MORSE POTANSİYELİ İÇİNDE ETKİLEŞEN *N* ELEKTRONLU KUANTUM NOKTA YAPILARIN TABAN DURUM ÖZELİKLERİNİN SINIRLANDIRMA ŞİDDETINE BAĞLI OLARAK DEĞİŞİMİNİN İNCELENMESİ

Ruya Aydın RAOOF

Yüksek Lisans Tezi
Fizik Anabilim Dalı
Genel Fizik Bilim Dalı

Prof. Dr. Rıdvan DURAK

2020

Her hakkı saklıdır

ATATÜRK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

MORSE POTANSİYELİ İÇİNDE ETKİLEŞEN *N* ELEKTRONLU KUANTUM NOKTA YAPILARIN TABAN DURUM ÖZELİKLERİNİN SINIRLANDIRMA ŞİDDETİNE BAĞLI OLARAK DEĞİŞİMİNİN İNCELENMESİ

Ruya Aydın RAOOF

FİZİK ANABİLİM DALI
Genel Fizik Bilim Dalı

ERZURUM
2020

Her hakkı saklıdır

T.C.
ATATÜRK ÜNİVERSİTESİ
Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğü

TEZ KABUL VE ONAY TUTANAĞI

MORSE POTANSİYELİ İÇİNDE ETKİLEŞEN N ELEKTRONLU KUANTUM NOKTA YAPILARIN TABAN DURUM ÖZELİKLERİNİN SINIRLANDIRMA ŞİDDETİNE BAĞLI OLARAK DEĞİŞİMİNİN İNCELENMESİ

Prof. Dr. Rıdvan DURAK danışmanlığında, Ruya Aydın RAOOF tarafından hazırlanan bu çalışma, 21/05/2020 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından Fizik Anabilim Dalı Genel Fizik Bilim Dalı'nda Yüksek Lisans tezi olarak **oybirliği / ~~oy çokluğu~~ (3/3)** ile kabul edilmiştir.

Jüri Başkanı:	Doç. Dr. Harun GÜNEY	
	Ağrı İbrahim Çeçen Üniversitesi	…….....
Danışman:	Prof. Dr. Rıdvan DURAK	
	Atatürk Üniversitesi	…….....
Jüri Üyesi:	Dr. Öğr. Üyesi Erdem ŞAKAR	
	Atatürk Üniversitesi	…….....

Enstitü Yönetim Kurulunun …./…/…. tarih ve …… sayılı kararı.

Bu tezin Atatürk Üniversitesi Lisansüstü Eğitim ve Öğretim Yönetmeliği'nin ilgili maddelerinde belirtilen şartları yerine getirdiğini onaylarım.

Prof. Dr. Mehmet KARAKAN
Enstitü Müdürü

Not: Bu tezde kullanılan özgün ve başka kaynaklardan yapılan bildiriş, çizelge, şekil ve fotoğrafların kaynak olarak kullanımı, 5846 sayılı Fikir ve Sanat Eserleri Kanunundaki hükümlere tabidir.

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

MORSE POTANSİYELİ İÇİNDE ETKİLEŞEN *N* ELEKTRONLU KUANTUM NOKTA YAPILARIN TABAN DURUM ÖZELİKLERİNİN SINIRLANDIRMA ŞİDDETİNE BAĞLI OLARAK DEĞİŞİMİNİN İNCELENMESİ

Ruya Aydın RAOOF

Atatürk Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı
Genel Fizik Bilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Rıdvan DURAK

Bu çalışmada, Morse potansiyelinde ($V(r) = V_0(1 - e^{-br})^2$, V_0 ve b sabitler) sınırlandırılmış etkileşen çok sayıda elektron içeren kuantum nokta (KN) sisteminin, elektron yoğunluğu, kimyasal potansiyel, kinetik ve Hartree enerjisi vs. gibi taban durum özellikleri, V_0ve b sınır parametrelerine bağlı olarak araştırılmıştır. Bu amaçla öncelikle $T = 0$ K'de Morse potansiyelinde sınırlandırılmış Coulomb potansiyeli ile etkileşen iki boyutlu elektron gazı için elektron yoğunluğu Fermi-Dirac fonksiyonları kullanılarak ifade edilmiştir. Daha sonra yoğunluk ifadesi Poisson denklemi ile birleştirilerek etkileşen sistem için Thomas-Fermi denklemi elde edilmiştir. Thomas-Fermi denkleminin çözümü nümerik olarak gerçekleştirilmiştir. Elektron etkileşiminin, sistemin taban durum özellikleri üzerindeki etkisi, nümerik işlemde $V_e = 0$ alınarak belirlenmiştir. Sonuçlar etkileşmeyen ($V_e = 0$) durum sonuçları ile karşılaştırıldığında sınırlandırma potansiyelinin derinlik ve eğriliğinin elektron etkileşimlerinin şiddetini ve dolayısı ile tüm sistem özelliklerini önemli ölçüde değiştirdiği sonucuna varılmıştır.

2020, 48 sayfa

Anahtar Kelimeler: KN yapılar, Elektron gazı, Thomas- Fermi yaklaşımı, Morse potansiyel

ABSTRACT

MS Thesis

THE INVESTIGATION OF GROUND STATE PROPERTIES OF QUANTUM DOT CONTAINING N INTERACTING ELECTRONS IN A MORSE POTENTIAL DEPENDING ON A CONFINEMENT STRENGTH

Ruya Aydın RAOOF

Atatürk University
Graduate School of Naturel and Applied Sciences
Department of Physics
Department of General Physics

Supervisor: Prof. Dr. Rıdvan DURAK

In this study, the ground state properties (such else electron density, chemical potential, kinetic energy and Hartree Energy etc.) of quantum dot system including large number of interacting electrons in Morse potential ($V(r) = V_0(1 - e^{-br})^2$, V_0 and b are constants) has been investigated by changing V_0 and b parameters. For this purpose; primarily, the electron density for two-dimensional electron gas which interacting with Coulomb Potential $V(r)$ has been expressed by using Fermi - Dirac functions. In next stage, Thomas-Fermi equation has been obtained for the system interacting by combining the density expression and Poisson equation. Thomas-Fermi equation has been solved numerically. The effect of electron interaction on the base properties of the system has been determined by taking $V_e = 0$ in numerical operation. The results showed that the strength of electron interaction and hence the system properties changed with depth and curvature of confining potential.

2020, 48 pages

Keywords: Quantum dot structures, Electron gaz, Thomas- Fermi approximation, Morse potential

TEŞEKKÜR

Atatürk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü Yüksek Lisans tezi olarak sunulan bu çalışmada, Morse potansiyel içinde etkileşen N elektronlu KN yapıların taban durum özelliklerinin sınırlandırma şiddetine bağlı değişiminin teorik olarak incelenmiştir.

Tez çalışmamın gerçekleştirilmesinde büyük emeği olan, hazırlanmasında her türlü tecrübe, bilgi ve önerileriyle bana destek olan çok değerli danışman hocam Sayın Prof. Dr. Rıdvan DURAK'a en içten sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Çalışmalarım sırasında destek ve bilimsel rehberliği ile manevi olarak desteğini ve engin bilgisini esirgemeyen Sayın hocam Prof. Dr. Berna GÜLVEREN'e teşekkür ederim.

Hayatım boyunca maddi ve manevi her türlü desteği ve yardımı benden esirgemeyen, çalışmam boyunca büyük bir sabırla yanımda olan, babam, annem ve eşime çok teşekkür ederim.

Aynı zamanda yüksek lisans eğitimimi maddi olarak destekleyen Yurtdışı Türkler ve Akraba Topluluğu Başkanlığı'na, her türlü olanak ve destekleri ile eğitimime katkılar sağlayan Atatürk Üniversitesi Rektörlüğü'ne ve Fen Bilimleri Enstitüsü'ne sonsuz şükranlarımı sunarım.

Ruya Aydın RAOOF

Mayıs, 2020

İÇİNDEKİLER

ÖZET i
ABSTRACT ii
TEŞEKKÜR iii
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ vi
ŞEKİLLER DİZİNİ viii
ÇİZELGELER DİZİNİ x
1. GİRİŞ 1
2. KURAMSAL TEMELLER 4
2.1. KN'ların Üretim Yöntemleri 7
2.1.1. Asitle Aşındırma yöntemi 7
2.1.2. Seçici büyütme yöntemi 8
2.1.3. Kuantum kuyusu ve engel arası interdifüzyon yöntemi 9
2.1.4. Yarıiletken mikrokristal yöntemi 11
2.1.5. Module edilmiş elektrik alan yöntemi 11
2.2. Bir Boyutlu Kutu 12
2.2.1. Bir kutudaki serbest parçacık 17
2.3. KN Yapılar ve Temel Özellikleri 17
2.3.1. Yapay atomlar olarak simetrik KN'ları 18
2.4 TF Atom Modeli ve N Elektronlu Sistem Uygulaması 22
2.4.1. TF yöntemi 22
2.4.2. TF denklemi 23
2.4.3. TF atomu 26
2.4.4. TF yaklaşımında yarıiletken KN'larının modellenmesi 28
3. MATARYEL ve YÖNTEM 33
3.1. İki Boyutlu Morse Potansiyelinde Sınırlandırılmış N elektron İçeren KN Yapıların Fiziksel Özelliklerinin Thomas-Fermi Yöntemi ile Belirlenmesi 33
3.1.1. Nümerik analiz 35
4. ARAŞTIRMA BULGULARI 36
5. SONUÇ ve TARTIŞMA 42

KAYNAKLAR 43
ÖZGEÇMİŞ 48

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

E_H	Hartree Enerjisi
E_K	Kinetik Enerji
E_T	Toplam Enerji
$E_U(r)$	Sınırlandırıcı Potansiyel Enerji
E_{ek}	İlave Enerji
V_0, b	Sınırlandırma Katsayı Sabitleri
$V_{\text{dış}}$	Dış Potansiyel
$V_e\ (r)$	Coulomb Potansiyeli
$V_{etkin}(r)$	Etkin Potansiyel
ρ_D	Donör Katman Yoğunlu
EDY	Elektronik Durum Yoğunluğu
h	Planck Sabiti
HF	Hartree-Fock
KN	Kuantum Nokta
N	Elektron Sayısı
TF	Thomas-Fermi
YFT	Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi
X	Slater Tipi Atomik Orbitaller
$\Psi(r)$	Dalga Fonksiyonu
Ω	Parçacık Katsayısı
C	Nokta Kapasitesi
N	Parçacık Sayısı
T	Sıcaklık
U	Potansiyel Enerji
d	Donör Konsantrasyonu
e	Elektronun Yükü
k	Boltzmann Sabiti
$m*$	Etkin Kütle

$n(r_0)$	Nokta Yarıçapı
p	Momentum
δ	Lagrange Çarpanı
ε	Malzemenin Dielektirik Sabiti
μ	Kimyasal Potansiyel
$\rho(r)$	Elektron Yoğunluğunu

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Bir bulk yarıiletken (a) ve yarıiletken nanoyapıların (b – d) enerji seviyesi yapısının şematik gösterimi. (b) İki boyutlu yarıiletken nanoyapı veya kuantum kuyusu, (c) Bir boyutlu yarıiletken nanoyapısı veya kuantum teli ve (d) Sıfır boyutlu yarı iletken nanoyapısı veya KNsı. EDY elektronik durumların yoğunluğunu temsil eder. 4

Şekil 2.2. Asitle aşındırma yöntemiyle KN yapısının üretim aşamaların şematik olarak gösterimi 8

Şekil 2.3. KN yapının seçici büyütme yöntemiyle elde edilmesi şematik gösterimi. Pramidin tepesinde elektronların yerleşim alanı genişliği yaklaşık 100 *nm* dir 9

Şekil 2.4. KN yapının şematik kesiti 10

Şekil 2.5. Elektrik alanı ile oluşturulmuş bir KNsı. İçteki dört elektrot elektronları hapsetmekte, dıştaki dört elektrot ise elektronların KNsından dışarı ya da KNsı içine tünelleme yapmasını sağlamaktadır 12

Şekil 2.6. Bir boyutlu bir kutudaki parçacık için potansiyel enerji fonksiyonu $V(x)$ 13

Şekil 2.7. Bir boyutlu parçacık için en düşük enerji seviyesi 15

Şekil 2.8. Bir kutudaki serbest parçacık için enerji seviyeleri 16

Şekil 2.9. İlave enerji E_{ek}'nin parçacık sayısı N ile değişimi 21

Şekil 2.10. Gate voltajına bağlı olarak iki boyutlu dairesel bir KNsından geçen akım. (a) İlk tepe noktası, birinci elektronun noktaya girdiği voltajı işaret eder ve elektron sayısı, sonraki her tepe noktasında bir artar. Bitişik tepeler arasındaki mesafe, toplama enerjilerine karşılık gelir. (b) Dairesel yörüngelere elektron eklenmesi şematik olarak gösterilmiştir 21

Şekil 2.11. $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ heteroyapının katmanlı şematik görünümü. (i) Sonsuz kalınlıkta katkısız GaAs (ii) $s = 10$ nm kalınlığında katkısız AlGaAs (iii) $\rho_D = 6 \times 10^{17} cm^{-3}$ donör konsantrasyonlu $d = 36$ nm kalınlığında tamamen iyonize donör AlGaAs (iv) $c = 24$ nm kalınlığındaki katkısız GaAs ara katmanlarından oluşmaktadır 29

Şekil 2.12. Şekil 2.10'de gösterilen heteroyapının yüzeyinden 70 nm derinliğinde sınırlandırma potansiyelinin 3 boyutlu grafiği 31
Şekil 4.1. Sınırlandırma Potansiyeli $(V(r) = V_0(1\text{-}e^{-br})^2$'nin potansiyelin katsayıya bağlı olarak değişimi 37
Şekil 4.2. Analitik ve numerik hesabın uyumunun belirlenmesi (Ω=0.05) 37
Şekil 4.3. Etkileşmenin yoğunluk üzerindeki etkisinin farklı sınırlandırma potansiyellerindeki elekronlar için belirlenmesi (Ω=0.05). Çizgi etkileşmenin göz ardı edildiği, noktalı çizgi ise Coulomb etkileşmesinin göz önünde bulundurulduğu durum için verilmiştir.....39
Şekil 4.4. Sınırlandırma parametrelerinin (a) etkileşmeyen (b) etkileşen sistemlerin elektron dağılımı üzerindeki etkilerinin belirlenmesi (Ω=0.05). Çizgi etkileşmenin göz ardı edildiği, noktalı çizgi ise Coulomb etkileşimi göz önünde bulundurulduğu durum için verilmiştir. 40

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 2.1. $V_{etkin}(r)$'nin radyal uzaklığa bağlı olarak değişimi 28

Çizelge 4.1. Farklı sınırlandırma parametrelerine bağlı olarak sistemlerin kimyasal, kinetik, Hartree, sınırlandırma ve toplam enerjilerinde meydana gelen değişim ($\Omega = 0.05$).....41

1. GİRİŞ

KN'ları, elektronların üç boyutta (*x*, *y*, *z* koordinatlarında) sınırlandırılmasıyla meydana gelen düşük boyutlu hetero-yapılardır. Yarıiletken malzeme bilimindeki ilerleme ve teknolojideki gelişimler, çok değişik yapı ve özelliklere sahip KN yapıların üretimine olanak sağlamıştır. Bu yapılara olan artan ilginin sebebi, ayarlanabilir optik absorpsiyon ve emisyon spektrumuna bağlı olarak değişen optik ve elektronik özelliklerinden, kaynaklanmaktadır. Bulk bir yarıiletkende, bir fotonun bantlar arası bir geçişle soğurulması, tipik olarak sistem içinde bir delokalize elektron ve hole oluşturur. İkinci bir olasılık, Wannier-Mott eksitonu olarak bilinen bir bağlı elektron-hole kuasiparçacık durumunun üretilmesidir. Elektron-hole çifti, karşılıklı bir Coulomb etkileşimi ile zayıf şekilde bağlanmıştır ve kararlı bir yörüngedeki elektron ve hole hidrojenik bir sistem olarak düşünülebilir. Bir Wannier-Mott eksitonunda, elektron ve hole çifti birkaç atom boyunca uzaysal olarak delokalizedir ve kristal boyunca serbestçe hareket edebilir. Tüm yarıiletkenlerde, elektron ve hole bohr yarıçapı olarak bilinen karakteristik bir aralığı koruyacaktır.

Bu yapılarda boyuta bağlı etkiler, serbest yük taşıyıcıların kuantum hapsolmasından kaynaklanmaktadır. Sınırlandırma, dış yarıçapın altındaki uzaysal boyutlar olarak tanımlanır. Bu durumda, yük taşıyıcıları bu boyutlarda serbestçe hareket edemezler. Sınırlandırmanın en belirgin etkisi, sistemin durum yoğunluğu üzerinde görülür. Bulk malzemeden başlayarak artan sınırlandırma derecelerini gösterir. Bu durumda, nanokristalin özellikleri önemli ölçüde yapının genişliğine bağlı hale gelir ve elektron deşik çifti yalnızca ayrık enerji seviyelerini işgal eder. Bu anlamda, KN yapılar *yapay atomlar* olarak kabul edilebilir. Halen, fotovoltaikler ve biyolojik görüntüleme sistemleri dahil olmak üzere çok çeşitli alanda potansiyel uygulamalar mevcuttur (Swafford *et al.* 2003; Kamat 2008; Michalet *et al.* 2005; Rosenthal *et al.* 2002). Bununla beraber yarıiletken lazerler, gelecek nesil bilgisayar bellekleri ve işlem birimleri gibi pek çok alanında uygulamaya sahip umut verici yapılardır.

