

## Hidrojen Tipi Kuantum Nokta Yapının Taban Durumunun Kuantum Genetik Algoritma Yöntemiyle İncelenmesi

Bekir Çakır<sup>1\*</sup>, M. Özgür SEZER<sup>1</sup>, Yusuf YAKAR<sup>2</sup>, Ayhan Özmen<sup>1</sup>, Hüseyin YÜKSEL<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü Kampüs, Selçuklu/KONYA.

<sup>2</sup> Aksaray Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü, Kampüs/AKSARAY.

### Özet:

Bu çalışmada sonlu küresel kuyudaki kuantum nokta yapısının taban durum elektronik özellikleri incelendi. Merkezinde hidrojen benzeri safsızlık olan **GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As** kuantum nokta yapısının farklı kuantum nokta yarıçapları için taban durum enerjileri nokta yarıçapına ve katkılanma oranına bağlı olarak hesaplandı. Slater tipi baz fonksiyonları cinsinden oluşturulan dalga fonksiyonu Kuantum Genetik Algoritma (KGA) yöntemi kullanılarak elde edildi ve Hartree-Fock-Roothaan (HFR) yöntemi ile taban durumu enerjisi hesaplandı.

**Anahtar kelimeler:** Kuantum Genetik Algoritma, sonlu potansiyel kuyu, küresel kuantum nokta yapı.

## Investigation of Ground State of Hydrogenlike Quantum Dot Structure with Quantum Genetic Algorithm

### Abstract:

In this study, the electronic structure of the ground states of a quantum dot structure with spherical well was investigated. The ground state energy depending on dot radius and stoichiometric ratio was calculated for **GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As** quantum structure including hydrogenlike impurity on center. Wave function was constructed in terms of Slater type basis functions and it was obtained by using Quantum Genetic Algorithm (KGA) method and the ground state energy was calculated by Hartree-Fock-Roothaan (HFR) method.

**Key words:** Quantum Genetic Algorithm, finite potential well, quantum dot structure.

### Giriş

Son yıllarda, nano boyuttaki yarı-iletken yapılar üzerinde yapılan çalışmalar ve bunların teknolojideki kullanımları artarak devam etmektedir. Yarı-iletken nano yapılar, tek elektron transistörleri, kuantum infrared foto dedektörleri gibi çeşitli birçok uygulamalarda yaygın olarak kullanılmaktadır [1, 2]. Kuantum nano yapıları kesikli enerji seviyelerine ve atomlarda olduğu gibi kabuk yapılarına sahip oldukları için “yapay atom” olarak adlandırılmaktadır [3, 4]. Kuantum kuyusu olarak adlandırılan iki boyutta sınırlandırılmış elektronik yapılar, daha yüksek iletim bandı enerjisine sahip olan iki ayrı düzlem yarı-iletken tabaka arasına, düşük bant aralıklı yarı-iletken bir düzlem tabaka eklenmesiyle elde edilir. Kuantum kuyusunun çok ince yapıya sahip olması ve elektronun bu yapı içinde tutulması, sistemin elektronik özelliklerinin incelenmesi bakımından birçok araştırmacının ilgisini çekmiştir. Bu sayede yarı-iletken teknolojisinde büyük ilerlemeler kaydedilmiştir.

Genetik Algoritma (GA) tekniği ilk olarak Holland [5] tarafından kullanılmış olup mühendislik ve malzeme biliminde yaygın olarak kullanılmaktadır. Kuantumlu yapılarda kullanıldığı zaman KGA olarak da adlandırılan bu yöntem, varyasyon yönteminde olduğu gibi enerjiyi minimize ederek Schrödinger denkleminin çözümünü bulmak amacıyla kullanılmaya başlanmıştır. Son zamanlarda bu yöntem, kuantum noktanın elektronik yapısı, taban ve uyarılmış durumların enerjileri, bağlanma enerjileri ve diğer fiziksel parametrelerin hesabında sıkça kullanılmaktadır [6-14].

