

## Tek Elektronlu Kuantum Nokta Yapılarda Manyetik Alan Etkisinin Pertürbasyon Yöntemiyle İncelenmesi

Mustafa Doğan SARIKAYA<sup>1</sup>, BekirÇAKIR<sup>2</sup>, Ayhan ÖZMEN<sup>2</sup>, Yusuf YAKAR<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Selçuk Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, KONYA

<sup>2</sup> Selçuk Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, KONYA

<sup>3</sup> Aksaray Üniversitesi, Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, AKSARAY

e-mail:must1890@hotmail.com

**Öz:** Bu çalışmada dış manyetik alan içinde tek elektronlu kuantum nokta yapının elektronik özellikleri pertürbasyon yöntemiyle incelendi. Sonlu derinlikli potansiyelle sınırlandırılmış merkezinde hidrojen benzeri safsızlık olan tek elektronlu kuantum nokta yapı ele alındı. 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 Metodu (HFR) kullanılarak hesaplandı. Sistemin dalga fonksiyonları Slater Tipi Orbitalerin (STO) lineer kombinasyonu şeklinde kuruldu. Bu nokta yapının taban ve bazı uyarılmış enerji seviyelerine paramanyetik ve diamanyetik terimden gelen katkılar kuantum nokta yarıçapına bağlı olarak incelendi.

**Anahtar kelimeler:** Hartree-Fock-Roothaan Metot, Kuantum Nokta Yapı, Kuantum Genetik Algoritma, Pertürbasyon Yöntemi, Slater Tipi Orbital, Manyetik Alan.

## Investigation of Magnetic Field Effect on the Quantum Dot with One Electron by Perturbation Method

**Abstract:** In this study we investigated the effect of an external magnetic field on the electronic properties of one-electron quantum dot using perturbation method. One electron quantum dot structure with hydrogen-like impurities at the center confined by finite parabolic potential was considered. Possible solutions of the Schrödinger equation of this structure were determined by the Quantum Genetic Algorithm (QGA), and energy eigenvalues of the quantum dot were calculated by Hartree-Fock-Roothaan Method (HFR). The wave functions of the system were constructed by linear combination of Slater Type Orbitals (STO). The contribution due to the paramagnetism and diamagnetism terms to the ground and some excited energies states of this structure were investigated depending on the radius of this structures.

**Keywords:** Hartree-Fock Roothaan Method, Quantum Dot, Quantum Genetic Algorithm, Perturbation Method, Slater Type Orbital, Magnetic Field.

### 1. Giriş

Günümüz teknolojilerinde haberleşme ve iletişime olan yoğun talep ve farklı uygulamaların ivme kazandırdığı teorik ve deneysel araştırmalar, 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 artırılması yönündeki olumlu araştırmalar, yeni mikroelektronik ve optoelektronik cihazların geliştirilmesine ve üretilmesine zemin hazırlamıştır.

Yarı iletken aygıtlar üzerinde kuantum sınırlandırmasının etkileri ile ilgili

tartışmalar 1950'li yıllarda başlamıştır. Bir potansiyel kuyu içerisinde hapsedilmiş elektronların klasik olarak davranamayacakları ve bu elektronların enerji seviyelerinin sınırlandırmanın olduğu boyutta kesikli değerler alacağı ileri sürülmüştür (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). 250 nm kenar uzunluğu olan kare biçiminde bir geometrik yapıya sahip ilk kuantum nokta yapının üretilmesiyle (Reed ve ark., 1986) daha düşük boyutta (30-45 nm) ve farklı geometrik (kübik, elipsoid, küresel ve piramit) yapıya sahip kuantum nokta yapılar üretilmeye başlanmıştır (Cibert ve ark., 1986; Temkin ve ark., 1987).

Helyum ve helyuma benzeyen kuantum nokta yapılarda iyonizasyon enerjisi ve bazı uyarılmış seviyelerin enerjileri hesaplanmıştır (Yakar ve ark., 2011). Parabolik potansiyel ile sınırlandırılmış, içinde safsızlık bulunduran

küresel bir kuantum nokta yapıda deşiklerin kırılma indisleri ve soğurma katsayıları hesaplanmıştır (Çakır ve ark., 2012). Tek elektronlu küresel kuantum nokta yapıların lineer ve lineer olmayan optiksel özellikleri ve rölativistik düzeltme terimleri hesaplanmıştır (Çakır ve ark., 2013). İki elektronlu sonsuz parabolik küresel kuantum nokta yapının, taban ve bazı uyarılmış seviye enerjilerinin kuantum nokta yarıçapına göre değişimi hesaplanmıştır (Çakır ve ark., 2015). Sonsuz potansiyelli küresel kuantum nokta yapısının çizgisel ve çizgisel olmayan soğurma katsayıları hesaplanmıştır (Yakar ve ark., 2015a).

Tek elektronlu ya da çok elektronlu kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerini incelemek için çeşitli yöntemler, araştırmacılar tarafından yaygın olarak kullanılmaktadır. Bunlardan bazıları, varyasyon yöntemi, pertürbasyon yöntemi, matris köşegenleştirme yöntemi, yoğunluk fonksiyonel teorisi, Hartree-Fock yöntemi gibi tekniklerdir. 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 (Venugopal ve Narendran, 1992; Homaifar ve ark., 1994; Şahin ve ark., 2000; Castro ve ark., 2004; Kulkarni ve ark., 2004; Çakır ve ark., 2006.; Çakır, 2007; Çakır ve ark., 2007; Yakar ve ark., 2007; Yakar ve ark., 2010a; Yakar ve ark., 2010b; 2011; Çakır ve ark., 2012; 2013; Yakar ve ark., 2013a; Yakar ve ark., 2013b; Çakır ve ark., 2015; Yakar ve ark., 2015b; 2015a). Bu tür kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerini dış manyetik alan varlığında inceleyen birçok çalışma vardır (Halonen ve ark., 1992; Fal'ko ve Efetov, 1994; Nomura ve ark., 1994; Oaknin ve ark., 1994; Wojs ve Hawrylak, 1996; Dineykan ve Nazmitdinov, 1997). Manyetik alanın etkisinde GaN/AlGaN kuantum nokta yapısında bir hidrojenik örneğin bağlanma enerjileri, tek parçacık etkin kütle yaklaşımı altında varyasyonel yöntemle hesaplanmıştır (Joseph Sharkey ve ark., 2010).

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 etkisindeki bir kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumların paramanyetik terimi de içine katarak enerji öz değerlerini ve dalga fonksiyonlarını KGA tekniğini ve HFR yöntemini kullanarak hesapladık. Bu enerji öz değerleri ve dalga fonksiyonları kullanılarak diamanyetik terimin enerji seviyelerine getirdiği katkıları pertürbasyon yöntemiyle inceledik.

## 2. Materyal ve Metot

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

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

biçiminde yazılır. Burada  $m^*$ ,  $\vec{p}$  ve  $e$  sırasıyla elektronun etkin kütlesi, çizgisel momentumu ve yüküdür.  $c$  ışık hızı,  $\vec{A}$  vektör potansiyelini göstermektedir, öyle ki  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ 'dir.  $\epsilon$  ortamın dielektrik katsayısı ve  $\vec{r}$  elektronun safsızlığa göre yer vektörüdür.  $V(\vec{r})$  sınırlandırıcı potansiyel olup,

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

biçiminde alınmıştır. Düzgün bir manyetik alan için vektör potansiyeli  $\vec{A}(r) = \frac{1}{2} \vec{B} \times \vec{r}$ 'dir.