KN'ları, 100 ila 10000 atom içeren, boyutları 1-10 *nm* arasında değişen kristal yarıiletkenlerdir. Litografi, epitaksiyel büyütme, kolloidal sentez gibi pek çok yöntem kullanılarak üretilebilirler (Bowers *et al.* 2005; Schreuder *et al.* 2008). Üretilen KN yapının büyüklüğüne bağlı olarak sınırlandırılan elektron sayısı değişir ve bu yapıların fiziksel özelliklerini klasik yöntemlerle araştırmak oldukça zor hale gelir. Thomas Fermi (TF) yaklaşımı atomların ve moleküllerin parçacık yoğunluğunu doğrudan elektrostatik potansiyelle ilişkilendiren istatistiksel bir yöntemdir. Model oldukça basit olmasına rağmen bugüne kadar çok parçacıklı sistemlerin temel özelliklerini tahmin etmede oldukça başarılı olmuştur. Yöntem ve modifiye edilmiş halinin bu güne kadar atomlar, iyonlar, nanokristaller ve nanoyapılarda uygulamaları mevcuttur (Lieb 1981; Pino 1998, 2000; Puente *et al.* 2000; Cappelluti and Site 2000; Lieb *et al.* 2000; Vignolo and Minguzzi 2000; Puglia *et al.* 2003; Ninno 2006; Sergeev *et al.* 2016).

KN yapılarda sınırlandırma potansiyelinin şekli yapının fiziksel özelliklerini oldukça değiştirir. Literatürde deneysel sonuçlara bağlı olarak, sınırlandırma potansiyelinin şekli harmonik (Liu *et al.* 1989; Hansen *et al.* 1989; Demel *et al.* 1990; Lorke *et al.* 1990; Tewordt *et al.* 1990; Johnson 1995), kuartik (Kim and Fetter 2004; Howe *et al.* 2009; Aftalionand and Danaila 2010), anharmonik (Demel *et al.* 1990; Gudmundsson and Gerhardts 1991; Ye *et al.* 1994; Li *et al.* 1998; Li *et al.* 1999; Rasanen *et al.* 2005) Gauss (Bretin *et al.* 2004; Ryu 2007; Weiler *et al.* 2008; Gülveren 2019) gibi potansiyellerde sınırlandırılmış elektronların fiziksel özellikleri oldukça araştırılmıştır.

Yapılan literatür taramasına göre KN yapılarda Morse potansiyelinde sınırlandırılan elektronların Thomas-Fermi yöntemi ile fiziksel özelliklerinin araştırıldığı çalışma mevcut değildir.

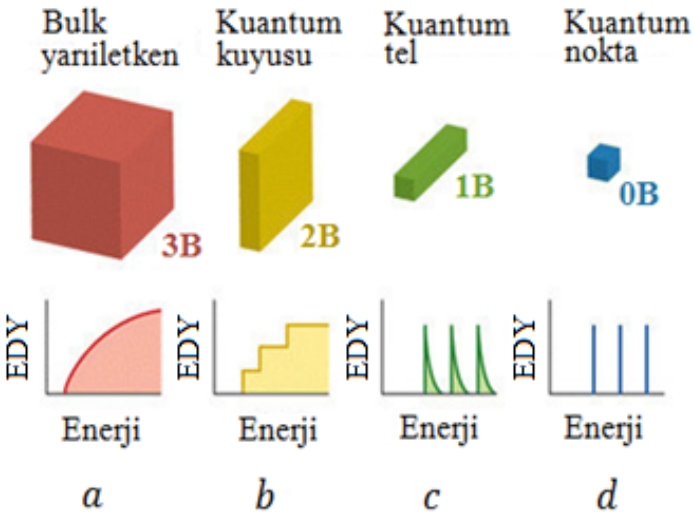
Bu tez çalışmasının birinci bölümde konunun amaç ve kapsamı belirten "Giriş" kısmından bahsedilmiştir. İkinci bölümde Morse Potansiyelinde Sınırlandırılmış N elektronlu KN yapıların bilim adamları tarafından dünyada ve Türkiye'de yapılan çalışmalardan bahsedilmiş, teorik olarak bir boyuttaki kutunum kuyu hakkında bilgi verilmiş ve KN yapıların temel özeliklerinden bahsedilmiştir. KN yapıların atoma

benzerliğinden bahsedilmiş, Thomas- Fermi yöntemi, denklemi ve atomu hakkında bilgi verilmiştir. Üçüncü bölüm, "Materyal ve Yöntem" kısmından oluşmaktadır. Bu bölümde, Thomas-Fermi yöntemini kullanılarak sınırlandırılmış etkileşen N elektron içeren KN sisteminin taban durumunda elektron yoğunluğu, kimyasal potansiyel, kinetik ve Hartree enerji vs. gibi özellikleri göz önünde bulundurularak nümerik olarak incelenmiştir. Dördüncü bölüm, "Araştırma Bulguları" kısmından oluşmaktadır. Bu bölümde, Thomas- Fermi yaklaşımı kullanılarak Morse potansiyelinde $V(r) = V_0(1 - e^{-br})^2$ sınırlandırılmış N elektron içeren KN yapılar incelendi. Bu amaçla Thomas-Fermi denklemi nümerik olarak çözülmüştür. Sınırlandırılan yapı içerisinde elektron etkileşimlerinin şiddeti, sınırlandırma potansiyelinin derinlik ve eğriliğine oldukça bağlıdır. Bu nedenle sonuçlar etkileşmeyen durum sonuçları ile karşılaştırılmıştır. Elde edilen araştırma bulgularının genel değerlendirmesinin yapıldığı "Sonuç ve Tartışma" bölümü ile çalışmalarının sunumu tamamlanmıştır.

2. KURAMSAL TEMELLER

Geçtiğimiz birkaç yıl içinde, nanoteller, KN'ları, nanotüpler veya nanofilmler gibi nanoparçacıklaın üretimi üzerine yapılan çalışmalar önemli ölçüde artmıştır (Wang *et al.* 2007). Bunun sebebi de nanoparçacıkların kataliz, kaplamalar, tekstil, veri depolama, biyoteknoloji, sağlık bakımı, biyomedikal ve ilaç endüstrileri gibi son derece önemli alanlardaki kullanımının mümkün hale gelmesidir (Drbohlavova *et al.* 2009). Katı parçacık büyüklüğü <100 *nm* olan yapılara nanoyapılar denir ve değişken bir optik ve elektronik özelliklerin farklı bir varyasyonudur, (Henglein 1989; Bera *et al.* 2004). Bu yapının temel amacı bileşenlerin daha hızlı olması ve daha az ısı harcamasıdır.

Nanoyapı üç ana sistemden oluşmaktadır; iki boyutlu sistemler kuantum kuyular, bir boyutlu sistemler kuantum teller ve sıfır boyutlu sistemler de KN'dır (Bera *et al.* 2010; Trindade *et al.* 2001; Kuchibhatla *et al.* 2007). Şekil 2.1'de bu yapıların sınırlandırmaya bağlı olarak durum yoğunluklarının değişimi gösterilmiştir.



Şekil 2.1. Bir bulk yarıiletken (a) ve yarıiletken nanoyapıların (b – d) enerji seviyesi yapısının şematik gösterimi. (b) İki boyutlu yarıiletken nanoyapı veya kuantum kuyusu, (c) Bir boyutlu yarıiletken nanoyapısı veya kuantum teli ve (d) Sıfır boyutlu yarı iletken nanoyapısı veya KN'sı. EDY elektronik durumların yoğunluğunu temsil eder.

Görüldüğü gibi yapay olarak elde edilen KN'lar, sıradan atomlara benzer yani ayrık enerji durumlarında sınırlı sayıda elektron ihtiva edilmektedir (Şekil.2.1) Ancak atomlardan çok daha esnek ve değiştirilebilir yapılardır. KN'ları, kendi içlerinde çekirdeksizdir, bu nedenle küçük bir uzaysal hacim içine alınmış, yüzlerce veya binlerce gelişigüzel sayıda sınırlı elektron içerebilirler. KN'ları çok çeşitli teknikler kullanılarak üretilebilir (Jacak *et al.*1998). KN yapılar içerisinde sınırlandırılan elektron sayısı, sınırlandırma potansiyeli gibi fiziksel özellikler, üretim tekniğine bağlı olarak hassas olarak değiştirilebilir (Xia 1989; Sercel and Vahala 1990; Wagner and Merke 1992; Tulkki and Henamaki 1995; Rafal Oszwaldowskoi *et al.* 2010). Bu durum, laboratuvar ortamında atomlar ile gerçekleştirilemeyen bazı parçacık etkilerinin araştırılmasına imkan vermektedir. Bunun yanında ilginç elektriksel ve optik özelliklerin teorik ve deneysel araştırmacıların oldukça ilgisini çekmiştir. KN olarak adlandırılan nanometre boyutundaki kristaller de yoğun bir şekilde araştırılmıştır, tipik KN boyutları $2-20\ nm$ arasında değişmektedir (Kluson *et al.* 2007). Ancak bazı literatüre göre çap kesinlikle $10\ nm$'nin altında olmalıdır (Kral *et al.* 2006; Ferancova 2008). Bununla birlikte KN boyutları temel olarak onları hazırlamak için kullanılan malzemeye bağlıdır. KN büyüme yöntemine bağlı olan sınırlandırma potansiyeli, KN ve matris arasındaki ara yüzey KN büyütülmesi sırasında ortaya çıkmaktadır. Çoğu durumda sınırlandırma potansiyeli parabolik potansiyel ile yaklaşık olarak hesaplanmaktadır. Ancak, teorikte parabolik potansiyel yalnızca düşük enerji seviyeleri için hesaplanmıştır. Sınırlama potansiyelinin davranışı, kuantum sayısındaki artışla parabolik şekilden farklılaşmaktadır. Bu potansiyelin modellenmesi birçok yönden yarıiletken büyüme yöntemine bağlıdır. Kuantum yapılarda sınırlandıran elektronların sayısı diğer elektronlar sayısına göre değişebilmektedir.

KN yapıların fiziksel özellikleri, içerisinde sınırlandırılan elektron sayısına bağlı olarak çeşitli hesaplama yöntemleri ile belirlenebilir. Şu ana kadar yarıiletkenlerin elektronik özelliklerini araştırmak amacıyla yapılan çalışmaların bir kısmı analitik ve diğeri kısmı ise varyasyonel veya nümerik işlemlere dayanmaktadır (Bellesa and Combescot 1999; Varshni 1999; Boseand Sarkar 2000). Örneğin iki boyutlu parabolik olarak sınırlandırılmış bir potansiyelde etkileşen iki elektronlu bir sistemde pertürbasyon ve varyasyonel teorisi kullanılarak sıfır dış manyetik alandaki iki boyutlu kuantum nokta helyumunun taban durumu özelliklerini incelemişlerdir (Ciftja *et al.* 2004).

KN yapıda sınırlandırılan elektronların sayısının fazla olması durumunda bazı problemler ortaya çıkmaktadır. Bu problemleri çözebilmek için bazı yöntemler kullanılmaktadır. Bu yöntemler ise (HF), (TF) ve Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi gibi yöntemler olarak özetlenebilir.

(TF) yaklaşımı ve değiştirilmiş şekilleri çok fazla bilim adamı tarafından Fermi sistemlerinin (çekirdek, atom, iyon) potansiyel alan ve yük yoğunluklarının elde edilmesinde kullanılmıştır (Thomas 1927; Fermi 1927; VonWeizsacker 1935; Hodges 1973; Lieb 1981; Spruch 1991). TF modeli, Schrödinger denkleminin oluşturulmasında bir süre sonra Llewellyn Thomas ve Enrico Fermi'den tarafından, yarı klasik olarak geliştirilen çoklu yapı sisteminin elektronik yapısı için kullanılan istatistiksel teoridir. Kuantum-mekaniği dalga fonksiyonları yerine normal fonksiyonlarla uğraşır. Bu yöntem, metallerdeki potansiyel alanları ve yük yoğunluğunu ve elementlerin hal denklemini incelemek için daha önce kullanılmıştır (Feynman *et al.* 1949). Bu yaklaşım ve farklı şekilleri sınırlandırılmış elektron gazı içeren fiziksel yapıların analiz edilmesinde kullanılmaktadır (Pino *et al.* 2003; Gülveren vd. 2005). Thomas- Fermi teorisinin avantajı, dalga fonksiyonlarından (yani, 3 *N* koordinatlarına bağlı değişkenler) kurtulabilmesi ve yerine, parçacık yoğunluğu gibi daha basit değikenler kullanabilmesidir. Bu sayede Schordinger denklemi ile uğraşmak yerine elektron yoğunluğunu potansiyel alan ile direk ilişkilendirilerek sistemin fiziksel özellikleri araştırılabilir. Ancak TF teorisi, değişim-korelasyon etkilerini tamamen görmezden gelir ve kabuk yapısı gibi birtakım kuantum mekaniksel özellikleri tahmin edemez. Bununla beraber, yöntemin doğruluğu parçacık sayısının artışına bağlı olarak artmaktadır. Literatürde, yöntemin düşük sayılardan (30 elektron gibi) binlerce elektrona kadar uygulaması mevcuttur (Sinha *et al.* 2000; Gülveren 2018; Sinha 2000).

Morse potansiyeli adını fizikçi Philip M. Morse den alan, birbirleri ile etkileşen iki atomlu molekül modeli için tanımlanmış bir potansiyeldir (Morse 1929). Son yıllarda oldukça ilgi görmüş bir potansiyel tipidir. Diatomik molekülleri, yapay atomları ve kristaleri incelemek için kullanılmaktadır (Torrens 1972; Saha *et al.* 2004; Hayrapetyan *et al.* 2015; Açıksöz vd 2016). Örneğin, anharmonik bir model potansiyelinde (Morse

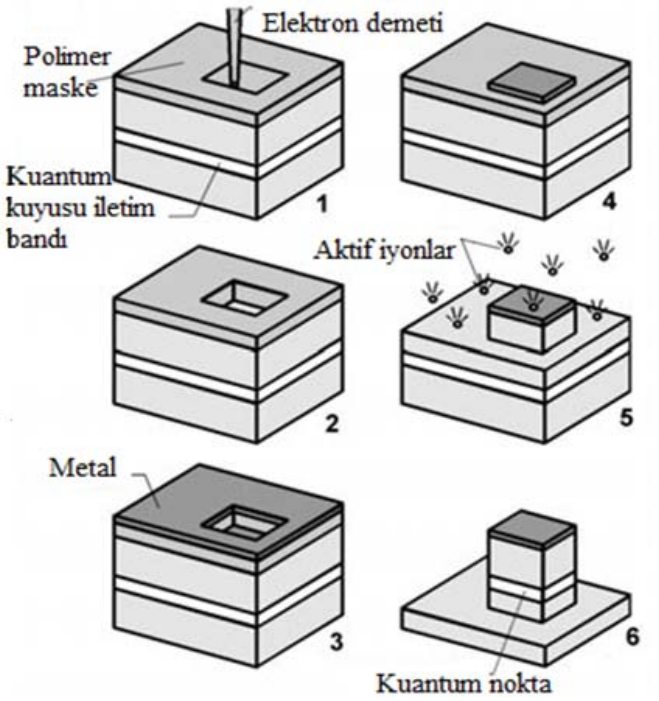
tipi) iki kütle noktasının enerji seviyeleri incelenmiştir (Saha *et al.* 2004). Enerji seviyeleri için analitik ifadeler türetilmiştir. Model potansiyelinin belirli koşullar altında bağlı durumları desteklediği gösterilmiştir. Bu tür durumların sayısının potansiyel parametrelerine bağlı olduğu ifade edilmiştir. Elektronik durumlar ve doğrudan bantlar arası ışık emilimi, paralel elektriksel ve manyetik alanların varlığında GaAs'lardan yapılan Morse sınırlandırma potansiyeli ile silindirik kuantum noktasında çalışmışlardır (Hayrapetyan *et al.* 2015). Dış alanların silindirik kuantum noktasının doğrudan bantlar arası ışık emilimine bağlı etkisi araştırmışlardır. Seçim kuralları, paralel elektrik ve manyetik alanların varlığında elde edilmişlerdir. Emilim eşiğinin KN'larının geometrik parametrelerine ve dış alanların şiddetlerine bağımlılığı da incelemişlerdir. Morse potansiyeli ile temsil edilen GaAs-Ga1_$_x$Al$_x$As kuantum kuyu telindeki bir donörün davranışı, etkin kütle yaklaşımı çerçevesinde incelemişlerdir (Açıksöz vd. 2016). Dolaysıyla bağlanma enerjiler üzerindeki etkilerini göstermek amacıyla, elektriksel ve manyetik alanlarla sayısal hesaplamalar yapılmıştır.

2.1. KN'ların Üretim Yöntemleri

KN'ları üretmek için pek çok yöntem mevcuttur (Jacak *et al.*1998). Şekilleri ve diğer özellikleri, hazırlama aşamasında modellenebilir. Bu yapılar farklı yöntemlerle üretilebilirler. Bunlar asitle aşındırma (etching) yöntemi, seçici büyütme yöntemi**,** modüle edilmiş elektrik alan yöntemi, kuantum kuyusu ve engel arası interdifüzyon yöntemi, yarıiletken mikrokristaller yöntemi gibi yöntemlerdir (Reed *et al.* 1986).

