farklı en az iki yarı iletken kullanılarak oluşturulan heteroeklemlerin ortaya çıkışı (Anderson 1962), 1975 yılında Cho ve Arthur (1975) tarafından moleküler demet kaplama (Molecular Beam Epitaxy (MBE)) yönteminin bulunuşu çoklu eklem kuantum yapılarında önemli gelişmelere ışık tutmuştur.

1981 yılında Taramalı Tünelleme Mikroskobu ve 4 yıl sonra Atomik Kuvvet Mikroskobunun geliştirilmesiyle nano bilim hızla gelişmeye başladı. Bu mikroskoplarla nm boyutundaki madde, atom ve moleküller incelenmeye başlanmıştır.

Elektronların serbest hareketinin tüm boyutlarda sınırlandırılması, kuantum nokta yapıları olarak adlandırılan sıfır boyutlu nano yapıların ortaya çıkmasına yol açmıştır (Reed ve ark. 1986). Tüm boyutlarda güçlü bir sınırlandırma sonucu elde edilen Kuantum nokta yapıları kesikli enerji seviyelerine ve kabuk yapılarına sahip oldukları için yapay atom olarak da adlandırılırlar (Maksym ve Chakraborty 1990, Fujito ve ark. 1996).

Üretilme aşamasında bu yapıların şekilleri, boyutları, enerji seviyeleri ve sınırlandırdıkları elektron sayıları kontrol edilebilir olduğundan, teknolojik olarak daha ilgi çekicidir. Kuantum nokta yapıları kullanılarak kızıl ötesi foto dedektörler (QDIP), tek elektron transistorler, hafıza elemanları ve kuantum bilgisayarları gibi cihazlar geliştirilmeye başlanmıştır(Ryzhii 1996, Nomoto ve ark. 1998, Choi ve ark. 1998, Yusa ve Sakaki 1999, Gammon 2000, Sim ve ark. 2004).

Kuantum nokta yapılarının fiziksel özelliklerini inceleyen farklı teorik yöntemler kullanılmıştır. Bunlardan biriside nano yapıları sistemlerin elektronik yapılarının ve fiziksel özelliklerinin incelenmesinde en iyileme yöntemi olan KGA tekniğidir. GA, ortama iyi uyum sağlayan bireylerin hayatta kalması ve sağlayamayan bireylerin ise elenmesi olarak tanımlanabilir. GA tekniği ilk kez Holland (1975) tarafından kullanılmış olup, mühendislik ve malzeme biliminde yaygın olarak kullanılmaktadır(Venugopal ve Narendran 1992, Homaifar ve ark. 1994, Sahin ve ark. 2000, Kulkarni ve ark. 2004, Castro ve ark. 2004, Grigorenko ve

Garcia (2000, 2001, 2002), Nakanishi ve Sugawara 2000, Saha ve ark. 2001, Chaudhury ve Bhattacharyya 1998, Sahin ve Tomak 2002, Şafak ve ark. 2003, Şahin ve Tomak 2005, Çakır ve ark. 2006, Çakır ve ark. 2007).

Kuantum nokta yapılar üzerine dışardan bir elektrik manyetik alan uygulandığında optoelektronik özellikleri etkilenmektedir ve buda teknolojik uygulamalarda önemli bir yer tutmaktadır. Kuantum nokta yapıların elektronik yapısı üzerine elektrik alan etkisini inceleyen bir çok çalışma yapılmıştır Gerardo ve ark. (2004), Huangfu ve ark. (2008), Kirak ve ark. (2013).

Kuantum genetik algoritma yöntemiyle Hartree-Fock Roothaan yöntemini birleştirerek sonlu ve sonsuz potansiyelle sınırlandırılmış bir elektronlu küresel kuantum nokta yapının elektronik yapısını incelediler (Çakır ve ark., 2007-2008). Bazı yazarlar (Özmen ve ark 2009, Yakar ve ark. 2010, Yakar ve ark. 2010, Çakır ve ark. 2010) bir elektronlu küresel kuantum nokta yapıların lineer ve nonlinear optiksel özelliklerini, rölativistik düzeltme terimlerini (Yakar ve ark. 2013, Özmen ve ark 2013), off-center problemini (Yakar ve ark. 2013) araştırmışlardır. Çakır ve ark. (2013) sonsuz küresel bir kuyuda sınırlandırılmış hidrojen atomunun enerji seviyelerini, statik ve dinamik kutuplanabilirlikleri üzerine oscillator strength ve elektrik alan etkisini kuantum genetik algoritma yöntemiyle incelediler.

Bu çalışmada biz parabolik potansiyele sahip, merkezinde safsızlık bulunan sonlu küresel bir kuantum nokta yapı üzerine uygulanan bir dış elektrik alanının etkisini pertürbasyon etkisi ile inceledik.

2. Materyal ve Metot

2.1. Parabolik Sonlu Küresel Kuyuda Elektrik Alan Etkisi

Etkin kütle yaklaşımı altında, z- yönünde bir elektrik alanının varlığında merkezinde Hidrojen tipi bir safsızlık bulunduran, sonlu küresel kuyu içinde sınırlandırılmış bir elektronun elektronik Hamiltoniyeni,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon r} + V_c(r) + |e| F r \cos\theta \quad (1)$$

biçiminde yazabiliriz. Burada m^* elektronun etkin kütlesi, ϵ ortamın statik dielektrik sabiti e de elektronun yüküdür. F ise z-yönünde uygulanan elektrik alan büyüklüğü, R ise elektron ile

safsızlık arasındaki uzaklık θ ise yer vektörü ile elektrik alan arasındaki açı, $V_c(r)$ ise sınırlandırıcı potansiyel olup,

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

şeklinde seçilebilir. Buradaki R nokta yapının yarıçapı, $\frac{1}{2}\alpha r^2$ parabolik potansiyel, V_0 ise sonlu potansiyel olup, ($V_0 = 0.6(1.155x + 0.37x^2)$) ile belirlenir. Burada x stokometre oranıdır.

Denk.(1)'teki dördüncü terim diğer terimlerle karşılaştırıldığında küçük olacağından pertürbe hamiltoniyen olarak alınabilir ve pertürbasyon olarak hesaplanabilir. Bu durumda Denk.(1)'i

$$H = H^{(0)} + H^{(1)} \quad (3)$$

yazılabilir. Burada $H^{(0)}$ pertürbe olmamış hamiltoniyen, $H^{(1)}$ ise pertürbe hamiltoniyen olup,

$$H^{(0)} = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{e^2}{\epsilon r} + V_c(r) \quad (4)$$

ve

$$H^{(1)} = |e|Frcos\theta \quad (5)$$

Biçiminde yazılabilir. Pertürbe olmamış Hamiltoniyen $H^{(0)}$ için Shrödinger denklemi,

$$H^{(0)}\psi_i^{(0)} = E_i^{(0)}\psi_i^{(0)} \quad (6)$$

ile verilir. Burada $\psi_i^{(0)}$ ve $E_i^{(0)}$ i. duruma karşılık gelen pertürbe olmamış hamiltoniyenin özfonksiyonu ve özdeğeridir. Hartree-Fock Roothaan yaklaşımında normalize özfonksiyonların uzaysal kısmı Slater tipi orbitallerinin lineer kombinasyonu şeklinde aşağıdaki gibi ifade edilebilir.

$$\psi_i^{(0)} = \sum_{k=1}^{\omega} c_{ik}\chi_{q_k}(\zeta_k, \vec{r}) \quad (7)$$

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

$$H^{(1)}\psi_i^{(0)} = E_S^{(1)}(i)\psi_i^{(0)} \quad (8)$$

ile verilir. Burada $E_S^{(1)}(i)$, i. durum için enerji düzeltmesidir ve bu Stark enerjisi olarak adlandırılır. Uyarılmış durumlar için birinci derece Stark enerji düzeltme terimi,

$$E_S^{(1)}(i) = |e|F \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_k^w \sum_{k'}^{w'} c_{i n_k l_k m_k}^* c_{i n'_k l'_k m'_k} \times \sum_{L_{min}}^{L_{max}} {}^{(2)} \langle l_k m_k | l'_k m'_k | LM \rangle \times \left\{ Q_{n_k+n'_k, n}^{r < R}(\zeta_k, \zeta'_k, \mathbf{R}) + Q_{n_k+n'_k, n}^{r > R}(\zeta_k, \zeta'_k, \mathbf{R}) \right\} \quad (9)$$

ile verilir. Burada $L_{min} = \max\{|l - l'|, |m - m'|\}$, $L_{max} = 1 + l'$, $\langle l m | l' m' | LM \rangle$ Gaunt katsayısı, $L \geq M$ ve $M = |m - m'|$ dir. Ayrıca burada,

$$Q_n^{r < R}(\alpha, R) = \int_0^R r^N e^{-\alpha r} dr \quad (10a)$$

$$Q_n^{r > R}(\alpha, R) = \int_R^\infty r^N e^{-\alpha r} dr \quad (10b)$$

olup, incomplete gamma integralleridir (Arfken 1985).