Çizgisel momentum  $\vec{p}$ 'nin operatörü  $i\hbar \vec{\nabla}$  olduğundan ve manyetik alan z yönünde  $\vec{B} = B_0 \hat{k}$  seçilirse, Hamiltoniyen ifadesi,

$$H = -\hbar^2 \frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\epsilon r} - \frac{e}{2m^* c} B_0 L_z + \frac{e^2}{8m^* c^2} B_0^2 \sin^2 \theta + V(r) \quad (3)$$

olur. Burada eşitliğin sağındaki üçüncü terim paramagnetik, dördüncü terim ise diyamagnetik terime karşılık gelir. Denk. (3) ifadesi,

$$H = H_0 + H' \quad (4)$$

şeklinde yazılır. Burada  $H_0$  pertürbe olmamış Hamiltoniyen,  $H'$  pertürbe Hamiltoniyeni,

$$H_0 = -\hbar^2 \frac{\nabla^2}{2m^*} - \frac{e^2}{\epsilon r} - \frac{e}{2m^* c} B_0 L_z + V(r) \quad (5)$$

ve

$$H' = \frac{e^2}{8m^* c^2} B_0^2 r^2 \sin^2 \theta \quad (6)$$

olur. Sistemin Schrödinger denklemi,

$$H\psi = E\psi \quad (7)$$

olup, pertürbe olmamış Hamiltoniyen,

$$H_0\psi^{(0)} = E\psi^{(0)} \quad (8)$$

kısmı kolayca çözülebilir. Burada  $\psi^{(0)}$  tek elektron spin orbitalleri olup,  $\phi$  uzaysal kısmı ile temsil edilirse HFR yaklaşımında STO'nun lineer kombinasyonu şeklinde aşağıdaki gibi yazılır.

$$\phi_p = \sum_{k=1}^{\sigma} c_{pk} \chi_k(\zeta_k, r\theta\phi) \quad (8)$$

olur. Burada  $\chi_k$ ,

$$\chi_{n_i \ell_i m_i}(\zeta, r\theta\phi) = r^{n-1} e^{-\zeta_i r} Y_{\ell_i}^{m_i}(\theta, \phi) \quad (9)$$

dir.  $\chi_k$  k. STO'dur.  $k \longrightarrow n_i \ell_i m_i$  STO için kuantum sayılarını,  $\sigma$  baz seti sayısını ve  $c_{pk}$  orbitallerin lineer katsayılarının toplamını ifade etmektedir.  $H_0$  pertürbe olmamış Hamiltoniyenin beklenen değeri, Den. (3), Denk (8) ve Denk. (9) ifadeleri kullanılarak,

$$\begin{aligned}
 \langle \psi^{(0)} | H_0 | \psi^{(0)} \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_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}^{r < R}(\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_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}^{r > R}(\zeta_i, \zeta_j) - \frac{e^{-(\zeta_i + \zeta_j)R} R^{n_i + n_j}}{n_i + n_j} \right] + \\
 & \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\{ \frac{[\ell_j(\ell_j + 1) - n_j(n_j - 1)](\zeta_i + \zeta_j)^2}{2(n_i + n_j)(n_i + n_j - 1)} \times S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}^{r < R}(\zeta_i, \zeta_j) + \right. \\
 & \left. \left[ \frac{[\ell_j(\ell_j + 1) - n_j(n_j - 1)] 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] + \right. \\
 & \left. \frac{n_j \zeta_j (\zeta_i + \zeta_j)}{n_i + n_j} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}^{r < R}(\zeta_i, \zeta_j) + \frac{n_j \zeta_j}{n_i + n_j} e^{-(\zeta_i + \zeta_j)R} R^{n_i + n_j} - \right. \\
 & \left. \frac{(\zeta_i)^2}{2} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}^{r < R}(\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\{ \frac{[\ell_j(\ell_j + 1) - n_j(n_j - 1)](\zeta_i + \zeta_j)^2}{2(n_i + n_j)(n_i + n_j - 1)} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}^{r > R}(\zeta_i, \zeta_j) + \right. \\
 & \left. \frac{[\ell_j(\ell_j + 1) - n_j(n_j - 1)] e^{-(\zeta_i + \zeta_j)R} R^{n_i + n_j - 1}}{2(n_i + n_j - 1)} \left( -1 - \frac{(\zeta_i + \zeta_j)R}{n_i + n_j} \right) + \right. \\
 & \left. \frac{n_j \zeta_j (\zeta_i + \zeta_j)}{n_i + n_j} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}^{r > R}(\zeta_i, \zeta_j) - \frac{n_j \zeta_j}{n_i + n_j} e^{-(\zeta_i + \zeta_j)R} R^{n_i + n_j} - \right. \\
 & \left. \frac{(\zeta_i)^2}{2} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}^{r > R}(\zeta_i, \zeta_j) \right\} - \sum_{i=1}^{\sigma} \sum_{j=1}^{\sigma} c_{pn_i \ell_i m_i}^* c_{pn_j \ell_j m_j} \times \\
 & \left\{ \frac{B_0}{2 \times 137 m^*} m_{\ell} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}^{r < R}(\zeta_i, \zeta_j) \right\} - \sum_{i=1}^{\beta} \sum_{j=1}^{\beta} d_{pn_i \ell_i m_i}^* d_{pn_j \ell_j m_j} \times \\
 & \left[ \frac{B_0}{2 \times 137 m^*} m_{\ell} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}^{r > R}(\zeta_i, \zeta_j) \right] + \\
 & \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_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}^{r < R}(\zeta_i, \zeta_j) - \right. \\
 & \left. \frac{e^{-R(\zeta_i + \zeta_j)} R^{n_i + n_j + 1} [n_i + n_j + 2 + R(\zeta_i + \zeta_j)]}{(\zeta_i + \zeta_j)^2} \right\} +
 \end{aligned}$$

$$\sum_{i=1}^{\beta} \sum_{j=1}^{\beta} d_{pn_i \ell_i m_i}^* d_{pn_j \ell_j m_j} \frac{\alpha}{2} \left\{ \frac{(n_i + n_j + 2)(n_i + n_j + 1)}{(\zeta_i + \zeta_j)^2} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}^{r>R}(\zeta_i, \zeta_j) - \frac{e^{-R(\zeta_i + \zeta_j)} R^{n_i + n_j + 1} [n_i + n_j + 2 + R(\zeta_i + \zeta_j)]}{(\zeta_i + \zeta_j)^2} \right\} \quad (10)$$

elde edilebilir. Pertürbasyon enerjisi  $\langle \psi^{(0)} | H' | \psi^{(0)} \rangle$  ile hesaplanabilir. Burada küreselharmoninin çarpımı, Clebsch-Gordan katsayısı cinsinden,

$$Y_{\ell_i m_i}^*(\theta, \phi) Y_{\ell_j m_j}(\theta, \phi) = \sum_{L=\max(|\ell_j - \ell_i|, |m_j - m_i|)}^{\ell_i + \ell_j} \langle \ell_i m_i | \ell_j m_j | L m_j - m_i \rangle Y_{L, m_j - m_i}^*(\theta, \phi) \quad (11)$$