2.1.1. Asitle aşındırma yöntemi

Asitle aşındırma yönteminde iki boyutlu elektron gazı içeren bir yapının bir yarıiletken hetero-yapıdan elde edilmesidir. Bu üretimin aşamaları Şekil 2.2'de gösterildiği gibidir: Öncelikle bir veya daha fazla kuantum kuyusu içeren bir numunenin yüzeyi bir polimer maske ile kaplanır ve daha sonra kısmen ışınlanır. Elde edilen desen nanoyapının şekline karşılık gelir.



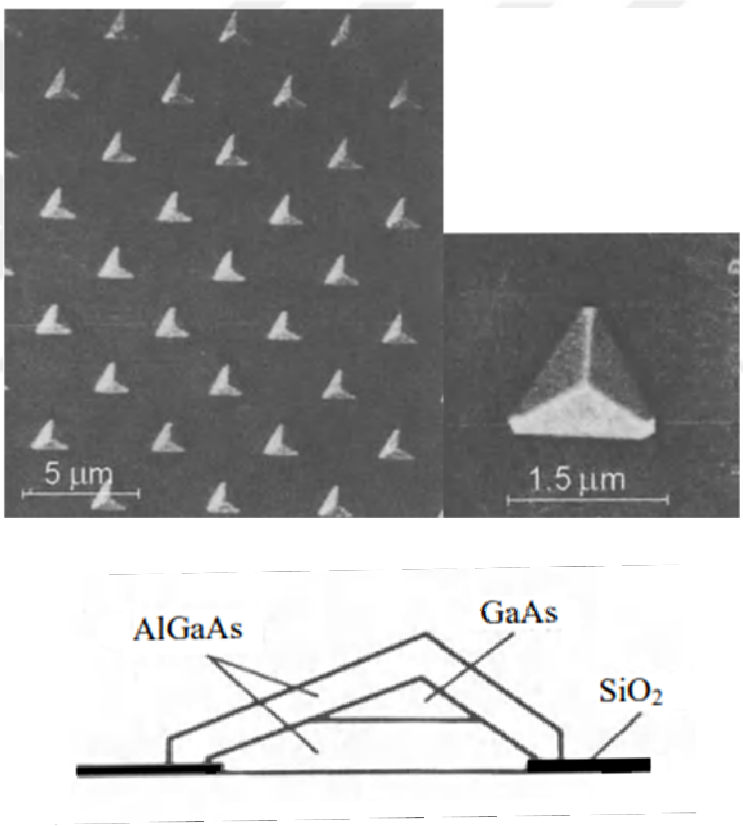
Şekil 2.2. Asitle aşındırma yöntemiyle KN yapısının üretim aşamaların şematik olarak gösterimi (Jacak 2000)

Yüksek çözünürlük için, maske görünür ışıktan ziyade elektron veya iyon demetiyle (elektron/iyon ışın litografisi) ışınlanır (Şekil 2.2 1). Işınlanmış alandan maske çıkarılır (Şekil 2.2 2). Daha sonra, tüm yüzey ince bir metal tabaka ile kaplanır (Şekil 2.2 3). Özel bir çözelti kullanılarak, polimer film ve koruyucu metal tabaka çıkarılır ve metal tabakanın kaldığı önceden ışınlanmış alanlar hariç, temiz bir numune yüzeyi elde edilir (Şekil 2.2 4). Daha sonra, metal maske ile korunmayan alanlar kimyasal olarak aşındırılarak (Şekil 2.2 5), kuantum kuyularının kesik parçalarını içeren ince sütunlar oluşturulur (Şekil 2.2 6). (Reed 1993; Jacak *et al.*1998; Jacak 2000). Böylece bu yöntem ile elektronların hareketi çapı 10-100 *nm* aralığında olan bir kuantum yapı ile sınırlandırılmış olur (Smith *et al.*1988; Demel *et al.*1990).

2.1.2. Seçici büyütme yöntemi

Seçici büyütme yönteminde KN'ları, geniş yasak enerji aralığına sahip (AlGaAs gibi) bir bileşiğin üzerine daha dar enerji aralığına sahip yarıiletken bir bileşiğin (GaAs gibi)

büyütülmesi ile oluşturulabilir. Büyütmenin seçilmiş alanlara sınırlandırılması için bir maske ile (mesela SiO_2) numune yüzeyi kaplanır ve aşındırma (veya dağlama) ile yüzeyde küçük üçgenler meydana getirilir. Maske ile kaplanmamış yüzeyde büyütme, 700-800°C sıcaklıkta metal-organik kimyasal buharlaştırma (MOCVD) yöntemi ile gerçekleştirilir. Sıcaklık etkisiyle hacimleri büyüyen üçgen yüzeyler tetrahedral piramit haline dönüşür ve büyütme tamamlanmış olur (Grundmann *et al.* 1995; Raymond *et al.* 1996). Sonuçta bu yöntemle boyutları 100 *nm* mertebesinden daha küçük KN yapılar elde edilir. Bu yöntemle elde edilen KN'lar Şekil 2.3'te gösterilmiştir.

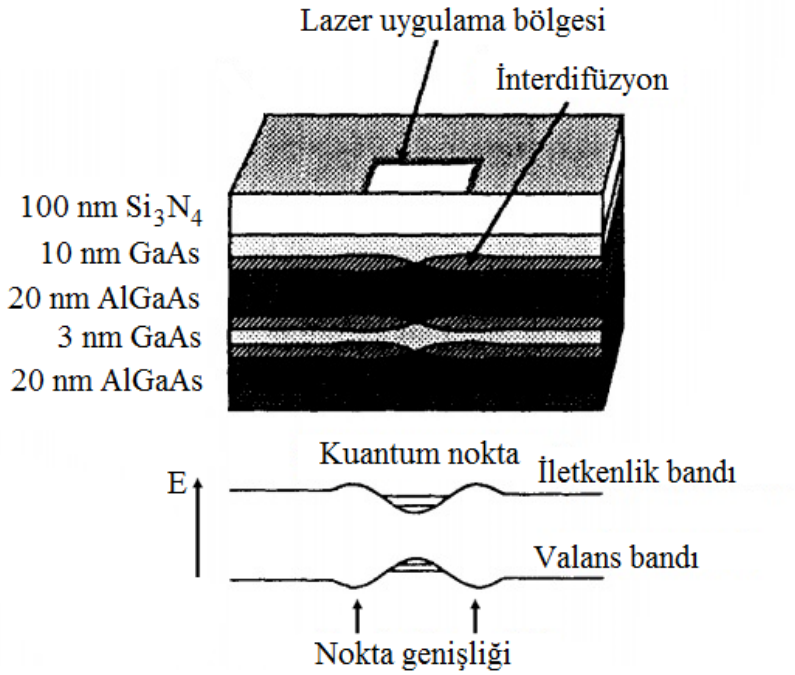


Şekil 2.3. KN yapının seçici büyütme yöntemiyle elde edilmesi şematik gösterimi. Pramidin tepesinde elektronların yerleşim alanı genişliği yaklaşık 100 *nm* dir (Fukui *et al.*1991)

2.1.3. Kuantum kuyusu ve engel arası interdifüzyon yöntemi

Bu yöntem, kuantum kuyusunun belirli bir bölgesinin lazer ışını ile ısıtılmasına dayanan bir yöntemdir. Bunun için yaklaşık 3 *nm* kalınlıklı bir GaAs kuantum kuyusu kullanılır. Sonra bu, 20 *nm* kalınlığında bir çift $Alx_{o,35}Ga_{o.65}As$ engeli arasına yerleştirilir. AlGaAs

tabaka üzerine 10 *nm* kalınlığında GaAs tabaka yerleştirilir ve bu tabaka lazerle ışınıyla erime veya oksitlenmeye karşı 100 *nm* Si_3N_4 tabakayla kaplanır. Lazer uyarımı yaklaşık 1,5 μm boyutunda bir noktaya odaklanır (Şekil 2.4). Yaklaşık 1000 ° C sıcaklıklarda, kuyu ve bariyerler arasında Al ve Ga atomlarının hızlı termal interdifüzyonu (karışımı) gerçekleşir. Bu durum bölgesel bant yapısının oluşumuna neden olur. Isıtılan ve ısıtılmayan bölgelerin yasak enerji arasındaki fark, ısıtılan kısmın diğerinden daha düşük olmasıdır. Böyle bir işlem büyük boyutlu malzemelerde kullanılırsa, aralarında yasak enerji aralığı bulunan ve içinde elektron veya elektronların hapsedildiği KN'ları elde edilir (Jacak *et al.* 1998).



Şekil 2.4. KN yapının şematik kesiti

2.1.4. Yarıiletken mikrokristal yöntemi

KN yapılarının üretilmesindeki bir başka yöntem, yarıiletken mikrokristal malzemelerin cam dielektrik matrisler içerisine yerleştirilerek KN'lar elde edilmesidir. Belirli oranlarda (~ %1) CdS, CuCl, CdSe, CuBr gibi yarıiletken bileşikler katılmış silikat cam birkaç yüz santigrat derece sıcaklıkta birkaç saat ısıtılır, bu da hemen hemen eşit boyutlarda uygun mikro kristallerin oluşmasına yol açar.

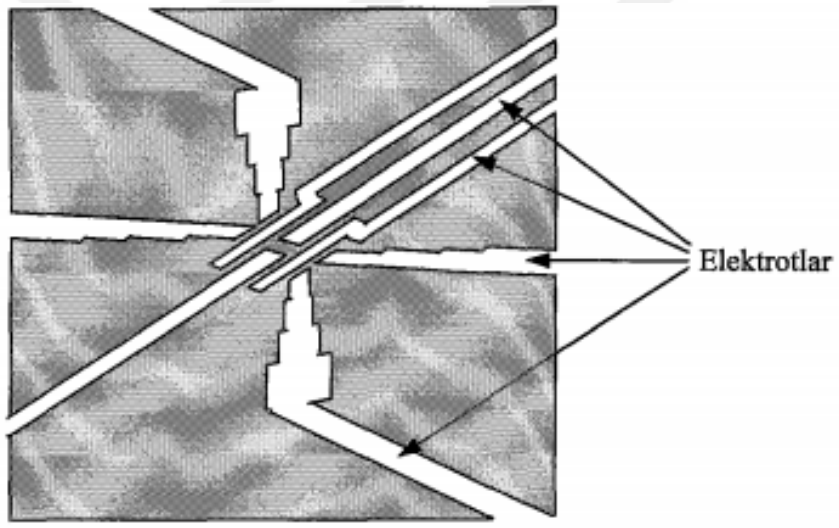
Ortalama kristal yarıçapının boyutlarını, dolayısıyla KN'nın boyutları sıcaklık ve ısıtma süresine bağlı olarak kontrol edilebilir. Bu yöntemle elde edilen KN'ların yarıçapları 1,2-38 *nm* arasında değişmektedir. Dielektrik matris olarak cam yerine alkali klorürler de kullanılabilir (Ekimov *et al.* 1985; Jacak *et al.* 1998).

2.1.5. Module edilmiş elektrik alan yöntemi

Module edilmiş elektrik alan yönteminde, litografik tekniklerle bir kuantum kuyunun yüzeyinde küçük elektrotlar oluşturulur (Şekil 2.5). Elektrotlara uygun bir voltaj uygulanması, elektronları hareketini küçük bir alana sınırlayan uzaysal olarak modüle edilmiş bir elektrik alanı üretir. Bu şekilde oluşturulan yanal sınırlandırma, bu tür aşındırılmış yapıların karakteristiği olan, bir kenar kusuru göstermez.

Bir kuantum kuyusunun yüzeyine ince bir elektrot yayma işlemiyle, hem tek KN'ları hem de büyük nokta dizileri (matrisler) oluşturulabilir (Hansen *et al.* 1989; Sikorski and Merkt 1989; Lorke *et al.* 1990; Meurer *et al.*1992; Ashoori 1996). Bir elektrotta bir voltaj uygulanarak üretilen elektrik potansiyelinin modülasyonu, numune yüzeyi üzerindeki metalik olmayan malzemelerin (örneğin, bariyer malzemesinin) düzenli bir adacık dizisinin önceden hazırlanması (litografik teknik kullanılarak) ile gerçekleştirilebilir. Sonuç olarak, elektrot ve kuantum kuyusunun düzlemi arasındaki mesafe ayarlanır ve elektronlar hazırlanan adacıkların altındaki küçük alanlara sınırlandırılır.

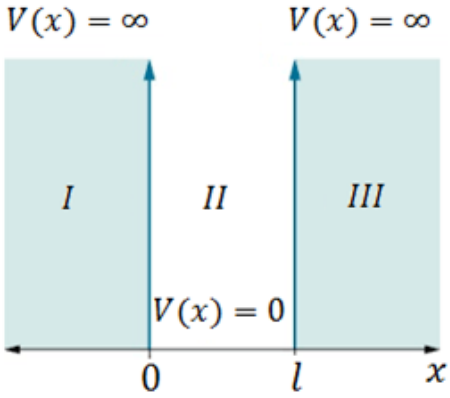
Elektrot ve kuyu arasındaki mesafeyi ayarlamak yerine, kuyunun üzerine paralel ve ince bir elektrot çifti oluşturmakta mümkündür. Alttaki elektrot, KN'larının oluşturulduğu, düzenli olarak yerleştirilmiş deşiklerden oluşur (Alsmeier *et al.* 1990; Hansen *et al.* 1990). Elektrot çiftine uygulanan bir voltaj hem nokta boyutunda hem de sınırlandırma potansiyelinin derinliğinde bir değişikliğe neden olur. Potansiyel derinliği, sınırlandırılmış elektronların sayısını etkiler. Bununla birlikte, kuantum-kuyu tabakası ile katkılı tabaka arasına ilave bir elektrot sokulduğunda, elektron sayısı ve potansiyel derinlik bağımsız olarak değiştirilebilir. Günümüzde daha karmaşık mikro-elektrot sistemleri de uygulanmaktadır (Zhitenev *et al.* 1999).



Şekil 2.5. Elektrik alanı ile oluşturulmuş bir KN'sı. İçteki dört elektrot elektronları hapsetmekte, dıştaki dört elektrot ise elektronların KN'sından dışarı ya da KN'sı içine tünelleme yapmasını sağlamaktadır (Reed 1993)

2.2. Bir Boyutlu Kutu

Levine (2000)'ne göre bir boyutlu kutuda bir parçacığın potansiyel enerjisinin sıfır olduğu çizgi hariç, *x* ekseni boyunca her yerde sonsuz olan potansiyele maruz kaldığı durum için, Şekil 2.6'da gösterilen üç bölge söz konusudur.



Şekil 2.6. Bir boyutlu bir kutudaki parçacık için potansiyel enerji fonksiyonu $V(x)$ (Levine 2000)

I ve III bölgelerinde $V(x)$ potansiyel enerjileri birbirine eşittir ve sonsuzdur. Bu durumda zamandan bağımsız Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} = (E-\infty)\Psi \tag{2.1}$$

şeklinde yazılabilir. Burada, E'yi ihmal edilip ∞ ile karşılaştırıldığında,

$$\Psi_I = 0, \qquad \Psi_{III} = 0$$

sonucuna varılır.

II. bölgede $x = 0\ ve\ x = L$ arasında potansiyel enerji $V(x) = 0$ ve Schrödinger denklemi,

$$\frac{d^2\Psi_{II}}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\Psi_{II} = 0 \tag{2.2}$$

şeklinde yazılabilir. Burada m ve E sırasıyla parçacığın kütlesi ve toplam enerjisidir. Sabit katsayılı lineer homojen ikinci dereceden bir diferansiyel denklemdir ve çözümü,

$$S^2 + 2mE\hbar^{-2} = 0$$

$$S = \pm(-2mE)^{1/2}\hbar^{-1}$$

$$S = \pm i(-2mE)^{1/2}/\hbar$$

$$\Psi_{II} = Acos[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2}x] + Bsin[\hbar^{-1}(2mE)^{1/2}x] \quad (2.3)$$

şeklindedir.

$x = 0$ ve $x = l'$de $\Psi_{II}(x) = 0$ koşulu kullanılarak,

$$\Psi_{II} = Bsin[(2\pi/\hbar)(2mE)^{1/2}x] \quad (2.4)$$

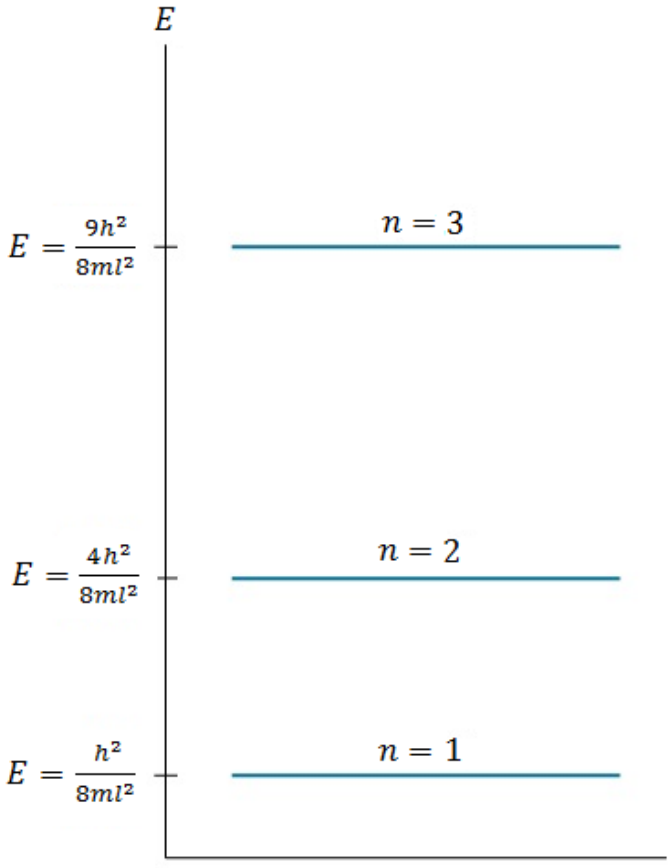
elde edilir.