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

$$E_S^{(1)}(1s) = |e|F \langle \psi_{100}^{(0)} | r \cos \theta | \psi_{100}^{(0)} \rangle = 0 \quad (11)$$

Diğer taraftan 1s taban durumunu ikinciden gelen Stark enerji düzeltmesi

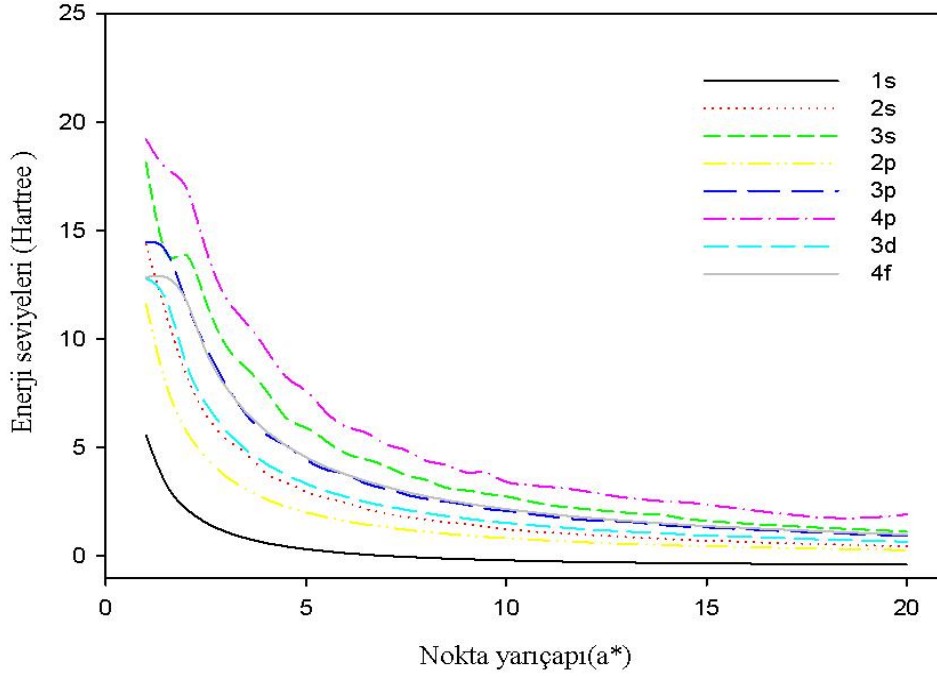
$$E_S^{(2)}(1s) = e^2 F^2 \sum_{n>1} \frac{\left| \langle \psi_{np}^{(0)}(\vec{r}) | r \cos \theta | \psi_{100}^{(0)}(\vec{r}) \rangle \right|^2}{E_{100}^{(0)} - E_{np}^{(0)}} \quad (12)$$

ifadesi ile hesaplanır.

3. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

Merkezinde safsızlık bulunan parabolik potansiyelli sonlu sınırlandırıcı potansiyel altında tek elektronlu GaAs/Al_xGa_{1-x}As yapısının enerji özdeğerleri ve öz fonksiyonları KGA yöntemiyle HF yönteminin birleşimi ile hesaplandı. Hesaplamalarımızda atomik birimler kullanıldı. GaAs/Al_xGa_{1-x}As yapısının taban ve bazı uyarılmış durumlarının enerjileri nokta yarıçapına ve katkılanma(stokometre) oranına bağlı olarak hesaplandı. GaAs için etkin Bohr yarıçapı $a^* = 100 \text{ \AA}$, etkin Rydberg enerjisi $R_y = 5.72 \text{ meV}$ dir. Malzeme parametreleri olarak kuyu içinde GaAs'ın kuyu dışında ise AlGaAs'ın parametreleri alındı. Bu materyal parametreleri $m_{GaAs} = 0.0665m_0$, $\epsilon_{GaAs} = 13.18$ ve $m_{AlGaAs} = 0.0665 + 0.0835x$, $\epsilon_{AlGaAs} = 13.18 - 3.12x$ olarak alındı (Adachi, 1994). Burada m_0 serbest elektron kütlesi ve x katkılanma oranıdır. Potansiyel engeli yüksekliği ise GaAs ve AlGaAs enerji bant yapılarını birbirlerine göre durumunu düzenleyen katkılanma oranı x bağlı olarak $V = 0.6(1.155x + 0.37x^2)$ eV alınmıştır (Adachi, 1994). Ayrıca basitlik olması bakımından

GaAs ve AlGaAs nin içerisinde elektronların etkin kütlelerini sırasıyla m_1 ve m_2 , dielektrik sabitlerini de ε_1 ve ε_2 aldık. Hesaplamalarımızda üç farklı katkılanma oranı(stokometre) $x=0.2$, $x=0.3$ ve $x=0.4$ değerleri alındı. Sınırdaki bariyer yüksekliği ile parabolik potansiyel arasındaki sürekliliği sağlamak için parabolik potansiyel parametresi $\alpha = \frac{2.V_0}{m^*R^2}$ alındı. Dış elektrik alandan dolayı enerji seviyelerine gelen katkı pertürbasyon yöntemiyle hesaplandı. Dış elektrik alanı için 50 , 100 ve 150 kV/cm değerleri alındı.



Şekil 1: $x=0.2$ için sonsuz küresel parabolik kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumların enerjilerinin nokta yarıçapına göre değişim

Şekil 1, de sırasıyla $x=0.2$ için merkezinde safsızlık bulunduran kuantum nokta yapısının taban ve bazı uyarılmış durumların enerjilerinin nokta yarı çapına göre değişim grafiği verilmiştir. Enerji değerleri ise Tablo 1, Tablo 2 ve Tablo 3 de verilmiştir. Şekil 1' den görüleceği gibi nokta yarı çapı arttıkça enerji düzeyleri azalmakta ve belli bir dot yarı çapından sonra sabit kalmaktadır. Güçlü sınırlandırma bölgesinde enerji seviyeleri arasındaki fark artarken, zayıf sınırlandırma bölgesinde enerji seviyeleri arasındaki fark azalmaktadır. Bunun sebebi güçlü sınırlandırma bölgesinde, yani safsızlığa yakın bölgelerde elektronun kinetik enerjisinin artması sonucu seviyeler arasındaki enerji farkının artmasıdır. Tablolardan görüleceği gibi katkılanma oranı arttıkça enerji seviyeleri dahada yukarıya çıkmaktadır. $x=0.2$ için taban durum enerjisi dot yarı çapının büyük değerlerinde ($r=20a^*$) -0.4042 H

gitmektedirki bu da hidrojen atomunun taban durumuna(-0.5 H) yaklaşmaktadır. Benzer şekilde taban durum enerjisi aynı dot yarı çapı için $x=0.3$ değerinde $-0.3504 H$ ve $x=0.4$ için ise $-0.2933 H$ gitmektedir. Hidrojen atomuyla bu değerler arasındaki fark parabolik ve sınırlandırıcı potansiyelden kaynaklanmaktadır.

Tablo 1: Kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumlar için stokometre oranı $x=0.2$ değerinde hesaplanan enerji değerleri. Tüm değerler atomik birimde verilmiştir.

R	1s	2s	3s	2p	3p	4p	3d	4f
1.00	5.5634	14.3729	18.1312	11.5945	14.4492	19.2114	12.8164	12.8493
1.50	3.3113	11.1482	13.9778	7.9010	14.0631	17.8715	11.8052	12.8493
2.00	2.1763	8.3680	13.8787	5.7724	11.7551	16.9854	8.8777	11.7962
2.50	1.5229	6.4871	11.6890	4.4946	9.6069	14.1105	7.0085	9.4026
3.00	1.1052	5.3733	9.6883	3.6526	7.8885	11.9027	5.7677	7.7776
4.00	0.5966	3.8148	7.6170	2.6109	5.5885	9.5186	4.2402	5.7574
6.00	0.1265	2.4463	4.7103	1.5978	3.7495	5.9470	2.7177	3.7543
7.00	3.5678×10^{-3}	1.9474	4.1229	1.3138	3.0840	5.1307	2.2880	3.1839
8.00	-0.0859	1.6817	3.4915	1.1065	2.6248	4.3745	1.9611	2.7478
10.0	-0.2050	1.2232	2.7390	0.8156	2.0700	3.4014	1.5196	2.1596
15.0	-0.3449	0.6965	1.6102	0.4414	1.3077	2.3581	0.9379	1.3797
20.0	-0.4042	0.4446	1.1253	0.2672	0.9267	1.9134	0.6545	0.9920

Tablo 2 : Kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumlar için stokometre oranı $x=0.3$ değerinde hesaplanan enerji değerleri. Tüm değerler atomik birimde verilmiştir.