Bu çalışmada, merkezinde hidrojen tipi safsızlık bulunan sonlu küresel simetrik potansiyelle sınırlandırılmış bir elektronlu kuantum nokta yapısı göz önüne alındı. Dalga fonksiyonu olarak ise Slater Tipi Orbitalerin (STO) lineer bileşiminden oluşan tek-elektron spin orbitalleri kullanıldı. KGA tekniği ile Schrödinger denkleminin olası çözümleri olan dalga fonksiyonları belirlendi ve

\* Yazışma adresi: becakir@selcuk.edu.tr

bu fonksiyonlar kullanılarak HFR yöntemiyle taban durum enerjisi hesaplandı. Ayrıca kuantum nokta yapısının taban durum enerjisinin değişimi nokta yarıçapına bağlı olarak incelendi.

### Materyal ve Metot

Merkezinde hidrojen tipi safsızlık olan, sonlu küresel bir potansiyel engeline sahip GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As kuantum nokta yapının elektronik Hamiltoniyeni etkin kütle yaklaşımıyla atomik birimlerde,

$$H = -\frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{1}{\epsilon r} + V(r) \quad (1)$$

şeklinde yazılabilir.  $r$  elektronun safsızlığa olan uzaklığı  $m^*$  etkin kütle,  $\epsilon$  ortamın dielektrik sabitini ifade etmektedir.  $V(r)$  sınırlayıcı potansiyeli,

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r < a \\ V, & r \geq a \end{cases} \quad (2)$$

şeklinde sonlu küresel simetriktir. Burada  $a$  nokta yarıçapını göstermektedir. Denklem (1) deki Hamiltoniyen ifadesi nokta yapının içinde ve dışındaki durumlar için,

$$H^{r < a} = -\frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{1}{\epsilon_1 r}, \quad r < a \quad (3)$$

$$H^{r > a} = -\frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{1}{\epsilon_2 r} + V(r), \quad r \geq a \quad (4)$$

olarak iki kısma ayrılır. Toplam Hamiltoniyen kuyu içindeki ve kuyu dışındaki Hamiltoniyenlerin toplamı olarak,

$$H = H^{r < a} + H^{r > a} \quad (5)$$

yazılabilir.  $\psi(1,2,\dots,n)$  ler, Hamiltoniyen operatörünün antisimetrik öz fonksiyonları olmak üzere kapalı kabuklu sistemler için tek elektron spin orbitalleri olan  $\phi_p$  lerin oluşturduğu Slater determinant dalga fonksiyonu,

$$\psi(1,2,\dots,n) = (1/\sqrt{n!}) \det |\phi_p(1)\phi_p(2)\dots\phi_p(n)| \quad (6)$$

olarak yazılırsa tek elektron spin orbitalleri cinsinden kuantum nokta yapısının enerjisi,

$$E = \langle \psi^{r < a} | H^{r < a} | \psi^{r < a} \rangle + \langle \psi^{r > a} | H^{r > a} | \psi^{r > a} \rangle \quad (7)$$

yazılabilir. Burada  $\phi_p$  ler çekirdeğe yakın ve uzak bölgelerde iyi davranışlı  $\chi_k$  Slater tipi orbitallerin lineer toplamı cinsinden,

$$\begin{aligned} \phi_p &= \Theta(a-r)\phi_p^{r < a} + \{1 - \Theta(a-r)\}\phi_p^{r > a} \\ &= \Theta(a-r) \sum_{k=1}^{\sigma^{r < a}} c_{pk}^{r < a} \chi_k(\zeta_{pk}^{r < a}, \vec{r}) + \{1 - \Theta(a-r)\} \sum_{k=1}^{\sigma^{r > a}} c_{pk}^{r > a} \chi_k(\zeta_{pk}^{r > a}, \vec{r}) \end{aligned} \quad (8)$$

şeklinde yazılabilir. Burada  $\Theta(x)$  Heaviside fonksiyonudur. Normalize olmayan Slater atomik orbitalleri ise

$$\chi_{nlm}(\xi, r\theta\varphi) = r^{n-1} e^{-\xi r} Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (9)$$

ifadesiyle tanımlanır.

Genetik Algoritma (GA), ortama iyi uyum sağlayan bireylerin hayatta kalması, sağlayamayan bireylerin ise elenmesi olarak tanımlanabilen bir arama ve sayısal optimizasyon yöntemidir [10]. Kuantumlu yapılara uygulandığında KGA olarak adlandırılan bu yöntem sonlu küresel potansiyel ile sınırlandırılmış, merkezinde hidrojen benzeri safsızlık olan kuantum nokta yapının Schrödinger denklemini çözmek için kullanıldı.

