



T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ



ÇOK ELEKTRONLU KUANTUM NOKTA
YAPILARIN ELEKTRONİK YAPISININ VE
DALGA FONKSİYONLARININ
BELİRLENMESİ

Celalettin DEMİR

DOKTORA TEZİ

Fizik Anabilim Dalını

Ağustos-2022
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

TEZ KABUL VE ONAYI

Celalettin DEMİR tarafından hazırlanan “Çok Elektronlu Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Yapısının ve Dalga Fonksiyonlarının Belirlenmesi” adlı tez çalışması 10/08/2022 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği ile Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda DOKTORA TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

İmza

Başkan

Prof. Dr. Oğuz DOĞAN

.....

Danışman

Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN

.....

Üye

Prof. Dr. Yusuf YAKAR

.....

Üye

Prof. Dr. Bekir ÇAKIR

.....

Üye

Doç. Dr. Ozan ÖZKAN

.....

Yukarıdaki sonucu onaylarım.

Prof. Dr.

FBE Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

Bu tezdeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini ve tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

DECLARATION PAGE

I hereby declare that all information in this document has been obtained and presented in accordance with academic rules and ethical conduct. I also declare that, as required by these rules and conduct, I have fully cited and referenced all material and results that are not original to this work.

Celalettin DEMİR

Tarih:10/08/2022

ÖZET

DOKTORA TEZİ

ÇOK ELEKTRONLU KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK YAPISININ VE DALGA FONKSİYONLARININ BELİRLENMESİ

Celalettin DEMİR

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN

2022, 172 Sayfa

Jüri

Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN
Prof. Dr. Oğuz DOĞAN
Prof. Dr. Yusuf YAKAR
Prof. Dr. Bekir ÇAKIR
Doç. Dr. Ozan ÖZKAN

Kuantum nokta yapıların ayar edilebilir özellikleri sayesinde yaygın teknolojik uygulama potansiyeline ve halihazırdaki kullanım alanlarına sahip olması bu yapılara ilginin giderek artmasına neden olmuştur. Ayrıca sınırlandırılmış atomik yapılar için model oluşturmaları saf bilimsel araştırmalar için de önemli bir araç olmalarını sağlamıştır. Dolayısıyla bu yapılar hem bilimsel hem de teknolojik alanda araştırmalar için çok geniş uygulama alanlarına sahiptir. Bu nedenlerle kuantum nokta yapıların optoelektronik özelliklerinin bilinmesi çok önemlidir. Bu yapıların elektronik özellikleri farklı yöntemler kullanılarak incelenmiştir. Ancak çok elektronlu sistemlerin dalga fonksiyonlarının dikleştirilmesinde ve sistemin sonlu sınırlama potansiyeli ile sınırlanması durumunda karşılaşılan zorluklar nedeniyle bu çalışmalar genelde nokta yapıların taban durumları üzerinde ya da sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış nokta yapılar üzerinde yoğunlaşmıştır.

Bu tez çalışmasında, atomik sistemlerin incelenmesinde sıkça kullanılan yöntemler genel olarak özetlendi. Hartree Fock Roothan (HFR) ve kuantum genetik algoritma (KGA) yöntemlerinin üç boyutlu uzaysal sınırlandırılmış yapılara uyarlanması ayrıntılı olarak açıklandı. Bu yöntemler kullanılarak kuantum nokta yapıların elektronik özellikleri incelendi. Hesaplamalarda elektron sayısı iki ile dört arasında değişen, küresel simetrik sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılan sistemler ve iki elektronlu küresel simetrik sonlu potansiyel engeli ile sınırlandırılmış sistemler ele alındı. Sistemlerin uzaysal dalga fonksiyonları Slater tipi orbitallerin (STO) lineer kombinasyonundan oluşturuldu ve bu fonksiyonların dikleştirilmesinde Gram-Schmidt yöntemi kullanıldı. STO'ların lineer ve nonlineer parametreleri KGA yöntemi ile belirlendi. Bu parametreler, HFR yöntemi ile türetilen ifadelerde kullanılarak sistemin konfigürasyon ortalama enerjileri, enerji seviyeleri ve virial katsayıları hesaplandı. Ayrıca sonlu potansiyel engeli ile sınırlandırılmış nokta yapıların elektronlarının olasılık yoğunlukları hesaplandı. Elde edilen sonuçlar literatürdeki benzer çalışmalar ile karşılaştırılarak yorumlandı.

Anahtar Kelimeler: Kuantum Genetik Algoritma, Kuantum Nokta Yapı, Sınırlandırılmış Sistemler, Çok Elektronlu Sistemler, Hartree Fock Roothaan Yöntemi, Slater Tipi Baz fonksiyonları.

ABSTRACT

Ph.D THESIS

DETERMINATION OF THE ELECTRONIC STRUCTURE AND WAVE FUNCTIONS OF MULTI-ELECTRON QUANTUM DOT STRUCTURES

Celalettin DEMİR

THE GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE OF
SELÇUK UNIVERSITY
THE DEGREE OF DOCTOR OF IN PHYSICAL SCIENCE

Advisor: Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN

2022, 172 Pages

Jury

Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN
Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN
Prof. Dr. Oğuz DOĞAN
Prof. Dr. Yusuf YAKAR
Prof. Dr. Bekir ÇAKIR
Doç. Dr. Ozan ÖZKAN

Quantum dot structures have extensive technological application potential and current usage areas thanks to their adjustable properties, which has led to an increasing interest in these structures. In addition, their being models for confined atomic structures has made them an important tool for pure scientific research. Therefore, these structures have a wide range of applications for research in both scientific and technological fields. For these reasons, it is very important to know the optoelectronic properties of quantum dot structures. The electronic properties of these structures were investigated using different methods. However, due to the difficulties encountered in orthogonalizing the wave functions and when the system is confined by the finite potential, these studies have generally focused on the ground states of quantum dots or quantum dots constrained by the infinite potential barrier.

In this thesis, the methods that are frequently used in the analysis of atomic systems are summarized in general. The adaptation of Hartree Fock Roothaan (HFR) and quantum genetic algorithm (QGA) methods to three-dimensional spatially constrained structures is explained in detail. Using these methods, the electronic properties of quantum dot structures were investigated. In the calculations, systems with two to four electrons confined by a spherically symmetric infinite potential barrier and systems confined by a two electron spherically symmetric finite potential barrier were considered. The spatial wave functions of the systems were formed from the linear combination of Slater type orbitals (STO) and the Gram-Schmidt method was used to perpendicular to these functions. Linear and nonlinear parameters of STOs were determined by the QGA method. By using these parameters in expressions derived by the HFR method, the configuration average energies, energy levels and virial coefficients of the system were calculated. In addition, probability distributions of electrons of quantum dots confined by the finite potential barrier were calculated. The obtained results were interpreted by comparing them with similar studies in the literature.

Keywords: Quantum Genetic Algorithm, Quantum Point Structure, Confined Systems, Multi-Electron Systems, Hartree Fock Roothaan Method, Slater Type Base Functions.

ÖNSÖZ

Bu çalışmada sonlu ve sonsuz sınırlama potansiyeli ile sınırlandırılmış çok elektronlu kuantum nokta yapıların elektronik özellikler ve dalga fonksiyonları KGA ve HFR yöntemleri kullanılarak incelendi. Bu yapıların incelenmesi teknolojik gelişmeler ve atomik sistemlerin doğasının anlaşılmasındaki yararlılıkları nedeniyle önemli hale gelmiştir. Özellikle elektronik aygıtların kullanımının yaygınlaşması ile birlikte bu alandaki deneysel ve teorik çalışmalar da artmıştır. Bu çalışmada literatürdeki nokta yapılar ile ilgili çalışmalara katkı sağlamak ve daha kompleks nokta yapıların incelenmesinde kullanılabilecek yöntemler geliştirmek amaçlandı. Ayrıca nokta yapıların sınır şartlarının sağlanmasında izlenilen yol, dikleştirilmiş dalga fonksiyonlarının enerji değerlerine göre sıralanması ve kullanılan yöntemlerin mevcut çalışmalardaki yöntemlere kıyasla daha karmaşık sistemlerde de kullanılabilir olması bu çalışmanın literatürdeki benzerlerinden ayrışmasını sağladı.

Çalışmanın ilk bölümünde kuantum nokta yapıların teknoloji ve bilim alanındaki önemi üzerinde duruldu ve farklı alanlardaki kullanımları örneklandı. İkinci bölümde literatür araştırması verildikten sonra üçüncü bölümde KGA, varyasyon ve HFR yöntemleriyle birlikte dalga fonksiyonlarının özellikleri, elektron konfigürasyonu ve sistemin ortalama enerjisi atomik sistemler için genel hatlarıyla özetlendi. Bir sonraki bölümde kuantum nokta yapıların elektronik özellikleri ve bu çalışmada kullanılan yöntemlerin kuantum nokta yapılara nasıl uygulandığı verilerek tezin kuramsal kısmı tamamlandı. Beşinci ve altıncı bölümde iki, üç ve dört elektronlu sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış ve iki elektronlu sonlu potansiyel engeli ile sınırlandırılmış kuantum nokta yapıların farklı konfigürasyonları için hesaplanan enerji değerleri ve virial katsayıları verilerek elde edilen sonuçlar yorumlandı. Ayrıca bazı analitik ifadeler, ek açıklamalar, grafikler ve hesaplamalar sonucunda elde edilen dosyaların örneği **EKLER** kısmında verildi.

Bütün bu süreç içerisinde çalışmalarımın her anında desteğini esirgemeyen değerli hocam ve danışmanın Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN'e, her zaman bilgilerinden istifade ettiğim hocalarım Prof. Dr. Bekir ÇAKIR ve Prof. Dr. Yusuf YAKAR'a, bu süreçte yeterince zaman ayıramadığım çocuklarım Bengi Ayşe DEMİR'e ve Mete Utku DEMİR'e ve sevgisine her an muhtaç olduğum eşim Bilge DEMİR'e sonsuz teşekkürlerimi sunarım.

Celalettin DEMİR
KONYA-2022

İÇİNDEKİLER

ÖZET	iv
ABSTRACT	v
ÖNSÖZ	vi
İÇİNDEKİLER	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR.....	ix
1. GİRİŞ.....	1
2. KAYNAK ARAŞTIRMASI	5
2.1. Sıfır Boyutlu Nano Yapılar	5
2.2. Kuantum Mekaniksel Yöntemler	6
2.3. Kuantum Nokta Yapılarla İlgili Çalışmalar	8
3. GENEL TEORİ	14
3.1. Kuantum Genetik Algoritma.....	14
3.2. Varyasyon Yöntemi	18
3.3. Hartree-Fock Yöntemi	19
3.4. Çiftlenimli Dalga Fonksiyonları.....	25
3.5. Elektron Konfigürasyonu ve Ortalama Enerji.....	27
3.6. Dalga Fonksiyonlarının Dikleştirilmesi ve Normalizasyonu	29
4. KUANTUM NANO YAPILAR.....	30
4.1. Düşük Boyutlu Yapılar	30
4.2. Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özellikleri	33
4.2.1. Dalga fonksiyonu ve sınır koşulları	33
4.2.2. Kinetik enerji	36
4.2.3. Nükleer potansiyel enerji.....	37
4.2.4. Sınırlama potansiyel enerjisi	38
4.2.5. Coulomb ve exchange enerjisi.....	39
4.2.6. Ortalama enerji	46
4.2.7. Enerji seviyeleri	47
4.2.8. Orbital enerjileri.....	48
4.2.9. Virial teoremi.....	48
4.3. Dalga Fonksiyonlarının Belirlenmesi ve Enerji Seviyelerinin Hesaplanması	50
5. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA	56
5.1. Sonsuz Kuyu Potansiyelleri	56
5.1.1. Sonsuz kuantum nokta yapıların ortalama enerjileri	56
5.1.2. Sonsuz kuantum nokta yapıların orbital enerjileri	64
5.1.4. Sonsuz kuantum nokta yapıların enerji seviyeleri	70

5.1.5. Sonsuz kuantum nokta yapıların virial katsayıları.....	78
5.2. Sonlu Kuyu Potansiyelleri.....	84
5.2.1. Kuantum nokta yapının elektronlarının olasılık yoğunlukları.....	84
5.2.2. Sonlu kuantum nokta yapıların ortalama enerjileri.....	91
5.2.4. Sonlu kuantum nokta yapıların sınırlama potansiyel enerjileri.....	95
5.2.5. Sonlu kuantum nokta yapıların orbital enerjileri.....	99
5.2.6. Sonlu kuantum nokta yapıların enerji seviyeleri	104
5.2.7. Sonlu kuantum nokta yapıların virial katsayıları.....	110
6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER	115
KAYNAKLAR	117
EKLER	129
ÖZGEÇMİŞ.....	162



SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

a	: Kuantum nokta yapı yarıçapı
α	: Gaussian tipi orbitallerin üsteli
β	: Ayar parametresi
c_i	: Kuyu içindeki Slater tipi orbitallerin açılım katsayısı
c_{vir}	: Virial katsayısı
C	: Gaunt katsayıları
d_i	: Kuyu dışındaki Slater tipi orbitallerin açılım katsayısı
E	: Sistemin enerjisi
E_g	: Yasak enerji aralığı
E_{ort}	: Ortalama enerji
E_d	: Kristale donör atomlarının katkılanmasıyla oluşan izinli enerji seviyesi
E_a	: Kristale akseptör atomlarının katkılanmasıyla oluşan izinli enerji seviyesi
$\bar{E}$	: Popülasyonun ortalama enerjisi
E_{min}	: Popülasyonun en küçük enerji değeri
E_{kin}	: Kinetik enerji
ϵ	: Ortamın bağıl dielektrik sabiti
ϵ_i	: Orbital enerjisi
F^k	: Coulomb Slater integrali
f_k	: Coulomb katsayısı
f_m	: Mutasyon fonksiyonu
f_c	: Çaprazlama fonksiyonu
$\hat{F}$	: Fock operatörü
F_i	: Uygunluk fonksiyonu
$F_{r\tau}$	: Hartree matris elementi
ϕ	: Uzaysal dalga fonksiyonu
Φ	: Deneme uzaysal varyasyon dalga fonksiyonu
φ	: Azimut açısı
G^k	: Exchange Slater integrali
g_k	: Exchange katsayısı
$\hat{H}$	: Hamiltoniyen operatörü
H_{ij}	: Varyasyon matris elementi
$\vec{J}$	: Toplam açısal momentum vektörü
j	: Toplam açısal momentum kuantum sayısı
$\hat{J}_z$	: Toplam açısal momentum vektörünün z bileşeninin operatörü
χ	: Baz fonksiyonu
$\vec{L}$	: Toplam yörünge açısal momentum vektörü
$\vec{l}_i$	: Yörünge açısal momentum vektörü
$\hat{L}$	: Toplam yörünge açısal momentum operatörü
$\hat{L}_z$	: Toplam yörünge açısal momentumun z bileşeninin operatörü
L	: Toplam yörünge açısal momentum kuantum sayısı
l	: Yörünge açısal momentum kuantum sayısı
m^*	: Elektronun etkin kütlesi
M_L	: Toplam yörünge manyetik kuantum sayısı
m_l	: Yörünge manyetik kuantum sayısı

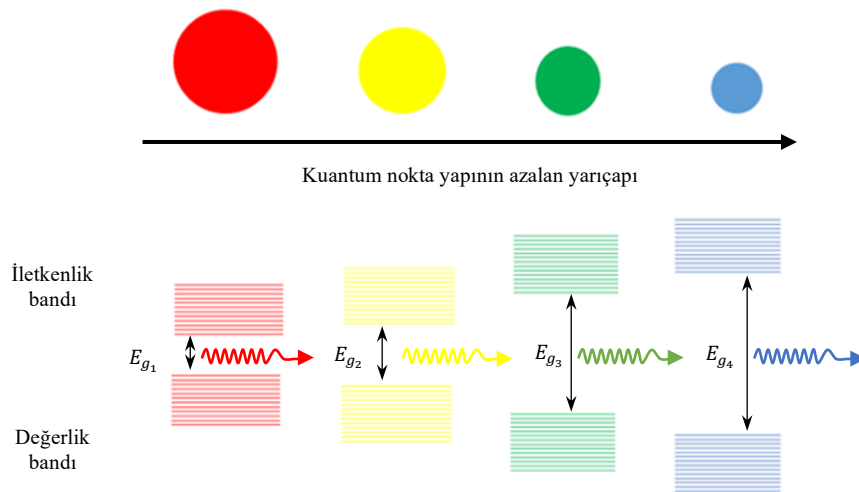
M_S	: Toplam spin kuantum sayısı
m_s	: Spin kuantum sayısı
N_{pop}	: Popülasyondaki birey sayısı
n	: Baş kuantum sayısı
P_i	: Seçilme olasılığı
Ψ	: Toplam dalga fonksiyonu
ψ	: Spin orbitali
r	: Elektronların sistemin merkezine göre konumu
$S_{r\tau}$	: Örtüşme matrisi
S_{ij}	: Örtüşme integrali
$\hat{S}$	: Toplam spin açısal momentum operatörü
$\hat{S}_z$	: Toplam spin açısal momentumun z bileşeninin operatörü
$\vec{S}$	: Toplam spin açısal momentum vektörü
$\vec{s}_i$	: Spin açısal momentum vektörü
S	: Toplam spin açısal momentum kuantum sayısı
σ	: Baz seti sayısı
$\sigma(\omega)$	: Ortogonal spin fonksiyonu
ζ	: Perdeleme sabiti
T	: Kinetik enerji
θ	: Kutup açısı
U_q	: Normalize edilmiş uzaysal orbital
V_c	: Sınırlama potansiyeli
V_{snr}	: Sınırlandırma potansiyel enerjisi
V	: Potansiyel enerji
W	: Varyasyon integrali
w_i	: Varyasyon fonksiyonunun açılım katsayıları
$Y_{lm_l}(\theta, \varphi)$	: Küresel harmonik dalga fonksiyonu
Z	: Safsızlık yükü
ζ	: Slater tipi orbitallerin üsteli

Kısaltmalar

a. u	: Atomik birimler
GTO	: Gaussian Tipi Orbitaller
HF	: Hartree Fock
HFR	: Hartree Fock Roothaan
KGA	: Kuantum Genetik Algoritma
PC	: Çaprazlama Olasılığı
PM	: Mutasyon Olasılığı
ROHF	: Sınırlandırılmış Açık Kabuk Hartree Fock
STO	: Slater Tipi Orbital
UHF	: Sınırlandırılmamış Hartree Fock

1. GİRİŞ

Kuantum nokta yapılar muhtemelen yüzyıllardır renkli cam üretimi sırasında istemeksizin üretilse de bilinçli olarak üretimi ve elektriksel-optiksel özelliklerine yoğunlaşılması yirminci yüzyılın ikinci yarısından sonra gerçekleşmiştir (Banyai ve Koch, 1993). Temelde çok küçük boyutlu yarıiletken materyallerdir ve önemi yük taşıyıcılarının kuantum sınırlama etkisi nedeniyle fiziksel ve kimyasal özelliklerinde önemli değişiklikler ve kesikli enerji seviyeleri oluşmasındandır (Shao ve ark., 2010). Bu yüzden sık sık “yapay atom” olarak adlandırılırlar (Maksym ve Chakraborty, 1990; Alivisatos, 1996; Fujito ve ark., 1996; Kouwenhoven ve Marcus, 1998). Dahası bu yapıların boyutlarına müdahale edilebilmesi, özelliklerinin kontrol edilebilmesini sağlamıştır (Sadeghi, 2009). Bu sayede bir kuantum nokta yapının boyutları değiştirilerek yasak enerji aralığı, E_g , ayarlanabilir (Şekil 1.1.) ve istenilen frekansta/renkte ışıma spektrumları (Şekil 1.2.) elde edilebilir ya da mikrobiyal hücrelerin İmmunflöresan Antikor Tekniği (IFA)¹ tespitinde (Şekil 1.3.) mükemmel bir fluorofor (Zhu ve ark., 2004) olarak kullanılabilir. Dolayısıyla bio etiketleme, sensörler, lazerler, güneş pilleri, LED aydınlatmalar, tıp ve benzeri birçok alanda uygulama potansiyeline sahiptir (Lott ve ark., 1997; Bruchez ve ark., 1998; Chan ve Nie, 1998; Shi ve ark., 2006; Smith ve ark., 2006; Bagalkot ve ark., 2007; Frasco ve Chaniotakis, 2009; Biju ve ark., 2010; Kim ve ark., 2011; Jang ve ark., 2012; Wu ve ark., 2012).



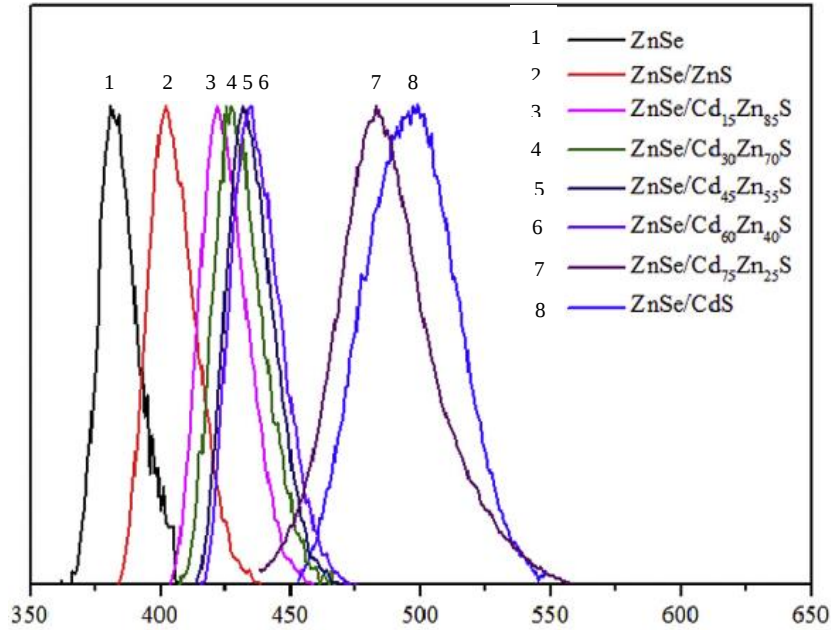
Şekil 1.1. Küresel kuantum nokta yapının ışıma spektrumunun boyut ve bant yapısına bağlı değişimi

¹ İmmunflöresan Antikor Tekniği: Bakteri ve ya diğer hastalığa neden olan mikroorganizmaları belirleme tekniği.

Kuantum nokta yapılar çeşitli uygulama imkanlarının yanında salt fiziksel sistemler olarak da ilgi çekici yapılardır (Varga ve ark., 2001). Öyle ki doğal atomlar için kullanılan modeller sınırlandırılmış atomik yapıların incelenmesinde kullanılabilirler ve deneysel sonuçlarla teorik sonuçların karşılaştırılmasında da köprü görevi görürler. Hatta periyodik tabloda dengi olmayan “yapay” atomların bile modellenmesinde kullanılabilirler. Sonuç olarak bu yapılar yoğun bir şekilde hem teorik hem de deneysel olarak katıhal fiziği, atom fiziği ve kuantum kimyasında çalışılmıştır (Çakir ve ark., 2007).

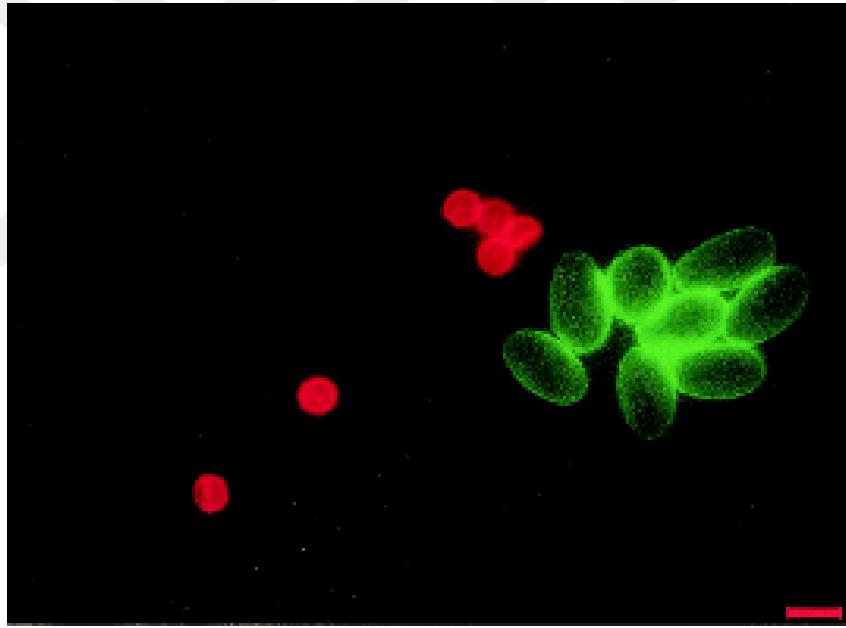
Bütün bu özellikler kuantum nokta yapıların dalga fonksiyonlarının ve enerji seviyelerinin incelenmesini önemli hale getirir. Bunun için farklı yöntemler kullanılmıştır. Bu tez çalışmasında ise sonlu ya da sonsuz küresel simetrik sınırlandırma potansiyeli ile sınırlandırılmış, çok elektronlu kuantum nokta yapıların enerji seviyelerinin ve dalga fonksiyonlarının belirlenmesi için Hartree Fock Roothaan (HFR) yöntemi ve Kuantum Genetik Algoritma (KGA) yöntemi birlikte kullanılmıştır.

HFR yöntemi, Schrödinger dalga denklemini çözmeksizin deneme dalga fonksiyonlarının tekrarlanan bir süreçte enerji minimizasyonundan yararlanılarak olası en iyi dalga fonksiyonlarını bulmayı amaçlayan varyasyonel bir yöntemdir. Dolayısı ile yöntem deneme dalga fonksiyonlarının seçimi ile başlar ve dalga fonksiyonlarının başlangıç parametrelerinin seçimi yöntemin başarısını belirler.



Şekil 1.2. Normalize edilmiş ZnSe ve ZnSe/Cd_{1-x}Zn_xS kuantum nokta yapılarının emisyon spektrumu (Gheshlaghi ve ark., 2017)

Evrimsel biyolojiden esinlenilerek yaratılan genetik algoritma yöntemi, bir sistemin parametreleri için rastgele sayılar üreterek belli fiziksel parametrelerin minimumluğu ilkesi temelinde çalışır. Dolayısı ile sistem hakkında ön bilgilerin çok kısıtlı olduğu durumlarda yaygın olarak kullanılan istatistiksel bir yöntemdir. Holland tarafından 1975 yılında tanıtılan yöntem (Holland, 1975), mühendislik dallarında ve fizikte yaygın olarak kullanılmaya başlanmıştır (Beacham ve Murray, 1993; Judson ve ark., 1994; Wanschura ve ark., 1996; Kariuki ve ark., 1997; Zacharias ve ark., 1998; Sahin ve ark., 2000; Kim ve ark., 2001; Liu ve ark., 2001; Aydın ve Yildirim, 2004; Kudla, 2004). Kuantum mekaniğinde sistemin dalga fonksiyonunu ve enerjisini, enerjinin minimumluğu ilkesinden yola çıkarak hesaplamak amacıyla kullanılmıştır ve KGA olarak adlandırılmıştır. Böylece olası “en iyi” dalga fonksiyonları seçilerek hem süreç kısaltılmış hem de daha güvenilir sonuçlar elde edilmiştir.



Şekil 1.3. *Cryptosporidium parvum*² (kırmızı) ve *Giardia lamblia*³ (yeşil) çift renkli kuantum nokta yapı görüntüsü (Zhu ve ark., 2004)

Kuantum nokta yapıların incelenmesinde, literatürde KGA ve HFR yönteminin birlikte kullanıldığı çalışmalar olmakla birlikte bu çalışmalarda sonsuz sınırlama potansiyeline sahip olan ya da sadece bir elektron içeren kuantum nokta yapılar incelenmiştir. Bu tez çalışmasında ise KGA, HFR, Gram-Schmidt Dikleştirme yöntemleri

² Omurgalıların bağırsak ve solunum epitelini etkileyen bir koksidiyen parazit.

³ Giardiasis veya lambliazis adı verilen hastalığa neden olan kamçılı parazit mikroorganizma.

ve Slater Tipi Orbital (STO)'ler kullanılarak birden fazla elektron içeren, küresel simetrik sonlu ya da sonsuz potansiyeli ile sınırlandırılmış kuantum nokta yapıların enerji özdeğerleri ve enerji özfonksiyonları; sınır, diklik ve normalizasyon koşulları gözetilerek hesaplanmıştır. Ayrıca atomik sistemlerin dalga fonksiyonlarını ve enerji seviyelerini HFR yöntemi ile hesaplamayı amaçlayan literatürdeki birçok çalışmada atomik fonksiyonlar sonsuzda sıfıra yakınsar iken bu çalışmada sonsuz sınırlama potansiyeli ile sınırlandırılan kuantum nokta yapıların atomik fonksiyonları kuantum nokta yapının sınırında sıfıra gidecek şekilde oluşturulmuştur.



2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

2.1. Sıfır Boyutlu Nano Yapılar

Fizik ve teknolojideki gelişmelerle birlikte transistör, lazer, diyot gibi heteroyapı temelli elektronik aygıtlar birçok alanda yaygın bir şekilde kullanılır hale geldi. Bütün bu gelişmelerin temeli, yarıiletkenlerle ilgili kayda geçmiş ilk çalışma olan gümüş sülfürün sıcaklık yükseldikçe elektriksel iletkenliğinin arttığının (Faraday, 1833) gözlemlenmesinden sonra yapılan yarıiletkenler ve özellikleri ile ilgili çalışmalar ile oluşturulmaya başlandı. Katıların bant teorisi (Wilson, 1931), transistörün keşfi (Bardeen ve Brattain, 1948) ve bir potansiyel içine hapsedilmiş elektronların tıpkı atomlar gibi enerji seviyelerinin kesikli olacağının ileri sürülmesi (Schrieffer, 1957), yarıiletken lazerin icat edilmesi (Hall ve ark., 1962) ve heteroeklemlerin ortaya çıkışı (Anderson, 1962) ise yarıiletkenleri kuantum mekaniğinin önemli bir uygulama alanı haline getirdi.

Moleküler Demet Epitaksi (Cho ve Arthur, 1975) yönteminin geliştirilmesi heteroeklem kuantum yapıların üretimine zemin hazırladı. İlerleyen dönemlerde kristal büyütme tekniklerindeki ilerlemeler sayesinde yarıiletken kuantum kuyu (Esaki ve Tsu, 1970) ve kuantum teller (Petroff ve ark., 1982; Hansen ve ark., 1987) üretildi. Cam matriste (Ekimov ve Onushchenko, 1982) ve koloidal materyallerde (Brus, 1984) kuantum nokta yapı adı verilen sıfır boyutlu nanoyarıiletken yapılar keşfedildi ve bu yapılar iki boyutlu elektron gazı içeren bir yapının etkilmesi ile ilk kez 1986 yılında üretildi (Reed ve ark., 1986). Daha sonra farklı geometrik özelliklere sahip kuantum nokta yapılar da üretildi (Cibert ve ark., 1986; Temkin ve ark., 1987; Bimberg ve ark., 1999).

Kuantum nokta yapılar yüksek verimli ve tam kontrol edilebilir lazerlerin yapımında (Reed, 1993) kullanması, bu yapıların boyut ve şekillerinin deneysel olarak kontrol edilebileceğini gösterdi. Bu gelişmelerle birlikte modern yarıiletken üretim teknikleri sadece birkaç elektron içeren yapay kuantum sınırlandırmanın yaratılmasına olanak sağladı (Reimann ve Manninen, 2002). Böylece tek elektron transistörler, kızıl ötesi foto dedektörler, hafıza elemanları ve kuantum bilgisayarları gibi teknolojik cihazların bilimsel temelleri atıldı (Choi ve ark., 1998; Nomoto ve ark., 1998; Yusa ve Sakaki, 1999; Gammon, 2000; Sim ve ark., 2004). Ayrıca kuantum nokta yapıların kuantumlu enerji seviyelerine ve kabuk yapılarına sahip olmaları, yapay atom olarak da adlandırılmalarına neden olmuştur (Maksym ve Chakraborty, 1990; Fujito ve ark., 1996). Bu nedenle kuantum nokta yapıları ile ilgili araştırmalar bu sistemlerin cihazlara

uygulanabilirlik kapasitesi kadar değiştirilebilir fiziksel özelliklerine yoğunlaşan saf bilimsel ilgiyi de motive etmiştir (Banyai ve Koch, 1993).

2.2. Kuantum Mekaniksel Yöntemler

Kuantum mekaniksel bir sistemin dalga fonksiyonunun ve enerji seviyelerinin belirlenebilmesi için

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (2.1)$$

Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekir. Burada $\hat{H}$ Hamiltoniyen operatörü, Ψ dalga fonksiyonu ve E bu dalga fonksiyonunu karşılık gelen enerji özdeğeridir. Çözüm sırasında ikinci dereceden diferansiyel bir denklem ile karşılaşılır ve bu denklemin değişkenlerine ayırma yöntemi ile hidrojen atomu, hidrojen benzeri iyonlar ve serbest elektron gibi sınırlı sayıdaki sistemler için analitik çözümleri bulunabilir (Nanni, 2015). Oysa klasik fizikteki üç cisim probleminde olduğu gibi kuantum mekaniğinde de sistemi oluşturan etkileşimli parçacıkların sayısı ikiden fazla ise Schrödinger denklemi için analitik bir çözüm bulunamaz. Dolayısı ile birden fazla elektron içeren sistemler için Schrödinger denkleminin ancak yaklaşımlar kullanılarak nümerik çözümlerine ulaşılabilir (Attila ve Ostlund, 1982). Bu yüzden yarı deneysel ve *ab initio* yöntemler geliştirildi.

Latince kökenli *ab initio* terimi “başlangıçtan beri” anlamına gelir ve deneysel verileri kullanmaksızın teorik ilkelere direkt türetilen hesaplamaları tanımlamak için kullanılır (Young, 2001). En basit *ab initio* yaklaşımlarından biri Hartree tarafından 1928 yılında önerildi ve bu yöntem Hartree öz uyumlu alan yöntemi denildi. Bu yöntem Fock tarafından elektron spinlerini de hesaba katacak şekilde geliştirildi ve Hartree Fock yöntemi olarak adlandırıldı. Bilgisayarların 1950’lerde ortaya çıkmasının bilim ve teknolojiye meydana getirdiği ilerlemeler sayesinde HF yönteminde diferansiyel denklemleri çözmek için baz fonksiyonlarının kullanılabileceği öne sürüldü (Roothaan, 1960). Hartree Fock Roothaan yöntemi olarak adlandırılan bu yöntem sayesinde diferansiyel denklemler matris teknikleri ile çözülebilen cebirsel denklemlere dönüştürüldü.

HF yönteminde elektronlar arası etkileşme, her bir elektronun diğer tüm elektronlardan dolayı oluşan ortalama bir elektrostatik alanda hareket etmesiyle

gerçekleşir (Errol, 2011). Bundan dolayı elektron korelasyonu tam olarak yansıtılamaz. HF yönteminde ortaya çıkan bu hatayı giderebilmek için deneme dalga fonksiyonunu büyütmek veya daha esnek hale getirmek gerekir (Fernández, 2004)⁴. Bu amaçla pertürbasyon yöntemleri ya da konfigürasyon etkileşim yöntemleri kullanılabilir.

Pertürbasyon teorisi ilk önce astronomi ile bağlantılı olarak ortaya çıksa da yirminci yüzyılın erken dönemlerinde meydana gelen gelişmelerle birlikte kuantum mekaniğine de uygulanmaya başlandı. Kuantum mekaniğinin erken dönemlerinde özellikle iki tür pertürbasyon teorisi, Brillouin-Wigner ve Rayleigh-Schrödinger pertürbasyon teorileri, geliştirildi (Lindgren, I., 2014). Pertürbasyon yöntemlerinin ana fikri, araştırılan problemin çözümünün çözülmüş bir problemten sadece biraz farklı olmasıdır. Bu nedenle, temel ve pertürbasyon kısımlarından oluşan bir Hamiltoniyen operatörü tanımlanarak matematiksel olarak açıklanır (Röthlisberger, 2015).

Konfigürasyon etkileşim yönteminde Slater determinantlarının lineer bir kombinasyonu olan bir deneme dalga fonksiyonu kullanılır. Slater determinantlarının katsayıları zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin en düşük enerjili çözümünü bulabilmek için varyasyon ilkesi uygulanarak belirlenir (Schermann, 2007).

Elektron korelasyonunu çalışmak için kullanılan geleneksel yöntemlere güçlü ve güvenilir bir alternatif kuantum Monte Carlo yöntemi (Hoggan, 2018) ve elektron korelasyonunu yerel olarak formüle eden yoğunluk fonksiyonelleri teorisi yöntemidir. Yoğunluk fonksiyonelleri teorisinde taban durum elektronik yoğunluğun kimyasal sistemin bütün bilgilerini içerdiği varsayımına dayanır (Fernández, 2004). Temelleri Hohenberg ve Kohn tarafından atılan bu yöntemde çözüme ulaşmak için sistemin dalga fonksiyonunu yerine elektron yoğunluğu kullanılır (Hohenberg ve Kohn, 1965). Kuantum Monte Carlo yönteminde ise Schrödinger denklemi stokastik yöntemlerle çözülen bir difüzyon denklemine dönüştürülür (Acioli, 1997).

Dalga fonksiyonu temelli *ab initio* yöntemlerinin uygulanmasında karşılaşılan bir başka problem deneme dalga fonksiyonlarının uygun başlangıç parametrelerinin belirlenmesinde ortaya çıkar. Atomik yapılarda söz konusu parametreler teorik çalışmalar yardımı ile belirlenir. Oysa kuantum nokta yapıların sabit bir yarıçap değerleri olmadığı için teorik çalışmalar bu noktada işlevsiz kalır. Bu sorunu aşmak için başlangıç parametreleri Genetik algoritma yöntemi gibi istatistiksel yöntemler yardımı ile belirlenebilir.

⁴ Bu yöntemler Post HF yöntemleri olarak da adlandırılır.

2.3. Kuantum Nokta Yapılarla İlgili Çalışmalar

Kuantum nokta yapıların kendine has özellikleri ve elektronik aygıtlarda giderek yaygınlaşan kullanım alanları, bu yapılar üzerindeki çalışmaların yoğunlaşmasına neden olmuştur. Bu nedenle birçok araştırmacı tarafından farklı yöntemler kullanılarak kuantum nokta yapılar incelenmiştir.

