

T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FARKLI POTANSİYELLERDE
SINIRLANDIRILMIŞ ÇOK ELEKTRONLU
KUANTUM NOKTA YAPILARIN
ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ
SUDE KART
YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
Konya, 2010

ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

FARKLI POTANSİYELLERDE SINIRLANDIRILMIŞ ÇOK ELEKTRONLU KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

Sude Kart

Selçuk Üniversitesi
Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Yrd. Doç. Dr. Berna GÜLVEREN
2010,....sayfa

Jüri:

Bu çalışmada öncelikle kuantum nokta yapıların atomlarla olan benzerliği tartışılmış, sonra çok elektronlu sistemlerin fiziksel özelliklerini araştırmak amacı ile kullanılan istatistiksel yöntemler olan, Hartree-Fock yaklaşımı (H-F) , yoğunluk fonsiyonel teoremi ve Thomas Fermi (T-F) atom modeli tanıtılmıştır. Daha sonra Thomas Fermi denklemi iki boyutlu kuantum nokta yapılar için, harmonik (αr^2), r^4 (γr^4), harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) ve deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) farklı potansiyellerde sınırlandırılmış etkileşmeyen elektronlar için, $T=0$ K sıcaklığında çözülmüştür. Aynı şekilde iki boyutlu kuantum nokta yapıda $v(r)=br^t$ potansiyelinde sınırlandırılmış etkileşmeyen sistemin fiziksel özellikleri sonlu sıcaklıkta ifade edilmiştir. Farklı potansiyeller için düşük sıcaklıkta analitik ifadeler türetilmiştir.

Anahtar kelimeler: Kuantum nokta yapılar, Thomas Fermi yöntemi.

ABSTRACT

Ph. D. Thesis

ELECTRONICAL PROPERTIES OF QUANTUM DOTS CONTAINING MANY ELECTRONS CONFINED BY VARIETY OF POTENTIALS

Sude Kart

Selcuk University
Graduate School of Natural and Applied Sciences
Department of Physics

Supervisor: Yrd. Doç. Dr. Berna GÜLVEREN
2010,....pages

Jury:

In this study, the similarity of quantum dot structures to the atoms . Then, statistical methods named hartree-Fock approach (H-F), density functional theory and Thomas Fermi (T-F) approximation which are used the analyze many particle systems introduced presented first. Afterwards, Thomas Fermi equation is solved for T=0 K temperature at different potentials (i.e. harmonic (αr^2), r^4 (γr^4), un-harmonic ($\alpha r^2 + \gamma r^4$), r^4 potential (γr^4) ve deformed ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$)) in two-dimension non-interaction system. The physical property of non-interaction system confined in the $v(r) = br^4$ potential in the two-dimension quantum dot structure is introduced at finite temperature. Analytic definitions are derived for various potentials at low temperatures.

Key Words: Quantum Dot Structures, Thomas Fermi Method.

ÖNSÖZ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne Yüksek Lisans tezi olarak sunulan bu çalışmada, farklı potansiyellerde sınırlandırılmış nokta yapıların elektronik özellikleri teorik olarak incelenmiştir.

Çalışma süresince bilgi ve tecrübeleri, bilimsel rehberliği ile manevi olarak desteğini esirgmeden hep arkamda duran saygıdeğer hocam **Yrd. Doç. Dr. Berna GÜLVEREN**'e en içten teşekkürlerimi sunarım.

Tüm çalışmam boyunca beni her zaman maddi ve manevi olarak destekleyen annem, babam ve eşime çok teşekkür ederim.

Sude Kart

İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	iii
ABSTRACT.....	iv
ÖNSÖZ.....	v
1.GİRİŞ.....	1
2. YAPAY ATOM OLARAK KUANTUM NOK YAPILAR.....	7
3.N ELEKTRONLU SİSTEMLER.....	10
3.1. Hartree-Fock Yöntemi	10
3.2. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi	13
3.3. Thomas-Fermi (T-F) Atom Modeli.....	17
3.1.1. Fermi Enerjisi.....	20
3.1.2. Çok Elektronlu Atomlar Ve İyonlar İçin Thomas Fermi Kuramı...22	
4. FARKLI POTANSİYELLERDE SINIRLANDIRILMIŞ N ELEKTRONDAN OLUŞAN İKİ BOYUTLU KUANTUM NOKTA YAPININ FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN T=0 K'DE İNCELENMESİ.....	24
4.1 Farklı Sınırlandırma Potansiyelleri İçin Thomas-Fermi Denklemi'nin T=0 K de Çözümü	24
4.2Sonuç ve Tartışma.....	28
5. İKİ BOYUTLU KUANTUM NOKTA YAPIDA $v(r)=br^t$ POTANSİYELİNDE SINIRLANDIRILMIŞ ETKİLEŞMEYEN SİSTEMİN TERMAL ÖZELLİKLER.....	36
5.1 n Boyutta ve br^t Potansiyelde Sınırlandırılmış Sistemin Termal Özellikleri.....	36
5.2 Farklı Potansiyellerde Sınırlandırılmış N Elektronda Oluşan İki Boyutta ve Farklı Potansiyellerde (harmonik (αr^2), r^4 Potansiyeli (γr^4), Harmonik Olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$), Deforme Edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$)) Sınırlandırılmış Elektronların Termal Özellikleri.....	41
5.3 Sonuç ve Tartışma.....	44
6. SONUÇ VE TARTIŞMA.....	50
7. KAYNAKLAR.....	51

1. GİRİŞ

Uzun bir süredir elektronik sistemlerdeki bilimsel arařtırmalar, atomlar, parçacıklar, metalik veya yarıiletken kristaller ya da beta radyasyon ışınları ile sınırlandırılmıştır (Jacak vd., 1998). Bunların pek çoğu üç boyutlu sistemler olup atomlarda ve kristal kusurlarda, elektronların (örneğin safsızlıklarda) iki ya da daha az boyutta sınırlandırılmasıyla meydana gelmektedir.

1970'lerin başlarında bir boyutta sınırlandırılmış kuantum kuyu olarak adlandırılan yeni bir araştırma alanı göze çarptı. Kuantum kuyu, daha yüksek iletim bant enerjisine sahip iki yarıiletken malzeme arasına sıkıştırılmış diğerk bir yarıiletken malzemeden oluşur. İki materyalin iletim bandı enerjisi arasındaki fark, elektronları ince düzlem içerisinde tutar. Yarıiletken içerisindeki elektronun etkin kütlesi küçük olduğundan De Broglie dalga boyu göreli olarak büyüktür. Düzleme bağılı elektronun hareketi iki boyutludur ve düşey boyuttaki uyarılmalar güçlü bir şekilde kuantumlanmıştır.

Elektronik ve opto elektronikte umut verici uygulamaları olan sanki iki boyutlu sistemlerin yeni, sıradan olmayan özellikleri pek çok araştırma laboratuvarının ilgisini çekmiştir. Bu durum üretim teknolojisinin ve yaygın arařtırmaların hızlı gelişmesine yol açmıştır. Bu çalışmalarla birlikte kuantum kuyular üretilmiş, CD çalarlardaki lazer diyotları veya uydu televizyonlarında kullanılan mikrodalga alıcılar gibi aletlerde yıllardır kullanılmaktadır.

1980'lerin başında teknolojiadaki hızlı gelişmeler, özellikle çok doğru üretim teknikler yardımıyla elektronların kuantum tel olarak adlandırılan sanki bir boyutlu yapılarda sınırlandırılmasını mümkün kılmıştır. Kuantum teller örneğin kuantum kuyu içeren numune içinde minyatür şeritler şeklinde üretilir (Petroff vd. 1982).

Elektronların serbest hareketlerinin tamamen kuantizasyonu, onları sanki sıfır boyutlu kuantum nokta yapıların içinde sınırlandırarak yapılır. Bu ilk defa Texas Alet Şirketi'nden arařtırmacılar tarafından başarılmıştır. Reed ve arkadaşları (1986) 250 nm uzunluğunda kesilmiş kare kuyudan nokta üretimini yapmışlardır. Daha sonra kuantum nokta yapının boyutları 30-45 nm' den daha aza indirilmiştir (Cibert vd. 1986; Temkin vd. 1987).

Üç boyutta kuvvetli uzaysal sınırlandırmanın sonucu olarak kuantum nokta yapılar atomlara benzerdir ve bu nedenle sıklıkla yapay atomlar, süper atomlar ve kuantum nokta atomlar olarak adlandırılırlar. Kuantum nokta yapıları ilginç kılan özelliklerinden biri yapılarının, boyutlarının, enerji düzeylerinin ve sınırlandırılmış elektron sayılarının kontrol edilebilmesidir. Bununla birlikte, çok sayıda elektrondan oluşan kuantum nokta yapıların oluşturduğu kristal yapılar içindeki bant yapıları gözlemlenebilmektedir. Bir çift etkileşen kuantum nokta yapılardan oluşan yapay moleküllerin özellikleri Tarucha ve arkadaşları (Tarucha vd., 1998) tarafından incelenmiştir.

Kuantum nokta yapılar tipik olarak iki boyutlu elektron gazının yarı iletken heteroyapının ortak yüzey bölgesinde sınırlandırmak amacıyla metal girişlere elektrostatik potansiyel uygulayarak yapılır. Sınırlandırıcı potansiyel, üretim tekniğine bağlı olarak çok çeşitli şekillerde olabilir (Xia 1989; Sercel ve Vahala 1990; Wagner ve Merkt 1992; Tulkki ve Henamaki 1995; Rafał Oszwałdowski vd. 2010).

Xia (1989), kuantum kuyuların sıfır boyutlu elektronik yapılarını etkin kütle teorisinin desteklediği bir modelle çalışmıştır. Wagner ve arkadaşları (1992), yarı iletken yüzeydeki bir diskte sınırlandırılmış etkileşen iki elektronu, dik bir manyetik alan içinde ele almışlar ve deneysel gerçekliklerle uygun olarak, bu disk yüzeyindeki elektronları sınırlamak için iki boyutlu harmonik osilatör kuyusunu kullanmışlardır. Tulkki ve Henamaki (1995), serbest InP topluluğu tarafınca uyarılan $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$ kuantum kuyusundaki hapsedilme etkisini hesaplamışlardır. Enerji düzeylerini, direk etkileşmeyi ve Luttinger-Kohn Hamiltonian 'deki kenar band sınırlandırmasını göz önüne alarak hesaplamışlardır. Rafał Oszwałdowski ve arkadaşları (2010) spini polarize edilmiş elektronların püskürtülmesiyle yarı iletken bir kuantum noktanın şeklini formüle etmişlerdir.

Sınırlandırma şekli, kuantum nokta sistemlerin elektronik yapılarını önemli bir biçimde etkiler. Harmonik (αr^2) sınırlandırma kabulü, gerçek bir kuantum nokta yapının dış potansiyeli için anlamlı bir yaklaşıklık sağlar. (Johnson 1995; Demel ve diğerleri 1990; Lorke vd. 1990; Liu vd. 1989, Hansen vd. 1989; Tewordt vd. 1990). Ayrıca ileri üretim teknikleriyle, harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$), r^4 potansiyeli (γr^4), deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) potansiyeller gibi farklı sınırlandırma potansiyellerinde sınırlandırılmış sistemleri incelemek, hem teorikcilerin hem de deneycilerin ilgisini

çekmiştir (Ye vd. 1994; Rasanen vd. 2005; Gudmundsson ve Gerhardts 1991; Demel vd. 1990; Li vd. 1998; Li vd.1999).

Kuantum nokta yapıların fiziksel özellikleri araştırılırken çeşitli hesaplama yöntemleri kullanılır. Şu ana kadar, yarı iletkenlerin elektronik özelliklerini araştırmak amacıyla yapılan çalışmaların bir kısmı analitik ve diğerleri ise varyasyonel veya nümerik işlemlere dayanmaktadır (Bellesa ve Combescot 1999; Varshni 1999; Bose ve Sarkar 2000). Örneğin Ciftja ve arkadaşı (2004) iki boyutlu parabolik olarak sınırlandırılmış bir potansiyelde etkileşen iki elektronlu bir sistemde pertürbasyon ve varyasyonel teoriyi kullanarak sıfır dış manyetik alanındaki iki boyutlu kuantum nokta helyumunun taban durumu özelliklerini çalışmışlardır. Ancak, son yıllarda genetik algoritma olarak adlandırılan yeni optimizasyon tekniği kuantum mekaniğinde optimizasyon ve minimizasyon problemlerinde kullanılır hale gelmiştir (Chaudhury ve Bhattacharyya 1998; Nakanishi ve Sugawara 2000; Grigorenko ve Garcia 2000).

Son on yılda düşük boyutlu heteroyapıdaki safsızlıkla ilgili özellikleri araştırmak amacıyla pek çok teorik ve deneysel çalışmalar yapılmıştır (Porras-Montenegro vd. 1991,1992,1993; Zhu vd. 1989,1990; Ribeiro ve Ladge 1994; Yang vd. 1998; Ferreyra ve Proetto 1995; Lee vd.1999; Yau ve Lee 2003; Bastard 1981, Weber vd.1988; Bryant 1985; Brum 1985; Oliveira vd.1986, 1988,1993; Morgan vd. 1991). Safsızlık içeren bu tip sistemlere büyük ilgi materyalin enerji düzeylerini değiştirmeleri ve dolayısıyla elektronik ve optik özelliklerin etkilemelerindedir.

Porras-Montenegro ve arkadaşları (1992,1993), GaAs-GaAlAs için varyasyonel yöntemi kullanarak kuantum nokta yapının safsızlık bağlanma enerjilerini nokta yarıçapının fonksiyonu olarak hesaplamışlardır. Zhu ve arkadaşları (1989,1990), sonlu potansiyelde ve seri açılım kullanarak kuantum nokta yapı merkezindeki safsızlığın bağlanma enerjisini hesaplamıştır. Kübik GaAs kuantum nokta yapı için taban durum, safsızlık bağlanma enerjileri ve yoğunluk gibi fiziksel özellikler Ribeiro ve Latge (1994) tarafından hesaplanmıştır. Başka bir çalışmada, Yang ve arkadaşları (1998), merkezdeki hidrojenik safsızlığın enerji düzeylerini basit tam çözümler kullanarak hesaplamışlardır. Lee ve arkadaşları (1999), kuantum yapılarda verici safsızlık ve sınırdaki dielektrik uyumsuzluk etkisini çalışmışlardır. Yau ve Lee (2003), merkezdeki Coulomb saflığına bağlı N elektronlu kutuplu nokta yapı için nümerik metodu önermişlerdir.

Kuantum nokta yapılarda sınırlandırılan elektron sayısı birkaç elektrondan binlerce elektrona kadar değişebilir. Etkileşen elektronların sayısı arttığında geleneksel yöntemleri kullanarak hesaplama yapmak problem hale gelir. Bu durumda, problemi çözülebilir hale getirmek için birçok fiziksel yaklaşım geliştirilmiştir. Bunlara örnek olarak, Hartree-Fock, Thomas-Fermi, yoğunluk fonksiyonel teorisi verilebilir.

15 yılın üzerinde yoğunluk fonksiyonel teorisi, çok elektronlu sistemleri çalışmada faydalı bir metot haline gelmiştir. Çok iyi bilinen Thomas-Fermi (T-F) yöntemi bu teorinin temelini oluşturur. Bu yöntem istatistiksel bir yöntem olup, sistemlerin enerji davranışı, yoğunluk davranışı gibi pek çok fiziksel özelliği bu yolla doğru ve hızlı bir biçimde araştırılabilir.

Thomas-Fermi (T-F) yaklaşımı ve değiştirilmiş şekilleri geçmişte pek çok yazar tarafından fermi sistemlerinin (atom, iyon, çekirdek...) potansiyel alan ve yük yoğunluklarının elde edilmesinde kullanılmıştır (Thomas 1927; Fermi 1927; Von Weizsacker 1935; Hodges 1973; Lieb 1981; Spruch 1991). Yöntemin bununla birlikte yarıiletken nanoyapılarda da uygulaması vardır. Örneğin, Pino (1998,2001) iki boyutlu parabolik kuantum nokta yapının kimyasal potansiyel, toplam enerji gibi fiziksel özelliklerini manyetik alan varlığında (Maksym ve Chakraborty 1990) ve yokluğunda (Gulveren vd. 2005) T-F denklemini Poisson denklemi ile birlikte çözerek araştırmıştır. Benzer bir biçimde, Lieb ve arkadaşları (1981), iki boyutlu T-F denklemini kullanarak manyetik alan varlığında geniş bir kuantum nokta yapının özelliklerini incelemiştir. Aynı yaklaşım yaklaşık 30-100 arasında elektron içeren sisteme de uygulanmıştır (Sinha vd. 2000). Sinha (2000), etkin elektron etkileşimlerinin elektron sayısı ile değişmesi sebebiyle, T-F yaklaşımını çok çeşitli e-e etkileşim şekilleri için parabolik kuantum nokta yapının taban durum özelliklerini tartışmıştır. Puente ve arkadaşları (2000), Weizsacker gradyan terimini de ekleyerek T-F yöntemini, çeşitli şekillerdeki iki boyutlu nanoyapıyı tanımlamakta kullanmıştır. T-F kinetik, Dirac değiş-tokuş ve Hartree bölgesel enerjiye dayanan orbital serbest yaklaşımı, üç boyutlu kuantum nokta yapı düzeneğinin taban durum yoğunluğunu hesaplamak için kullanılmıştır (Pino vd. 2003). Spruch (1991) ise daha çok belirsizlik ve dışarlama ilkeriyle Coulomb veya Newton kuvvet yasalarının uygulaması gibi Thomas Fermi teorisinin temeline odaklanmıştır. Çünkü, olayın sayısal hasiyettinden çok fiziksel anlamıyla ilgilenmiştir. Reimann ve Manninen

(2002) sanki iki boyutlu yarı iletken kuantum noktalarının özellikleri incelenmişlerdir. Elektronik kabuk yapısını ve manyetik alan etkisi için deneysel tekniklerini kısaca tanımlamışlar ve elektronik yapılarını basit tek parçacık modelleri, yoğunluk fonksiyonel teorisi ve tam köşegenleştirme metodları sayesinde analiz etmişlerdir.