KGA yeniden oluşum (veya kopyalama), çaprazlama ve mutasyon olmak üzere üç temel süreç üzerine kurulmuştur. Yeniden oluşum sürecinde bireylerin hayatta kalma olasılıkları belirlenir. Hayatta kalma olasılığı yüksek olan bireyler bir sonraki nesle aktarılırken hayatta kalma olasılığı düşük olan bireyler ise elenir. Çaprazlama (Crossover) sürecinde biyolojide kullanılan doğal

çaprazlama işlemine benzer bir sürece tabi tutulur. Çaprazlama işlemi, yeniden oluşumda elde edilen bireyler üzerine uygulanır. Bu bireyler içinden rastgele seçilen iki birey üzerinden yürütülür. Bu iki bireyin genetik bilgileri rastgele bir noktadan kesilerek, birinci bireyin kesilen noktanın solunda kalan bilgiler ikinci bireyin kestiğimiz noktanın sağında kalan bilgilerle, birinci bireyin kesilen noktanın sağında kalan bilgiler ikinci bireyin kestiğimiz noktanın solunda kalan bilgilerle eşleştirilir. Böylece her iki bireyde birbirlerinin genetik bilgilerini taşımış olurlar. Mutasyon işlemi yerel minimumlardan kurtulmak için uygulanan bir süreçtir. Mutasyon işlemi nüfus içinden rastgele seçilen bir birey üzerinden gerçekleştirilir. Çaprazlama ve mutasyon süreçlerinin uygulanmasında bir gerçekleştirme olasılığı belirlenir. Çaprazlama sürecinde gerçekleştirme olasılığı nüfuzundaki çeşitliliği artırmak için yüksek seçilir. Mutasyon sürecinde gerçekleştirme olasılığı yanlış çözümlere gitmemek için düşük seçilir. Yani olasılık büyük seçilirse yakınsama güçleşir ve rastgelelik çok artar. Bu yöntem uygulanırken, problemin olası çözümlerini içeren başlangıç nüfusu bireyleri s atomik orbitalleri, farklı s tipi STO lardan oluşturuldu. Başlangıç nüfus sayısı 100 olarak alındı. Baz seti sayısı kuantum kuyusunun içerisindeki bölgede 7, dışında ise tek bir STO olacak şekilde seçildi. Başlangıç nüfuzundaki her bir birey normalize edilerek, aynı tip atomik orbitallerin dikleştirilmesinde Gram-Schmidt yöntemi kullanıldı. Normalize edilen başlangıç bireyleri kullanılarak her bir bireyin enerji beklenen değeri Ref. [11] de verilen yöntemle hesaplandı. Bu enerji değerleri üzerinden KGA yöntemi yürütüldü.