Tek elektronlu kuantum nokta yapıların elektronik yapısı, bağlanma enerjileri, optik özellikleri, elektrik ve manyetik alan etkisi ve diğer fiziksel özellikleri Runge–Kutta yöntemi (Boz ve ark., 2016), varyasyon yöntemi (Yılmaz ve Kirak, 2018), sonlu farklar yöntemi (Safarpour ve ark., 2014; Makhlof ve ark., 2018), HFR ve KGA yöntemleri (Çakır ve ark., 2007; 2008; Çakır ve ark., 2009; Özmen ve ark., 2009; Çakır ve ark., 2010; Yakar ve ark., 2010a; Yakar ve ark., 2010b; Cakir ve ark., 2011; Çakır ve ark., 2012; 2013; Özmen ve ark., 2013; Yakar ve ark., 2013b; 2013a; El Ghazi ve Jorio, 2014; El Ghazi ve ark., 2014b; 2014a; El Ghazi ve Peter, 2015; Çakır ve ark., 2016a; Çakır ve ark., 2017b; 2017a; Sarıkaya ve ark., 2017; Yilmazer ve ark., 2017; Yakar ve ark., 2018b; 2018a; Çakır ve ark., 2020), Runge-Kutta yöntemi ve varyasyonel yaklaşım yöntemi (Kes ve ark., 2017), kompakt yoğunluk matrisi yaklaşımı (Kasapoglu ve ark., 2015; Pal ve ark., 2019; Li ve ark., 2020; Peter ve ark., 2020), sonlu elemanlar yöntemi (Niculescu ve ark., 2017), hibrit matris yöntemi (Rodríguez-Magdaleno ve ark., 2018), matris köşegenleştirme yöntemi (Huang ve Chen, 2018) ve diğer yöntemler (Amini ve ark., 2017; Stevanović ve ark., 2019; Wang ve ark., 2019; Al ve ark., 2020; Castano-Yepes ve Amor-Quiroz, 2020; Naifar ve ark., 2020; Nasa ve Purohit, 2020) kullanılarak incelendi. Bu çalışmalardan Çakır ve arkadaşları tarafından yapılan çalışmada sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış nokta yapı incelendi. Baz fonksiyonu olarak STO’lar kullanıldı. Bu fonksiyonların kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerini çok iyi yansıttığı ve KGA’nın baz fonksiyonlarının parametrelerini belirlemekte etkili bir şekilde kullanılabileceği görüldü (Çakır ve ark., 2007). Daha sonra bu çalışma sonlu potansiyel enerji ile sınırlandırılmış nokta yapı sistemlerine genişletildi (Çakır ve ark., 2008). Çeşitli potansiyel derinlikleri için küresel kuantum nokta yapının enerji seviyeleri ile temel ve uyarılmış seviyelerinin bağlanma enerjileri üzerinde manyetik alanın etkisinin incelendiği ve Zeeman geçiş enerjileri hesaplandığı çalışmada küçük yarıçap değerlerinde enerji seviyelerinin ve bağlanma enerjilerinin manyetik alanın artışına karşı duyarsız olduğu görüldü (Çakır ve ark., 2017a). Manyetik alan içindeki sonsuz sınırlama potansiyeline sahip kuantum nokta yapının dalga fonksiyonları ve enerji seviyelerinin

incelendiği çalışmada Zeeman enerji seviyeleri arasındaki optik geçişler üzerine manyetik alanın etkisi incelendi. Nokta sisteminin büyük yarıçap değerlerinde dış manyetik alan Zeeman seviyeleri arasındaki optik geçişleri güçlü bir şekilde etkilerken güçlü uzaysal sınırlama durumunda enerji seviyeleri nispeten dış manyetik alana duyarsız olduğu görüldü (Çakır ve ark., 2017b). Merkezinde hidrojenik safsızlık barındıran ve sonlu küresel simetrik potansiyel ile sınırlandırılan kuantum nokta yapının taban durum enerjileri hesaplandı. Kuantum nokta yapının yarıçap değeri arttıkça taban durum enerjisinin hidrojen atomunun taban durum enerjisine yaklaştığı, katkılanma oranının nokta yapının küçük yarıçap değerinde etkili iken büyük yarıçap değerlerinde bu etkinin neredeyse ortadan kalktığı görüldü (Çakır ve ark., 2009). Özmen ve arkadaşları tarafından yapılan çalışmada 1s,1p,1d,1f seviyeleri için bağlanma enerjileri, osilatör şiddetleri, doğrusal ve üçüncü sıra doğrusal olmayan optik soğurma katsayıları hesaplandı. Toplam absorpsiyon katsayılarının yüksek seviyeler arasındaki geçişlerde arttığı bulundu (Özmen ve ark., 2009). Doğrusal ve üçüncü sıra doğrusal olmayan optik soğurma katsayıları 1s-1p,1p-1d,1d-1f geçişleri için incelendiği çalışmada stokiyometrik oran, safsızlık, durulma zamanı ve nokta sisteminin yarıçapının optik soğurma katsayıları üzerinde büyük bir etkisinin olduğu bulundu (Yakar ve ark., 2010a). Nokta sistemin yarıçapı, safsızlık, gelen optik yoğunluğun 1s-1p,1p-1d, 1d-1f gibi yüksek enerji seviyeleri arasındaki geçişlere etkisi incelendi ve bu parametrelerin kırılma indis değişkenleri üzerinde büyük bir etkisinin olduğu gösterildi (Çakır ve ark., 2011). Parabolik potansiyele sahip küresel kuantum nokta yapının 1s, 1p, 1d, 1f enerji seviyelerinin dalga fonksiyonları ve bağlanma enerjileri, optik absorpsiyon katsayıları çalışıldı. Parabolik potansiyelin bağlanma enerjileri ve optik soğurma katsayıları üzerinde büyük bir etkiye sahip olduğu görüldü. Dahası optik soğurma katsayılarının safsızlık ve gelen optik yoğunluk tarafından güçlü bir şekilde etkilendiği görüldü (Yakar ve ark., 2010b). Kuantum nokta yapının doğrusal, doğrusal olmayan ve toplam kırılma indeks değişimleri ve 1s-1p, 1p-1d, 1d-1f geçişleri için absorpsiyon katsayıları hesaplandı. Safsızlık, nokta sisteminin yarıçapı, stokiyometrik oran, gelen optik yoğunluk ve sistemin taşıyıcı yoğunluğunun optik kırılma indisi değişkenleri ve absorpsiyon katsayıları üzerinde önemli bir etkiye sahip olduğu görüldü (Çakır ve ark., 2012). Sonlu sınırlama potansiyelin sahip küresel kuantum nokta yapının temel ve uyarılmış seviyelerinin enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları hesaplandı. Hesaplanan enerjilere ve dalga fonksiyonlarına göre, kuantum nokta yapının statik ve dinamik dipol polarizasyonları, kuadrupol polarizasyonları, dipol ve kuadrupol osilatör şiddetleri nokta sisteminin yarıçapı ve sınırlama potansiyelinin fonksiyonu olarak

incelendi. Polarizasyon güçlü sınırlama bölgesinde uzaysal sınırlama etkisinden dolayı artar. Dipol ve kuadrupol osilatör şiddetlerinin pik konumları, potansiyel kuyusunun derinliğinin artması ile daha küçük nokta yapı yarıçaplarına doğru kaydığı görüldü (Yakar ve ark., 2018b). Manyetik alanın varlığında sonlu sınırlama potansiyeline sahip küresel kuantum nokta yapının taban ve uyarılmış enerji seviyeleri hesaplandı. Osilatör şiddeti, statik dipol polarize edilebilirliği ve kırılma indisi değişiklikleri, nokta yarıçapı ve manyetik alan kuvvetinin bir fonksiyonu olarak incelendi. Sonuçlar, enerji durumunun, osilatör şiddeti, statik dipol polarize edilebilirliğinin ve kırılma indisi değişikliklerinin manyetik alan şiddetinden ve nokta boyutundan güçlü bir şekilde etkilendiğini göstermektedir. Manyetik alan kuvveti artarken, statik polarize edilebilirliğin kuvvetli bir şekilde azaldığı bulunmuştur (Yakar ve ark., 2018a). Başka bir çalışmada sonlu derinlikli sınırlama potansiyeli ile sınırlandırılmış kuantum nokta yapının taban ve uyarılmış seviyeleri hesaplandı. Hesaplanan enerjilere ve dalga fonksiyonlarına dayalı olarak, elektrik alan gradyanı nokta sisteminin yarıçapının ve sınırlama potansiyelinin bir fonksiyonu olarak incelendi. Hesaplamalar nokta sisteminin yarıçapı, sınırlama potansiyeli ve safsızlık yükünün elektrik alan gradyanı ve kuadrupol moment üzerinde büyük bir etkiye sahip olduğunu gösterdi. Ayrıca sınırlayıcı potansiyel arttıkça, pik konumu elektrik alan gradyanı daha küçük nokta yapı yarıçaplarına doğru kayar ve bu pikin genliği sınırlama potansiyeli arttıkça büyür (Çakır ve ark., 2020). Sonlu ve sonsuz sınırlama potansiyeline sahip küresel kuantum nokta yapının enerji seviyelerinin ve dalga fonksiyonlarının hesaplanmasında HFR ve KGA yöntemlerinin kullanıldığı bir çalışmada taban ve uyarılmış seviyelerin bağlanma enerjileri nokta sisteminin yarıçapının bir fonksiyonu olarak incelendi. Bağlanma enerjileri ve enerji seviyeleri üzerinde sınırlama potansiyelinin ve nokta sisteminin yarıçapının büyük bir etkisi olduğu görüldü. Büyük yarıçap değerlerinde sınırlama potansiyelinin enerji seviyeleri üzerindeki etkisinin kaybolduğu görüldü (Yilmazer ve ark., 2017). Küresel bir kuantum noktasının 1s-, 2p-, 3d- ve 4f-enerji seviyeleri üzerindeki harici bir manyetik alanın etkisinin ayrıntılı bir teorik araştırmasının yapıldığı bir çalışmada diyamanyetik terimin 1s-, 2p-, 3d- ve 4f-enerji seviyeleri üzerindeki etkisi incelendi. Ayrıca nokta sisteminin yarıçapı ve manyetik alan kuvvetinin bir fonksiyonu olarak Zeeman geçiş enerjileri de hesaplandı. Sonuçlar, manyetik alan, safsızlık yükü ve nokta sisteminin yarıçapının enerji durumları ve Zeeman geçişleri üzerinde güçlü bir etkiye sahip olduğunu göstermektedir (Çakır ve ark., 2016a).

Birden fazla elektron içeren kuantum nokta yapıların dalga fonksiyonlarının ve enerji seviyelerinin belirlenmesi elektronlar arası etkileşim nedeniyle ancak yaklaşık

yöntemler kullanılarak yapılabilir. Aşılabilir küresel bir hacim içinde sıkıştırılmış helyum atomunun enerji seviyeleri Kohn–Sham modeli kullanılarak hesaplandı (Aquino ve ark., 2006). Aşılabilir küresel sınırlar ile sınırlandırılmış, safsızlık yükü 0 ile 3 arasında değişen iki elektronlu sistemlerin korelasyon enerjilerinin sistemin boyutu ile ilişkisi incelendi (Wilson ve ark., 2010). Sınırlandırılmış çok elektronlu atomların taban durum enerjileri HF yöntemi kullanılarak hesaplandı (Ludeña, 1978). Varyasyon ve pertürbasyon teorisi kullanılarak küresel olarak sınırlandırılmış helyum atomunun en düşük üç S simetri seviyesinin enerjisi hesaplandı (Flores-Riveros ve ark., 2010). He, Li ve C atomu gibi sınırlandırılmış atomların taban ve uyarılmış enerji seviyeleri varyasyonel Monte Carlo ve direkt varyasyonel yöntemle incelendi (Sarsa ve Le Sech, 2011). Sınırlandırılmış berilyum atomunun taban ve ilk uyarılmış enerji seviyesi direkt varyasyonel yöntem kullanılarak incelendi (Sañu-Ginarte ve ark., 2018). Sınırlandırılmış Li, Be ve B gibi atomların taban ve uyarılmış enerji seviyeleri çalışıldı (Sañu-Ginarte ve ark., 2019). Hartree–Fock yöntemi kullanılarak Li ve Li benzeri sınırlandırılmış atomların taban ve uyarılmış enerji seviyeleri incelendi (Martínez-Flores ve Cabrera-Trujillo, 2020). İki elektronlu kuantum nokta yapıya, taban ve uyarılmış enerji seviyelerini elde etmek için pertürbasyon teorisi uygulandı (McKinney ve Watson, 2000). Sonsuz derinlikte küresel simetrik potansiyel ile sınırlandırılmış merkezinde safsızlık bulunduran kuantum nokta yapıların temel ve uyarılmış enerji seviyelerinin KGA ve HFR yöntemleri ile incelendiği bir çalışmada sınırlama bölgesinde temel ve uyarılmış enerji seviyeleri hızlı bir şekilde artarken zayıf sınırlama bölgesinde bu enerjilerin yavaşça değiştiği belirlendi (Yakar ve ark., 2016). ZnO kuantum nokta yapıları tanımlamak için farklı yoğunluk fonksiyonelli teorik yaklaşımlar Badaeva ve arkadaşları tarafından incelendi (Badaeva ve ark., 2008). Sonsuz küresel simetrik sınırlama potansiyeli ile sınırlanmış safsızlık yükü 0 ile 4 arasında değişen helyum ve helyum benzeri kuantum nokta yapıların dalga fonksiyonları ve bazı enerji seviyeleri ve safsızlığın iyonlaşma enerjisi üzerindeki etkisi KGA ve HFR yöntemleri kullanılarak hesaplandı (Yakar ve ark., 2011). Daha sonra bu çalışma aynı araştırmacılar tarafından parabolik potansiyelli kuantum nokta yapıya genişletildi. Toplam, kinetik, nükleer potansiyel, elektronlar arası Coulomb ve exchange etkileşim enerjilerinin nokta sisteminin yarıçapı arttıkça azaldığı ve safsızlık yükü arttıkça iyonlaşma enerjisinin de arttığı belirlendi (Yakar ve ark., 2015c). İki ile dört arasında elektron içeren bir kuantum nokta yapı sistemi Bolton tarafından incelendi (Bolton, 1996). Sonsuz küresel potansiyel yüzeyi ile sınırlandırılan doğrusal ve doğrusal olmayan absorpsiyon katsayılarının KGA ve HFR yöntemleri ile incelendiği bir çalışmada nokta

sisteminin yarıçapı ile gelen optik yoğunluğun bu katsayıların genliğini ve pik konumunu etkilediği görüldü (Yakar ve ark., 2015a). Sonsuz derin sınırlama potansiyeline sahip hidrojen, döteryum ve trityum kuantum nokta yapıların temel ve uyarılmış seviyelerinin pertürbe edilmemiş dalga fonksiyonları KGA ve HFR yöntemleri ile elde edildi (Çakır ve ark., 2016b). Sonlu sınırlama potansiyeline sahip küresel kuantum nokta yapının enerji seviyeleri ve temel durum bağlanma enerjileri üzerine dış manyetik alanın etkisi KGA ve HFR yöntemleri ile incelendi. Normal Zeeman seviyeleri ve Zeeman geçişleri hesaplandı. Safsızlık enerji seviyeleri, bağlanma enerjileri ve Zeeman geçiş enerjilerinin manyetik alan ve nokta sisteminin yarıçapı tarafından güçlü bir şekilde etkilendiği görüldü (Yakar ve ark., 2017). Merkezinde safsızlık barındıran ve sonlu küresel simetrik potansiyel ile sınırlandırılan kuantum nokta yapının bağlanma enerjileri ile taban durum ve uyarılmış enerji seviyeleri hesaplandı. Safsızlık bağlanma enerjisinin nokta sisteminin yarıçapı azaldıkça bir pik değerine ulaşınca kadar arttığı ve daha sonra bir limit değere düştüğü görüldü (Çakır ve ark., 2008). Parabolik potansiyelli küresel kuantum nokta yapının doğrusal ve doğrusal olmayan absorpsiyon katsayıları; $1s^2$, $1s1p$, $1s1d$, $1s1f$ elektronik seviyelerinin dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerlerinin KGA ve KFR yöntemi ile incelendiği başka bir çalışmada $S \rightarrow P$ geçiş kuvvetinin $P \rightarrow D$ ve $D \rightarrow F'$ den daha güçlü olduğu bulundu. Ek olarak absorpsiyon katsayılarının pik konumlarının ve genliklerinin güçlü şekilde parabolik potansiyele bağlı olduğu bulundu. Ayrıca nokta yapı yarıçapı, safsızlık yükü, gelen optik yoğunluk ve durulma zamanı doğrusal ve doğrusal olmayan absorpsiyon katsayısı üzerinde büyük bir etkiye sahiptir (Çakır ve ark., 2015). Sonlu potansiyel kuyusu içindeki küresel kuantum nokta yapının taban ve uyarılmış seviyelerinin pertürbe edilmemiş dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerleri HFR ve KGA yöntemi ile hesaplandı. Hyperfine çiftlenim sabiti ve hyperfine enerjisi $1s$, $2p$, $3d$ ve $4f$ seviyeleri için hesaplandı. Sonuçlar hyperfine çiftlenim sabiti ve hyperfine enerjisinin nokta sisteminin yarıçapı azaldıkça güçlü ve orta sınırlama bölgesinde hızlıca değiştiğini gösterdi. Ayrıca nokta sisteminin yarıçapı, safsızlık yükü ve açısal momentum hyperfine enerjisi üzerinde güçlü bir etkiye sahiptir (Yakar ve ark., 2015b). Potansiyel kuyusu içindeki kuantum nokta yapının enerji seviyeleri HFR ve KGA yöntemi ile değerlendirildi. Hesaplanan enerjilere ve dalga fonksiyonlarına dayalı olarak, statik dipol polarizasyon, osilatör gücü ve elektrik alan gradyanı hesaplandı. Safsızlık yükü ve nokta yapı yarıçapının dipol polarizasyon, osilatör gücü ve elektrik alan gradyanı üzerinde güçlü bir etkisinin olduğu görüldü. Polarize edilebilirlik nokta sisteminin yarıçapıyla birlikte monoton olarak artar ve ardından büyük nokta yarıçaplarında bir doygunluk

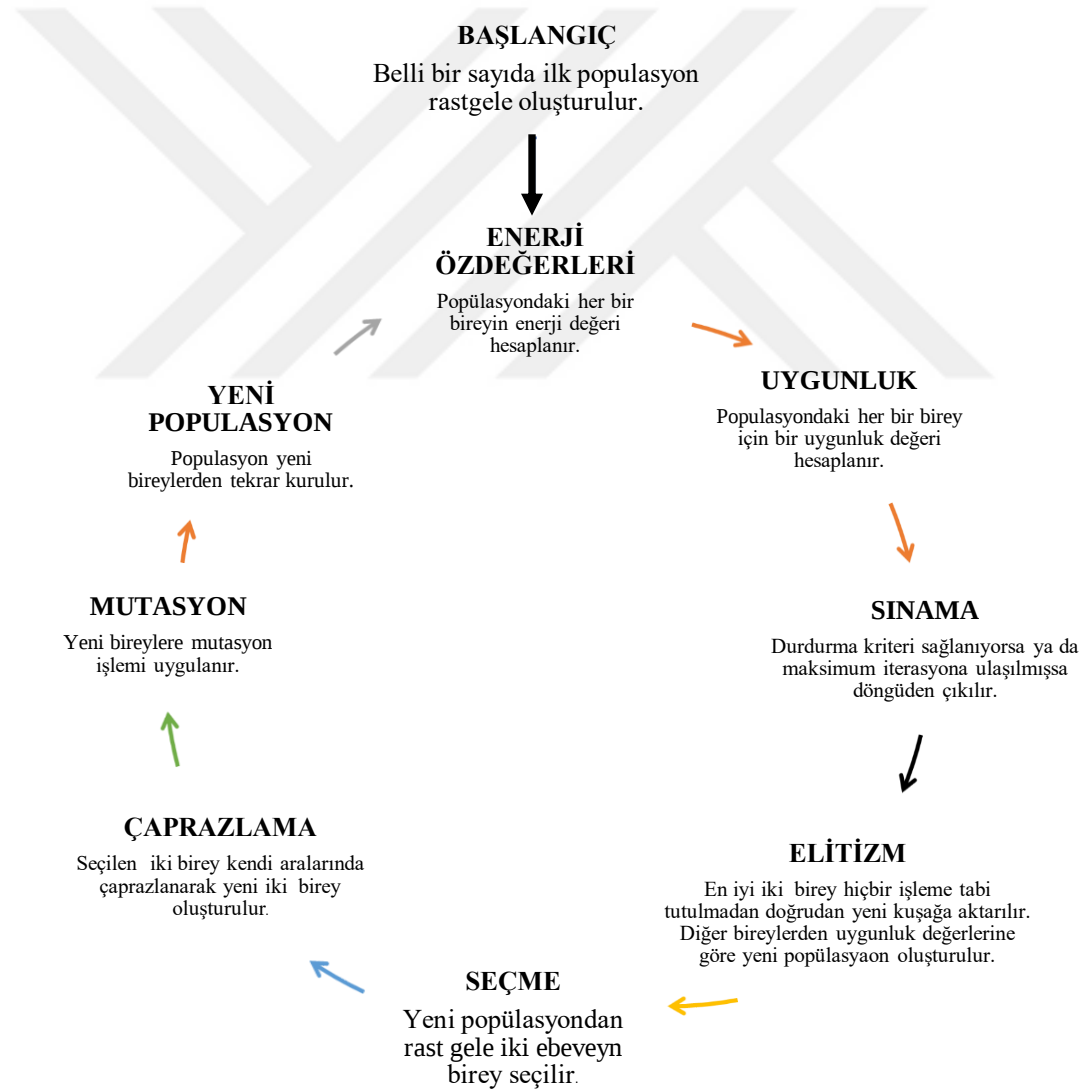
değerine ulaşır. Öte yandan, elektrik alan gradyanı nokta sisteminin yarıçapı azaldıkça artar (Yakar ve ark., 2020). Aşılabilir küresel bir oyuk içindeki üç elektronlu atomun taban ve uyarılmış enerji seviyeleri ve orbital enerjileri HFR ve KGA yöntemi ile hesaplandı. Statik ve dinamik polarizasyon, osilatör şiddeti ve basıncı incelendi. Oyuk yarıçapı ve safsızlık yükünün sistemin polarize edilebilirliği, osilatör şiddeti ve basıncı üzerinde önemli rol oynadığı ortaya çıktı. Ek olarak oyuğun yarıçapı aşırı büyüdüğünde bütün enerjileri ve diğer fiziksel parametreleri serbest atomun değerlerine yaklaşır. Oyuğun yarıçapı azaldıkça güçlü uzaysal sınırlamadan dolayı sistemin polarizasyonu azalır (Yakar ve ark., 2021). İki elektronlu kuantum nokta yapının dış elektrik alan etkisi altında elektronik özellikleri Pertürbasyon yöntemiyle incelendiği bir çalışmada dalga fonksiyonları ve enerji seviyeleri HFR ve KGA yöntemleri ile belirlendi (Türker ve ark., 2016).

3. GENEL TEORİ

3.1. Kuantum Genetik Algoritma

Optimizasyon, bir problemle ilgili başlangıçta ortaya atılan parametreleri zamanla değiştirerek probleme “en iyi” çözümü bulma sürecidir. Bu açıdan bakıldığında karşılaştığımız birçok problemin çözümüne farkında olmasak dahi optimizasyon süreci ile ulaşılır. Örneğin bir seradaki ısıtma sisteminin çalışma aralığı hem yüksek verim hem de düşük ısıtma maliyeti göz önüne alınarak ayarlanması bir optimizasyon problemidir. Hayatımızın her anında karşılaştığımız optimizasyonun en doğal ve en başarılı örneği evrim sürecidir. Canlı popülasyonlarını oluşturan bireylerden çevreye daha iyi uyum sağlayanların tamamen doğal süreçler sayesinde genlerinin gelecek nesillerde ağırlık kazanmasıyla farklı özelliklere ve yeteneklere sahip canlı türlerinin ortaya çıkması, karşılaştığımız kompleks ve zor problemleri çözmek için sonsuz bir ilham kaynağıdır. Doğadaki bu eşsiz mekanizmadan esinlenilerek geliştirilen GA temel mekanizmasını aldığı gibi temel kavramlarını da evrimsel biyolojiden alır. Kalıtımın temel birimi olan genler GA’daki parametrelere karşılık gelir. Çözüm uzayındaki her bir nokta parametre kümeleri şeklinde oluşturulan kromozomlar (bireyler) ile temsil edilir. Kromozomların bir araya gelmesi ile de popülasyon oluşturulur. Genetik algoritma yönteminin kuantum mekaniğine uyarlanmış hali olan KGA’da ise ele alınan sistemin olası dalga fonksiyonları popülasyona, popülasyondaki her bir dalga fonksiyonu bireylere (kromozomlara), fonksiyonunun parametreleri de genlere karşılık gelir. Bu yüzden ilk önce başlangıç popülasyonu, ele alınan sistemin yapısından kaynaklanan sınırlandırmaları (normalizasyon, diklik ve sınır koşulları) sağlayacak şekilde rastgele üretilen dalga fonksiyonlarından oluşturulur. Popülasyonu oluşturan bireylerin sayısının çok fazla olması çözüme ulaşma zamanının uzamasına neden olur. Diğer taraftan çok küçük olması genetik algoritmanın yerel bir optimumda takılıp kalması ile sonuçlanabilir. Bu yüzden genetik algoritma kullanıcısının popülasyon büyüklüğünü belirlemede seçici olması beklenir. Ayrıca dalga fonksiyonlarının parametrelerinin ele alınan sistemin yapısına göre kodlanması gerekir. Bu amaçla ikili kodlama veya sürekli kodlama kullanılır. İkili kodlamada her bir gen 0 ve 1 sayıları ile kodlanır. Sürekli kodlamada alt ve üst sınırları belirlenmiş sürekli bir değer kullanılır (Mirjalili ve ark., 2020). Daha sonra bu popülasyon genetik işlemlerin uygulandığı bir döngüye sokulur (**Şekil 3.1.**).

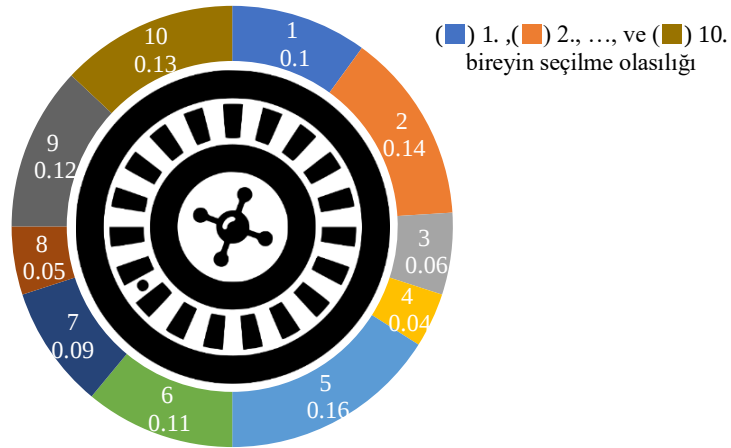
Döngünün ilk basağında popülasyonu oluşturan bireylerin/ dalga fonksiyonlarının enerji özdeğerleri hesaplanır. Daha sonra bu enerji özdeğerleri kullanılarak her bir birey için bir uygunluk değeri hesaplanır. Bu uygunluk değeri bireyin temsil ettiği çözümün işe yararlılığıyla orantılı sayısal bir değerdir ve gelecek nesillerde daha uygun çözümlerin üretilmesinde yol göstericidir. Bir kromozomun uygunluk değeri ne kadar yüksekse yaşama ve genlerini gelecek nesillere aktarma oranı da o kadar yüksek olur (Yeniay, 2001). Hesaplanan uygunluk değerleri ile bir önceki döngüde hesaplanan enerji değerleri arasında anlamlı bir fark oluşmuyorsa veya durdurma kriteri sağlanıyorsa ya da önceden belirlenen maksimum iterasyon sayısına ulaşılmışsa döngüden çıkılarak algoritma sonlandırılır. Aksi durumda döngü bir sonraki basamaktan devam eder.



Şekil 3.1. KGA'nın şematik gösterimi

Elitizm işleminde, uygunluk değerleri en iyi olan iki birey hiçbir genetik işleme tabi tutulmadan direkt yeni kuşağa aktarılır. Bu sayede yeni kuşağın en iyi bireyinin bir önceki kuşağın bireylerinden daha kötü olması engellenerek hem hesaplanan değerlerde meydana gelebilecek dalgalanmalar önlenir hem de eski kuşaktaki “sağlıklı” genler korunur. Ancak bu bireylerin sayısının çok artması da gen çeşitliliğini azaltabileceği için algoritmanın işleyişini olumsuz etkiler.

Yeni popülasyonu oluşturmak için mevcut popülasyonun içinden çaprazlama ve mutasyon işlemlerinde kullanılacak bireylerin seçilmesi gerekir. Bu işlem “daha iyi” bireylerin genlerinin gelecek kuşaklarda ağırlık kazanması gerekliliği üzerine kurulur. Bu nedenle uygunluk değeri daha yüksek olan bireylerin daha çok seçilmesine olanak tanıyan rulet çarkı, turnuva ve sıralama gibi seçim yöntemleri kullanılır. Bu yöntemlerden rulet çarkı yönteminde (Şekil 3.2.) popülasyonu oluşturan bireylerin toplam uygunluk değeri hesaplanır ve bireylerin uygunluk değerleri toplam uygunluk değerlerine bölünerek her bir birey için 0-1 aralığında bir seçim olasılığı bulunur. Daha sonra 0-1 aralığında bir sayı rastgele üretilir (rulet çarkı döndürülür) ve bu sayı bireyin seçim olasılığından küçükse bu birey seçilir, değilse diğer bireyler denenir. Böylece uygunluk değeri büyük olan bireylerin bir sonraki kuşakta bulunma olasılığı daha büyük olur.



Şekil 3.2. Bir popülasyonun bireylerinin seçim olasılıkları ve rulet çarkının şematik gösterimi

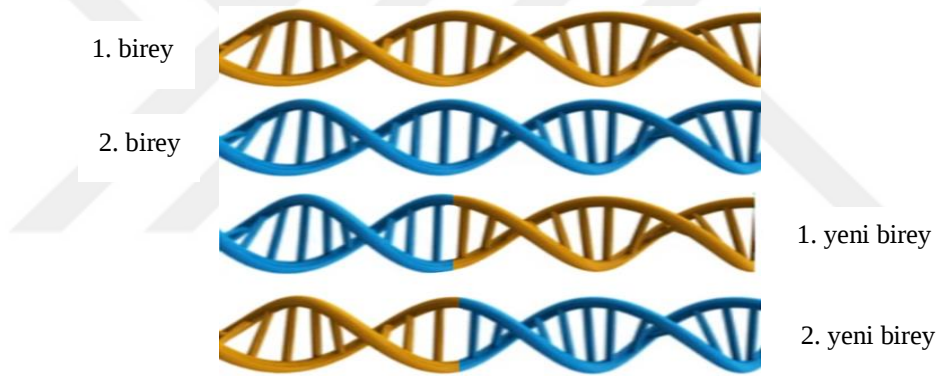
Çaprazlamanın amacı mevcut bireylerin genlerini kullanarak daha uygun bireylerin yaratılmasıdır (Şekil 3.3.). Genelde uygunluk değeri yüksek olan bireylerden rastgele iki birey ebeveyn olarak seçilir ve bu bireyler için rastgele üretilen bir sayı çaprazlama olasılığı (PC) ile karşılaştırılır. Eğer üretilen sayı PC değerinden küçük ise

ebeveynler rastgele seçilen bir noktadan kesilerek parçaların yerleri değiştirilir. Bu işlem dalga fonksiyonları üzerinde

$$\Psi'_1 = \Psi_1 f_c + \Psi_2 (1 - f_c) \quad (3.1)$$

$$\Psi'_2 = \Psi_2 f_c + \Psi_1 (1 - f_c) \quad (3.2)$$

şeklinde yapılır. Burada Ψ_1 ve Ψ_2 çaprazlama için seçilen dalga fonksiyonları, Ψ'_1 ve Ψ'_2 çaprazlama işlemi sonucu elde edilen yeni dalga fonksiyonları, f_c çaprazlama fonksiyonudur ve (0,1) aralığında değerler alacak şekilde sınırlandırılması dalga fonksiyonundaki kırılmaları önler. PC değerinin artması üretilecek bireylerin çeşitliliğinin artmasını sağlar ancak aynı zamanda iyi bireylerin yapısının bozulmasına da neden olabilir.



Şekil 3.3. Çaprazlama işleminin şematik gösterimi

Mutasyon, bireylerin gen yapısında değişiklik yapma işlemidir. Rastgele üretilen bir sayı mutasyon olasılığı (PM) ile karşılaştırılır ve bu sayı PM değerinden küçükse rastgele seçilen bir bireyin rastgele seçilen genlerinin değiştirilmesiyle mutasyon işlemine maruz bırakılır (Şekil 3.4.). Bu işlem

$$\Psi' = \Psi + f_m \quad (3.3)$$

şeklinde gösterilir. Burada Ψ mutasyon işlemi için rasgele seçilen bir dalga fonksiyonu, Ψ' mutasyona uğramış dalga fonksiyonu ve f_m mutasyon fonksiyonudur. Bu işlemler tamamlandıktan sonra gelecek kuşak oluşturulur. Mutasyon olasılığının çok büyük

olması algoritmayı bozarak rastgele arama sürecine dönüştürürken çok küçük olması ise genetik çeşitliliği azaltır. Mutasyon oluşan yeni çözümlerin çeşitliliğini arttırmak ve sonuca daha hızlı ulaşmak amacıyla yapılır. Böylece sonraki kuşaktaki bireylerin birbirini tekrar etmesinin önüne geçilir.



Şekil 3.4. Mutasyon işleminin şematik gösterimi

Popülasyona genetik işlemlerin uygulanmasından sonra elde edilen yeni bireylerden yeni bir popülasyon üretilir. Bu popülasyonun bireyleri sistemin sınırlamalarına uygun hale getirilerek döngüye devam edilir. Dolayısıyla popülasyon uygunluk fonksiyonunun kılavuzluğunda secim, çaprazlama ve mutasyon süreçleri kullanılarak sanal bir evrime tabi tutulur. Böylece probleme daha iyi çözümler sunması umulan yeni kuşaklar üretilir.

3.2. Varyasyon Yöntemi

Zamandan bağımsız Schrödinger eşitliğini çok elektronlu sistemlerde ele almak için yaklaşım yöntemlerinin kullanılması gerekir. Bu yöntemlerden biri olan ve Hartree Fock yöntemine temel oluşturan varyasyon yöntemi Schrödinger denklemini çözmeksizin yaklaşık taban durum enerjisinin bulunmasına olanak sağlar (Levine ve ark., 2009). Bu yöntemde zamandan bağımsız Hamiltoniyen operatörü $\hat{H}$ ve en düşük enerjisi E_1 olan bir sistem için

$$W = \frac{\int \Phi^* \hat{H} \Phi d\tau}{\int \Phi^* \Phi d\tau} \geq E_1 \quad (3.4)$$

denklemini yazılabilir. Burada Φ problemin sınır şartlarını sağlayan, sistemin parçacıklarının koordinatlarının herhangi bir normalize edilmiş, iyi davranışlı deneme varyasyon fonksiyonu; W , varyasyon integrali olarak adlandırılır. Taban durum

enerjisine ulaşmak için birçok deneme varyasyon fonksiyonu denenir ve varyasyon integralinin en küçük değerini veren biri aranır. Eğer deneme varyasyon fonksiyonu Φ , n tane lineer bağımsız f_i fonksiyonlarının lineer kombinasyonu olarak seçilirse bu fonksiyona

$$\Phi = w_1 f_1 + w_2 f_2 + \dots + w_n f_n = \sum_{j=1}^n w_j f_j \quad (3.5)$$

lineer varyasyon fonksiyonu denir. Burada w_j katsayıları varyasyon integralini minimize etmekte kullanılan parametrelerdir. Bu parametreler yardımı ile sistemin enerji değerlerinin üst sınırı varyasyon yöntemi ile belirlenebilir.

3.3. Hartree-Fock Yöntemi

Elektronları arasındaki etkileşmenin göz ardı edildiği, elektroları r_1 ve r_2 konumunda bulunan iki elektronlu bir sistemde birinci elektronun dv_1 hacminde iken ikinci elektronun dv_2 hacminde bulunma olasılığı, birinci elektronun dv_1 hacminde bulunma olasılığı ile ikinci elektronun dv_2 hacminde bulunma olasılıklarının çarpımına, $[\phi(r_1) \phi(r_1)]^2 dv_1 dv_2$, eşittir (Attila ve Ostlund, 1982). Dolayısı ile sistemin dalga fonksiyonu da her bir elektronun uzaysal dalga fonksiyonunun çarpımına eşittir. Bu durumda N elektronlu bir sistemin dalga fonksiyonu, N tane hidrojen benzeri uzaysal orbitalin çarpımı

$$\Psi = \phi_1(r_1, \theta_1, \varphi_1) \phi_2(r_2, \theta_2, \varphi_2) \dots \phi_n(r_N, \theta_N, \varphi_N) \quad (3.6)$$

şeklinde yazılabilir. Burada her bir ϕ_i küresel harmonikler tarafından çarpılmış r 'nin normalize edilmiş bir fonksiyonudur. Hartree çarpımı olarak adlandırılan bu fonksiyon kullanılarak varyasyon integralini minimize edecek ϕ_i fonksiyonları belirlenmeye çalışılır. Varyasyon yönteminden farkı, varyasyon yönteminde öngörülen deneme fonksiyonu birtakım parametreler değiştirilerek varyasyon integrali minimize edilmeye çalışılırken bu yöntemde aynı amaçla ϕ_i fonksiyonları değiştirilir. Bu fonksiyonları

bulmak için gerekli prosedür Hartree tarafından tanıtıldı ve Hartree öz uyumlu alan yöntemi olarak adlandırıldı (Hartree, 1928).

Hartree öz uyumlu alan yöntemi elektron spinlerini ve antisimetri özelliğini içermediği için yeterince hassas sonuçlar vermez. Bu eksikliği gidermek için ϕ_i uzaysal orbitalleri yerine

$$\psi_i(x_i) = \phi_i(r_i, \theta_i, \varphi_i) \sigma(\omega_i) \quad (3.7)$$

şeklinde verilen spin orbitallerinin kullanılması gerekir. Burada x_i hem uzaysal hem de spin koordinatlarını içerir, $\sigma(\omega)$ ise tam ve ortogonal spin fonksiyonudur. Ayrıca spin-istatistik teoreminin gerektirdiği birden fazla elektron içeren sistemlerin dalga fonksiyonunun antisimetrik olma koşulunu sağlamak için sistemin dalga fonksiyonu

$$\Psi = (N!)^{-1/2} \sum_P (-1)^p \psi_1(x_1) \psi_2(x_2) \psi_3(x_3) \dots \psi_N(x_N) \quad (3.8)$$

şeklinde çarpım fonksiyonlarının lineer kombinasyonu alınarak antisimetrize edilmiş dalga fonksiyonu elde edilir. Burada $(N!)^{-1/2}$ çarpanı normalizasyonu sağlar. P permütasyonunun paritesi olan p ise elektronların değişimi çift sayıda yapılırsa 0, tek sayıda yapılırsa 1 değerini alır. Bu fonksiyon Pauli dışarlama ilkesini sağlar. Ek olarak, konumları aynı olan iki paralel spinli elektron bulunması halinde $\Psi = 0$ olacağı için Hartree fonksiyonlarının aksine antisimetrize edilmiş dalga fonksiyonu, antiparalel spinli elektronlar hariç, elektron korelasyonunu da sağlar. Söz konusu korelasyon her ne kadar antiparalel spinli elektronları kapsamasa da Hartree çarpımına göre sistemi daha iyi temsil eder. Ayrıca antisimetrize edilmiş dalga fonksiyonları, Pauli dışarlama ilkesinin ve korelasyon ilişkisinin sonuçlarını matematiksel bir formülasyonda sergilemelerine olanak sağlamak için

$$\Psi = \frac{1}{N!^{1/2}} \begin{vmatrix} \psi_1(x_1) & \psi_1(x_2) & \dots \\ \psi_2(x_1) & \psi_2(x_2) & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} \quad (3.9)$$

şeklinde Slater determinantı (Slater, 1930) olarak adlandırılan determinantal bir formda da yazılabilir ve bu form determinantın köşegen üzerindeki elemanları kullanılarak

$$\Psi = \frac{1}{N!^{1/2}} |\psi_1(x_1)\psi_2(x_2) \dots \psi_N(x_N)| \quad (3.10)$$

şeklinde kısaltılabilir. Bu formülasyonda iki elektronun koordinatlarının değişimi fonksiyonun işaretinin değişmesine (Spin-istatistik teoremi), iki orbitalin aynı kuantum sayılarına (Pauli dışarlama ilkesi) ya da iki elektronun aynı koordinatlara sahip olması (elektron korelasyonu) ise fonksiyonun değerinin sıfır olmasına neden olur. Bu yöntem ilk kez Hartree ve Fock tarafından ifade edilen bu yönteme Hartree Fock yöntemi denildi (Fock, 1930a; Fock, 1930b).

Hartree Fock orbitallerini bulmak için diferansiyel denklemler genel formda

$$\hat{F}\psi_i = \epsilon_i\psi_i \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.11)$$

şeklinde yazılabilir. Burada ψ_i , i. spin orbitali; ϵ_i , i. spin orbitalinin enerjisidir. Fock operatörü olarak adlandırılan $\hat{F}$ ise sistemin enerji ifadesinin Lagrange çarpan yöntemi ile optimize edilerek türetilen etkin Hartree Fock Hamiltoniyenidir. Eğer ele alınan sistem sadece kapalı kabuklardan oluşuyorsa yöntem açık kabuk içermeyen sistemler için elektron spinlerinden bağımsız hale gelir (Attila ve Ostlund, 1982). Bu durumda

$$\hat{F}\phi_i = \epsilon_i\phi_i \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3.12)$$

şeklinde tekrar yazılabilir ve açık kabuk içermeyen sistemler için kullanılan bu yöntem Sınırlandırılmış Hartree Fock Yöntemi adını alır.

Roothaan, 1951 yılında Hartree Fock dalga fonksiyonlarının belirlenmesinde matrislerin kullanılmasını mümkün kılmak için uzaysal orbitali ϕ_i 'lerin baz fonksiyonu olarak adlandırılan, χ_τ , fonksiyonların lineer bir kombinasyonunu

$$\phi_i = \sum_{\tau=1}^{\sigma_i} c_{\tau i} \chi_{\tau i} \quad (3.13)$$

şeklinde yazılmasını önerdi (Roothaan, 1960). Burada $c_{\tau i}$ 'ler açılım katsayıları, χ_{τ} 'ler ise baz fonksiyonları, σ_i baz fonksiyonlarının sayısıdır. Yöntemin başarısı baz fonksiyonlarına ve bu fonksiyonları oluşturan parametrelere bağlı olduğu için baz fonksiyonlarının seçimi önem arz eder. Hartree Fock hesaplamalarında baz fonksiyonu olarak STO'lar ve Gaussian Tipi Orbitaller (GTO'lar) yaygın olarak kullanılır. STO'lar küresel koordinatlarda

$$\chi_{\tau i} = r_i^{n_i-1} e^{-\zeta_{\tau i} r_i} Y_{l_i m_{l_i}}(\theta, \varphi) \quad (3.14)$$

şeklinde ifade edilir. Radyal kısım, $r_i^{n_i-1} e^{-\zeta_{\tau i} r_i}$, i. elektronun sistemin merkezine uzaklığı olan r_i , orbital üsteli $\zeta_{\tau i}$ ve birincil kuantum sayısı n_i 'ye bağlıdır. Küresel kısım $Y_{l_i m_{l_i}}$ ise yörünge açısai momentum kuantum sayısı l ve yörünge manyetik kuantum sayısı m_l 'ye bağlıdır. GTO'lar ise küresel koordinatlarda

$$\chi_{\tau i} = r_i^{n_i-1} e^{-\alpha_{\tau i} r_i^2} Y_{l_i m_{l_i}}(\theta, \varphi) \quad (3.15)$$

şeklinde verilir. Radyal kısım $r_i^{n_i-1} e^{-\alpha_{\tau i} r_i^2}$, elektronların sistemin merkezine uzaklığı olan r , orbital üsteli α ve birincil kuantum sayısı n 'ye bağlıdır. Küresel kısım $Y_{l_i m_{l_i}}$ ise yörünge açısai momentum kuantum sayısı l ve yörünge manyetik kuantum sayısı m_l 'ye bağlıdır. Bu iki baz seti iki temel noktada ayrışır. Bunlardan birincisi çekirdekte, $r = 0$, STO'lar keskin bir pik verirken GTO'lar yayvan bir pik verir. İkincisi GTO'lar yarıçap sonsuza giderken, $r = \infty$ durumunda, STO'lardan daha çabuk sifıra yakınsar. Bu yüzden birden fazla merkez içeren moleküler yapıların incelenmesinde daha faydalı olan ve sonsuzda çabucak sifıra yakınsayan GTO'lar yerine kuantum nokta yapıların sınır değerlerinde dalga fonksiyonunun değerinin sifıra gitmesi için daha uygun olan STO'lar kullanıldı.

Baz fonksiyonlarının tipi ve parametreleri belirlendikten sonra açık kabuk içermeyen bir sistemde Denk. (3.13), Denk. (3.12)'de yerine yazılırsa

$$\sum_{\tau} c_{\tau i} \hat{F} \chi_{\tau} = \epsilon_i \sum_{\tau} c_{\tau i} \chi_{\tau} \quad (3.16)$$

denklemini elde edilir. Bu denklem χ_r^* ile çarpıldıktan sonra düzenlenirse

$$\sum_{\tau=1}^b c_{\tau i} (F_{r\tau} - \epsilon_i S_{r\tau}) = 0 \quad r = 1, 2, \dots, b \quad (3.17)$$

Hartree-Fock Roothaan denklemi elde edilir. Burada $S_{r\tau}$, örtüşme matrisi; $F_{r\tau}$, Hartree matris elementidir ve

$$\begin{aligned} S_{r\tau} &= \langle \chi_r(1) | \chi_\tau(1) \rangle \\ F_{r\tau} &= \langle \chi_r(1) | \hat{F}(1) | \chi_\tau(1) \rangle \end{aligned} \quad (3.18)$$

şeklinde verilirler.