R	1s	2s	3s	2p	3p	4p	3d	4f
1.0	7.8509	20.1652	22.7390	16.1048	21.6837	24.1819	19.8431	19.8811
1.50	4.7197	15.2078	23.1610	10.6044	20.0853	22.4235	15.8448	19.8811
2.00	3.2080	11.3491	19.4809	7.7992	15.7787	22.1818	11.7653	15.6215
2.50	2.3188	8.8204	16.9488	6.0972	12.2023	19.5777	9.3060	12.4054
3.00	1.7471	7.1423	13.4855	4.9826	10.2292	16.2575	7.6751	10.3043
4.00	1.0622	5.2265	9.3928	3.5771	7.5243	12.3471	5.6662	7.6092
6.00	0.4074	3.2991	6.3389	2.2093	4.8336	8.2983	3.6330	4.9724
7.00	0.2357	2.7539	5.5303	1.8293	4.0673	6.9986	3.0645	4.2602
8.00	0.1105	2.3365	4.8010	1.5584	3.5846	5.7765	2.6470	3.6667
10.00	-0.0597	1.7283	3.7425	1.1698	2.8038	4.5700	2.0614	2.8855

15.00	-0.2620	1.0533	2.3122	0.6641	1.7481	3.0510	1.2869	1.8500
20.00	-0.3504	0.6801	1.6343	0.4259	1.2963	2.2821	0.9117	1.3461

Tablo 3 : Kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumlar için stokometre oranı $x=0.4$ değerinde hesaplanan enerji değerleri. Tüm değerler atomik birimde verilmiştir.

R	1s	2s	3s	2p	3p	4p	3d	4f
1.00	9.9596	28.5053	36.5771	20.1886	28.6455	34.3988	27.0681	27.1116
1.50	6.1097	18.9308	30.8793	13.1507	25.8521	29.1560	19.5235	25.7168
2.00	4.2297	14.1257	26.2967	9.6911	19.1595	28.7551	14.4931	19.2368
2.50	3.1004	11.6024	19.8428	7.6008	15.3274	25.9273	11.5283	15.2910
3.00	2.4006	9.1342	17.1691	6.1861	12.4805	21.4053	9.5103	12.6752
4.00	1.5236	6.6747	12.2383	4.4960	9.4451	15.7912	7.0145	9.5795
6.00	0.6944	4.1803	7.8275	2.8156	6.1875	9.7951	4.5312	6.1351
7.00	0.4698	3.4958	6.6387	2.3308	5.1402	8.4726	3.8270	5.2074
8.00	0.3055	3.0567	5.8051	1.9894	4.4702	7.2048	3.3047	4.5351
10.00	0.0894	2.2762	4.4240	1.5095	3.4972	5.6321	2.5818	3.5734
15.00	-0.1762	1.3525	2.8046	0.8851	2.2286	4.0070	1.6273	2.3041
20.00	-0.2933	0.9049	1.9817	0.5814	1.5924	2.7737	1.1621	1.6802

Şekil 2-7 de stokometre oranı $x=0.2$ için ve elektrik alanının 50, 100 ve 150 kV/cm değerleri için nokta yapının taban ve bazı uyarılmış enerji seviyelerine Stark enerji düzeltme teriminin nokta yarıçapına göre değişim grafikleri çizilmiştir. Bu şekillerden görüleceği gibi taban durumuna gelen ikinci derece Stark enerji düzeltmesi dot yarıçapı arttıkça negatif yönde artmaktadır.

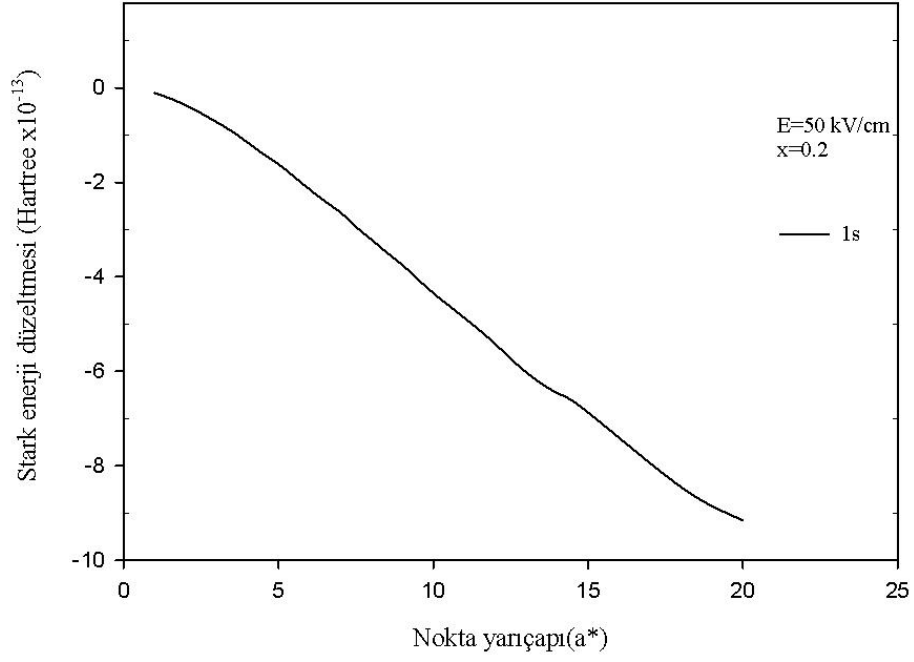
Uyarılmış durumlar (2p,3d,4f) için Stark enerji düzeltmesi nokta yarıçapı ve dış elektrik alan değeri arttıkça Stark enerji düzeltmesi artmaktadır. Uyarılmış durumlarda 3d'ye en fazla katkı gelirken 4f seviyesine en az katkı gelmektedir. Uyarılmış durumlara gelen Stark enerji düzeltme değeri $\sim 10^{-6}$ H mertebesindedir.

Şekil 8-13 de stokometre oranı $x=0.3$ için ve elektrik alanının 50, 100 ve 150 kV/cm değerleri için nokta yapının taban ve bazı uyarılmış enerji seviyelerine Stark enerji düzeltme teriminin nokta yarıçapına göre değişim grafikleri çizilmiştir.

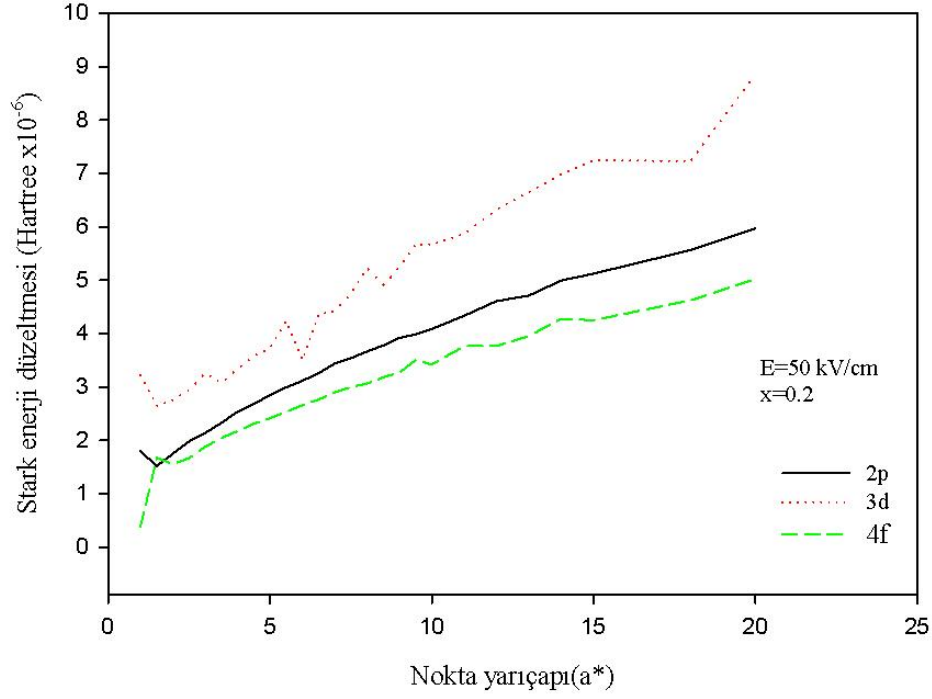
Bu şekillerden görüleceği gibi taban durumuna gelen ikinci derece Stark enerji düzeltmesi dot yarıçapı arttıkça negatif yönde artmaktadır. Uyarılmış durumlar (2p,3d,4f) için Stark enerji düzeltmesi nokta yarıçapı arttıkça ve dış elektrik alan değeri arttıkça Stark

enerji düzeltmesi artmaktadır. Uyarılmış durumlarda $3d'$ 'ye en fazla katkı gelirken $4f$ seviyesine en az katkı gelmektedir. Uyarılmış durumlara gelen Stark enerji düzeltme değeri $\sim 10^{-6}$ H mertebesindedir.