Son zamanlarda, sınırlandırılmış fermi sistemlerinin fiziksel özelliklerinin sıcaklıkla değişimine büyük ilgi vardır. Bu çalışmaların birçoğunda T-F yöntemi sınırlandırılmış elektronların araştırılmasında kullanılmıştır. Li ve arkadaşları (1998), T-F yöntemini herhangi bir d boyutunda ve br^d gibi dış potansiyelle sınırlandırılmış ideal (etkileşmeyen) fermi gazının elektronik özelliklerini araştırmada kullanmışlardır. Bununla birlikte bazı fiziksel özelliklerin analitik ifadelerini vermişler ve bu özelliklerin yüksek ve düşük sıcaklık davranışlarını, uzay boyutlarına ve dış potansiyele bağımlılığını tartışmışlardır. Benzer bir biçimde, Zyl ve arkadaşları (2003), ideal sınırlandırılmış fermi gazı için, tam analitik sonuçları sonlu sıcaklık için parçacık ve kinetik enerji yoğunluklarını tanıtmışlar ve büyük parçacık sayıları için $T = 0$ K' deki tam kuantum gösterimlerinin asimtotik olarak kendi T-F sonuçlarına yaklaştığını göstermişlerdir. Bhaduri ve arkadaşları(1996), T-F yaklaşımını iki boyutlu etkileşen fermion sistemini araştırmada kullanmışlardır. Buna rağmen, sıcaklık bağımlı incelemelerini kısa mesafeli parçacık etkileşimleri ile sınırlandırmışlardır. Abdullah ve arkadaşları (2009) tek ve çift kuantum nokta yapıları hesaba katarak, sınırlandırma potansiyellerinin genel bir sınıfı için bir nanoyapıda iki elektron arasına sınırlandırılmış uzaysal karmaşıklıkları hesaplamışlardır.

Luscombe ve Luban (1990), $T=0$ 'da T-F denkleminin tam sonuçlarını nanoyapılardaki etkileşmeyen fermionlar için türetmişlerdir. Ayrıca sonlu sıcaklıklar için, kendinden tutarlı potansiyel ve yoğunluk fonksiyonlarını hesaplamışlardır. Benzer bir biçimde, T-F denklemini sonlu sıcaklıklara genelleştirilmiş, eşli Poisson ve Schrödinger denklemleri nümerik olarak kuantum telleri için elektron yoğunluğu ve sınırlandırıcı potansiyel hesabı için çözülmüştür.

Bu tez çalışmasındaki asıl amaç, iki boyutlu kuantum nokta yapıda sınırlandırılmış ideal etkileşmeyen elektronların özelliklerini T-F yöntemi ile incelemektir. Bu amaçla, öncelikle birinci bölümde nokta yapının temel özelliklerinden bahsedilmiştir. Kuantum nokta yapıların atomlara olan

benzerliğinden ikinci bölümde bahsedilmiştir. Üçüncü bölümde çok elektronlu sistemlerin fiziksel özelliklerini araştırmak amacı ile kullanılan istatistiksel yöntemler olan, Hartree-Fock yaklaşımı (H-F) , yoğunluk fonsiyonel teoremi ve Thomas Fermi (T-F) atom modeli tanıtılmıştır. Ayrıca T-F metodunun çok elektronlu atomlara ve iyonlara uygulamasından bahsedilmiştir. Dördüncü bölümde Thomas Fermi denklemi iki boyutlu kuantum nokta yapılar için farklı potansiyellerde (harmonik (αr^2), r^4 potansiyeli (γr^4), harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) ve deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$), $\alpha = sbt, \gamma = sbt$) sınırlandırılmış etkileşmeyen elektronlar için, $T=0$ K sıcaklığında çözülmüştür. Nokta yapıda sınırlandırılan elektronlar için, elektron yoğunluğu $n(r)$, toplam parçacık sayısı N , kimyasal potansiyel μ , kinetik E_k ve potansiyel (E_p) enerjileri için analitik ifadeler türetilmiştir. Bu çözümlerden elde edilen sonuçlar değerlendirilmiştir. Beşinci bölümde iki boyutlu kuantum nokta yapıda $v(r) = br^l$ potansiyelinde sınırlandırılmış etkileşmeyen sistemin fiziksel özellikleri sonlu sıcaklıkta ifade edilmiştir. Farklı potansiyeller için (harmonik (αr^2), r^4 potansiyeli (γr^4), harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) ve deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$)) düşük sıcaklıkta analitik ifadeler türetilmiştir. Yine bu potansiyeller için sonlu sıcaklıkta elektron yoğunluğu $n(r)$, parçacık sayısı N , kimyasal potansiyel μ , kinetik enerji E_k , potansiyel enerji E_p nümerik yolla hesaplanmıştır. Elde edilen sonuçlar tartışılmıştır.

2. YAPAY ATOM OLARAK KUANTUM NOKTA YAPILAR

Kuantum noktalar, bir ile birkaç bin arasında elektron içeren yüklü insan yapımı parçacıklardır. Tipik boyutları nanometreden birkaç mikrona kadar uzanır. Bu yapıların genişlikleri, şekilleri ve içerisindeki elektron sayıları ileri üretim teknikleri kullanılarak kesin bir şekilde kontrol edilebilir.

Atomda olduğu gibi kuantum noktadaki enerji düzeyleri, elektronların sınırlandırılması sebebiyle kuantize olur. Kuantum noktalarla deneyçiler, voltajı basitçe değiştirerek periyodik tabloyu tarayabilirler (Kouvenhowen ve Marcus 1998). Japonya'da NTT'de Tarucha ve çalışma arkadaşları (1998) Delft'te simetrik kuantum nokta yapılarında ne olduğunu araştırmışlardır. Bunun için, birkaç yüz nanometre çapında 10 nm kalınlığında ve 100 elektron alabilecek yapıda bir yapı kullanmışlardır. Nokta yapının çapı, yapıdaki elektronlar bir bir azaltılarak ve hiç elektron kalmayana kadar, noktanın iki ucundaki metal girişlere gerilim uygulamasıyla küçültülmüştür. Bu sayede elektron sayısı değiştikçe noktanın enerjisi değişecek buna bağlı olarak akım değişecektir. Coulomb sınırlandırması ölçülen akımda dik tepe noktalarına neden olur. Herhangi bir tepe noktası için kuantum nokta yapıdaki elektron sayısı N'den N+1'e değişir. Tepeler arasında akım sıfırdır ve N sabit kalır. Bu tepeler arasındaki uzaklık eklenen enerji (E_{ek}) ile orantılıdır. E_{ek} , N+1 elektrona sahip kuantum noktanın enerjisi ile N elektrona sahip kuantum nokta yapının enerjisi arasındaki farktır. Kuantum nokta yapısını tanımlayan sabit etkileşim modeli olarak adlandırılan bu basit model, elektronların etkileşimlerinin parçacık sayısından bağımsız olarak kabul eder ve kapasitansı (C) tanımlar. Bu modelde

$$E_{ek} = \frac{e^2}{C} + \Delta E, \text{ e; elektronun yükü ve } \Delta E; \text{ durumlar arası enerji farkıdır. Bu nedenle}$$

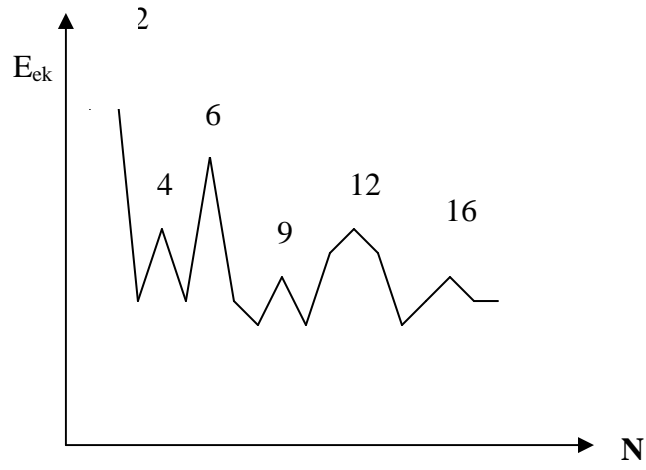
kuantum nokta yapıya tek bir elektron eklemek, $\frac{e^2}{C}$ gibi artı bir enerji gerektirir.

Basitliğine rağmen model doğrudur ve ölçümlerin daha detaylı yapılmasını sağlar. Grafikteki birinci ve ikinci tepe noktaları, sırasıyla birinci ve ikinci elektronların nokta yapıya girdiği enerjiyi gösterir ve böyle gider. Ancak tepe noktaları arasındaki uzaklık sabit değildir ve önemli bir biçimde ikinci, altıncı ve yirminci elektronların nokta yapıya girebilmeleri için çok daha fazla enerji gerekmektedir. Bu durum, iki

boyutlu elektron orbitallerinde şekil (2.1)'de gösterilmiştir. En düşük yarıçapta sadece zıt spinli iki elektron vardır. Bu durumdaki elektronlar sıfır açısız momentuma sahiptir ve bu $\frac{e^2}{C}$ 'lik bir enerjinin kuantum nokta yapıdaki elektron sayısını birden ikiye arttırmak için yeterli olduğu anlamına gelir. Ancak alttaki orbital tamamen dolu olduğundan ve üst enerji seviyesine elektron yerleştirilmesi gerektiğinden üçüncü elektron için ekstra enerji gerekmektedir. Elektronlar bu orbitte $\mp\ell$ açısız momentum ve iki spin durumuna sahip olacaktır. Bu da kabuğun dört elektrona sahip olabileceğini gösterir. Nokta yapı toplam altı elektrona sahip olduğunda yedinci elektronu eklemek için ekstra enerji gereklidir.

Sınırlandırma potansiyel parabolik ise, üçüncü kabuk özel bir durumu gösterir. Çünkü bu durum yeni bir kuantum sayısını gösterir. Bu kabuktaki durumlar sıfır açısız momentumuna ve bir radyal kuantum sayısına, $\mp\ell$ açısız momentuma sıfır radyal kuantum sayısına sahiptir. Spin durumlarıyla birlikte bu üçüncü kabuğun altı elektrona sahip olabileceği ve $N=12$ durumunda da tamamen dolu olacağı anlamına gelir. Bu sıra $N=2,6,12,20$ diye gider ve bu sayılar mucize sayılar olarak adlandırılır. Bununla birlikte $N=4,9$ ve 16 'da grafik küçük tepe noktaları gösterir. Bu durum, elektronlar arası etkileşimlerin enerji düzeylerini nasıl etkilediğini gösterir. Atomik fizikte bu etkiler, Hund Kuralı ile formüle edilir. Bununla birlikte $N=4,9$ ve 16 , ikici, üçüncü ve dördüncü kabuklardaki yarı dolu durumlarını gösterir.

Atomlardaki kabuk yapısı gibi gerçek atom ve çekirdekte gözlenen pek çok kuantum olayı kuantum nokta yapıda gözlemlenebilir ve bu etkileri farklı izotoplar ve atomlarla çalışmak yerine basit şekilde kuantum nokta yapının büyüklükleri değiştirilerek araştırılabilir. Bu noktalar benzer gerçek atomlardan çok daha kullanışlıdır. Çünkü çok daha geniş ve çok daha kontrol edilebilir boyutları sayesinde gerçek atomlarla gerçekleştirilemeyen deneyler bu yapılarla gerçekleştirilebilirler. Örneğin; hem atom hem de nokta yapının orbitalleri manyetik alan uygulayarak değiştirilebilir. Ancak $1T$ 'lik manyetik alanın kuantum nokta üzerindeki etkisi gerçek atomda bir milyon teslanın etkisine eşittir. Bu tip yüksek manyetik alanlar laboratuarda oluşturulamaz.



Şekil 2.1. Ek enerji E_{ek} (mev)'nin parçacık sayısı N ile değişimi

3. N ELEKTRONLU SİSTEMLER

Çok parçacıklı sistemlerin fiziksel özellikleri araştırılırken geleneksel yöntemleri kullanarak hesaplama yapmak problem haline gelir. Bu durumda, problemi çözülebilir hale getirmek için birçok istatistiksel yaklaşım geliştirilmiştir. Bunlara örnek olarak, Hartree-Fock teoremi, yoğunluk fonksiyonel teorisi, Thomas-Fermi yaklaşımı verilebilir. Bu bölümde Hartree-Fock, yoğunluk fonksiyonel teorisi ve T-F atom modeli tanılacaktır.

3.1. Hartree-Fock Yöntemi

Hartree-Fock (HF) teorisinde, N-fermiyonlu sisteminin taban durumu, Slater determinantı ϕ tarafından oluşturulur (Bhaduri 1997). ϕ determinantı tek parçacık dalga fonksiyonu olan $\{\psi_\alpha(\mathbf{r})\}$ ortogonal seti tarafından oluşturulur:

$$\phi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \det \left| \psi_i(r_j) \right|_{i,j=1,2,\dots,N} . \quad (3.1)$$

Bu dalga fonksiyonu, Fermi-Dirac istatistiğine göre fermiyonların herhangi çiftinin değiş tokuşundaki anti simetrikliği gösterir. Yoğunluk matrisi;

$$\rho_1^{\text{HF}}(r, r') = \sum_{i=1}^N \psi_i^*(r') \psi_i(r), \quad (3.2)$$

şeklinde yazılabilir. Tek parçacık dalga fonksiyonları olan Ψ_i , varyasyonel yöntem tarafından seçilir. Varyasyonel yöntem;

$$\frac{\delta}{\delta \psi_i^*(r)} \left[\left\langle \Phi \left| \hat{H} \right| \Phi \right\rangle - E_i \int |\psi_i(r)|^2 d^3r \right] = 0, \quad (3.3)$$

şeklinde ifade edilir. Bu, Schrödinger tipi integre edilebilir diferansiyel denklemler çiftleniminin bir seti olduğunu gösterir. Ancak potansiyelin yerel olmayan kısmı;

$$\left\{ \hat{T} + U(r) + V_H(r) \right\} \psi_i(r) + \hat{V}_F \psi_i(r) = E_i \psi_i(r), \quad (3.4)$$

ile verilir. Bu denklemler HF denklemleri olarak adlandırılır. Buradaki V_H ;

$$V_H(r) = \int \rho(r') V^{(2)}(r, r') d^3 r', \quad (3.5)$$

$V^{(2)}$ Coulomb etkileşimi olduğundaki yerel Hartree veya dirac potansiyelleridir. $V_H(r)$, $\rho(r)$ yoğunluğuna bağlı klasik Coulomb potansiyelidir. \hat{V}_F yerel olmayan Fock veya değiş tokuş potansiyelidir. Bunu dalga fonksiyonu belirler:

$$\hat{V}_F \psi_i(r) = -\frac{1}{2} \int \rho_i^{HF}(r, r') V^{(2)}(r, r') \psi_i(r') d^3 r'. \quad (3.6)$$

\hat{V}_F yerel olmayan bir potansiyeldir. Çünkü hem \hat{V}_H hem de \hat{V}_F bütün parçacıkların ψ_i dalga fonksiyonuna bağlıdır. HF denklemleri lineer değildir ve kendisiyle uyumlu bir biçimde çözümlenmelidir. Bu, genellikle iterasyon yoluyla yapılır. En büyük sayısal karmaşıklıklar \hat{V}_F operatörünün integralinden kaynaklanır. En düşük enerji genellikle HF enerjisi olarak adlandırılan, E_{HF} 'nin yakınsamasından sonra elde edilir. Slater determinanı, $|\text{HF}\rangle$ tarafından gösterilir:

$$E_{HF} = \min_{\{\Phi\}} \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle = \langle \text{HF} | \hat{H} | \text{HF} \rangle. \quad (3.7)$$

(3.4) denklemindeki Hartree ve Fock potansiyellerinin toplamı genellikle HF potansiyeli olarak adlandırılır:

$$\hat{V}_{HF} = V_H + \hat{V}_F. \quad (3.8)$$

HF enerjisi;

$$E_{\text{HF}} = \int \left\{ \tau(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} V_{\text{H}}(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) \right\} + E_x, \quad (3.9)$$