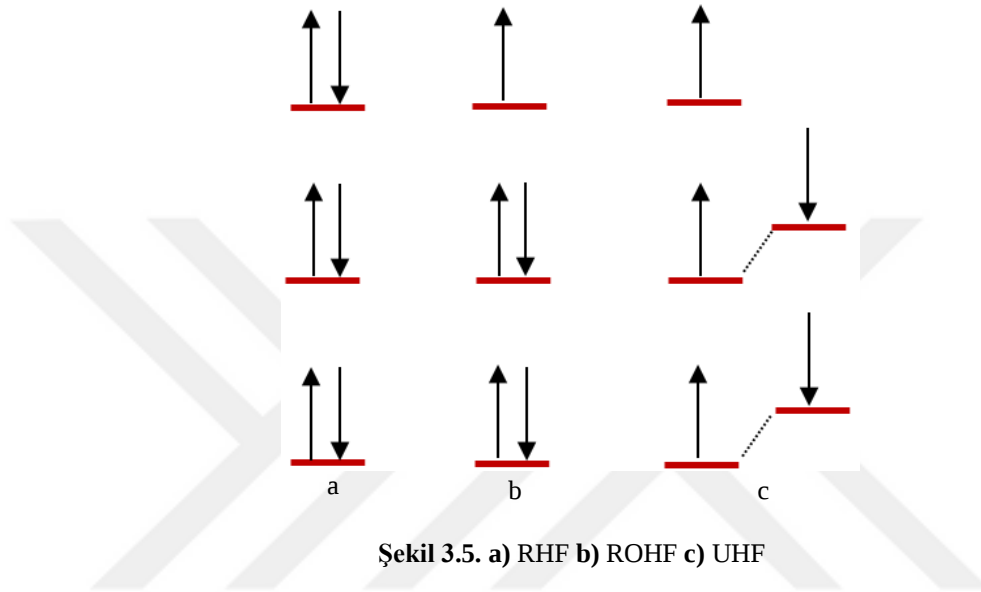
Hartree-Fock Roothaan denkleminin (Denk. 3.17) nontrivial çözümleri için

$$\det(F_{r\tau} - \epsilon_i S_{r\tau}) = 0 \quad (3.19)$$

eşitliğinin sağlanması gerekir. Bu denklem köklerinden her biri orbital enerjisi ϵ_i 'ye karşılık gelen seküler denklemdir. $F_{r\tau}$, ϕ_i 'ye bağlı ϕ_i 'de $F_{r\tau}$ 'ye bağlı olduğu için HFR eşitliği ancak iteratif olarak çözülebilir. Bu iteratif süreçte, $S_{r\tau}$, örtüşme matrisinin köşegenleştirilmesi gerekir. Bu işlem sınırlandırılmış Hartree Fock yönteminde enerjinin beklenen değerini ve Fock operatörünü değiştirmez. Dolayısı ile açık kabuk içermeyen sınırlandırılmış sistemlerde Hartree Fock Roothaan denklemi kolayca çözülebilir (**Şekil 3.5.a**). Açık kabuk içeren bir sistem ele alındığında ise örtüşme matrisinin üniter dönüşümü enerjinin beklenen değerini ve Fock operatörünü bozar (Krebs, 1999). Bu zorluğu aşmak için RHF yönteminin açık kabuklu sistemlere uyarlanmış hali olan sınırlandırılmış açık kabuk Hartree Fock (ROHF) yöntemi (**Şekil 3.5.b**) ya da sınırlandırılmamış Hartree Fock (UHF) yöntemi (**Şekil 3.5.c**) kullanılır.

ROHF yönteminde bu yüzden köşegen dışı Lagrangian çarpanları yalnızca uygun üniter değişimler tarafından elenebilir (Krebs, 1999). Ayrıca dalga fonksiyonu genellikle yörünge ve spin açısal momentum kuantum sayılarının özfonksiyonu da olmak durumundadır (Mitroy, 1999). Bu yüzden ROHF yönteminde HFR yönteminden daha karmaşık bir süreç izlenir.

HF yöntemi Fermi holünü dikkate alırken Coulomb holünü hesaba katmaz. Bu yüzden, ortalamada iki elektron olması gerekenden birbirine daha yakın olabilir (Fernández, 2004). Öte yandan açık kabuklu sistemler için kullanılan UHF yönteminde çiftlenimli elektronların aynı uzaysal dağılıma sahip olmamaları spin kontaminasyonuna neden olur ve bu sonuçları kullanılamaz hale getirecek kadar önemli bir hataya sebep olabilir.



Açık kabuklu sistemlerin dalga fonksiyonunu inşa etmek için kullanılan bir diğer yöntem olan ROHF yönteminde çiftlenimli elektronlar aynı uzaysal dağılıma sahip oldukları için spin kontaminasyonuna neden olmaz ancak bu yöntemin uygulanması UHF yönteminden çok daha zordur ve daha fazla işlem süresi gerektirebilir (Young, 2001). Başka bir zorluk ise başlangıç parametrelerinin seçiminde ortaya çıkar. Şöyle ki, çok elektronlu bir sisteme Hartree-Fock yöntemlerinin uygulanmasında uygun başlangıç parametrelerinin seçilmesi yöntemin başarısını doğrudan etkiler. Bu yüzden atomik yapılarda orbital üstelinin seçimi teorik çalışmalar yardımıyla yapılır ve

$$\zeta = \frac{(Z - \varsigma)}{n} \quad (3.20)$$

şeklinde ifade edilir. Burada Z atom numarası, n orbitalin baş kuantum sayısı ve ς perdeleme sabitidir. Ancak belli bir yarıçapı olmayan kuantum nokta yapılar için benzer bir teorik çalışma ile ζ değerlerinin belirlenmesi olası değildir. Bu yüzden bu tez

çalışmasında geleneksel HF yöntemine bağlı kalınmayacaktır. Bunun yerine KGA yöntemi ile sistemin ortalama enerjisi minimize edilerek dalga fonksiyonu belirlenecektir. Böylece hem orbital üstelinin belirlenmesinde karşılaşılan engeller aşılabilecek hem de spin kontaminasyonundan kaynaklanan hatalar en aza indirilecektir.

3.4. Çiftlenimli Dalga Fonksiyonları

Çok elektronlu bir sistemde Hamiltoniyen operatörü spin-yörünge etkileşmesinden dolayı tek tek elektronların açısal momentum operatörleri ile komite etmez ancak toplam açısal momentum operatörleri ile komite eder (Levine ve ark., 2009). Bu yüzden bir kuantum nokta yapının dalga fonksiyonunun yazılabilmesi için sistemin içerdiği elektronların açısal momentumlarının toplanması önemli hale gelir.

N elektronlu bir sistem için toplam yörünge açısal momentum vektörü her bir elektronun yörünge açısal momentumunun vektör toplamı şeklinde

$$\vec{L} = \sum_{i=1}^N \vec{l}_i \quad (3.21)$$

ifade edilir ve yörünge açısal momentum kuantum sayısı harflerle kodlanabilir (**Çizelge 3.1**). Toplam spin açısal momentum vektörü

$$\vec{S} = \sum_{i=1}^N \vec{s}_i \quad (3.22)$$

şeklinde her bir elektronun spin açısal momentum vektörlerinin toplanması ile elde edilir. Bir kuantum nokta yapıda toplam açısal momentum vektörü $\vec{J}$ ise toplam yörünge açısal momentum ve toplam spin açısal momentum vektörlerinin toplamına eşittir ve

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad (3.23)$$

şeklinde verilir. Burada yapıldığı gibi önce $\vec{L}$ ve $\vec{S}$ toplamalarının bulunup daha sonra $\vec{L}$ ve $\vec{S}$ nin toplanmasıyla $\vec{J}$ toplam açısal momentum değerinin bulunmasına LS çiftlenimi

denir ve spin-yörünge etkileşiminin küçük ve elektron sayısının az olduğu durumlarda geçerliliğini korur.

Çizelge 3.1. Yörünge açısal momentum kuantum sayısı ve harf kodları

L	0	1	2	3	4	5	6	7
Harf	S	P	D	F	G	H	I	K

Açısal momentum ve Hamiltoniyen operatörleri arasındaki komitasyon ilişkisi ve Heisenberg belirsizlik ilkesi nedeniyle çok elektronlu bir sistemin bir dalga fonksiyonu; özdeğerleri sırasıyla $L(L + 1)$, $S(S + 1)$, $J(J + 1)$ ve M_J olan $\hat{L}^2$, $\hat{S}^2$, $\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$ operatörlerinin eşzamanlı özfonksiyonu olmalıdır ve bu özfonksiyon kuantum sayıları cinsinden Ψ_{LSJM} şeklinde gösterilebilir ancak $\hat{J}^2$ operatörü $\hat{L}_z$ ve $\hat{S}_z$ operatörleri ile komite etmez (Levine ve ark., 2009). Bu yüzden Ψ_{LSJM_J} fonksiyonu, $\hat{L}_z$ ve $\hat{S}_z$ operatörlerinin özfonksiyonu olmak zorunda değildir. Dolayısı ile özdeğerleri M_L ve M_S olan $\hat{L}_z$ ve $\hat{S}_z$ operatörlerinin özfonksiyonlarını da ilgili kuantum sayıları cinsinden Ψ_{LM_L} ve Ψ_{SM_S} şeklinde yazılırsa Ψ_{LSJM_J} fonksiyonu bu fonksiyonlarının lineer kombinasyonu

$$\Psi_{LSJM_J} = \sum_{M_L=-L}^L \sum_{M_S=-S}^S C(LSM_LM_S; JM_J) \Psi_{LM_L} \Psi_{SM_S} \quad (3.24)$$

şeklinde genişletilmesi gerekir. Böylelikle Ψ_{LSJM_J} fonksiyonu $\hat{L}_z$ ve $\hat{S}_z$ operatörlerinin de özfonksiyonu haline gelir ve çiftlenimli dalga fonksiyonu olarak adlandırılır. Burada $C(LSM_LM_S; JM_J)$ Clebsch-Gordan katsayılarıdır ve 3j sembolleri (Cowan, 1981) cinsinden

$$C(LSM_LM_S; JM_J) = (-1)^{L-S+M_J} (2J + 1)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} L & S & J \\ M_L & M_S & -M_J \end{pmatrix} \quad (3.25)$$

şeklinde verilir (Cowan, 1981). Denk. (3.24)'deki fonksiyon, $\hat{L}_z$ ve $\hat{S}_z$ operatörlerinin özfonksiyonu olduğu için toplam sadece M_L ve M_S üzerinden alınır ve $M_L + M_S = M_J$ koşulunu sağlamalıdır (**EK-1**). Dolayısı ile M_J 'nin alabileceği değerler sınırlıdır. Bu da J 'nin alabileceği değerlerin

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S| \quad (3.26)$$

şeklinde sınırlandırılmasına neden olur.

3.5. Elektron Konfigürasyonu ve Ortalama Enerji

Çiftlenimli baz fonksiyonları hepsi $n_i l_i$ değerlerinin aynı setine sahip olan spin orbitallerinden oluşturulmuş baz fonksiyonlarının uygun lineer kombinasyonları alınarak oluşturulur. Fonksiyonların böyle bir setini tanımlayan $n_i l_i$ kuantum sayılarının listesi elektron konfigürasyonu olarak adlandırılır ve N elektronlu bir sistem için

$$(n_1 l_1)^{w_1} (n_2 l_2)^{w_2} \dots (n_q l_q)^{w_q} \quad (3.27)$$

notasyonu ile gösterilir (Cowan, 1981). Burada $\sum_{j=1}^q w_j = N$ olarak verilir. Bu yaklaşıma tekli konfigürasyon yaklaşımı denir. Eğer birden fazla konfigürasyonun kombinasyonu alınarak yeni bir konfigürasyon oluşturulursa bu yaklaşıma da çoklu konfigürasyon yaklaşımı adı verilir.

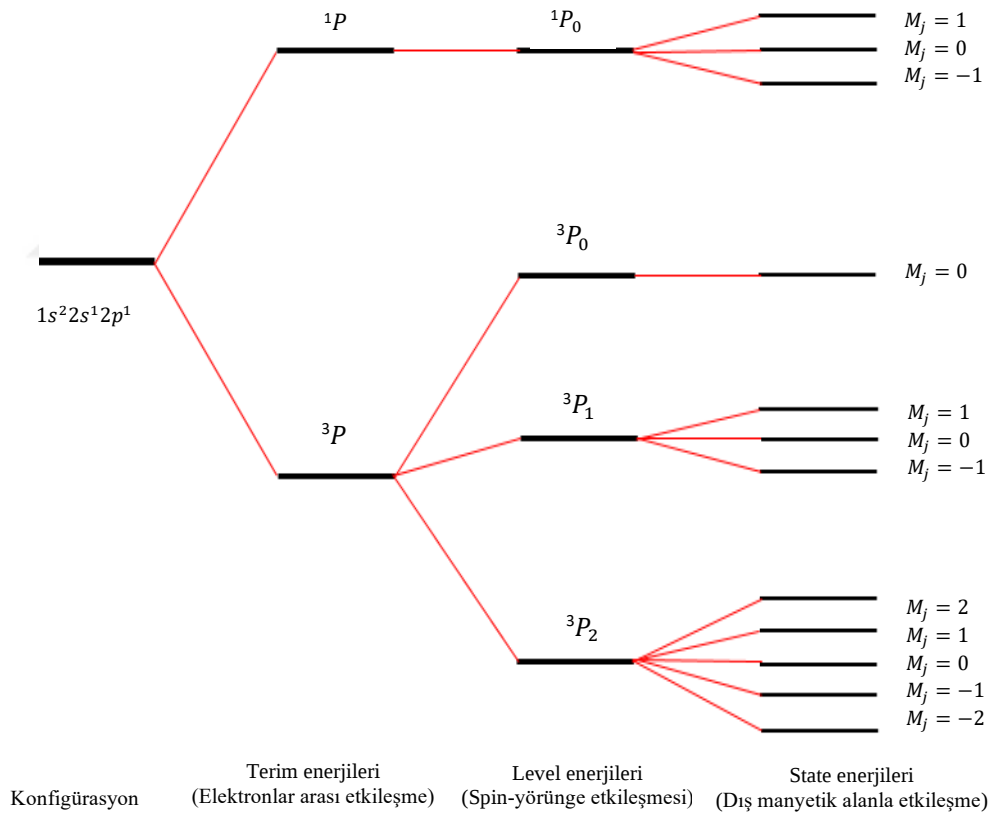
Verilen herhangi bir elektron konfigürasyonu genelde elektronlar arasındaki etkileşmelerden dolayı farklı enerji değerlerine yarılabılır. Bu aynı elektronik konfigürasyonda ortaya çıkan ve aynı L ve S kuantum sayılarına sahip olan enerji değerleri terim enerjilerini oluşturur. Her bir terim enerjisine $^{2S+1}L_J$ şeklinde bir terim sembolü atanır. Burada L toplam yörünge açısal momentum kuantum, S toplam spin açısal momentum kuantum, J ise toplam açısal momentum kuantum sayısıdır. Açık kabuklarında iki elektron bulunan bir sistemin terim enerjileri $2S + 1$ ifadesinin alacağı değere göre singlet ya da triplet olarak adlandırılır.

Aynı $n_i l_i$ değerlerine sahip olan elektron spin orbitalleri özdeş orbitaller olarak adlandırılır. Buna uygun olarak $n_i l_i$ 'nin aynı değerlerine sahip olan elektronlar özdeş elektronlar, özdeş elektronların bir seti de alt kabuk olarak adlandırılır. Dolu bir alt kabukta toplam yörünge manyetik kuantum sayısı ve toplam spin açısal kuantum sayısı sırasıyla

$$M_L = \sum_i m_{l_i} = 0 \quad (3.28)$$

$$M_S = \sum_i m_{s_i} = 0 \quad (3.29)$$

değerlerini alır. Burada m_{l_i} i . elektronun yörünge manyetik kuantum sayısı ve m_{s_i} i . elektronun spin kuantum sayısıdır. Dolayısı ile toplam açısal momentumlara bir katkı vermez ve olası LS çiftlenim fonksiyonu sadece bir tanedir. Bu fonksiyon 1S_0 terim sembolü ile temsil edilir ve yörünge uzaysal açıları θ ve ϕ 'den bağımsız olduğu için küresel simetriktir. Sistemin kapalı kabuklarının dışında birden fazla elektron bulunması halinde açısal momentumların toplamına göre farklı terim enerjileri ortaya çıkar. Eğer açık kabuklarda özdeş elektronlar varsa Pauli dışarlama ilkesi nedeniyle üretilen terim sembollerinin hepsinin fiziksel karşılığı olmayabilir.



Şekil 3.6. $1s^2 2s^1 2p^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri

Genellikle Hamiltoniyeen operatöründe gösterilmeyen (bu çalışmada da ihmal edildi) ve relativistik etkilerden doğan spin-yörünge etkileşmesi terim enerjilerinin level enerjilerine yarılmasına neden olur. Bu enerji seviyeleri de dış manyetik alana maruz kaldıklarında state enerjilerine ayrılır (Şekil 3.6.). Her bir $LSJM$ değerine bir dalga

fonksiyonu karşılık gelir ve bu fonksiyonlar spin fonksiyonları kullanılarak Slater determinantı formunda yazılabilir. Dalga fonksiyonlarının Denk. (3.24)'de göre lineer kombinasyonu alınarak da çiftlenimli dalga fonksiyonları elde edilebilir (**EK-2**).

Çok elektronlu bir sistemin herhangi bir konfigürasyonunun ortalama enerjisi, sistemin enerji seviyelerinin aritmetik ortalamasına eşit olur. Dolayısı ile herhangi bir konfigürasyonun ortalama enerjisi

$$E_{ort} = \frac{\sum_{b=1}^{\eta} \langle \Psi_b | \hat{H} | \Psi_b \rangle}{\eta} \quad (3.30)$$

ifadesi ile hesaplanabilir. Burada η enerji seviyelerinin sayısıdır.

3.6. Dalga Fonksiyonlarının Dikleştirilmesi ve Normalizasyonu

Bir sistemin minimum enerjide bulunabilmesi için orbital dalga fonksiyonlarının birbirine dik olması gerekir. Farklı yörünge açısai momentum kuantum sayısına sahip olan orbitaller küresel harmoniklerden dolayı doğal olarak birbirine diktir. Aynı yörünge açısai momentum kuantum sayılarına sahip olan orbitaller ise

$$\phi'_p = \phi_p - \sum_{q=1}^{p-1} \langle \phi_p | U_q \rangle U_q \quad (3.31)$$

şeklinde verilen Gram-Schmidt yöntemi ile dikleştirilebilir. Burada ϕ_p , dikleştirilmemiş uzaysal orbital; U_q normalize edilmiş uzaysal orbital; ϕ'_p ise U_q uzaysal orbitaline dikleştirilmiş uzaysal orbitaldir.

Uzaysal orbital ϕ_p ,

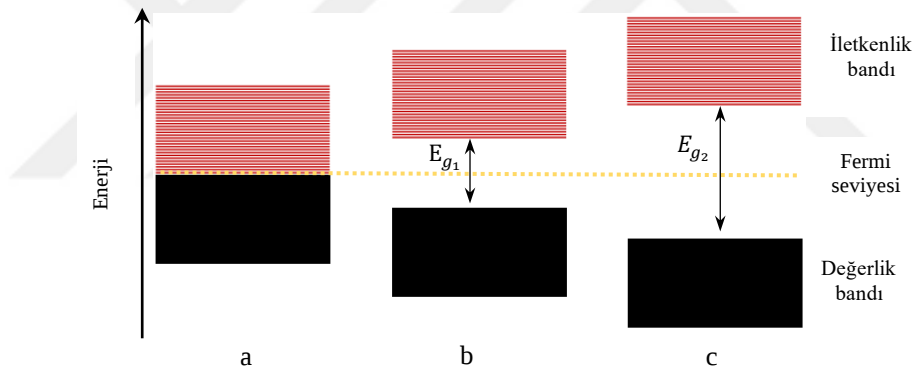
$$\phi''_p = \phi_p / \sqrt{\int \phi_p^* \phi_p dv} \quad (3.32)$$

işlemi ile normalize edilir. Burada ϕ''_p normalize edilmiş uzaysal orbital, dv ise hacim elemanıdır.

4. KUANTUM NANO YAPILAR

4.1. Düşük Boyutlu Yapılar

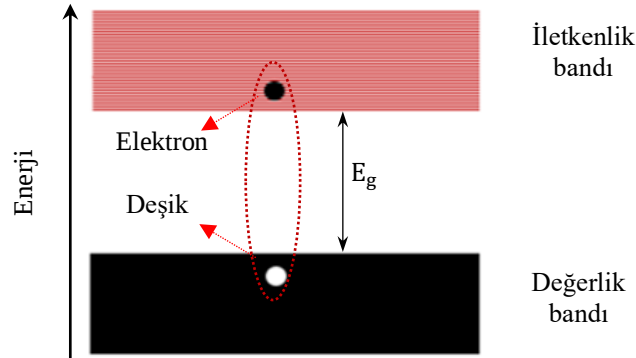
Serbest elektronlar sürekli enerji değerine sahipken bir atom içeriğindeki elektron ayrıık enerji seviyelerine sahiptir. Eğer tek bir atomdan oluşan bir sistem yerine bir kristal yapı göz önüne alınırsa üst üste gelen bu enerji seviyeleri Pauli dışarlama ilkesi nedeniyle yarıılır ve birbirine çok yakın yeni enerji seviyeleri oluşturur. Bu enerji seviyeleri birbirine o kadar yakın hale gelir ki enerji seviyelerinin sürekli olduğu kabul edilebilecek bir bant görünümü alır. Bu durum enerji bant modeline karşılık gelir. Elektron içeren en son banta değerlik bandı, bu bantın hemen üstündeki banta iletkenlik bandı denir. İletkenlik bandının alt seviyesi ile değerlik bandının üst seviyesi arasındaki enerji farkına da yasak enerji aralığı denir ve E_g ile gösterilir.



Şekil 4.1. a) İletkendeki iletkenlik ve değerlik bandı b) Yarıiletkendeki iletkenlik ve değerlik bandı c) Yalıtkandaki iletkenlik ve değerlik bandı

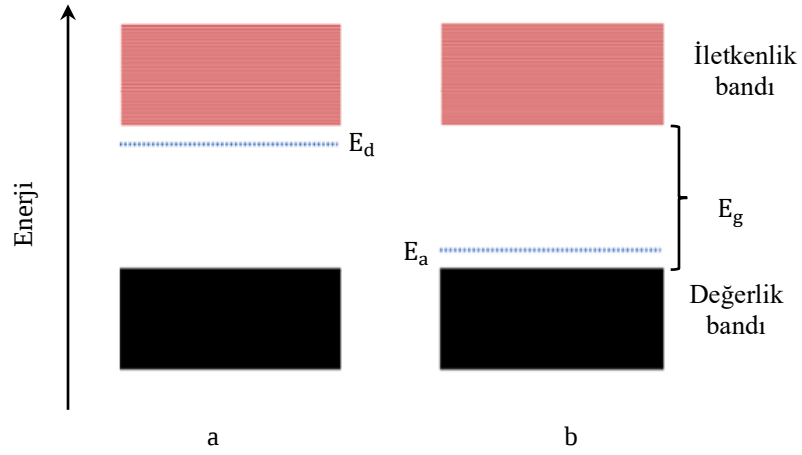
Şekil 4.1.'de ilk durumda en yüksek enerjili elektronlar çok az bir enerji alarak üst enerji seviyesine geçip iletkenliğe katkıda bulunabilir. Bu özelliğe sahip malzemeler iletken malzemelerdir. Diğer iki durumda ise elektron bir üst enerji seviyesine geçebilmesi için bant aralığını geçebilecek kadar enerji alması gerekir. Bu tür malzemeler yarıiletken veya yalıtkan olarak adlandırılır. Yarıiletken ve yalıtkan arasında temel bir fark olmamakla birlikte E_g değerleri 2 eV 'in altında olan ve bu sayede 2 eV 'den küçük bir enerji takviyesi ile elektronları değerlik bandından iletkenlik bandına çıkarak iletken hale gelebilen malzemeler yarıiletken olarak kabul edilir. Değerlik bandındaki bir elektron uyarılarak iletkenlik bandına çıkarılırsa geride bir deşik bırakır. Bu deşik pozitif

yüklü bir parçacıkmışçasına davranarak iletkenliğe katkıda bulunur. Dolayısı ile yük taşıyıcıları elektron ve deşiklerdir ve bir elektron deşik çiftine (Şekil 4.2.) eksiton denir.

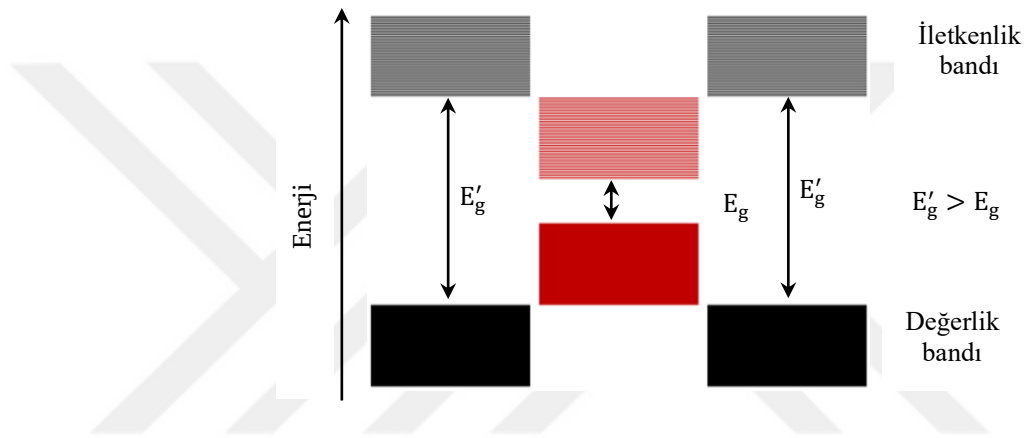


Şekil 4.2. Eksiton

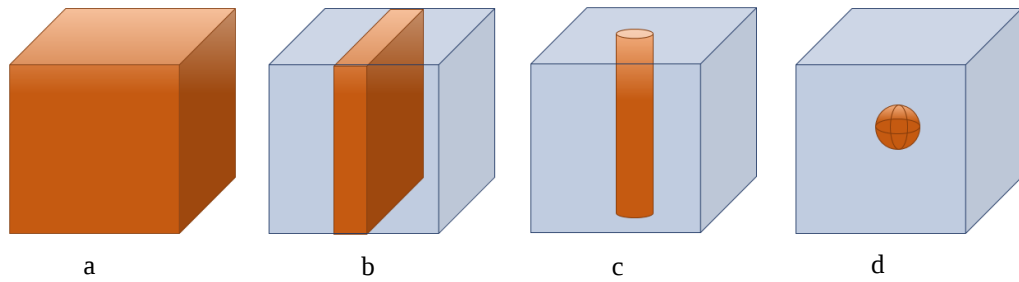
Yarıiletken bir malzemede elektron ve deşik sayısı birbirine eşit ise bu tür yarıiletkenlere asal yarıiletken denir. Yarıiletken bir malzeme içine safsızlık atomları olarak adlandırılan az miktarda yabancı atom ile katkılanırsa malzemenin elektron deşik dengesi bozulur. Bu safsızlık atomları, kristale elektron verirlerse donör; kristalden elektron alırlarsa akseptör adı verilir. Böylece bu atomlar kristalin yasak enerji aralığında izinli bir enerji seviyesini oluşturur. Kristale donör atomlarının katkılanmasıyla oluşan izinli enerji seviyesi (Şekil 4.3.a) E_d ile, akseptör atomlarının katkılanmasıyla oluşan izinli enerji seviyesi (Şekil 4.3.b) E_a ile gösterilir. Böyle bir yarıiletken ince levha şeklindeki bir malzeme yasak enerji aralığı (E_g) daha büyük olan başka bir yarıiletken malzemenin iki tabakası arasına sandiviçlenirse heterojonksiyonlu bir yapı elde edilir. Burada önemli olan orta tabakadaki elektronların enerjilerinin dış tabakadaki elektronların enerjilerinden daha az olmasıdır. Enerji aralığındaki farklar orta tabakadaki deşiklerin ve elektronların uzaysal sınırlandırılmasına (Şekil 4.4.) izin verir ve bu sayede orta tabakadaki elektronları sınırlayan bir enerji kuyusu yaratılmış olur (Band ve Avishai, 2013). Bu tür yapıların boyutlarına müdahale edilebilir. Eğer yarıiletken yapının boyutları Bohr eksiton yarıçapına eşit veya daha küçük olursa kuantum sınırlama etkisi ortaya çıkar (Öksel ve ark., 2018). Böylece atomda olduğu gibi, elektronların sınırlandırılması sebebiyle, kesikli enerji seviyeleri oluşturur. Böyle bir yapı sadece bir boyutta sınırlandırılırsa kuantum kuyu, iki boyutta sınırlandırılırsa kuantum tel, üç boyutta sınırlandırılırsa kuantum nokta yapı elde edilmiş olur (Şekil 4.5.).



Şekil 4.3. a) Donör atomlarının katkılanmasıyla oluşan izinli enerji seviyesi **b)** Akseptör atomlarının katkılanmasıyla oluşan izinli enerji seviyesi



Şekil 4.4. Uzaysal sınırlandırmanın şematik gösterimi



Şekil 4.5. a) Üç boyutlu bulk malzeme (3D) **b)** Bir boyutta sınırlandırılmanın yapıldığı kuantum kuyusu (2D); **c)** İki boyutta sınırlandırılmanın yapıldığı kuantum teli (1D) **d)** Üç boyutta sınırlandırılmanın yapıldığı kuantum noktası (0D)

Yarıiletken bulk malzemeler ile düşük boyutlu yapıların elektronik karakterleri arasındaki farkların çoğunun nedeni onların enerji seviyeleri arasındaki farklılıktan kaynaklanır. Bulk malzemelerde enerji seviyesi sürekli iken düşük boyutlu yapılarda enerji seviyeleri sınırlandırıldıkları boyutlarda kesikli hale gelir. Kuantum nokta yapılar üç boyutta da sınırlandırıldıkları için atomik enerji seviyelerine sahiptirler. Ancak

elektronların atom çekirdeğinin oluşturduğu Coulomb kuvveti sayesinde atoma bağlı kaldığı atomik sistemlerin aksine kuantum nokta yapılarda elektronlar ayrıca sınırlayıcı potansiyel yardımıyla sistem içinde tutulabilir. Bu nedenle baş kuantum sayısı n , yörünge açısal momentum kuantum sayısı l üzerinde herhangi bir kısıtlamaya neden olmaz ve kabuk yapısı n ve l 'ye bağlı olarak $1s, 1p, 1d, 2s, 1f, \dots$ şeklinde oluşur. Ayrıca bu kabuk yapısındaki baş kuantum sayısı n ile yörünge açısal momentum kuantum sayısı l toplanarak yeni bir baş kuantum sayısı elde edilebilir ve kabuk yapısı $1s, 2p, 3d, 2s, 4f, 3p, \dots$ şeklinde de ifade edilebilir (Zhu ve ark., 1990; Zhu ve Chen, 1994). Öte yandan kuantum nokta yapının merkezine bir safsızlık atomu yerleştirilirse enerji seviyeleri aşağı çekilir, elektron sayısı arttırılırsa elektronik seviyeler yukarı çıkar ve kuantum nokta yapının elektronik özellikleri dramatik bir şekilde değişir (Stojanović ve Kostić, 2011). Bu yüzden kuantum nokta yapıların merkezine yerleştirilen safsızlıkların incelenmesi bu tür yapıların elektronik ve optik özelliklerinin anlaşılmasında oldukça faydalı bir model oluşturur. Sonuç olarak kuantum nokta yapıların özellikleri boyut, şekil, kusur, safsızlık ve kristallik gibi etmenler tarafından belirlendiği için bu özelliklerinin kullanımı sentez sırasında dikkatli olunmasını gerektirir (Bera ve ark., 2010). Bu da üretim yöntemlerini ve kullanılan materyali önemli hale getirir. Yaygın olarak kullanılan fotolitografi ve materyal büyütme teknikleri ile birlikte benzer yöntemler kullanılarak birçok farklı boyut ve materyalden oluşan kuantum nokta yapı üretilebilmektedir (Hanson ve ark., 2007).

4.2. Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özellikleri

4.2.1. Dalga fonksiyonu ve sınır koşulları

Küresel simetrik, merkezinde safsızlık bulunan ve bir potansiyel engeli ile sınırlandırılmış N elektronlu bir kuantum nokta yapının (Şekil 4.6.) merkezdeki safsızlığın hızı, elektronların hızı ile kıyaslandığında çok küçük kalacağı için safsızlığın kinetik enerjisi ihmal edilebilir. Bu durumda Hamiltoniyen operatörü, $\hat{H}$, atomik birimlerde (a.u)

$$\hat{H} = \sum_{\mu=1}^N \left(-\frac{1}{2m^*} \nabla_{\mu}^2 - \frac{Z}{\epsilon r_{\mu}} + V_c(r_{\mu}) \right) + \sum_{\mu}^N \sum_{v>\mu}^N \frac{1}{\epsilon r_{\mu v}} \quad (4.1)$$

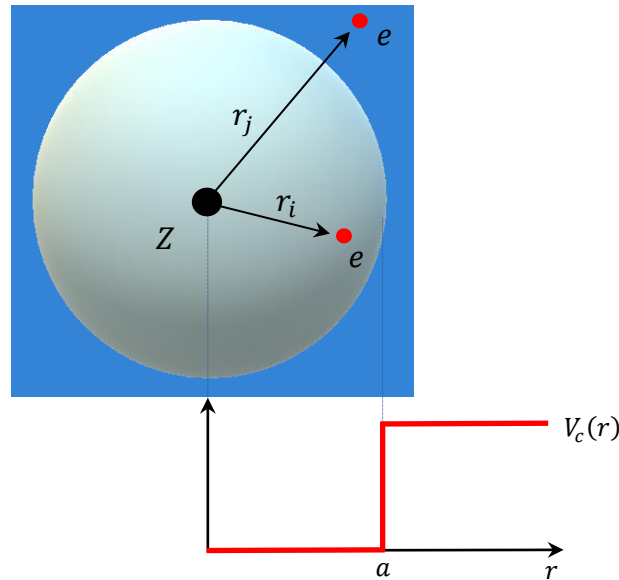
şeklinde yazılabilir. Burada m^* elektronun kristal içinde örgü potansiyeli ile etkileşmesi nedeniyle serbest elektron kütesinden farklılaşan elektronun etkin kütle değeri, Z merkezdeki safsızlık yükü, ϵ ortamın bağıl dielektrik sabiti, ∇^2 Laplace operatörüdür. $V_c(r_\mu)$ sınırlama potansiyelidir (Şekil 4.6.) ve $\mu = 1, 2, 3, \dots, N$ elektronlar olmak üzere tüm elektronlar için

$$V_c(r_\mu) = \begin{cases} 0, & r_\mu \leq a \\ \infty, & r_\mu > a \end{cases} \quad (4.2)$$

değerlerini alabiliyorsa kuantum nokta yapı sonsuz bir potansiyel tarafından sınırlandırılmıştır. Eğer sınırlama potansiyeli,

$$V_c(r_\mu) = \begin{cases} 0, & r_\mu \leq a \\ V_0, & r_\mu > a \end{cases} \quad (4.3)$$

değerlerini alabiliyorsa kuantum nokta yapı sonlu bir potansiyel engeli ile sınırlandırılmıştır. Burada a , kuantum nokta yapının yarıçapıdır.



Şekil 4.6. Sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış kuantum nokta yapısı

Kuantum nokta yapıların uzaysal orbitalleri

$$\phi_\mu = \phi_\mu^{r \leq a} + \phi_\mu^{r > a} \quad (4.4)$$

şeklinde ifade edilir. $\phi_\mu^{r \leq a}$ nokta yapının içinde, $\phi_\mu^{r > a}$ nokta yapının dışında tanımlı uzaysal orbitalleridir. Sonsuz kuyu potansiyellerinde $\phi_\mu^{r > a} = 0$ alınır. Bu fonksiyonlar STO'ların lineer kombinasyonu şeklinde yazılırsa Denk. (4.4)

$$\phi_\mu = \sum_{i=1}^{\sigma_\mu} c_{\mu i} \chi_{i\mu}^{r \leq a} + \sum_{i=1}^{\sigma_\mu} d_{\mu i} \chi_{i\mu}^{r > a} \quad (4.5)$$

halini alır. Burada $c_{\mu i}$ ve $d_{\mu i}$ sırasıyla nokta yapının içindeki ve dışındaki açılım katsayıları, σ_μ ise baz fonksiyonlarının sayısıdır.

Atomik sistemlerden farklı olarak kuantum nokta yapıların dalga fonksiyonlarının normalizasyon ve diklik koşullarının yanı sıra sınır koşullarını da sağlaması gerekir (BenDaniel ve Duke, 1966). Bu koşullar nokta yapının uzaysal orbitalleri üzerinden sınırlama potansiyelinin sonsuz olması durumunda,

$$\phi_\mu^{r \leq a} \Big|_{r=a} = 0 \quad (4.6)$$

şeklinde, sonlu olması durumunda

$$\phi_\mu^{r \leq a} \Big|_{r=a} = \phi_\mu^{r > a} \Big|_{r=a} \quad (4.7)$$

$$\frac{1}{m_{r \leq a}^*} \frac{d\phi_\mu^{r \leq a}}{dr} \Big|_{r=a} = \frac{1}{m_{r > a}^*} \frac{d\phi_\mu^{r > a}}{dr} \Big|_{r=a} \quad (4.8)$$

şeklinde ifade edilir.

Uzaysal orbitallerin spin fonksiyonları ile çarpımı spin orbitallerini (Denk. 3.7.) verir. Spin orbitalleri kullanılarak da enerji seviyelerine karşılık gelen dalga fonksiyonları oluşturulur. Bu fonksiyonlar kullanılarak yazılan $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ integrali sistemin enerji seviyelerine karşılık gelir. Bu integral hem nokta yapı içinde hem de nokta yapı dışında ortamın dielektrik sabitinin boşluğun dielektrik sabitine ve elektronun etkin kütlelerinin

serbest elektronun kütlesine eşit olduğu kabul edilerek Condon-Slater kuralları yardımıyla sadeleştirilirse a.u'de

$$\begin{aligned}
 E = \sum_{\mu}^N \left\langle \psi_{\mu} \left| -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{r_1} + V_c(r_1) \right| \psi_{\mu} \right\rangle \\
 + \frac{1}{2} \sum_{\mu=1} \sum_{v=1} \left[\left\langle \psi_{\mu}(r_1) \psi_v(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_{\mu}(r_1) \psi_v(r_2) \right\rangle \right. \\
 \left. - \left\langle \psi_{\mu}(r_1) \psi_v(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_v(r_1) \psi_{\mu}(r_2) \right\rangle \right] \quad (4.9)
 \end{aligned}$$

şeklinde ifade edilir. Buradaki ilk ifade elektronların hareketinden kaynaklanan kinetik enerjiye, ikinci ifade elektronlar ve safsızlık yükü arasındaki etkileşmeden kaynaklanan nükleer potansiyel enerjiye, üçüncü ifade sistemi sınırlandıran potansiyelden kaynaklanan sınırlama potansiyel enerjisine karşılık gelir. Son ikili toplam içindeki ifadeler de sırasıyla elektronlar arasındaki etkileşmeden kaynaklanan Coulomb ve exchange enerjilerini gösterir. Eğer bu enerji ifadeleri bilinirse nokta yapının ortalama enerjisi ve orbital enerjileri; ortalama enerjisi bilinirse enerji seviyeleri ve virial katsayıları hesaplanabilir.

4.2.2. Kinetik enerji

Bir kuantum nokta yapının μ . elektronunun kinetik enerjisi

$$\begin{aligned}
 \left\langle \psi_{\mu} \left| -\frac{1}{2} \nabla^2 \right| \psi_{\mu} \right\rangle = \sum_{i=1}^{\sigma_{\mu}} \sum_{j=1}^{\sigma_v} c_{\mu i} c_{\mu j} \left\langle \chi_{\mu i}^{r \leq a} \left| -\frac{\nabla^2}{2} \right| \chi_{\mu j}^{r \leq a} \right\rangle \\
 + \sum_{i=1}^{\sigma_{\mu}} \sum_{j=1}^{\sigma_v} d_{\mu i} d_{\mu j} \left\langle \chi_{\mu i}^{r > a} \left| -\frac{\nabla^2}{2} \right| \chi_{\mu j}^{r > a} \right\rangle \quad (4.10)
 \end{aligned}$$

şeklinde STO'lar kullanılarak ifade edilir. Bra-ket notasyonu içindeki ifadede STO'lar yerine konulur ve küresel koordinatlardaki Laplace operatörü kullanılarak gerekli düzenlemeler yapılırsa tek elektronun kinetik enerjisi

$$\begin{aligned}
\langle \psi_\mu | -\frac{1}{2} \nabla^2 | \psi_\mu \rangle &= \sum_{i=1}^{\sigma_\mu} \sum_{j=1}^{\sigma_\mu} c_{\mu i} c_{\mu j} \left\{ \left(\frac{l_{\mu j}(l_{\mu j} + 1) - n_{\mu j}(n_{\mu j} - 1)}{2} \right) \right. \\
&\times \left[\frac{(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j})^2}{(n_{\mu i} + n_{\mu j})(n_{\mu i} + n_{\mu j} - 1)} S_{\mu i, \mu j}^a + \frac{e^{-(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j})a} a^{n_{\mu i} + n_{\mu j} - 1}}{n_{\mu i} + n_{\mu j} - 1} \right. \\
&\times \left(1 + \frac{a(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j})}{n_{\mu i} + n_{\mu j}} \right) \left. + \zeta_{\mu j} n_{\mu j} \left[\frac{\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j}}{n_{\mu i} + n_{\mu j}} S_{\mu i, \mu j}^a + \frac{e^{-(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j})a} a^{n_{\mu i} + n_{\mu j}}}{n_{\mu i} + n_{\mu j}} \right] \right. \\
&\left. \left. - \frac{\zeta_{\mu j}^2}{2} S_{\mu i, \mu j}^a \right\} + \sum_{i=1}^{\sigma_\mu} \sum_{j=1}^{\sigma_\mu} d_{\mu i} d_{\mu j} \right. \\
&\times \left\{ \left[\frac{(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j})^2}{(n_{\mu i} + n_{\mu j})(n_{\mu i} + n_{\mu j} - 1)} S_{\mu i, \mu j}^\infty - \frac{e^{-(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j})a} a^{n_{\mu i} + n_{\mu j} - 1}}{n_{\mu i} + n_{\mu j} - 1} \right. \right. \\
&\left. + \zeta_{\mu j} n_{\mu j} \left[\frac{\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j}}{n_{\mu i} + n_{\mu j}} S_{\mu i, \mu j}^\infty - \frac{e^{-(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j})a} a^{n_{\mu i} + n_{\mu j}}}{n_{\mu i} + n_{\mu j}} \right] \right. \\
&\left. \times \left(1 + \frac{a(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j})}{n_{\mu i} + n_{\mu j}} \right) \right] - \frac{\zeta_{\mu i}^2}{2} S_{\mu i, \mu j}^\infty \left. \right\} \tag{4.11}
\end{aligned}$$

şeklinde ifade edilir. Burada $S_{\mu i, \mu j}^a$ ve $S_{\mu i, \mu j}^\infty$ sırasıyla nokta yapının içinde ve dışında tanımlı baz fonksiyonlarının örtüşme integralidir⁵.

4.2.3. Nükleer potansiyel enerji

Kuantum nokta yapının μ . elektronunun nükleer potansiyel enerjisi STO'lar üzerinden

$$\langle \psi_\mu | -\frac{Z}{r_1} | \psi_\mu \rangle = \sum_{i=1}^{\sigma_\mu} \sum_{j=1}^{\sigma_\mu} c_{\mu i} c_{\mu j} \langle \chi_{\mu i}^{r \leq a} | -\frac{Z}{r_1} | \chi_{\mu j}^{r \leq a} \rangle$$

⁵ $S_{\mu i, \mu j}^a = \int_0^a r^{n_{\mu i} + n_{\mu j}} e^{-(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j})r} dr$
 $S_{\mu i, \mu j}^\infty = \int_a^\infty r^{n_{\mu i} + n_{\mu j}} e^{-(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j})r} dr$

$$+ \sum_{i=1}^{\sigma_{\mu}} \sum_{j=1}^{\sigma_{\mu}} d_{\mu i} d_{\mu j} \left\langle \chi_{\mu i}^{r>a} \left| -\frac{Z}{r_1} \right| \chi_{\mu j}^{r>a} \right\rangle \quad (4.12)$$

şeklinde verilir. STO'lar yerine konulup gerekli düzenlemeler yapılırsa

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_{\mu} \left| -\frac{Z}{r_1} \right| \psi_{\mu} \right\rangle = & - \sum_{i=1}^{\sigma_{\mu}} \sum_{j=1}^{\sigma_{\mu}} c_{\mu i} c_{\mu j} Z \left(\frac{\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j}}{n_{\mu i} + n_{\mu j}} S_{\mu i, \mu j}^a + \frac{e^{-(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j})a} a^{n_{\mu i} + n_{\mu j}}}{n_{\mu i} + n_{\mu j}} \right) \\ & - \sum_{i=1}^{\sigma_{\mu}} \sum_{j=1}^{\sigma_{\mu}} d_{\mu i} d_{\mu j} Z \left(\frac{\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j}}{n_{\mu i} + n_{\mu j}} S_{\mu i, \mu j}^{\infty} - \frac{e^{-(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\mu j})a} a^{n_{\mu i} + n_{\mu j}}}{n_{\mu i} + n_{\mu j}} \right) \end{aligned} \quad (4.13)$$

halini alır.