(Arfken, 1985) ifadesi ile,

$$\sin^2 \theta = \frac{2}{3} - \sqrt{\frac{16\pi}{45}} Y_{20} \quad (12)$$

ifadesi kullanılarak  $H'$  'nün beklenen değeri,

$$\langle \psi | H' | \psi \rangle = \frac{e^2 B_0^2}{8m^* c^2} \left\{ \sum_{i=1}^{\sigma} \sum_{j=1}^{\sigma} c_{pn_i \ell_i m_i}^* c_{pn_j \ell_j m_j} \int_0^r r^{n_i + n_j + 2} e^{-(\zeta_i + \zeta_j)r} dr \int_{\Omega} Y_{\ell_j m_j}^*(\theta\phi) \left( \frac{2}{3} - \sqrt{\frac{16\pi}{45}} Y_{20} \right) Y_{\ell_i m_i}(\theta\phi) d\Omega + \sum_{i=1}^{\beta} \sum_{j=1}^{\beta} d_{pn_i \ell_i m_i}^* d_{pn_j \ell_j m_j} \int_r^R r^{n_i + n_j + 2} e^{-(\zeta_i + \zeta_j)r} dr \int_{\Omega} Y_{\ell_j m_j}^*(\theta\phi) \left( \frac{2}{3} - \sqrt{\frac{16\pi}{45}} Y_{20} \right) Y_{\ell_i m_i}(\theta\phi) d\Omega \right\} \quad (13)$$

olur. Tam olmayan gama fonksiyonları kullanılarak pertürbasyon teriminin beklenen değeri atomik birimlerde,

$$\langle \psi | H' | \psi \rangle = \frac{B_0^2}{137^2 \times 8m^*} \sum_{i=1}^{\sigma} \sum_{j=1}^{\sigma} c_{pn_i \ell_i m_i}^* c_{pn_j \ell_j m_j} S_{n_i \ell_i m_i, n_j + 2 \ell_j m_j}^{r<R}(\zeta_i, \zeta_j) \times \left( \frac{2}{3} \delta_{\ell_i \ell_j} \delta_{m_i m_j} - \sqrt{\frac{16\pi}{45}} \sum_{L=\max(|\ell_j - \ell_i|, |m_j - m_i|)}^{\ell_i + \ell_j} \langle \ell_j m_j | \ell_i m_i | L m_j - m_i \rangle \delta_{L2} \delta_{m_j - m_i, 0} \right) + \frac{B_0^2}{137^2 \times 8m^*} \sum_{i=1}^{\beta} \sum_{j=1}^{\beta} d_{pn_i \ell_i m_i}^* d_{pn_j \ell_j m_j} S_{n_i \ell_i m_i, n_j + 2 \ell_j m_j}^{r>R}(\zeta_i, \zeta_j) \times \left( \frac{2}{3} \delta_{\ell_i \ell_j} \delta_{m_i m_j} - \sqrt{\frac{16\pi}{45}} \sum_{L=\max(|\ell_j - \ell_i|, |m_j - m_i|)}^{\ell_i + \ell_j} \langle \ell_j m_j | \ell_i m_i | L m_j - m_i \rangle \delta_{L2} \delta_{m_j - m_i, 0} \right) \quad (14)$$

şeklinde bulunabilir.

### 3. Araştırma Sonuçları ve Tartışma

Merkezinde safsızlık bulunan sonlu potansiyelle sınırlandırılmış tek elektronlu ve parabolik  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  yapısı için etkin Bohr yarıçapı  $a^* = 100 \text{ \AA}$ , etkin Rydberg enerjisi  $R_y = 5.72 \text{ meV}$  alındı. Malzeme parametreleri olarak kuyu içinde GaAs'ın kuyu dışında ise  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 'ın parametreleri alındı. Bu materyal parametreleri  $m_{\text{GaAs}} = 0.0665m_0$ ,  $\varepsilon_{\text{GaAs}} = 13.18$  ve  $m_{\text{AlGaAs}} = 0.0665 + 0.0835x$ ,  $\varepsilon_{\text{AlGaAs}} = 13.18 - 3.12x$  olarak alındı (Shunji A. ve ark., 1994). Burada  $m_0$  serbest elektron kütlesi ve  $x$  stokiyometri oranıdır. Potansiyel engeli yüksekliği ise GaAs ve  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  enerji bant yapılarını birbirlerine göre durumunu düzenleyen stokiyometri oranı  $x$  bağlı olarak  $V = 0.6(1.155x + 0.37x^2) \text{ eV}$  alınmıştır. Ayrıca basitlik olması bakımından GaAs ve  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ 'ın içerisinde elektronların etkin külesini sırasıyla  $m_1$  ve  $m_2$ , dielektrik sabitlerini de  $\varepsilon_1$  ve  $\varepsilon_2$  aldık.

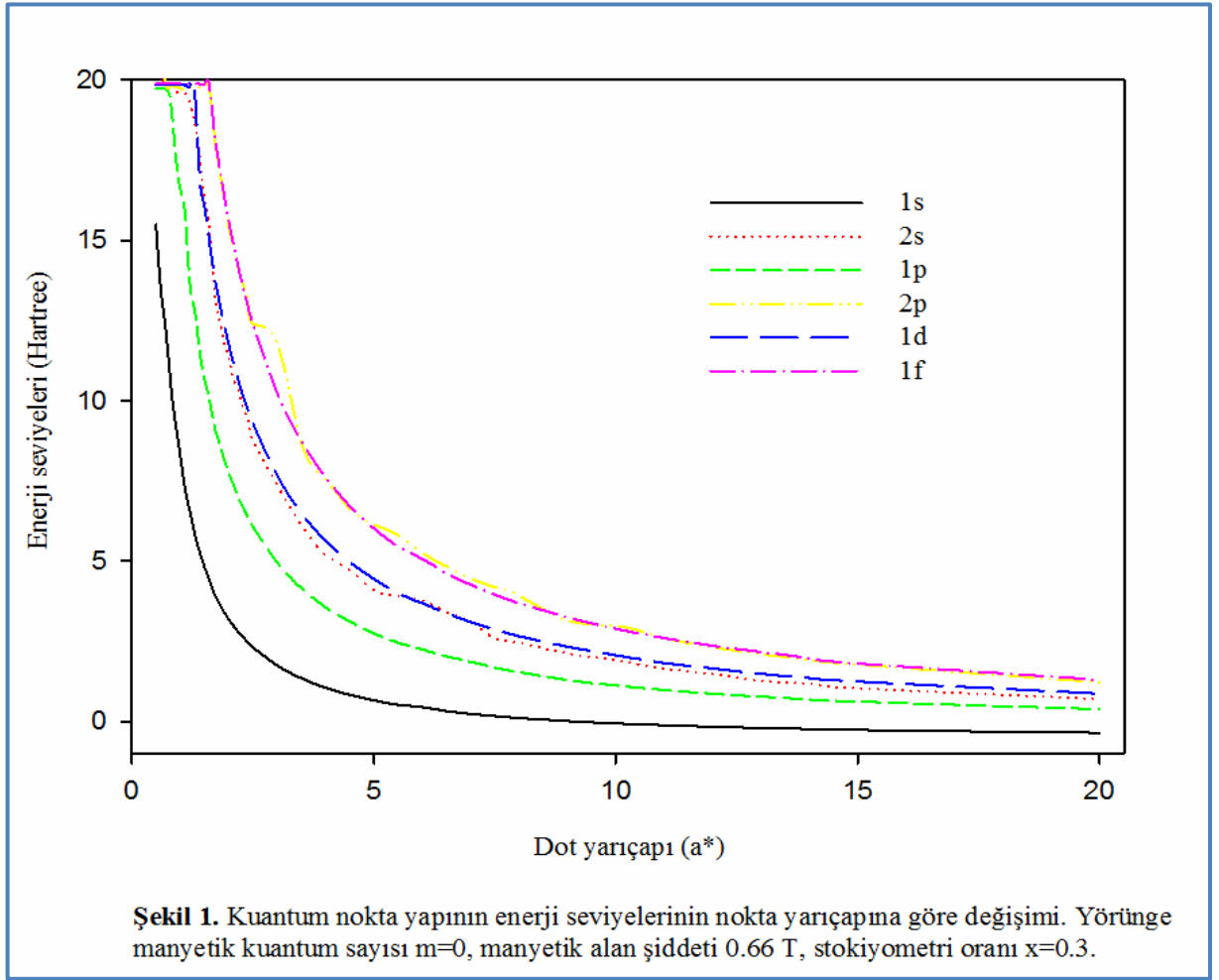
Sınırdaki bariyer yüksekliği ile parabolik potansiyel arasındaki sürekliliği sağlamak için parabolik potansiyel parametresi  $\alpha = \frac{2V_0}{m^* r^2}$  alındı. Hesaplamalarımızda stokiyometri (katkılanma) oranı  $x$ 'in 0.3 değerleri alındı.