şeklinde yazılarak farklı katkılar ihmal edilebilir. Burada $\tau(\mathbf{r})$;

$$\tau(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N |\nabla \psi_i(\mathbf{r})|^2, \quad (3.10)$$

olarak verilen kinetik enerji yoğunluğudur. E_x değiş tokuş enerjisidir:

$$E_x = -\frac{1}{4} \iint \rho_1^{\text{HF}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') V^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rho_1^{\text{HF}}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) d^3 r' d^3 r. \quad (3.11)$$

(3.10) denklemindeki kinetik enerji yoğunluğu, (3.2) denkleminde verilen bir cisim için yoğunluk matrisinden elde edilebilir:

$$\tau(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \rho_1^{\text{HF}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}}. \quad (3.12)$$

Yerel yoğunluk $\rho(\mathbf{r})$;

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_1^{\text{HF}}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Big|_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}}, \quad (3.13)$$

ile verilir. Bu unsurların hepsi ile, toplam HF enerjisi, tek cisim yoğunluk matrisinin bir fonksiyonu olarak bütünüyle ifade edilebilir:

$$E_{\text{HF}} = E_{\text{HF}}[\rho_1^{\text{HF}}]. \quad (3.14)$$

Sonraki ilişki için matris gösterimindeki ρ_1^{HF} tekrar yazılır. Alt indis '1' ve üst indis 'HF' çıkartılarak, rastgele bir tek parçacık ilkesinde temsil edilir:

$$\rho_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^N \langle \alpha | i \rangle \langle i | \beta \rangle. \quad (3.15)$$

Daha sonra HF enerjisi;

$$E_{\text{HF}}[\rho] = \text{tr}(T + U)\rho + \frac{1}{2} \text{tr}\rho(\text{tr}V_p), \quad (3.16)$$

ile verilir. Burada T ve U tek cisim ve V kinetik enerjinin anti simetrikleştirilmiş iki cisim matris elemanıdır. Dış potansiyel ve iki cisim potansiyeli sırasıyla;

$$T_{\alpha\beta} = \langle \alpha | \hat{T} | \beta \rangle, \quad U_{\alpha\beta} = \langle \alpha | U | \beta \rangle, \quad V_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \langle \alpha\beta | V^{(2)} | \gamma\delta \rangle, \quad (3.17)$$

şeklindedir. Gerçekten (3.4) ve (3.9) denklemlerinden;

$$E_{\text{HF}} = \sum_i^N E_i - \frac{1}{2} \langle \text{HF} | \hat{V}_{\text{HF}} | \text{HF} \rangle, \quad (3.18)$$

olduğu kolaylıkla sağlanır. Yukarıdaki V_H , \hat{V}_F ve E_x ifadeleri i'nci durumdaki parçacığın etkisinden dolayı fiziksel olmayan katkıları içerir. Ancak, E_{HF} 'deki tam ve değiş tokuş terimlerinin toplamı alınarak, bu katkılar tam olarak yok edilir.

3.2. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi

Yoğunluk fonksiyonel teorisi (DFT), bağıntıları HF enerjisinin kapsamadığı hesaplamaları içine alan hassasiyette, HF yaklaşımının ötesindedir (Bhaduri 1997). Korelasyon enerjileri ile, (3.1) denklemindeki karmaşık slater determinantlarının dalga fonksiyonlarından gelen toplam enerjideki bütün katkılar kastediliyor.

DFT'nin temeli yaklaşık kuantum mekaniği kadar eskidir ve hali hazırda Thomas ve Fermi tarafından kullanılmıştır. Yani, sadece yerel taban durumu yoğunluğu $\rho(r)$ 'ye bağlı bir ifade üzerinden integral alınan bir sistemin toplam enerjisini hesaplamak için kullanılmıştır:

$$E_t = E[\rho] = \int \epsilon[\rho(r)] d^3r. \quad (3.19)$$

Matematiksel olarak enerjinin, $\rho(r)$ 'nin bir fonksiyonu olduğu farzedilir. İlgili elektron sisteminin tam olarak taban durum enerjisi, $\rho(r)$ yoğunluğunun bir fonksiyonudur ve bu fonksiyon tam taban durumu için değerlendirildiğinde minimum değişime sahiptir. Bu, varyasyonel denklemi ile ifade edilir:

$$\frac{\delta}{\delta\rho(r)} \left[E[\rho(r)] - \mu \int \rho(r) d^3r \right] = 0. \quad (3.20)$$

Bu denklemde (3.19) denkleminin birkaç parçasını kullanılarak;

$$E[\rho] = T_s[\rho] + \int \rho(r) \left\{ U(r) + \frac{1}{2} V_H[\rho(r)] \right\} d^3r + E_{xc}[\rho], \quad (3.21)$$

şeklinde yazılabilir. Burada $T_s[\rho]$, ρ yoğunluklu bağımsız parçacıklar sistemine bağlı olan kinetik enerji kısmını içerir.

E_{xc} , genellikle sonlu etkileşen fermiyon sistemleri için kesin olarak bilinemez, tıpkı bir çok fermiyon sistemi için açıkça bilinmeyen T_s kinetik enerji fonksiyonu gibi.

Kinetik enerji için net bir yoğunluk fonksiyonu bulmanın zorluğundan kaçınmak için, Kohn ve Sham (1965) birkaç deneme tek parçacık $\psi_i(r)$ dalga fonksiyonlarının $\rho(r) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(r)|^2$ ifadesindeki $\rho(r)$ yoğunluğunu yazmayı önerdiler. Bu gerçekte, normalize edilebilen yoğunluk için geçerlidir. Kinetik enerji yoğunluğunun etkileşmeyen kısmı daha sonra aynı $\psi_i(r)$ 'nin terimlerindeki (3.10) denklemindeki $\tau(r)$ şeklinde verilebilir. Enerji fonksiyonunun (3.20) denklemindeki

değişimi, şekillerindeki kısıtlamayla $\psi_i(\mathbf{r})$ deneme fonksiyonlarının değişimi vasıtasıyla yapılabilmektedir. Genellikle bu;

$$\left\{ \hat{T} + V_{KS}(\mathbf{r}) \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = E_i \psi_i(\mathbf{r}), \quad (3.22)$$

yerel potansiyel V_{KS} 'nin üç teriminin toplamından oluşan Kohn-Sham (KS) denklemlerinin kullanımını gösterir:

$$V_{KS}(\mathbf{r}) = V_{KS}[\rho(\mathbf{r})] = U(\mathbf{r}) + V_H[\rho(\mathbf{r})] + V_{xc}[\rho(\mathbf{r})]. \quad (3.23)$$

İlk iki terim yukarıdaki gibi aynıdır ve üçüncü terim değiş tokuş korelasyon enerjisinin türev değişimidir:

$$V_{xc}[\rho(\mathbf{r})] = \frac{\delta}{\delta \rho(\mathbf{r})} E_{xc}[\rho]. \quad (3.24)$$

Prensipite Hohenberg-Kohn teoremi çok daha basit bir şekilde, kendisiyle uyumlu tek cisim varyasyonel denklemleri olan (3.20) veya (3.24) denklemlerinin, çok cisim problemine dönüşümünü kabul eder, çünkü yaklaşım bu noktaya kadar yoktur. Ancak pratikte, değiş tokuş ve korelasyon katkıları sadece yaklaşık olarak değerlendirilebilir. Bu, böylece değiş tokuş korelasyon fonksiyonuna daha fazla veya daha az hayali yaklaşımları kullanmak için DFT yaklaşımının bir sorunudur. Daha basit ve daha sıklıkla $E_{xc}[\rho]$ için uygulanan fonksiyonlarda yerel yoğunluk yaklaşımı (LDA) kullanılır. Parçacık başına oluşan enerji, ρ değişkeninin bir fonksiyonu olan $e_{xc}(\rho)$ 'nin xc kısmına karşılık gelen kısmını çıkarmak için kullanılır. Daha sonra $\rho(\mathbf{r})$ değişken yoğunluklu sonlu bir sistem için LDA, $\rho = \rho(\mathbf{r})$ yoğunluklu sisteme denk gelmesi için yerel xc enerjisi farzedilerek oluşur:

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \rho(\mathbf{r}) e_{xc}(\rho(\mathbf{r})) d^3r. \quad (3.25)$$

Bu formalizm aşağı spin yoğunluğu ve yukarı spin yoğunluğunu hesaba katarak hesaplamaları parçacıkların spin derecelerini almak için genişletilebilir. Bu, yerel spin yoğunluğu (LSD veya LSDA) şeklini gösterir.

DFT'nin diğer bir açılımı $T>0$ sonlu sıcaklığıyla ilgilidir. Mermin (1965), büyük kanonik sistem için $T>0$ sıcaklığında Hohenberg teoremini ve Kohn-Sham formalizmini türetti. Evans (1979) kanonik sistemlerine genişletti. Temelde biri, iç enerjiden $E[\rho]$, serbest enerjiye $F[\rho]$ gider:

$$F[\rho] = E[\rho] - TS_s[\rho]. \quad (3.26)$$

Burada S_s entropinin etkileşmeyen kısmıdır. Değiş tokuş korelasyon enerjisi $E_{xc}[\rho]$, genellikle açık bir biçimde T 'ye bağlı olacaktır. Daha sonra Kohn-Sham formalizmi, sonlu sıcaklık yerleşim sayısı n_i yoğunluklarının tanımını içererek;

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2 n_i, \quad \tau(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \sum_i |\nabla \psi_i(\mathbf{r})|^2 n_i, \quad \sum_i n_i = N, \quad (3.27)$$

ve ψ_i ve n_i 'nin ikisine göre de $F[\rho]$ minimize edilerek elde edilir. Çünkü S_s açıkça ψ_i dalga fonksiyonlarına bağlı değildir. Daha sonraki değişim KS denklemlerinin aynı şeklini verir. Tek fark V_{KS} potansiyeline bağlı sıcaklığın oluşmasıdır. n_i değişimi E_i 'nin terimlerindeki açık formlarını verir. Sonuç, büyük kanonik topluluğun kanonik bir sistem gibi davranıp davranmadığına bağlıdır.

DFT fiziğin bir çok dalında başarılı bir şekilde uygulanabilmektedir.

3.3. Thomas-Fermi (T-F) Atom Modeli

Elektron sayısının yeterince fazla olduğu sistemlerde, sistem elektron gazı gibi davranır. Bu durumda T-F istatistiksel yaklaşımını kullanmak hesaplarda kolaylık sağlar. Bu yaklaşım, çok elektronlu sistemlerin özelliklerini incelemede hızlı ve doğru bir şekilde hesaplanmasını sağlar.

V hacminde N sayıda serbest fermiyondan oluşan kuantum gazına Fermi gazı denir (Karaoğlu, 2003). Fermi Dirac istatistiğinde ortalama doluluk sayısı;

$$\langle n_r \rangle_{F-D} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_r - \mu)} + 1}, \quad (3.28)$$

şeklindedir. Burada ε_r , r kuantum durumunun enerjisi, μ , kimyasal potansiyel ve $\beta=1/kT$ 'dir. 0 K sıcaklığında bu denklem aşağıdaki şekilde ifade edilir:

$$\left\{ \begin{array}{l} 1 \quad \varepsilon_r < \mu \\ 0 \quad \varepsilon_r > \mu \end{array} \right\}. \quad (3.29)$$

Bunun anlamı, fermi enerjisi altındaki durumlar tümüyle dolu, üstündeki diğer bütün durumlar tümüyle boş olacaklardır. Buna kuantum yozlaşma adı verilir.

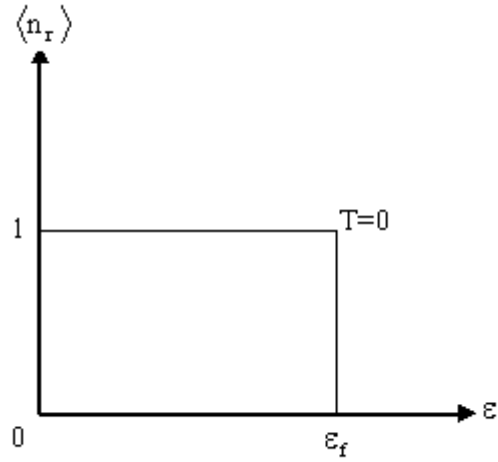
N toplam parçacık sayısı ve E toplam enerjisi şu şekilde bulunur:

$$N = \sum_r \langle n_r \rangle. \quad (3.30)$$

$$E = \sum_r \langle n_r \rangle \varepsilon_r. \quad (3.31)$$

$D(\varepsilon)$ durum yoğunluğu olmak üzere N sayısı büyükse, buradaki toplamlar integrale dönüşür:

$$\sum_r \rightarrow \int D(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.32)$$



Şekil 3.1. Fermiyon dağılımının $T=0$ sıcaklığındaki değişimi

İncelenilen fermiyonlar bir kenarı L uzunlukta ve küp şeklindeki bir hacim içinde bulunsunlar. Periyodik sınır koşullarına göre her bir dalga sayısı bileşeni için;

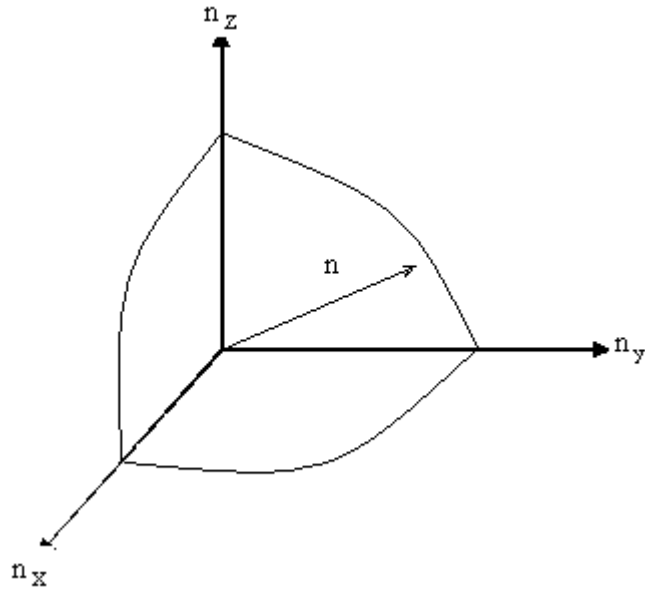
$$\begin{aligned} k_x &= \frac{2\pi}{L} n_x \quad (n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \\ k_y &= \frac{2\pi}{L} n_y \quad (n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \\ k_z &= \frac{2\pi}{L} n_z \quad (n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots), \end{aligned} \quad (3.33)$$

şeklinde ifade edilir.

$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ifadesinde (3.33) denklemleri kullanılırsa, buradan kuantumlanmış enerji ifadesi;

$$\epsilon = \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2), \quad (3.34)$$

şeklinde elde edilir. n durum sayısı şu şekildedir:



Şekil 3.2 . n uzayında kübik örgü. Her nokta bir parçacık durumuna karşılık gelir.

$$dn = \frac{4\pi}{3} \frac{[(dk + k)^3 - k^3]}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}. \quad (3.35)$$

Buradan dn;

$$dn = \frac{L^3}{2\pi^2} k^2 dk, \quad (3.36)$$

şeklinde ifade edilebilir. İki spin durumu olduğundan 2 ile çarpılır ve L^3 yerine V yazılırsa sonuç şu şekilde bulunur:

$$dn = \frac{V}{\pi^2} k^2 dk. \quad (3.37)$$

(3.37) denklemi, $dn = D(k)dk$ 'da yerine yazılırsa;

$$D(\mathbf{k})d\mathbf{k} = \frac{2Vd^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (3.38)$$

gibi ifade edilebilir. Buradaki 2, spin katlılığını göstermektedir.

3.1.1. Fermi Enerjisi

Bir elektronun izinli değerleri;

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2, \quad (3.39)$$

şeklindedir. Enerjisi E kadar olan bireysel elektron durumlarının toplam sayısı N_s 'dir (Brandsden vd., 1989). Yani E belli bir seviyenin elektronlarının sayısıdır.

Burada kürenin $\frac{1}{8}$ 'i kullanılır. n uzayında N_s hesaplanırsa;

$$N_s = 2 \frac{1}{8} \frac{4}{3} \pi n^3 = \frac{1}{3} \pi n^3, \quad (3.40)$$

şeklinde ifade edilebilir. (3.39) denkleminde n çekilir ve (3.40) denkleminde yerine yazılırsa, gerekli hesaplar yapıldıktan sonra sonuç şu şekildedir:

$$N_s = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \epsilon^{\frac{3}{2}} V. \quad (3.41)$$

Daha sonra toplam elektron sayısı hesaplanır. $dN_s = D(\epsilon)d\epsilon$ 'dir. Buradan $D(\epsilon)$;

$$D(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \epsilon^{\frac{1}{2}} V. \quad (3.42)$$

şeklinde elde edilir. Toplam elektron sayısı N 'dir.

$$N = \int_0^{\epsilon_f} D(\epsilon) d\epsilon \quad (3.43)$$

(3.42), (3.43) denkleminde yerine yazılıp gerekli işlemler yapılırsa;

$$\epsilon_f = \left(3\pi^2 n\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{2m} , \quad (3.44)$$

ifadesi bulunur. Taban durumunda bir fermi elektron gazının toplam enerjisi;

$$\epsilon_{\text{top}} = \int_0^{\epsilon_f} \epsilon D(\epsilon) d\epsilon , \quad (3.45)$$

ile verilebilir. (3.45) denkleminde, (3.42) ve (3.44) denklemleri yerine yazılıp, işlemler yapılırsa toplam enerji ϵ_{top} ;

$$\epsilon_{\text{top}} = \frac{3}{5} N \epsilon_f , \quad (3.46)$$

şeklinde bulunabilir. Bulunan bu toplam enerji ifadesinden ortalama enerji hesaplanabilir. Ortalama enerji $\bar{E} = \frac{\epsilon_{\text{top}}}{N}$ 'dir. (3.46) denklemini yerine yazılırsa ortalama enerji \bar{E} ;

$$\bar{E} = \frac{3}{5} \epsilon_f , \quad (3.47)$$

şeklinde ifade edilir.