4.2.4. Sınırlama potansiyel enerjisi

Kuantum nokta yapının μ . elektronunun sistemi sınırlandıran potansiyelden dolayı maruz kaldığı sınırlama potansiyel

$$\begin{aligned} \left\langle \psi_{\mu} \left| V_c(r) \right| \psi_{\mu} \right\rangle = & V_C^{r \leq a} \sum_{i=1}^{\sigma_i} \sum_{j=1}^{\sigma_j} c_{\mu i} c_{\mu j} \left\langle \chi_{\mu i}^{r \leq a} \left| \chi_{\mu j}^{r \leq a} \right\rangle \right. \\ & + V_C^{r > a} \sum_{i=1}^{\sigma_i} \sum_{j=1}^{\sigma_j} d_{\mu i} d_{\mu j} \left\langle \chi_{\mu i}^{r > a} \left| \chi_{\mu j}^{r > a} \right\rangle \end{aligned} \quad (4.14)$$

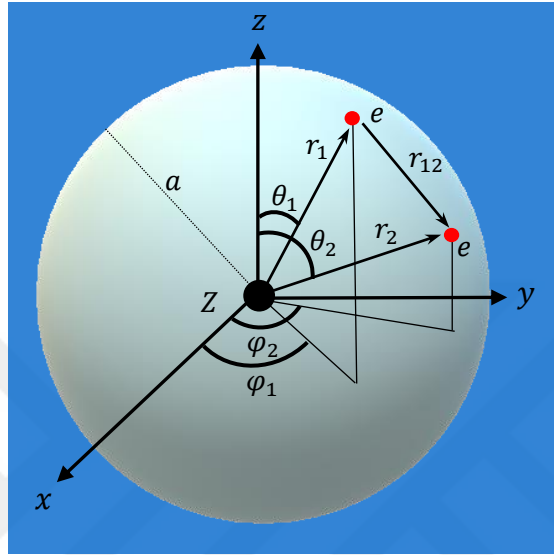
şeklinde verilir. Bu denklem STO'lar ve örtüşme integralleri kullanılarak

$$\left\langle \psi_{\mu} \left| V_c(r) \right| \psi_{\mu} \right\rangle = V_C^{r \leq a} \sum_{i=1}^{\sigma_i} \sum_{j=1}^{\sigma_j} c_{\mu i} c_{\mu j} S_{\mu i, \mu j}^a + V_C^{r > a} \sum_{i=1}^{\sigma_i} \sum_{j=1}^{\sigma_j} d_{\mu i} d_{\mu j} S_{\mu i, \mu j}^a \quad (4.15)$$

şeklinde yeniden ifade edilebilir.

4.2.5. Coulomb ve exchange enerjisi

Küresel koordinat sisteminin orijinine yerleştirilmiş Z safsızlığı ve N tane elektronun oluşturduğu bir kuantum nokta yapının (Şekil 4.7.) herhangi iki elektronu arasındaki elektriksel potansiyel enerji



Şekil 4.7. İki elektronlu küresel kuantum nokta yapısı

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \psi_{\mu}(r_1) \psi_{\nu}(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_{\mu}(r_1) \psi_{\nu}(r_2) \right\rangle - \left\langle \psi_{\mu}(r_1) \psi_{\nu}(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_{\nu}(r_1) \psi_{\mu}(r_2) \right\rangle \\
 &= \int_{r_2=0}^a \int_{r_1=0}^a \phi_{\mu}^{r \leq a}(r_1) \phi_{\nu}^{r \leq a}(r_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_{\mu}^{r \leq a}(r_1) \phi_{\nu}^{r \leq a}(r_2) r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \\
 &\quad - \delta_{m_{s_{\mu}} m_{s_{\nu}}} \int_{r_2=0}^a \int_{r_1=0}^a \phi_{\mu}^{r \leq a}(r_1) \phi_{\nu}^{r \leq a}(r_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_{\nu}^{r \leq a}(r_1) \phi_{\mu}^{r \leq a}(r_2) r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \\
 &\quad + \int_{r_2=a}^{\infty} \int_{r_1=a}^{\infty} \phi_{\mu}^{r > a}(r_1) \phi_{\nu}^{r > a}(r_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_{\mu}^{r > a}(r_1) \phi_{\nu}^{r > a}(r_2) r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \\
 &\quad - \delta_{m_{s_{\mu}} m_{s_{\nu}}} \int_{r_2=a}^{\infty} \int_{r_1=0}^{\infty} \phi_{\mu}^{r > a}(r_1) \phi_{\nu}^{r > a}(r_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_{\nu}^{r > a}(r_1) \phi_{\mu}^{r > a}(r_2) r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{r_2=a}^{\infty} \int_{r_1=0}^a \phi_{\mu}^{r \leq a}(r_1) \phi_{\nu}^{r > a}(r_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_{\mu}^{r \leq a}(r_1) \phi_{\nu}^{r > a}(r_2) r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \\
& - \delta_{m_{s\mu} m_{s\nu}} \int_{r_2=a}^{\infty} \int_{r_1=0}^a \phi_{\mu}^{r \leq a}(r_1) \phi_{\nu}^{r > a}(r_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_{\nu}^{r \leq a}(r_1) \phi_{\mu}^{r > a}(r_2) r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \\
& + \int_{r_2=0}^a \int_{r_1=a}^{\infty} \phi_{\mu}^{r \leq a}(r_1) \phi_{\nu}^{r > a}(r_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_{\mu}^{r > a}(r_1) \phi_{\nu}^{r > a}(r_2) r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \\
& - \delta_{m_{s\mu} m_{s\nu}} \int_{r_2=0}^a \int_{r_1=a}^{\infty} \phi_{\mu}^{r > a}(r_1) \phi_{\nu}^{r \leq a}(r_2) \frac{1}{r_{12}} \phi_{\nu}^{r > a}(r_1) \phi_{\mu}^{r \leq a}(r_2) r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \quad (4.16)
\end{aligned}$$

integralleri ile hesaplanır. Denklemin sol tarafındaki ilk ifade Coulomb enerjisine, ikinci ifade exchange enerjisine karşılık gelir.

Kosinüs teoremi, binom açılımı ve küresel harmonik toplam teoremi⁶ kullanılarak

$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{q=-k}^k \frac{4\pi}{2k+1} (-1)^q Y_{k,-q}(\theta_1, \varphi_1) Y_{k,q}(\theta_2, \varphi_2) \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}}$ (Cowan, 1981) şeklinde verilen iki elektron operatörü Denk. (4.16)'de yerine yazılır ve uzaysal orbitaller Denk. (4.5)'e göre açılırsa;

$$\begin{aligned}
& \left\langle \psi_{\mu}(r_1) \psi_{\nu}(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_{\mu}(r_1) \psi_{\nu}(r_2) \right\rangle - \left\langle \psi_{\mu}(r_1) \psi_{\nu}(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_{\nu}(r_1) \psi_{\mu}(r_2) \right\rangle \\
& = \sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} c_{\mu i}^* c_{\nu j} c_{\mu t}^* c_{\nu u} \sum_k I_{i\zeta, i\zeta}^k(\mu i, \nu j, \mu t, \nu u) \sum_{q=-k}^k (-1)^q \delta_{q, m_{l_{\mu}} - m_{l_{\mu}}} \delta_{q, m_{l_{\nu}} - m_{l_{\nu}}} \\
& \times C^k(l_{\mu} m_{l_{\mu}}, l_{\mu} m_{l_{\mu}}) \times C^k(l_{\nu} m_{l_{\nu}}, l_{\nu} m_{l_{\nu}}) - \delta_{m_{s\mu} m_{s\nu}} \sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} c_{\mu i}^* c_{\nu j} c_{\nu t}^* c_{\mu u} \\
& \times \sum_{k'} I_{i\zeta, i\zeta}^{k'}(\mu i, \nu j, \nu t, \mu u) \sum_{q=-k'}^{k'} (-1)^q \delta_{q, m_{l_{\mu}} - m_{l_{\mu}}} \delta_{q, m_{l_{\nu}} - m_{l_{\nu}}}
\end{aligned}$$

⁶ $P_k(\cos \omega) = \frac{4\pi}{2k+1} \sum_{q=-k}^k (-1)^q Y_{k,-q}(\theta_1, \varphi_1) Y_{k,q}(\theta_2, \varphi_2)$

$$\begin{aligned}
& \times \left(C^{k'}(l_\mu m_{l_\mu}, l_v m_{l_v}) \right)^2 + \sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} d_{\mu i}^* d_{vj} d_{\mu t}^* d_{vu} \\
& \times \sum_k I_{d\iota\varsigma, d\iota\varsigma}^k(\mu i, vj, \mu t, vu) \sum_{q=-k}^k (-1)^q \delta_{q, m_{l_\mu} - m_{l_\mu}} \delta_{q, m_{l_v} - m_{l_v}} C^k(l_\mu m_{l_\mu}, l_\mu m_{l_\mu}) \\
& \times C^k(l_v m_{l_v}, l_v m_{l_v}) - \delta_{m_{s_\mu} m_{s_v}} \sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} d_{\mu i}^* d_{vj} d_{vt}^* d_{\mu u} \sum_{k'} I_{d\iota\varsigma, d\iota\varsigma}^{k'}(\mu i, vj, vt, \mu u) \\
& \times \sum_{q=-k'}^{k'} (-1)^q \delta_{q, m_{l_\mu} - m_{l_\mu}} \delta_{q, m_{l_v} - m_{l_v}} \left(C^{k'}(l_\mu m_{l_\mu}, l_v m_{l_v}) \right)^2 \\
& + \sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} c_{\mu i}^* d_{vj} c_{\mu t}^* d_{vu} \sum_k I_{i\varsigma, d\iota\varsigma}^k(\mu i, vj, \mu t, vu) \sum_{q=-k}^k (-1)^q \delta_{q, m_{l_\mu} - m_{l_\mu}} \delta_{q, m_{l_v} - m_{l_v}} \\
& \times C^k(l_\mu m_{l_\mu}, l_\mu m_{l_\mu}) C^k(l_v m_{l_v}, l_v m_{l_v}) - \delta_{m_{s_\mu} m_{s_v}} \sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} c_{\mu i}^* d_{vj} c_{vt}^* d_{\mu u} \\
& \times \sum_{k'} I_{i\varsigma, d\iota\varsigma}^{k'}(\mu i, vj, vt, \mu u) \sum_{q=-k'}^{k'} (-1)^q \delta_{q, m_{l_\mu} - m_{l_\mu}} \delta_{q, m_{l_v} - m_{l_v}} \\
& \times \left(C^{k'}(l_\mu m_{l_\mu}, l_v m_{l_v}) \right)^2 + \sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} d_{\mu i}^* c_{vj} d_{\mu t}^* c_{vu} \sum_k I_{d\iota\varsigma, i\varsigma}^k(\mu i, vj, \mu t, vu) \\
& \times \sum_{q=-k}^k (-1)^q \delta_{q, m_{l_\mu} - m_{l_\mu}} \delta_{q, m_{l_v} - m_{l_v}} C^k(l_\mu m_{l_\mu}, l_\mu m_{l_\mu}) C^k(l_v m_{l_v}, l_v m_{l_v}) \\
& - \delta_{m_{s_\mu} m_{s_v}} \sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} d_{\mu i}^* c_{vj} d_{vt}^* c_{\mu u} \sum_{k'} I_{d\iota\varsigma, i\varsigma}^{k'}(\mu i, vj, vt, \mu u) \\
& \times \sum_{q=-k'}^{k'} (-1)^q \delta_{q, m_{l_\mu} - m_{l_\mu}} \delta_{q, m_{l_v} - m_{l_v}} \left(C^{k'}(l_\mu m_{l_\mu}, l_v m_{l_v}) \right)^2
\end{aligned} \tag{4.17}$$

ifadesi elde edilir. Burada $C^k(lm, l'm')$ 3j sembolleri ile ifade edilen Gaunt sayılarıdır⁷.

$I_{i\zeta, i\zeta}^k(\mu i, v j, \kappa t, \rho u)$, $I_{d\zeta, d\zeta}^k(\mu i, v j, \kappa t, \rho u)$, $I_{i\zeta, d\zeta}^k(\mu i, v j, \kappa t, \rho u)$ ve $I_{d\zeta, i\zeta}^k(\mu i, v j, \kappa t, \rho u)$

integralleri ise tam Gama⁸ ve tam olmayan Gama⁹ fonksiyonları yardımıyla sırasıyla;

$$\begin{aligned}
 & I_{i\zeta, i\zeta}^k(\mu i, v j, \kappa t, \rho u) \\
 &= \int_{r_2=0}^a \int_{r_1=0}^a \frac{r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} r_1^{n_{\mu i}+n_{\kappa t}} r_2^{n_{v j}+n_{\rho u}} e^{-(\zeta_{\mu i}+\zeta_{\kappa t})r_1} e^{-(\zeta_{v j}+\zeta_{\rho u})r_2} dr_1 dr_2 \\
 &= \frac{(n_{\mu i} + n_{\kappa t} + k)!}{(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\kappa t})^{n_{\mu i}+n_{\kappa t}+k+1}} \left[\frac{\Upsilon(n_{v j} + n_{\rho u} - k, (\zeta_{v j} + \zeta_{\rho u})a)}{(\zeta_{v j} + \zeta_{\rho u})^{n_{v j}+n_{\rho u}-k}} \right. \\
 &\quad - \frac{1}{(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\kappa t} + \zeta_{v j} + \zeta_{\rho u})^{n_{v j}+n_{\rho u}-k}} \sum_{s_1=0}^{n_{\mu i}+n_{\kappa t}+k} \left(\frac{\zeta_{\mu i} + \zeta_{\kappa t}}{\zeta_{\mu i} + \zeta_{\kappa t} + \zeta_{v j} + \zeta_{\rho u}} \right)^{s_1} \frac{1}{s_1!} \\
 &\quad \times \Upsilon(n_{v j} + n_{\rho u} + s_1 - k, (\zeta_{\mu i} + \zeta_{\kappa t} + \zeta_{v j} + \zeta_{\rho u})a) \Big] \\
 &\quad + \frac{\Upsilon(n_{\mu i} + n_{\kappa t} - k, (\zeta_{\mu i} + \zeta_{\kappa t})a) \Upsilon(n_{v j} + n_{\rho u} + k + 1, (\zeta_{v j} + \zeta_{\rho u})a)}{(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\kappa t})^{n_{\mu i}+n_{\kappa t}-k} (\zeta_{v j} + \zeta_{\rho u})^{n_{v j}+n_{\rho u}+k+1}} \\
 &\quad - \frac{(n_{\mu i} + n_{\kappa t} - k - 1)!}{(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\kappa t})^{n_{\mu i}+n_{\kappa t}-k}} \left[\frac{\Upsilon(n_{v j} + n_{\rho u} + k + 1, (\zeta_{v j} + \zeta_{\rho u})a)}{(\zeta_{v j} + \zeta_{\rho u})^{n_{v j}+n_{\rho u}+k+1}} \right. \\
 &\quad - \frac{1}{(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\kappa t} + \zeta_{v j} + \zeta_{\rho u})^{n_{v j}+n_{\rho u}+k+1}} \sum_{s_2=0}^{n_{\mu i}+n_{\kappa t}-k-1} \left(\frac{\zeta_{\mu i} + \zeta_{\kappa t}}{\zeta_{\mu i} + \zeta_{\kappa t} + \zeta_{v j} + \zeta_{\rho u}} \right)^{s_2} \frac{1}{s_2!} \\
 &\quad \times \Upsilon(n_{v j} + n_{\rho u} + k + 1 + U_2, (\zeta_{\mu i} + \zeta_{\kappa t} + \zeta_{v j} + \zeta_{\rho u})a) \Big] \tag{4.18}
 \end{aligned}$$

⁷ $c^k(lm, l'm') = \delta_{q, m-m'} (-1)^{-m} [l, l']^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} l & k & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & k & l' \\ -m & q & m \end{pmatrix}$

⁸ $\Gamma(n, a, \zeta) = \int_a^\infty e^{-\zeta r} r^{n-1} dr = \zeta^{-n} \Gamma(n, x) = (n-1)! \zeta^{-n} e^{-\zeta a} \sum_{S=0}^{n-1} \frac{(\zeta a)^S}{S!}$

⁹ $\Upsilon(n, a, \zeta) = \int_0^a e^{-\zeta t} r^{n-1} dr = \zeta^{-n} \Upsilon(n, x) = (n-1)! \zeta^{-n} \left(1 - e^{-\zeta a} \sum_{S=0}^{n-1} \frac{(\zeta a)^S}{S!} \right)$

$$\begin{aligned}
& I_{d\mathfrak{I}\mathfrak{S}, d\mathfrak{I}\mathfrak{S}}^k((\mu i, vj, kt, \rho u)) \\
&= \int_{r_2=a}^{\infty} \int_{r_1=a}^{\infty} \frac{r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} r_1^{n_{\mu i}+n_{kt}} r_2^{n_{vj}+n_{\rho u}} e^{-(\zeta_{\mu i}+\zeta_{kt})r_1} e^{-(\zeta_{vj}+\zeta_{\rho u})r_2} dr_1 dr_2 \\
&= \sum_{s_3=0}^{n_{\mu i}+n_{kt}+k} \frac{(n_{\mu i}+n_{kt}+k)!}{s_3! (\zeta_{\mu i}+\zeta_{kt})^{n_{\mu i}+n_{kt}+k+1-s_3}} \\
&\quad \times \left(\frac{a^{s_3} e^{-(\zeta_{\mu i}+\zeta_{kt})a} \Gamma(n_{vj}+n_{\rho u}-k, (\zeta_{vj}+\zeta_{\rho u})a)}{(\zeta_{vj}+\zeta_{\rho u})^{n_{vj}+n_{\rho u}-k}} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\Gamma(n_{vj}+n_{\rho u}-k+s_3, (\zeta_{\mu i}+\zeta_{kt}+\zeta_{vj}+\zeta_{\rho u})a)}{(\zeta_{\mu i}+\zeta_{kt}+\zeta_{vj}+\zeta_{\rho u})^{n_{vj}+n_{\rho u}-k+s_3}} \right) \\
&\quad + \sum_{s_4=0}^{n_{\mu i}+n_{kt}-k-1} \frac{(n_{\mu i}+n_{kt}-k-1)!}{s_4! (\zeta_{\mu i}+\zeta_{kt})^{n_{\mu i}+n_{kt}-k-s_4}} \\
&\quad \times \frac{\Gamma(n_{vj}+n_{\rho u}+k+s_4+1, (\zeta_{\mu i}+\zeta_{kt}+\zeta_{vj}+\zeta_{\rho u})a)}{(\zeta_{\mu i}+\zeta_{kt}+\zeta_{vj}+\zeta_{\rho u})^{n_{vj}+n_{\rho u}+k+s_4+1}} \tag{4.19}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& I_{i\mathfrak{C}, d\mathfrak{I}\mathfrak{S}}^k(\mu i, vj, kt, \rho u) = \\
&= \int_{r_2=a}^{\infty} \int_{r_1=0}^a \frac{r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} r_1^{n_{\mu i}+n_{kt}} r_2^{n_{vj}+n_{\rho u}} e^{-(\zeta_{\mu i}+\zeta_{kt})r_1} e^{-(\zeta_{vj}+\zeta_{\rho u})r_2} dr_1 dr_2 \\
&= \frac{\Upsilon(n_{\mu i}+n_{kt}+k+1, (\zeta_{\mu i}+\zeta_{kt})a) \Gamma(n_{vj}+n_{\rho u}-k, (\zeta_{vj}+\zeta_{\rho u})a)}{(\zeta_{\mu i}+\zeta_{kt})^{n_{\mu i}+n_{kt}+k+1} (\zeta_{vj}+\zeta_{\rho u})^{n_{vj}+n_{\rho u}-k}} \tag{4.20}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& I_{d\mathfrak{I}\mathfrak{S}, i\mathfrak{C}}^k(\mu i, vj, kt, \rho u) \\
&= \int_{r_2=0}^a \int_{r_1=a}^{\infty} \frac{r_{\leq}^k}{r_{>}^{k+1}} r_1^{n_{\mu i}+n_{kt}} r_2^{n_{vj}+n_{\rho u}} e^{-(\zeta_{\mu i}+\zeta_{kt})r_1} e^{-(\zeta_{vj}+\zeta_{\rho u})r_2} dr_1 dr_2
\end{aligned}$$

$$= \frac{\Gamma(n_{\mu i} + n_{\kappa t} - k, (\zeta_{\mu i} + \zeta_{\kappa t})a) \Upsilon(n_{vj} + n_{\rho u} + k + 1, (\zeta_{vj} + \zeta_{\rho u})a)}{(\zeta_{\mu i} + \zeta_{\kappa t})^{n_{\mu i} + n_{\kappa t} - k} (\zeta_{vj} + \zeta_{\rho u})^{n_{vj} + n_{\rho u} + k + 1}} \quad (4.21)$$

şeklinde ifade edilir. Ayrıca Dirac delta fonksiyonları nedeniyle q sadece 0 değerini alabileceğinden Denk. (4.17)

$$\begin{aligned} & \left\langle \psi_{\mu}(r_1) \psi_v(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_{\mu}(r_1) \psi_v(r_2) \right\rangle - \left\langle \psi_{\mu}(r_1) \psi_v(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_v(r_1) \psi_{\mu}(r_2) \right\rangle \\ &= \sum_k \left\{ \left[\sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} c_{\mu i}^* c_{vj} c_{\mu t}^* c_{vu} I_{i\zeta, i\zeta}^k(\mu i, vj, \mu t, vu) \right] \right. \\ &+ \left[\sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} d_{\mu i}^* d_{vj} d_{\mu t}^* d_{vu} I_{d\zeta, d\zeta}^k(\mu i, vj, \mu t, vu) \right] \\ &+ \left[\sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} c_{\mu i}^* d_{vj} c_{\mu t}^* d_{vu} I_{i\zeta, d\zeta}^k(\mu i, vj, \mu t, vu) \right] \\ &+ \left. \left[\sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} d_{\mu i}^* c_{vj} d_{\mu t}^* c_{vu} I_{d\zeta, i\zeta}^k(\mu i, vj, \mu t, vu) \right] \right\} C^k(l_{\mu} m_{l_{\mu}}, l_{\mu} m_{l_{\mu}}) C^k(l_v m_{l_v}, l_v m_{l_v}) \\ &- \delta_{m_{s_{\mu}} m_{s_v}} \sum_{k'} \left\{ \left[\sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} c_{\mu i}^* c_{vj} c_{vt}^* c_{\mu u} I_{i\zeta, i\zeta}^{k'}(\mu i, vj, vt, \mu u) \right] \right. \\ &- \left[\sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} d_{\mu i}^* d_{vj} d_{vt}^* d_{\mu u} I_{d\zeta, d\zeta}^{k'}(\mu i, vj, vt, \mu u) \right] \\ &- \left[\sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} c_{\mu i}^* d_{vj} c_{vt}^* d_{\mu u} I_{i\zeta, d\zeta}^{k'}(\mu i, vj, vt, \mu u) \right] \\ &- \left. \left[\sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} d_{\mu i}^* c_{vj} d_{vt}^* c_{\mu u} I_{d\zeta, i\zeta}^{k'}(\mu i, vj, vt, \mu u) \right] \right\} \left(C^{k'}(l_{\mu} m_{l_{\mu}}, l_v m_{l_v}) \right)^2 \quad (4.22) \end{aligned}$$

şeklinde sadeleştirilebilir. Burada köşeli parantez içindeki ifadeler Coulomb ve exchange potansiyel enerjilerinin radyal kısmını oluşturan Slater integralidir. Bu integraller sırasıyla $F^k(\mu\nu)$ ve $G^{k'}(\mu\nu)$ şeklinde verilir ve ele alınan elektronların kuantum nokta yapıda bulunduğu yerler gözetilerek

$$\begin{aligned}
 F^k(\mu\nu) = & \sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} [c_{\mu i}^* c_{\nu j} c_{\mu t}^* c_{\nu u} I_{i\zeta, i\zeta}^k(\mu i, \nu j, \mu t, \nu u) \\
 & + d_{\mu i}^* d_{\nu j} d_{\mu t}^* d_{\nu u} I_{d\zeta, d\zeta}^k(\mu i, \nu j, \mu t, \nu u) \\
 & + c_{\mu i}^* d_{\nu j} c_{\mu t}^* d_{\nu u} I_{i\zeta, d\zeta}^k(\mu i, \nu j, \mu t, \nu u) \\
 & + d_{\mu i}^* c_{\nu j} d_{\mu t}^* c_{\nu u} I_{d\zeta, i\zeta}^k(\mu i, \nu j, \mu t, \nu u)] \quad (4.23)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 G^{k'} = & \sum_{i,j,t,u=1}^{\sigma} [c_{\mu i}^* c_{\nu j} c_{\nu t}^* c_{\mu u} I_{i\zeta, i\zeta}^{k'}(\mu i, \nu j, \nu t, \mu u) \\
 & + d_{\mu i}^* d_{\nu j} d_{\nu t}^* d_{\mu u} I_{d\zeta, d\zeta}^{k'}(\mu i, \nu j, \nu t, \mu u) \\
 & + c_{\mu i}^* d_{\nu j} c_{\nu t}^* d_{\mu u} I_{i\zeta, d\zeta}^{k'}(\mu i, \nu j, \nu t, \mu u) \\
 & + d_{\mu i}^* c_{\nu j} d_{\nu t}^* c_{\mu u} I_{d\zeta, i\zeta}^{k'}(\mu i, \nu j, \nu t, \mu u)] \quad (4.24)
 \end{aligned}$$

şeklinde yazılır. Sonsuz sınırlama potansiyeline maruz kalan nokta yapılarda elektronlar nokta yapının dışına çıkamayacağı için Denk. (4.23) ve Denk. (4.24)'ün sadece ilk kısımları kalır. Sonuç olarak herhangi iki elektron arasındaki elektriksel potansiyel enerji

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \psi_{\mu}(r_1) \psi_{\nu}(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_{\mu}(r_1) \psi_{\nu}(r_2) \right\rangle - \left\langle \psi_{\mu}(r_1) \psi_{\nu}(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_{\nu}(r_1) \psi_{\mu}(r_2) \right\rangle \\
 & = \sum_k F^k(\mu\nu) C^k(l_{\mu} m_{l_{\mu}}, l_{\mu} m_{l_{\mu}}) C^k(l_{\nu} m_{l_{\nu}}, l_{\nu} m_{l_{\nu}}) \\
 & - \delta_{m_{s_{\mu}} m_{s_{\nu}}} \sum_{k'} G^{k'}(\mu\nu) [C^{k'}(l_{\mu} m_{l_{\mu}}, l_{\nu} m_{l_{\nu}})]^2 \quad (4.25)
 \end{aligned}$$

şeklinde verilir. Burada $C^k(l_\mu m_{l_\mu}, l_\nu m_{l_\nu})$ ifadesi için üçgen şartı sağlanmalıdır ve ayrıca $l_\mu + k + l_\nu$ çift sayı olmalıdır. Bu nedenle

$$\begin{aligned} k &= 0, 2, 4, \dots, \min(2l_i, 2l_j), \\ k' &= |l_1 - l_2|, |l_1 - l_2| + 2, \dots, l_1 + l_2 \end{aligned} \quad (4.26)$$

değerlerini alabilir.

4.2.6. Ortalama enerji

Kuantum nokta yapının ortalama enerjisine ve herhangi bir enerji seviyesine elektronik kinetik enerji, nükleer potansiyel ve sınırlama potansiyel enerjisi aynı katkıyı verir. Bu nedenle herhangi bir konfigürasyonun ortalama enerjisi hesaplanırken yalnızca Coulomb ve exchange potansiyel enerjilerinin ortalaması alınır.

İki elektron arasındaki ortalama elektriksel potansiyel enerji

$$\begin{aligned} & \left(\left\langle \psi_\mu(r_1) \psi_\nu(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_\mu(r_1) \psi_\nu(r_2) \right\rangle - \left\langle \psi_\mu(r_1) \psi_\nu(r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi_\nu(r_1) \psi_\mu(r_2) \right\rangle \right)_{ort} \\ &= \left[F^0(\mu\nu) - \frac{1}{2} \sum_{k'=0}^{\infty} G^{k'}(\mu\nu) \begin{pmatrix} l_\mu & k' & l_\nu \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \right] (1 - \delta_{\mu\nu}) \\ &+ \left[F^0(\mu\nu) - \frac{2l_\nu + 1}{4l_\nu + 1} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_\mu & k & l_\nu \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^k(\mu, \nu) \right] \delta_{\mu\nu} \end{aligned} \quad (4.27)$$

şeklinde verilir. Burada denklemin sağ tarafındaki ilk ifade elektronların özdeş olmadığı duruma, ikinci ifade ise özdeş olduğu duruma karşılık gelir. Bu durumda bir konfigürasyonun ortalama enerjisi

$$\begin{aligned} E_{av} &= \sum_a \left\{ q_a \left\langle \Phi_a \left| -\frac{\nabla^2}{2} - \frac{Z}{r} \pm V_0 \right| \Phi_a \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + \frac{q_a}{2} (q_a - 1) \left[F^0(a, a) - \frac{2l_a + 1}{4l_a + 1} \sum_{k'>0} \begin{pmatrix} l_a & k' & l_a \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^{k'}(a, a) \right] \right\} \end{aligned}$$

$$+ \sum_{b>a} q_a q_b \left[F^0(a, b) - \frac{1}{2} \sum_{k'} \begin{pmatrix} l_a & k' & l_b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^{k'}(a, b) \right] \quad (4.28)$$

şeklinde ifade edilir. Burada ϕ_a ve ϕ_b kuantum nokta yapının herhangi iki uzaysal orbitalini, q_a ve q_b ise a ve b alt kabuklarının elektron sayılarını temsil eder.

4.2.7. Enerji seviyeleri

Açık kabuk içermeyen ya da açık kabuklarında en fazla bir elektron bulunan sistemlerin bir tane enerji seviyesi vardır ve bu enerji ortalama enerji ile aynı değeri alır. Açık kabuklarında iki ve daha fazla sayıda elektron içeren sistemler elektronik potansiyel enerjileri nedeniyle enerji seviyeleri birbirinden ve ortalama enerjiden ayrışır.

Açık kabuklarında iki elektron bulunan bir kuantum nokta yapının herhangi bir enerji seviyesi, KGA ile hesaplanan ortalama enerji kullanılarak

$$E(^{2S+1}L) = \left[E_{av} + \sum_{k>0} f_k F^k(a'b') + \sum_{k'} g_{k'} G^{k'}(a'b') \right] (1 - \delta_{a'b'}) \\ + \left[E_{av} + \sum_k f'_k F^k(a'b') \right] \delta_{a'b'} \quad (4.29)$$

ifadesi ile hesaplanır. Burada a' ve b' açık kabukta bulunan elektronların orbitallerini gösterir. Ayrıca Coulomb ve exchange katsayıları

$$f_k = (-1)^L [l_{a'}, l_{b'}] \begin{pmatrix} l_{a'} & k & l_{a'} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{b'} & k & l_{b'} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l_{a'} & l_{b'} & L \\ l_{b'} & l_{a'} & k \end{Bmatrix} \quad (4.30)$$

$$f'_k = \begin{pmatrix} l & k & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left[\frac{2l+1}{4l+1} + (-1)^L (2l+1)^2 \begin{Bmatrix} l & l & L \\ l & l & k \end{Bmatrix} \right] \quad (4.31)$$

$$g_{k'} = \begin{pmatrix} l_{a'} & k' & l_{b'} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \left[\frac{1}{2} + (-1)^S [l_{a'}, l_{b'}] \begin{Bmatrix} l_{a'} & l_{b'} & L \\ l_{a'} & l_{b'} & k' \end{Bmatrix} \right] \quad (4.32)$$

şeklinde verilir. Burada l , l_a' ve l_b' açık kabuklarda bulunan elektronların yörünge açısal momentum kuantum sayılarıdır. Denk. (4.30-32)'de küçük parantez içinde verilen ifadeler 3j sembollerine, büyük parantez içinde verilen ifadeler 6j sembollerine (Cowan, 1981) karşılık gelir.

4.2.8. Orbital enerjileri

Bir atomun ortalama iyonlaşma enerjisi atomun en düşük enerjili durumundan bir elektronu uzaklaştırmak için gerekli enerji olarak tanımlanır. Benzer şekilde i. kabuğunda bulunan bir elektronu iyonlaştırılmış bir sistemin ortalama enerjisi ile aynı sistemin iyonlaşmadan önceki ortalama enerjisinin farkı, o orbitaldeki elektronun ortalama iyonlaşma enerjisi ya da orbital enerjisi olarak adlandırılır. Dolayısı ile μ . orbitalin orbital enerjisi

$$\begin{aligned}
 E_{\mu}^{orb} = & \left\langle \Phi_{\mu} \left| -\frac{\nabla^2}{2} - \frac{Z}{r} + V_C(r) \right| \Phi_{\mu} \right\rangle \\
 & + (q_{\mu} - 1) \left[F^0(\mu\mu) - \frac{2l_{\mu} + 1}{4l_{\mu} + 1} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_{\mu} & k & l_{\mu} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F^k(\mu\mu) \right] \\
 & + \sum_{v \neq \mu} q_v \left[F^0(\mu, v) - \frac{1}{2} \sum_{k'} \begin{pmatrix} l_{\mu} & k' & l_v \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 G^{k'}(\mu, v) \right]
 \end{aligned} \tag{4.33}$$

şeklinde verilir. Burada v diğer orbitalleri temsil eder. q_{μ} ve q_v , μ ve v kabuklarındaki elektronların sayısıdır. Eğer μ . orbitalde elektron bulunmuyorsa, bu durumunda bu orbitalde hayali bir elektronun bulunduğu varsayılır ve orbital enerjisi bu elektron göz önüne alınarak hesaplanır (Attila ve Ostlund, 1982).

4.2.9. Virial teoremi

Herhangi bir kuantum mekaniksel sistemde, $\hat{A}$ operatörü zamandan bağımsız ise bu operatörün beklenen değerinin zamana göre türevi

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \quad (4.34)$$

şeklinde verilir. Bu ifade Ehferrest teoremi olarak adlandırılır (Kumar, 2018). Burada ele alınan sistem enerjisi iyi bilinen bir sistem ise $\hat{A}$ operatörünün beklenen değeri sabit olacağı için türevi sıfır olur. Bu çerçevede $\hat{A}$ operatörü

$$\hat{A} = -i\hbar \sum_i q_i \frac{\partial}{\partial q_i} \quad (4.35)$$

şeklinde seçilerek gerekli düzenlemeler yapılırsa

$$\langle \sum_i q_i \frac{\partial V}{\partial q_i} \rangle = 2\langle T \rangle \quad (4.36)$$

denklemini elde edilir. Burada q_i Kartezyen koordinatlara, V potansiyel enerjiye, T kinetik enerjiye karşılık gelir. Bu denklem kuantum mekaniksel virial teoremidir ve sadece bağlı durumlarda geçerlidir (Levine ve ark., 2009).

Potansiyel enerji n . dereceden homojen bir fonksiyon ise Denk. (4.36)

$$n\langle V \rangle = 2\langle T \rangle \quad (4.37)$$

şeklini alır. Atomik sistemlerde $n = -1$ değerini alacağı için

$$\frac{\langle V \rangle}{\langle T \rangle} = -2 \quad (4.38)$$

değerini alır. Burada kullanılan sınırlama potansiyeli r 'nin bir fonksiyonu olmadığından Denk. (4.36)'da verilen virial teoremi, sınırlama potansiyelinin sonlu ya da sonsuz olmasına bağlı olarak sırasıyla

$$\langle V \rangle - \langle V_{snr} \rangle + 2\langle T \rangle = a^3 V_c [\sum_i q_i (\Psi(\mathbf{a}))^2] \quad (4.39)$$

$$\langle V \rangle + 2\langle T \rangle = \frac{1}{2}a \left[\sum_i q_i \left(\frac{\partial \Psi(a)}{\partial a} \right)^2 \right] \quad (4.40)$$

halini alır (Fernández ve Castro, 1981). Burada V_{snr} , sonlu potansiyel engeli ile sınırlandırılmış sistemlerin sınırlandırma potansiyel enerjisidir. Dolayısı ile kuantum nokta yapılarda $\frac{\langle V \rangle}{\langle T \rangle}$ oranı -2 değerini vermez. Diğer taraftan hem ortalama enerjinin minimize edilmesi hem de virial ilişkisinin sağlanabilmesi için dalga fonksiyonunun bir ölçeklendirme çarpanı ile ayar edilmesi gerekir (Coulson ve Bell, 1945; Löwdin, 1959). Bu yüzden virial katsayısı olarak bilinen bu oran ancak sınırlama etkisinin neredeyse ortadan kalktığı büyük yarıçap değerlerinde -2 değerine yaklaşır ve kuantum nokta yapıların ortalama ve kinetik enerjileri kullanılarak

$$c_{vir} = \frac{E_{ort} - E_{kin}}{E_{kin}} \quad (4.41)$$

ifadesi ile hesaplanabilir. Sonuç olarak virial teoremi ve virial katsayısı yapılan hesaplamaları sınamak için kullanılabilir.

4.3. Dalga Fonksiyonlarının Belirlenmesi ve Enerji Seviyelerinin Hesaplanması

Bir kuantum nokta yapının dalga fonksiyonlarının belirlenmesi ve enerji seviyelerinin hesaplanması için sistemin olası dalga fonksiyonlarının oluşturduğu popülasyona KGA yöntemi uygulanarak sistemin HF prosedürü ile üretilen ortalama enerji (Denk. 4.28) değeri minimize edildi. Bu yüzden ilk olarak her bir bireyi sistemin olası dalga fonksiyonlarından birine karşılık gelen bir popülasyon oluşturulması gerekir. Ortalama enerji ifadesi sistemin uzaysal orbitalleri üzerinden hesaplandığı için popülasyonun bireyleri, olası dalga fonksiyonları yerine bu fonksiyonları oluşturan uzaysal orbital takımlarından oluşturulabilir ve her bir uzaysal orbital bilinen fonksiyonların lineer kombinasyonu şeklinde yazılabilir. Bu sayede her bir birey uzaysal orbitallerin parametreleri ile temsil edilebilir.

Bu tez çalışmasında uzaysal orbitaller ele alınan sistemin elektronik konfigürasyonuna göre sayısı beş ile sekiz arasında değişen ve Denk. (3.14)'te verilen STO'ların lineer kombinasyonu şeklinde oluşturuldu. STO'ların baş kuantum sayıları,

yörünge açısal momentum kuantum sayılarının bir fazlası olarak alındı ($n = l + 1$) ve uzaysal orbitallerin parametreleri (STO'ların açılım katsayıları ve orbital üstelleri) başlangıçta rastgele üretildi. Burada her bir uzaysal orbital için farklı bir açılım katsayısı takımı oluşturulurken bazı hesapsal kolaylıklardan dolayı yörünge açısal momentum kuantum sayıları aynı olan uzaysal orbitaller için ortak orbital üsteli takımı tanımlandı. Popülasyonun birey sayısı 100 olarak alındı. Böylece 100 bireyden oluşan bir başlangıç popülasyonu oluşturuldu.

Başlangıç popülasyonunu oluşturan parametreler rastgele üretildikleri için uzaysal orbitaller sınır, diklik ve normalizasyon koşullarını sağlamazlar. Bu yüzden ortalama enerji hesabına geçmeden önce bu koşulların sağlanması gerekir.

Sonsuz sınırlama potansiyeline sahip kuantum nokta yapılarda Denk. (4.6) ile verilen sınır şartı, dalga fonksiyonunun her bir uzaysal orbitalinin sonuncu açılım katsayısının

$$c_{son} = - \sum_{i=1}^{N-1} c_i a^{n_i - n_{son}} e^{-(\zeta_i - \zeta_{son})a} \quad (4.42)$$

şeklinde sağlandı. Daha sonra diklik koşulunun sağlanması için her bir açılım katsayısı Denk. (3.31)'te verilen Gram-Schmidt yöntemine göre

$$c'_{pk} = c_{pk} - \sum_{q=1}^{p-1} \left(\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N c_{pi} c_{qj} S_{n_i l_i m_i n_j l_j m_j}^a(\zeta_i, \zeta_j) \right) c_{qk} \quad (4.43)$$

şeklinde yeniden üretildi. Daha sonra her bir bireyin açılım katsayıları

$$c'_{pi} = \frac{c_{pi}}{\left(\sum_{i=1}^{\sigma_i} \sum_{j=1}^{\sigma_j} c_{pi} c_{pj} S_{ij}^a \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (4.44)$$

şeklinde normalize edildi.