**Tablo 1.** Yörünge manyetik kuantum sayısı 0, manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokiyometri oranı 0.3 olduğu durumda kuantum nokta yapının enerji seviyelerinin nokta yarıçapına göre verilmiş bazı değerleri. Enerjiler Hartree, etkin Bohr yarıçapı  $a^*$  cinsinden verilmiştir.

R ( $a^*$ )	1s Enerjisi (Hartree)	2s Enerjisi (Hartree)	1p Enerjisi (Hartree)	2p Enerjisi (Hartree)	1d Enerjisi (Hartree)	1f Enerjisi (Hartree)
0.5	15.505332158	21.21134929758	19.7329967572	21.42336339555	19.842113991917	19.880591294332
1	8.3363518073	19.62842135684	16.6169411276	19.73870766559	19.842178070526	19.880591727501
1.5	4.8256606945	16.28303929242	10.7017448380	19.78109598142	16.087362793444	19.880598058789
2	3.2014122832	11.3349799360	7.756452961368	15.44304271386	11.799511641711	15.619757644701
3.5	1.3535505169	6.12938161730	4.159664220375	8.688409826084	6.5026460533587	8.7478640191744
5	0.66182330553	4.0854705100	2.750583508513	6.139854431314	4.4445160952802	6.0190328148201
8	0.1100197888	2.45379518897	1.537928304311	3.921543363000	2.6569829002983	3.6891352850302
10	-0.0569996197	1.90479233971	1.118657261498	2.988992607317	2.0605154960386	2.8891950562311
15	-0.2618156210	1.0333760758	0.615918177781	1.771114250934	1.2432692237493	1.8039207730678
20	-0.3501442614	0.702024301421	0.378449795347	1.215186367527	0.8654786606102	1.2974227392392

Tablo 1'de ve Şekil 1'de yörünge manyetik kuantum sayısının  $m=0$  değeri için, manyetik alan şiddetinin 0.66 T ve stokiyometri oranının 0.3 için pertürbe olmamış  $H_0$  teriminden gelen enerjinin kuantum nokta yarıçapına göre sırasıyla değerleri ve değişimi verilmiştir. Bu grafik ve tablodan görüldüğü gibi kuantum nokta yarıçapı arttığında, enerji değerleri hızlı bir şekilde düşerek sabit değere gidiyor ve enerji seviyeleri birbirine yaklaşmaktadır. Elektronun safsızlığa bağlı olduğu durum enerjisinin negatif olduğu duruma karşılık gelir ve Tablo 1'den taban durum 1s de safsızlığa 10  $a^*$  da bağlandığı görülmektedir. Halbuki manyetik alan yokluğunda taban durumunda elektron safsızlığı 2  $a^*$ 'da

bağlanmaktadır (Çakır ve ark., 2008). Manyetik alanın varlığı elektronun safsızlığa bağlanmasını zorlaştırmaktadır.