Şekil 2.7'de gösterilen bir boyutlu kutudaki parçacık için enerji ve dalga fonksiyon ifadeleri

$$E = \frac{n^2h^2}{8ml^2} \qquad n = 1,2,3, \ldots \ldots \quad (2.5)$$

$$\Psi_{II} = \mathrm{Bsin}\left(\frac{n\pi x}{l}\right), \quad n = 1,2,3, \ldots \ldots .. \quad (2.6)$$

şeklinde yazılabilir.



Şekil 2.7. Bir boyutlu parçacık için en düşük enerji seviyesi (Levine 2000)

Burada *B* sabiti, normalizasyon ilkesi kullanılarak aşağıdaki gibi bulunabilir,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi|^2 dx = 1 \tag{2.7}$$

$$\int_{-\infty}^{0} |\Psi_I|^2 dx + \int_{0}^{l} |\Psi_{II}|^2 dx + \int_{l}^{\infty} |\Psi_{III}|^2 dx = 1 \tag{2.8}$$

$$|B|^2 \int_0^l sin^2(\frac{n\pi x}{l}) dx = 1 = |B|^2 \frac{l}{2}$$

burada 2 $sin^2 t = 1 - cos2t$ matematiksel eşitliği göz önüne alınmıştır.

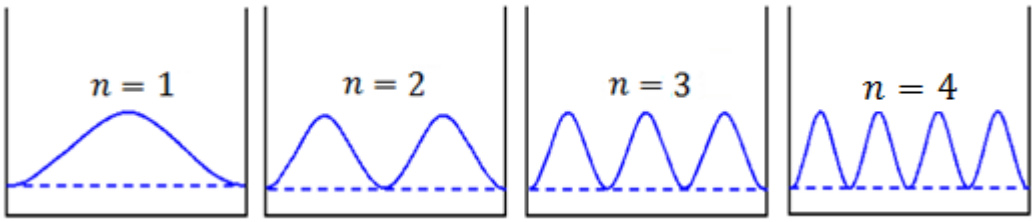
$$|B| = (2/l)^{1/2} \tag{2.9}$$

Fazın sıfır olmasını seçerek, bir kutudaki parçacık için durağan-durum dalga fonksiyonları

$$\Psi_{II} = (\frac{2}{l})^{1/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{l}\right) \qquad n = 1,2,3,\ldots \tag{2.10}$$

Denklem (2.5) ve (2.7)'deki *n* sayısına kuantum sayısı denir.

Kuantum sayısının her bir farklı değeri (2.10) denklemlerin de farklı bir dalga fonksiyon ve farklı bir duruma karşılık gelmektedir.



Şekil 2.8. Bir kutudaki serbest parçacık için enerji seviyeleri (Levine 2000)

Şekil 2.8 parçacığın kutudaki çeşitli yerlerde bulunma olasılığının klasik sonuçtan farklı olduğunu göstermektedir. Klasik olarak, bir kutudaki sabit enerji parçacığı, iki duvar arasında elastik olarak ileri geri sekerek sabit bir hızda hareket eder. Bu nedenle, kutunun herhangi bir noktasında bulunması eşit derecede muhtemeldir. Kuantum mekaniksel olarak kutunun merkezinde en düşük enerji için bir maksimum olasılık söz konusudur. Daha fazla düğümle daha yüksek enerji seviyelerine gittikçe, maksimum ve olasılık minimumları birbirine yaklaşır ve kutunun uzunluğu boyunca olasılıktaki değişiklikler sonuçta tespit edilemez hale gelir. Yüksek kuantum sayıları için üniform olasılık yoğunluğunun klasik sonucuna yaklaşılır.

2.2.1. Bir kutudaki serbest parçacık

Serbest bir parçacığın potansiyel enerjisi Schrödinger denklemin'de $V(x) = 0$ alındığında serbest serbest parçacık için aşağıdaki denklem elde edilir.

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\Psi = 0 \tag{2.11}$$

Burada denklem (2.11)'un genel çözümünden bulunan Ψ dalga fonksiyonu;

$$\Psi = c_1 e^{i}(2mE)^{1/2}\, x/\hbar + c_2 e^{-i}(2mE)^{1/2}\; x/\hbar \tag{2.12}$$

şeklinde ifade edilebilir. (2.12)'daki ilk terim $x \to -\infty$ yaklaştıkça sonsuz olacaktır. Benzer şekilde, E negatif ise, (2.12)'daki ikinci terim $x \to +\infty$ yaklaştıkça sonsuz olur. Dolayısıyla sınır şartı

$$E \geq O \tag{2.13}$$

olmasını gerektirir.

Serbest parçacık için, dalga fonksiyonu Ψ, sinüs ve kosinüs teriminin doğrusal bir birleşimidir (örnek. denklem 2.3). Serbest parçacık için enerji kuantumlu değildir, tüm negatif olmayan enerjiler için izinlidir. $V = 0$ seçtiğimizde E, bu durumda tamamen kinetik enerj değerine eşittir. Eğer c_1, c_2 keyfi sabitlerini dalga fonksiyonunun normalizasyonu ile belirlemeye çalışırsak integralin sonsuz olduğu görülebilir.

2.3. KN Yapılar ve Temel Özellikleri

KN'ları, bir tek elektrondan birkaç bin elektrona kadar oluşabilen insan-yapımı yük damlacıklardır. Büyüklük, şekil ve etkileşimleri nano fabrikasyon teknolojisi kullanılarak kusursuz olarak kontrol edilebilir. Bu yapıların fiziksel olarak özellikleri,

teorik ve deneysel olarak gözlenmiş, özellikle enerji durumları, optik ve manyetik özellikleri araştırılmaktadır (Hsiao *et al.*1992; Chuu 1992; Bellessa and Combescot 1999; Varshni 1999). KN'ları, KN'larının fiziği, atomik ve nükleer fizikte doğal olarak oluşan kuantum sistemlerinin davranışları ile pek çok alanda paralellik göstermektedir (Ashoori 1996; Kouvenhowen and Marcus 1998; Jancak 2000). Gerçekte KN'ları, araştırmacıların gerçek atomlar veya çekirdekler yerine insan yapımı nesneleri incelediği yoğun madde fiziğinde önemli bir eğilimi göstermektedir. Atom yapısında olduğu gibi bir KN'sındaki enerji seviyeleri elektronların hapsolması nedeniyle belirli bir noktada sabitlenmiştir. Ancak gerilim değiştirerek elde edilen deneysel sonuçlarla tüm periyodik tablo incelenebilir. Hollanda'daki Delft Teknoloji Üniversitesi ve Kaliforniya'daki Stanford Üniversitesi'ndeki laboratuvarlardaki deneyler KN'larının özelliklerini araştırmak için bu teknik kullanılmaktadır. En heyecanlı olanı ise, gerçek atom ve parçacıklar üzerinde gözlemlenen KN'larının çoğu atomlardaki kabuk yapısından parçacıklardaki kuantum kaosuna kadar kuantum parçacıklarında da gözlemlenebilir olmasıdır. Ayrıca farklı elementler ve izotoplar üzerinde çalışmak zorunda olmanın aksine, bu etkiler basitçe boyutunu veya şeklini değiştirerek bir KN'sı üzerinde incelenebilir.

2.3.1. Yapay atomlar olarak simetrik KN'ları

KN'larının birçok özelliği, elektronların klasik olarak yasaklanmış bir potansiyel engelinden geçmesine izin veren kuantum etkisi olan elektron tünelleme yoluyla incelenmiştir (Kouvenhowen and Marcus 1998). Ancak bir KN'sına ve bir KN'sından elektron tünellemesi, bir elektron üzerindeki ayrık yük biriminden kaynaklanan esasen klasik bir etkiye sahiptir. Noktaya tünelleme zayıfsa (örneğin, nispeten yüksek potansiyel engel oluşumlarında bir nokta bir elektron kaynağından ayırdığında) tünelleme olayı zayıf ihtimaliyete oluşmakta bu elektronların sayısı tam sayılarla ifade edilmektedir. Noktadaki elektron sayısı N, iyi tanımlanmış bir tamsayıdır.

Elektronların noktaya doğru yaptığı her hareket için bu sayının birden farklı olması gerekir. Fakat elektronlar arasındaki Coulomb itmesine göre, $N + 1$ tane elektron taşıyan bir noktanın

enerjisi, N elektron taşıyan bir noktanın enerjisinden büyüktür. Bu nedenle bir noktaya elektron eklemek için ekstra bir enerji gerekir ve gerilimi artırarak bu enerji sağlanmadıkça hiçbir akım geçmez (Şekil 2.10). Buna Coulomb engeli denir. Bunun pratikte nasıl çalıştığını görmek için, Seigo Tarucha ve meslektaşları Japonya'daki NTT'de (1998) ve Delft Teknoloji Üniversitesinde bazı araştırmacılar simetrik kuantum-nokta yapısında neler olduğunu araştırdılar.

Yapı, birkaç yüz nanometre çapında $10\ nm$ kalınlığında ve 100 elektrona kadar taşıyabilen bir KN'sından oluşuyordu. Nokta, kendisini üstündeki ve altındaki iletken malzemeden ayıran iki iletken olmayan engel tabaka arasına sıkıştırılmıştı. Noktanın etrafindaki metal bir kapıya (gate) negatif voltaj uygulayarak, çapı azar azar sıkıştırılabilir, böylece nokta üzerindeki elektron sayısı adım adım, hiç elektron kalmayıncaya kadar azaltılır. Bu noktadaki elektronların sayısı ve dolayısıyla da enerjisi, değiştikçe akım değişecektir. Coulomb engeli ölçülen akımda bir seri ani yükselmelere yol açar. Bahsedilen her yükselişte, noktadaki elektron sayısı *N* ve *N*+1 arasında değişkenlik gösterir.

Pikler arasında akım sıfir olur ve *N* sabit kalır. Ardışık pikler arasındaki mesafe ilave enerji E_{ek} ile orantılıdır. E_{ek} *N* ve *N*+1 elektronlu noktalar arasındaki enerjidir. Bir KN'yı tanımlayan en basit model, sabit etkileşim modeli olarak isimlendirilir. Bu model elektronlar arasındaki Coulomb etkileşiminin, N'den bağımsız olduğunu ve noktanın kapasitansı (C) ile tanımlandığını varsayar.

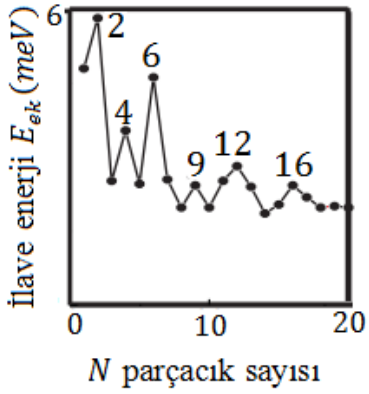
Bu modelde E_{ek} , $E_{ek} = e^2/C\ + \Delta$E ile verilir. Burada e elektronun yükünü ve ΔE de bir kuantum hali ile bir sonraki arasındaki enerji farkını temsil eder. Dolayısıyla KN yapıya tek bir elektron eklemek, e^2/C gibi sabit bir yük enerjisi gerektirir. Kuantum halleri arasındaki enerji farkı, basitliğinin yanı sıra bu model, dikkat çekici şekilde tutarlıdır ve ölçümleri daha detaylı tanımlamamızı sağlar. Grafikteki ilk pik (tepe) ilk elektronun noktaya girdiğindeki enerji durumunu işaret eder. Ancak pikler arasındaki mesafe sabit değildir ve ikinci, altıncı ve yirminci elektronu eklemek için önemli derecede daha fazla enerji gerekir. KN'sının şekli elektron hareketini bir düzleme sınırladığından bunu iki boyutlu elektron yörüngeleri olarak resmedebiliriz. En küçük çaplı yörünge en düşük enerjili durumuna karşılık gelir. Bu durumun

açısal momentumu sıfırdır ve atomlarda s durumlarındaki gibi yörünge zıt kutuplu sadece iki elektron bulundurabilir. Bu, yük enerjisi e^2/C'nin noktadaki elektron sayısının birden ikiye çıkarılması için yeterli olduğu anlamına gelir. Ancak en içteki yörünge dolu olacağından ve elektron daha yüksek bir enerji durumuna geçmek zorunda kalacağından üçüncü bir elektronu ekleyebilmek için ΔE ekstra enerjisi gereklidir (Şekil 2.10). Bu yörüngedeki elektronların açısal momentumu ± 1'dir ve iki spin durumuna sahiptir. Yani bu ikinci kabuk dört elektron taşıyabilir. Nokta yapı altı elektron taşıdığında dolmuş olacak ve yani yedinci bir elektron eklemek için ekstra enerjiye ihtiyaç olacaktır. Sınırlandırma potansiyeli yarıçap (radyal) boyunca parabolik ise üçüncü kabuk, özel bir durumu ortaya koyar ve bu durum radyal bir kuantum sayısını ortaya çıkarır. Bu kabuktaki hallerin açısal momentumu 0 ve radyal kuantum sayısı 1 veya açısal momentumu ± 2 ve radyal kuantum numarası 0 olabilir. Spin durumları ile beraber bu, üçüncü kabuğun 6 elektron taşıyabileceği ve $N = 12$ olduğu zaman tam dolu olacağı anlamına gelir, $N = 2, 6, 12, 20$ şeklinde devam eden bu dizi, iki boyutla sınırlandırılmış dairesel simetrik bir harmonik potansiyelde elektronların "sihirli sayılarını" sağlar.

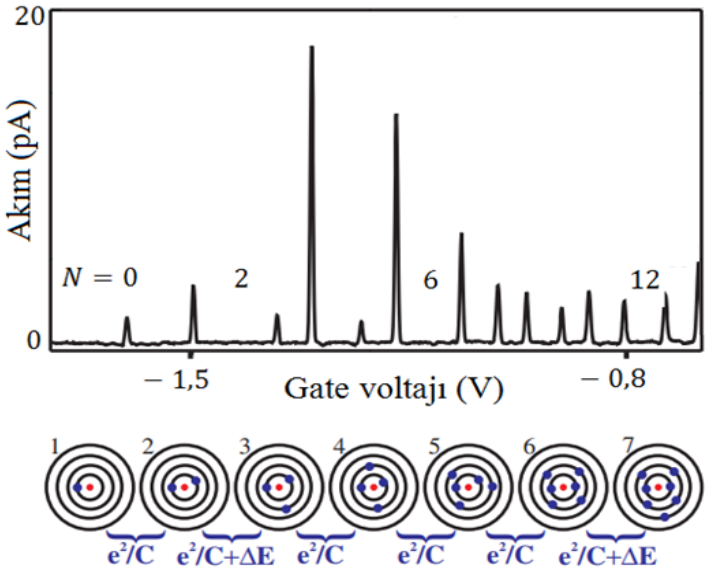
Şekil 2.9 ilave enerji E_{ek}'nin parçacık sayısı N ile değişimini ve sihirli sayıları göstermektedir. Böyle bir sistemin enerji durumları 1920'lerde Charles G. Darwin ve ondan bağımsız olarak Vladamir Fock tarafından hesaplanmıştır.

İlave enerji $N = 4, 9$ ve 16 boyutunda daha küçük pikler gösterir (bkz. Şekil 2.9). Bu alt yapı, elektronlar arasındaki etkileşimlerin enerji hallerinin doldurulmasındaki etkisinin nasıl olduğunu yansıtır. Atom fiziğinde bu etkiler, kabuk yarım dolana kadar elektronlar kabuğa paralel spinler ile girer ve daha sonra zıt spinli elektronlarla doldurulur şeklinde ifade edilen Hund Kuralı olarak formülleştirilir. $N = 4, 9$ ve 16 ikinci, üçüncü ve dördüncü kabukların elektronların toplam spinlerinin maksimum değere ulaştığı, yarı dolumuna tekabül eder. Noktaların yapısı daha büyük ve kontrol edilebilir boyutları deneylerde hâlihazırda atomlar üzerinde uygulanamayacak sistemlerin kullanılmasını sağladıkları için basitçe gerçek atomların birer benzeri olmaktan daha kullanışlıdırlar. Örneğin hem atomlardaki hem de KN'larındaki elektron yörüngeleri bir manyetik alan tarafından değişmiştirler, ama bir $1\,T$ manyetik alanının KN'sı

üzerindeki etkisi bir gerçek atom üzerindeki bir milyon Tesla alanının etkisi ile kıyaslanabilir. Böylesine büyük manyetik alanlar laboratuvarda sağlanamaz.