Sonlu sınırlama potansiyeline sahip kuantum nokta yapılarda da sonsuz kuantum noktalarda olduğu gibi popülasyondaki her bir dalga fonksiyonunun açılım katsayıları

üzerinden sınır, diklik ve normalizasyon koşulları sağlanır. Bu amaçla nokta yapının hem içinde hem de dışında tanımlı uzaysal orbitallerin önce sonuncu açılım katsayıları sınır koşullarının (Denk. 4.7, 4.8) sağlanması için

$$\begin{aligned}
 c_{son} = & \left\{ \sum_{i=1}^{N_{i\zeta}-1} c_i e^{-\zeta_{i\zeta} a} \{[(n_{d\zeta_{son}} - 1)a^{-1} - \zeta_{d\zeta_{son}}]\} \right. \\
 & - [(n_{i\zeta_i} - 1)a^{-1} - \zeta_{i\zeta_i}] - \sum_{i=1}^{N_{d\zeta}-1} d_i a^{n_{d\zeta_i}-1} e^{-\zeta_{d\zeta_i} a} \\
 & \times \{[(n_{d\zeta_{son}} - 1)a^{-1} - \zeta_{d\zeta_i}] - [(n_{d\zeta_{son}} - 1)a^{-1} - \zeta_{d\zeta_{son}}]\} \\
 & / \left\{ \frac{1}{m_{i\zeta}} [(n_{d\zeta_{son}} - 1)a^{-1} - \zeta_{i\zeta_{son}}] a^{n_{i\zeta_{son}}-1} e^{-\zeta_{i\zeta_{son}} a} \right. \\
 & \left. \left. - \{a^{n_{i\zeta_{son}}-1} e^{-\zeta_{i\zeta_{son}} a} [(n_{d\zeta_{son}} - 1)a^{-1} - \zeta_{d\zeta_{son}}]\} \right\} \right. \quad (4.45)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 d_{son} = & \left\{ \sum_{i=1}^{N_{i\zeta}-1} c_i a^{n_{i\zeta_i}-1} e^{-\zeta_{i\zeta_i} a} - \sum_{i=1}^{N_{d\zeta}-1} d_i a^{n_{d\zeta_i}-1} e^{-\zeta_{d\zeta_i} a} + c_{son} a^{n_{i\zeta_{son}}-1} e^{-\zeta_{i\zeta_{son}} a} \right\} \\
 & / a^{n_{d\zeta_{son}}-1} e^{-\zeta_{d\zeta} a} \quad (4.46)
 \end{aligned}$$

ifadesine göre, sonra diklik koşulunun (Denk. 3.31) sağlanması için her bir açılım katsayısı

$$\begin{aligned}
 c'_{pk} = & c_{pk} - \sum_{q=1}^{p-1} \left(\sum_{i=1}^{N_{i\zeta}} \sum_{j=1}^{N_{i\zeta}} c_{pi} c_{qj} S_{n_i l_i m_i, n_j l_j m_j}^a(\zeta_i, \zeta_j) \right. \\
 & \left. + \sum_{m=1}^{N_{d\zeta}} \sum_{n=1}^{N_{d\zeta}} d_{pm} d_{qn} S_{n_m l_m m_m, n_n l_n m_n}^\infty(\zeta_m, \zeta_n) \right) c_{qk} \quad (4.47)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d'_{pk} = d_{pk} - \sum_{q=1}^{p-1} \left\{ \sum_{i=1}^{N_{i\zeta}} \sum_{j=1}^{N_{i\zeta}} c_{pi} c_{qj} S_{n_i l_i m_i, n_j l_j m_j}^a (\zeta_i, \zeta_j) \right. \\
\left. + \sum_{m=1}^{N_{dl\zeta}} \sum_{n=1}^{N_{dl\zeta}} d_{pm} d_{qn} S_{n_m l_m m_m, n_n l_n m_n}^\infty (\zeta_m, \zeta_n) \right\} d_{qk}
\end{aligned} \quad (4.48)$$

ifadesine göre yeniden üretildi. Daha sonra her bir açılım katsayısı

$$c'_{pi} = \frac{c_{pi}}{\left(\sum_{i=1}^{\sigma_i} \sum_{j=1}^{\sigma_j} c_{pi} c_{pj} S_{ij}^a + \sum_{m=1}^{\sigma_m} \sum_{n=1}^{\sigma_n} d_{pm} d_{pn} S_{mn}^\infty \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (4.49)$$

$$d'_{pi} = \frac{d_{pi}}{\left(\sum_{i=1}^{\sigma_i} \sum_{j=1}^{\sigma_j} c_{pi} c_{pj} S_{ij}^a + \sum_{m=1}^{\sigma_m} \sum_{n=1}^{\sigma_n} d_{pm} d_{pn} S_{mn}^\infty \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (4.50)$$

şeklinde normalizasyon sabitine bölünerek uzaysal orbitaller normalize edildi.

Dalga fonksiyonlarının dikleştirilmesi için yapılan işlemler sınır koşullarını, normalizasyon işlemi ise sınır ve diklik koşullarını bozmaz. Bu yüzden işlemlerin sırası her zaman yukarıda verildiği gibi yapıldı. Farklı yörünge açısal momentum kuantum sayısına sahip olan uzaysal orbitaller küresel harmonikler nedeniyle birbirine dik oldukları için dikleştirme işlemi yalnız aynı yörünge açısal kuantum sayısına sahip uzaysal orbitallere uygulandı.

Bireyleri sınır, diklik ve normalizasyon koşullarını yerine getiren bir popülasyon elde edildikten sonra her bir dalga fonksiyonu için ortalama enerji değeri, E_i , hesaplandı ve bu enerji değeri kullanılarak her bir birey için

$$F_i = e^{-\frac{\beta(E_i - \bar{E})}{(\bar{E} - E_{min})}} \quad (4.51)$$

denklemini ile uygunluk fonksiyonu F_i hesaplandı. Burada $\bar{E}$ ve E_{min} sırasıyla popülasyonun ortalama enerjisi ve minimum enerjisidir. β ise ayar parametresidir.

Herhangi bir i . bireyin bir sonraki kuşakta gelme olasılığı P_i

$$P_i = \frac{F_i}{\sum_{j=1}^{N_{pop}} F_j} \quad (4.52)$$

denklemleri ile hesaplandı. Burada N_{pop} popülasyondaki birey sayısıdır. Bu olasılık değerine göre rulet çarkı yöntemi ile seçilen bireyler bir sonraki kuşağa aktarıldı.

Çaprazlama ve mutasyon rulet çarkı yöntemi ile rastgele seçilen dalga fonksiyonları üzerinden yapılır. Çaprazlama için seçilen dalga fonksiyonlarının parametreleri ile yeni bireylerin parametreleri

$$\begin{aligned} \zeta'_1 &= f_{c_1} \zeta_1 + (1 - f_{c_1}) \zeta_2 \\ \zeta'_2 &= f_{c_1} \zeta_2 + (1 - f_{c_1}) \zeta_1 \\ c'_1 &= f_{c_2} c_1 + (1 - f_{c_2}) c_2 \\ c'_2 &= f_{c_2} c_2 + (1 - f_{c_2}) c_1 \end{aligned} \quad (4.53)$$

şeklinde çaprazlandı. Burada f_c çaprazlama fonksiyonudur. Dalga fonksiyonunda meydana gelebilecek kırılmaları önlemek için alabileceği değerler 0–1 aralığında sınırlandırıldı.

Son olarak popülasyondaki genetik çeşitliliği arttırmak için rastgele seçilen bireylere mutasyon işlemi uygulandı. Mutasyon için rasgele seçilen uzaysal fonksiyonun parametreleri

$$\begin{aligned} \zeta'_1 &= (-1)^M f_{m_1} + \zeta_1 \\ c'_1 &= (-1)^M f_{m_2} + c_1 \end{aligned} \quad (4.54)$$

işlemi ile mutasyona uğratıldı. Burada f_m mutasyon fonksiyonudur. Enerjinin minimize edilmesinde yerel minimum değerlerinden kurtulabilmek için mutasyon fonksiyonu 0-0.1 aralığında alındı. Bu işlemler tamamlandıktan sonra gelecek kuşak oluşturuldu. Yeni kuşak tamamen yeni bireylerden oluşturulursa önceki popülasyondaki en iyi bireyler de değiştirilmiş olur. Bunun önüne geçmek için önceki popülasyondaki en iyi iki birey hiçbir işleme tabi tutulmadan sonraki kuşağa olduğu gibi aktarıldı. Böylece ortalama enerjisi en

küçük iki birey dışında diğer bireyler yeniden üretildi. Bu yeni bireylerin sınır, diklik ve normalizasyon koşulları bozulduğu için bu işlemler tekrar yapılarak yeni bir popülasyon oluşturuldu. Daha sonra aynı işlemler yeni kuşağa da uygulanarak bir sonraki kuşak oluşturuldu ve bu işlemler iterasyon sayısı kadar tekrar edildi. İterasyon sayısı, ele alınan sistemin elektronik konfigürasyonunun yapısına göre, 15 bin ile 30 bin arasında alındı. Böylece sistemin uzaysal orbitallerinin parametreleri belirlendi ve ortalama enerjisi (Denk. 4.28), elektronik kinetik enerjisi (Denk. 4.11), nükleer potansiyel enerjisi (Denk. 4.13), sınırlama potansiyel enerjisi (Denk. 4.15), elektronik potansiyel enerjisi (Denk. 4.25) ve uzaysal orbitallerin parametreleri belirlendi. Bu enerji değerleri kullanılarak enerji seviyeleri (Denk. 4.29) ve orbital enerjileri (Denk. 4.33) hesaplandı. Ayrıca uzaysal orbitallerin parametreleri kullanılarak dalga fonksiyonları, bu dalga fonksiyonları da kullanılarak çiftlenimli dalga fonksiyonları oluşturuldu. Oluşturulan dalga fonksiyonlarından bazıları **EK-2**'de verildi.

5. ARAŞTIRMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA

Kuantum nokta yapıların taban ve uyarılmış enerji seviyelerinin elektronik özellikleri incelendi. Uyarılmış durumlarda sistemin bir elektronu üst orbitallere geçirilirken diğer elektron/elektronlar taban durumda bulunduğ/ bulundukları orbitalde tutuldu. Hesaplamalarda ortalama enerji üzerinde etkisi olmadığı için konfigürasyonların toplam manyetik kuantum sayıları ve toplam spin kuantum sayıları ($\sum m_l = 0$, $\sum m_s = 0$) sıfır olarak kabul edildi. Nokta yapı içindeki elektronların etkin kütlesi serbest elektronların kütlesine; ortamın elektriksel geçirgenliği, boşluğun elektriksel geçirgenliğine eşit alındı. Uzaysal orbitalleri oluşturan baz fonksiyonlarının sayısı ele alınan sistemin yapısına göre beş ile sekiz arasında tutuldu. Safsızlık yükü ya elektron sayısına eşit ya da sıfır alındı. Kuantum nokta yapıların yarıçapı (Bohr) ve enerji değerleri (Hartree) a.u'de verildi. Elde edilen sonuçlar çizelgeler halinde bölüm içinde, nokta yapının yarıçapına bağlı değişiminin grafiklerinin bir kısmı bölüm içinde kalanları ise **EK-3.**'te verildi. Literatürde bulunan çalışmalardan farklı olarak aynı yörünge açışal kuantum sayısına sahip birden fazla orbitali bulunan sistemler için de hesaplamalar yapıldı.

5.1. Sonsuz Kuyu Potansiyelleri

Sonsuz küresel simetrik potansiyel engeli ile sınırlandırılmış kuantum nokta yapılarda elektronlar kuyunun dışına asla çıkamaz. Dolayısı ile nokta yapının yarıçapı azaldıkça dar bir alana sıkıştırılan elektronların etkileşimi şiddetlenir. Bu durum ele alınan sistemin enerji değerlerinin ve virial katsayılarının yarıçapa bağlı olarak keskin bir şekilde değişmesine neden olur.

5.1.1. Sonsuz kuantum nokta yapıların ortalama enerjileri

İki elektronlu ve sonsuz küresel simetrik potansiyel engeli ile sınırlandırılmış kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^1 2s^1$, $1s^1 3s^1$, $1s^1 4s^1$, $1s^1 2p^1$, $1s^1 3p^1$, $1s^1 4p^1$, $1s^1 3d^1$, $1s^1 4d^1$ ve $1s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri $Z=2$ için Denk. (4.28) kullanılarak hesaplandı. Aynı denklem kullanılarak safsızlık yükü içermeyen ($Z=0$) $1s^1 4s^1$, $1s^1 4p^1$, $1s^1 4d^1$ ve $1s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri de hesaplandı ve elde edilen sonuçlar hem $Z=2$ hem de $Z=0$ için **Çizelge 5.1.**'de verildi.

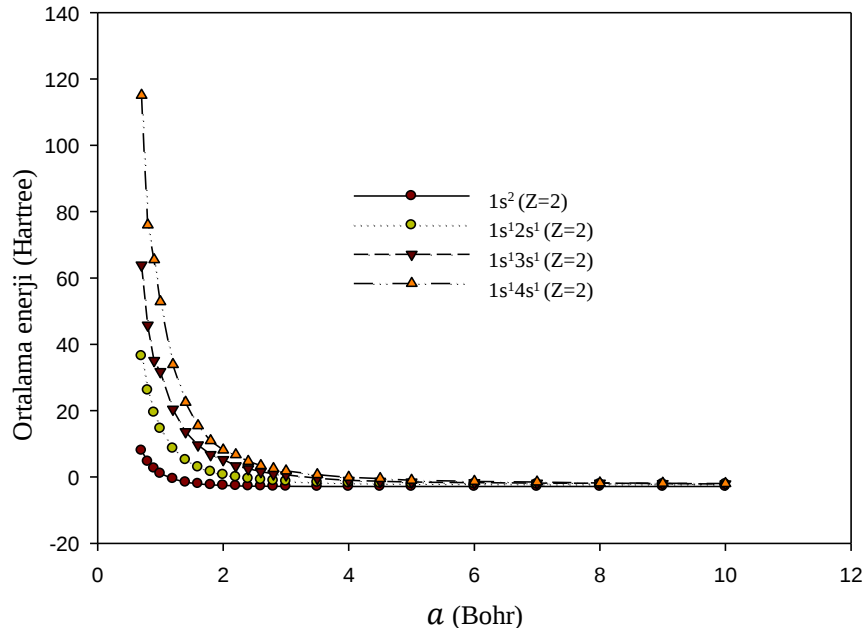
Çizelge 5.1. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların taban ve bazı uyarılmış konfigürasyonlarının ortalama enerjileri*

a	$1s^2$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^12s^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^13s^1$ $\sigma = 7$ $Z=2$	$1s^14s^1$ $\sigma = 8$ $Z=2$	$1s^14s^1$ $\sigma = 8$ $Z=0$	$1s^12p^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^13p^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^14p^1$ $\sigma = 8$ $Z=2$	$1s^14p^1$ $\sigma = 8$ $Z=0$	$1s^13d^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^14d^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^14d^1$ $\sigma = 5$ $Z=0$	$1s^14f^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^14f^1$ $\sigma = 5$ $Z=0$
0.5	23.5799 22.741303 ^a	79.7880	180.0817	212.0108	270.6355	44.6901	85.4727	147.5182	192.4140	71.8215	121.6460	151.7710	103.9774	119.9946
0.6	13.3742	52.7874	121.9637	156.9298	188.3911	28.8006	61.6268	117.7351	121.8656	47.8181	82.9389	105.3535	70.1331	83.8109
0.7	7.9773	36.4804	63.8590	115.0644	148.1314	19.4924	48.3810	74.0348	89.5705	33.5556	58.9584	77.7933	50.0008	61.7600
0.8	4.6621	26.1625	45.7952	75.9587	117.7229	13.6278	35.8956	57.1254	74.6822	24.4807	43.9330	60.6638	37.1060	47.4389
0.9	2.5891	19.4308	35.0913	65.4565	83.6324	9.7626	22.7874	40.0632	59.7444	18.3777	33.8075	47.4394	28.3643	37.6926
1.0	1.0625 1.015755 ^a	14.5864	31.7639	52.8285	70.8447	7.0302	19.3907	32.2027	45.2901	14.0921	26.5205	38.4514	22.1998	30.7094
1.2	-0.5652	8.6223	20.4066	33.8822	46.5013	3.6590	11.8266	18.6217	31.7614	8.6415	17.5395	26.9122	14.3235	21.4890
1.4	-1.5663	5.1194	13.6624	22.4938	37.9995	1.7525	6.5482	13.9388	23.2271	5.4731	12.4241	20.0288	9.6844	15.8884
1.6	-2.0741	2.9912	9.6622	15.4359	29.4207	0.5974	4.2377	10.3657	18.1671	3.4921	8.7856	15.3103	6.7231	12.2790
1.8	-2.3691	1.5965	6.7566	10.9230	23.5714	-0.1469	2.6825	7.9075	15.2874	2.1783	6.1167	12.1796	4.7517	9.8157
2.0	-2.5465 -2.604038 ^a -2.604 038 ^b	0.6496	5.2253	8.1026	20.1622	-0.6432	1.7180	5.5640	12.5079	1.2696	4.3670	10.0013	3.3550	7.9869
2.2	-2.6732	-7.5e-3	3.3573	6.7048	16.7700	-0.9861	1.3972	4.3046	11.1605	0.6178	2.9940	8.2563	2.3539	6.6289
2.4	-2.7423	-0.4823	2.4681	4.6569	13.2152	-1.2326	0.7896	3.5089	8.8831	0.1327	2.1234	7.2426	1.5931	5.6581
2.6	-2.7858	-0.8419	1.6333	3.3921	11.4197	-1.4124	0.1789	2.8640	7.6728	-0.2345	1.6186	5.9687	1.0107	4.8795
2.8	-2.8134	-1.1106	0.9249	2.5019	9.8427	-1.5476	-0.2452	2.1636	6.6315	-0.5188	0.9310	5.3495	0.5560	4.2146
3.0	-2.8310 -2.872495 ^a -2.872494 ^b	-1.3090	0.6456	1.7835	8.6966	-1.6512	-0.4138	1.2537	5.5445	-0.7462	0.5562	4.7179	0.1928	3.7355
4.0	-2.8585 -2.900486 ^a -2.900486 ^b	-1.8435	-1.0041	-0.1190	4.6579	-1.9260	-1.5072	-0.5762	3.6599	-1.3918	-0.6803	2.6899	-0.8599	2.1990
6.0	-2.8617 -2.903696 ^a	-2.1143	-1.7359	-1.3316	3.0785	-2.0824	-1.9719	-1.5781	2.3433	-1.8219	-1.5804	1.3658	-1.5784	1.0782
8.0	-2.8477 -2.903724 ^a	-2.1600	-1.8890	-1.8457	2.1971	-2.1202	-2.0877	-1.8484	1.5712	-1.9545	-1.8484	0.9132	-1.8119	0.8245
10.0	-2.8477 -2.903724 ^a	-2.1658	-2.1173	-2.0050	1.6732	-2.1308	-2.1190	-2.0500	1.2887	-2.0073	-1.9657	0.6635	-1.9115	0.5216
12.0	-2.8477	-2.1678	-2.1283	-2.1267	1.4071	-2.1339	-2.1275	-2.0905	0.8774	-2.0314	-2.0160	0.4510	-1.9636	0.4559
15.0	-2.8477	-2.1730	-2.1455	-2.1425	1.2887	-2.1348	-2.1304	-2.1085	0.7592	-2.0467	-2.0440	0.3542	-1.9954	0.3387

^a Montgomery Jr ve Pupyshev, 2013^b Bhattacharyya ve ark., 2013

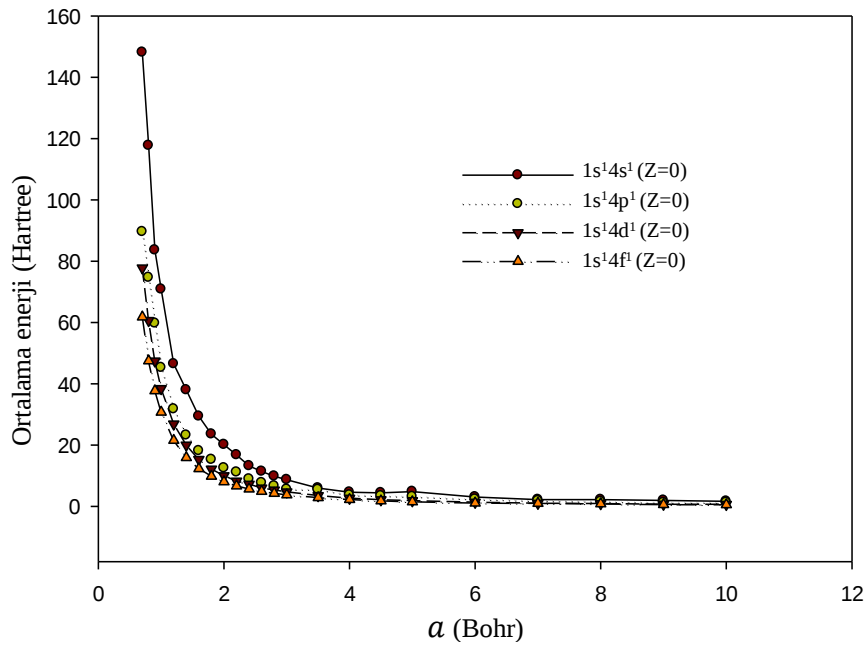
* Enerji ve yarıçap a.u (Hartree, Bohr) cinsinden verildi.

Merkezinde safsızlık yükü bulunan ($Z=2$) iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^1 2s^1$, $1s^1 3s^1$, $1s^1 4s^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjilerinin yarıçapa bağlı değişimi **Şekil 5.1.**'de verildi. Ortalama enerji değerleri nokta yapının yarıçapı büyüdükçe belli bir yarıçap değerine kadar hızlı bir şekilde azaldı. Bu kritik yarıçap değerinden sonra nokta yapının ortalama enerjisi serbest He atomunun ortalama enerji değerine yaklaştı. Bu durum, nokta yapının yarıçapı serbest atomun yarıçap değerine yaklaştıkça sınırlama potansiyelinin etkisinin zayıfladığını gösterir. Sınırlama etkisinin neredeyse tamamen ortadan kalktığı bu kritik yarıçap değeri $1s^2$ konfigürasyonu için küçükken uyarılmış durumlarda özellikle de sistemin uyarılmış elektronunun daha yüksek enerjili orbitallerde bulunması halinde, örneğin $1s^1 4s^1$ konfigürasyonunda, daha büyük değerlere doğru kaydı. Bu durumun nedeni uyarılmış elektronu daha üst orbitallere uyarılan sistemlerin ortalama enerjileri daha büyük olduğu için sınırlama potansiyelinden daha fazla etkilenmesidir. Büyük nokta yapı yarıçaplarında enerji seviyeleri birbirine çok yaklaşırken yarıçap küçüldükçe enerji seviyeleri ayrılmaya başladı. Başka bir ifade ile elektronların güçlü sınırlamaya maruz kaldığı bölgelerde dejenerasyon ortadan kalktı. Elektronların safsızlığa bağlandıkları yarıçap değerleri sistemin uyarılmış elektronu daha yüksek enerjili orbitallere çıktıkça arttı.



Şekil 5.1. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^1 2s^1$, $1s^1 3s^1$ ve $1s^1 4s^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri

Nokta yapının merkezinde safsızlık yükü bulunmaması halinde **Şekil 5.2.**'de görüldüğü gibi $1s^14s^1$, $1s^14p^1$, $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjilerinin yarıçapa bağlı değişimi merkezinde safsızlık yükü bulunan yapılara benzer bir davranış sergiledi. Ancak bu durumda nükleer potansiyel enerjinin ortadan kalkması, ortalama enerjinin artmasına ve farklı konfigürasyonların enerji seviyelerinin birbirine yaklaşmasına neden oldu.



Şekil 5.2. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^14s^1$, $1s^14p^1$, $1s^14d^1$ ve $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri

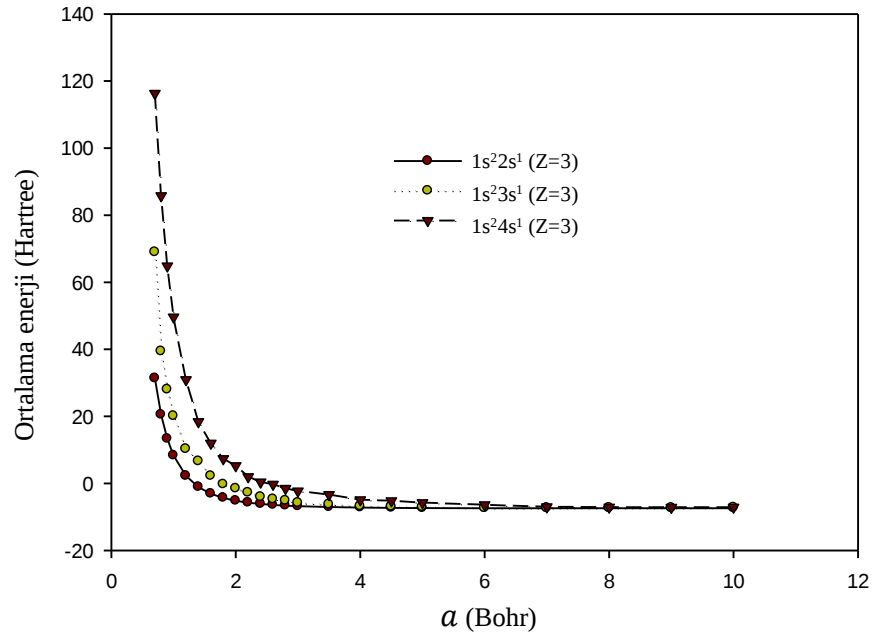
Üç elektronlu sistemler kuantum nokta yapıların $1s^22s^1$, $1s^23s^1$, $1s^24s^1$, $1s^22p^1$, $1s^23p^1$, $1s^24p^1$, $1s^23d^1$, $1s^24d^1$, $1s^24f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri $Z=3$ için ve $1s^24d^1$, $1s^24f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri $Z=0$ için Denk. (4.28) ile hesaplandı ve sonuçlar **Çizelge 5.2.**'de verildi. Bu sistemlerin yarıçapa bağlı ortalama enerji değerleri **Şekil 5.3.**'de görüldüğü gibi yarıçap değeri büyüdükçe belli bir yarıçap değerinden sonra serbest Li atomunun ortalama enerji değerlerine yaklaştı ve daha sonra sabit kaldı. Bu yarıçap değeri üçüncü elektronu daha yüksek enerji değerlerine uyarılmış sistemlerde daha büyük yarıçap değerlerine doğru kaydı. Benzer şekilde elektronların safsızlığa bağlandığı yarıçap değeri de daha yüksek enerjili konfigürasyonlara çıkıldıkça daha büyük değer almaya başladı.

Çizelge 5.2. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış üç elektronlu kuantum nokta yapıların farklı elektronik konfigürasyonlarının ortalama enerji değerleri*

a	$1s^2 2s^1$ $\sigma = 5$ $Z=3$	$1s^2 3s^1$ $\sigma = 6$ $Z=3$	$1s^2 4s^1$ $\sigma = 8$ $Z=3$	$1s^2 2p^1$ $\sigma = 5$ $Z=3$	$1s^2 3p^1$ $\sigma = 6$ $Z=3$	$1s^2 4p^1$ $\sigma = 8$ $Z=3$	$1s^2 3d^1$ $\sigma = 5$ $Z=3$	$1s^2 4d^1$ $\sigma = 5$ $Z=3$	$1s^2 4d^1$ $\sigma = 5$ $Z=0$	$1s^2 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z=3$	$1s^2 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z=0$
0.5	78.9793	130.0927	247.9871	45.6188	95.8184	169.2105	73.4148	134.3245	177.4923	105.6081	145.6870
0.6	48.7996	99.1066	166.0418	26.5575	61.1750	111.8932	46.2386	87.7458	123.4826	68.6550	102.3188
0.7	31.3257	68.9403	116.3204	15.6305	41.3022	81.3532	30.2466	56.8449	91.9538	46.9400	76.0150
0.8	20.4619	39.4088	85.7899	8.9121	28.1880	55.6779	20.2365	44.7925	71.8066	33.1778	58.9354
0.9	13.2644	27.9887	64.8423	4.5540	19.8051	40.9334	13.5950	31.8274	56.9048	23.9349	47.1648
1.0	8.2908	20.1020	49.6270	1.6104	13.8319	32.5020	9.0559	23.3630	46.4655	17.3154	38.6249
	8.51392 ^c			2.32373 ^c							
1.2	2.2531	10.2307	30.9533	-1.9189	6.4217	19.0578	3.3833	13.6314	33.0618	9.1411	27.3474
1.4	-1.1021	6.6091	18.3866	-3.8110	1.9448	10.2826	0.1772	7.4507	24.2962	4.4302	20.4814
1.6	-3.0935	2.2162	11.9779	-4.9075	-0.5578	5.9306	-1.8104	3.7552	19.2524	1.4451	16.0043
1.8	-4.3488	-0.3025	7.3611	-5.6322	-2.1240	3.1661	-3.0630	1.2079	15.1704	-0.5225	12.8966
2.0	-5.1754	-1.5569	5.2614	-6.0223	-3.3214	0.4522	-4.0300	-0.5872	12.8076	-1.8915	10.6592
	-5.08419 ^c			-5.73861 ^c							
2.2	-5.7405	-2.7836	2.0083	-6.3217	-4.4628	-1.1635	-4.6215	-1.8614	10.7736	-2.9169	9.0028
2.4	-6.1390	-4.0522	0.4020	-6.5757	-5.1553	-2.1851	-5.1242	-2.8033	9.2362	-3.6603	7.8011
2.6	-6.4275	-4.7546	-0.2602	-6.6956	-5.6714	-2.6883	-5.4803	-3.5638	8.0199	-4.2093	6.7107
2.8	-6.6404	-5.1435	-1.5180	-6.8443	-5.9950	-3.2229	-5.7584	-4.1335	7.0866	-4.6620	6.0584
3.0	-6.8013	-5.8100	-2.2816	-6.9333	-5.9121	-3.8047	-5.9814	-4.5718	6.2713	-5.0247	5.3133
	-6.74635 ^c			-6.78374 ^c							
4.0	-7.1957	-6.8111	-4.9097	-7.1502	-6.9531	-5.7337	-6.6253	-5.8915	3.8461	-6.0944	3.3552
	-7.18599 ^c			-7.09747 ^c							
5.0	-7.3386	-7.0954	-5.7611	-7.2524	-7.0086	-6.4593	-6.9106	-6.3791	2.7231	-6.5666	2.3537
	-7.32300 ^c			-7.22446 ^c							
6.0	-7.3792	-7.3397	-6.3655	-7.2897	-7.2919	-6.7281	-7.0573	-6.6886	2.2672	-6.8007	1.7868
	-7.37679 ^c			-7.28376 ^c							
7.0	-7.3990	-7.3635	-6.9872	-7.3253	-7.3272	-7.0136	-7.1405	-6.8309	2.0511	-6.9447	1.5199
8.0	-7.4001	-7.3228	-7.0937	-7.3245	-7.3418	-7.1239	-7.1908	-6.9522	1.4813	-7.0345	1.3711
	-7.40985 ^c			-7.32975 ^c							
10.0	-7.4135	-7.2002	-7.0989	-7.3506	-7.3523	-7.2246	-7.2295	-7.2116	1.3136	-7.1308	0.9109
	-7.41658 ^c			-7.34330 ^c							
12.0	-7.4182	-7.1431	-7.1534	-7.3529	-7.3557	-7.3122	-7.2472	-7.1941	1.1077	-7.1828	0.8621
15.0	-7.4180	-7.4221	-7.2154	-7.3549	-7.3549	-7.2889	-7.2826	-7.2148	1.0941	-7.2159	0.7477

^c Sañu-Ginarte ve ark., 2019

* Enerji ve yarıçap a.u (Hartree, Bohr) cinsinden verildi.



Şekil 5.3. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış üç elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^22s^1$, $1s^23s^1$ ve $1s^24s^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri

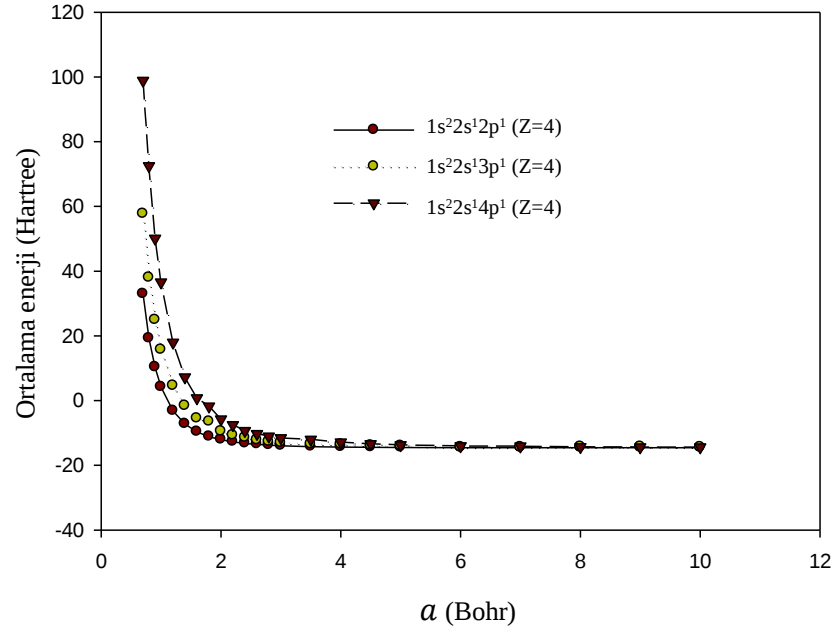
Dört elektronlu sistemlerin $1s^22s^2$, $1s^22s^13s^1$, $1s^22s^14s^1$, $1s^22s^12p^1$, $1s^22s^13p^1$, $1s^22s^14f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri $Z=4$ için ve $1s^22s^14f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri $Z=0$ için hesaplandı ve **Çizelge 5.3.**'de verildi. $1s^22s^12p^1$, $1s^22s^13p^1$ ve $1s^22s^14p^1$ konfigürasyonlarının $Z=4$ için yarıçapa bağlı değişim grafikleri **Şekil 5.4.**'de verildi. Grafiklerden görüleceği üzere tıpkı iki ve üç elektronlu sistemlerde olduğu gibi yarıçap değeri belli bir kritik değere ulaştığında ortalama enerji değeri sabitleşti ve serbest Be atomunun enerji seviyesine ulaştı. Elektronların safsızlığa bağlanma yarıçapları uyarılmış elektron yüksek enerjili orbitallere çıktıkça daha büyük yarıçap değerlerine kayd.

İki, üç ve dört elektronlu nokta yapılar için sistemin ortalama enerji grafikleri karşılaştırıldığında (**Şekil 5.1.**, **Şekil 5.3.** ve **Şekil 5.4.**) bu grafiklerdeki konfigürasyonların ortalama enerji değerleri arasındaki farkın iki elektronlu sistemlerde daha belirgin olduğu ortaya çıktı. Bu durumun nedeni, farklı sayıda elektrona sahip olmalarına rağmen uyarılmış elektron sayısı bütün konfigürasyonlarda bir tanedir. Dolayısıyla elektron sayısı fazla olan sistemlerde uyarılmış elektrondan kaynaklanan enerjinin ortalama enerji içindeki ağırlığının azalması farklı konfigürasyonların enerji değerlerinin birbirine yaklaşmasına neden oldu.

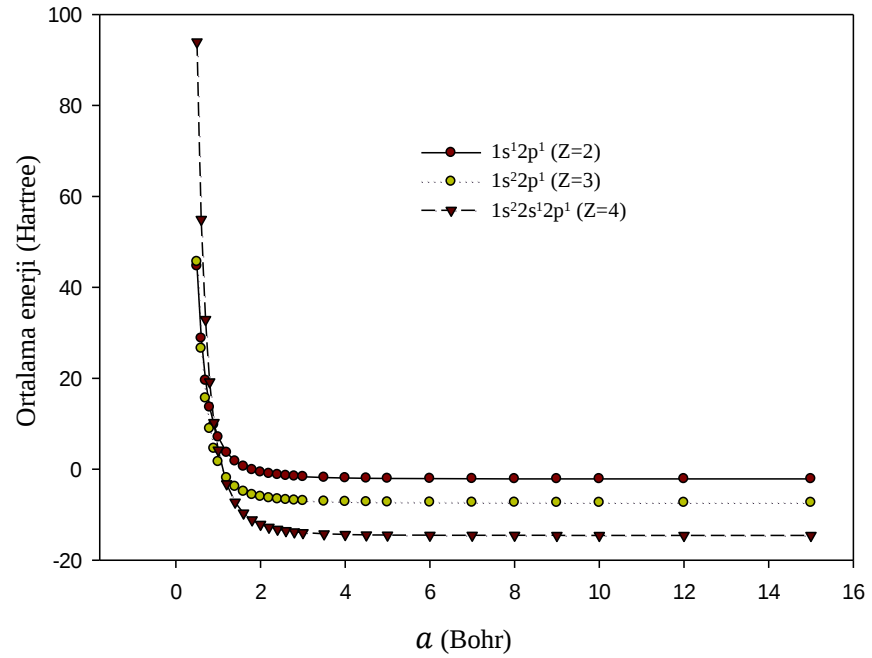
Çizelge 5.3. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların farklı elektronik konfigürasyonlarının ortalama enerjileri*

a	$1s^2 2s^2$ $\sigma = 5$ $Z=4$	$1s^2 2s^1 3s^1$ $\sigma = 7$ $Z=4$	$1s^2 2s^1 2p^1$ $\sigma = 5$ $Z=4$	$1s^2 2s^1 3p^1$ $\sigma = 5$ $Z=4$	$1s^2 2s^1 4p^1$ $\sigma = 8$ $Z=4$	$1s^2 2s^1 3d^1$ $\sigma = 5$ $Z=4$	$1s^2 2s^1 4d^1$ $\sigma = 5$ $Z=4$	$1s^2 2s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z=4$	$1s^2 2s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z=0$
0.5	125.2111	224.1648	93.9407	143.6246	224.0398	121.6391	183.4378	153.9804	234.6661
0.6	75.4324	144.0131	54.9379	89.2545	154.1223	74.8611	126.6413	97.2060	165.4253
0.7	46.9924	97.2908	32.9101	57.6705	98.8741	47.5218	79.1251	64.1401	123.5406
0.8	29.4405	67.0116	19.1935	37.9675	72.5001	30.6429	54.4855	43.3637	95.8734
0.9	17.7985	47.3052	10.2456	24.8916	50.1102	19.8321	37.9044	29.6122	76.8234
1.0	9.7638	34.1034	4.1929	15.6733	36.5903	11.8211	26.5434	19.9288	62.9643
1.2	0.1581	16.7900	-3.2044	4.5305	17.9792	2.1380	12.0772	7.9228	44.9581
1.4	-5.1880	6.9791	-7.2329	-1.6749	7.2179	-3.0191	3.9043	1.0570	34.0843
1.6	-8.3067	0.6626	-9.6648	-5.5248	0.7591	-6.4729	-1.1387	-3.1714	26.6980
1.8	-10.2469	-3.2545	-11.1465	-6.5268	-1.7650	-8.5661	-4.3391	-5.9402	21.6958
2.0	-11.5053	-5.9338	-12.1134	-9.6321	-5.7520	-9.9801	-6.7087	-7.8399	18.0219
2.2	-12.3504	-7.8208	-12.7662	-10.7960	-7.5026	-10.9713	-8.2387	-9.1804	15.4598
2.4	-12.8834	-9.2290	-13.2255	-11.4896	-9.3287	-11.7013	-9.4622	-10.1828	13.3669
2.6	-13.3459	-10.2677	-13.5303	-12.2562	-10.2455	-12.2087	-10.1520	-10.9131	11.8389
2.8	-13.6314	-11.0350	-13.7711	-12.7149	-11.0355	-12.6245	-10.9332	-11.4962	10.1710
3.0	-13.7504	-11.6370	-13.9605	-13.0621	-11.5909	-12.9206	-11.1948	-11.9342	9.1507
3.5	-14.1793	-12.6170	-14.2288	-13.5076	-12.0480	-13.4189	-12.3192	-12.6903	7.1607
4.0	-14.3442	-13.2010	-14.3691	-13.5968	-12.8968	-13.7236	-13.0806	-13.1237	5.8773
4.5	-14.4391	-13.5239	-14.4530	-14.0018	-13.3765	-13.9036	-13.3858	-13.4348	4.9595
5.0	-14.5068	-13.8059	-14.4904	-14.1130	-13.6833	-14.0187	-13.5765	-13.6338	4.2855
6.0	-14.5359	-14.0302	-14.5314	-14.5117	-14.0496	-14.1482	-13.7929	-13.8710	3.2164
7.0	-14.5500	-14.1268	-14.5430	-14.5134	-14.1178	-14.2218	-14.0502	-14.0036	2.8051
8.0	-14.5563	-14.1731	-14.5466	-14.3622	-14.3224	-14.1793	-14.0489	-14.0841	2.4890
9.0	-14.5597	-14.2531	-14.5470	-14.3993	-14.3759	-14.1975	-14.2166	-14.1277	2.1497
10.0	-14.5641	-14.2298	-14.5481	-14.5199	-14.3760	-14.2827	-14.2079	-14.0926	1.8603
12.0	-14.5658	-14.3089	-14.5663	-14.5425	-14.5145	-14.2887	-14.2255	-14.1453	1.4830
15.0	-14.5619	-13.5973	-14.5672	-14.5629	-14.2070	-14.2972	14.2930	-14.2544	1.3722

* Enerji ve yarıçap a.u (Hartree, Bohr) cinsinden verildi.



Şekil 5.4. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^22s^12p^1$, $1s^22s^13p^1$ ve $1s^22s^14p^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri



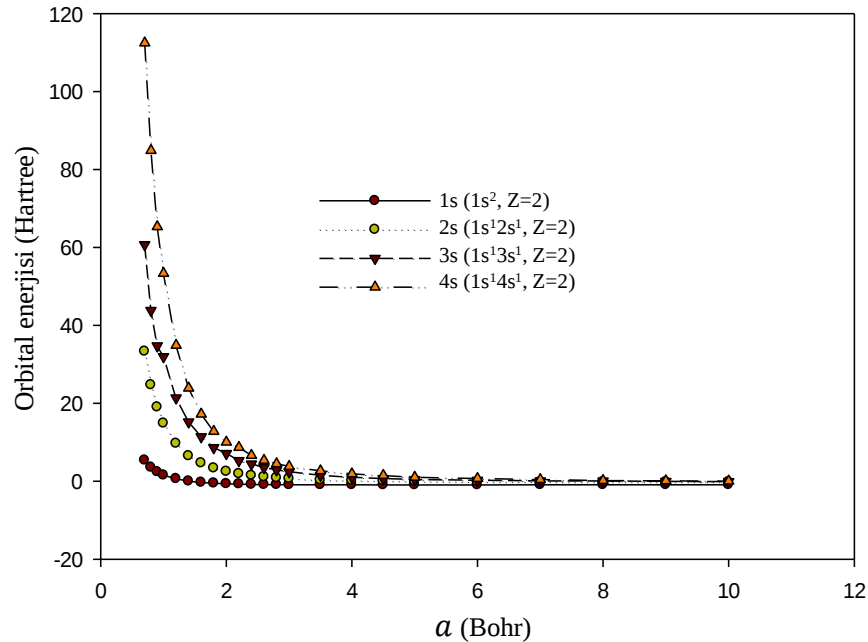
Şekil 5.5. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki, üç ve dört elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^12s^1$, $1s^22p^1$ ve $1s^22s^12p^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri

Öte yandan farklı sayıda elektron içeren sistemlerin elektronlarının safsızlığa bağlanma yarıçapları karşılaştırıldığında, **Şekil 5.5.**'te görüldüğü gibi, iki elektronlu sistemden dört elektronlu sisteme gidildikçe bu yarıçap değeri büyüdü. Bu durumun nedeni elektron sayısı arttıkça elektronlar arasındaki etkileşmenin şiddetlenmesinin elektronların safsızlığa bağlanmasını zorlaştırmasıdır.

5.1.2. Sonsuz kuantum nokta yapıların orbital enerjileri

Taban ve uyarılmış durumda bulunan iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^1 2s^1$, $1s^1 3s^1$, $1s^1 4s^1$, $1s^1 2p^1, 1s^1 3p^1$, $1s^1 4p^1$, $1s^1 3d^1$, $1s^1 4d^1$, $1s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının $Z=2$ ve $1s^1 4s^1$, $1s^1 4p^1$, $1s^1 4d^1$, $1s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının $Z=0$ için orbital enerjileri Denk. (4.33) kullanılarak hesaplandı ve **Çizelge 5.4.**'de verildi.

Şekil 5.6.'da görüldüğü gibi $Z=2$ için $1s^2$, $1s^1 2s^1$, $1s^1 3s^1$, $1s^1 4s^1$ konfigürasyonlarında nokta yapının yarıçapı arttıkça farklı konfigürasyonların orbital enerjileri arasındaki fark azaldı ve serbest He atomunun orbital enerjilerine yaklaştı. Bu durumun nedeni nokta yapının yarıçapı arttıkça uzaysal sınırlama etkisinin zayıflamasıdır.