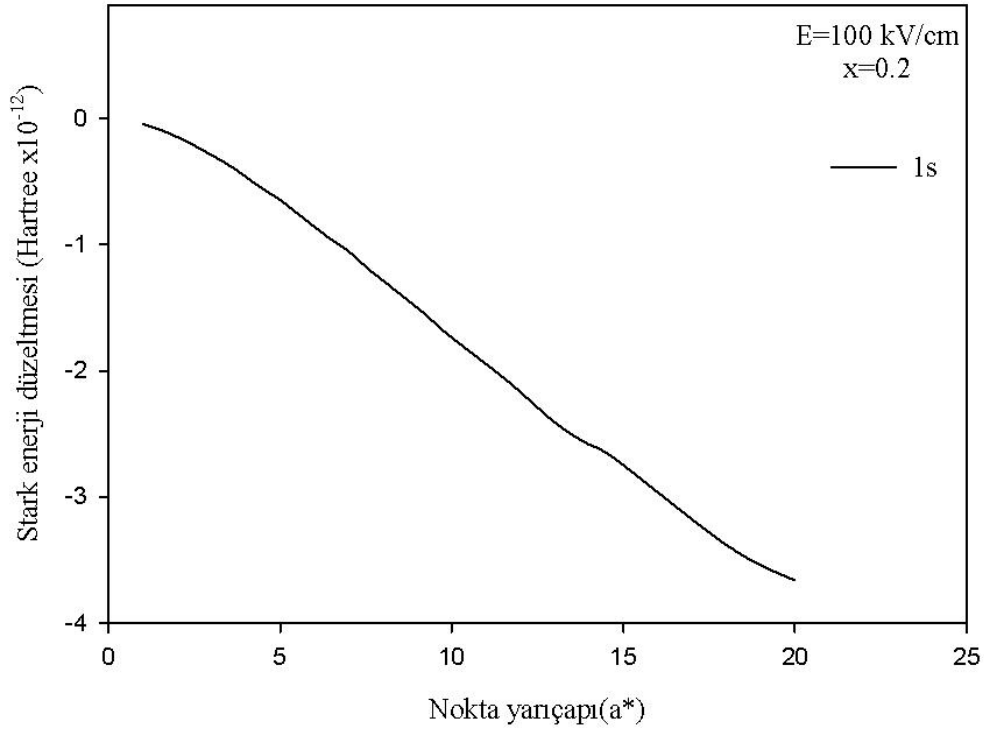
Farklı sınırlandırıcı potansiyellerde uyarılmış durumlara gelen Stark enerji düzeltmesi kırmızı ötesi bölgeye düşmektedir ($\lambda \sim 10^{-4} m$).



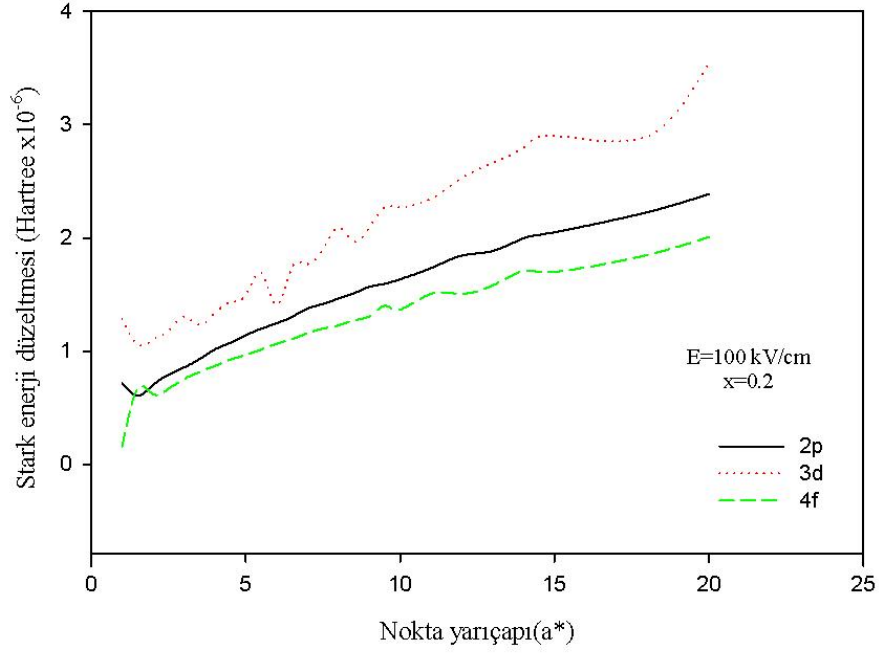
Şekil 2: Taban durum ($1s$) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



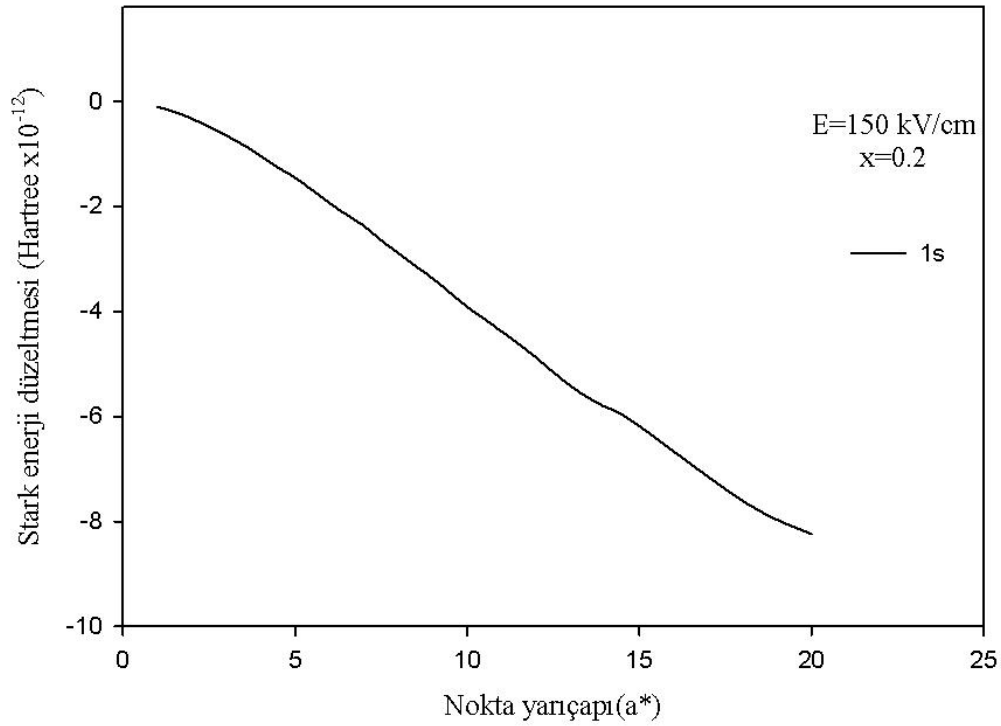
Şekil 3: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, 4f,) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



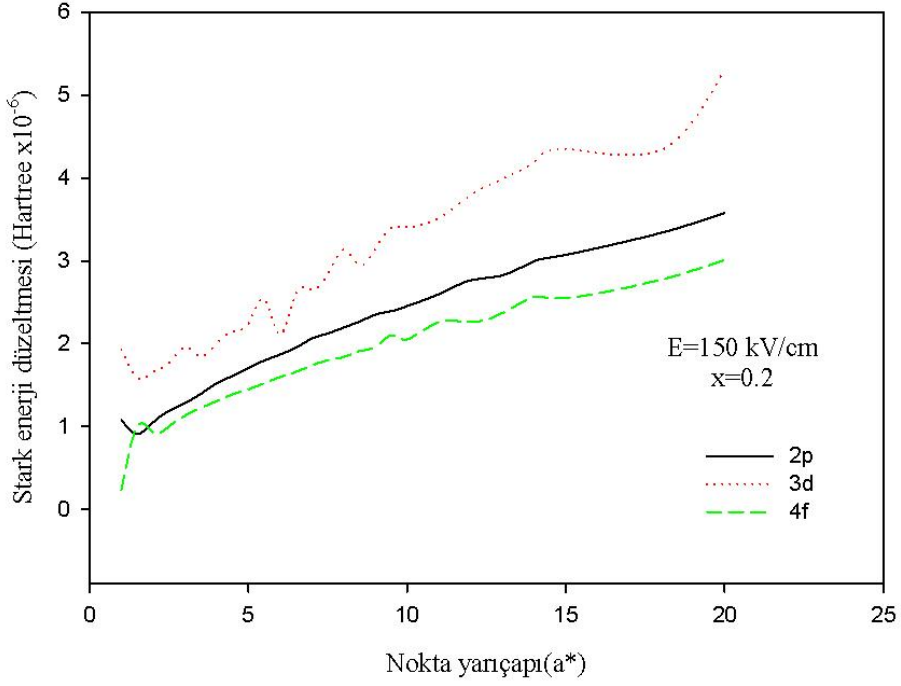
Şekil 4: Taban durum (1s) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