3.1.2. Çok Elektronlu Atomlar Ve İyonlar İçin Thomas Fermi Kuramı

Thomas Fermi Atom Modeli'nin amacı, $V(r)$ potansiyelini ve $n(r)$ elektron yoğunluğunu hesaplayan bir yöntem elde etmektedir.

$$E_{\text{mak}} = \varepsilon_f + V(r) . \quad (3.48)$$

$\varepsilon_f = \frac{\hbar^2}{2m} k_f^2$ eşitliğinden k_f ;

$$k_f^2 = \frac{2m}{\hbar^2} \varepsilon_f , \quad (3.49)$$

gibi ifade edilebilir. ε_f , (3.48) denkleminde çekilip, denklem (3.49)'da yerine yazılırsa k_f şu şekilde bulunabilir:

$$k_f^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E_{\text{mak}} - V(r)) . \quad (3.50)$$

Tek elektronlu sistemlerdeki sonuçlardan faydalanılarak yoğunluk aşağıdaki gibi bulunabilir. (3.44) denkleminde n çekilirse;

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (\varepsilon_f)^{\frac{3}{2}} , \quad (3.51)$$

ifadesi elde edilir. (3.48) denkleminde ε_f çekilip (3.51) denkleminde yerine yazılırsa;

$$n(r) = \frac{1}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} (E_{\text{mak}} - V(r))^{\frac{3}{2}} , \quad (3.52)$$

şeklinde bulunur. $V = E_{\text{mak}}$ olduğu zaman yoğunluğu (n), 0 olacaktır. Klasik olarak yasaklanmış bölgede, ($V > E_{\text{mak}}$), $n = 0$ alınmalıdır.

4. FARKLI POTANSİYELLERDE SINIRLANDIRILMIŞ N ELEKTRONDAN OLUŞAN İKİ BOYUTLU KUANTUM NOKTA YAPININ FİZİKSEL ÖZELLİKLERİNİN T=0 K'DE İNCELENMESİ

Son zamanlarda iki boyutlu kuantum nokta yapıları incelemek oldukça ilginç hale gelmiştir. Bu bölümde, iki boyutlu kuantum nokta yapıların elektron yoğunluğu $n(r)$, kinetik E_k ve potansiyel enerji E_p gibi fiziksel özelliklerinin sınırlandırma potansiyeli ile değişimi değişimi T-F yöntemi kullanılarak T=0 K'de analitik olarak araştırılacaktır.

4.1 Farklı Sınırlandırma Potansiyelleri İçin Thomas-Fermi Denklemi'nin T=0 K de Çözümü

Kuantum nokta yapının merkezinde sınırlandırılmış etkileşmeyen elektron gazı sistemi için iki boyutlu T-F denklemi,

$$\left(\frac{p_f^2}{2m} + v \right) = \mu \quad (4.1)$$

şeklinde yazılabilir (Pino 1998). Burada m elektronun kütlesi, p_f ; fermi momentumu, v ; dış potansiyeldir.

-1/2 spinli parçacıklar için fermi momentumunun elektron yoğunluğu $n(r)$ cinsinden,

$$p_f = (2\pi n(r))^{1/2}, \quad (4.2)$$

şeklinde yazılabilir. Denklem (4.2), (4.1)'de kullanılırsa elektron yoğunluğu,

$$\begin{aligned} n(r) &= \left(\frac{m}{\pi} \right) [\mu - v(r)], & r \leq r_0 \\ &= 0, & r > r_0 \end{aligned} \quad (4.3)$$

şeklinde elde edilir.

r_0 nokta yarıçapı olup bu nokta elektron yoğunluğunun sıfıra gittiği klasik dönme noktası olarak seçilirse,

$$v(r_0) = \mu \quad (4.4)$$

eşitliği elde edilir. Bununla birlikte, toplam parçacık sayısı elektron yoğunluğu cinsinden:

$$N = \int n(r) 2\pi r dr. \quad (4.5)$$

şeklinde ifade edilebilir.

Pek çok durumda gerçek bir kuantum nokta yapının sınırlandırıcı potansiyeli harmonik potansiyel ;

$$v(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2, \quad (4.6)$$

ile tanımlanır. Burada, ω açısal frekanstır. Nokta yarıçapı r_0 'da $n(r_0) = 0$ kabulünden faydalanılarak kimyasal potansiyel;

$$\mu = \frac{1}{2} m\omega^2 r_0^2, \quad (4.7)$$

şeklinde yazılabilir. (4.7) eşitliği, (4.6) denklemiyle beraber (4.3) denkleminde, (4.6) denklemi de (4.5) denkleminde yerine yazıldığında sırasıyla harmonik sistemde sınırlandırılmış etkileşmeyen sistemin yoğunluğu ve parçacık sayısı;

$$n(r) = \frac{m\omega^2}{2\pi} (r_0^2 - r^2), \quad (4.8)$$

$$N = \frac{m^2 \omega^2 r_0^4}{4}. \quad (4.9)$$

şeklinde elde edilebilir. Örneğin, $\Omega = \frac{N}{\omega^2 \epsilon^2} = 1$ durumu için nokta yarıçapı r_0 ;

$$r_0 = 1.41$$

olarak elde edilir.

Elektron yoğunluğuna bağlı olarak sistemin kinetik E_k ve potansiyel enerjisi E_p ;

$$E_k = \int_0^{r_0} \frac{p^2}{2m} n(r) d^2 r = \int_0^{r_0} \frac{p^2}{2m} n(r) 2\pi r dr, \quad (4.10)$$

$$E_p = \int_0^{r_0} n(r) \upsilon(r) d^2 r = \int_0^{r_0} n(r) \upsilon(r) 2\pi r dr$$

eşitliklerinden faydalanılarak hesaplanabilir. Harmonik potansiyelde sınırlandırılmış sistem için E_k ve E_p , nokta yarıçapı cinsinden;

$$E_k = \frac{\pi^2 m \omega^4}{24} r_0^6, \quad (4.11)$$

$$E_p = \frac{\pi m^2 \omega^4}{24} r_0^6, \quad (4.12)$$

şeklinde yazılabilir. Bulunan (4.11) ve (4.12) denklemlerinden faydalanılarak toplam enerji E_{top} ;

$$E_{top} = \frac{\pi m \omega^4}{24} r_0^6 (\pi + m), \quad (4.13)$$

şeklinde ifade edilebilir.

Teknolojide meydana gelen gelişmeler sayesinde, farklı potansiyellerde sınırlandırılmış yapıları araştırmak oldukça ilginç hale gelmiştir. Harmonik (αr^2) sınırlandırmaya benzer yolla, r^4 potansiyeli (γr^4), harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$), deforme edilmiş ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) sistemler için elektron yoğunluğu $n(r)$, parçacık sayısı N , kimyasal potansiyel μ , kinetik enerji E_k ve potansiyel enerji E_p değerleri bulunabilir (Tablo 4.1, Tablo 4.2).

Tablo 4.1. Farklı potansiyellerde sınırlandırılmış bir kuantum nokta yapı için $n(r)$, N ve μ .

$$\gamma = \frac{1}{2} \frac{m^2 \omega^2}{\epsilon} \text{ ve } V_0 = \frac{\alpha^2}{4\gamma} \text{ olarak alınmıştır.}$$

Sınırlandırma Potansiyeli	Elektron Yoğunluğu ($n(r)$)	Toplam Parçacık Sayısı (N)	Kimyasal Potansiyel (μ)
γr^4	$\frac{m}{2\pi} (r_0^4 - r^4)$	$\left(\frac{m}{3}\right) r_0^6$	γr_0^4
$\frac{1}{2} r^2 + \gamma r^4$	$\frac{m}{\pi} \left(\frac{1}{2} (r_0^2 - r^2) + \gamma (r_0^4 + r^4) \right)$	$\frac{m r_0^4}{4} + \frac{2\gamma m r_0^6}{3}$	$\frac{1}{2} r_0^2 + \gamma r_0^4$
$V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$	$\frac{m}{\pi} (\alpha (r^2 - r_0^2) - \gamma (r^4 - r_0^4))$	$\frac{2\gamma m r_0^6}{3} - \frac{m \alpha r_0^4}{2}$	$V_0 - \alpha r_0^2 + \gamma r_0^4$

Tablo 4.2. Farklı potansiyelerde sınırlandırılmış bir kuantum nokta yapı için E_k ve

$$E_p \cdot \gamma = \frac{1}{2} \frac{m^2 \omega^2}{\epsilon} \text{ ve } V_0 = \frac{\alpha^2}{4\gamma} \text{ olarak alınmıştır.}$$

Sınırlandırma Potansiyeli	Kinetik Enerji (E_k)	Potansiyel Enerji (E_p)
γr^4	$\frac{4r_0^{10}}{30}$	$\frac{5r_0^{10}}{30}$
$\frac{1}{2} r^2 + \gamma r^4$	$\frac{r_0^6}{24} + \frac{5\gamma r_0^8}{24} + \frac{8\gamma^2 r_0^{10}}{30}$	$\frac{r_0^6}{24} + \frac{\gamma r_0^8}{6} + \frac{2\gamma^2 r_0^{10}}{15}$
$V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$	$\frac{\alpha^2 r_0^6 m}{6} - \frac{5\alpha \gamma m r_0^8}{12} + \frac{8\gamma^2 r_0^{10}}{30}$	$-\frac{V_0 \alpha r_0^4}{2} + \left(\frac{2V_0 \gamma}{3} + \frac{\alpha^2}{6} \right) r_0^6 - \frac{\alpha \gamma r_0^8}{3} + \frac{2\gamma^2 r_0^{10}}{15}$

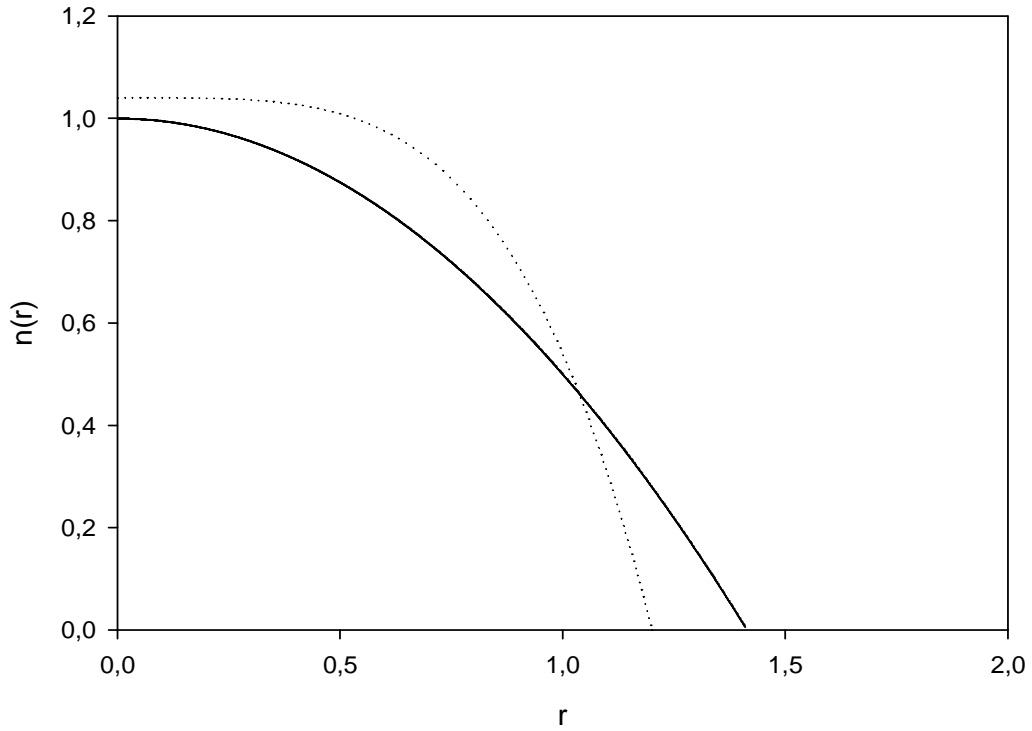
4.2. Sonuç ve Tartışma

Bu bölümde, T-F metodu kullanılarak, N elektron içeren iki boyutlu kuantum nokta yapının özellikleri analiz edilmiştir. Yapılan hesaplamalarda yoğunluk $n(r)$;

$$\left(\frac{m\omega^2 \epsilon}{\pi} \right), r \text{ ise } \left(\frac{\epsilon}{m} \right)^{1/2} \text{ birimleri cinsinden ifade edilmiştir. } \Omega, \Omega = \frac{N}{\omega^2 \epsilon^2} \text{ eşitliğine}$$

göre parçacık sayısı ile ilişkilidir.

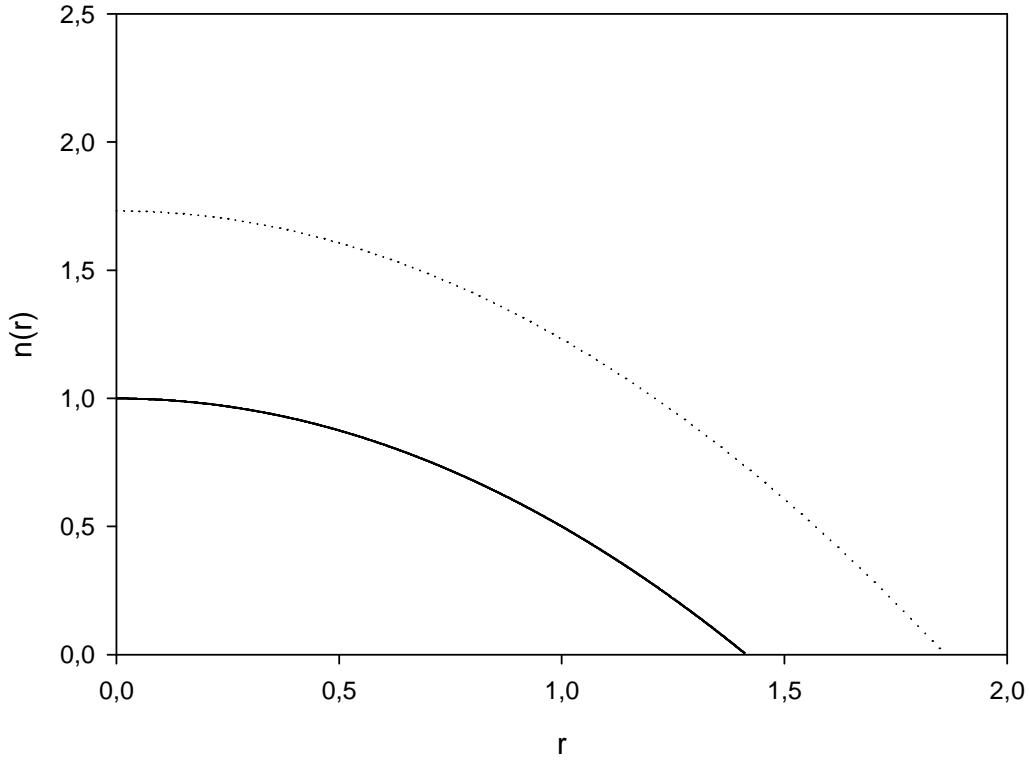
Şekil 4.1'de, (4.6) ifadesi ile verilen harmonik sınırlandırma potansiyelinde sınırlandırılmış bir sistem için yoğunluğun nokta yarıçapı ile değişimi etkileşmeyen sistem için araştırılmıştır. Bununla birlikte, r^4 potansiyelinde sınırlandırılmış etkileşmeyen sistem için sınırlandırmanın elektron yoğunluğu üzerindeki etkisi tartışılmıştır.



Şekil 4.1. Harmonik (αr^2) ve r^4 potansiyelinde (γr^4) sınırlandırılmış etkileşmeyen sistem için nokta yarıçapıyla yoğunluğun değişimi. Çizgi-harmonik sınırlandırma (etkileşmeyen), nokta r^4 potansiyeli sınırlandırma (etkileşmeyen)

Her iki potansiyelde sınırlandırılmış, etkileşmeyen sistemlerin yoğunlukları nokta yarı çapı ile azalmaktadır. Harmonik (αr^2) ve r^4 potansiyelleri (γr^4) karşılaştırılırsa, r^4 potansiyelinde sınırlandırılmış sistemin merkez elektron yoğunluğunun harmonik potansiyelde sınırlandırılmış sistemin elektron yoğunluğundan az miktarda fazla olduğu ve r^4 potansiyelinde sınırlandırılmış sistemin elektron yoğunluğunun merkeze doğru kaydığı söylenilebilir.