Şekil 5.6. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların 1s, 2s, 3s ve 4s orbitallerinin orbital enerjileri

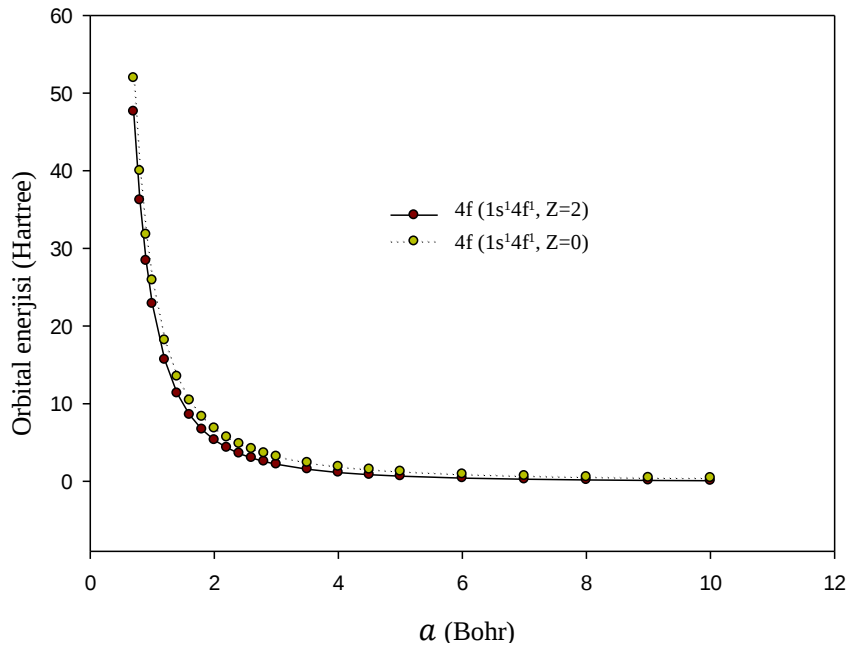
Çizelge 5.4. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların konfigürasyonlarının orbital enerjileri*

a	$1s^2$ 1s $\sigma = 5$ Z=2	$1s^1 2s^1$ 2s $\sigma = 5$ Z=2	$1s^1 3s^1$ 3s $\sigma = 7$ Z=2	$1s^1 4s^1$ 4s $\sigma = 8$ Z=2	$1s^1 4s^1$ 4s $\sigma = 8$ Z=0	$1s^1 2p^1$ 2p $\sigma = 5$ Z=2	$1s^1 3p^1$ 3p $\sigma = 5$ Z=2	$1s^1 4p^1$ 4p $\sigma = 8$ Z=2	$1s^1 4p^1$ 4p $\sigma = 8$ Z=0	$1s^1 3d^1$ 3d $\sigma = 5$ Z=2	$1s^1 4d^1$ 4d $\sigma = 5$ Z=2	$1s^1 4d^1$ 4d $\sigma = 5$ Z=0	$1s^1 4f^1$ 4f $\sigma = 5$ Z=2	$1s^1 4f^1$ 4f $\sigma = 5$ Z=0
0.5	13.7702	70.0654	145.9209	202.4790	236.0500	35.8946	76.2071	138.3495	171.5732	62.8564	112.3198	132.1785	94.6401	100.6702
0.6	8.2850	46.8389	99.4147	151.6883	165.8736	24.3024	56.6956	111.3146	107.6530	43.1762	78.0176	91.7792	65.2730	70.3214
0.7	5.3770	33.3366	60.7050	112.4426	135.7691	17.3964	45.9887	70.4738	79.0632	31.3330	56.4929	67.8570	47.6296	51.9485
0.8	3.5653	24.7115	43.8514	84.8537	107.1839	12.9693	34.9796	55.7796	66.6566	23.7048	42.9559	53.0654	36.2184	39.9888
0.9	2.4329	19.0164	34.7297	65.3102	75.9791	9.9829	22.7651	39.9780	53.1170	18.5183	33.7659	41.4549	28.4197	31.7797
1.0	1.5483	14.8887	31.9921	53.3076	64.3156	7.8598	19.8980	32.7647	40.1803	14.8313	27.0934	33.5731	22.8627	25.8873
1.2	0.6286	9.7031	21.3796	34.8680	41.9643	5.1564	13.1311	20.0107	27.8048	10.0542	18.8240	23.5284	15.6622	18.1748
1.4	1.92e-3	6.4910	15.2232	23.8968	34.9031	3.5646	8.1912	15.6475	20.5932	7.2093	13.5696	17.5770	11.3509	13.4953
1.6	-0.3214	4.6899	11.4173	17.2038	25.7476	2.5639	6.0597	12.0165	15.9371	5.3892	10.6031	13.4308	8.5696	10.4452
1.8	-0.5181	3.3660	8.6218	12.7923	20.7177	1.8934	4.5946	9.7885	13.5520	4.1548	8.0246	10.6959	6.6784	8.3449
2.0	-0.6431	2.4949	7.1390	10.0182	18.3233	1.4307	3.6786	7.4766	11.0299	3.2835	6.3277	8.8095	5.3327	6.8279
2.2	-0.7429	1.9295	5.3190	8.6666	15.2453	1.0995	3.3897	6.2744	9.8491	2.6477	4.9764	7.2611	4.3462	5.6985
2.4	-0.7989	1.4788	4.4330	6.6323	11.6087	0.8540	2.7955	5.4898	7.8584	2.1667	4.1176	6.4057	3.5991	4.8436
2.6	-0.8366	1.1309	3.5264	5.3679	10.2369	0.6698	2.1887	4.8648	6.7415	1.7985	3.6228	5.2223	3.0217	4.1719
2.8	-0.8623	0.8711	2.9139	4.4754	9.0021	0.5282	1.7672	4.1679	5.8359	1.5108	2.9348	4.6111	2.5670	3.6305
3.0	-0.8799	0.6825	2.4256	3.7614	7.8452	0.4177	1.6009	3.2567	4.8644	1.2793	2.5696	4.1873	2.2027	3.1993
3.5	-0.9035	0.3412	1.5094	2.6588	5.5496	0.2288	0.7819	2.1931	4.8842	0.8745	1.7165	3.1292	1.5563	2.4105
4.0	-0.9125	0.1539	0.9887	1.8654	4.2826	0.1144	0.4948	1.4294	3.2768	0.6179	1.3246	2.3643	1.1436	1.8905
4.5	-0.9160	0.0427	0.7040	1.4885	4.0385	0.0414	0.3126	1.0364	2.6595	0.4470	0.9030	1.9316	0.8657	1.5318
5.0	-0.9173	-0.0288	0.4479	0.9926	4.4405	-7.3e-3	0.1782	0.7956	2.5685	0.3282	0.6840	1.5892	0.6702	1.2707
6.0	-0.9179	-0.1572	0.2405	0.6681	2.6669	-0.0645	0.0287	0.4223	1.9675	0.1798	0.4205	1.1572	0.4220	0.9230
7.0	-0.8964	-0.1724	0.1128	0.4276	2.0959	-0.0934	-0.0475	0.2204	1.6564	0.0963	0.2439	0.8864	0.2779	0.7126
8.0	-0.8965	-0.1839	0.0731	0.1543	2.0441	-0.1089	-0.0862	0.1523	1.3020	0.0459	0.1518	0.7950	0.1881	0.5700
9.0	-0.8965	-0.1894	-0.0108	0.1044	1.8444	-0.1173	-0.1060	0.0188	1.0115	0.0139	0.0754	0.6180	0.1290	0.4822
10.0	-0.8965	-0.1674	-0.1186	-5.05e-3	1.3867	-0.1219	-0.1161	-0.0495	1.0633	-7.1e-3	0.0343	0.5689	0.0885	0.4341
12.0	-0.8965	-0.1684	-0.1290	-0.1660	1.0070	-0.1258	-0.1239	-0.0900	0.7142	-0.0313	-0.0160	0.3775	0.0313	0.3242
15.0	-0.8965	-0.1924	-0.1487	-0.1545	1.1676	-0.1271	-0.1264	-0.1078	0.6278	-0.0467	-0.0440	0.2867	0.0180	0.2284

* Enerji ve yarıçap $a.u$ (Hartree, Bohr) cinsinden verildi.

Orbital enerjilerinin serbest He atomuna benzemeye başladığı kritik yarıçap değeri $1s^2$ konfigürasyonundan $1s^14s^1$ konfigürasyonuna doğru gittikçe daha büyük yarıçap değerlerine doğru kaydı (**Şekil 5.6.**). Bu sistemin uyarılmış elektronu daha yüksek enerji seviyelerine çıktıkça sonsuz sınırlama potansiyelinden daha çok etkilenmesinden kaynaklanır. Diğer taraftan uyarılan elektronun daha yüksek enerjili seviyelere çıkması durumunda, ortalama enerjinin artmasıyla paralel olarak, orbital enerjileri arasındaki fark arttı.

$1s^14f^1$ konfigürasyonunun $4f$ orbital enerjisinin $Z=0$ ve $Z=2$ durumunda yarıçapa bağlı değişimi **Şekil 5.7.**'de karşılaştırıldı. Safsızlık yükü içermeyen sistemlerin orbital enerjilerinin daha büyük değerler aldığı ancak nokta yapının yarıçapına bağlı olarak merkezinde safsızlık bulunan sistemlere benzer bir değişim sergilediği görüldü.



Şekil 5.7. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $4f$ ve $4f$ orbitallerinin enerjileri

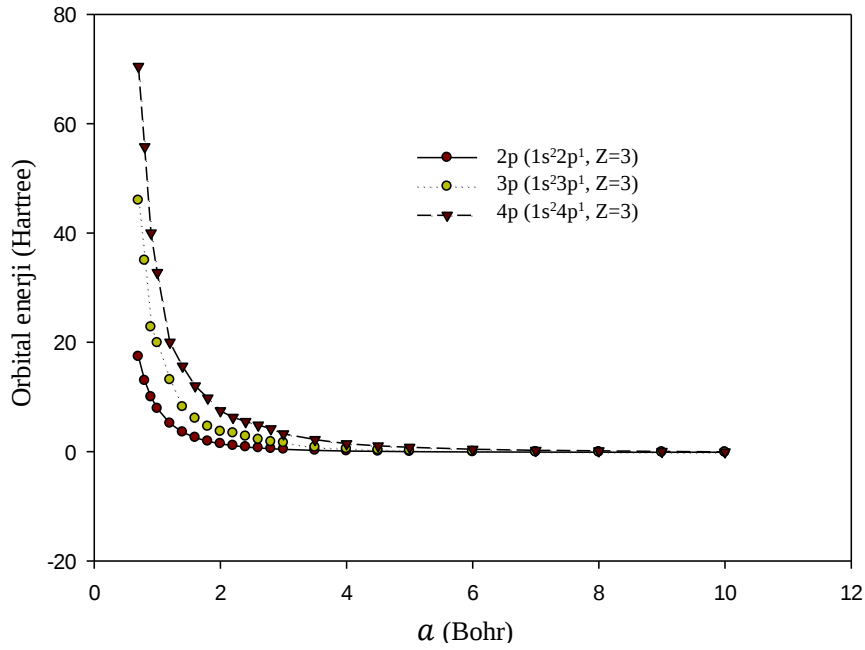
Üç elektronlu sistemlerin $Z=3$ için $1s^22s^1$, $1s^23s^1$, $1s^24s^1$, $1s^22p^1$, $1s^23p^1$, $1s^24p^1$, $1s^23d^1$, $1s^24d^1$, $1s^24f^1$ konfigürasyonlarının ve $Z=0$ için $1s^24d^1$, $1s^24f^1$ konfigürasyonlarının orbital enerjileri Denk. (4.33) kullanılarak hesaplandı ve sonuçlar **Çizelge 5.5.**'de verildi.

Çizelge 5.5. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış üç elektronlu kuantum nokta yapıların konfigürasyonlarının orbital enerjileri*

a	$1s^2 2s^1$ $\sigma = 5$ $Z = 3$ 1s	$1s^2 2s^1$ $\sigma = 5$ $Z = 3$ 2s	$1s^2 3s^1$ $\sigma = 6$ $Z = 3$ 3s	$1s^2 4s^1$ $\sigma = 8$ $Z = 3$ 4s	$1s^2 2p^1$ $\sigma = 5$ $Z = 3$ 2p	$1s^2 3p^1$ $\sigma = 6$ $Z = 3$ 3p	$1s^2 4p^1$ $\sigma = 8$ $Z = 3$ 4p	$1s^2 3d^1$ $\sigma = 5$ $Z = 3$ 3d	$1s^2 4d^1$ $\sigma = 5$ $Z = 3$ 4d	$1s^2 4d^1$ $\sigma = 5$ $Z = 0$ 4d	$1s^2 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z = 3$ 4f	$1s^2 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z = 0$ 4f
0.5	11.3094	67.1318	117.8849	231.2849	35.1764	84.1843	150.2596	62.6132	122.8630	134.6937	94.4708	103.4846
0.6	6.5472	44.7795	94.6020	159.3891	23.7250	57.4250	103.3956	42.9855	84.0477	93.0768	65.1594	72.6475
0.7	3.8078	31.6055	69.0133	114.5786	16.9137	41.5065	81.7877	31.1972	57.3740	69.2651	47.5507	53.9435
0.8	2.1078	23.2678	42.0875	87.3489	12.5625	30.9678	58.5729	23.5980	47.8495	54.2130	36.1650	41.7567
0.9	1.0123	17.5884	32.2583	68.2674	9.6277	24.1682	45.3529	18.4263	36.3443	42.8913	28.3845	33.3497
1.0	0.2444	13.5899	25.3231	54.3117	7.5631	19.2103	37.8248	14.7523	28.8167	34.8247	22.8275	27.2969
1.2	-0.6734	8.5947	16.4859	36.9975	4.9399	12.8507	25.4589	10.0115	20.0770	24.8229	15.6399	19.3403
1.4	-1.1820	5.7056	13.3845	25.0176	3.4147	8.8364	17.1257	7.1911	14.3201	17.9938	11.3388	14.4892
1.6	-1.4869	3.9314	9.1047	18.9138	2.4593	6.5306	13.0029	5.3810	10.8510	14.3043	8.5633	11.3124
1.8	-1.6849	2.7813	6.5661	14.3626	1.8077	5.0564	10.3146	4.1604	8.3907	11.1428	6.6748	9.1100
2.0	-1.8215	2.0062	5.5631	12.2298	1.3918	3.8971	7.7632	3.2766	6.6340	9.5244	5.3335	7.5207
2.2	-1.9209	1.4666	4.2933	8.9344	1.0787	2.7870	6.1757	2.6523	5.3753	8.0048	4.3436	6.3364
2.4	-1.9972	1.0815	3.1463	7.5893	0.8298	2.0931	5.1339	2.1685	4.4415	6.8321	3.5985	5.4316
2.6	-2.0578	0.8002	2.4436	6.6296	0.6643	1.5750	4.5631	1.8016	3.6810	5.9168	3.0244	4.7063
2.8	-2.1065	0.5910	2.0428	5.4496	0.5206	1.2496	4.0144	1.5137	3.1099	5.2080	2.5696	4.1453
3.0	-2.1483	0.4303	1.3092	4.6380	0.4144	1.3440	3.4301	1.2832	2.6698	4.6086	2.2047	3.6676
3.5	-2.2297	0.1747	0.9750	2.8547	0.2309	0.7492	2.1337	0.8765	1.8207	3.4335	1.5576	2.8123
4.0	-2.2767	0.0380	0.4157	2.0551	0.1235	0.2733	1.4909	0.6194	1.3418	2.7323	1.1443	2.2482
4.5	-2.3109	-0.0526	0.3148	1.6541	0.0473	0.3438	1.2229	0.4477	1.1203	2.2969	0.8660	1.8453
5.0	-2.3617	-0.1035	0.0909	1.1411	-1.4555e-3	0.2197	0.7661	0.3286	0.8496	1.8982	0.6703	1.5548
6.0	-2.3886	-0.1565	-0.1175	0.7072	-0.0465	-0.0578	0.4971	0.1802	0.5369	1.5754	0.4221	1.1597
7.0	-2.4074	-0.1764	-0.1410	0.2302	-0.0900	-0.0908	0.2110	0.0965	0.3935	1.4568	0.2780	0.9362
8.0	-2.4053	-0.1774	-0.1072	0.1175	-0.0890	-0.1051	0.1020	0.0460	0.2716	0.9491	0.1882	0.7701
9.0	-2.4351	-0.1909	-0.1206	0.0593	-0.1140	-0.1144	0.0471	0.0140	0.2105	1.0637	0.1289	0.6674
10.0	-2.4233	-0.1909	0.0319	0.0777	-0.1213	-0.1190	3.3890e-3	-6.8240e-3	0.0216	0.8881	0.0918	0.4886
12.0	-2.4473	-0.1956	0.0865	0.0439	-0.1239	-0.1236	-0.0892	-0.0245	0.0415	0.6924	0.0398	0.4251
15.0	-2.4220	-0.1868	-0.1935	-2.1106e-4	-0.1267	-0.1267	-0.0502	-0.0465	0.0173	0.7121	6.7522e-3	0.3532

* Enerji ve yarıçap a.u (Hartree, Bohr) cinsinden verildi.

$1s^2 2p^1$, $1s^2 3p^1$, $1s^2 4p^1$ konfigürasyonlarının **Şekil 5.8.**'de görüldüğü gibi yarıçap değeri arttıkça orbital enerjileri hızla düştü ancak belli bir yarıçap değerine ulaşıldığında orbital enerjileri serbest Li atomunun orbital enerji değerlerine gitti. Bu yarıçap değeri sınırlama etkisinin yeterince zayıfladığı kritik yarıçap değeridir. Daha yüksek enerji seviyelerine çıkıldıkça bu kritik yarıçap değeri arttı.



Şekil 5.8. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış üç elektronlu kuantum nokta yapıların 2p, 3p ve 4p orbitallerinin orbital enerjileri

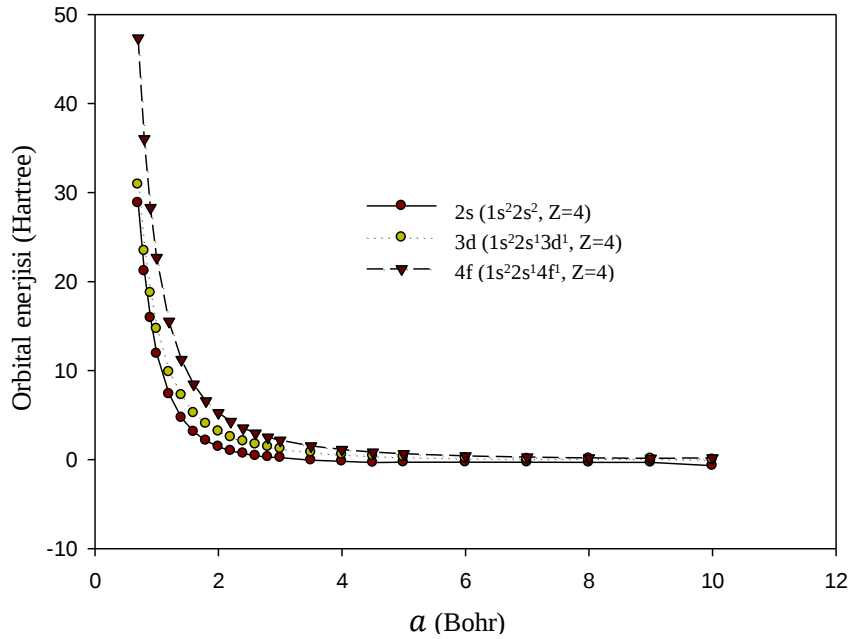
Dört elektronlu kuantum nokta yapıların $Z=4$ için $1s^2 2s^2$, $1s^2 2s^1 3s^1$, $1s^2 2s^1 2p^1$, $1s^2 2s^1 3p^1$, $1s^2 2s^1 4p^1$, $1s^2 2s^1 3d^1$, $1s^2 2s^1 4d^1$, $1s^2 2s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının ve $Z=0$ için $1s^2 2s^1 4f^1$ konfigürasyonunun orbital enerjileri Denk. (4.33) kullanılarak hesaplandı ve sonuçlar **Çizelge 5.6.**'de verildi. **Şekil 5.9.**'da $Z=4$ için $1s^2 2s^2$, $1s^2 2s^1 3d^1$, $1s^2 2s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının orbital enerjilerinin yarıçapa bağlı değişimi verildi. Bu grafikten görüleceği üzere büyük yarıçap değerlerine gidildikçe belli bir kritik yarıçap değerinden sonra orbital enerjileri serbest Be atomunun orbital enerjilerine gittiği görüldü.

İki, üç ve dört elektronlu sistemlerin orbital enerjilerinin yarıçapa bağlı değişimleri incelendiğinde birbirlerine benzer bir seyir izledikleri görüldü. Ancak daha çok elektron içeren sistemlerin kritik yarıçap değeri daha büyük yarıçap değerlerine doğru kaydı. Bu durum beklendiği üzere elektron sayısının artmasıyla birlikte elektronlar arasındaki etkileşmenin artması ve elektronların daha büyük bir hacme yayılma isteği nedeniyle sınırlama potansiyelinden daha fazla etkilenmesidir.

Çizelge 5.6. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların konfigürasyonlarının orbital enerjileri*

a	$1s^2 2s^2$ 2s Z=2 $\sigma = 5$	$1s^2 2s^1 3s^1$ 3s Z=2 $\sigma = 7$	$1s^2 2s^1 2p^1$ 2p Z=2 $\sigma = 5$	$1s^2 2s^1 3p^1$ 3p Z=2 $\sigma = 5$	$1s^2 2s^1 4p^1$ 4p Z=2 $\sigma = 8$	$1s^2 2s^1 3d^1$ 3d Z=2 $\sigma = 5$	$1s^2 2s^1 4d^1$ 4d Z=2 $\sigma = 5$	$1s^2 2s^1 4f^1$ 4f Z=2 $\sigma = 5$	$1s^2 2s^1 4f^1$ 4f Z=0 $\sigma = 5$
0.5	63.3559	159.4361	34.5085	83.3999	162.0167	62.2239	123.3376	94.2002	234.3268
0.6	40.7058	104.9855	23.1579	56.8895	121.1759	42.8791	94.1219	64.9362	165.1408
0.7	28.8224	78.7612	16.5234	40.7239	80.9321	30.9009	62.0551	47.3530	123.2927
0.8	21.1793	58.9052	12.1321	30.5539	64.2033	23.4470	46.9737	36.0296	95.6503
0.9	15.9099	45.0568	9.2475	23.5089	48.3328	18.7116	36.4833	28.2900	76.6246
1.0	11.8800	36.3224	7.2168	18.3608	39.0182	14.6855	29.1748	22.6820	62.8047
1.2	7.3652	23.9620	4.6461	12.1151	25.3654	9.8359	19.5957	15.5209	44.8196
1.4	4.7053	16.6298	3.1552	8.4909	17.2250	7.2418	14.0536	11.2354	33.9582
1.6	3.1332	11.8839	2.2036	6.1271	12.2596	5.2402	10.4812	8.4738	26.5849
1.8	2.1155	9.0823	1.5858	6.0826	10.6828	4.0254	8.0799	6.5944	21.5906
2.0	1.4439	6.3065	1.1590	3.4824	7.2465	3.1677	6.3687	5.2599	17.9455
2.2	0.9875	5.4977	0.8546	2.6883	5.8786	2.5415	5.1997	4.2794	15.3652
2.4	0.6967	4.1068	0.6304	2.0944	4.3144	2.0710	4.2346	3.5431	13.2793
2.6	0.4283	3.4959	0.4673	1.6520	3.5783	1.7158	3.7211	2.9682	11.7294
2.8	0.2776	2.8750	0.3380	1.3135	2.9150	1.4293	3.0529	2.5208	10.0851
3.0	0.2249	2.3674	0.2425	1.0502	2.4481	1.2030	2.8941	2.1585	9.0806
3.5	-0.0700	1.5186	0.0660	0.6665	2.1412	0.8160	1.8792	1.5213	7.0884
4.0	-0.1805	1.0022	-0.0335	0.5973	1.3360	0.5635	1.1656	1.1225	5.8191
4.5	-0.3357	0.6844	-0.0951	0.3083	0.8738	0.4017	0.8329	0.8433	4.9062
5.0	-0.2906	0.4435	-0.1268	0.1959	0.5873	0.2911	0.6211	0.6536	4.2368
6.0	-0.2838	0.2291	-0.1690	-0.1575	0.2266	0.1560	0.4929	0.4129	3.1672
7.0	-0.2966	0.1303	-0.1840	-0.1608	0.1628	0.0835	0.2249	0.2734	2.7702
8.0	-0.3042	0.0918	-0.1899	-0.0695	-0.0429	0.1261	0.2303	0.1863	2.4539
9.0	-0.3087	-0.0172	-0.1892	-0.0998	-0.0923	0.1079	0.0446	0.1421	2.1610
10.0	-0.6714	0.0396	-0.1925	-0.1738	-0.0959	-9.1256e-3	0.0537	0.1712	1.8305
12.0	-0.3058	-0.0510	-0.1908	-0.1825	-0.1830	2.3351e-3	0.0481	0.0738	1.4768
15.0	-0.3218	0.1835	-0.1982	-0.2031	-0.1204	-0.0471	-0.0428	2.6961e-3	1.3697

* Enerji ve yarıçap a.u (Hartree, Bohr) cinsinden verildi.



Şekil 5.9. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların 2s, 3d ve 4f orbitallerinin orbital enerjileri

5.1.4. Sonsuz kuantum nokta yapıların enerji seviyeleri

İki elektronlu kuantum nokta yapılar için ortalama enerji ve elektronik potansiyel enerji değerleri kullanılarak nokta yapının $Z=2$ için $1s^2$, $1s^12s^1$, $1s^13s^1$, $1s^14s^1$, $1s^12p^1$, $1s^13p^1$, $1s^14p^1$, $1s^13d^1$, $1s^14d^1$, $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının ve $Z=0$ için $1s^14s^1$, $1s^14p^1$, $1s^14d^1$, $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının farklı yarıçap değerlerine karşılık gelen singlet ve triplet enerjileri Denk. (4.29) kullanılarak hesaplandı ve elde edilen sonuçlar **Çizelge 5.7.** ve **Çizelge 5.8.**'de verildi. Singlet ve triplet enerji seviyelerinin yarıçapa bağlı değişimi, safsızlık yükünün $Z=2$ olması durumunda $1s^12s^1$ konfigürasyonu için **Şekil 5.10.**'da verildi. Grafiğe göre enerji değerleri yarıçap arttıkça kritik yarıçap değerine kadar azaldı ve serbest He atomunun enerji seviyelerine ulaştı. Bu durum ortalama enerjide olduğu gibi beklenen bir durumdur. Ancak küçük nokta yapı yarıçaplarında singlet ve triplet enerjileri arasındaki fark belirginken büyük yarıçap değerlerinde bu fark azaldı. Bu durumun nedeni singlet ve triplet enerji seviyeleri arasında farkın oluşmasına neden olan exchange enerjisinin küçük yarıçap değerlerinde birbirine çok yaklaşan elektronlar arasında artarken büyük yarıçap değerinde birbirinden uzaklaşan elektronlar arasında azalmasındandır. Öyle ki büyük yarıçap değerlerinde exchange enerjisi aşırı azalması neredeyse enerji seviyelerinin üst üste gelmesine neden oldu.

Çizelge 5.7. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların konfigürasyonlarının singlet enerji seviyeleri*

a	$1s^2$ $\sigma=5$ $Z=2$	$1s^12s^1$ $\sigma=5$ $Z=2$	$1s^13s^1$ $\sigma=7$ $Z=2$	$1s^14s^1$ $\sigma=8$ $Z=2$	$1s^14s^1$ $\sigma=8$ $Z=0$	$1s^12p^1$ $\sigma=5$ $Z=2$	$1s^13p^1$ $\sigma=5$ $Z=2$	$1s^14p^1$ $\sigma=8$ $Z=2$	$1s^14p^1$ $\sigma=8$ $Z=0$	$1s^13d^1$ $\sigma=5$ $Z=2$	$1s^14d^1$ $\sigma=5$ $Z=2$	$1s^14d^1$ $\sigma=5$ $Z=0$	$1s^14f^1$ $\sigma=5$ $Z=2$	$1s^14f^1$ $\sigma=5$ $Z=0$
0.5	23.5800	80.7672 69.55041 ^a	180.4423 80.06519 ^a	212.4203 123.4466 ^a	270.7867	47.8750	86.5978	149.3209	192.7392	73.8444	122.3667	152.5565	105.2760	121.5456
0.6	13.3742	53.6361	122.2646	157.0927	189.0294	31.4398	62.3964	118.1109	122.1630	49.4816	83.5650	106.0079	71.2061	85.0389
0.7	7.9773	37.1780	64.0388	115.4300	148.2250	21.7445	49.3101	74.2335	89.8156	34.9510	59.4335	78.3829	50.9049	62.8367
0.8	4.6621	26.7748	45.9114	76.3888	117.8150	15.5864	36.7185	57.2977	74.8925	25.6735	44.3505	61.2159	37.8803	48.4026
0.9	2.5892	19.9893	35.2248	65.6636	83.6771	11.4945	23.3013	40.3032	59.9201	19.4209	34.1435	47.8804	29.0422	38.5159
1.0	1.0625	15.0903	31.8757	53.1270	70.8965	8.5780	19.8660	32.4989	45.4841	15.0138	26.8028	38.8273	22.7913	31.4287
		14.41376 ^a	15.12721 ^a	28.27446 ^a										
1.2	-0.5652	9.0537	20.4866	33.9577	46.5462	4.9314	12.2097	18.8463	31.8767	9.3693	17.7693	27.2282	14.7661	22.0918
1.4	-1.5663	5.4546	13.7411	22.5912	38.0491	2.8188	6.8275	14.5486	23.3378	6.0631	12.5533	20.3369	10.0214	16.4180
1.6	-2.0741	3.3081	9.7305	15.5842	29.4747	1.5130	4.4667	10.4024	18.2567	3.9748	8.9487	15.5586	6.9967	12.7309
1.8	-2.3691	1.8511	6.8167	11.1082	23.6149	0.6443	2.8561	7.9699	15.3724	2.5760	6.2379	12.3864	4.9591	10.1997
2.0	-2.5465	0.8712	5.2947	8.1860	20.2048	0.0433	1.8692	5.5992	12.5822	1.5966	4.4749	10.2060	3.5258	8.3461
		0.946589 ^a	2.109932 ^a	4.201021 ^a										
2.2	-2.6732	0.2199	3.4037	6.8001	16.8089	-0.3830	1.5509	4.3505	11.2291	0.8879	3.0687	8.4265	2.4784	6.9730
2.4	-2.7423	-0.2764	2.5215	4.7558	13.2536	-0.7032	0.9103	3.5461	8.9488	0.3527	2.1785	7.4104	1.6942	5.9421
2.6	-2.7858	-0.6637	1.6761	3.5283	11.4551	-0.9453	0.2766	2.9229	7.7289	-0.0548	1.6816	6.1029	1.0927	5.1311
2.8	-2.8134	-0.9532	0.9657	2.5776	9.8678	-1.1341	-0.1540	2.2120	6.6837	-0.3727	0.9692	5.4533	0.6188	4.4624
3.0	-2.8310	-1.1656	0.6914	1.8673	8.7197	-1.2846	-0.3302	1.2818	5.5936	-0.6279	0.6204	4.8583	0.2409	3.9466
		-1.114121 ^a	0.173325 ^a	0.645721 ^a										
4.0	-2.8585	-1.7646	-0.9851	-0.1070	4.6743	-1.7197	-1.4963	-0.5482	3.7159	-1.3524	-0.6599	2.7689	-0.8462	2.3452
		-1.717517 ^a	-0.458205 ^a	-0.286007 ^a										
5.0	-2.8614	-1.9784	-1.5420	-0.9704	4.8387	-1.9059	-1.8186	-1.1972	3.2541	-1.6602	-1.3128	1.9232	-1.3271	1.5883
		-1.949762 ^a	-1.079197 ^a	-0.641430 ^a										
6.0	-2.8617	-2.1092	-1.7304	-1.3246	3.0881	-1.9953	-1.9687	-1.5755	2.3860	-1.8151	-1.5769	1.4121	-1.5772	1.1567
		-2.050701 ^a	-1.460232 ^a	-0.735069 ^a										
7.0	-2.8476	-2.1370	-1.8556	-1.5527	2.2234	-2.0419	-2.0434	-1.7761	1.8491	-1.9011	-1.7550	1.0611	-1.7217	0.9974
		-2.097824 ^a	-1.675499 ^a	-1.031614 ^a										
8.0	-2.8477	-2.1558	-1.8798	-1.8392	2.2096	-2.0670	-2.0809	-1.8450	1.5968	-1.9527	-1.8476	0.9429	-1.8118	0.8329
		-2.120562 ^a	-1.799879 ^a	-1.294020 ^a										
10.0	-2.8477	-2.1525	-2.1157	-1.9981	1.6843	-2.0891	-2.1060	-2.0475	1.3070	-2.0066	-1.9655	0.6850	-1.9115	0.5593
		-2.133647 ^a	-1.942677 ^a	-1.443232 ^a										
12.0	-2.8477	-2.1523	-2.1241	-2.1107	1.4400	-2.0960	-2.1108	-2.0881	0.9033	-2.0310	-2.0160	0.4811	-1.9636	0.4638
15.0	-2.8477	-2.1695	-2.1450	-2.1170	1.3037	-2.0984	-2.1126	-2.1053	0.7727	-2.0465	-2.0439	0.3740	-1.9954	0.3416

*Montgomery Jr ve Pupyshev, 2013

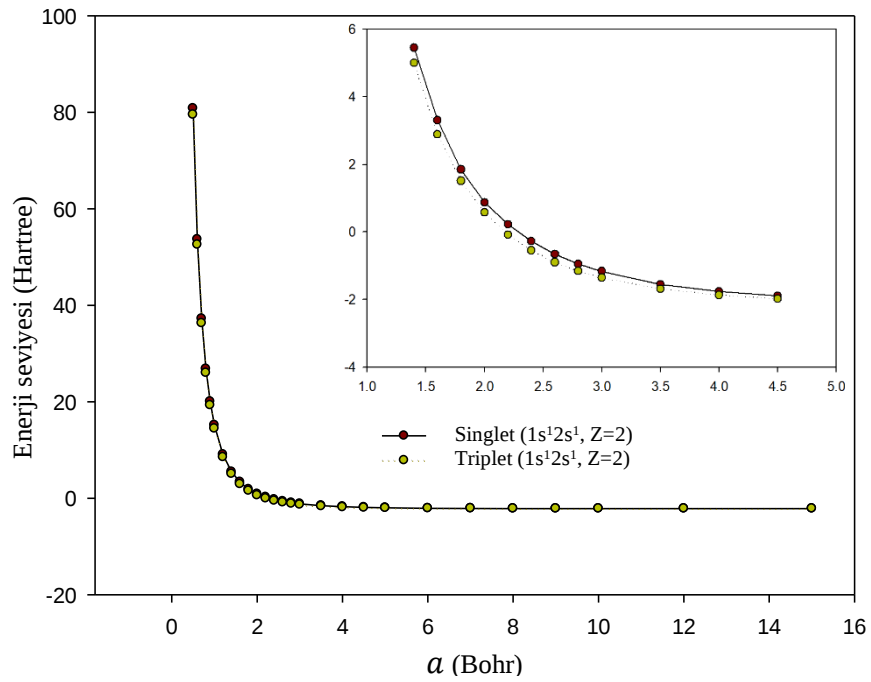
* Enerji ve yarıçap a.u (Hartree, Bohr) cinsinden verildi.

Çizelge 5.8. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların konfigürasyonlarının triplet enerji seviyeleri*

a	$1s^1 2s^1$ $Z=2$ $\sigma=5$	$1s^1 3s^1$ $Z=2$ $\sigma=7$	$1s^1 4s^1$ $Z=2$ $\sigma=8$	$1s^1 4s^1$ $Z=0$ $\sigma=8$	$1s^1 2p^1$ $Z=2$ $\sigma=5$	$1s^1 3p^1$ $Z=2$ $\sigma=5$	$1s^1 4p^1$ $Z=2$ $\sigma=8$	$1s^1 4p^1$ $Z=0$ $\sigma=8$	$1s^1 3d^1$ $Z=2$ $\sigma=5$	$1s^1 4d^1$ $Z=2$ $\sigma=5$	$1s^1 4d^1$ $Z=0$ $\sigma=5$	$1s^1 4f^1$ $Z=2$ $\sigma=5$	$1s^1 4f^1$ $Z=0$ $\sigma=5$
0.5	79.4616 78.820864 ^a	179.9615 145.940357 ^a	211.8744 176.363244 ^a	270.5851	43.6285	85.0976	146.9173	192.3055	71.1472	121.4058	151.5092	103.5445	119.4776
0.6	52.5046	121.8634	156.8755	188.1783	27.9208	61.3702	117.6098	121.7665	47.2636	82.7302	105.1353	69.7755	83.4015
0.7	36.2479	63.7991	114.9426	148.1002	18.7417	48.0713	73.9685	89.4888	33.0904	58.8000	77.5968	49.6994	61.4011
0.8	25.9584	45.7565	75.8153	117.6922	12.9749	35.6213	57.0680	74.6121	24.0831	43.7938	60.4798	36.8479	47.1176
0.9	19.2446	35.0468	65.3875	83.6175	9.1853	22.6161	39.9832	59.6859	18.0299	33.6955	47.2924	28.1384	37.4181
1.0	14.4184 14.359715 ^a	31.7266 32.954387 ^a	52.7290 38.515498 ^a	70.8274	6.5143	19.2323	32.1040	45.2254	13.7849	26.4263	38.3261	22.0027	30.4696
1.2	8.4786	20.3800	33.8570	46.4863	3.2349	11.6989	18.5469	31.7230	8.3988	17.4629	26.8068	14.1760	21.2881
1.4	5.0077	13.6361	22.4614	37.9830	1.3971	6.4551	13.7355	23.1902	5.2764	12.3810	19.9260	9.5721	15.7119
1.6	2.8855	9.6394	15.3865	29.4026	0.2921	4.1613	10.3535	18.1373	3.3312	8.7313	15.2276	6.6319	12.1284
1.8	1.5116	6.7366	10.8613	23.5569	-0.4107	2.6247	7.8867	15.2590	2.0458	6.0763	12.1106	4.6825	9.6878
2.0	0.5758 0.560251 ^a	5.2022 6.373994 ^a	8.0748 6.531128 ^a	20.1481	-0.8720	1.6675	5.5523	12.4831	1.1606	4.3310	9.9330	3.2981	7.8671
2.2	-0.0833	3.3418	6.6731	16.7571	-1.1872	1.3459	4.2893	11.1376	0.5278	2.9691	8.1996	2.3123	6.5142
2.4	-0.5509	2.4503	4.6239	13.2024	-1.4091	0.7493	3.4964	8.8612	0.0594	2.1050	7.1867	1.5594	5.5635
2.6	-0.9013	1.6191	3.3467	11.4079	-1.5681	0.1463	2.8444	7.6541	-0.2944	1.5976	5.9239	0.9834	4.7956
2.8	-1.1631	0.9113	2.4767	9.8344	-1.6854	-0.2756	2.1475	6.6141	-0.5675	0.9182	5.3149	0.5351	4.1320
3.0	-1.3568 -1.370511 ^a	0.6303 1.192269 ^a	1.7556 1.987546 ^a	8.6889	-1.7733	-0.4416	1.2443	5.5282	-0.7857	0.5347	4.6711	0.1768	3.6652
3.5	-1.6877	-0.4243	0.6441	6.0074	-1.9147	-1.2268	0.1698	5.4625	-1.1648	-0.2949	3.4880	-0.4587	2.7493
4.0	-1.8697 -1.874612 ^a	-1.0104 -0.497750 ^a	-0.1230 0.597762 ^a	4.6524	-1.9947	-1.5108	-0.5856	3.6413	-1.4050	-0.6871	2.6635	-0.8645	2.1503
4.5	-1.9771	-1.2984	-0.5141	4.4230	-2.0435	-1.6930	-0.9731	3.3926	-1.5674	-1.1004	2.1653	-1.1385	1.7458
5.0	-2.0445 -2.048044 ^a	-1.5553 -1.211382 ^a	-1.0184 0.019600 ^a	4.8071	-2.0753	-1.8240	-1.2088	3.1755	-1.6810	-1.3185	1.8523	-1.3321	1.4541
6.0	-2.1161 -2.117816 ^a	-1.7377 -1.562909 ^a	-1.3340 -0.683439 ^a	3.0753	-2.1114	-1.9730	-1.5790	2.3290	-1.8242	-1.5815	1.3504	-1.5787	1.0520
7.0	-2.1428	-1.8671	-1.5578	2.2038	-2.1288	-2.0503	-1.7816	1.8252	-1.9057	-1.7570	1.0028	-1.7223	0.9757
8.0	-2.1615 -2.162784 ^a	-1.8921 -1.866425 ^a	-1.8479 -1.395143 ^a	2.1930	-2.1379	-2.0900	-1.8496	1.5627	-1.9551	-1.8486	0.9032	-1.8120	0.8217
9.0	-2.1683	-1.9944	-1.8971	1.9805	-2.1425	-2.1117	-1.9816	1.2350	-1.9867	-1.9246	0.7078	-1.8711	0.5613
10.0	-2.1703 -2.172627 ^a	-2.1178 -1.979424 ^a	-2.0073 -1.691923 ^a	1.6696	-2.1448	-2.1233	-2.0509	1.2826	-2.0076	-1.9658	0.6563	-1.9115	0.5090
12.0	-2.1730	-2.1297	-2.1320	1.3961	-2.1465	-2.1331	-2.0913	0.8687	-2.0315	-2.0160	0.4409	-1.9636	0.4533
15.0	-2.1741	-2.1457	-2.1510	1.2837	-2.1470	-2.1363	-2.1096	0.7546	-2.0468	-2.0440	0.3476	-1.9954	0.3378

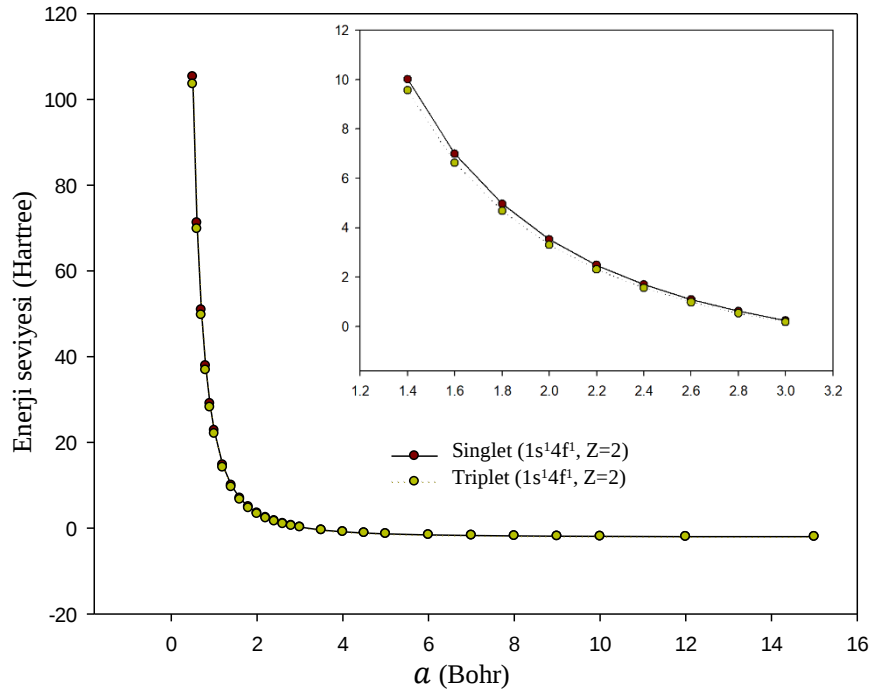
*Montgomery Jr ve Pupyshev, 2013

* Enerji ve yarıçap a.u (Hartree, Bohr) cinsinden verildi.