### Sonuç ve Tartışma

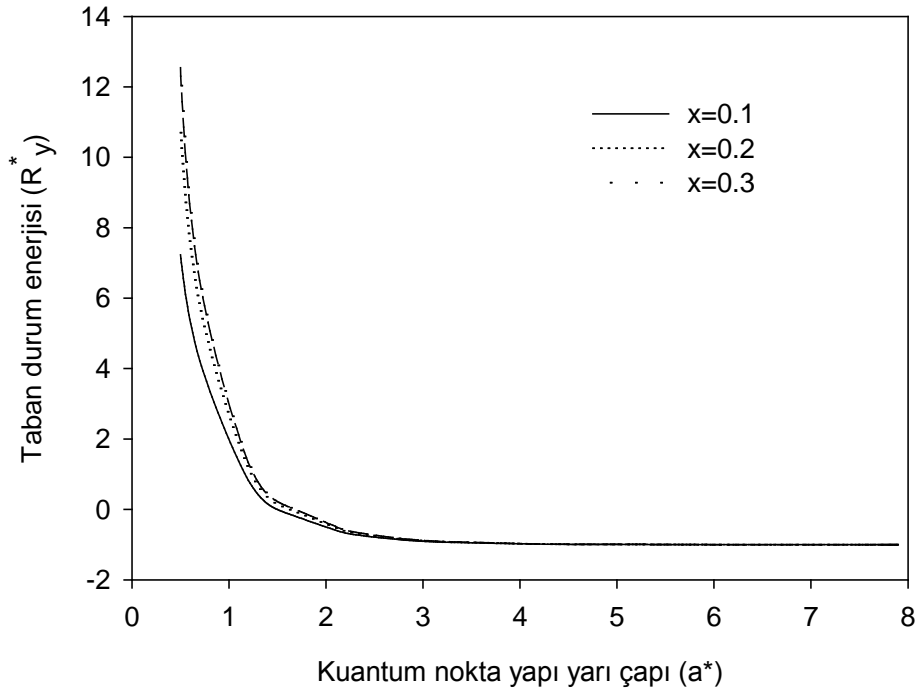
Bu çalışmada, sonlu küresel potansiyel ile sınırlandırılmış, merkezinde hidrojen benzeri safsızlık olan  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  yapısının taban durum enerjisi nokta yarıçapına ve katkılanma oranına bağlı olarak hesaplandı. Hesaplama atomik birimler kullanıldı. GaAs için etkin Bohr yarıçapı  $a^* = 100 \text{ \AA}$ , etkin Rydberg enerjisi  $R_y = 5.72 \text{ meV}$  dir. Malzeme parametreleri olarak kuyu içinde GaAs' in kuyu dışında ise AlGaAs' in parametreleri alındı. Bu materyal parametreleri  $m_{GaAs} = 0.0665m_0$ ,  $\epsilon_{GaAs} = 13.18$  ve  $m_{AlGaAs} = 0.0665 + 0.083x$ ,  $\epsilon_{AlGaAs} = 13.18 - 3.12x$  olarak alındı [12]. Burada  $m_0$  serbest elektron kütlesi ve x katkılanma oranıdır. Potansiyel engeli yüksekliği, GaAs ve AlGaAs enerji bant yapılarının birbirlerine göre durumunu düzenleyen katkılanma oranı x' e bağlı olarak  $V = 0.6(1.55x + 0.37x^2) \text{ eV}$  olarak ve katkılanma oranları ise 0.1, 0.2 ve 0.3 alındı. Kuantum noktanın yarıçapı taban durum için  $0.5a^*$  dan  $7.9a^*$  ya kadar seçildi. Merkezinde hidrojen tipi safsızlık bulunan bir elektronlu kuantum nokta yapısının baz fonksiyonu sayısı 7 iken elde edilen taban durum enerjisinin nokta yarıçapına ve katkılanma oranına göre değişimi Şekil 1 de verildi.

Nokta yapının bazı yarıçap değerleri için hesaplanan enerji değerleri Çizelge 1 de verilmiştir. Şekilden de görüleceği gibi katkılanma oranını artırmak, elektronun safsızlığa bağlanmasını değiştirmektedir ve elektron yaklaşık olarak taban durumda  $x=0.1$  için  $r=1.61a^*$  safsızlığa bağlanırken,  $x=0.2$  ve  $x=0.3$  için daha büyük yarıçaplarda safsızlığa bağlanmaktadır. Nokta yarıçapı büyüdükçe taban enerjisinin, hidrojen atomunun taban durum enerjisi olan -1 Rydberg değerine gittiği görülmektedir [14].

Kuantum nokta yapının küçük yarıçap değerlerinde katkılanma oranı kuantum nokta yapı üzerinde etkili olurken büyük yarıçap değerlerinde bu etki neredeyse yok denecek kadar az olmaktadır. Kuantum nokta yarıçapı küçüldükçe elektron kinetik enerjisi artmakta ve çok küçük değerleri için iyonize olmaktadır. Dolayısıyla yüksek enerjili parçacıkları nokta yapının içinde tutmak için potansiyel engelinin yüksek olması gerekmektedir. Ayrıca kuantum nokta yarıçapının küçük değerlerinde enerji seviyeleri arasındaki farkın arttığı, büyük değerlerinde ise bu farkın kaybolduğu görülmektedir. Bu da katkılanma oranının kuantum nokta yarıçapının küçük değerleri için önem kazandığını, yani büyük kuantum nokta yarıçaplarında sınırlandırıcı potansiyelin etkisinin neredeyse yok denecek kadar az olduğunu göstermektedir [14]. Elde edilen sonuçlar literatürle uyumlu olup [15-17], kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerinin incelenmesinde KGA metodunun oldukça başarılı olduğu söylenebilir

**Çizelge 1.** Merkezinde hidrojen benzeri safsızlık olan  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  kuantum nokta yapının farklı kuantum nokta yarıçapları için hesaplanan taban durum enerjileri.  $\sigma$  baz fonksiyonu sayısını,  $x$  ise katkılanma oranını göstermektedir.