Şekil 2.9. İlave enerji E_{ek}'nin parçacık sayısı N ile değişimi (Kouvenhowen and Marcus 1998)



Şekil 2.10. Gate voltajına bağlı olarak iki boyutlu dairesel bir KN'sından geçen akım. (a) İlk tepe noktası, birinci elektronun noktaya girdiği voltajı işaret eder ve elektron sayısı, sonraki her tepe noktasında bir artar. Bitişik tepeler arasındaki mesafe, toplama enerjilerine karşılık gelir. (b) Dairesel yörüngelere elektron eklenmesi şematik olarak gösterilmiştir (Kouvenhowen and Marcus 1998)

2.4 TF Atom Modeli ve N Elektronlu Sistem Uygulaması

Bu model, çok sayıda elektrona sahip karmaşık atomların veya iyonların taban durumu için Thomas (1927) ve Fermi (1928) tarafından geliştiren kuantum istatistiksel ve yarı istatistiksel incelemeleri temel alır. Sistemin N elektronu sonsuzda sıfır olan bir merkezi potansiyel $V(r)$ tarafından uzayın bir bölgesine hapsedilmiş olan taban durumunda bir Fermi elektron gazı gibi ele alınır. Bu potansiyelin, büyük bir uzaklık üzerinde yavaş olarak değiştiğini, yani $V(r)$'nin yaklaşık olarak sabit olduğu bir hacimde yeterli miktarda elektron bulunduğu ve Fermi elektron gazı incelemelerinde kullanılan istatistiksel yaklaşımlarının kullanılabileceğini kabul edilir. Thomas-Fermi modelinin amacı $V(r)$ potansiyelini ve $\rho(r)$ elektron yoğunluğunu ölçen bir yöntem elde etmektir (Liboff 1997; Landeu1977).

2.4.1. TF yöntemi

N elektrondan oluşan bir sistem için Schrödinger denklemi (Thomas 1927),

$$\left[-\frac{h^2}{2m}\sum_i \nabla_i^2 + \frac{1}{2}\sum_{i\neq j} v(r_i, r_j)\right] \Psi(r_1, \dots, r_N) = E_i \Psi(r_1, \dots, r_N) \qquad (2.14)$$

şeklinde yazılabilir. Böyle bir sistem için dalga fonksiyonunu araştırmak oldukça karmaşık ve zor bir iştir. Bunun yerine elektron yoğunluğuna ($\rho(r)$) odaklanılabilir. Elektron yoğunluğu, fiziksel olarak gözlemlenebilir, ölçülebilir, hesaplanabilir ve kolayca görselleştirilebilir (Liboff 1977; Landeu1997). Tek bir parçacık için $\rho(r)$ bir parçacığı uzayda belli bir bölgede bulma olasılığıdır ve dalga fonksiyon Ψ cinsinden aşağıdaki şekilde ifade edilebilir;

$$\rho(r) = \Psi^*(r)\Psi(r) \qquad (2.15)$$

N parçacığa sahip bir sistem için yoğunluğun tanımı aşağıdaki gibidir;

$$\rho(r) = N \int \Psi^* (r, r_2, \dots, r_N)\Psi(r, r_2 \dots, r_N) dr_2 \dots dr_N \qquad (2.16)$$

Burada denklem (2.14) yinelemeli olarak belirli tahmine bağlı kalınarak çözülebilir. Elektron dalga fonksiyonu $\Psi(r)$ öz tutarlı olarak denklem (2.14) deki Coulomb potansiyeli ile ilişkilendirebilir. Thomas-Fermi yöntemi bu sayede dalga fonksiyonu $\Psi(r)$ ile ilgili hesabı tamamen ortadan kaldırır, temel bir değişken olarak yoğunluğa $\rho(r)$ odaklanır. Bu anlamda basit olduğu kadar pratik bir biçimde problemin çözümünü sağlar.

2.4.2. TF denklemi

1927 yılında L. Thomas ve E. Fermi tarafından Thomas–Fermi denklemi önerilmiştir. Thomas-Fermi yaklaşımı yarı klasiktir. Uygulanacak olan yarı klasik yaklaşımın şartı, söz konusu sistemdeki de Broglie dalga boyunun uzaysal varyasyonlarının küçük olmasını gerekliliğidir;

$$\varepsilon = \left|\frac{d\lambda(x)}{dx}\right| \ll 1 \tag{2.17}$$

Fermi istatistiğine göre maksimum enerji durumuna kadar tüm durumlar ve dolaylısıyla da P_F momentumu işgal edilmiştir. Belirsizlik ilkesine göre ise; h^3 hacmindeki her hücrede zıt spinli iki elektron bulunur. Taban durumundaki elektronlar için üç boyutlu uzayda toplam parçacık sayısı, momentum ve uzay koordinat parametreleri cinsinden,

$$N = \frac{4\pi}{3}\, p_F^3\, V\, \frac{2}{h^3} \tag{2.18}$$

şeklinde yazılabilir. Bu nedenle uzayda düzgün dağılmış elektronlar için yoğunluk,

$$\rho = \frac{N}{V} = \frac{8\pi}{3h^3}\, p_F^3 \tag{2.19}$$

şeklinde yazılabilir. (2.19) denkleminden faydalanarak p_F aşağıdaki gibi ifade edilebilir;

$$p_F = \left[\frac{3h^3}{8\pi}\right]^{1/3} \tag{2.20}$$

TF yaklaşımında, tüm elektronların ortak bir potansiyel alan $V(r)$'de klasik parçacıklar olarak hareket ettiği kabul edilir. En hızlı elektron için klasik enerji,

$$E_{maks} = \frac{p_F^2}{2m} + V(r) \tag{2.21}$$

şeklinde yazılabilir. (2.20) denklemini kullanılarak E_{maks} aşağıdaki şekilde tekrar düzenlenebilir,

$$E_{maks} = \frac{1}{2m}\left[\frac{3h^3}{8\pi}\right]^{2/3} \rho^{2/3} + V(r) \tag{2.22}$$

Bununla birlikte kinetik enerji yoğunluğu P_F cinsinden

$$t = \frac{T}{V} = \frac{1}{V}\int \frac{p}{2m} dN = \frac{1}{V}\int_0^{p_F} \frac{p^2}{2m} \frac{4\pi p^2 .V .2}{h^3} dp = \frac{8\pi}{2mh^3}\int_0^{p_F} p^4\, dp = \frac{8\pi}{2mh^3}\frac{p_F^5}{5} \tag{2.23}$$

şeklinde yazılabilir. Burada T toplam kinetik enerjidir. Kinetik enerji yoğunluğu elektron yoğunluğu ρ(r) cinsinden,

$$t = \frac{8\pi}{2mh^3}\frac{1}{5}\left[\frac{3h^3}{8\pi}\,\rho(r)\right]^{5/3} = \frac{3h^2}{10m}\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{2/3}[\rho(r)]^{5/2} \tag{2.24}$$

şeklinde yazılabilir. Potansiyel enerji U, dış alan $V_{dış}(r)$ ile elektron yoğunluğu $\rho(r)$ ve Coulomb etkileşimine bağlıdır;

$$U = e\int \rho(r)\, V_{dış}(r) dr + \frac{1}{2}e^2 \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dx dr' \tag{2.25}$$

(2.24) ve (2.25) denklemleri kullanılarak elektron sisteminin toplam enerjisi,

$$E_{top} = C_k \int [\rho(r)]^{5/3} dr + e\int \rho(r)\, V_{dış}(r) + \frac{1}{2}e^2 \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} dx dr' \tag{2.26}$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada normalizasyon koşullarına bağlı olarak toplam enerjiyi minimum yapacak elektron yoğunluğu aşağıdaki koşullar ile belirlenir,

$$\int \rho(r)\, dr = N \tag{2.27}$$

$$\delta\left(E_{top} - \mu N\right) = 0 \tag{2.28}$$

Burada δ Lagrange çarpanıdır. Kimyasal potansiyel ve yoğunluk ilişkisi (2.28)'den faydalanılarak,

$$\delta\left(E_{top} - \mu N\right) = \int \left\{\frac{5}{3} C_K[\rho(r)]^{3/2} + eV_{ext}(r) + e^2 \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' - \mu\right\} \delta\rho(r) dr = 0 \rightarrow$$

$$\frac{5}{3} C_K[\rho(r)]^{3/2} + eV_{ext}(r) + e^2 \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' = \mu, \tag{2.29}$$

şeklinde yazılabilir. Denklem (2.29), (2.22) ile karşılaştırıldığında ve soldaki son iki terimin potansiyel enerjiyi yansıttığını dikkate alınırsa, μ'nin Fermi enerjisi ile tanımlanabilen en hızlı elektronun klasik enerjisi olduğunu görülür. Diğer tarafta, denklem (2.28) 'deki $\mu = \partial E_{top} / \partial N$, yani μ kimyasal potansiyel olarak adlandırılır. Denklem (2.29) integral formda $\rho(r)$ için Thomas-Fermi denklemidir. $\rho(r)$ elektron yoğunluğu ve P_F arasındaki ilişki aşağıdaki gibi ifade edilebilir,

$$\rho^{1/3}(r) = p_F \left(\frac{8\pi}{3h^3}\right)^{1/3} = \frac{1}{(3\pi^2)^{1/3}} \frac{p_F}{\hbar} = \frac{1}{(3\pi^2)^{1/3}} K_F \tag{2.30}$$

Bununla birlikte Denklem (2.29), (2.30)'den faydalanılarak

$$\frac{5}{3} C_K \frac{1}{(3\pi^2)^{2/3}} K_F^2(r) + eV_{dış}(r) + \frac{e^2}{3\pi^2} \int \frac{K_F^3(r')}{|r-r'|} dr' = \mu, \tag{2.31}$$

$$\frac{p_F(r)}{2m} + eV_{dış}(r) + \frac{e^2}{3\pi^2} \int \frac{K_F^3(r')}{|r-r'|} dr' = \mu$$

şeklinde ifade edilebilir. Bununla birlikte, diğer tarafta u(r) olarak verilen Coulomb etkileşme potansiyeli

$$\mu(r) = e \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr' \tag{2.32}$$

aynı zamanda Poisson denklemini sağlamalıdır.

$$\Delta u(r) = -4\pi e\rho(r) \tag{2.33}$$

$$\rho(r) = (\frac{3}{5Ck})^{3/2} \, (u - eV_{ext}(r) - eu(r))^{3/2} \tag{2.34}$$

Bu durumda Thomas- Fermi denkleminin diferansiyel formu aşağıdaki şeklindedir;

$$\Delta u(r) = -4\pi e(\frac{3}{5Ck})^{3/2}\big(u - eV_{ext}(r) - eu(r)\big)^{3/2}$$

$$= -\frac{32\pi^2 e}{3h^3}(2m)^{3/2}(u - eV_{ext}(r) - eu(r))^{3/2} \tag{2.35}$$

2.4.3. TF atomu

Nötral bir TF atom için toplam elektron sayısı N ve dış potansiyel $V_{\text{dış}}$

$$N = Z \; ve \; V_{dış}(r) = -\frac{eZ}{r}$$

şeklinde ifade edilebilir.

$$N = Z; \; V_{dış}(r) = -\frac{eZ}{r} \rightarrow \Delta^2 V_{dış}(r) = 4\pi eZ\delta(r) \tag{2.36}$$

Elektron yoğunluğu tarafından oluşturulan dış alan ve Coulomb alanı toplanarak etkin potansiyel $V_{etkin}(r)$ aşağıdaki gibi yazılabilir

$$V_{etkin}(r) = V_{dış}(r) + \mu(r);\ \ \Delta V_{etkin}(r) = 4\pi eZ\delta(r) + \Delta\mu(r) \quad (2.37)$$

Burada $r > \infty$, $\rho(r) \to 0$ dır. Denklem (2.34)'de tüm terimler $r \to \infty$ sonsuzda sıfıra yaklaşırlar. Dolayısıyla $\mu = 0$ olur. Denklem (2.35) aşağıdaki forma dönüşür.

$$V_{etkin}(r) - 4\pi eZ\delta(r) = \frac{32\pi^2 e}{3h^3}(2m)^{3/2}[-eV_{etkin}(r)]^{3/2}$$

$$-\Delta V_{etkin}(r) = \frac{32\pi^2 e}{3h^3}(2m)^{3/2}[-eV_{etkin}(r)]^{3/2} - 4\pi eZ\delta(r) \quad (2.38)$$

Burada $r \to 0$, için, $V_{etkin} = Z\ /\ r$ ve $r > \infty$ da sıfır olur

Burada $-\Delta V_{etkin}$ yerine $-\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\ rV_{etkin}$ yazılarak aşağıdaki denklem elde edilir,

$V_{etkin} = \frac{z}{r}\chi(\alpha r)$ dönüşümü yapılarak

$$-\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}rV_{etkin}(r) = \frac{32\pi^2 e}{3h^3}(2m)^{3/2}[-V_{etkin}(r)]^{3/2} \quad (2.39)$$

$V_{etkin}(r) = -Z/r\chi(\alpha r)$ eşitliği kullanıldığında Denklem (2.39) aşağıdaki gibi yazılabilir;

$$\frac{Z\alpha^3}{x}\frac{d^2(x)}{dx^2} = (\frac{Z\alpha}{x})^{3/2}\frac{32\pi^2 e}{3h^3}(2m)^{3/2}[\chi(x)]^{3/2}$$

$$\frac{d^2(x)}{dx^2} = (\frac{Z}{x})^{3/2}\alpha^{-3/2}\frac{32\pi^2 e}{3h^3}(2m)^{3/2}[\chi(x)]^{3/2}$$

$$\frac{d^2(x)}{dx^2} = \frac{1}{x^{1/2}}[Z^{1/2}\ \frac{32\pi^2 e}{3h^3}(2m)^{3/2}\alpha^{-3/2}][\chi(x)]^{3/2} \quad (2.40)$$

$[Z^{1/2}\ \frac{32\pi^2 e}{3h^3}(2m)^{3/2}\alpha^{-3/2}] = 1$ dersek

(2.39) χ(αr) cinsinden tekrar yazılabilir. Burada a aşağıdaki gibi ifade edilebilir,

$$\alpha = (\frac{32\pi^2 e}{3h^3})^{3/2}\ 2meZ^{1/3} \tag{2.41}$$

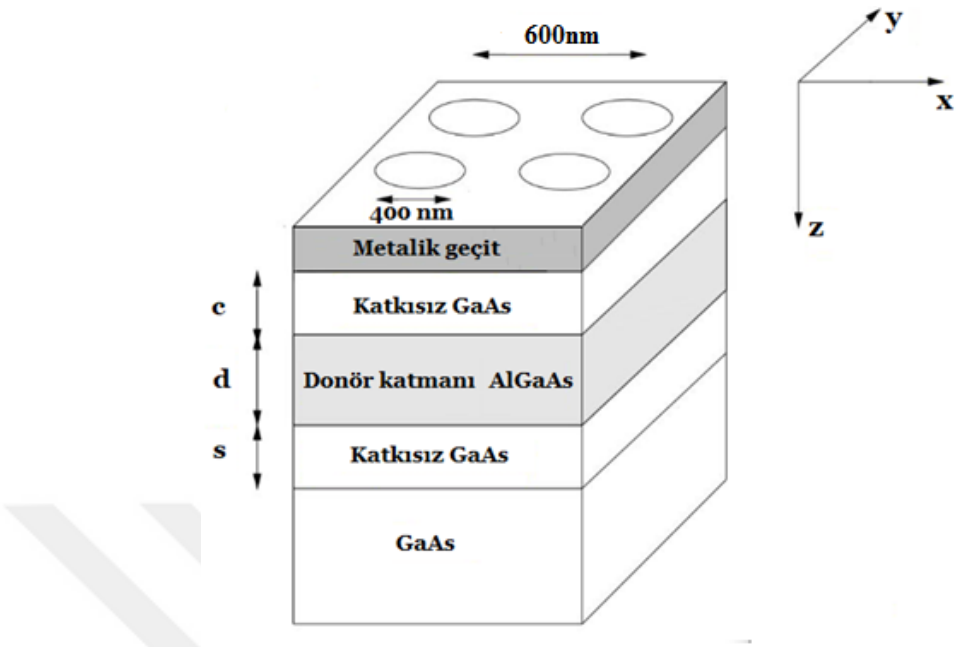
$V_{\text{etkin}}(r)$'nin özel koşullarda davranışı aşağıdaki gibidirT

Çizelge 2.1. $V_{\text{etkin}}(r)$'nin radyal uzaklığa bağlı olarak değişimi

R	V_{etkin}
$r \to \infty$	r^{-4}
$r \to 0$	$-\frac{z}{r}$

2.4.4. TF yaklaşımında yarıiletken KN'larının modellenmesi

Laux *et al.* (1988), $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ heteroyapı düzlemine yakın KN'larından oluşan hücreleri ve hücre dizilerini göz önünde bulundurmuşlardır. Şekil 2.11 eşit büyüklükte dört KN'sından oluşan bir hücre oluşumuna izin veren böyle bir yapının tipik bir örneğini göstermektedir. Noktaların, $400\,nm$ çapındaki dört dairesel delik hariç, yapının üstünde her yere biriken metal geçide (gate) negatif bir voltaj uygulandığında oluştuğu varsayılmaktadır (Yakimenko *et al.*1999 Laux *et al.* (1988),).