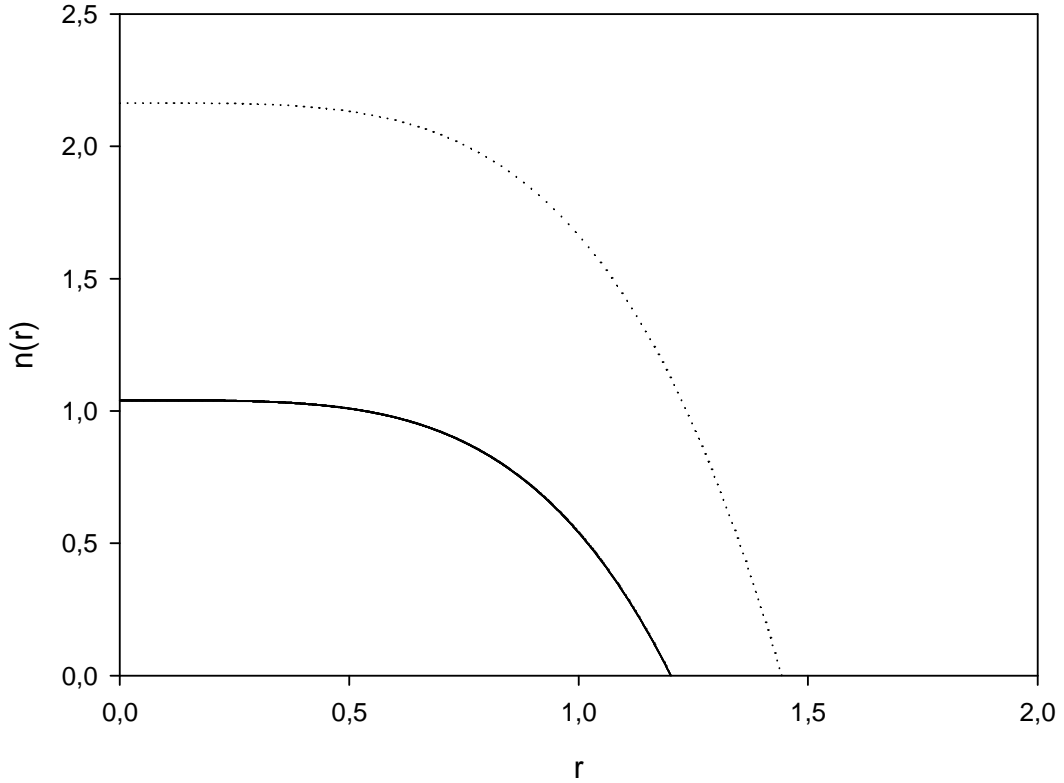
Şekil 4.2’de harmonik (αr^2) potansiyelde sınırlandırılmış bir sistemin farklı elektron sayıları için radyal değişimi araştırılmıştır. Şekilden de görüldüğü gibi



Şekil 4.2. Harmonik (αr^2) potansiyelde sınırlandırılmış bir sistem için elektron yoğunluğunun radyal değişimi. Burada çizgi- $\Omega=1$ durumu, nokta- $\Omega=3$ durumudur.

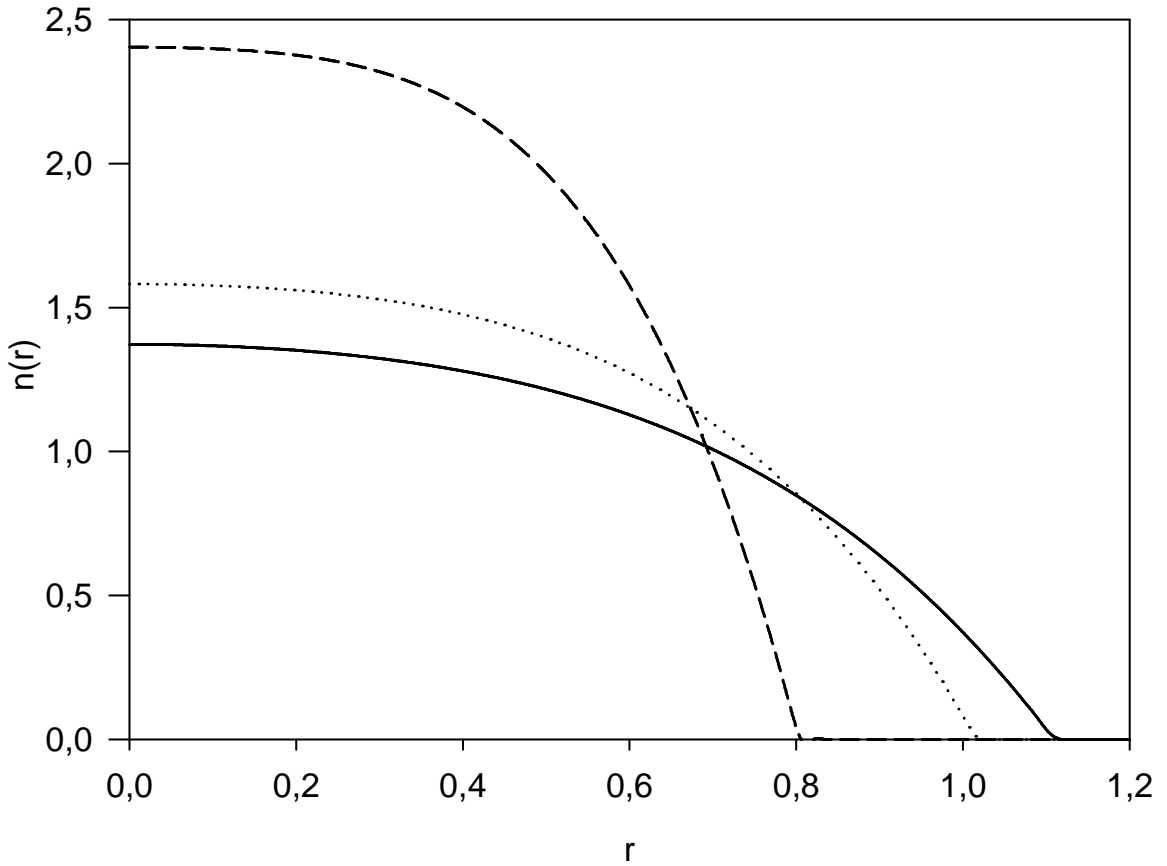
parçacık sayısının artmasıyla beraber merkez elektron yoğunluğu artmış ve aynı zamanda nokta yarıçapı da artmıştır.

r^4 potansiyelinde (γr^4) sınırlandırılmış bir sistemin farklı elektron sayıları için elektron yoğunluğunun nokta yarıçapıyla değişimi şekil 4.3'den görülmektedir. Şekil 4.2'ye benzer bir biçimde elektron sayısının artmasıyla nokta yarıçapı artmıştır. Şekil 4.2 ve şekil 4.3 karşılaştırıldığında, harmonik potansiyelinde sınırlandırılmış sistemdeki parçacık sayısı arttıkça yayılma hızının r^4 potansiyelde sınırlandırılmış sistemdeki parçacıklara göre daha fazla olduğu sonucuna varılabilir.



Şekil 4.3. r^4 potansiyelinde (γr^4) sınırlandırılmış bir sistem için elektron yoğunluğunun nokta yarıçapıyla değişimi. Burada çizgi- $\Omega=1$ durumu, nokta- $\Omega=3$ durumudur.

Şekil 4.4’de, harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) potansiyelde sınırlandırılmış etkileşmeyen sistem için yoğunluk dağılımının radyal değişimi araştırılmıştır. Bununla birlikte, γ ile tanımlanan pertürbasyon teriminin elektron yoğunluğu üzerindeki etkisi tartışılmıştır. Şekil (4.1)’e benzer bir biçimde her üç durum için elektron yoğunluğunun nokta yarı çapı ile azaldığı söylenilebilir. Ancak γ katsayısı arttıkça bu azalma daha keskin hale gelmektedir. Bunun sebebi, r^4 terimi baskın hale gelmekte ve merkez yoğunluğu artmaktadır. Bu da nokta yarıçapının küçülmesine neden olur.



Şekil 4.4. Harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) potansiyelde sınırlandırılmış bir sistem için nokta yarıçapıyla yoğunluk değişimi. $\gamma=0,5$ (çizgi), $\gamma=1$ (kesikli çizgi), $\gamma=5$ (kesikli çizgi).

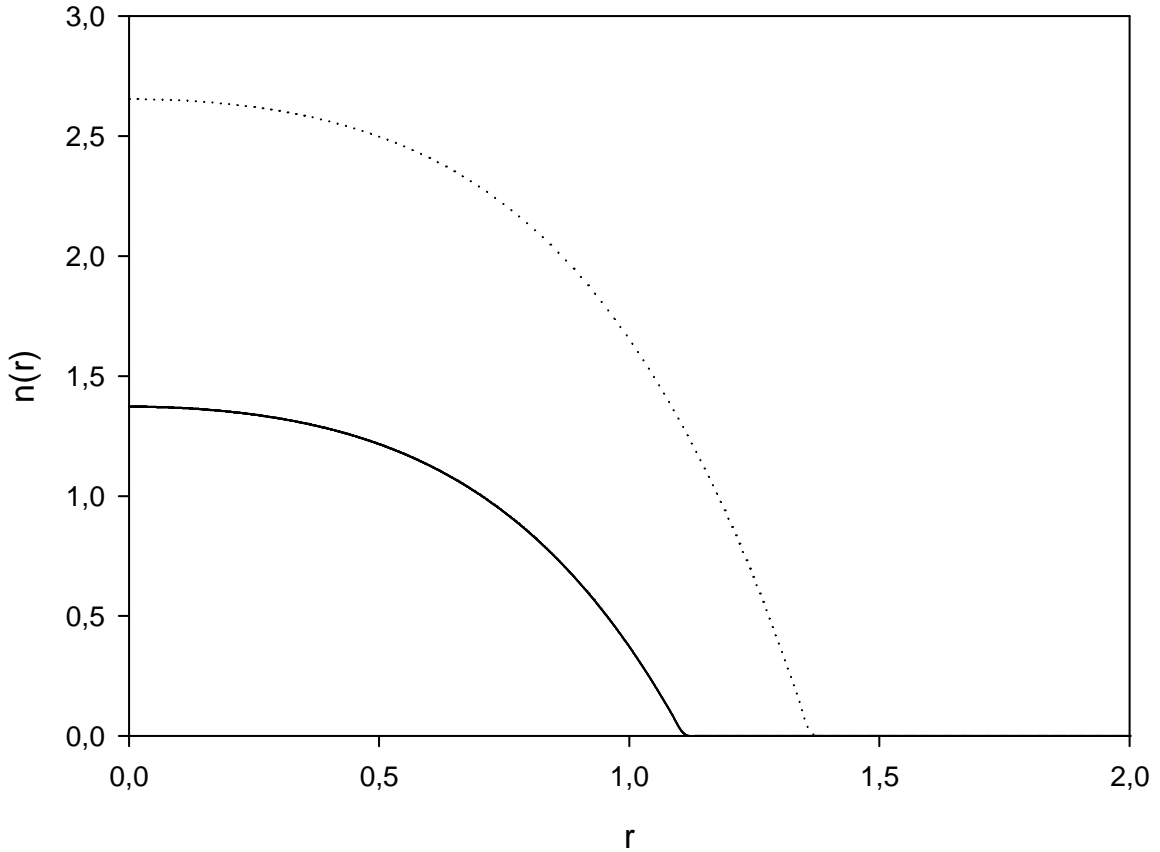
Şekil 4.5’de farklı sayıda elektron içeren harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) yapıda sınırlandırılmış ($\gamma=0,5$) iki sistem karşılaştırılmıştır. Beklenildiği gibi, elektron sayısı arttıkça merkez yoğunluğu ve nokta yarıçapının arttığı sonucuna varılabilir.

Şekil 4.6’de deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) bir potansiyelde sınırlandırılmış etkileşmeyen sistem için yoğunluğun nokta yarıçapı ile değişimi üç durum için incelenmiştir; $\gamma=0,5$, $\gamma=1$, $\gamma=5$. Yoğunluk eğrileri, her üç durum için belli bir noktaya kadar yavaşça artmakta daha sonra azalmaktadır. Bu azalmanın hızı, harmonik olmayan yapıya benzer bir biçimde γ tarafından belirlenir. γ katsayısı sabit tutulup, harmonik olmayan ve deforme edilmiş potansiyellerde sınırlandırılmış sistemler karşılaştırılırsa, V_0 deformasyon sabitinin, merkezde azalmaya neden

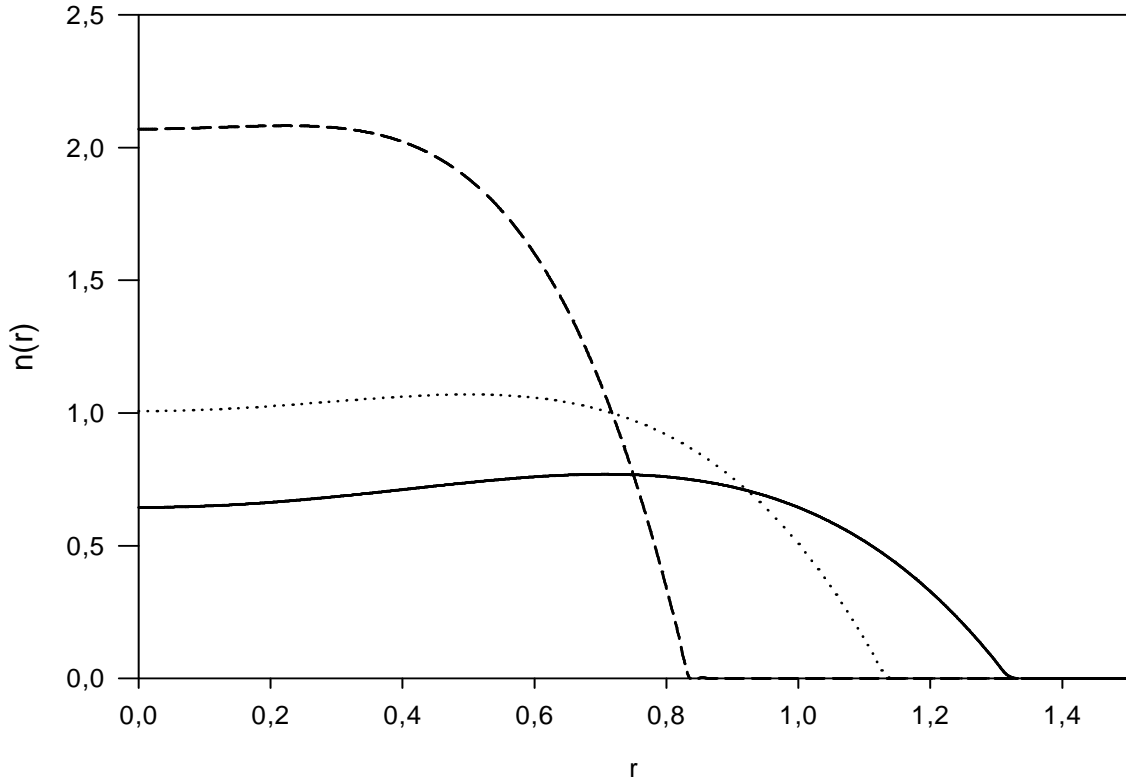
olduđu, bununla birlikte merkez yakınlarında elektron yoğunluğunun radyal deęişimden bağımsız sabit davranış gösterdiği söylenebilir. Bu davranış γ katsayısının artışıyla daha belirgin hale gelmektedir.

Şekil 4.7’de γ sabit tutularak deforme edilmiş bir potansiyelde sınırlandırılmış bir sistemin yoğunluğunun nokta yarıçapı ile deęişiminin, parçacık sayısı ile deęişimi karşılaştırılmıştır. Parçacık sayısındaki artış, eğrilerin genel davranışını deęiştirmez. Harmonik olmayan yapıya benzer biçimde, merkez yoğunluğu ve nokta yarıçapı parçacık sayısıyla artar.

Şekil 4.8’da toplam enerjinin, Ω ’ya göre deęişimi farklı potansiyellerdeki sınırlandırmalar için gösterilmiştir.