Nokta yarıçapı ( $a^*$ )	Taban durumu (1s) enerjisi ( $R_y$ )		
	$\sigma = 7, x = 0.1$	$\sigma = 7, x = 0.2$	$\sigma = 7, x = 0.3$
0.5	7.231792	10.705020	12.545956
0.7	4.216982	5.748330	6.503356
1.2	0.823689	1.160480	1.340674
1.6	-0.112683	0.018209	0.086338
2.2	-0.671818	-0.625224	-0.594542
2.8	-0.866504	-0.850899	-0.837845
3.2	-0.928374	-0.914179	-0.910040
4.2	-0.983448	-0.981989	-0.981035
5.2	-0.995048	-0.993913	-0.989188
6.2	-0.999084	-0.998825	-0.998314
7.5	-0.999524	-0.999799	-0.999754
7.9	-0.999737	-0.999854	-0.999817



**Şekil 1.** Bir elektronlu  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  kuantum nokta yapısının taban durum enerjisinin kuantum nokta yarıçapına göre ve katkılanma oranına göre değişimi.

#### Kaynaklar

1. Ryzhii, V., The theory of quantum-dot infrared phototransistors, **Semiconductor Science and Technology**, 11, 759-765, 1996.
2. Levine, I. N., Quantum Chemistry, **Prentice-Hall, Inc.**, New Jersey, 2000.
3. Maksym, P.A., Chakraborty, t., Quantum dots in a magnetic field: role of electron-electron interactions, **American Physical Society**, 65, 108-111, 1990.
4. Kouwenhoven, L., Marcus, C., Quantum dots, **PhysicsWorld**, 11, 35-39, 1998.
5. Holland, J. H., Adaptation in Natural and Artificial Systems, University of Michigan, Ann Arbor, MI, 1975.
6. Chaudhury, P. And Bhattacharyya, S. P., Numerical solutions of the Schrödinger equation directly or perturbatively by a genetic algorithm: test cases, **Chemical Physics Letters**, 296, 51-60, 1998.
7. Grigorenko, I., Garcia, M. E., An evolutionary algorithm to calculate the ground state of a quantum systems, **Physica A**, 284, 131-139, 2000.
8. Şahin, M., Tomak, M., Self-consistent calculation of semiconductor heterojunctions using quantum genetic algorithm, **International Journal of Modern Physics B**, 16, 3883-3893, 2002.
9. Şafak, H., Şahin, M., Gülveren, B., Tomak, M., 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, 2003.
10. Coley, D. A., An Introduction to Genetic Algorithms for Scientists and Engineers, **World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.**, Singapore, 2001.
11. Yakar, Y., Özmen, A., Atav, Ü., Evaluation of two-center one- and two-electron integral over Slater type orbitals, **Chinese Journal of Chemistry**, 24, 603-608, 2006.
12. Adachi, S., GaAs and Relati Materials, **World Scientific**, Singapore, 1994.
13. Çakır, B., Özmen, A., Atav, Ü., Yüksel, H. And Yakar, Y., Investigation of Electronic structure of a spherical quantum dot using a Slater-Type orbitals and quantum genetic algorithm, **International Journal of Modern Physics C**, Vol.18, No 1, 61-72, 2007.
14. Çakır, B., Özmen, A., Atav, Ü., Yüksel, H. And Yakar, Y., Calculation of Electronic structure of a spherical quantum dot using a combination of quantum genetic algorithm and Hartree-Fock-Roothaan Method, **International Journal of Modern Physics C**, Vol.19, No 4, 599-609, 2008.
15. Marin, J. L., Cruz, S. A., On the use of direct variational methods to study confined quantum systems, **American Journal of Physics**, 59: 931-935, 1991.
16. Marin, J. L., Cruz, S. A, Enclosed quantum systems:use of direct variational method, **Jornal Physics B: At. Mol.Opt. Phys.**, 24:2899-2907., 1991.
17. Varshni, Y. P., Binding energy of a screened donor in a spherical quantum dot with a parabolic potential, **Superlattices and microstructures**, 29: 233-238, 2001.