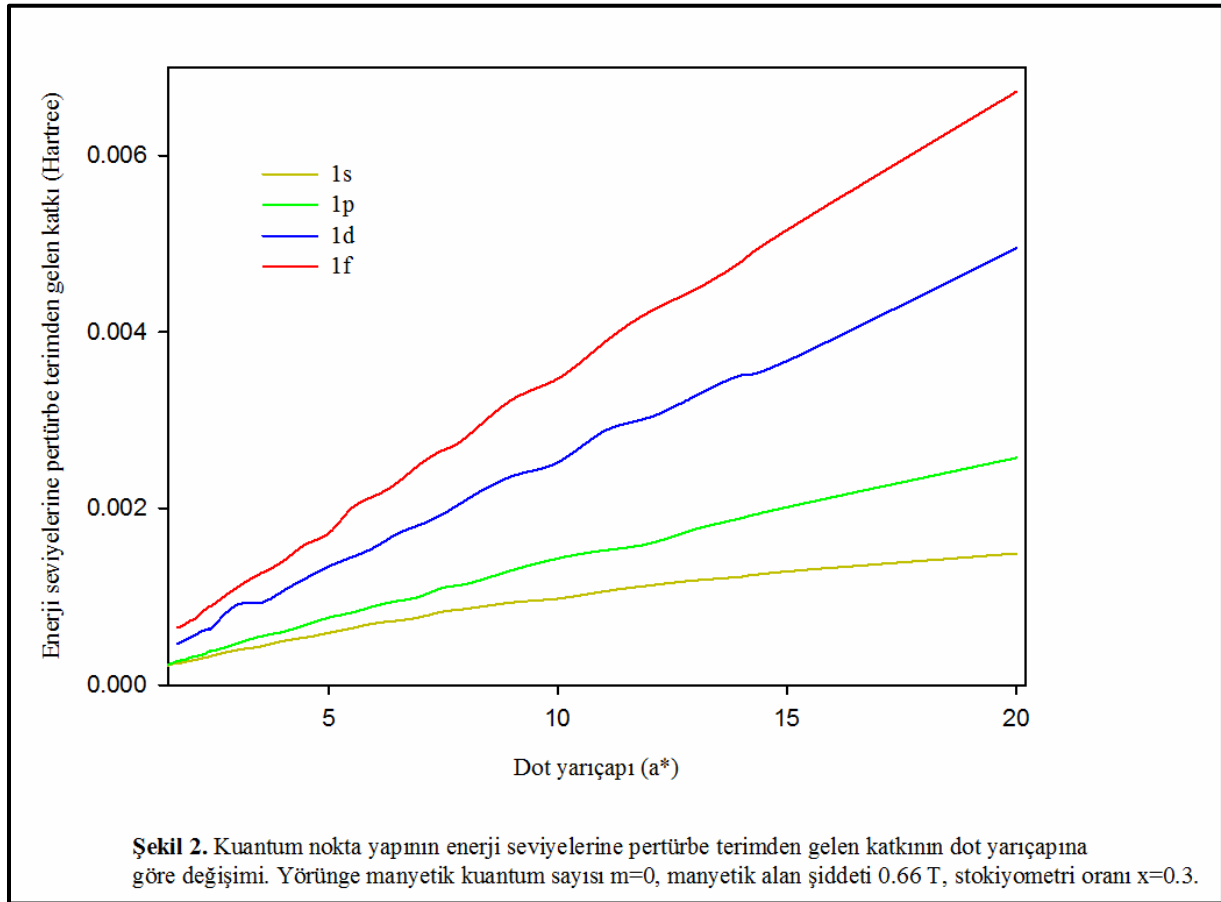


Tablo 2’de ve Şekil 2’de  $m=0$  değeri için  $\ell$  farklı orbitallerinde, manyetik alan şiddetinin 0.66 T ve stokiyometri oranını 0.3 değerleri için, pertürbe diamanyetik terimden gelen katkının kuantum nokta yarıçapına göre sırasıyla değerleri ve değişimi verilmiştir. Kuantum nokta yapı yarıçapı arttıkça, orbitallere gelen katkı enerjileri de lineer bir şekilde artmaktadır. Açıl momentum kuantum sayısı ( $\ell$ ) küçük olan enerji seviyelerine az katkı gelirken, büyük olan seviyelere katkı daha fazla gelmektedir. Ayrıca manyetik alanın enerji üzerine etkisi, büyük dot yarıçaplarında, özellikle dış orbitallerde daha çok hissedilmektedir. Bunun sebebi de, dış manyetik alanın dış orbitalleri daha fazla etkilerken, perdelemeden dolayı iç orbitalleri daha az etkilemesidir.



**Tablo 2.** Yörünge manyetik kuantum sayısı  $m=0$  için, manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokiyometri oranı 0.3 olduğunda kuantum nokta yapının bazı pertürbe enerji seviyelerine pertürbe terimden gelen katkının kuantum nokta yarıçapına göre değerleri. Enerjiler Hartree, etkin Bohr yarıçapı  $a^*$  cinsinden verilmiştir.

R ( $a^*$ )	1s Enerji (Hartree)	1p Enerji (Hartree)	1d Enerji (Hartree)	1f Enerji (Hartree)
0.5	1.4070235594403e-4	7.01846801606985e-3	0.034674291682493	0.10168925531207
1	1.9044415218794e-4	1.17025124485916e-3	0.03465021471450	0.10171113132924
1.5	2.181759912942e-4	2.27671960015318e-4	6.02245146549929e-4	0.10172920825488
2	2.7273116884941e-4	3.12288192031283e-4	5.43704083934607e-4	7.2871751449437e-4
3.5	4.3398732136183e-4	5.46738321756022e-4	9.27072451322728e-4	1.256272764376e-3
5	5.8971240802699e-4	7.62100803274625e-4	1.34135597371743e-3	1.7149756186860e-3
8	8.618395304865e-4	1.14291874768792e-3	2.09590255434473e-3	2.8040963504368e-3
10	9.7719060669146e-4	1.43291921846198e-3	2.51924493772001e-3	3.4704782690249e-3
15	1.2854606793204e-3	2.01492159664711e-3	3.67186250717274e-3	5.1560305267468e-3
20	1.4890239538214e-3	2.5730529885493e-3	4.94976095187809e-3	6.7228503110717e-3



Birinci uyarılmış 1p seviyesine paramanyetik terimden gelen katkıdan dolayı oluşan yarıлма Şekil 3'te, hem paramanyetik hem diamanyetik terimden gelen katkılardan oluşan yarıлма Şekil 4'te dot yarıçapına göre verilmiştir. Bu seviyenin pertürbe olmamış enerji değerleri Tablo 3'te, pertürbe olmuş enerji değerleri Tablo 4'te verilmiştir. Burada yörünge manyetik kuantum sayısı  $m_\ell = \pm 1, 0$ , stokiyometri oranı 0.3'tür. Bu şekiller ve tablolardan

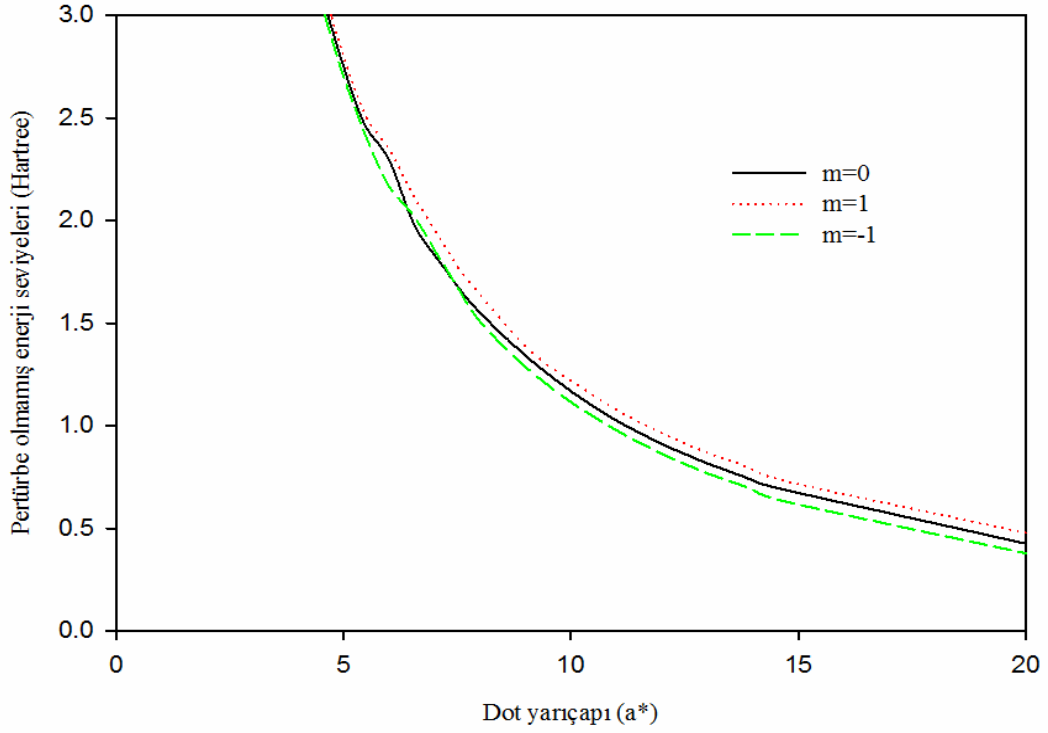
görüreceği gibi  $1p$  seviyesinin paramanyetik terimden dolayı üçe yarıldığı, diamanyetik terimlerin ise bu seviyelerin hepsini çok az miktarda yukarı kaydıracağı gözlemlendi.