Şekil 2.11. $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ heteroyapının katmanlı şematik görünümü. (i) Sonsuz kalınlıkta katkısız GaAs (ii) $s = 10\,nm$ kalınlığında katkısız AlGaAs (iii) $\rho_D = 6 \times 10^{17} cm^{-3}$ donör konsantrasyonlu $d = 36\,nm$ kalınlığında tamamen iyonize donör AlGaAs (iv) $c = 24\,nm$ kalınlığındaki katkısız GaAs ara katmanlarından oluşmaktadır (Yakimenko *et al.*1999).

Komşu deşik merkezleri arasındaki mesafe $600\,nm$'dir. Ve farklı katmanların kalınlıkları ise $c = 24nm$, $d = 36\,nm$, $s = 10\,nm$'dir. Literatür sonuçlarından (Nixon and Davies 1990; Martorell and Sprung 1997; Davies 1998;) faydalanarak Şekil 2.11'de tasvir edilen yapı aşağıdaki gibi açıklanabilir:

(a) Elektron gazı, kesinlikle iki boyutlu olarak davranır..

(b) Elektron yoğunluğu, potansiyelin yavaşça değiştiği ve noktalar içindeki elektronların yoğunluğunun yeterince yüksek olduğu durumlarda kabul edilebilir yarı klasik bir TF yaklaşımı ile belirlenir,

(c) Donörler tamamen iyonizedir ve donör tabakasındaki yoğunlukları $\rho_D = 6 \times 10^{17} cm^{-3}$'dir,

(d) Farklı malzemelerin dielektrik sabitleri arasındaki fark göz ardı edilir, bu nedenle her yerde $\varepsilon = 12{,}9$ alınır,

(e) Yapı, her yerde düz olan kimyasal potansiyel μ ile denge durumundadır,

(f) GaAs'lardaki (parabolik iletken bant) etkin kütle $m^* = 0{,}067m_e$'dir,

Ayrıca, iki sınır koşulu benimsenmiştir;

(1) Heteroyapı elektriksel olarak nötrdür, yani elektrik alanı sonsuzda sıfıra yaklaşır.
(2) Yüzeydeki elektronlar için eV_s ile göstereceğimiz bir Schottky engeli vardır.

İletkenlik bandında bir elektrona etki eden toplam elektrostatik potansiyel, (i) geçitten (V_g), donörlerden (V_d) ve yüzey durumlarından (V_s) (ii) elektronların kendilerinden (V_e) gelen katkılarla belirlenir. İlk üç katkının toplamı sınırlandırma potansiyelini tanımlar.

$$U^c(r) = eV_g(\boldsymbol{r}, z) + eV_d + eV_s \tag{2.42}$$

Burada, $eV_g(\boldsymbol{r}, z)$ geçitten z derinlikte iki boyutlu elektron gazı düzleminde $\boldsymbol{r}$ = (x, y) noktasında geçitten kaynaklanan potansiyeldir ve aşağıdaki ifade ile verilir (Davies 1988).

$$eV_g(\boldsymbol{r}, z) = \frac{1}{2\pi}\int d\boldsymbol{r}' eV_g(\boldsymbol{r}', 0)\frac{|Z|}{(Z^2+|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^2)^{3/2}} \tag{2.43}$$

$eV_g(\boldsymbol{r}, 0)$ geçit yüzeyi boyunca potansiyel dağılımıdır. Keyfi $V_g(\boldsymbol{r}', 0)$'da denklem (2.43) 'deki integrasyon nümerik olarak yapılabilir. Ancak bazı dairesel, üçgen, kare ve çokgen deşikli bazı belirli geçitler analitik olarak da yapılabilir.

Ayrıca 2BEG ara yüzeyinde sonsuz donör tabakasından gelen katkı aşağıdaki gibi alınabilir;

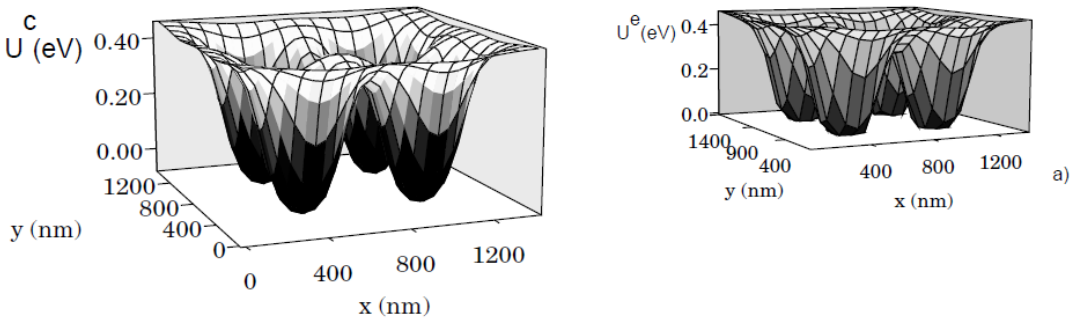
$$eV_d = \frac{e^2}{\epsilon\epsilon_0}\rho_d d(c + d/2) \tag{2.44}$$

Son olarak referans enerji olarak $\mu = 0$ seçerek $eV_s = 0.8\ eV$ alırız.

Şekil 2.11'de, $-0.8\ V$'luk uygulanan geçit voltajı için 2.42 - 2.44 denklemlerine göre hesaplanan basit sınırlandırma potansiyeli, Şekil 2.12 ile temsil edilmektedir.

Noktalardan herhangi biri içinde bu sınırlandırmanın şekli hemen hemen paraboliktir ve bu nedenle analitik olarak aşağıdaki gibi tahmin edilebilir:

$$U^c(r) = U_0^c + \frac{1}{2}kr^2 \tag{2.45}$$



Şekil 2.12. Şekil 2.11'de gösterilen heteroyapının yüzeyinden $70\ nm$ derinliğinde sınırlandırma potansiyelinin 3 boyutlu grafiği. Uygulanan voltaj $-0{,}8\ V$'dir (Yakimenko 1999).

r ve r' noktalarına yerleşen elektronlar arasındaki Coulomb etkileşiminin katkısı:

$$eV^e\ (r, r', z) = \left[\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0}\frac{1}{|r-r'|} - \frac{1}{\sqrt{|r-r'|^2+4z^2}}\right] \tag{2.46}$$

ile verilir.

Burada ikinci terim ayna yük etkisini temsil eder. Verilen r noktasında toplam elektrostatik potansiyeli bulmak için sistemde elektronların geri kalanı üzerinden 2.46 denkleminin toplamını almalıyız. Prensip olarak bu, sistemin toplam Hamiltoniyanını

yazma ve dolayısıyla Poisson-Schrödinger denkleminin nümerik çözümleriyle sorunu çözme imkânı verir.

Bununla birlikte, çok elektronlu tek bir nokta ve kuantum tellerinde (nümerik olarak hantal) bu tür çözümlerin çok daha basit iki boyutlu TF yaklaşımı ile iyi bir şekilde elde edilebildiği (en azından nitel düzeyde) kanıtlanmıştır (Martorell and Sprung 1994, 1997). O zaman bu yaklaşımı çok noktalı sistemler için kullanmak doğaldır.

İki boyutlu TF denklemini türetmek için, değiş-tokuş ve korelasyon terimlerini ihmal ederek sistemin enerjisi ifadesinden başlayabiliriz;

$$E[n(r)] = \frac{\pi\hbar^2}{2m^*}\int drn^2(r) + \frac{1}{2}\frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0}\iint dr\, d\,r' n(r)n(r') - \left[\frac{1}{|r-r'|} - \frac{1}{\sqrt{|r-r'|^2+4z^2}}\right] + \int dr\, n(r)U^c(r) \tag{2.47}$$

Burada $n(r)$ yerel iki boyutlu elektron yoğunluğu, m^* elektronun etkin kütlesidir (hesaplamalarımızda m serbest elektron kütlesi olmak üzere $m^* = 0{,}067\, m$, alacağız).

Denklemden 2.47'den görüldüğü gibi, sistemin enerjisi yerel yoğunluk $n(r)$'nin bir fonksiyonel formuna sahiptir. Bu işlevselliği

$$\delta\{E[n(r)] - \mu\int dr\, n(r)\} = 0 \tag{2.48}$$

alarak minimize edebiliriz. Buradan Euler-Lagrange denklemini

$$\frac{\pi\hbar^2}{m^*}n(r) + U^e(r) + U^e(r) = \mu \tag{2.49}$$

elde ederiz. Buradaki $U^c(r)$, denklem 2.45 ile verilmiştir ve $U^e(r)$, Hartree etkileşim terimidir:

$$U^e(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0}\int dr'\, n(r')\left[\frac{1}{|r-r'|}\frac{1}{\sqrt{|r-r'|^2+4z^2}}\right] \tag{2.49}$$

3. MATARYEL ve YÖNTEM

3.1. İki Boyutlu Morse Potansiyelinde Sınırlandırılmış N elektron İçeren KN Yapıların Fiziksel Özelliklerinin TF Yöntemi ile Belirlenmesi

Bu bölümde, TF yöntemini kullanılarak sınırlandırılmış etkileşen N elektron içeren KN sisteminin taban durumunda elektron yoğunluğu, kimyasal potansiyel, kinetik enerji, sınırlayıcı enerji ve Hartree enerji vs. gibi özellikleri göz önünde bulundurularak nümerik olarak incelenmiştir.

İki boyutlu sistemde $V(r) = V_0(1 - e^{-br})^2$ potansiyel alanında sınırlanmış etkileşen bir elektron gazı için sistemin yoğunluğu aşağıdaki gibi ifade edilebilir (Li *et al.* 1998; Gülveren vd. 2019).

$$n(r) = \frac{1}{h^2} \int_0^\infty \frac{4\pi p dp}{c^{-1} e^{((p^2/2m)+V_e(r)+v(r))/kT} + 1} \tag{3.1}$$

Burada, p momentum, k Boltzmann sabiti, h Planck sabiti, T sıcaklık, μ kimyasal potansiyel, $c = e^{\mu/kT}$ ise fugasite fonksiyonu, $V_e\ (r)$ Coulomb potansiyelidir. Denklem 3.1, $f_n(y')$ Fermi-Dirac integralleri kullanılarak aşağıdaki şekilde yeniden yazılabilir (Gülveren 2012; Pathria 1977);

$$n(r) = \frac{mkT}{\hbar^2 \pi} f_1(y') = \frac{mkT}{\hbar^2 \pi} \ln(1 + y') \tag{3.2}$$

Burada $y' = e^{(\mu - v(r) - V_e(r))/kT}$ 'dir. Düşük sıcaklıklarda ($T \sim 0\,K$) sınırlandırılan sistem için denklem 3.2 Sommerfeld yaklaşımı aracılığıyla aşağıdaki şekle indirenir: (Pathria 1977).

$$n(r) = \frac{m}{\hbar^2 \pi} (\mu - v(r) - V_e(r)) \tag{3.3}$$

İki boyutlu bir alanda sınırlandırılmış sistem için toplam elektron sayısı, elektronların yoğunluğu cinsinden açık bir şekilde aşağıdaki gibi yazılabilir;

$$N = \int_O^{r_o} n(r) 2\pi r dr \tag{3.4}$$

Etkileşen sınırlandırılmış sistemin temel durum özelliklerini belirlemek için (3.3) denklemi Poisson denklemiyle ilişkilendirilebilir,

$$\nabla^2 V_e(r) = -\frac{2\pi}{\varepsilon} n(r) \tag{3.5}$$

ve TF denklemi

$$\nabla^2 V_e(r) = \frac{2m}{\hbar^2 \varepsilon} (\mu - v(r) - V_e(r)) \tag{3.6}$$

Burada $\nabla^2 = (1 / r) (\partial / \partial r) r (\partial / \partial r)$ ve ε malzemenin dielektirik sabitidir (Pino1998). Elektron yoğunluğunun sınırlandırma nedeniyle sınırlarda sıfıra yaklaşacağı açıktır. Bu yüzden sınırlandırılmış bölgenin r_0 yarıçapı sıfır olarak alınabilir. Ayrıca elektron-elektron etkileşimi bu noktada sıfır kabul edilecektir ($V_e(r) = 0$). Etkileşmeyen sistemin temel durum özellikleri, sınır şartları denklem 3.3'e bağlanarak ve sabit sayıda parçacık için $f(r)$ fonksiyonunun pozitif kökü kullanılarak doğrudan belirlenebilir (Pino 1998).

$$\mu = v(r_0) \tag{3.7}$$

$$f(r_0) = N - \int_O^{r_o} \tau(r) 2\pi r dr = 0 \tag{3.8}$$

TF yaklaşımı çerçevesinde toplam enerji (E_T) yoğunluk cinsinden ifade edilebilir (Gülveren 2012; Alfarisa *et al.* 2016) ;

$$E_T = \int_O^{r_o} \tau(r) 2\pi r dr + \int_0^{r_o} n(r) v(r) 2\pi r dr + \frac{1}{2\varepsilon} \int_0^{r_o} n(r) V_e\,(r) 2\pi r dr \qquad (3.9)$$

Burada kinetik enerji yoğunluğu $\tau(r) = \frac{\hbar^2 \pi}{2m} n(r)^2$olarak yazılabilir. Burada birinci terim kinetik enerji (E_K), ikinci terim sınırlandırıcı potansiyel enerji ($E_U(r)$) ve üçüncü terim Hartree enerjisi (E_H) dir (Gülveren 2012; Alfarisa *et al.* 2016).

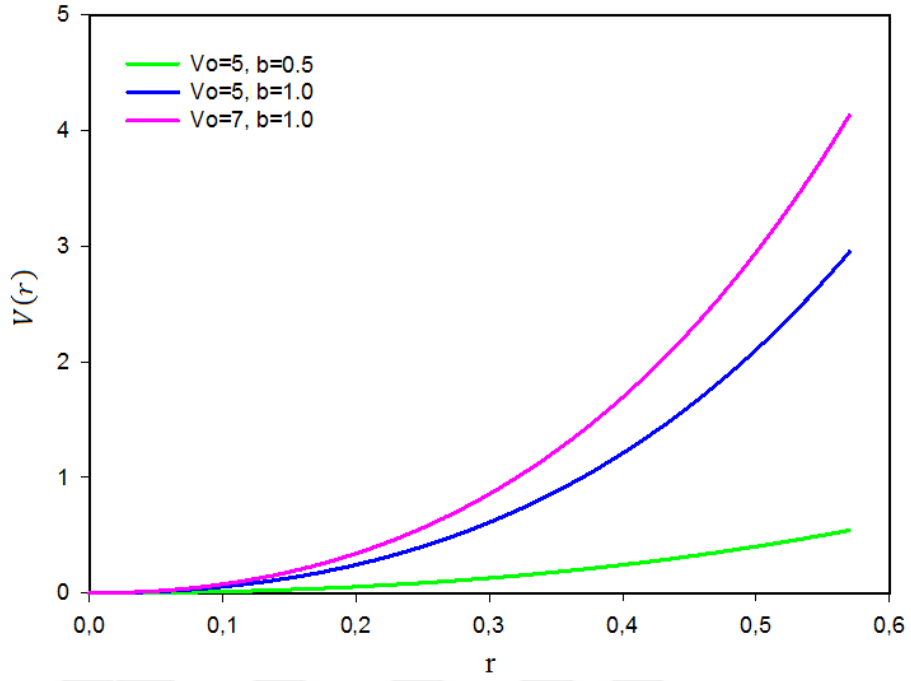
3.1.1. Nümerik analiz

Bilindiği kadarıyla, literatürde, iki boyutlu sistemde $V(r) = V_0(1 - e^{-br})^2$ potansiyel alanında sınırlanmış etkileşen bir elektron gazı için (3.5) denkleminin analitik çözümü mevcut değildir. Bu nedenle nümerik bir çözüm bu tip sistemin temel durum özelliklerini elde etmek için uygulanabilir (Gülveren, 2018). Bunun için kimyasal potansiyel için bir başlangıç değeri belirlenir. Kimyasal potansiyel için rastgele belirlenen değer kullanılarak denklem (3.5) den $V_e(r)$ değerleri elde edilir. $V_e(r)$ değerleri denklem (3.4) de kullanılarak yeni kimyasal potansiyel değeri elde edilir. Bu işlem belli bir kimyasal potansiyel değerine yakınsayana kadar devam eder. Elde edilen veriler aracılığı ile sistemin $n(r)$, E_K, $E_U(r)$, E_H ve E_T belirlenir. Coulomb etkileşiminin bu fiziksel parametreler üzerindeki etkisini araştırmak amacı ile $V_e(r) = 0$ alınarak nümerik hesap tekrarlanır. Elde edilen veriler yine (3.3), (3.4) ve (3.7) denklemleri kullanılarak elde edilen analitik sonuçlarla karşılaştırılır. Nümerik sistemin hassasiyeti belirlenir.