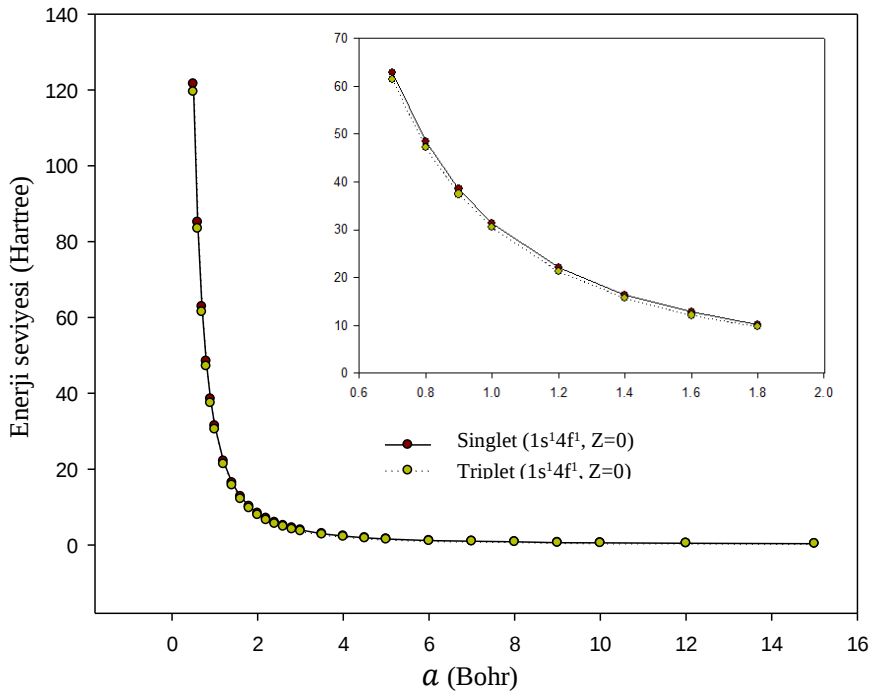


Şekil 5.10. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapının $1s^1 2s^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri

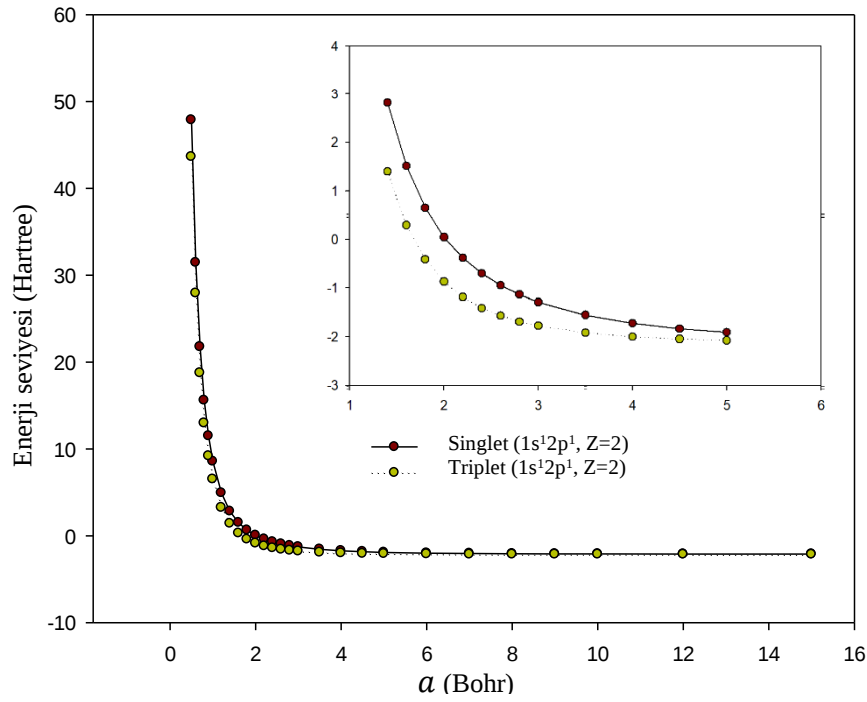
Uyarılan elektron daha yüksek enerji seviyelerine çıktıkça, **Şekil 5.11.**'de verilen $1s^1 4f^1$ konfigürasyonunun enerji seviyelerinde olduğu gibi, singlet ve triplet enerji seviyeleri arasındaki fark iyice azaldı. Bu durumun nedeni iki elektron arasındaki mesafenin artmasının sonucu olarak enerji seviyelerinin oluşmasında etkili olan exchange enerji değerinin azalmasıdır. Benzer şekilde nokta yapının yarıçapının artması elektronların birbirinden uzaklaşmasına ve dolayısı ile enerji seviyelerinin birbirine yaklaşmasına sebep oldu. Ayrıca safsızlık yükünün sıfır olması, elektronların safsızlık nedeniyle maruz kalacağı elektriksel çekim kuvvetinin ortadan kalkmasına neden olur ve bu sayede elektronlar daha serbest hareket eder. Daha serbest hareket eden elektronların birbirlerinden iyice uzaklaşması da enerji seviyeleri arasındaki farkı azaltır. Öyle ki merkezinde safsızlık bulunmayan $1s^1 4f^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri **Şekil 5.12.**'de görüldüğü gibi neredeyse üst üste geldi.



Şekil 5.11. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapının $1s^1 4f^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri



Şekil 5.12. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapının $1s^1 4f^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri



Şekil 5.13. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapının $1s^2 2p^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri

İki elektronlu kuantum nokta yapılarında enerji seviyeleri arasındaki en belirgin fark, şekil **Şekil 5.13.**'te görüldüğü gibi $Z=2$ için $1s^2 2p^1$ konfigürasyonunda ortaya çıktı. Bu durum $1s$ ve $2p$ orbitallerinde bulunan elektronların birbirine diğer orbitallerdeki elektronlara göre daha yakın olmasının sonucudur.

Dört elektronlu sistemlerin $Z=4$ için $1s^2 2s^2$, $1s^2 s^1 3s^1$, $1s^2 2s^1 2p^1$, $1s^2 2s^1 3p^1$, $1s^2 2s^1 4p^1$, $1s^2 2s^1 3d^1$, $1s^2 2s^1 4d^1$, $1s^2 2s^1 4f^1$ konfigürasyonun ve $Z=0$ için $1s^2 2s^1 4f^1$ konfigürasyonunun singlet ve triplet enerji seviyeleri Denk. (4.29) kullanılarak hesaplandı ve elde edilen değerler sırasıyla **Çizelge 5.9.** ve **Çizelge 5.10.**'da verildi. **Şekil 5.14.**'de görüldüğü gibi yarıçap arttıkça singlet ve triplet enerji değerleri azaldı ve belli bir kritik yarıçap değerinden sonra serbest Be atomunun enerji seviyelerine yaklaştı. Küçük yarıçap değerlerinde exchange enerjisinin artmasından dolayı singlet ve triplet enerji seviyeleri arasındaki fark belirgin iken büyük yarıçap değerlerinde uzaklaşan elektronlar arasındaki etkileşmenin zayıflaması nedeniyle enerji seviyeleri birbirine yaklaştı.

Çizelge 5.9. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların konfigürasyonlarının singlet enerji seviyeleri*

a	$1s^2 2s^2$ 2s z=2 $\sigma = 5$	$1s^2 2s^1 3s^1$ 3s z=2 $\sigma = 7$	$1s^2 2s^1 2p^1$ 2p z=2 $\sigma = 5$	$1s^2 2s^1 3p^1$ 3p z=2 $\sigma = 5$	$1s^2 2s^1 4p^1$ 4p z=2 $\sigma = 8$	$1s^2 2s^1 3d^1$ 3d z=2 $\sigma = 5$	$1s^2 2s^1 4d^1$ 4d z=2 $\sigma = 5$	$1s^2 2s^1 4f^1$ 4f z=2 $\sigma = 5$	$1s^2 2s^1 4f^1$ 4f z=0 $\sigma = 5$
0.5	125.2111	225.2688	95.0098	146.1287	225.2149	122.8444	185.1117	155.2517	235.6838
0.6	75.4324	144.8658	55.8547	91.3557	155.2900	75.9173	128.2273	98.3188	166.2790
0.7	46.9924	98.0617	33.7280	59.4651	99.7111	48.4919	80.2899	65.1311	124.2842
0.8	29.4405	67.7097	19.9701	39.5879	73.4549	31.5703	55.5743	44.2881	96.5428
0.9	17.7985	47.8772	10.9898	26.3263	50.7786	20.6679	38.8288	30.4843	77.4201
1.0	9.7638	34.6816	4.9213	16.9718	37.2158	12.6470	27.3856	20.7488	63.4429
1.2	0.1581	17.2359	-2.5030	5.6188	18.4190	2.9445	12.7443	8.6711	45.3736
1.4	-5.1880	7.3865	-6.5325	-0.7391	7.7344	-2.2690	4.4629	1.7463	34.4624
1.6	-8.3067	0.9257	-9.0298	-4.6911	1.0808	-5.7494	-0.6534	-2.5428	27.0372
1.8	-10.2469	-3.0383	-10.5254	-5.6722	-1.4227	-7.8900	-3.9199	-5.3695	22.0117
2.0	-11.5053	-5.7794	-11.5021	-8.9668	-5.5052	-9.3503	-6.3496	-7.3195	18.2509
2.2	-12.3504	-7.6580	-12.1676	-10.1905	-7.2910	-10.3843	-7.9107	-8.7147	15.7435
2.4	-12.8834	-9.0987	-12.6429	-10.9456	-9.1061	-11.1664	-9.1872	-9.7597	13.6296
2.6	-13.3459	-10.1419	-12.9411	-11.7418	-10.0505	-11.7081	-9.8597	-10.5279	12.1675
2.8	-13.6314	-10.9235	-13.2030	-12.2328	-10.8568	-12.1554	-10.6754	-11.1429	10.4287
3.0	-13.7504	-11.5320	-13.3997	-12.6087	-11.4226	-12.4812	-10.9271	-11.6084	9.3608
3.5	-14.1793	-12.5284	-13.7295	-13.1473	-11.8633	-13.0537	-12.1076	-12.4268	7.3775
4.0	-14.3442	-13.1190	-13.9104	-13.2197	-12.7637	-13.4065	-12.9623	-12.9300	6.0520
4.5	-14.4391	-13.4548	-14.0173	-13.6331	-13.3070	-13.6311	-13.3336	-13.2605	5.1193
5.0	-14.5068	-13.7392	-14.0756	-13.7801	-13.6195	-13.7826	-13.5438	-13.4929	4.4317
6.0	-14.5359	-13.9742	-14.1514	-14.1423	-13.9941	-13.9707	-13.6875	-13.7817	3.3639
7.0	-14.5500	-14.0913	-14.1776	-14.1352	-14.0627	-14.0927	-14.0036	-13.9497	2.9097
8.0	-14.5563	-14.1334	-14.1880	-14.2137	-14.2379	-14.0055	-14.0256	-14.0585	2.5944
9.0	-14.5597	-14.1864	-14.1871	-14.2172	-14.2739	-14.0233	-14.2091	-14.1051	2.1765
10.0	-14.5641	-14.1795	-14.1929	-14.1582	-14.2927	-14.2396	-14.1959	-14.0723	1.9494
12.0	-14.5658	-14.2683	-14.2209	-14.1995	-14.2758	-14.2268	-14.2100	-14.1435	1.5021
15.0	-14.5619	-13.5222	-14.2321	-14.2399	-14.0683	-14.2901	-14.2816	-14.2539	1.3807

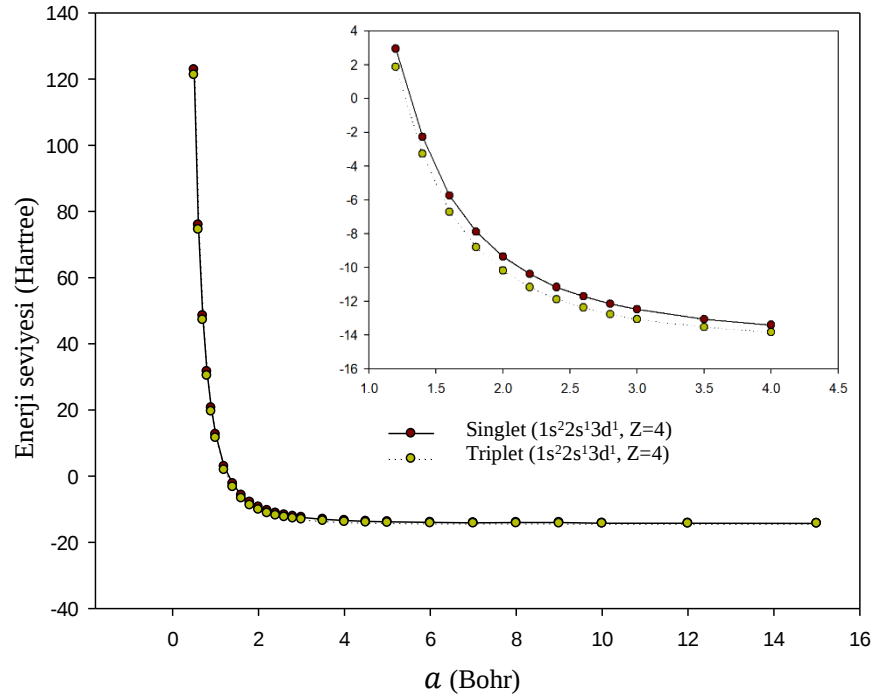
* Enerji ve yarıçap a.u (Hartree, Bohr) cinsinden verildi.

Çizelge 5.10. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların konfigürasyonlarının triplet enerji seviyeleri*

a	$1s^2 2s^1 3s^1$ $\sigma = 7$ $Z = 4$ 3s	$1s^2 2s^1 2p^1$ $\sigma = 5$ $Z = 4$ 2p	$1s^2 2s^1 3p^1$ $\sigma = 5$ $Z = 4$ 3p	$1s^2 2s^1 4p^1$ $\sigma = 8,$ $Z = 4$ 4p	$1s^2 2s^1 3d^1$ $\sigma = 5$ $Z = 4$ 3d	$1s^2 2s^1 4d^1$ $\sigma = 5$ $Z = 4$ 4d	$1s^2 2s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z = 4$ 4f	$1s^2 2s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z = 0$ 4f
0.5	223.7968	93.5843	142.7898	223.6481	121.2373	182.8798	153.5566	234.3268
0.6	143.7288	54.6324	88.5541	153.7330	74.5090	126.1127	96.8350	165.1408
0.7	97.0315	32.6374	57.0724	98.5952	47.1985	78.7368	63.8098	123.2927
0.8	66.7789	18.9347	37.4274	72.1818	30.3337	54.1226	43.0555	95.6503
0.9	47.1145	9.9975	24.4134	49.8874	19.5535	37.5962	29.3215	76.6246
1.0	33.9107	3.9501	15.2404	36.3818	11.5458	26.2627	19.6555	62.8047
1.2	16.6413	4.84199 ^c						
1.4	6.8433	-3.4382	4.1678	17.8326	1.8692	11.8548	7.6734	44.8196
1.6	0.5749	-7.4664	-1.9868	7.0458	-3.2692	3.7181	0.8272	33.9582
1.8	-3.3266	-9.8765	-5.8027	0.6519	-6.7140	-1.3005	-3.3810	26.5849
2.0	-5.9854	-11.3536	-6.8117	-1.8792	-8.7915	-4.4789	-6.1304	21.5906
2.2	-7.8750	-12.3171	-9.8539	-5.8343	-10.1900	-6.8284	-8.0134	17.9455
2.4	-9.2725	-11.82487 ^c						
2.6	-10.3096	-12.9657	-10.9979	-7.5731	-11.1670	-8.3480	-9.3356	15.3652
2.8	-11.0722	-13.4198	-11.6710	-9.4028	-11.8795	-9.5538	-10.3238	13.2793
3.0	-11.6721	-13.7267	-12.4277	-10.3105	-12.3756	-10.2494	-11.0415	11.7294
4.0	-13.2283	-13.9605	-12.8756	-11.0951	-12.7808	-11.0191	-11.6140	10.0851
5.0	-13.8281	-14.1279	-13.2132	-11.6470	-13.0671	-11.2840	-12.0428	9.0806
6.0	-14.0489	-13.81933 ^c						
7.0	-14.1387	-14.5220	-13.7224	-12.9412	-13.8293	-13.1201	-13.1883	5.8191
8.0	-14.1864	-14.28306 ^c						
10.0	-14.2465	-14.6287	-14.2240	-13.7045	-14.0974	-13.5874	-13.6807	4.2368
12.0	-14.3225	-14.42037 ^c						
15.0	-13.6226	-14.6581	-14.6348	-14.0681	-14.2073	-13.8281	-13.9008	3.1672
		-14.46545 ^c						
		-14.6648	-14.6394	-14.1362	-14.2649	-14.0657	-14.0216	2.7702
		-14.48140 ^c						
		-14.6661	-14.4116	-14.3505	-14.2372	-14.0566	-14.0926	2.4539
		-14.48764 ^c						
		-14.6665	-14.6404	-14.4038	-14.2970	-14.2119	-14.0994	1.8305
		-14.49182 ^c						
		-14.6814	-14.6569	-14.5941	-14.3094	-14.2307	-14.1459	1.4768
		-14.6789	-14.6705	-14.2532	-14.2996	-14.2968	-14.2545	1.3697

^c Sañu-Ginarte ve ark., 2019

* Enerji ve yarıçap a.u (Hartree, Bohr) cinsinden verildi.



Şekil 5.14. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2 2s^1 3d^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri

Üç elektronlu kuantum nokta yapılarda iki elektron $1s$ orbitalinde tutulurken üçüncü elektron daha yüksek enerjili orbitallerde bulunduğu durumlar incelendi. Dolayısıyla ele alınan üç elektronlu sistemlerin açık kabuklarında her zaman sadece bir elektron tutuldu. Bu durumda tek bir enerji seviyesi (doublet) ortaya çıkar ve bu enerji seviyesi konfigürasyonun ortalama enerjisine eşittir.

5.1.5. Sonsuz kuantum nokta yapıların virial katsayıları

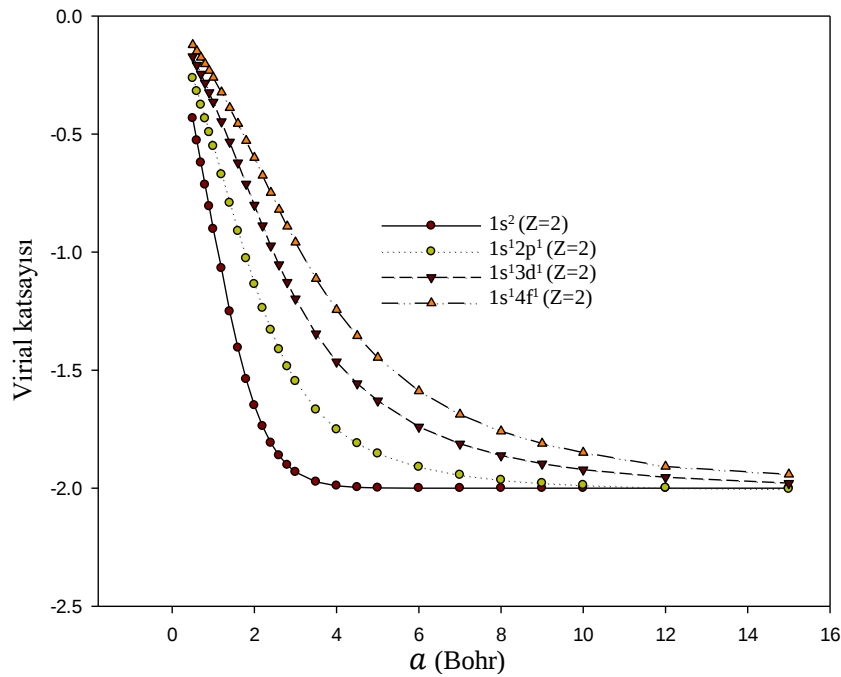
Kuantum nokta yapılarda sınırlama etkisi, virial katsayısının serbest atomların virial katsayılarından farklı değerler almasına neden olur. Buna rağmen sınırlama etkisinin zayıfladığı büyük yarıçap değerlerinde kuantum nokta yapının virial katsayıları da tıpkı atomik sistemlerde olduğu gibi -2 değerine yaklaşır. Bu durum yapılan hesaplamalarda bir tür kontrol mekanizması olarak kullanıldı. Bu amaçla merkezinde atomik safsızlık bulunan iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^1 2s^1$, $1s^1 3s^1$, $1s^1 4s^1$, $1s^1 2p^1$, $1s^1 3p^1$, $1s^1 4p^1$, $1s^1 3d^1$, $1s^1 4d^1$ ve $1s^1 4f^1$ konfigürasyonları için virial katsayıları Denk. (4.41) kullanılarak hesaplandı ve sonuçlar **Çizelge 5.11.**'de verildi.

Çizelge 5.11. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların konfigürasyonlarının virial katsayıları*

a	$1s^2$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^1 2s^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^1 4s^1$ $\sigma = 8$ $Z=2$	$1s^1 2p^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^1 3p^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^1 4p^1$ $\sigma = 8$ $Z=2$	$1s^1 3d^1$ $\sigma = 8$ $Z=0$	$1s^1 4d^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$
0.5	-0.4338	-0.2043	-0.0964	-0.2634	-0.1444	-0.1084	-0.1716	-0.1023	-0.1229
0.6	-0.5275	-0.2505	-0.0877	-0.3194	-0.1693	-0.1012	-0.2082	-0.1257	-0.1489
0.7	-0.6213	-0.2921	-0.1469	-0.3763	-0.1923	-0.1334	-0.2460	-0.1492	-0.1758
0.8	-0.7153	-0.3366	-0.1886	-0.4340	-0.2221	-0.1464	-0.2838	-0.1740	-0.2034
0.9	-0.8062	-0.3827	-0.1601	-0.4927	-0.2743	-0.1745	-0.3237	-0.1984	-0.2316
1.0	-0.9025	-0.4286	-0.2150	-0.5515	-0.3008	-0.1974	-0.3642	-0.2234	-0.2609
1.2	-1.0688	-0.5234	-0.2062	-0.6717	-0.3726	-0.2689	-0.4472	-0.2763	-0.3232
1.4	-1.2520	-0.6207	-0.2708	-0.7921	-0.4804	-0.3364	-0.5330	-0.3554	-0.3892
1.6	-1.4059	-0.7164	-0.3263	-0.9110	-0.5693	-0.3605	-0.6215	-0.3903	-0.4563
1.8	-1.5388	-0.8143	-0.4053	-1.0266	-0.6611	-0.4039	-0.7110	-0.4613	-0.5286
2.0	-1.6497	-0.9098	-0.4221	-1.1360	-0.7450	-0.4794	-0.8004	-0.5353	-0.6001
2.2	-1.7376	-1.0012	-0.4690	-1.2374	-0.7795	-0.5322	-0.8880	-0.6167	-0.6757
2.4	-1.8083	-1.0888	-0.5481	-1.3301	-0.8606	-0.5795	-0.9729	-0.6883	-0.7485
2.6	-1.8620	-1.1741	-0.6313	-1.4121	-0.9635	-0.6258	-1.0531	-0.7407	-0.8202
2.8	-1.9020	-1.2537	-0.6755	-1.4844	-1.0559	-0.6823	-1.1275	-0.8299	-0.8911
3.0	-1.9314	-1.3296	-0.7394	-1.5469	-1.0990	-0.7831	-1.1974	-0.8912	-0.9589
3.5	-1.9730	-1.4894	-0.8827	-1.6674	-1.3801	-0.9602	-1.3455	-1.0699	-1.1132
4.0	-1.9899	-1.6149	-1.0278	-1.7518	-1.5235	-1.1529	-1.4644	-1.1852	-1.2448
4.5	-1.9962	-1.7127	-1.1271	-1.8104	-1.6377	-1.2876	-1.5567	-1.3435	-1.3548
5.0	-1.9987	-1.7828	-1.2928	-1.8535	-1.7353	-1.3936	-1.6296	-1.4453	-1.4470
6.0	-1.9999	-1.8863	-1.4499	-1.9101	-1.8642	-1.6001	-1.7404	-1.5963	-1.5887
7.0	-1.9999	-1.9414	-1.6690	-1.9441	-1.9343	-1.7497	-1.8123	-1.7182	-1.6881
8.0	-2.0000	-1.9636	-1.7749	-1.9658	-1.9706	-1.8596	-1.8615	-1.7949	-1.7592
9.0	-2.0000	-1.9811	-1.8204	-1.9789	-1.9952	-1.9002	-1.8966	-1.8610	-1.8111
10.0	-2.0000	-1.9825	-1.8362	-1.9873	-2.0033	-1.9706	-1.9217	-1.8989	-1.8496
12.0	-2.0000	-1.9903	-1.8408	-1.9986	-2.0196	-2.0108	-1.9541	-1.9526	-1.9081
15.0	-2.0000	-1.9999	-1.8417	-2.0036	-2.0158	-2.0289	-1.9787	-1.9831	-1.9415

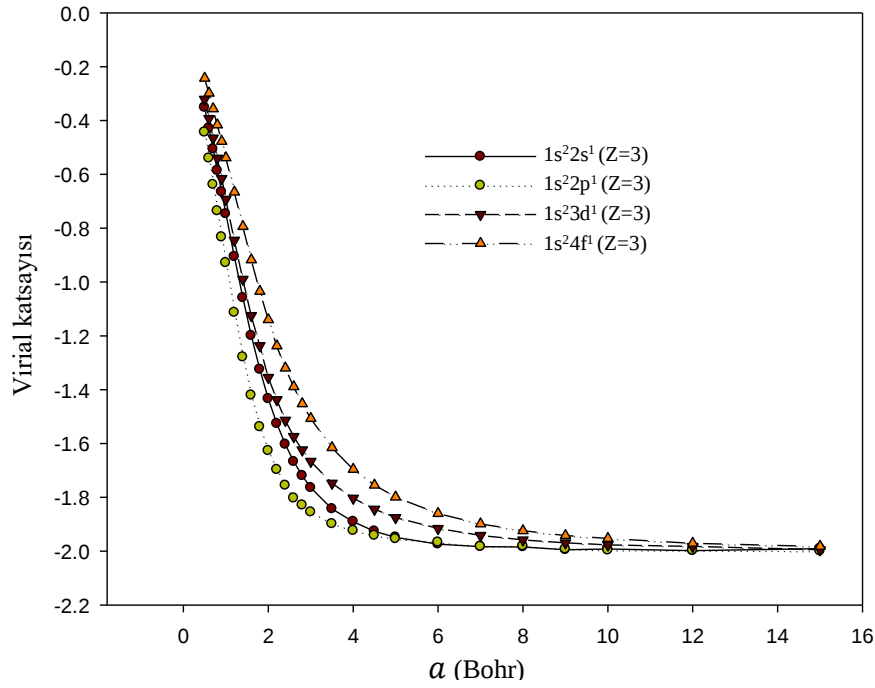
* Yarıçap a.u (Bohr) cinsinden verildi.

$1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$ ve $1s^14f^1$ konfigürasyonların virial katsayılarının yarıçapa bağlı değişimi **Şekil 5.15.**'te verildi. Çok küçük yarıçap değerlerinde sınırlama potansiyelinin etkisi ile çok dar bir alana sıkıştırılan elektronların arasındaki etkileşmenin şiddetlenmesi, elektriksel potansiyel enerjinin nükleer potansiyel enerjiye baskın hale gelmesine neden oldu. Bu durum da farklı konfigürasyonlar için hesaplanan virial katsayılarının büyük değerler almasına neden oldu. Nokta yapının yarıçapı büyüdükçe belli bir kritik yarıçap değerine kadar virial katsayısı küçüldü ve serbest atomlarda olduğu gibi -2 değerine yaklaştı. Bu durumun nedeni yarıçap değeri arttıkça sınırlama etkisinin azalması ve sistemin serbest He atomu gibi davranmaya başlamasıdır. Uyarılmış elektronu daha yüksek enerjili orbitallerde bulunan konfigürasyonların virial katsayılarının artan yarıçapla daha yavaş düşmesi bu konfigürasyonların sınırlama potansiyelinden daha çok etkilendiğini gösterir. Ek olarak virial katsayıları, uyarılmış elektronun daha yüksek enerjili orbitallerde bulunduğu durumda, sonsuz potansiyel engelinden daha fazla etkileneceğinden dolayı, daha büyük yarıçap değerlerinde ancak yatay dengeye gelebildi. Başka bir ifade ile kritik yarıçap daha büyük değerlere doğru kaydı.



Şekil 5.15. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$ ve $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının virial katsayıları

Üç ve dört elektronlu kuantum nokta yapıların $Z=3$ için $1s^22s^1$, $1s^22p^1$, $1s^23p^1$, $1s^24p^1$, $1s^23d^1$, $1s^24d^1$, $1s^24f^1$ konfigürasyonlarının ve $Z=4$ için $1s^22s^2$, $1s^22s^13s^1$, $1s^22s^12p^1$, $1s^22s^13p^1$, $1s^22s^14p^1$, $1s^22s^13d^1$, $1s^22s^14d^1$, $1s^22s^14f^1$ konfigürasyonlarının virial katsayıları Denk. (4.41) kullanılarak hesaplandı ve sonuçlar **Çizelge 5.12.**'te verildi.



Şekil 5.16. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış üç elektronlu kuantum nokta yapının $1s^22s^1$, $1s^22p^1$, $1s^23d^1$ ve $1s^24f^1$ konfigürasyonunun virial katsayıları

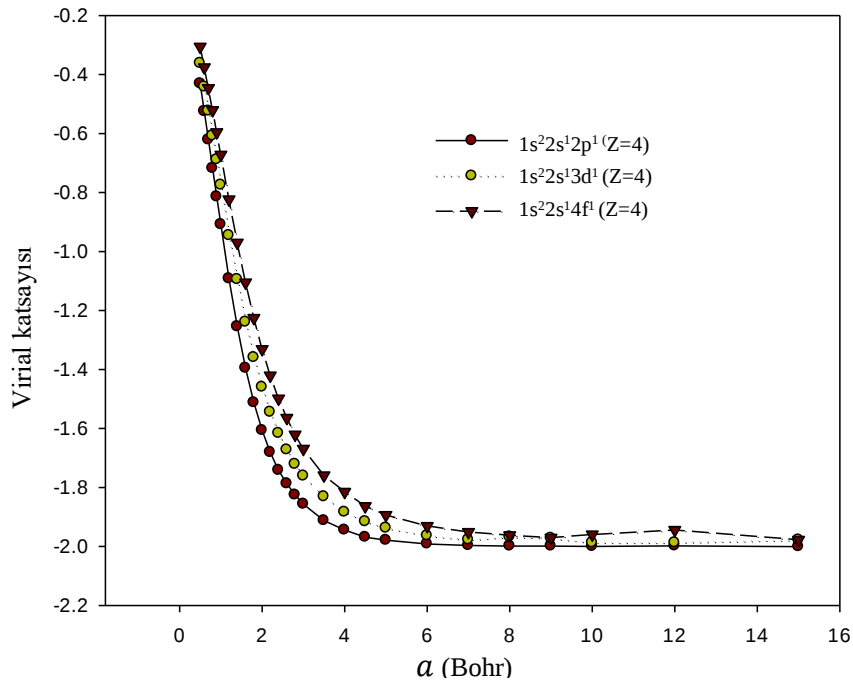
Kuantum nokta yapıların virial katsayılarının yarıçapa bağlı değişimi $1s^22s^1$, $1s^22p^1$, $1s^23d^1$, $1s^24d^1$, $1s^24f^1$ konfigürasyonları üç elektronlu sistemler için **Şekil 5.16.**'da, dört elektronlu $1s^22s^13s^1$, $1s^22s^12p^1$, $1s^22s^13d^1$, $1s^22s^14f^1$ konfigürasyonlu sistemler için **Şekil 5.17.**'de verildi. Bu sistemlerde de iki elektronlu kuantum nokta yapılarda olduğu gibi yarıçap arttıkça virial katsayıları -2 değerine yaklaştı. Bu durumun nedeni üç ve dört elektronlu konfigürasyonlarda nokta yapının yarıçapı arttıkça sınırlamanın etkisinin azalması ve sistemin sırasıyla serbest Li ve Be atomları gibi davranmasıdır.

Çizelge 5.12. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış üç ve dört elektronlu kuantum nokta yapıların konfigürasyonlarının virial katsayıları*

a	$1s^2 2s^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^2 2p^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^2 4p^1$ $\sigma = 8$ $Z=2$	$1s^2 3d^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^2 4d^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^2 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^2 2s^2$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^2 2s^1 3s^1$ $\sigma = 7$ $Z=2$	$1s^2 2s^1 2p^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^2 2s^1 3p^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^2 2s^1 4p^1$ $\sigma = 8$ $Z=2$	$1s^2 2s^1 3d^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^2 2s^1 4d^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$	$1s^2 2s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$
0.5	-0.3514	-0.4441	-0.1884	-0.3210	-0.2018	-0.2433	-0.3880	-0.2692	-0.4310	-0.3260	-0.2400	-0.3619	-0.2715	-0.3061
0.6	-0.4281	-0.5403	-0.2303	-0.3926	-0.2492	-0.2988	-0.4739	-0.3319	-0.5257	-0.4021	-0.2813	-0.4422	-0.3208	-0.3757
0.7	-0.5062	-0.6379	-0.2454	-0.4654	-0.3098	-0.3567	-0.5609	-0.3950	-0.6215	-0.4787	-0.3536	-0.5237	-0.3969	-0.4464
0.8	-0.5859	-0.7357	-0.2971	-0.5402	-0.3445	-0.4166	-0.6490	-0.4561	-0.7179	-0.5586	-0.4074	-0.6079	-0.4655	-0.5211
0.9	-0.6655	-0.8330	-0.3433	-0.6158	-0.4031	-0.4778	-0.7374	-0.5181	-0.8147	-0.6394	-0.4738	-0.6885	-0.5344	-0.5956
1.0	-0.7471	-0.9291	-0.3859	-0.6927	-0.4614	-0.5389	-0.8262	-0.5849	-0.9091	-0.7251	-0.5363	-0.7753	-0.6059	-0.6718
1.2	-0.9060	-1.1131	-0.4909	-0.8447	-0.5723	-0.6664	-0.9962	-0.7184	-1.0922	-0.8920	-0.6766	-0.9458	-0.7543	-0.8237
1.4	-1.0587	-1.2790	-0.6223	-0.9898	-0.6987	-0.7941	-1.1571	-0.8460	-1.2553	-1.0501	-0.8307	-1.0949	-0.8995	-0.9705
1.6	-1.1992	-1.4208	-0.7329	-1.1249	-0.8121	-0.9179	-1.3004	-0.9825	-1.3961	-1.1965	-0.9778	-1.2397	-1.0353	-1.1052
1.8	-1.3249	-1.5385	-0.8335	-1.2365	-0.9287	-1.0346	-1.4250	-1.1016	-1.5126	-1.2474	-1.0569	-1.3592	-1.1596	-1.2256
2.0	-1.4339	-1.6273	-0.9718	-1.3545	-1.0395	-1.1405	-1.5304	-1.2082	-1.6064	-1.4361	-1.2234	-1.4599	-1.2703	-1.3310
2.2	-1.5264	-1.6974	-1.0794	-1.4372	-1.1393	-1.2375	-1.6175	-1.3062	-1.6813	-1.5303	-1.3162	-1.5449	-1.3628	-1.4209
2.4	-1.6036	-1.7554	-1.1678	-1.5136	-1.2273	-1.3203	-1.6834	-1.3930	-1.7418	-1.6879	-1.4402	-1.6164	-1.4493	-1.4987
2.6	-1.6673	-1.8034	-1.2161	-1.5739	-1.3098	-1.3894	-1.7471	-1.4715	-1.7878	-1.6772	-1.5141	-1.6722	-1.5065	-1.5642
2.8	-1.7201	-1.8293	-1.2718	-1.6237	-1.3806	-1.4523	-1.7913	-1.5361	-1.8254	-1.7313	-1.5840	-1.7219	-1.5754	-1.6212
3.0	-1.7643	-1.8547	-1.3395	-1.6665	-1.4407	-1.5075	-1.8074	-1.5935	-1.8568	-1.7774	-1.6470	-1.7613	-1.5986	-1.6694
3.5	-1.8428	-1.8983	-1.5199	-1.7472	-1.5724	-1.6156	-1.8937	-1.7060	-1.9123	-1.8357	-1.6910	-1.8315	-1.7219	-1.7596
4.0	-1.8906	-1.9236	-1.6331	-1.8034	-1.6601	-1.6961	-1.9316	-1.7844	-1.9443	-1.8427	-1.7919	-1.8836	-1.8054	-1.8154
4.5	-1.9262	-1.9419	-1.6864	-1.8442	-1.7028	-1.7547	-1.9549	-1.8332	-1.9686	-1.9214	-1.8522	-1.9161	-1.8518	-1.8634
5.0	-1.9485	-1.9546	-1.7792	-1.8757	-1.7606	-1.7992	-1.9754	-1.8818	-1.9790	-1.9378	-1.8956	-1.9377	-1.8742	-1.8936
6.0	-1.9737	-1.9671	-1.8446	-1.9159	-1.8344	-1.8602	-1.9892	-1.9221	-1.9917	-1.9947	-1.9553	-1.9638	-1.9205	-1.9307
7.0	-1.9833	-1.9823	-1.9174	-1.9416	-1.8675	-1.8990	-1.9957	-1.9432	-1.9969	-1.9926	-1.9578	-1.9773	-1.9569	-1.9513
8.0	-1.9844	-1.9809	-1.9449	-1.9581	-1.8998	-1.9244	-1.9985	-1.9476	-1.9989	-1.9998	-1.9969	-1.9680	-1.9501	-1.9625
9.0	-1.9944	-1.9921	-1.9623	-1.9691	-1.9181	-1.9422	-1.9997	-1.9689	-1.9988	-2.0055	-2.0036	-1.9727	-1.9781	-1.9707
10.0	-1.9916	-1.9962	-1.9754	-1.9766	-1.9714	-1.9533	-2.0009	-1.9612	-1.9998	-1.9909	-2.0047	-1.9880	-1.9752	-1.9595
12.0	-1.9981	-1.9976	-2.0000	-1.9827	-1.9671	-1.9708	-2.0005	-1.9890	-1.9984	-1.9952	-2.0087	-1.9871	-1.9775	-1.9442
15.0	-1.9906	-1.9998	-1.9947	-1.9949	-1.9754	-1.9825	-1.9963	-2.0565	-2.0009	-2.0032	-2.0294	-1.9783	-1.9768	-1.9776

* Yarıçap a.u (Bohr) cinsinden verildi.

İki elektronlu kuantum nokta yapı ile karşılaştırıldığında üç elektronlu, üç elektronlu yapı ile karşılaştırıldığında dört elektronlu kuantum nokta yapının virial katsayılarının yarıçapa bağlı grafikleri birbirine daha yakın çıktı (**Şekil 5.15.**, **Şekil 5.16.**, **Şekil 5.17.**). Bu durumun nedeni farklı konfigürasyonların enerji değerleri ve virial katsayıları arasındaki farkın uyarılmış elektrondan kaynaklanmasıdır. Şöyle ki iki elektronlu sistemde elektronların yarısı uyarılmış orbitalde, üç elektronlu sistemde elektronların üçte biri uyarılmış orbitalde, dört elektronlu sistemde ise sistemin elektronlarının dörtte biri uyarılmış orbitalde bulunur. Dolayısıyla elektron sayısı azaldıkça uyarılmış elektronun enerji değerleri ve virial katsayıları üzerindeki ağırlığı artar ve bu durum da iki elektronlu sistemin farklı konfigürasyonlarının virial katsayılarının birbirine yakınsamasına neden olur. Ayrıca virial katsayısının -2 değerine ulaştığı kritik yarıçap değeri farklı elektron sayısına sahip sistemlerde farklı değerler almaktadır. Bu durumun nedeni, elektron sayısı arttıkça elektronların potansiyelinden daha fazla etkilenmesidir.



Şekil 5.17. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^22s^12p^1$, $1s^22s^13d^1$ ve $1s^22s^14f^1$ konfigürasyonlarının virial katsayıları

5.2. Sonlu Kuyu Potansiyelleri

İki elektronlu kuantum nokta yapıların elektronik özellikleri üç farklı sonlu sınırlama potansiyeli ($V_c=1, 5, 10$ Hartree) için incelendi. Sonlu potansiyel engeli, kuantum nokta yapıların elektronlarının yapı dışında bulunmasını olası kılacağı için gerçek sistemlere daha yakındır. Bu nedenle gerçek sistemlerde olduğu gibi herhangi bir elektronun potansiyel engelini aşıp kuyu dışına çıkması sistemin enerji değerlerinde ve virial katsayılarında keskin değişimlere neden oldu.

5.2.1. Kuantum nokta yapının elektronlarının olasılık yoğunlukları

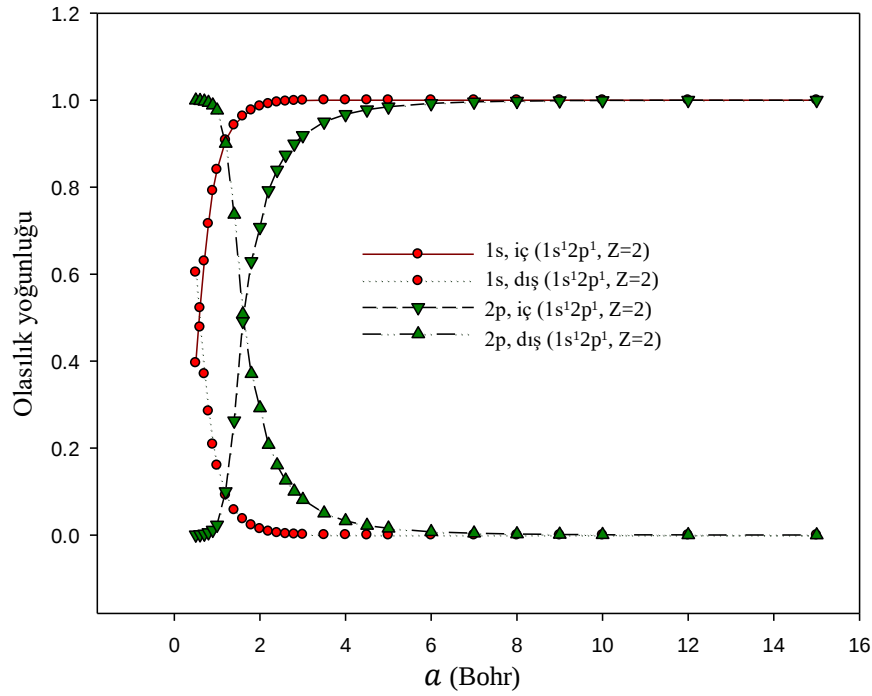
Derinliği 1 Hartree olan küresel simetrik sonlu potansiyel kuyusu içine hapsedilen ve merkezinde atomik safsızlık yükü $Z=2$ olan iki elektronlu kuantum nokta yapılarda $1s^2, 1s^12p^1, 1s^13d^1, 1s^14f^1$ konfigürasyonları için elektronlarının kuyu içindeki ($|\phi^{r \leq a}|^2$) ve kuyu dışındaki ($|\phi^{r > a}|^2$) olasılık yoğunlukları hesaplandı ve **Çizelge 5.13**'te verildi.