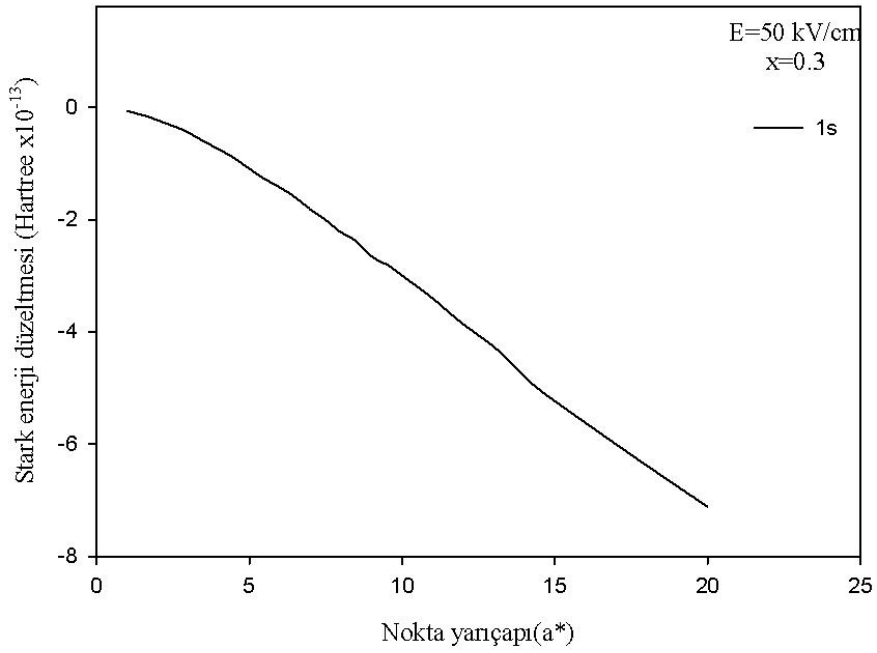
Şekil 5: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, ve 4f) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



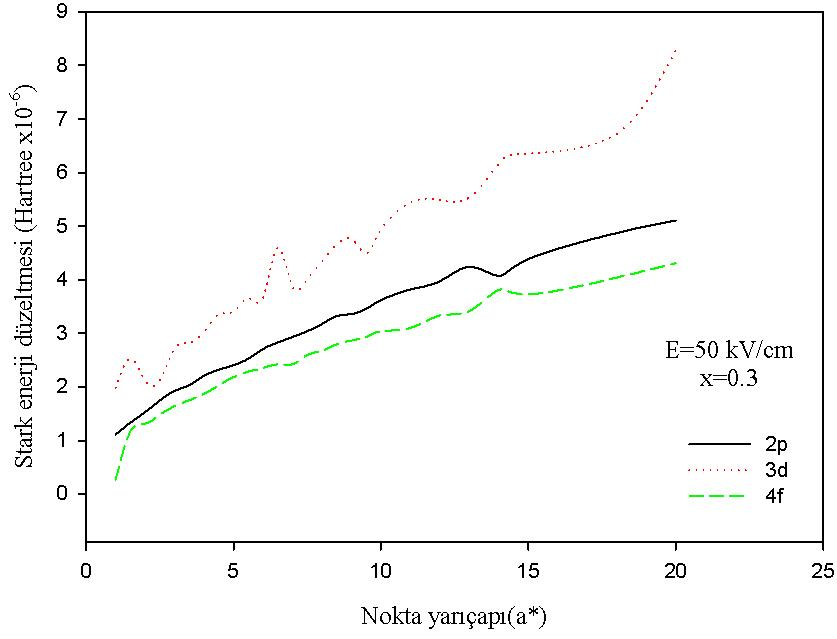
Şekil 6: Taban durum (1s) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



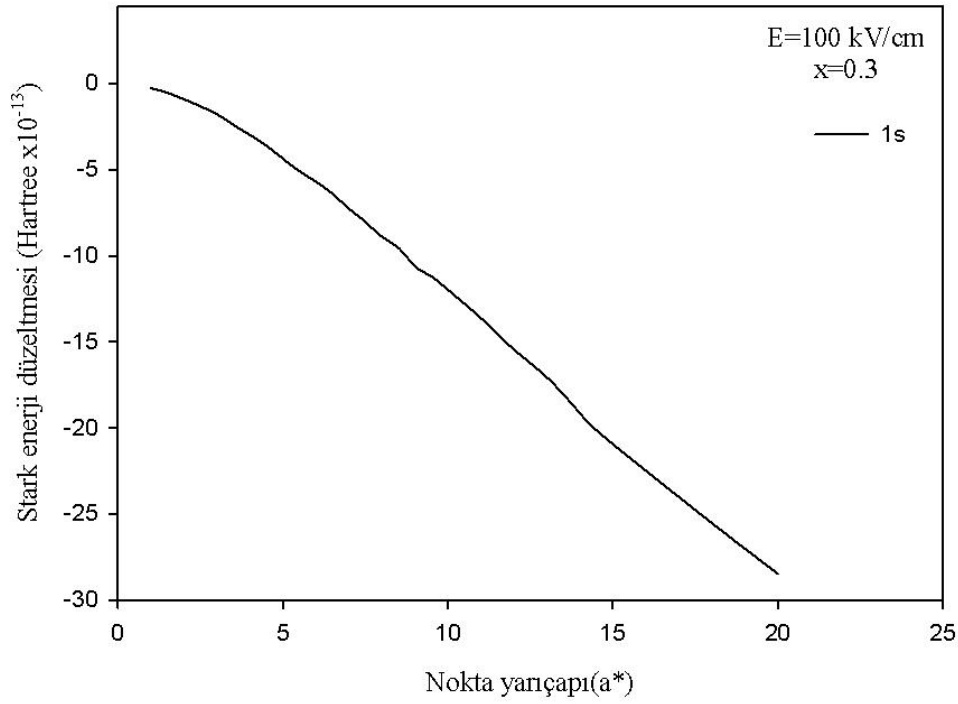
Şekil 7: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, 4f,) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



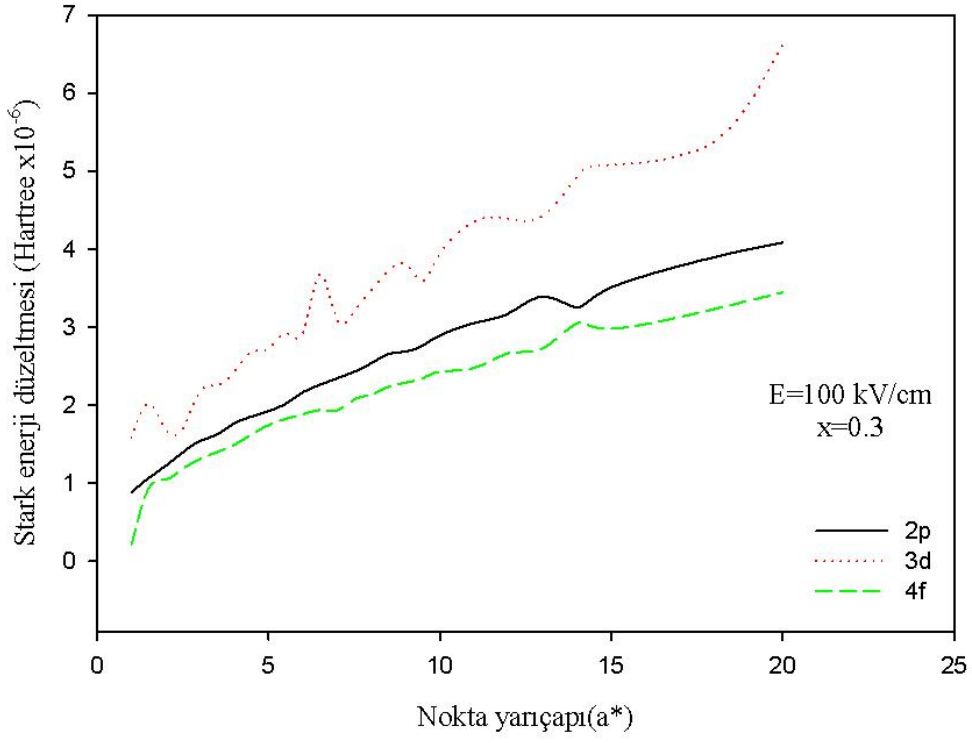
Şekil 8: Taban durum (1s) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