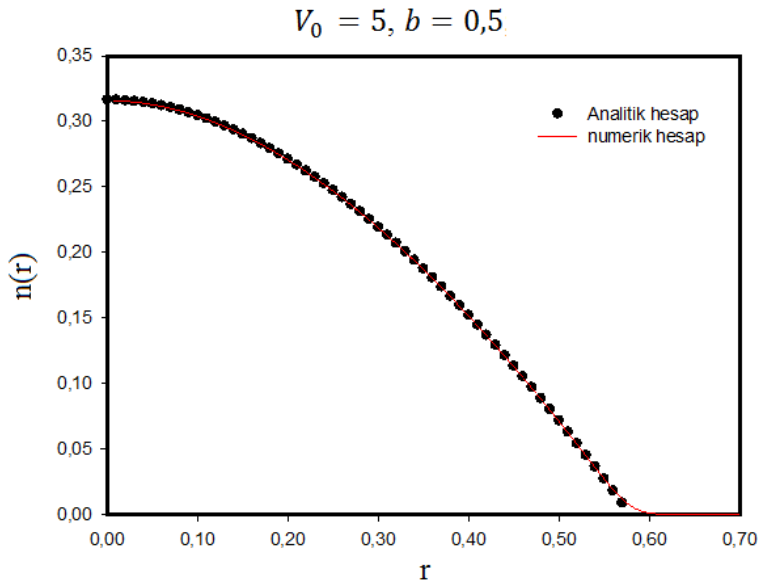
4. ARAŞTIRMA BULGULARI

Bu bölümde, TF yaklaşımı kullanılarak Morse potansiyelinde $V(r) = V_0(1 - e^{-br})^2$ sınırlandırılmış N elektron içeren KN yapılar incelendi. $V_0 = 5$, $b = 0{,}5$; $V_0 = 7$, $b = 0{,}5$ ve $V_0 = 7$, $b = 1{,}0$ alınarak üç farklı potansiyel için sınırlandırma potansiyelinin sistemin elektriksel özellikleri (elektron yoğunluğu $n(r)$, μ kimyasal potansiyel, toplam enerji E_T gibi) üzerindeki etkisi araştırıldı. Bütün hesaplamalarda atomik birimler ($m_e = 1, \hbar = 1, \ldots$ gibi) kullanıldı. Elektron yoğunluğu $(m\omega^2\ \varepsilon_0)/\pi)$, radyal uzaklık $\left(\frac{\varepsilon_0}{m}\right)^{1/2}$ ve toplam parçacık sayısı $N = \Omega\varepsilon_0^2\ \omega^2, (\Omega = 0{,}05)$ cinsinden verildi.

Şekil 4.1'de sınırlandırma potansiyelinin ($(V(r) = V_0(1 - e^{-br})^2$) şeklinin, potansiyel katsayıları V_0 ve b 'ye bağlı olarak değişimi üç farklı durum için incelemektedir. $V_0 = 5$, $b = 0{,}5$ durumunda potansiyel daha yayılmış şeklindedir. V_0 sabit tutularak b katsayısı arttırıldığında (V_0, $b = 0.5$ ve $b = 1.0$) sınırlandırma şekli merkeze doğru parçacıkları itecek şekilde daralmaktadır. Burada $b$katsayısı sabit tutulup V_0 daha da büyütülürse ($V_0 = 5$, $V_0 = 7$, $b = 1.0$) sınırlandırma potansiyelinin parçacıkları merkeze doğru toparlama etkisi daha da artmakta ve içerisinde sınırlandırılan elektron gazının elektriksel özelliklerinin belirlemesinde daha etkin yer alacak hale gelmektedir.



Şekil 4.1. Sınırlandırma Potansiyeli $(V(r) = V_0(1 - e^{-br})^2$'nin potansiyelin katsayıya bağlı olarak değişimi

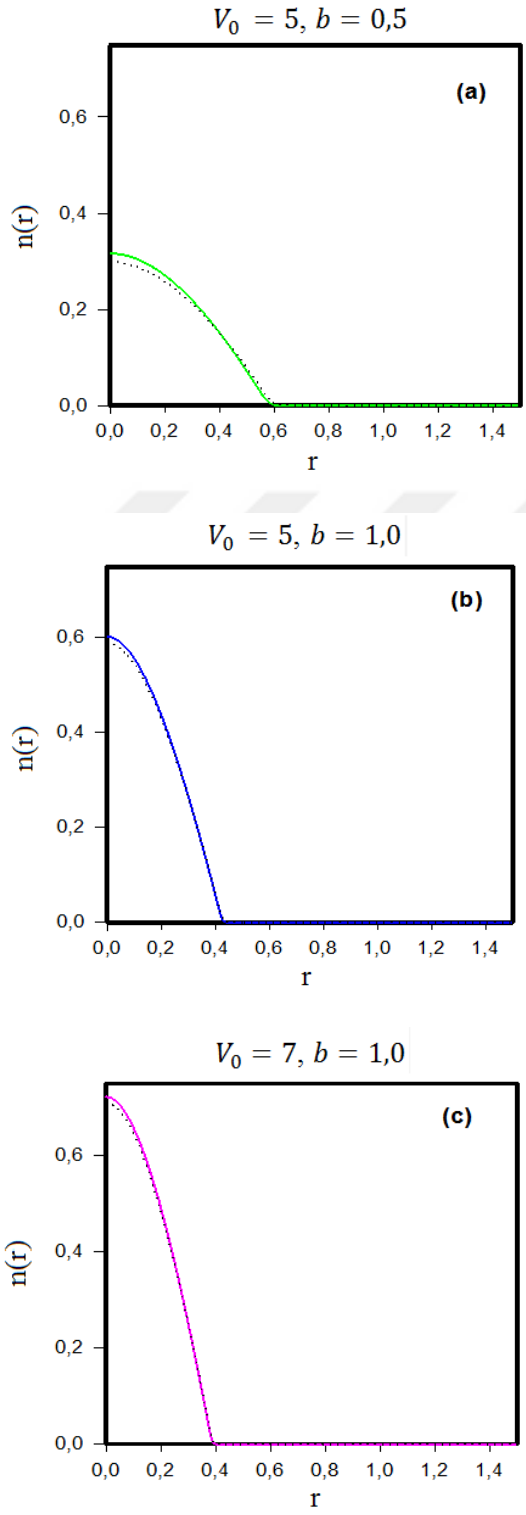


Şekil 4.2. Analitik ve nümerik hesabın uyumunun belirlenmesi (Ω=0.05)

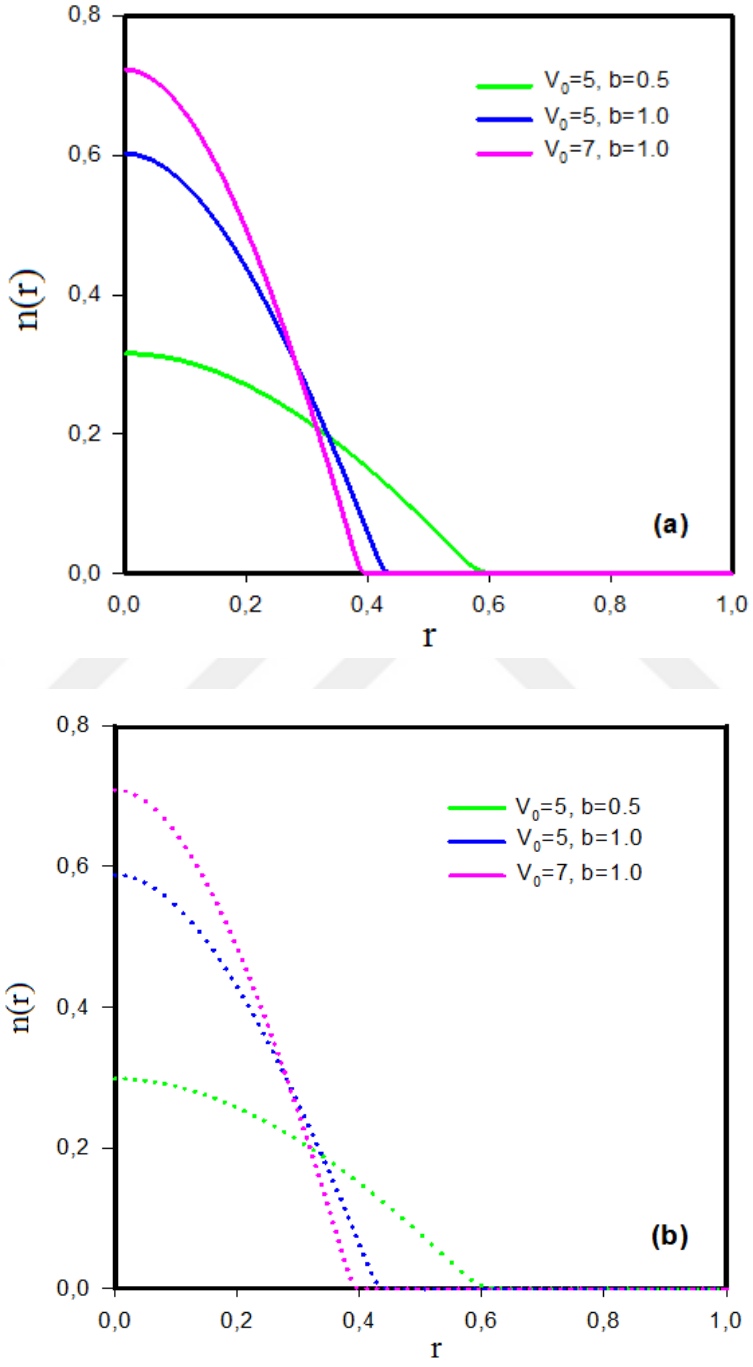
Şekil 4.2'de parçacık etkileşmesinin göz ardı edildiği ($V_e = 0$) sistem için potansiyel şiddetlerinin $V_0 = 5, b = 0.5$ alındığı durumda elde edilen nümerik ve analitik sonuçlar

karşılaştırılmaktadır. Çizgiler nümerik sonuçları, noktalar analatik sonuçları göstermektedir. Buna göre, nümerik ve analitik sonuçların uyumlu olduğu ve uygulanan nümerik prosedürün nokta yapı içerisinde sınırlandırılan elektron gazının fiziksel özelliklerinin belirlenmesinde oldukça etkin olduğu sonucuna varılabilir.

Şekil 4.3 ve 4.4'te sınırlandırma parametrelerinin (V_0 ve b) elektron gazının Coulomb etkileşmesi ve yoğunluk $(n(r))$, nokta yarıçapı gibi fiziksel parametrelerinin belirlenmesi üzerindeki etkisi detaylı olarak araştırılmıştır. Şekil 4.3'ten kolayca anlaşılacağı gibi bütün sınırlandırma parametreleri için (a-c), etkileşen (noktalı çizgi) sistemlerin merkez elektron yoğunluğu (n(0)) etkileşmeyen (düz çizgi) sisteme göre daha düşüktür. Bununla beraber bütün durumlar için (a-c) elektron yoğunlukları radyal uzaklık ile azalmaktadır. Buna bağlı olarak merkez elektron yoğunluğu azaldıkça toplam parçacık sayısı sabit kalacak şekilde radyal uzaklık artmaktadır. Beklendiği gibi Coulomb etkileşimi elektronları sınırlandırılan sistem içinde yaydığından, etkileşen sistemin nokta yarı çapı etkileşmeyen sistemin nokta yarı çapından büyüktür. Şekil 4.3 a'da ve 4.3 b'de V_0 değeri sabit tutularak b katsayısı arttırıdığında (V_0=5, b=0.5 ve b=1) etkileşen ve etkileşmeyen sistemlerin merkez elektron yoğunlukları artmakta nokta yarı çapı azaltmaktadır. Bununla beraber Şekil 4.3 b ve 4.3 c'deki gibi V_0 değeri arttırılarak b kat sayısını sabit tutulursa (V_0=5, V_0=7, b=1) merkez elektron yoğunluğu daha da artmakta buna paralel olarak nokta yarıçapı azalmaktadır. Sınırlandırma katsayılarının arttırılması, etkileşen ve etkileşmeyen sistemlerin nokta içerisinde dağılımları arasındaki farkı azaltmaktadır. $V_0 = 7$, $b = 1.0$ durumu için, etkileşen ve etkileşmeyen sistemlerin nokta yarıçapları ve potansiyel içerisindeki dağılımları arasındaki fark diğer iki duruma kıyasla oldukça azdır. Bununla beraber, merkez yoğunluğu en yüksek değerini (ve dolayısı ile nokta yarıçapı en düşük değerini) hem etkileşen hem de etkileşmeyen sistem için yine $V_0 = 7$, $b = 1.0$ durumunda almaktadır (Şekil 4.4 a-b).



Şekil 4.3. Etkileşmenin yoğunluk üzerindeki etkisinin farklı sınırlandırma potansiyellerindeki elekronlar için belirlenmesi(Ω=0.05). Çizgi etkileşmenin göz ardı edildiği, noktalı çizgi ise Coulomb etkileşmesinin göz önünde bulundurulduğu durum için verilmiştir.



Şekil 4.4. Sınırlandırma parametrelerinin (a) etkileşmeyen (b) etkileşen sistemlerin elektron dağılımı üzerindeki etkilerinin belirlenmesi (Ω=0.05). Çizgi etkileşmenin göz ardı edildiği, noktalı çizgi ise Coulomb etkileşimi göz önünde bulundurulduğu durum için verilmiştir.

Farklı sınırlandırma parametrelerine bağlı olarak etkileşen ve etkileşmeyen sistemlerin kimyasal potansiyel (μ), kinetik enerji (E_K), Hartree enerji (E_H), sınırlandırma potansiyel enerji $E_{v(r)}$, Toplam enerji (E_T) değerlerinde meydana gelen değişim ($\Omega = 0.05$) denklem (3.9) ile hesaplanmış olup Tablo 4.1 'de verilmiştir. Hesaplamalardan, sınırlandırma potansiyel şiddeti arttıkça μ, E_K, $E_{U(r)}$, E_T değerlerinin her iki durum için de arttığı söylenilebilir. Bununla beraber sabit bir sınırlandırma potansiyeli için, etkileşen sistemin μ , $E_{U(r)}$ ve E_T değeri, etkileşmeyen sisteminki ile kıyaslandığında daha büyük olduğu görülebilir. Etkileşme dikkate değer ölçüde μ değerini değiştirmektedir. Bununla beraber, Coulomb etkileşimi sebebiyle toplam enerjiye Hartree enerjisi E_H kadar da bir katkı gelmektedir. Bütün durumlar karşılaştırıldığında toplam enerji en yüksek değerini $V_0 = 7,\ b = 1.0$ durumunda etkileşen sistem için almaktadır.

Çizelge 4.1. Farklı sınırlandırma parametrelerine bağlı olarak sistemlerin kimyasal, kinetik, Hartree, sınırlandırma ve toplam enerjilerinde meydana gelen değişim ($\Omega = 0.05$)

V_0	b	Kimyasal Potansiyel μ	Kinetik Enerji E_K	Hartree Enerji E_H	Sınırlandırma Pot. Enerji $E_{U(r)}$	Toplam Enerji E_T
Etkileşmeyen Sistem						
5	0,5	0,315711	0,005067	0,000000	0,005654	0,010721
	1,0	0,601862	0,009525	0,000000	0,011044	0,020569
7	1,0	0,722155	0,011487	0,000000	0,013134	0,024621
Etkileşen Sistem						
5	0,5	0,337327	0,004764	0,001362	0,005902	0,012028
	1,0	0,630263	0,009208	0,001719	0,011086	0,022013
7	1,0	0,752019	0,011158	0,001804	0,013117	0,026079

5. SONUÇ ve TARTIŞMA

Bu çalışmada temel amaç, KN yapı içerisinde Morse potansiyelinde $V(r) = V_0(1 - e^{-br})^2$ sınırlandırılmış etkileşen elektron gazının taban durum (elektron yoğunluğu, kimyasal potansiyel, kinetik ve Hartree enerji vs. gibi) özelliklerini V_0 ve b sınırlandırılma potansiyel parametreleri değiştirilerek belirlemektir. Yapılan çalışmada, Morse potansiyelinin $V(r) = V_0(1 - e^{-br})^2$ yapısı sebebiyle parçacık sayısı düşük tutulmuş ve potansiyel sınırlandırma parametreleri parçacıkları tamamen sınırlandıracak şeklinde seçilmiştir. Atomik birimler kullanılmıştır. TF denklemi nümerik olarak çözülmüştür. Morse potansiyelinde sınırlandırılan elektron gazı için Coulomb etkileşmesinin sistemin elektronik özellikleri üzerindeki etkisi $V_e = 0$ kabulu ile nümerik ve analitik çözümler kullanılarak belirlenmiştir. Elde edilen sonuçlar V_0 ve b sınırlandırılma potansiyel katsayılarının sınırlandırılan sistemin elektron yoğunluğu, kimyasal potansiyel, kinetik ve Hartree enerji vs. gibi özelliklerini önemli ölçüde değiştirdiğini göstermektedir. Bu çalışmanın, Morse potansiyelinde sınırlandırılan elektron gazı içeren düzlemsel aygıt modellemesi konusunda örnek bilgi teşkil edeceği düşünülmektedir.

KAYNAKLAR

Açiksoz, E., Bayrak, O., and Soylu, A., 2016. Binding energy of the donor impurities in GaAs–Ga1−xAlxAs quantum well wires with Morse potential in the presence of electric and magnetic fields. Chin. Phys. B, 25, 10 100302.

Aftalionand. A., Danaila. I., 2010. Phys. Rev. A, 81:023607.

Alsmeier J, Batke E and Kotthaus J P 1990 *Phys. Rev.* B, **41** 1699.

and density oscillations of quantum dots. Physica E, 8:387.

Ashoori, R. C., 1996. Electrons in artificial atoms. Nature, 379:431.