**Tablo 3.**  $1p$  seviyesi için manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokiyometri oranı 0.3 olduğunda enerji seviyelerine paramanyetik terimden gelen katkıdaki yarılımların kuantum nokta yarıçapına göre değerleri. Enerjiler Hartree, etkin Bohr yarıçapı  $a^*$  cinsinden verilmiştir.

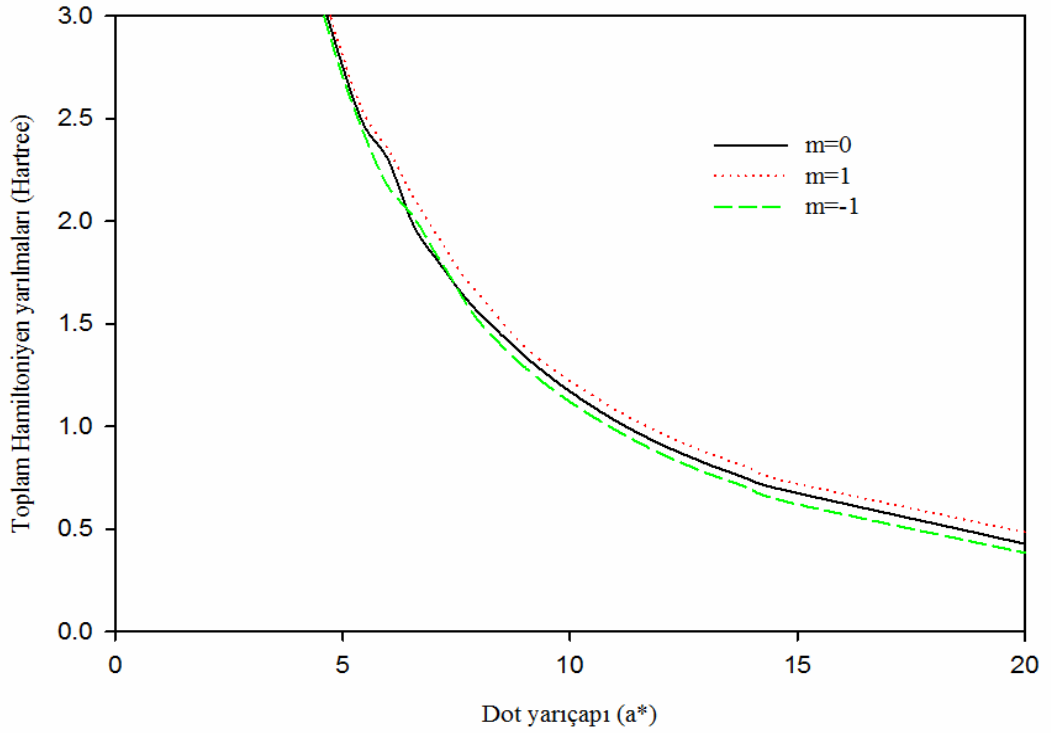
R ( $a^*$ )	$E_0, m=-1$	$E_0, m=0$	$E_0, m=1$
0.5	19.6830586001265	19.7329967572783	19.7830586001265
1	16.0891493219459	16.6169411276448	16.1891493219459
1.5	10.5978476530531	10.7820056983401	10.6978476530531
2	7.725078590776	7.7564529613684	7.825078590776
3.5	4.1186387469269	4.1596642203756	4.2186387469269
5	2.6996548396589	2.7505835085134	2.7996548396589
8	1.5069665976934	1.5502597615843	1.6379283043114
10	1.1152028194531	1.1686572614986	1.2186572614985
15	0.6159181777814	0.6727913108991001	0.7159181777814
20	0.3784497953473	0.4259175370186	0.4784497953473

**Tablo 4.**  $1p$  seviyesi için manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokiyometri oranı 0.3 iken enerji seviyelerine hem paramanyetik terimden gelen yarılımların hem de diamanyetik terimden gelen katkıların sonucu enerjilerinin bazı kuantum nokta yarıçapına göre değerleri. Enerjiler Hartree, etkin Bohr yarıçapı  $a^*$  cinsinden verilmiştir.

R ( $a^*$ )	$E_0 + \Delta E, m=-1$	$E_0 + \Delta E, m=0$	$E_0 + \Delta E, m=1$
0.5	19.69688092685731	19.74001522529437	19.7968809268573
1	16.09148982443562	16.61811137888966	16.1895289970528
1.5	10.59830299697313	10.78223337030002	10.69835146859955
2	7.72574089482432	7.756765249560431	7.825666688148764
3.5	4.119736577801962	4.160210958697356	4.219721492125884
5	2.701282638202961	2.751345609316675	2.801138714983143
8	1.509514089612165	1.551402680331988	1.640375796230165
10	1.11812170110702	1.170090180717062	1.221422767878508
15	0.6199465401272018	0.6748062324957471	0.7199465401272017
20	0.3836213903039842	0.4284905900071494	0.4836213903039842



**Şekil 3.** 1p seviyesine paramanyetik terimden dolayı oluşan yarılmanın dot yarıçapına göre değişimi. (yörünge manyetik kuantum sayısı  $m=0,\pm 1$ , manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokiyometri oranı  $x=0.3$ )



**Şekil 4.** 1p seviyesine toplam paramanyetik terimden gelen yarılmanın ve diamanyetik terimden bütün seviyelere gelen pozitif katkılardan dolayı oluşan yarılmanın dot yarıçapına göre değişimi. (yörünge manyetik kuantum sayısı  $m=0,\pm 1$ , manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokiyometri oranı  $x=0.3$ )