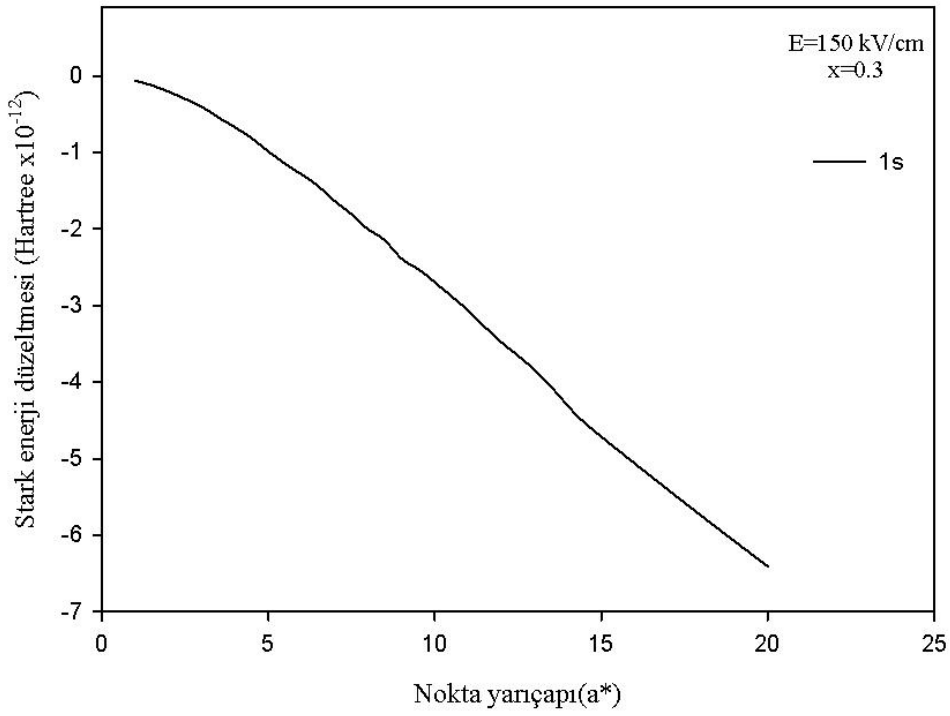
Şekil 9: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, 4f,) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



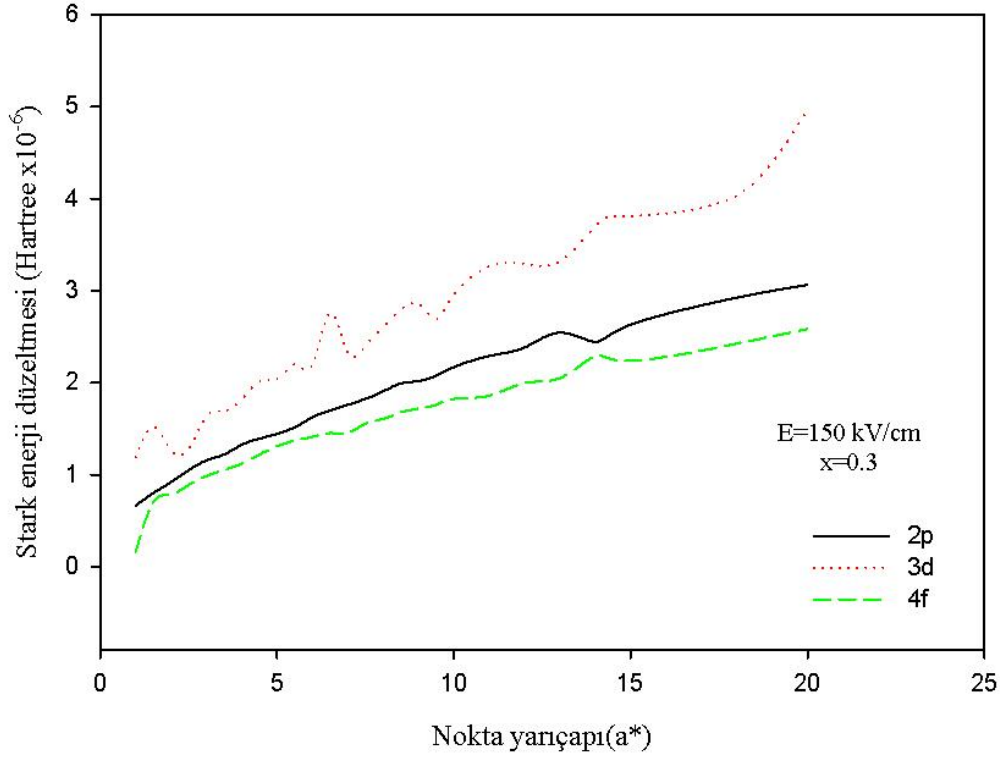
Şekil 10: Taban durum (1s) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



Şekil 11: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, 4f,) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



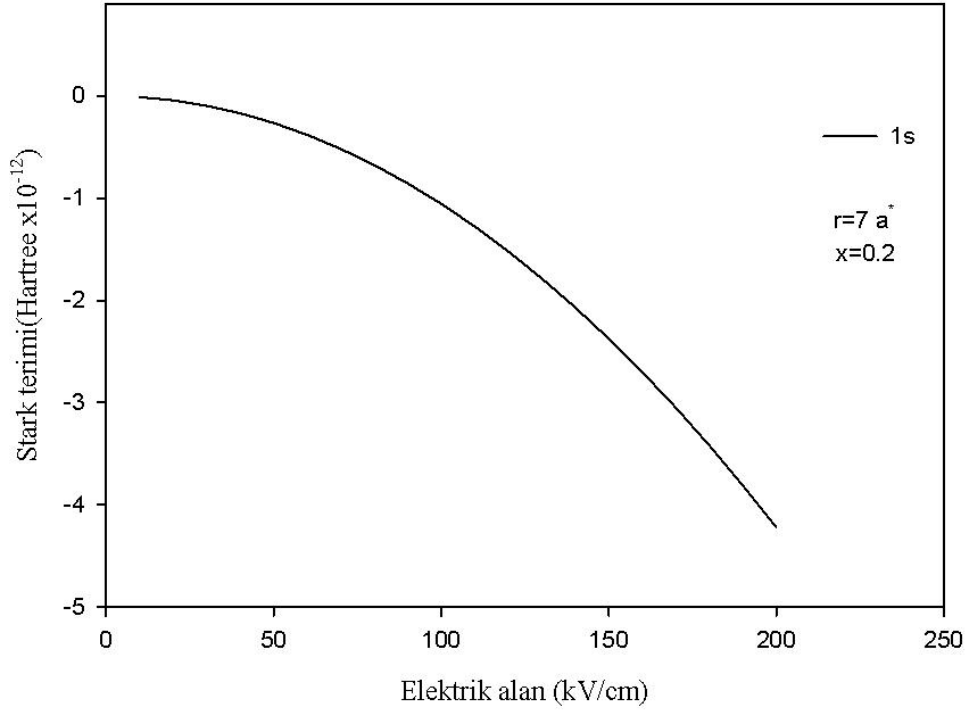
Şekil 12: Taban durum (1s) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.



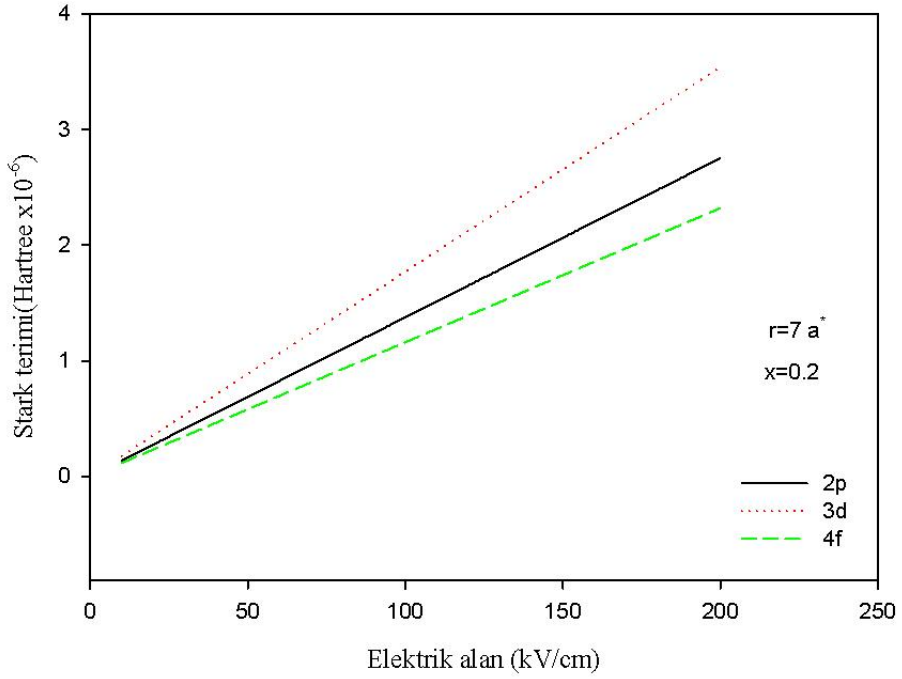
Şekil 13: Uyarılmış durumlara (2p, 3d, 4f,) gelen Stark enerji düzeltmesinin nokta yarıçapına göre değişimi.