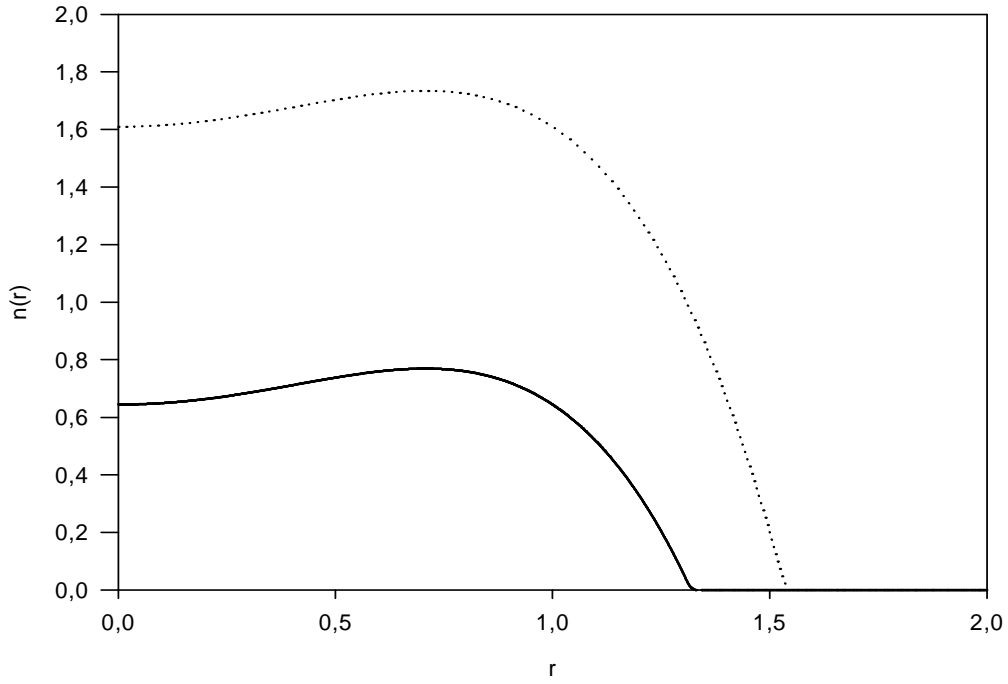


Şekil 4.5. Farklı sayılarda elektron içeren $\gamma=0,5$ için harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) potansiyelde sınırlandırılmış bir sistemin nokta yarıçapıyla yoğunluk deęişimi. Çizgi- $\Omega =1$, nokta- $\Omega =3$.

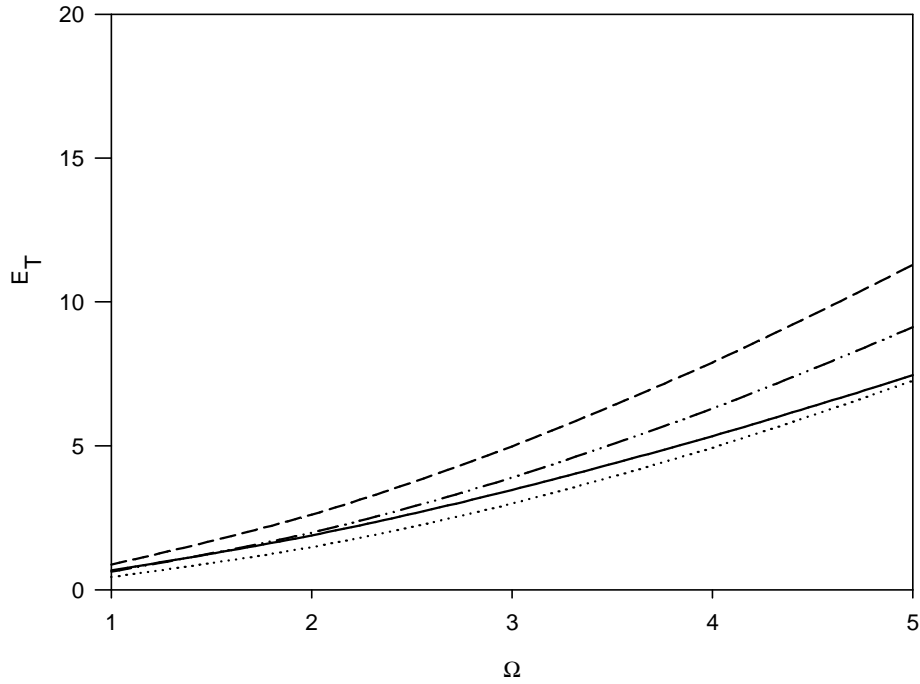


Şekil 4.6. Deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) bir potansiyelle sınırlanmış bir sistem için nokta yarıçapıyla yoğunluk değişimi. Çizgi- $\gamma=0,5$, nokta- $\gamma=1$, çizgi- $\gamma=5$.

Şekil 4.8'e göre toplam enerji ve parçacık sayısı doğru orantılıdır. Farklı potansiyellerdeki sınırlandırma şekli ise enerjideki artış şeklini önemli ölçüde etkilemektedir. r^4 potansiyeli (γr^4) ve harmonik (αr^2) yapılarda sınırlanmış sistemler karşılaştırıldığında, düşük sayılarda harmonik potansiyelin enerjisinin çok az miktarda r^4 potansiyelinden fazla olduğu gözlenir. Parçacık sayısının artışıyla birlikte bu davranışın değiştiği ve r^4 potansiyelinde sınırlanmış sistemin enerjisinin, harmonik potansiyelde sınırlanmış sistemin enerjisinden daha büyük hale geldiği söylenilebilir. Harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) sistemin enerjisi, beklenildiği gibi Harmonik ve r^4 potansiyellerinde sınırlanmış sistemlerin enerjilerinden büyüktür. Ancak deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) sistemin enerjisi V_0 deformasyon teriminin etkisiyle bu iki potansiyelin arasında yer alır.



Şekil 4.7. Farklı sayı içeren, deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) bir potansiyelle sınırlandırılmış bir sistem için nokta yarıçapıyla yoğunluk değişimi. Çizgi- $\Omega=1$, nokta- $\Omega=3$ durumları.



Şekil 4.8. Etkileşmeyen sistem için enerjinin parçacık sayısıyla değişimi. Çizgi-harmonik (αr^2), nokta- r^4 potansiyeli (αr^4), çizgi-harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \alpha r^4$), noktali çizgi-deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \alpha r^4$).

5. İKİ BOYUTLU KUANTUM NOKTA YAPIDA $v(r)=br^t$ POTANSİYELİNDE SINIRLANDIRILMIŞ ETKİLEŞMEYEN SİSTEMİN TERMAL ÖZELLİKLERİ

Buraya kadar olan kısımdaki bütün hesaplamalar sabit sıcaklıkta $T=0$ K yapılmıştır. Bundan sonraki bölümde sıcaklığın etkisi aynı sınırlandırma potansiyelleri için incelenecektir.

5.1. n Boyutta ve br^t Potansiyelde Sınırlandırılmış Sistemin Termal Özellikleri

n boyutlu uzayda toplam parçacık sayısı N ve toplam enerji E sırasıyla;

$$N = \sum \frac{g}{e^{\frac{\epsilon-\mu}{kT}} + 1} = \frac{g}{h^n} \int \frac{\epsilon d^n r d^n p}{z^{-1} e^{\frac{\epsilon}{kT}} + 1}, \quad (5.1)$$

ve

$$E = \sum \frac{g\epsilon}{e^{\frac{\epsilon-\mu}{kT}} + 1} = \frac{g}{h^n} \int \frac{\epsilon d^n r d^n p}{z^{-1} e^{\frac{\epsilon}{kT}} + 1}, \quad (5.2)$$

ile verilebilir. Burada k ve h, sırasıyla Boltzman ve Plank sabitleridir, g, spin dejenerasyon faktörüdür. $z = \exp\left(\frac{\mu}{kT}\right)$ fugasitedir. Fermi-Dirac integrali kullanılarak;

$$f_1(z) = \frac{1}{\Gamma(1)} \int_0^{\infty} \frac{x^{1-1} dx}{z^{-1} e^x + 1}, \quad (5.3)$$

ve $v(r) = br^t$ potansiyelinde sınırlandırılmış $\epsilon = ap^s + br^t$ enerjili fermi gazı için

(5.1) ve (5.2) denklemleri;

$$N = \frac{gC_n^2 \Gamma\left(\frac{n}{s} + 1\right) \Gamma\left(\frac{n}{t} + 1\right)}{h^n a^{\frac{n}{s}} b^{\frac{n}{t}}} (kT)^\lambda f_\lambda(z), \quad (5.4)$$

$$E = Nk\lambda T \frac{f_{\lambda+1}(z)}{f_\lambda(z)}, \quad (5.5)$$

şeklinde ifade edilebilir (Lee vd. 1998). Burada a, b, s ve t pozitif sabitlerdir.

$$\lambda = \frac{n}{s} + \frac{n}{t}, \text{ dir. } C_n = \frac{V_n}{R_n} = \frac{\pi^{\frac{n}{2}}}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)} \text{ olup } R \text{ ve } V_n, \text{ sırasıyla yarıçap ve } n \text{ boyutlu}$$

bir kürenin hacmidir. $\Gamma(l) = \int_0^\infty y^{l-1} e^{-y} dy$ ise Gamma fonksiyonudur.

Fermi integralleri, $f_1(z)$ Fermi sisteminin özelliklerini yansıtır. Yüksek sıcaklıklarda, z çok küçüktür, bu yüzden $f_1(z)$;

$$f_1(z) = \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^{i-1} \frac{z^i}{i!}, \quad (5.8)$$

gibi bir seri açılım yapılabilir. Düşük sıcaklıklarda, Fermi integralleri Sommerfeld kuralı kullanılarak;

$$f_1(z) = \frac{(\ln z)^1}{\Gamma(1+1)} \left[1 + 1(1-1) \frac{\pi^2}{6} \frac{1}{(\ln z)^2} + 1(1-1)(1-2)(1-3) \frac{7\pi^4}{360} \frac{1}{(\ln z)^4} + \dots \right] \quad (5.9)$$

şeklinde ifade edilebilir. T = 0 K 'de (5.9) denklemi;

$$f_1(z) = \frac{(\ln z)^1}{\Gamma(1+1)},$$

şeklinde verilebilir. Bu ifade, (5.4) denkleminde yerine yazılırsa, toplam parçacık sayısı N;

$$N = \frac{gC_n^2 \Gamma\left(\frac{n}{s} + 1\right) \Gamma\left(\frac{n}{t} + 1\right)}{h^n a^{\frac{n}{s}} b^{\frac{n}{t}} \Gamma(\lambda + 1)} E_F^\lambda, \quad (5.10)$$

şeklinde tekrar yazılabilir. Burada E_F Fermi enerjisidir ve;

$$E_F = \left[\frac{N h^n a^{\frac{n}{s}} b^{\frac{n}{t}} \Gamma(\lambda + 1)}{gC_n^2 \Gamma\left(\frac{n}{s} + 1\right) \Gamma\left(\frac{n}{t} + 1\right)} \right]^{\frac{1}{\lambda}}, \quad (5.11)$$

olarak elde edilir. (5.9) denklemini, (5.5) denkleminde yerine yazıldığında taban durum enerjisi Fermi sistemindeki taban durum enerjisi E_0 , Fermi enerjisi E_F cinsinden;

$$E_0 = \frac{\lambda}{\lambda + 1} N E_F, \quad (5.12)$$

şeklinde ifade edilebilir. Düşük sıcaklık limitinde kimyasal potansiyel;

$$\mu = E_F \left[1 - (\lambda - 1) \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^2 \right], \quad (5.13)$$

şeklinde yazılabilir.

Yüksek sıcaklıklarda, z çok küçüktür. (5.8) denklemini de Fermi-Dirac fonksiyonunun ilk terimi (5.4) denkleminde yerine yazılarak, yüksek sıcaklıklar limitindeki kimyasal potansiyel;

$$\mu = kT \ln \left[\frac{N h^n a^{\frac{n}{s}} b^{\frac{n}{t}}}{gC_n^2 \Gamma\left(\frac{n}{s} + 1\right) \Gamma\left(\frac{n}{t}\right) (kT)^\lambda} \right], \quad (5.14)$$

şeklinde türetilir.

Dış potansiyelin sabit tutulması şartı altında denk(5.5)'in sıcaklığa göre türevinden sistemin ısı kapasitesi;

$$C = Nk\lambda \left[(\lambda + 1) \frac{f_{\lambda+1}(z)}{f_{\lambda}(z)} - \frac{f_{\lambda}(z)}{f_{\lambda-1}(z)} \right], \quad (5.15)$$

şeklinde yazılabilir. (5.8) ve (5.9) denklemleri yardımıyla, (5.15) denklemi düşük ve yüksek sıcaklıklar limitinde sırasıyla:

$$C = Nk\lambda \frac{\pi^2 kT}{3 E_F}. \quad (5.16)$$

ve

$$C = Nk\lambda. \quad (5.17)$$

şeklinde ifade edilebilir. Düşük sıcaklıklarda $C, T \rightarrow 0$ durumunda sıfıra gider. Bu termodinamiğin 3. Kanununa uyar. Yüksek sıcaklıklarda ise ısı kapasitesi (5.17) denkleminde açıkça görülebildiği gibi klasik limite gider.

$$b = b_0 \left(\frac{1}{r_0} \right)^t \text{ seçildiğinde } t \rightarrow \infty \text{ durumunda (5.4) denklemi, (5.5) ve (5.11)-}$$

(5.17) denklemleri kullanılarak, serbest Fermi gazının termodinamik özelliklerini elde edebiliriz. Örneğin, toplam parçacık sayısı N , toplam enerji E , Fermi enerjisi E_F ve taban durumu enerjisi E_0 sırasıyla aşağıdaki gibi verilir:

$$N = \frac{gV_n C_n \Gamma\left(\frac{n}{s} + 1\right)}{h^n a^{\frac{n}{s}}} (kT)^{\frac{n}{s}} f_{\frac{n}{s}}(z). \quad (5.18)$$

$$E = NkT \frac{n}{s} \frac{f_{\frac{n}{s}+1}(z)}{f_{\frac{n}{s}}(z)}. \quad (5.19)$$

$$E_F = \mu_0 = \left[\frac{N h^n a^{\frac{n}{s}}}{g V_n C_n} \right]^{\frac{s}{n}}. \quad (5.20)$$

$$E_0 = \frac{n}{n+s} N E_F. \quad (5.21)$$

Düşük ve yüksek sıcaklıklarda kimyasal potansiyel μ ve ısı sıgası C sırasıyla;

$$\mu = E_F \left[1 - \left(\frac{n}{s} - 1 \right) \frac{\pi^2}{6} \left(\frac{kT}{E_F} \right)^2 \right], \quad (5.22)$$

$$C = Nk \frac{\pi^2}{3} \frac{n}{s} \frac{kT}{E_F}, \quad (5.23)$$

$$\mu = kT \ln \left[\frac{N h^n a^{\frac{n}{s}}}{g V_n C_n \Gamma\left(\frac{n}{s} + 1\right) (kT)^{\frac{n}{s}}} \right], \quad (5.24)$$

$$C = \frac{n}{s} Nk, \quad (5.25)$$

şeklinde verilir.

5.2. Farklı Potansiyelerde Sınırlandırılmış N Elektronunda Oluşan İki Boyutta ve Farklı Potansiyelerde (harmonik (αr^2), r^4 Potansiyeli (γr^4), Harmonik Olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$), Deforme Edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$)) Sınırlandırılmış Elektronların Termal Özellikleri

Bölüm 5.1’de $n=2$, $a = \frac{1}{2m}$, $s=2$ ve $g=2$ alındığında herhangi bir $v(r)$ potansiyeli için parçacık sayısı N , elektron yoğunluğu $n(r)$, kinetik enerji E_k , potansiyel enerji E_p , toplam enerji E_t Fermi Dirac integralleri cinsinden aşağıdaki gibi ifade edilebilir:

$$N = 2mkT \int_0^{r_0} r f_1(z) . \quad (5.26)$$

$$n(r) = \frac{mkT}{\pi} f_1(z) dr . \quad (5.27)$$

$$E_k = \frac{m(kT)^2}{\pi} \int 2\pi r f_2(z) dr . \quad (5.28)$$

$$E_p = \frac{mkT}{\pi} \int 2\pi r v(r) f_1(z) dr . \quad (5.29)$$

$$E_t = \frac{mkT}{\pi} \int 2\pi r (kT f_2(z) + v(r) f_1(z)) dr . \quad (5.30)$$

Tablo 5.1, tablo 5.2, tablo 5.3 ve tablo 5.4 sırasıyla harmonik (αr^2), r^4 potansiyeli (γr^4), harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) ve deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) potansiyelerde sınırlandırılmış sistemler için, serbest ve sınırlandırılmış gaz için düşük sıcaklıkta elektron yoğunluğu $n(r)$, toplam parçacık sayısı N , toplam enerji E ve kimyasal potansiyel μ ifadeler verilmiştir.

Tablo 5.1. İki boyuttaki serbest ve harmonik (αr^2) potansiyelde sınırlandırılmış düşük sıcaklıkta Fermi gazının karşılaştırması. $\alpha=0,5$, $\gamma=0,5$ 'dir.

Fiziksel nicelik	serbest gaz	harmonik (αr^2) potansiyelde sınırlandırılmış gaz
Toplam parçacık sayısı N	$\frac{mV\mu}{\pi}$	$mr_0^2 - \frac{m\alpha r_0^4}{2}$
Elektron yoğunluğu $n(r)$	$\frac{m\mu}{\pi}$	$\frac{m(\mu - \alpha r^2)}{\pi}$
Toplam enerji E	$\frac{N\mu}{2} \left[1 + \frac{\pi^2}{6} \frac{kT^2}{\mu^2} \right]$	$\frac{\pi m \omega^4}{24} r_0^6 (\pi + m)$
Kimyasal potansiyel μ	$\frac{N\pi}{mV}$	αr_0^2

Tablo 5.2. Düşük sıcaklıkta, iki boyutta serbest ve r^4 potansiyelinde (γr^4) sınırlandırılmış Fermi gazının karşılaştırması.