Bellessa, J., Combescot, M., 1999. Size dependance of impurity levels in quantum dots: exact versus variational results. Solid State Comm, 111:275.

Bera, D., Kuiry, S.C., Seal, S., 2004. Synthesis of nanostructured materials using template-assisted electrodeposition. JOM, 56, 49–53.

Bera, D., Qian, L.H., Kuan Tseng. T., ve Holloway. P., 2010. Quantum Dots and their multimodal applications: A Review, 3, 2260-2345.

Bose. C., ve Sarkar, K., 2000. Binding energy of impurity states in spherical GaAs-Gal-xAlxAs quantum dots. Phys. Stat. Sol. (b), 218:461.

Bowers, M. J.; McBride, J. R.; Rosenthal, S. J., 2005. Journal of the American Chemical Society. 127, 15378–15379.

Bretin, V., Stock, S., Seurin, Y., Dalibard, J., 2004. Phys. Rev. Lett, 92:050403.

Cappelluti, E., Site, L. D., 2002. Physica A, 303, 481.

Chuu, D. S., Hsaio, C. M., Mei, W. N., 1992. Hydrogenic impurity states in quantum dots and quantum wires. Phys. Rev. B, 46:3898.

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 and boxes.Appl. Phys. Lett, 49: 1275.

Ciftja, O., ve Kumar, A. A., 2004. Ground state of two-dimensional quantum-dot helium in zero magentic Perturbation, diagonalization, and variational theory field. Phys. Rev. B, 70:205326.

Davies J H 1988 Supercond. Sci. Technol, 3 995.

Davies, J. H., Larkin, I. A., and Sukhorukov, E. V., 1995 J. Appl. Phys, 77 4504.

Demel, T., Heihnann, D., Grambow, P., ve Ploog, K., 1990. Nonlocal dynamic response and level crossings in quantum-dot structures Phys. Dev. Lett, 64: 788.

Drbohlavova, J., Adam, V., Kizek, R., ve Hubalek, J., 2009. Quantum Dots - characterization, preparation and usage in biological systems. Int. J. Mol. Sci, 10, 656-673.

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

Ferancova, A., Labuda, J., 2008. DNA Biosensors based on nanostrucutred materials. In Nanostrucutred Materials in Electrochemistry; Eftekhari, A., Ed.; Wiley-VCH: Weinheim, Germany, pp.409-434.

Fermi, E., 1927. Rend. Accad. Naz. Lincei 6:602.

Fermi, E., 1928, Rend. Acc. Lincei, 6, 602.

Feynman, R. P., Metropolis, N., and Teller, E., 1949. Equations of state of elements based on the generalized Thomas–Fermi theory, Phys. Rev, 75, pp. 1561–1573.

Fukui T, Ando S and Tokura Y 1991 *Appl. Phys. Lett*, **58** 2018.

Grundman,M., Stier, O., Bimberg, D., 1995. InAs/GaAs Phramidal quantum dots:Strain distribution,on optical phonons and electronics Structure , Physical Review B, **52**:11969-11981.

Gudmundsson, V., Gerhardts, R. R., 1991. Self-consistent model of magnetoplasmons in quantum dots with nearly parabolic confinement potentials. Phys. Rev. B, 43:12098.

Gülveren, B., 2018. The ınfluence of confining parameters on the ground state properties of interacting electrons in a two-dimensional quantum dot with Gaussianpotential. Journal of the Korean Physical Society, 73, 11, December 2018, pp. 1612- 1618.

Gülveren, B., Atav, Ü., Şahin, M., Tomak, M., 2005. A parabolic quantum dot with N electrons and an impurity. Physica E, 30:143.

Gülveren, B., 2012. Int. J. Mod. Phys. B, 26, 1250029-1.

Gülveren, B., 2012. Int. J. Mod. Phys. B 26, 1250152.

Gülveren, B., Şahin, M., Atav, Ü., 2019. The ground state prperties of tow dimensional Fermi gas system confined in a potential composed of harmonic and a Gaussian terms. Chemical Physics, 517 (2019) 48- 53.

Hansen, W., Smith H.I. , Lee, K.L., Brum, J. A., Knoedler, C.M., Hong J.M., Kern, D.P., 1989 Zeeman bifurcation of quantum-dot spectra. Phys. Rev. Lett, 62:2168.

Hansen, W., Smith, T. P., Lee, . K Y., Hong , J. M., Knoedler, C. M., 1990. *Appl. Phys. Lett*, **56** 168.

Hayrapetyan, D.B., Kazaryan, E.M., Kotanjyan, T.V., and Tevosyan, H.Kh., 2014. Exction states and interband absorption cylindrical quantum dot wit Morse confining potential, superlattices and microstructures, 78(2015) 40-49.

Henglein, A., 1989. Small-particle research- physicochemical properties of extremely small colloidal metal and semiconductor particles. Chem. Rev, 89, 1861–1873.

Hodges, C. H., 1973 Can. J. Phys, 51:1428.

Hohenberg, P., and Kohn, W., 1964. Inhomogeneous electron gas, Phys. Rev. 136, pp. B, 864–B871

Howe, K., Lima, A. R. P., Pelster, A., 2009. Eur. Phys. J. D, 54:667.

Hsiao, C. M., Mei, W.N., Chuu, D. S., 1992. Quantum confinement effect on the impurity states of a spherşcal confining system. Solid State Comm, 81:807.

Iadonisi, G., Degoli, E., Ossicini, S., 2006. Europhys. Lett, 74,519.

Jacak, L., 2000. Semiconductor quantum dots- towards a new generation of semiconductor devices. Eur. J. Phys, 21:487–497.

Jacak, L., Hawrylak, P., and Wojs, A., 1998. Quantum Dots. Berlin, Springer.

Johnson, N.F., 1995. Quantum dots -few-body, low-dimensional systems. J Phys. Condens Marter, 7: 965.

Kamat, P. V., 2008. The Journal of Physical Chemistry C 2008, 112, 18737–18753

Kash, K., Scherer, A., Worlock, J. M., Craighead, H. G., and Tamargo M C 1986 Appl. Phys. Lett, 49: 1043.

Kim, J. K., and Fetter, A. L., 2004. Phys. Rev. A, 70:043624.

Kluson, P., Drobek, M., Bartkova, H., Budil, I., 2007. Welcome in the Nanoworld. Chem. Listy, 101, 262-272.

Kohn, W., 1999. Electronic structure of matter—wave functions and density functionals, Rev. Mod. Phys, 71, pp. 1253–1266.

Kouvenhowen, L., Marcus, C., 1998. Quantum dots Phys. Word June: 35.

Kral, V., Sotola, J., Neuwirth, P., Kejik, Z., Zaruba, K., Martasek, P., 2006. Nanomedicine – Current status and perspectives: A big potential or just a catchword. Chem. Listy, 100, 4-9.

Kuchibhatla, S., Karakoti, A.S., Bera, D., Seal, S., 2007. One dimensional nanostructured materials. Prog. Mater. Sci, 52, 699–913.

Landau, L. D., 1977. Lifshitz, E. M.,Quantum Mechanics, Pergamon Pres.

Laux S E, Franck J D and Stern F 1988 Surf. Sci, 196

Levine, I., 2000.The Particle in a Box, Part 2, Quantum Chemistry 5th ed. Includes bibliographical references and index. ISBN, 0-13-685512-1.

Li, M. Chen, L. Chen, J. 1999. Density of states of particles in a generic power-law potential in any dimensional space. Phys. Rev. A, 59:3109.

Li, M., Yan, Z., Chen, J., Chen L., and Chen, C., 1998. Thermodynamic properties of an ideal Fermi gas in an external potential with *U=brt* in any dimensional space. Phys. Rev.A, 58:1445.

Li, M., Yan, Z.,Chen, L., and Chen, C., 1998. Thermodynamic properties of an ideal Fermi gas in an external potential with $U = br^t$ in any dimensional space. Phys. Rev. A, 58:1445.

Liboff, R. L.,1977. "Introductory Quantum Mechanics", Addison Wesley Lieb, E. H., 1981. Thomas –Fermi and related theories of atoms and molecules. Rev. Mod. Phys, 53:603.

Lieb, E. H., 1981. Rev. Mod. Phys, 63,151.

Lieb, E. H., 1981. Rev. Mod. Phys, 53, 603.

Lieb, E. H., Solovej, J. P., Yngvason, J., 2000. Phys. Rev. B, 51, 646

Liu, C. T., Nakamura, K., Tsui, D. C., İsmail, K., Antoniads, D. A., Smith, H. I., 1989. Magneto-optics of a quasi-zero- dimensional electrons-gas. App. Phys. Lett, 55:168.

Lorke, A., Kothaus, J.P., and Ploogy, K., 1990. Coupling of quantum dots on GaAs. Phys.Dev. Lett, 64:2559.

magnetic field. Eur. Phys. J. B, 13 :723

Martorell , J., and Sprung, D. W. L., 1997. unpublished.

Martorell, J., Wu, H., and Sprung, D. W. L., 1994 Phys. Rev. B, 50 17 298.

McQuarrie, D. A., 1976. Statistical Mechanics (Harper and Row, New York).

Meurer, B., Heitmann, D., Ploog, K., 1992. *Phys. Rev. Lett*, **68 :**1371.

Michalet, X., Pinaud, F. F., Bentolila, L. A., Tsay, J. M., Doose, S., Li, J. J., Sundaresan, G., Wu, A. M., Gambhir, S. S., Weiss, S. Science 2005. 307, 538–544.

Morse, P. M., 1929. Diatomic Molecules According to the Wave Machanics 2. Vibrational Level. Physical Review, 34:57.

Ninno, D., Trani, F., Cantele, G., Hameeuw, K. J., Oszwaldowskoi, R., Gothgen, C., ve Zutic, I., 2010. Theory of quantum dot spin lasere. Phys. Rev. B, 82:085316.

parabolic quantum dot. Phys. Rev. B, 58:4644

Parr, R. G., and Yang, W., 1989. Density Functional Theory of Atoms and Molecules (Oxford University Press, New York). Particles in an Anharmonic Potential. Int J Quantum Chem, 102: 158–164, 2005.

Pathria, R. K., 1977. Statistical Mechanics (Pergamon, New York, 1977).

Petroff, P. M., Gossard, A. C., Logan, R. A., and Wiegmann W., 1982. Toward quantum well wires: Fabrication and optical properties Appl. Phys. Lett, 41: 635.

Pino, R. 1998. Exact solution of the Thomas-Fermi two-dimensional *N*-electron parabolic quantum dot. Phys. Rev. B, 58:4644

Pino, R. 2000. Two-dimensional Thomas-Fermi parabolic quantum dot in a weak.

Pino, R., Markvoot., A. J., ve Hilbers, P. A.,2003. Local Thomas-Fermi approximation for modeling the electronic structure of planar devices. J . Physica B, 325:149.

Puente, A., Casas M. ve Serra, L. 2000. A semiclassical approach to the ground state

Puglia, S. J., Bhattacharrya, A., Furnstahl, R. J., 2003. Nucl. Phys. A, 723, 145.

Rasanen, E. Könemann, J. Haug, R. J. Puska, M.J. Nieminen, M. 2005. Charecterization of deformed quantum dots by modelling single-elektrontunnelin experiments. Physica E, 26:477.

Raymond, S., Fafard, S., Poole, P. J., W´ojs, A., Hawrylak, P., Charbonneau, S., Leonard, D., Leon, R., Petroff, P. M., and Merz J. L., 1996. *Phys. Rev.* B, **54** 11548.

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

Reed, M. A., Bate R. T., Bradshaw, K., Duncan, W. M., Frensley, W. M., Lee, J. W and Smith, H .D., 1986. Spetial quantization in GaAs- AlGaAs multiple quantum dots. J. Vacuum Sci.Technol. B, 4: 358.

Rosenthal, S. J., Tomlinson, I., Adkins, E. M., Schroeter, S., Adams, S., Swafford, L., McBride, J., Wang, Y., DeFelice, L. J., Blakely, R. D., 2002. Journal of the American Chemical Society, 124, 4586–4594.

Ryu, C., Andersen, M. F., Clade, P., Natarajan, V., Helmerson, K., Phillips, W. D., 2007. Rev. Lett, 99: 260401.

Saha, B., Sil, A.N., Das, A. K., Mukherjee, P.K.,2004. Energy Levels of Two Interacting.

Schreuder, M. A., Gosnell, J. D., Smith, N. J., Warnement, M. R., Weiss, S. M., Rosenthal, S. J., 2008. Journal of Materials Chemistry, 18, 970–975.

Sercel, P.C., Vahala, K.J., 1990. Analytical formalism for determining quantum-wire and quantum-dot band structure in the multiband envelope-function approximation. Phys. Rev. B, 42:3690.

Sergeev, A., Jovanovic, R., Kais, S., Alharbi, F. H., 2016. J.Phys. A: Math. Theor. 49, 285202.

Sikorski, C., and Merkt, U., 1989. *Phys. Rev. Lett*, **62** 2164

Sinha, S., 2000. Collective excitation in quantum dots. Physica E 8:24.

Sinha, S., Shankar R. ve Murthy,M. V. N. 2000. Shell effects in quantum dots: A semiclassical approach. Phys. Rev. B, 62:10 896.

Smith, T. P., Lee, K. Y., Knoedler, C. M., Hong, J. M., Kern, D. P., 1988. Phys. Rev. B, 38:2172.

Spruch, L., 1991. Pedagogic notes on Thomas-Fermi theory (and on some improvements): atoms, stars, and the stability of bulk matter. Rev. Mod. Phys, 63:151.

Swafford, L., Rosenthal, S. J. 2003. Molecular and Nanocrystal Based Photovoltaics. In Molecular Nanoelectronics; Reed, M. A., Lee, T., Eds.; American Scientific Publishers.

Temkin, H., Dolan, G. J, Panish, M. B., and Chu, S. N. G.,1987. Low-temperrature photoluminesence from InGaAs/InP quantum wires and boxes. Appl. Phys. Lett, 50:413.

Tewordt, L. Wolkhausen Th. 1990. Theory of phonon thermal conductivity for strong-coupling s- and d-wave pairing in high Tc superconductors. Elsevier 75:515.

Tomas, L.H. 1927. The calculation of atomic fields. Proc.Cambridge Philos. Soc, 23:542.

Torrens, I. 1972. Interatomic Potentials; Academic Press: San Diego, CA.

Trindade, T., O'Brien, P., Pickett, N.L., 2001. Nanocrystalline semiconductors: Synthesis, properties, and perspectives. Chem. Mater, 13, 3843–3858.

Tulkki, J., Henamaki, A., 1995. Confinement effect in a quantum well dot induced by an InP stressor. Phys. Rev. B 52: 8239.

Varshni, Y. P., 1999. Accurate wavefunction for hydrogenic donors in GaAs-(GaAl)As quantum dots. Phys. Lett. A, 252:248.

Varshni, Y. P., 1999. Accurate wavefunction for hydrogenic donors in GaAs- (Ga, Al) As quantum dots. Phys. Lett. A, 252:248.

Vignolo, P., Minguzzi, A., Tosi, M. P., 2000. Phys. Rev. Lett. 85, 2850.

Von Weizsacker, C.F. 1935. Z. Phys, 96:431.

Wagner, M., Merkt, U., and Chaplik, A.V., 1992. Spin-singlet-spin triplet oscillations in quantum dots. Phys. Rev.B 45:1951.

Wang, W., Chen, C., Lin, K. H., Fang, Y., Lieber, C.M., 2007. Nanosensors. US, 2007/0264623 A1.

Xia, J.B., 1989. Electronic structures of zero-dimensional quantum wells. Phys. Rev. B, 40:8500.

Yakimenko, I I., Zozoulenko, I V., and Berggren, K-F., 1999. Electronic configurations in coupled many-electron quantum-dot systems. Semicond. Sci. Technol, 14 (1999) 949–957. Printed in the UK.

Ye, Z.L. Zaremba, E. 1994. Magnetoplasma excitations in anharmonic electron dots. Phys. Rev. B, 50:17217.

Zhitenev, N B, Brodsky, M., Ashoori, R. C., Pfeiffer L N and West K W 1999. *Science*, 285 715.

ÖZGEÇMİŞ

1990 yılında Kerkük'te doğdu. İlk orta ve lise eğitimini Irak (Kerkük'te) bulunan okullardan mezun oldu. 2010 yılında Yurtdışı Türkler ve Akraba Topluluğu Başkanlığı Tarafından burs kazanarak Ankara'da Gazi Üniversitesinde Türkçe ve Yabancı Dil Eğitim Uygulama ve Araştırma Merkezinde (TÖMER) 1 yıl boyunca Türkçe hazırlık okudu. 2011 yılında Samsun'da Yurtdışı Türkler ve Akraba Topluluğu Başkanlığı Tarafından burslu olarak Ondokuz Mayıs Üniversitesi, Eğitim Fakültesinde Fizik Öğretmenliği Bölümünü kazanarak lisans eğitimine başladı ve 2016 yılı haziran ayında Fizik Öğretmenliği Bölümünden mezun oldu. 2016 yılında Yurtdışı Türkler ve Akraba Topluluğu Başkanlığı Tarafından bursluluk sınavına girdi ve burs kazanarak 2017 yılı Mart ayında Atatürk Üniversitesi, Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı Genel Fizik Bilim Dalında yüksek lisans eğitimine başladı ve araştırma çalışmaları devam etmektedir.