Şekil 14-19 arasında dot yarıçapı $r=7a^*$ da stokometre oranları x 'in farklı değerleri için elektrik alanına göre seviyelere gelen Stark enerji düzeltmesinin grafiği çizilmiştir. Bu grafiklerden görüleceği gibi taban durumda negatif yönde bir katkı olup, elektrik alanın karesi ile değişmektedir. Bu da taban durum enerjisini daha da negatif yapacaktır. Dot yarıçapı artıkça gelen katkılar da artmaktadır. Taban duruma gelen bu katkıların mutlak değeri stokometre oranı artıkça azalmaktadır. Ayrıca taban duruma gelen katkılar ikinci mertebenden olduğu için çok küçük olmaktadır. Bunun sebebi ise yukarı seviyelerin elektrik alanı perdelemesinden katnaklanmaktadır.

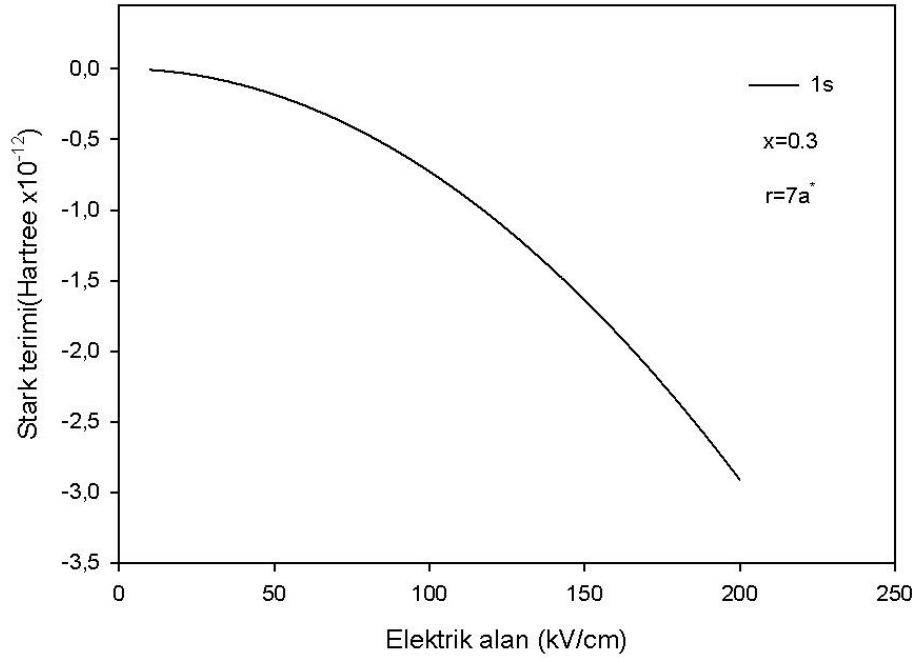
Uyarılmış seviyelere gelen katkı ise Denk.(12) den görüleceği gibi elektrik alan ile lineer bağımlı bir katkı gelmektedir. Şekillerden görüleceği gibi elektrik alanı artıkça Stark katsıısı elektrik alanla doğru orantılı olacak şekilde artmaktadır. 3d seviyesi elektrik alandan daha çok etkilenmekte ve gelen katkı çok olmaktadır. Yani elektrik alanı içinde iken nokta yapının 3d seviyesindeki kayma diğer p ve f seviyelerine göre daha fazla olmaktadır. Uyarılmış seviyeler arasında dış elektrik alandan en az etkilenen seviye ise 4f seviyesidir.



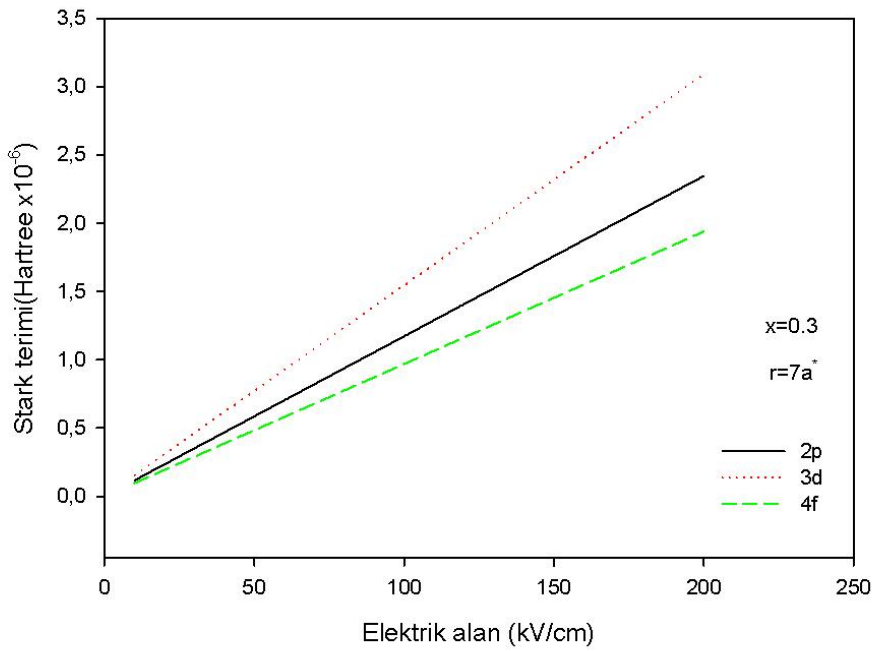
Şekil 14: Taban durum(1s) için Stark teriminin elektrik alana göre değişimi.



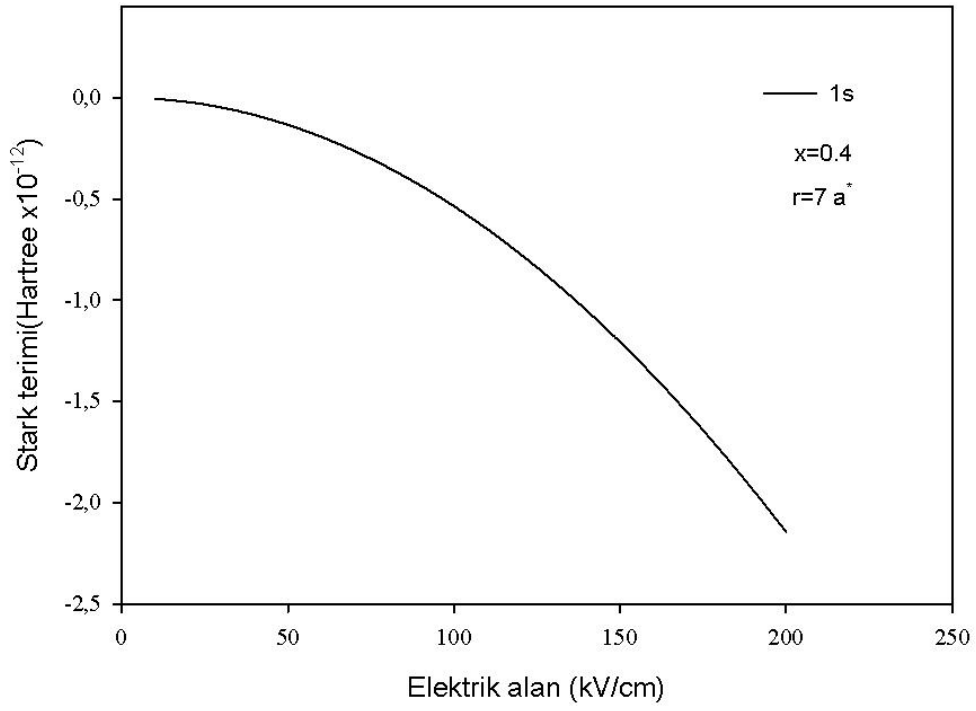
Şekil 15: Uyarılmış seviyeler (2p, 3d ve 4f) için Stark teriminin elektrik alana göre değişim grafiği.



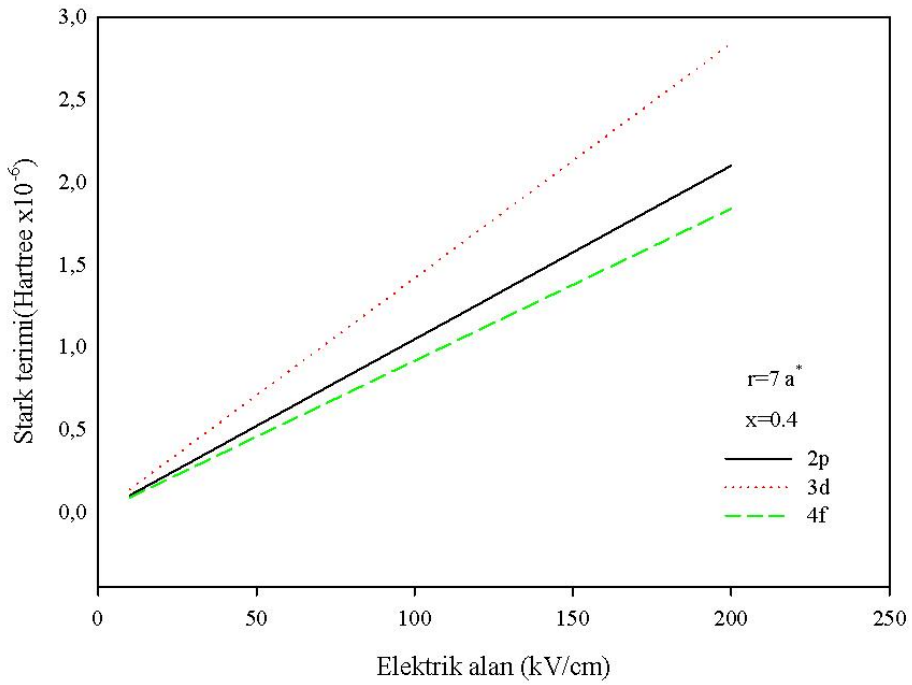
Şekil 16: Taban durum($1s$) için Stark teriminin elektrik alana göre değişimi.