Fiziksel nicelik	serbest gaz	r^4 potansiyelinde (γr^4) sınırlandırılmış gaz
Toplam parçacık sayısı N	$\frac{mV\mu}{\pi}$	$mr_0^2 - \frac{m\gamma r_0^6}{3}$
Elektron yoğunluğu $n(r)$	$\frac{m\mu}{\pi}$	$\frac{m(\mu - \gamma r^4)}{\pi}$
Toplam enerji E	$\frac{N\mu}{2} \left[1 + \frac{\pi^2}{6} \frac{kT^2}{\mu^2} \right]$	$\frac{9r_0^{10}}{30}$
Kimyasal potansiyel μ	$\frac{N\pi}{mV}$	γr_0^4

Tablo 5.3. İki boyuttaki serbest ve harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) potansiyelde sınırlandırılmış düşük sıcaklıkta Fermi gazının karşılaştırması.

Fiziksel nicelik	serbest gaz	harmonik olmayan potansiyelde ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) sınırlandırılmış gaz
Elektron yoğunluğu $n(r)$	$\frac{mV\mu}{\pi}$	$\frac{m(\mu - \alpha r^2 - \gamma r^4)}{\pi}$
Toplam parçacık sayısı N	$\frac{m\mu}{\pi}$	$mr_0^2 - \frac{m\alpha r_0^4}{2} - \frac{m\gamma r_0^6}{3}$
Toplam enerji E	$\frac{N\mu}{2} \left[1 + \frac{\pi^2}{6} \frac{kT^2}{\mu^2} \right]$	$\frac{r_0^6}{12} + \frac{3}{8} r_0^8 + \frac{2}{5} \gamma^2 r_0^{10}$
Kimyasal potansiyel μ	$\frac{N\pi}{mV}$	$\alpha r_0^2 + \gamma r_0^4$

Tablo 5.4. İki boyuttaki serbest ve deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r_0$) potansiyelde sınırlandırılmış düşük sıcaklıkta Fermi gazının karşılaştırması. Burada $V_0 = \frac{\alpha^2}{4\gamma}$ olarak tanımlanmıştır.

Fiziksel nicelik	serbest gaz	deforme edilmiş potansiyelde ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r_0$) sınırlandırılmış gaz
Elektron yoğunluğu $n(r)$	$\frac{mV\mu}{\pi}$	$\frac{m(\mu - V_0 + \alpha r^2 - \gamma r^4)}{\pi}$
Toplam parçacık sayısı N	$\frac{m\mu}{\pi}$	$mr_0^2 (1 - V_0 + \frac{m\alpha r_0^4}{2} - \frac{m\gamma r_0^6}{3})$
Toplam enerji E	$\frac{N\mu}{2} \left[1 + \frac{\pi^2}{6} \frac{kT^2}{\mu^2} \right]$	$-\frac{V_0 \alpha r_0^4}{2} + \left(\frac{2V_0 \gamma}{3} + \frac{\alpha^2}{6} + \frac{\alpha^2 m}{6} \right) r_0^6$ $- r_0^8 \left(\frac{\alpha \gamma}{3} - \frac{5\alpha \gamma m}{12} \right) + \frac{2\gamma^2 r_0^{10}}{5}$
Kimyasal potansiyel μ	$\frac{N\pi}{mV}$	$V_0 - \alpha r_0^2 + \gamma r_0^4$

Serbest gazda sadece parçacık sayısı termal özellikleri belirlerken, sınırlandırılmış sistemlerde buna ek olarak sınırlandırma katsayıları olan V_0 , α ve γ sistemin özelliklerinin belirlenmesinde etkili olmaktadır. Sonlu sıcaklıklarda, düşük sıcaklık haricindeki tüm işlemler nümerik olarak Mapple 9.0 aracılığıyla gerçekleştirilmiştir. Sabit bir sıcaklık için (5.26) denkleminde verilen N ifadesinden elektron yoğunluğunun 0'a gittiği nokta olan r_0 değeri elde edilir. Daha sonra bu değer yardımıyla toplam enerji ifadesi olan (5.30) denklemi elde edilir.

5.3 Sonuç ve Tartışma

Bu bölümde, T-F metodu kullanılarak, ideal Fermi gazının termal özellikleri analiz edilmiştir. Kinetik ve potansiyel enerji, elektron yoğunluğu, toplam enerji gibi taban durum özellikleri harmonik (αr^2), r^4 potansiyeli (γr^4), harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) ve deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) potansiyeller için etkileşme göz önünde bulundurulmadan hesaplanmıştır. Burada $\gamma = \frac{1}{2} \frac{m^* \omega^2}{\epsilon}$,

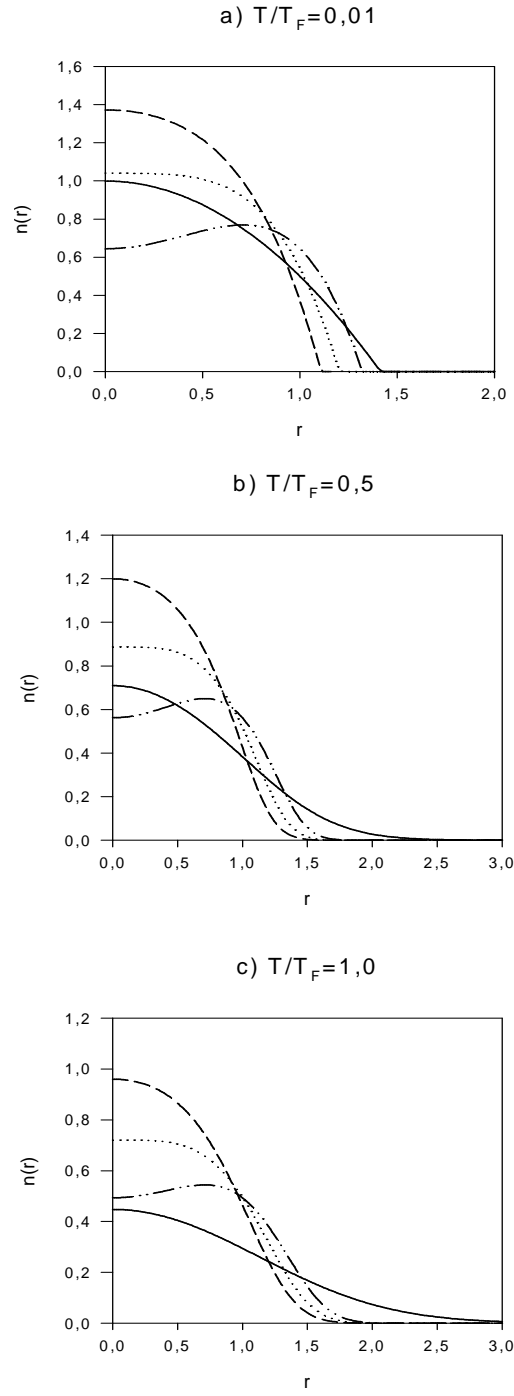
$$V_0 = \frac{\alpha^2}{4\gamma} \text{ ve } \alpha = \frac{1}{2} \text{ olarak alınmıştır.}$$

Şekil 5.1'te harmonik (αr^2), r^4 potansiyeli (γr^4), harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) ve deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) potansiyellerde sınırlandırılmış sistemlerin a) $T/T_F=0,01$ (sıfır sıcaklığına çok yakın) b) $T/T_F=0,5$ (orta sıcaklık) c) $T/T_F=1,0$ (yüksek sıcaklık) için elektron yoğunluklarının radyal uzaklıkla değişimi görülmektedir. Genel olarak sınırlandırma potansiyeli ne olursa olsun nokta yarıçapı arttıkça elektron yoğunluğu olarak azalmaktadır. Buna ek olarak deforme edilmiş potansiyelde sınırlandırılmış sistemin elektron yoğunluğu öncelikle belli bir noktaya kadar artmış, daha sonra ise azalmıştır. Bu hareket şekil olarak merkezde bir basıklığa neden olmuştur. Deforme edilmiş potansiyelde sınırlandırılmış sistemin merkezci elektron yoğunluğu $T/T_F=0,01$ ve $T/T_F=0,5$ sıcaklıklarında en düşük değere sahip iken harmonik olmayan potansiyelde sınırlandırılmış sistemin merkezci elektron yoğunluğu üç sıcaklıkta da en yüksek

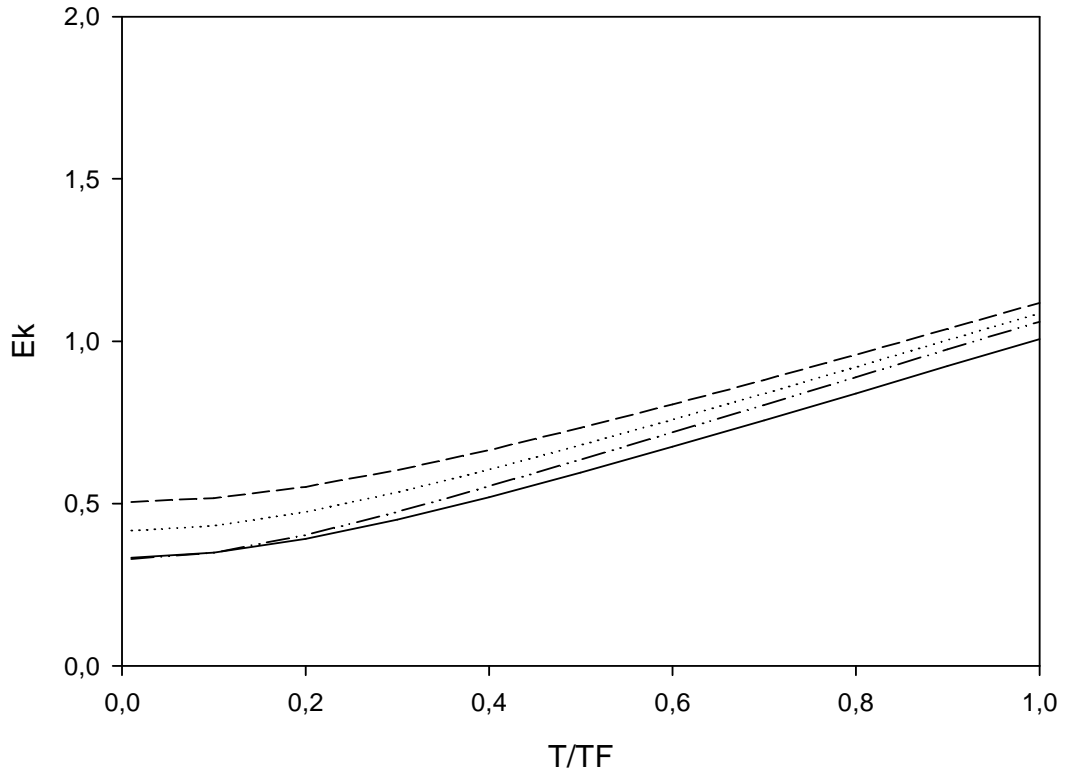
değere sahiptir. Şekil a,b,c 'de görüldüğü gibi bütün sınırlandırma potansiyelleri için nokta yarıçapı sıcaklık arttıkça artmaktadır. Deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) potansiyelde sınırlandırılmış sistemin şekil olarak merkezindeki basıklık sıcaklığın artmasıyla birlikte azalmıştır. Ayrıca sıcaklık arttıkça merkezdeki en hızlı yoğunluk azalması harmonik (αr^2) olarak sınırlandırılmış sistemde görülmektedir.

Şekil 5.2' de kinetik enerjinin sıcaklığa göre değişimi farklı sınırlandırma potansiyelleri için (harmonik(αr^2), r^4 potansiyeli(γr^4), harmonik olmayan($\alpha r^2 + \gamma r^4$) ve deforme edilmiş($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$)) incelenmiştir. Sınırlandırma potansiyeli ne olursa olsun kinetik enerji sıcaklıkla orantılı olarak artmaktadır. Düşük sıcaklıklarda harmonik ve deforme edilmiş potansiyelin birbirine yakın değerlere sahip olduğu görülmektedir. Bununla birlikte bu iki potansiyel en düşük kinetik enerji değerine sahiptir. Ancak sıcaklığın artmasıyla deforme edilmiş potansiyelde sınırlandırılmış sistemin kinetik enerjisi, harmonik potansiyelde sınırlandırılmış sistemin kinetik enerjisine göre daha hızlı artış göstermektedir. Harmonik olmayan potansiyelde sınırlandırılmış sistemin kinetik enerjisi ise en yüksek değere sahiptir.

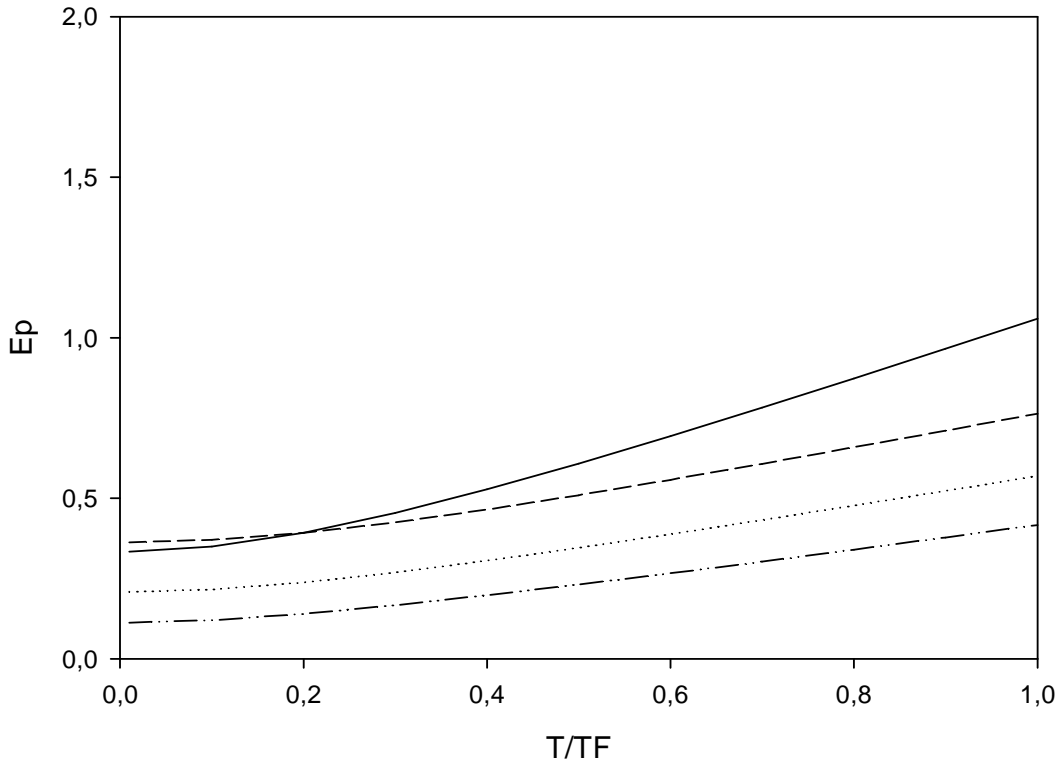
Şekil 5.3'de potansiyel enerjinin sıcaklığa göre değişimi harmonik(αr^2), r^4 potansiyeli(γr^4), harmonik olmayan($\alpha r^2 + \gamma r^4$), deforme edilmiş($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) sınırlandırma potansiyelleri için araştırılmıştır. Sıcaklığın artmasıyla birlikte potansiyel enerjinin arttığı şekilden açıkça görülmektedir. Düşük sıcaklıklarda en yüksek potansiyel enerjiye sahip olan sistem, harmonik olmayan ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) potansiyelde sınırlandırılmış sistemdir. Ancak sıcaklık arttıkça harmonik potansiyelde sınırlandırılmış sistemin potansiyel enerjisi, harmonik olmayan potansiyelde sınırlandırılmış sistemin potansiyel enerjisine göre daha hızlı artış göstermektedir. Sıcaklık sabit tutulduğunda ise deforme edilmiş potansiyelde sınırlandırılmış sistemin potansiyel enerjisi en düşük değere sahiptir. Bununla birlikte şekil olarak harmonik olmayan, r^4 potansiyeli ve deforme edilmiş potansiyellerde sınırlandırılmış sistemlerin sıcaklığının artması ile birlikte, potansiyel enerjilerindeki artış hızları yaklaşık olarak aynıdır.