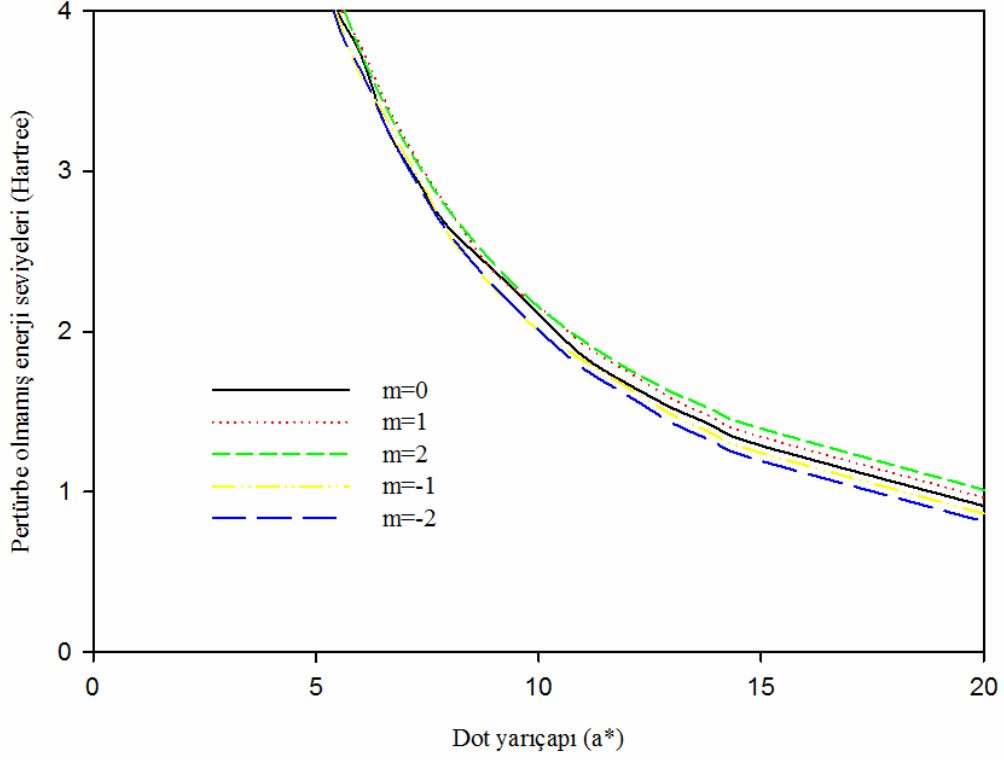
Tablo 5'te ve Şekil 5'te ikinci uyarılmış seviye olan 1d seviyesine paramanyetik terimden gelen yarılımların dot yarıçapına göre sırasıyla değerleri ve değişimi verilmiştir. Tablo 6'da ve Şekil 6'da ise manyetik alandan gelen toplam katkıların (hem paramanyetik hem diamanyetik terimden gelen katkı) bazı dot yarıçaplarına göre sırasıyla değerleri ve değişimi verilmiştir. 1d seviyesi paramanyetik terimden dolayı yörünge manyetik kuantum sayısı  $m_\ell$ 'nin alacağı değer olan  $2\ell + 1$  kere yarılmaya uğramıştır. Diamanyetik terim ise bu seviyelerin enerjilerini çok az yukarı kaydırmıştır.

**Tablo 5.** 1d seviyesi için manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokiyometri oranı 0.3 iken enerji seviyelerine paramanyetik terimden gelen yarılımların enerjilerinin bazı kuantum nokta yarıçaplarındaki değerleri. Enerjiler Hartree, etkin Bohr yarıçapı  $a^*$  cinsinden verilmiştir.

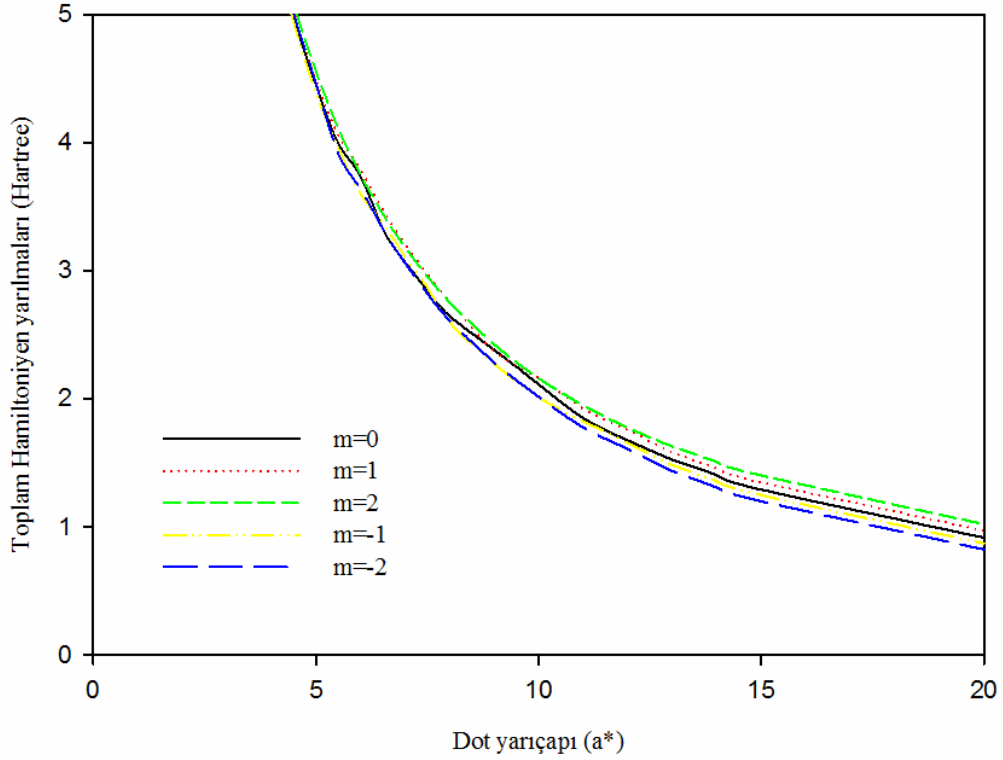
R ( $a^*$ )	$E_0, m=-1$	$E_0, m=-2$	$E_0, m=0$	$E_0, m=1$	$E_0, m=2$
0.5	19.79211423567	19.74211479755	19.842113991917	19.89211423567	19.94211479755
1	19.79217092540	19.742178070526	19.842178070526	19.89217092540	19.94217807052
1.5	15.84288793226	15.845635546199	15.945635546199	15.94288793226	16.04563554619
2	11.72405175961	11.681858656367	11.799511641711	11.82405175961	11.87405175961
3.5	6.46612696861	6.566208223657	6.502646053358	6.56612696861	6.61612696861
5	4.37728589495	4.45474517684	4.444516095280	4.47728589495	4.55025290132
8	2.59457584896	2.606982900298	2.642833560004	2.75698290029	2.75016333612
10	2.00846288825	2.010515496038	2.110515496038	2.16051549603	2.15460068324
15	1.24326922374	1.193269223749	1.28856986291	1.34326922374	1.39523845139
20	0.86547866061	0.815478660610	0.91247017765	0.96547866061	1.01281868069

**Tablo 6.** 1d seviyesi için manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokiyometri oranı 0.3 iken enerji seviyelerine hem paramanyetik terimden gelen yarılımların hem de diamanyetik terimden gelen katkıların sonucu enerjilerinin bazı kuantum nokta yarıçapına göre değerleri. Enerjiler Hartree, etkin Bohr yarıçapı  $a^*$  cinsinden verilmiştir.