Şekil 17: Uyarılmış durumlar($2p, 3d$ ve $4f$) için Stark teriminin elektrik alana göre değişimi.



Şekil 18: Taban durum(1s) için Stark teriminin elektrik alana göre değişimi.



Şekil 19: Uyarılmış durumlar(2p,3d ve 4f) için Stark teriminin elektrik alana göre değişimi.

Açıklama

Bu çalışma Selçuk Üniversitesi Fizik bölümünde Emine Şeyma ALKAN tarafından hazırlanan Yüksek lisans tez çalışmasının bir bölümüdür.

KAYNAKLAR

Adachi, S., 1994 GaAs and Relati Materials, World Scientific, Singapare.

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

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

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

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

Cho, A. Y., 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., Kim, Y., Kim, E.K., 1998, Fabrication and room-temperature characterization of a silicon self-assembled quantum-dot transistor, *Applied Physics Letters*, 73: 3129-3131.

Çakır, B., Özmen, A., Şahin, M., Yakar, Y., Atav, Ü. and Yüksel, H., 28-30 August. 2006, Determination of wave functions of a quantum dot using the genetic algorithm, Proceedings of the international conference on modeling and simulation, Konya, Turkey, paper No:B032

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

- Çakır, B., Özmen, A., Atav, Ü., Yüksel, H. and Yakar, Y., 2007, Investigation of electronic structure of a quantum nokta using Slater-type orbitals and quantum genetic algorithm, *International Journal of Modern Physics C*, 18, 61-72.
- Çakır, B., Özmen, A., Atav, Ü., Yüksel, H., Yakar, Y., 2008, Calculation Of Electronic Structure Of A Spherical Quantum Nokta Using A Combination Of Quantum Genetic Algorithm And Hartree Fock Roothaan Method, *International Journal of Modern Physics C*, 19(4) ,599-609.
- Çakır, B., Yakar, Y., Özmen, A., Sezer, M. Ö., Şahin, M., 2010, Linear and nonlinear optical absorption coefficients and binding energy of a spherical quantum nokta, *Superlattices and Microstructures* ,47, 556-566 .
- Çakır, B., (2013), Calculation of oscillator strength and the effects of electric field on energy states, static and dynamic polarizabilities of the con Optics Communications 311(2013)222–228
- Fujito, M., Natori, A., and Yasunaga, H., 1996, Many-electron ground states in anisotropic parabolic quantum dots, *Physical Review B* , 53: 9952-9958.
- Gammon, D., 2000, Semiconductor physics: Electrons in artificial atoms, *Nature*, 405: 899-900.
- Gerardo J. Vázquez, (2004), Spherical quantum dot under an electric field, *phys. stat. sol. (c)* 1, No. S1, S54– S57.
- Grigorenko, I., Garcia M. E., 2000, An evolutionary algorithm to calculate the ground state of a quantum system, *Physica A*, 284: 131-139. Grigorenko, I., Garcia M. E., 2001, Ground-state wavefunctions of two-particle systems determined using quantum genetic algorithms, *Physica A*, 291: 439-448.
- Grigorenko, I., Garcia M. E., 2001, Ground-state wavefunctions of two-particle systems determined using quantum genetic algorithms, *Physica A*, 291: 439-448.
- Grigorenko, I., Garcia M. E., 2002, Calculation of the partition function using quantum genetic algorithms, *Physica A*, 313: 463-470.
- Holland, J. H., 1975, *Adaptation in Natural and Artificial Systems*, University of Michigan, Ann Arbor, MI.
- Homaifar, A., Lai, H. Y., McCormick, E., 1994, System optimization of turbofan engines using genetic algorithms, *Applied Mathematical Modelling*, 18: 72-83.

- Huangfu, Y.F., Z.W. Yan, (2008) , Bound polaron in a spherical quantum dot under an electric field, *Physica E ,Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Volume 40, Issue 9 Pages 2982-2987
- Kirak,M., Altınok, Y., Yılmaz,S.,2013, The effects of the hydrostatic pressure and temperature on binding energy and optical properties of a donor impurity in a spherical quantum nokta under external electric field, *Journal of Luminescence*,136,415-421.
- Kulkarni, A. J., Krishnamurthy, K., Deshmukh, S. P., Mishra R. S., 2004, Microstructural optimization of alloys using a genetic algorithm, *Materials Science and Engineering A*, 372: 213-220.
- Maksym, P. A., Chakraborty, T., 1990, Quantum dots in a magnetic field: role of electron-electron interactions, *American Physical Society*, 65: 108-111
- Nakanishi, H., Sugawara, M., 2000, Numerical solution of the Schrodinger equation by a microgenetic algorithm, *Chemical Physics Letters*, 327 429-438.
- Nomoto, K., Ugajin, R., Suzuki, T., Taira, K., Hase, I., 1998, Quantum-dot based optoelectronic device, *IEICE Transactions on Electronics E*, 81C: 8-15.
- Özmen, A., Yakar, Y., Cakır B., Atav, U., 2009, Computation of the oscillator strength and absorption coefficients for the intersubband transitions of the spherical quantum nokta, *Optics Communications*, 282, 3999–4004.
- Özmen A., Yakar, Y., Cakır B., 2013, Electronic structure and relativistic terms of one-electron spherical quantum dot.
- Reed, M.A., Bate, R. T., Bradshaw, K., Duncan, W. M., Frensley, W. M., Lee, J. W., Smith, H. D., 1986, Spatial quantization in GaAs-AlGaAs multiple quantum noktas, *Journal of Vacuum Science & Technology B*, 4, 358-360.
- Ryzhii, V., 1996, The theory of quantum-dot infrared phototransistors, *Semiconductor Science and Technology*, 11: 759-765.
- Saha, R., Chaudhury, P., 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*, Kingston, R. H. (ed), p.55, *University of Pennsylvania Press*, Philadelphia.
- Shockley, W., 1949, Bell System, *Technical Journal*, 28, 435-489.
- Sim, J. S., Kong, J., Lee, J. D., Park, B. G., 2004, Monte Carlo simulation of single-electron nanocrystal memories, *Japanese Journal of Applied Physics*, 43: 2041-2045.
- Smith, W., 1873, *J.Soc.Telegr. Eng.*2:31
- Şafak, H., Şahin, M., Gülveren, B., Tomak, M., 2003, Efficiency of genetic algorithm and determination of ground state energy of impurity in a spherical quantum dot, *International Journal of Modern Physics C*, 14: 775-784.
- Şahin, Ö., Sayan, P., Bulutcu, A. N., 2000, Application of genetic algorithm for determination of mass transfer coefficients. *Journal of Crystal Growth* 216: 475-482.
- Şahin, M., Tomak, M., 2002, Self-consistent calculation of semiconductor heterojunctions using quantum genetic algorithm, *International Journal of Modern Physics B*, 16: 3883-3893.
- Şahin, M. and Tomak, M. 2005, Electronic structure of a many-electron spherical quantum dot with an impurity, *Physical Review B*, 72: 125323(1-6).
- Venugopal, V., Narendran, T.T., 1992, A genetic algorithm approach to the machine-component grouping problem with multiple objectives, *Computers & Industrial Engineering*, 22: 469-480.
- Yakar, Y., Çakır, B., Özmen, A., 2010, Calculation of linear and nonlinear optical absorption coefficients of a spherical quantum dot with parabolic potential, *Optics Communications*, 283, 1795–1800.
- Yakar, Y., Çakır, B., Özmen, A., 2010, Linear and Nonlinear Optical Properties in Spherical Quantum Dots, *Communications in Theoretical Physics*, 53, 1185–1189.
- Yakar, Y., Çakır, B., Özmen, A., 2013, Computation of relativistic terms in a spherical quantum dot, *Journal of Luminescence*, 134, 778-783.
- Yakar, Y., Çakır, B., Özmen, A., 2013, Off-center hydrogenic impurity in spherical quantum dot with parabolic potential, *Superlattices and Microstructures*, 60, 389-397.

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

SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
BİLİMSEL DERGİLER KOORDİNATÖRLÜĞÜ
SELÇUK UNIVERSITY
COORDINATION UNIT OF SCIENTIFIC JOURNALS
© 2015 Reproduction is free for scientific studies