Şekil 5.1. Harmonik (αr^2) (düz çizgi), r^4 potansiyeli (γr^4) (nokta), harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) (kısa çizgi) ve deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) (noktalı çizgi) potansiyellerde sınırlandırılmış sistemler için a) $T/T_F=0,01$ b) $T/T_F=0,5$ c) $T/T_F=1,0$ sıcaklıkları için yoğunluğun radyal değişimi

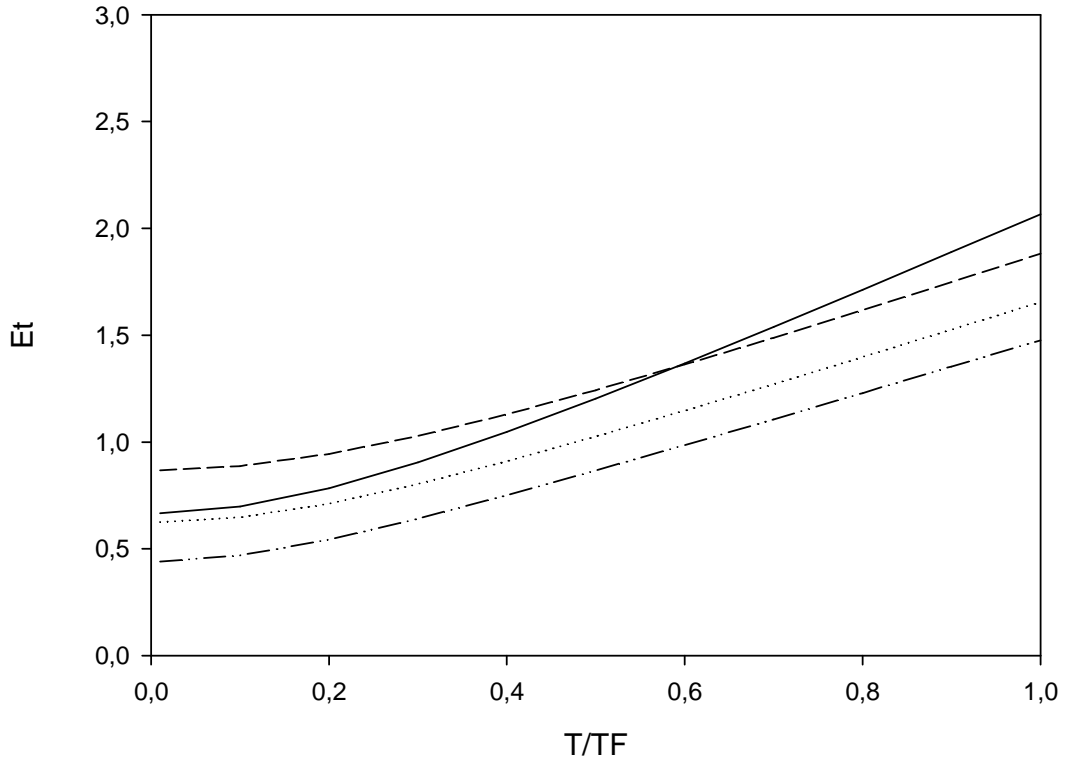


Şekil 5.2. Harmonik (αr^2) (düz çizgi), r^4 potansiyeli (γr^4) (nokta), harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) (kısa çizgi) ve deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) (noktalı çizgi) potansiyellerde sınırlandırılmış sistemler için E_k kinetik enerjisinin sıcaklıkla değişimi.



Şekil 5.3. Harmonik (αr^2) (düz çizgi), r^4 potansiyeli (γr^4) (nokta), harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) (kısa çizgi) ve deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) (noktalı çizgi) potansiyellerde sınırlandırılmış sistemler için E_p potansiyel enerjisinin sıcaklıkla değişimi.

Toplam enerjinin sıcaklıkla değişimi harmonik (αr^2), r^4 potansiyeli (γr^4), harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) ve deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) potansiyellerde sınırlandırılmış sistemler için şekil 5.4'den görülmektedir. Bu değişimler şekil olarak potansiyel enerjiye benzemektedir. Potansiyel enerji ve toplam enerjinin şekil olarak aralarındaki fark sıcaklığın artmasıyla harmonik potansiyelde sınırlandırılmış sistemin potansiyel enerjisinin toplam enerjiye göre daha hızlı atmasıdır.



Şekil 5.4. Harmonik (αr^2) (düz çizgi), r^4 potansiyeli (γr^4) (nokta), harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) (kısa çizgi) ve deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$) (noktalı çizgi) potansiyellerde sınırlandırılmış sistemler için E_t toplam enerjisinin sıcaklıkla değişimi.

6. SONUÇ VE TARTIŞMA

Bu tez çalışmasında, kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerinin parçacık sayısı, sınırlandırma şekli ve sıcaklık ile değişimi incelenmiştir. Öncelikle kuantum nokta yapının özelliklerinden bahsedilmiştir. Daha sonra kuantum nokta yapıların atomlara olan benzerliği incelenmiştir. Sonra, çok elektronlu sistemlerin fiziksel özelliklerini araştırmak amacı ile kullanılan istatistiksel yöntemler olan, Hartree-Fock yaklaşımı (H-F) , yoğunluk foksiyonel teoremi ve Thomas Fermi (T-F) atom modeli tanıtılmıştır.

Kuantum nokta yapı içerisindeki parçacık sayısı arttırıldığında geleneksel yöntemlerle hesaplama yapmak oldukça zor hale gelir. Bu nedenle çok sayıda parçacık içeren nokta yapıların elektronik özelliklerini araştırmak için istatistiksel yöntemlerden biri olan T-F yöntemi seçilmiştir. Bu amaçla Thomas Fermi denklemi iki boyutlu kuantum nokta yapılar için farklı potansiyellerde (harmonik (αr^2), r^4 potansiyeli (γr^4), harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) ve deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$), $\alpha = sbt, \gamma = sbt$) sınırlandırılmış etkileşmeyen elektronlar için, $T=0$ K sıcaklığında çözülmüştür. İki boyutlu kuantum nokta yapıda $v(r) = bt^t$ potansiyelinde sınırlandırılmış etkileşmeyen sistemin fiziksel özellikleri sonlu sıcaklıkta ifade edilmiştir. Farklı potansiyeller için (harmonik (αr^2), r^4 potansiyeli (γr^4), harmonik olmayan ($\alpha r^2 + \gamma r^4$) ve deforme edilmiş ($V_0 - \alpha r^2 + \gamma r^4$)) düşük sıcaklıkta analitik ifadeler türetmiştir.

Kuantum noktaların fiziği diğer bazı kuantum sistemlerinde de gözlemlenebilir. Örneğin; karbon nano tüplerdeki tek elektronun hareketi kuantum nokta yapılarınkine benzer. Bu durum kuantum nokta yapılarıdaki fiziğin diğer sınırlandırılmış elektron içeren sistemlere uygulanabileceğini gösterir. Nano teknolojide devam eden gelişmeler yapay kuantum yapılarının daha geniş aralıkta araştırılmasına olanak verir.

Burada teorik olarak modellenen yapı, daha sonra deneysel olarak oluşturulacak yapıların fiziksel özelliklerini incelemede ışık tutacaktır.

7. KAYNAKLAR

- Abdullah, S., Coe, J. P. ve D'Amico, I. 2009 Effect of confinement potential geometry on entanglement in quantum dot-based nanostructures. *Phys. Rev. B* 80:235302
- Bastard, G. 1981 Hydrogenic impurity states in a quantum well: A simple model. *Phys. Rev. B* 24: 4714.
- Bellessa, J., Combescot, M. 1999 Size dependence of impurity levels in quantum dots: exact versus variational results. *Solid State Comm.* 111:275.
- Bhaduri, R. K. Murthy M. V. N. ve Srivastava, M. K. 1996 Fractional exclusion statistics and two dimensional electron systems. *Phys. Rev. Lett.* 76: 165.
- Bhaduri, R. K. 1997 *Semiclassical physics*. Addison Wesley Publishing Company.
- Bose, C. ve Sarkar, K. 2000 Binding energy of impurity states in spherical GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs quantum dots. *Phys. Stat. Sol.(b)* 218:461.
- Brandsden, B. H., Joachain, C. J., çeviri, Köksal, F., Gümüş, H., 1989 *Atom ve Molekül Fiziği*. Ondokuz Üniversitesi yayınları.
- Brum, J. A. 1985 Position-dependence of the impurity binding-energy in quantum well wires. *Solid State Commun.* 54:179.
- Bryant, G. W. 1985 Hydrogenic impurity states in quantum-well wires: Shape effects *Phys. Rev B* 31: 7812.
- Chaudhury, P. ve Bhattacharyya, S.P. 1998 Numerical solutions of the Schrodinger equation directly or perturbatively by a genetic algorithm: test cases. *Chem.Phys.Lett.* 327:429
- Cibert, J. Petroff, P. M. Dolan, G. J. Pearon, S. J. Gossard, A. C. English, J. H. 1986 Optically detected carrier confinement to one and zero dimension in GaAs quantum well wires and boxes. *Appl. Phys. Lett.* 49:1275.
- Ciftja, O. ve Kumar, A. A. 2004 Ground state of two-dimensional quantum-dot helium in zero magnetic Perturbation, diagonalization, and variational theory field. *Phys. Rev. B* 70: 205326.
- Demel, T., Heihmann, D. Grambow P. ve Ploog, K. 1990 Nonlocal dynamic response and level crossings in quantum-dot structures *Phys. Rev. Lett.* 64: 788.
- Evans, R. 1979 *Adv. in Phys.* 28:143.

- Fermi, E. 1927 *Rend. Accad. Naz. Lincei* 6: 602
- Ferreya, J. M. Proetto, C.R. 1995 Strong-confinement approach for impurities in quantum dots. *Phys. Rev. B* 52:R2309.
- Gulveren, B., Atav, Ü., Tomak, M. 2005 Electronic properties of a large quantum dot at a finite temperature. *Physica E* 28: 482.
- Grigorenko, I. ve Garcia, M. E. 2000 An evolutionary algorithm to calculate the ground state of a quantum system. *Physica A*, 284:131.
- Gudmundsson, V. Gerhardt, R. R. 1991 Self-consistent model of magnetoplasmons in quantum dots with nearly parabolic confinement potentials. *Phys. Rev. B* 43: 12098.
- 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.
- Hodges, C. H. 1973 *Can. J. Phys.* 51:1428
- Jacak, L., Hawrylak, P. ve Wojs, A. 1998 *Quantum Dots*. Berlin, Springer.
- Johnson, N. F. 1995 Quantum dots - few-body, low-dimensional systems. *J. Phys. Condens. Matter* 7: 965.
- Karaoğlu, B. 2003 *İstatistik Mekaniğe Giriş*. Seyir yayıncılık.
- Kohn, W. Sham L. J. 1965 *Phys. Rev.* 140:A1133.
- Kouvenhoven, L., Marcus, C. 1998 Quantum dots *Phys. World* June: 35.
- Lee, M. Yan, Z. Chen, J. Chen, L. Chen, C. 1998 Thermodynamic properties of an ideal Fermi gas in an external potential with $U=br^l$ in any dimensional space. *Phys. Rev A* 58:2.
- Lee, I.H. , Ahn, K.H. Leburton, J-P. 1999 Capacitive energies of quantum dots with hydrogenic impurity. *Phys. Rev. B* 60 :13720.
- Li, M. Yan, Z. Chen, J. Chen L. and Chen, C. 1998 Thermodynamic properties of an ideal Fermi gas in an external potential with $U=br^l$ in any dimensional space. *Phys. Rev. A* 58:1445.
- 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.
- Lieb, E. H. Solovej, J. P. Yngvason, 1995 Ground states of large quantum dots in magnetic fields. *J. Phys. Rev. B* 51:10646.

- Liu, C.T. Nakamura, K. Tsui, D.C. Ismail, K. Antoniadis, D.A. and Smith, H.I. 1989 Magneto-optics of a quasi-zero-dimensional electron-gas. *App.Phys.Lett.* 55:168.
- Luscombe, J. H. Luban, M. 1990 Lateral confinement in quantum nanostructures - self-consistent screening potentials. *Appl. Phys. Lett.* 57:61.
- Maksym P.A and Chakraborty T. 1990 Quantum dots in a magnetic field: role of electron-electron interactions *Phys.Rev.Lett.* 65:108.
- Mermin, 1965 N. D. *Phys.Rev.* 137:1441A
- Morgan, G. P., Ogawa, K. Hiruma, K. Kakibayashi, H. ve Katsuyama, T. 1991 Optical characterization of GaAs quantum wire microcrystals. *Solid State Commun.* 80:235.
- Nakanishi, H. ve Sugawara M. 2000 Numerical solution of the Schrodinger equation by a microgenetic algorithm. *Chem.Phys. Lett.* 327:429.
- Oliveira, L. E. Falicov, L. M. 1986 Energy spectra of donors and acceptors in quantum-well structures: Effect of spatially dependent screening. *Phys. Rev. B* 34:8676.
- Oliveira, L. E. 1988 Spatially dependent screening calculation of binding energies of hydrogenic impurity states in GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs quantum wells. *Phys. Rev. B* 38:10 641.
- Oliveira, L. E., Porras-Montenegro N. ve Latgé, A. 1993 Acceptor-related photoluminescence spectra of GaAs quantum-wire microcrystals: A model calculation. *Phys. Rev. B* 47:13 864
- Onyszkiewicz, Z. Wierzbicki, A. 1997 Magnetic properties of quasi low dimensional ising models. Elsevier Science B.V. 174:174.
- Ortenberg, M. 1980 Optical properties of the quasi two dimensional systems on tellurium surfaces. 98: A309.
- Oszwałdowski, R., Gøthgen, C. ve Žutić, I. 2010 Theory of quantum dot spin lasers. *Phys. Rev. B* 82:085316
- Petroff, P. M. Gossard, A. C. Logan, R. G. Wiegmann, W. Toward 1992 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 magnetic field. *Eur. Phys. J. B* 13 :723
- 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.
- Porras-Montenegro N. ve Pérez-Merchancano, S. T. 1992 Hydrogenic impurities in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots. *Phys. Rev B* 46 :9780
- Porras-Montenegro, N., Pérez-Merchancano, S. T. ve Ladgé,A. 1993 Binding energies and density of impurity states in spherical GaAs-(Ga, Al)As quantum dots. *J.Appl.Phys.*74 :7652.
- Porras-Montenegro,N., Gondar J. L. ve Oliveira,L. E. 1991 Binding energies and density of impurity states of shallow hydrogenic impurities in cylindrical quantum-well wires. *Phys. Rev. B* 43:1824. 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.
- Puente,A., Casas M. ve Serra, L. 2000 A semiclassical approach to the ground state and density oscillations of quantum dots. *Physica E* 8:387.
- Rasanen, E. Könemann, J. Haug, R. J. Puska, M.J. Nieminen, M. 2005 Charecterization of deformed quantum dots by modelling single-elektron-tunneling experiments. *Physica E* 26:477.
- Reed, M. A. Bate, R.T. Bradshaw, K. Duncan, W. M. Frensley, W. M. Lee, J. W. Smith, H. D. 1986 Spetial quantization in GaAs-AlGaAs multiple quantum dots. *J. Vacuum Sci. Technol. B* 4:358.
- Reimann, S. M., Manninen, M. 2002 Electronic structure of quantum dots. *Rev. Mod. Phys.* 74:1283.
- Ribeiro,F. J., Latgé,A. 1994 Impurities in a quantum dot: A comparative study. *Phys. Rev. B* 50:4913.
- Sinha,S., Shankar R. ve Murthy,M. V. N. 2000 Shell effects in quantum dots: A semiclassical approach. *Phys. Rev. B* 62:10 896.
- 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

- Tarucha, S. Honda, Austing, T. D. Tokura G. Y. Muraki, K. Oosterkamp, T. H. Janssen, J. W. and Kouwenhoven L. P. 1998 Electronic states in quantum dot atoms and molecules. *Physica E* 3:120.
- Temkin, H. Dolan, G. J. Panish, M. B. Chu, S. N. G. 1987 Low-temperature photoluminescence 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 T_c superconductors. Elsevier 75:515.
- Thomas, L. H. 1927 The calculation of atomic fields. *Proc. Cambridge Philos. Soc.* 23:542.
- 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 wavefunctions for hydrogenic donors in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots. *Phys. Lett. A* 252:248.
- 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
- Weber, G., Schulz, P. A. and L. E. Oliveira, 1988 Density of states and energy spectra of hydrogenic impurities in quantum-well wires. *Phys. Rev. B* 38:2179.
- Xia, J-B. 1989 Electronic structures of zero-dimensional quantum wells. *Phys. Rev. B* 40:8500.
- Xia, J-B. 1989 Electronic structures of zero-dimensional quantum wells. *Phys. Rev. B* 40:8500.
- Yang, C.C, Liu L.C. and Chang S.H., 1998 Eigenstates and fine structure of a hydrogenic impurity in a spherical quantum dot. *Phys. Rev. B* 58:1954.
- Yau ve J. K. F. Lee, C. M. 2003 Numerical method for N electrons bound to a polar quantum dot with a Coulomb impurity. *Phys. Rev. B* 67:115321.
- Ye, Z.L. Zaremba, E. 1994 Magnetoplasma excitations in anharmonic electron dots. *Phys. Rev. B* 50:17217.
- Zhu, J. L. 1989 Exact solutions for hydrogenic donor states in a spherically rectangular quantum well. *Phys. Rev. B* 39:8780.

Zhu, J. L., Xiong J. J. ve Gu, B. L. 1990 Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of GaAs-Ga_{1-x}Al_xAs. Phys. Rev. B 41:6001.