R ( $a^*$ )	$E_0 + \Delta E, m=-1$	$E_0 + \Delta E, m=-2$	$E_0 + \Delta E, m=0$	$E_0 + \Delta E, m=1$	$E_0 + \Delta E, m=2$
0.5	19.8337258376	19.8045322005	19.8767882836	19.93372583765	20.00453220052
1	19.8337511830	19.8045484570	19.87682828524	19.93384682086	20.00454845701
1.5	15.8436106264	15.8467195874	15.94623779134	15.94339716053	16.04671958746
2	11.7247270110	11.6828264381	11.80005534579	11.82472269916	11.87505816893
3.5	6.46731025858	6.56798315860	6.503573125810	6.567205096314	6.617744160162
5	4.37892836532	4.45720888240	4.445857451253	4.478888014565	4.552628153121
8	2.59720539492	2.61092721923	2.644929462558	2.759612446256	2.753843841674
10	2.01170141907	2.01521736211	2.113034740976	2.163754026859	2.159196188427
15	1.24780653379	1.20007518881	1.2922417254191	1.347806533790	1.402009929010
20	0.871298704253	0.82420872607	0.9174199386028	0.971298704253	1.021499575165



**Şekil 5.** 1d seviyesine paramanyetik terimden dolayı oluşan yarılımların dot yarıçapına göre değişimi. (yörünge manyetik kuantum sayısı  $m=0,\pm 1,\pm 2$ , manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokiyometri oranı  $x=0.3$ )



**Şekil 6.** 1d seviyesine toplam paramanyetik terimden gelen yarılımların ve diamanyetik terimden bütün seviyelere gelen pozitif katkılardan dolayı oluşan yarılımların dot yarıçapına göre değişimi. (yörünge manyetik kuantum sayısı  $m=0,\pm 1,\pm 2$ , manyetik alan şiddeti 0.66 T, stokiyometri oranı  $x=0.3$ )

Sonuç olarak dış manyetik alandan dolayı paramanyetik terim herhangi bir enerji seviyesini  $2\ell + 1$  kez yarılmaya uğrattırken, diamanyetik terim bu enerji seviyelerini  $\Delta E$  kadar arttırmaktadır.  $\ell$ 'si büyük olan seviyelerdeki yarılmalar,  $\ell$ 'si küçük olan seviyelerden daha fazla olmaktadır.

## Kaynaklar

- Anderson RL (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.*
- Castro CF, António CA, Sousa LC (2004). Optimisation of shape and process parameters in metal forging using genetic algorithms. *Journal of Materials Processing Technology* 146: 356-364.
- Cho AY, Arthur JR (1975). Molecular beam epitaxy. *Progress in Solid State Chemistry* 10: 157-191.
- Cibert J, Petroff PM, Dolan GJ, Pearton SJ, Gossard, AC, English JH (1986). Optically detected carrier confinement to one and zero dimension in GaAs quantum well wires and boxes. *Journal Applied Physics Letters* 49: 1275-1277.
- Cakir B, Ozmen A, Sahin M, Yakar Y, Atav U, 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.*
- Çakır B (2007). Çok elektronlu kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerinin incelenmesi, *Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya.*
- Cakir B, Ozmen A, Atav U, Yüksel H, Yakar Y (2007). Investigation of electronic structure of a quantum dot using slater-type orbitals and quantum genetic algorithm. *International Journal Of Modern Physics C* 18: 61-72.
- Cakir B, Ozmen A, Atav U, Yüksel H, ve Yakar Y (2008). Calculation of electronic structure of a spherical quantum dot using a combination of quantum genetic algorithm and Hartree-Fock-Roothaan method. *International Journal of Modern Physics C* 19(4): 599-609.
- Cakir B, Yakar Y, Ozmen A, (2012). Refractive index changes and absorption coefficients in a spherical quantum dot with parabolic potential. *Journal of Luminescence* 132: 26-59.

- Cakir B, Yakar Y, Ozmen A (2013). Calculation of oscillator strength and the effects of electric field on energy states, static and dynamic polarizabilities of the confined hydrogen atom. *Optics Communications* 311: 222–228.
- Cakir B, Yakar Y, Ozmen A (2015). Linear and nonlinear optical absorption coefficients of two-electron spherical quantum dot with parabolic potential. *Physica B* 458: 138–143.
- Dineykhani M, Nazmitdinov RG (1997). Two-electron quantum dot in a magnetic field: analytical results. *Physical Review B* 55: 13707-13714.
- Fal'ko VI, Efetov KB (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.
- Hall RN, Fenner GE, Kingsley JD, Soltys TJ (1962). Coherent light emission from GaAs junctions. *Physical Review Letters* 9: 366-368.
- Halonen V, Chakraborty T, Pietiläinen P (1992). Excitons in a parabolic quantum dot in magnetic fields. *Physical Review B* 45(11): 5980-5985.
- Homaifar A, Lai HY, Cormick E (1994). System optimization of turbofan engines using genetic algorithms. *Applied Mathematical Modelling* 18: 72-83.
- Kulkarni AJ, Krishnamurthy K, Deshmukh SP (2004). Microstructural optimization of alloys using a genetic algorithm. *Materials Science and Engineering A* 372: 213-220.
- Nomura S, Segawa Y, Kobayashi T (1994). Confined excitons in a semiconductor quantum dot in a magnetic field. *Physical Review B* 49(19): 13571-13582.
- Oaknin JH, Palacios JJ, Brey L, Tejedor C (1994). Self-consistent Hartree description of N electrons in a quantum dot with a magnetic field. *Physical Review B* 49(8): 5718-5721.
- Schrieffer JR (1957). In Semiconductor surface physics. *University of Pennsylvania Press, Philadelphia*.
- Sharkey J, Yoo C, Peter AJ (2010). Magnetic field induced diamagnetic susceptibility of a hydrogenic donor in a GaN/AlGaIn quantum dot. *Superlattices and Microstructures* 48(2): 248-255.
- Shunji A, Masami C, Tachishige H, Shojiro N, Yuki N, Toshiyuki S (1994). Precise measurements of  $e^+e^-$  annihilation at rest into four photons and the search for exotic particles. *Physical Review A*: 3201.
- Sahin O, Sayan P, Bulutcu AN (2000). Application of genetic algorithm for determination of mass transfer coefficients. *Journal of Crystal Growth* 216: 475-482.
- Temkin H, Dolan GJ, Panish MB, Chu SN (1987). Low-temperature photoluminescence from InGaAs/InP quantum wires and boxes. *Applied Physics Letters* 50: 413-415.

- Venugopal V, Narendran TT (1992). A genetic algorithm approach to the machine-component grouping problem with multiple objectives. *Computers & Industrial Engineering* 22: 469-480.
- Wojs A, Hawrylak P (1996). Charging and infrared spectroscopy of self-assembled quantum dots in a magnetic field. *Physical Review B* 53: 10841-10845.
- Yakar Y, Ozmen A, Cakir B, Yüksel H (2007). Computation of rotation matrices making lined-up to the local Cartesian coordinates. *Journal of the Chinese Chemical Society* 54(5): 1139-1144.
- Yakar Y, Cakir B, Ozmen 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, Cakir B, Ozmen A (2010b). Linear and nonlinear optical properties in spherical quantum dots. *Communications in Theoretical Physics* 53: 1185–1189.
- Yakar Y, Cakir B, Ozmen 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, Cakir B, Ozmen A, (2013a). Computation of relativistic terms in a spherical quantum dot. *Journal of Luminescence* 134: 778-783.
- Yakar Y, Cakir B, Ozmen A (2013b). Off-center hydrogenic impurity in spherical quantum dot with parabolic potential. *Superlattices and Microstructures* 60: 389-397.
- Yakar Y, Cakir B, Ozmen A (2015a) Linear and nonlinear absorption coefficients of spherical two-electron quantum dot. *Computer Physics Communications* 188: 88–93.
- Yakar Y, Cakir B, Ozmen A (2015b). Electronic structure of two-electron quantum dot with parabolic potential. *Philosophical Magazine* 95: 311–325.