Nokta yapının yarıçapı arttıkça **Şekil 5.18.**'de görüldüğü gibi $1s^12p^1$, elektronların nokta yapı içindeki olasılık yoğunlukları da arttı. Küresel kuyu içinde yüksek enerjili orbitallerde bulunan elektronun kuyu dışına kaçabilme yeteneği daha fazla olacağı için kuyu içindeki olasılık yoğunlukları, düşük enerjili orbitallerdeki elektronlardan daha düşüktür. Bu nedenle elektronların kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değerleri yüksek enerjili orbitallerde bulunan elektron için daha büyük bir değer aldı. Eğer nokta yapının yarıçapı aşamalı olarak küçültülürse dar bir alanda sıkıştırılan elektronlar kuyu dışına kaçmaya başlar ve önce yüksek enerjili orbitaldeki elektron daha sonra düşük enerjili orbitaldeki elektron kuyu dışına çıkar. Bu durumun nedeni birbirine çok yaklaşan elektronlar arasındaki etkileşmenin çok şiddetlenmesidir. Bu yüzden yarıçap arttıkça elektronların kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değeri düşük enerjili orbitaldeki elektron için yüksek enerjili orbitaldeki elektronun kritik yarıçap değerinden daha düşüktür. Bu iki kritik yarıçap değeri arasında, başka bir ifadeyle düşük enerjili orbitaldeki elektronun halihazırda kuyu içinde bulunduğu ve yüksek enerjili orbitaldeki elektronun da kuyu içine girmeye başladığı yarıçap aralığında elektronlar arasındaki uzaklığın radikal değişimi elektronların etkileşiminde de radikal değişimlere neden oldu ve bu durum enerji grafiklerinde net bir şekilde görüldü. Öte yandan yarıçap yeterince arttırılırsa her iki elektron da kuyu içine girer ve sınırlama potansiyelinin etkisi giderek azalır.

Çizelge 5.13. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların taban ve bazı uyarılmış konfigürasyonlarının elektronlarının olasılık yoğunlukları*

a	$1s^2$ $\sigma=5, 1s$ İÇ	$1s^2$ $\sigma=5, 1s$ DIŞ	$1s^1 2p^1$ $\sigma=5, 1s$ İÇ	$1s^1 2p^1$ $\sigma=5, 1s$ DIŞ	$1s^1 2p^1$ $\sigma=5, 2p$ İÇ	$1s^1 2p^1$ $\sigma=5, 1s$ DIŞ	$1s^1 3d^1$ $\sigma=5, 1s$ İÇ	$1s^1 3d^1$ $\sigma=5, 1s$ DIŞ	$1s^1 3d^1$ $\sigma=5, 3d$ İÇ	$1s^1 3d^1$ $\sigma=5, 3d$ DIŞ	$1s^1 4f^1$ $\sigma=5, 1s$ İÇ	$1s^1 4f^1$ $\sigma=5, 1s$ DIŞ	$1s^1 4f^1$ $\sigma=5, 4f$ İÇ	$1s^1 4f^1$ $\sigma=5, 4f$ DIŞ
0.5	0.3138	0.4117	0.3957	0.6043	5.583e-4	0.9994	0.4019	0.5981	1.003e-7	1.0000	0.4025	0.5975	5.97e-11	1.0000
0.6	0.4317	0.5424	0.5221	0.4779	1.324e-3	0.9987	0.5306	0.4694	3.169e-7	1.0000	0.5322	0.4678	1.48e-10	1.0000
0.7	0.5411	0.6530	0.6296	0.3704	2.857e-3	0.9971	0.6420	0.3580	9.077e-7	1.0000	0.6415	0.3585	9.19e-10	1.0000
0.8	0.6339	0.7403	0.7155	0.2845	5.864e-3	0.9941	0.7307	0.2693	2.210e-6	1.0000	0.7295	0.2705	1.17e-9	1.0000
0.9	0.7088	0.8085	0.7915	0.2085	0.0116	0.9884	0.7971	0.2029	4.361e-6	1.0000	0.7983	0.2017	2.67e-9	1.0000
1.0	0.7726	0.8588	0.8399	0.1601	0.0233	0.9767	0.8486	0.1514	9.912e-6	1.0000	0.8482	0.1518	4.32e-9	1.0000
1.2	0.8561	0.9247	0.9081	0.0919	0.0998	0.9002	0.9145	0.0855	3.430e-5	1.0000	0.9149	0.0851	1.48e-8	1.0000
1.4	0.9139	0.9600	0.9426	0.0574	0.2627	0.7373	0.9516	0.0484	1.006e-4	0.9999	0.9539	0.0461	6.03e-8	1.0000
1.6	0.9383	0.9758	0.9629	0.0371	0.4920	0.5080	0.9746	0.0254	3.265e-4	0.9997	0.9729	0.0271	2.54e-7	1.0000
1.8	0.9655	0.9761	0.9770	0.0230	0.6292	0.3708	0.9847	0.0153	9.863e-4	0.9990	0.9861	0.0139	5.00e-7	1.0000
2.0	0.9763	0.9721	0.9861	0.0139	0.7078	0.2922	0.9918	8.21e-3	3.077e-3	0.9969	0.9925	7.53e-3	1.90e-6	1.0000
2.2	0.9852	0.9699	0.9916	8.42e-3	0.7921	0.2079	0.9949	5.07e-3	0.0220	0.9780	0.9959	4.13e-3	3.64e-6	1.0000
2.4	0.9898	0.9729	0.9953	4.73e-3	0.8393	0.1607	0.9971	2.89e-3	0.3614	0.6386	0.9978	2.17e-3	1.52e-5	1.0000
2.6	0.9944	0.9853	0.9972	2.78e-3	0.8741	0.1259	0.9976	2.35e-3	0.5283	0.4717	0.9988	1.24e-3	3.79e-5	1.0000
2.8	0.9957	0.9862	0.9985	1.52e-3	0.8996	0.1004	0.9987	1.32e-3	0.6505	0.3495	0.9993	7.18e-4	1.12e-4	0.9999
3.0	0.9967	0.9787	0.9991	8.60e-4	0.9188	0.0812	0.9993	7.24e-4	0.7299	0.2701	0.9997	3.20e-4	4.25e-4	0.9996
3.5	0.9998	0.9905	0.9998	2.11e-4	0.9499	0.0501	0.9998	1.65e-4	0.8399	0.1601	0.9999	1.19e-4	0.6195	0.3805
4.0	0.9997	0.9972	0.9999	9.47e-5	0.9674	0.0326	1.0000	4.47e-5	0.8965	0.1035	1.0000	2.20e-5	0.7947	0.2053
4.5	0.9999	1.0000	1.0000	2.99e-5	0.9782	0.0218	1.0000	8.88e-6	0.9287	0.0713	1.0000	5.94e-6	0.8642	0.1358
5.0	1.0000	1.0000	1.0000	2.05e-5	0.9846	0.0154	1.0000	3.03e-6	0.9494	0.0506	1.0000	1.27e-6	0.9035	0.0965
6.0	1.0000	0.9997	1.0000	5.71e-6	0.9925	7.48e-3	1.0000	1.19e-7	0.9718	0.0282	1.0000	1.26e-8	0.9472	0.0528
7.0	1.0000	0.9999	1.0000	3.79e-7	0.9960	4.01e-3	1.0000	3.10e-8	0.9832	0.0168	1.0000	3.83e-10	0.9569	0.0321
8.0	1.0000	0.9999	1.0000	1.16e-7	0.9978	2.20e-3	1.0000	1.78e-8	0.9989	1.08e-3	1.0000	1.75e-9	0.9792	0.0208
9.0	1.0000	1.0000	1.0000	8.64e-8	0.9988	1.18e-3	1.0000	4.45e-11	0.9993	7.15e-4	1.0000	8.99e-13	0.9859	0.0141
10.0	1.0000	1.0000	1.0000	1.93e-8	0.9994	6.36e-4	1.0000	1.69e-10	0.9953	4.72e-3	1.0000	3.89e-13	0.9901	9.88e-3
12.0	0.9999	1.0000	1.0000	1.26e-8	0.9998	1.97e-4	1.0000	3.65e-16	0.9977	2.28e-3	1.0000	5.07e-15	0.9947	5.28e-3
15.0	1.0000	1.0000	1.0000	7.04e-10	1.0000	3.51e-5	1.0000	2.42e-10	0.9992	8.34e-4	1.0000	1.43e-20	0.9977	2.34e-3

* Yarıçap a.u (Bohr) cinsinden verildi.



Şekil 5.18. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 2p^1$ konfigürasyonundaki elektronların olasılık yoğunlukları

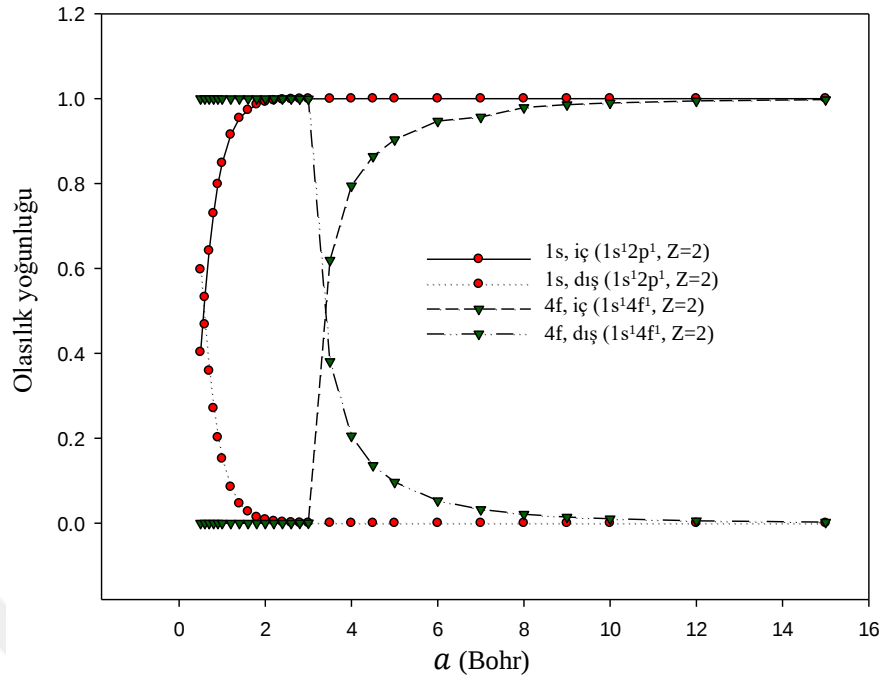
Kuantum nokta yapının uyarılmış elektronunun 2p orbitalinden daha yüksek enerjili bir orbitale, örneğin 4f orbitaline uyarıldığı durumda, **Şekil 5.19.**'de görüldüğü gibi, $1s^1 4f^1$ konfigürasyonunun 4f orbitaline uyarılmış elektronun kritik yarıçap değeri 2p orbitaline uyarılmış elektronun kritik yarıçap değerinden daha büyük bir değer aldı. Bu durum yüksek enerjili orbitaldeki elektronu kuyu içinde tutmanın daha zor olacağını gösterir.

Küresel simetrik sonlu potansiyel engelinin 5 Hartree olduğu durumda merkezinde safsızlık yükü bulunan iki elektronlu kuantum nokta yapıların elektronlarının kuyu içindeki ($|\phi^{r \leq a}|^2$) ve dışındaki ($|\phi^{r > a}|^2$) olasılık yoğunlukları $1s^2$, $1s^1 2s^1$, $1s^1 3s^1$, $1s^1 4f^1$ konfigürasyonları için hesaplandı ve olasılık yoğunlukları **Çizelge 5.14.**'te verildi. Elektronların olasılık yoğunluklarının yarıçapa bağlı değişimi $1s^1 2p^1$ konfigürasyonu için **Şekil 5.20.**'te gösterildi. Bu grafiğe göre yarıçap arttıkça önce yüksek enerjili orbitaldeki elektron daha sonra düşük enerjili orbitaldeki elektron kuyu içine girdi. Bu durum 1 Hartree potansiyel engeli ile sınırlandırılmış sistemlerde karşılaşılan durum ile örtüşmektedir. Ancak sınırlama potansiyelinin 5 Hartree olması durumunda elektronların kuyu içine girmeye/çıkmaya başladığı kritik yarıçap değerleri değişti.

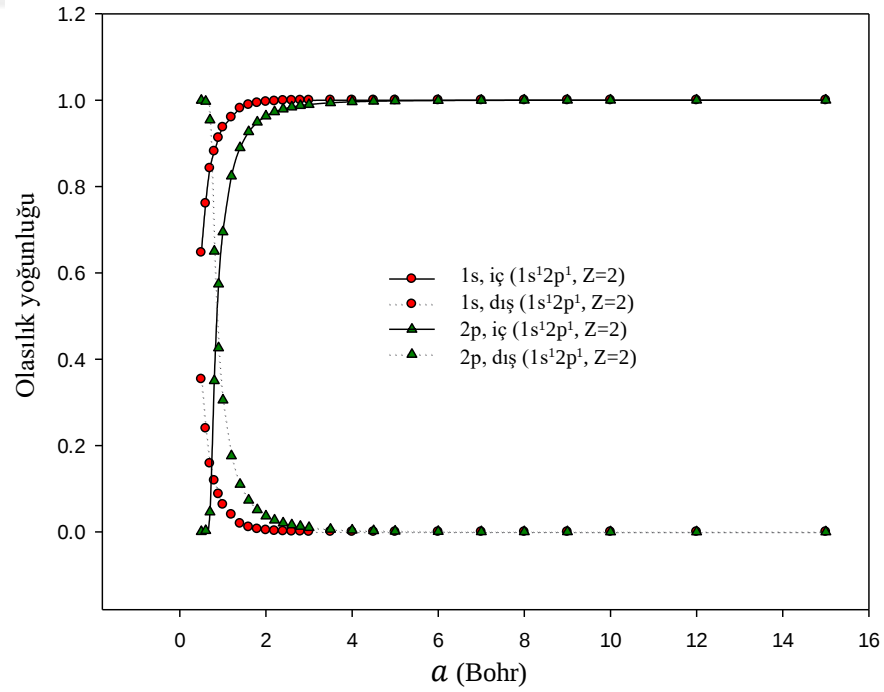
Çizelge 5.14. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların taban ve bazı uyarılmış konfigürasyonlarının elektronlarının olasılık yoğunlukları*

a	$1s^2$ $\sigma =5, 1s$ İÇ	$1s^2$ $\sigma =5, 1s$ DIŞ	$1s^1 2p^1$ $\sigma =5, 1s$ İÇ	$1s^1 2p^1$ $\sigma =5, 1s$ DIŞ	$1s^1 2p^1$ $\sigma =5, 2p$ İÇ	$1s^1 2p^1$ $\sigma =5, 1s$ DIŞ	$1s^1 3d^1$ $\sigma =5, 1s$ İÇ	$1s^1 3d^1$ $\sigma =5, 1s$ DIŞ	$1s^1 3d^1$ $\sigma =5, 3d$ İÇ	$1s^1 3d^1$ $\sigma =5, 3d$ DIŞ	$1s^1 4f^1$ $\sigma =5, 1s$ İÇ	$1s^1 4f^1$ $\sigma =5, 1s$ DIŞ	$1s^1 4f^1$ $\sigma =5, 4f$ İÇ	$1s^1 4f^1$ $\sigma =5, 4f$ DIŞ
0.5	0.5865	0.4135	0.6465	0.3535	5.16e-4	0.9995	0.6498	0.3502	6.32e-8	1.0000	0.6484	0.3516	2.83e-11	1.0000
0.6	0.7121	0.2879	0.7606	0.2394	2.98e-3	0.9970	0.7658	0.2342	2.16e-7	1.0000	0.7657	0.2343	7.74e-9	1.0000
0.7	0.8090	0.1910	0.8420	0.1580	0.0459	0.9541	0.8427	0.1573	1.11e-6	1.0000	0.8415	0.1585	1.86e-9	1.0000
0.8	0.8607	0.1393	0.8813	0.1187	0.3500	0.6500	0.8896	0.1104	2.04e-6	1.0000	0.8857	0.1143	5.10e-10	1.0000
0.9	0.8958	0.1042	0.9126	0.0874	0.5738	0.4262	0.9241	0.0759	4.80e-6	1.0000	0.9267	0.0733	1.28e-9	1.0000
1.0	0.9220	0.0780	0.9369	0.0631	0.6948	0.3052	0.9482	0.0518	4.61e-5	1.0000	0.9482	0.0518	4.49e-9	1.0000
1.2	0.9553	0.0447	0.9601	0.0399	0.8241	0.1759	0.9731	0.0269	4.52e-3	0.9955	0.9732	0.0268	1.96e-8	1.0000
1.4	0.9777	0.0223	0.9808	0.0192	0.8899	0.1101	0.9820	0.0180	0.7116	0.2884	0.9841	0.0159	4.84e-8	1.0000
1.6	0.9867	0.0133	0.9890	0.0110	0.9268	0.0732	0.9897	0.0103	0.8245	0.1755	0.9910	9.04e-3	2.55e-7	1.0000
1.8	0.9919	8.13e-3	0.9936	6.42e-3	0.9489	0.0511	0.9941	5.88e-3	0.8799	0.1201	0.9944	5.56e-3	0.7716	0.2284
2.0	0.9949	5.05e-3	0.9961	3.93e-3	0.9632	0.0368	0.9966	3.41e-3	0.9138	0.0862	0.9969	3.07e-3	0.8404	0.1596
2.2	0.9968	3.24e-3	0.9976	2.37e-3	0.9728	0.0272	0.9980	1.96e-3	0.9352	0.0648	0.9982	1.79e-3	0.8835	0.1165
2.4	0.9980	2.00e-3	0.9987	1.28e-3	0.9793	0.0207	0.9988	1.16e-3	0.9503	0.0497	0.9990	9.74e-4	0.9126	0.0874
2.6	0.9987	1.27e-3	0.9991	8.90e-4	0.9840	0.0160	0.9993	7.12e-4	0.9607	0.0393	0.9994	5.76e-4	0.9320	0.0680
2.8	0.9992	8.13e-4	0.9995	5.49e-4	0.9874	0.0126	0.9996	3.55e-4	0.9688	0.0312	0.9997	2.96e-4	0.9463	0.0537
3.0	0.9995	5.19e-4	0.9996	3.61e-4	0.9899	0.0101	0.9996	3.52e-4	0.9747	0.0253	0.9998	1.83e-4	0.9565	0.0435
3.5	0.9998	1.69e-4	0.9998	2.38e-4	0.9939	6.07e-3	1.0000	3.85e-5	0.9842	0.0158	0.9999	7.580e-5	0.9731	0.0269
4.0	0.9999	5.67e-5	0.9999	7.16e-5	0.9961	3.86e-3	1.0000	2.75e-5	0.9895	0.0105	1.0000	1.88e-5	0.9820	0.0180
4.5	0.9999	6.53e-5	1.0000	2.15e-5	0.9975	2.54e-3	1.0000	7.03e-6	0.9927	7.30e-3	1.0000	3.43e-6	0.9875	0.0125
5.0	1.0000	1.58e-5	1.0000	6.92e-6	0.9983	1.74e-3	1.0000	2.16e-6	0.9948	5.20e-3	1.0000	4.75e-7	0.9909	9.08e-3
6.0	1.0000	2.23e-6	1.0000	1.05e-6	0.9991	8.75e-4	1.0000	1.60e-7	0.9971	2.90e-3	1.0000	1.21e-8	0.9949	5.12e-3
7.0	1.0000	8.87e-6	1.0000	3.01e-7	0.9996	4.31e-4	1.0000	2.96e-9	0.9983	1.72e-3	1.0000	4.03e-10	0.9968	3.16e-3
8.0	1.0000	8.25e-6	1.0000	1.20e-7	0.9998	2.43e-4	1.0000	1.18e-8	0.9989	1.08e-3	1.0000	2.09e-11	0.9980	2.03e-3
9.0	1.0000	3.56e-7	1.0000	3.91e-8	0.9999	1.25e-4	1.0000	5.12e-11	0.9993	7.12e-4	1.0000	5.80e-12	0.9986	1.38e-3
10.0	1.0000	2.75e-7	1.0000	1.58e-8	0.9999	7.34e-5	1.0000	2.76e-11	0.9995	4.80e-4	1.0000	1.71e-11	0.9990	9.66e-4
12.0	1.0000	4.38e-9	1.0000	1.14e-8	1.0000	2.87e-5	1.0000	2.88e-15	0.9998	2.32e-4	1.0000	2.66e-14	0.9995	5.16e-4
15.0	1.0000	1.05e-5	1.0000	3.93e-9	1.0000	3.25e-6	1.0000	6.08e-12	0.9999	8.45e-5	1.0000	8.20e-22	0.9998	2.29e-4

* Yarıçap a.u (Bohr) cinsinden verildi.

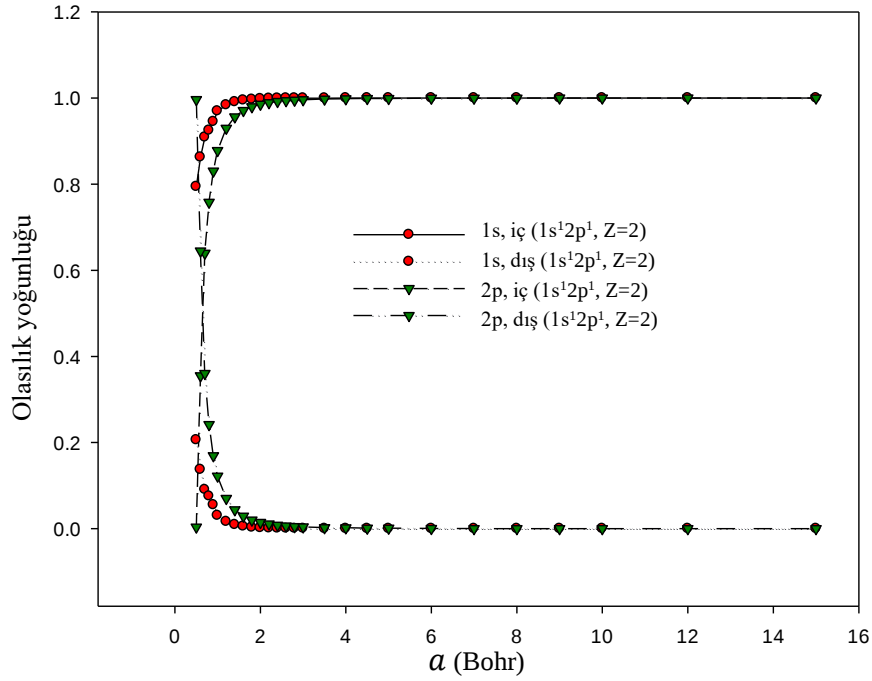


Şekil 5.19. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 4f^1$ konfigürasyonundaki elektronların olasılık yoğunluğu



Şekil 5.20. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 2p^1$ konfigürasyonundaki elektronların olasılık yoğunluğu

Merkezinde safsızlık yükü bulunan 10 Hartree değerindeki potansiyel engeli ile sınırlandırılmış kuantum nokta yapıların elektronlarının kuyu içindeki ($|\phi^{r \leq a}|^2$) ve kuyu dışındaki ($|\phi^{r > a}|^2$) olasılık yoğunlukları $1s^2$, $1s^1 2p^1$, $1s^1 3d^1$, $1s^1 4f^1$ konfigürasyonları için hesaplandı ve sonuçlar **Çizelge 5.15.**'te verildi. Olasılık yoğunluklarının yarıçapa bağlı değişimi, $1s^1 2p^1$ konfigürasyonu için **Şekil 5.21.**'te görüleceği üzere, 1 ve 5 Hartree potansiyel engeli ile sınırlandırılmış sistemler ile benzer bir değişim gösterdi. Ancak sınırlama potansiyelinin artması, yüksek enerjili orbitalde bulunan elektronun kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değerinin düşük enerjili orbitalde bulunan elektronun kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değerine yaklaşmasına neden oldu. Bu durumun nedeni sonlu sınırlama potansiyelinin değeri arttıkça yüksek enerjili orbitaldeki elektronun da kuyu içinde tutulmasının kolaylaşmasıdır.



Şekil 5.21. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 2p^1$ konfigürasyonundaki elektronların olasılık yoğun

Çizelge 5.15. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların taban ve bazı uyarılmış konfigürasyonlarının elektronlarının olasılık yoğunlukları*

a	$1s^2$	$1s^2$	$1s^1 2p^1$	$1s^1 2p^1$	$1s^1 2p^1$	$1s^1 2p^1$	$1s^1 3d^1$	$1s^1 3d^1$	$1s^1 3d^1$	$1s^1 3d^1$	$1s^1 4f^1$	$1s^1 4f^1$	$1s^1 4f^1$	$1s^1 4f^1$
	$\sigma = 5, 1s$	$\sigma = 5, 1s$	$\sigma = 5, 1s$	$\sigma = 5, 1s$	$\sigma = 5, 2p$	$\sigma = 5, 1s$	$\sigma = 5, 1s$	$\sigma = 5, 1s$	$\sigma = 5, 3d$	$\sigma = 5, 3d$	$\sigma = 5, 1s$	$\sigma = 5, 1s$	$\sigma = 5, 4f$	$\sigma = 5, 4f$
	İÇ	DIŞ	İÇ	DIŞ	İ	DIŞ	İÇ	DIŞ	İÇ	DIŞ	İÇ	DIŞ	İÇ	DIŞ
0.5	0.7639	0.2361	0.7943	0.2057	3.45e-3	0.9965	0.7875	0.2125	3.43e-8	1.0000	0.7887	0.2113	1.54e-9	1.0000
0.6	0.8430	0.1570	0.8627	0.1373	0.3551	0.6449	0.8738	0.1262	2.83e-7	1.0000	0.8671	0.1329	7.50e-8	1.0000
0.7	0.9034	0.0966	0.9090	0.0910	0.6396	0.3604	0.9100	0.0900	3.02e-6	1.0000	0.9190	0.0810	3.48e-10	1.0000
0.8	0.9343	0.0657	0.9248	0.0752	0.7582	0.2418	0.9429	0.0571	2.86e-6	1.0000	0.9378	0.0622	8.61e-8	1.0000
0.9	0.9543	0.0457	0.9452	0.0548	0.8305	0.1695	0.9582	0.0418	0.5462	0.4538	0.9633	0.0367	1.88e-9	1.0000
1.0	0.9673	0.0327	0.9696	0.0304	0.8781	0.1219	0.9704	0.0296	0.6999	0.3001	0.9715	0.0285	5.52e-7	1.0000
1.2	0.9823	0.0177	0.9839	0.0161	0.9300	0.0700	0.9844	0.0156	0.8465	0.1535	0.9850	0.0150	0.6682	0.3318
1.4	0.9899	0.0101	0.9910	8.99e-3	0.9563	0.0437	0.9913	8.71e-3	0.9067	0.0933	0.9915	8.45e-3	0.8247	0.1753
1.6	0.9940	6.01e-3	0.9949	5.11e-3	0.9710	0.0290	0.9951	4.88e-3	0.9371	0.0629	0.9956	4.44e-3	0.8912	0.1088
1.8	0.9964	3.64e-3	0.9970	2.98e-3	0.9799	0.0201	0.9973	2.74e-3	0.9560	0.0440	0.9974	2.61e-3	0.9253	0.0747
2.0	0.9977	2.25e-3	0.9983	1.73e-3	0.9856	0.0144	0.9984	1.62e-3	0.9682	0.0318	0.9985	1.49e-3	0.9462	0.0538
2.2	0.9985	1.47e-3	0.9989	1.05e-3	0.9893	0.0107	0.9991	9.38e-4	0.9762	0.0238	0.9992	8.47e-4	0.9602	0.0398
2.4	0.9991	8.97e-4	0.9994	6.01e-4	0.9920	8.03e-3	0.9995	5.14e-4	0.9818	0.0182	0.9995	4.75e-4	0.9693	0.0307
2.6	0.9994	5.73e-4	0.9996	3.64e-4	0.9938	6.18e-3	0.9997	2.92e-4	0.9856	0.0144	0.9997	2.85e-4	0.9760	0.0240
2.8	0.9996	3.63e-4	0.9997	2.61e-4	0.9951	4.87e-3	0.9998	1.74e-4	0.9885	0.0115	0.9999	1.41e-4	0.9808	0.0192
3.0	0.9998	2.32e-4	0.9997	2.64e-4	0.9961	3.87e-3	0.9999	9.44e-5	0.9906	9.37e-3	0.9999	8.61e-5	0.9844	0.0156
3.5	0.9999	7.65e-5	0.9999	1.01e-4	0.9977	2.29e-3	1.0000	2.94e-5	0.9942	5.83e-3	1.0000	2.25e-5	0.9901	9.93e-3
4.0	1.0000	2.51e-5	1.0000	4.98e-5	0.9983	1.65e-3	1.0000	2.57e-5	0.9961	3.88e-3	1.0000	4.98e-6	0.9935	6.53e-3
4.5	1.0000	3.39e-5	1.0000	6.95e-6	0.9990	9.92e-4	1.0000	6.18e-6	0.9973	2.70e-3	1.0000	3.36e-6	0.9954	4.55e-3
5.0	1.0000	2.77e-5	1.0000	6.03e-6	0.9991	9.12e-4	1.0000	1.18e-6	0.9981	1.93e-3	1.0000	3.33e-7	0.9967	3.32e-3
6.0	1.0000	2.91e-6	1.0000	1.82e-6	0.9997	3.38e-4	1.0000	2.11e-7	0.9989	1.07e-3	1.0000	2.17e-8	0.9981	1.87e-3
7.0	1.0000	5.27e-7	1.0000	2.12e-7	0.9998	1.70e-4	1.0000	6.41e-10	0.9994	6.36e-4	1.0000	6.59e-10	0.9989	1.13e-3
8.0	1.0000	1.33e-8	1.0000	1.49e-7	0.9999	9.47e-5	1.0000	9.32e-10	0.9996	4.03e-4	1.0000	1.40e-10	0.9993	7.41e-4
9.0	1.0000	4.24e-9	1.0000	5.12e-7	1.0000	4.87e-5	1.0000	8.93e-11	0.9997	2.62e-4	1.0000	2.26e-11	0.9995	4.98e-4
10.0	1.0000	2.33e-7	1.0000	2.87e-7	1.0000	2.65e-5	1.0000	1.12e-11	0.9998	1.74e-4	1.0000	3.42e-14	0.9997	3.49e-4
12.0	1.0000	2.91e-8	1.0000	2.08e-10	1.0000	1.30e-5	1.0000	9.66e-12	0.9999	8.43e-5	1.0000	3.12e-14	0.9998	1.88e-4
15.0	1.0000	1.01e-6	1.0000	4.13e-18	1.0000	8.80e-7	1.0000	6.14e-12	1.0000	3.09e-5	1.0000	6.53e-17	0.9999	8.21e-5

* Yarıçap a.u (Bohr) cinsinden verildi.

5.2.2. Sonlu kuantum nokta yapıların ortalama enerjileri

İki elektronlu küresel simetrik sonlu potansiyel engeli ile sınırlandırılmış kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$, $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri $Z=2$ için Denk. (4.28) kullanılarak hesaplandı ve sonuçlar **Çizelge 5.16.**'te verildi.

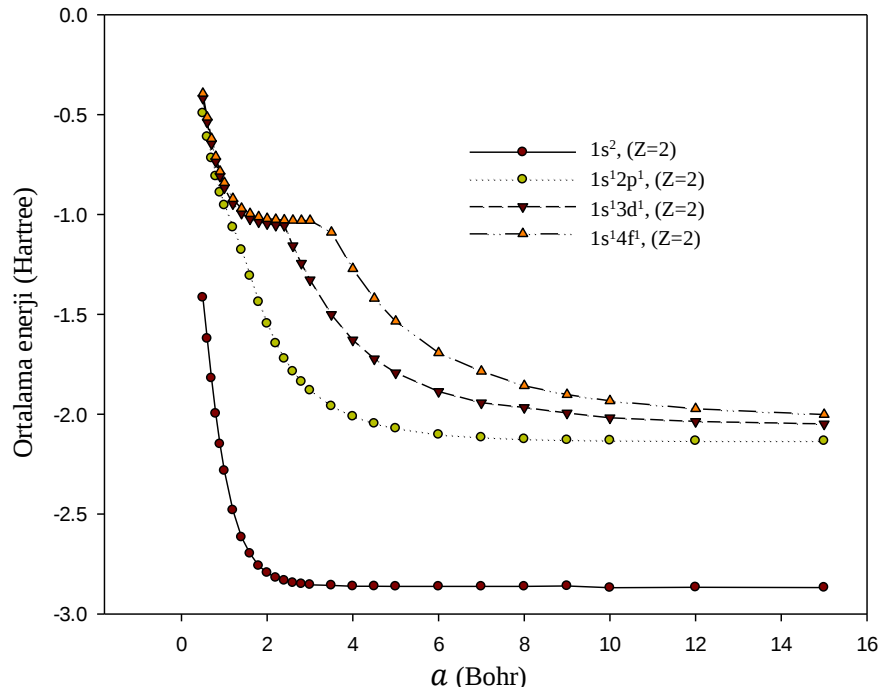
Ortalama enerjinin yarıçapa bağlı değişimi $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$ ve $1s^14f^1$ konfigürasyonları için **Şekil 5.22.**'de verildi. Nokta yapının yarıçapı arttıkça ortalama enerji, sonsuz kuantum nokta yapılarda olduğu gibi, serbest He atomunun enerji değerlerine yaklaştı. Ancak sonsuz kuantum nokta yapılardan farklı olarak özellikle uyarılmış elektronu 3d ve 4f orbitalinde bulunduğu konfigürasyonlarda, ortalama enerji yarıçap arttıkça azalırken belli bir yarıçap değerinde grafikte bir çıkıntı oluştu. Bu durum 1s orbitalindeki elektron kuyu içinde iken kuyu dışında bulunan uyarılmış elektronun kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değerinde ortaya çıktı ve nedeni 1s orbitalinde bulunan elektron ile uyarılmış elektronun birbirine yaklaşması sonucunda etkileşimlerinin şiddetlenmesidir. Böylece elektronik potansiyel enerji birden arttı ve bu değişim grafiklerde görülen çıkıntının oluşmasına neden oldu. Bu durum uyarılmış elektronun daha yüksek enerjili orbitalde bulunması halinde, birbirinden doğal olarak uzakta bulunması gereken elektronların “zorla” birbirine yaklaştırılmaları nedeniyle daha belirgin hale geldi. Bu yüzden grafikte görülen çıkıntılar $1s^13d^1$ ve $1s^14f^1$ konfigürasyonunda açıkça görülürken $1s^12p^1$ konfigürasyonunda daha az belirgindir. Ayrıca uyarılmış elektronların daha küçük enerji seviyelerinde bulunması halinde söz konusu çıkıntının daha küçük yarıçap değerlerinde ortaya çıkmasının nedeni, küçük enerjili orbitallerde bulunan uyarılmış elektronların nokta yapı yarıçapı arttırılırken kuyu içine girmeye başladıkları kritik yarıçap değerinin yüksek enerjili orbitallerde bulunan uyarılmış elektronların kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değerinden daha küçük olmasındandır. Bu yüzden yarıçap küçüldükçe daha etkili hale gelen sınırlama potansiyeli uyarılmış elektronu küçük yörünge açısal momentum kuantum sayısına sahip orbitallerde bulunan sistemleri daha geç etkiler. Bu durum $1s^12p^1$ konfigürasyonunda görülen çıkıntının $1s^14f^1$ konfigürasyonunda görülen çıkıntıdan daha küçük olmasına neden oldu. Öte yandan $1s^2$ konfigürasyonunda her iki elektronda aynı orbitalde bulunduğu için, başka bir ifade ile aynı anda kuyu içine girip aynı anda kuyu dışına çıktıkları kabul edildiği için, diğer konfigürasyonlarda meydana gelen çıkıntı bu konfigürasyonda oluşmadı.

Çizelge 5.16. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1, 5, 10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların taban ve bazı uyarılmış konfigürasyonlarının ortalama enerjileri*

a	$1s^2$ $\sigma =5$ $Z=2$ $V_C=1$	$1s^12p^1$ $\sigma =5$ $Z=2$ $V_C=1$	$1s^13d^1$ $\sigma =5$ $Z=2$ $V_C=1$	$1s^14f^1$ $\sigma =5$ $Z=2$ $V_C=1$	$1s^2$ $\sigma =5$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^12s^1$ $\sigma =7$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^13s^1$ $\sigma =7$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^12p^1$ $\sigma =5$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^13d^1$ $\sigma =5$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^14f^1$ $\sigma =5$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^14f^1$ $\sigma =5$ $Z=0$ $V_C=5$	$1s^2$ $\sigma =5$ $Z=2$ $V_C=10$	$1s^12p^1$ $\sigma =5$ $Z=2$ $V_C=10$	$1s^13d^1$ $\sigma =5$ $Z=2$ $V_C=10$	$1s^14f^1$ $\sigma =5$ $Z=2$ $V_C=10$
0.5	-1.4155	-0.4932	-0.4183	-0.3943	2.9418	5.3021	5.3190	5.3598	5.4277	5.4534	10.0000	6.0602 4.2233 ^d	11.6860	11.7944	11.8113
0.6	-1.6213	-0.6116	-0.5376	-0.5139	1.6273	4.6205	4.6490	4.7197	4.7862	4.8103	9.6657	3.7078	10.0927	10.6264	10.6763
0.7	-1.8188	-0.7179	-0.6449	-0.6206	0.5644	4.1292	4.1570	4.1780	4.2956	4.3228	9.1141	1.9082	7.8451	9.9312	9.8685
0.8	-1.9970	-0.8088	-0.7351	-0.7106	-0.2082	3.7717	3.7995	3.5291	3.9449	3.9682	8.5788	0.6914	5.9778	9.3380	9.3710
0.9	-2.1494	-0.8903	-0.8082	-0.7841	-0.8044	3.5107	3.5290	2.7675	3.6804	3.6940	8.1123	-0.1908	4.4359	8.9841	8.9509
1.0	-2.2829	-0.9537	-0.8663	-0.8416	-1.2554	3.2829	3.3124	2.0089	3.4792	3.5035	7.7274	-0.8309 -1.1871 ^d	3.1662	7.4055	8.7156
1.2	-2.4801	-1.0641	-0.9462	-0.9217	-1.8780	2.6322	2.9055	0.8570	3.2359	3.2615	7.0979	-1.6579	1.5000	4.8922	8.3859
1.4	-2.6157	-1.1773	-0.9935	-0.9700	-2.2778	1.6431	2.2991	0.0456	2.2997	3.1384	6.7259	-2.1298	0.4517	3.1690	6.0670
1.6	-2.6976	-1.3067	-1.0217	-0.9963	-2.4971	0.7763	1.8480	-0.4988	1.4324	3.0637	6.3222	-2.4087	-0.2351	1.9811	4.3554
1.8	-2.7586	-1.4380	-1.0366	-1.0126	-2.6319	0.1078	1.4840	-0.8793	0.7639	2.4523	6.2204	-2.5781	-0.7005	1.1394	3.1036
2.0	-2.7937	-1.5460	-1.0462	-1.0212	-2.7161	-0.3776	1.1411	-1.1479	0.2577	1.7105	5.7555	-2.6827 -2.7116 ^d	-1.0259	0.5263	2.1747
2.2	-2.8182	-1.6449	-1.0540	-1.0258	-2.7690	-0.7476	0.6767	-1.3473	-0.1304	1.1284	4.9673	-2.7479	-1.2599	0.0688	1.4693
2.4	-2.8330	-1.7215	-1.0545	-1.0284	-2.8027	-1.0334	0.2579	-1.5002	-0.4336	0.6630	4.3209	-2.7896	-1.4326	-0.2826	0.9204
2.6	-2.8442	-1.7854	-1.1568	-1.0297	-2.8241	-1.2554	-0.0653	-1.6107	-0.6749	0.2875	3.7936	-2.8157	-1.5625	-0.5563	0.4875
2.8	-2.8497	-1.8375	-1.2442	-1.0304	-2.8378	-1.4295	-0.3828	-1.6996	-0.8688	-0.0188	3.3575	-2.8324	-1.6592	-0.7748	0.1394
3.0	-2.8537	-1.8805	-1.3273	-1.0310	-2.8465	-1.5631	-0.7124	-1.7701	-1.0268	-0.2728	2.9933	-2.8430 -2.8462 ^d	-1.7383	-0.9513	-0.1442
4.0	-2.8609	-2.0110	-1.6285	-1.2717	-2.8601	-1.9423	-1.4853	-1.9693	-1.5075	-1.0523	1.8393	-2.8597 -2.8602 ^d	-1.9574	-1.4760	-0.9988
5.0	-2.8616	-2.0705	-1.7929	-1.5353	-2.8614	-2.0610	-1.8225	-2.0517	-1.7327	-1.4274	1.2570	-2.8610	-2.0418	-1.7173	-1.4009
6.0	-2.8617	-2.1016	-1.8865	-1.6932	-2.8616	-2.1124	-1.9715	-2.0921	-1.8532	-1.6327	0.9199	-2.8616 -2.8617 ^d	-2.0893	-1.8444	-1.6178
7.0	-2.8617	-2.1158	-1.9430	-1.7854	-2.8601	-2.1438	-2.0615	-2.1109	-1.9230	-1.7554	0.7073	-2.8617	-2.1108	-1.9180	-1.7463
8.0	-2.8617	-2.1242	-1.9662	-1.8575	-2.8598	-2.1576	-2.0395	-2.1214	-1.9662	-1.8335	0.5643	-2.8614	-2.1221	-1.9630	-1.8275
9.0	-2.8600	-2.1286	-1.9940	-1.9020	-2.8576	-2.1579	-2.1111	-2.1271	-1.9940	-1.8857	0.4675	-2.8617	-2.1279	-1.9919	-1.8817
10.0	-2.8686	-2.1310	-2.0180	-1.9333	-2.8581	-2.1427	-2.1267	-2.1302	-2.0125	-1.9219	0.3877	-2.8574	-2.1314	-2.0110	-1.9190
12.0	-2.8665	-2.1329	-2.0365	-1.9727	-2.8574	-2.1721	-2.1603	-2.1327	-2.0338	-1.9666	0.2886	-2.8547	-2.1337	-2.0331	-1.9651
15.0	-2.8675	-2.1335	-2.0486	-2.0024	-2.8506	-2.1721	-2.1639	-2.1335	-2.0476	-1.9997	0.2030	-2.8517	-2.1347	-2.0474	-1.9990

^d Rodriguez-Bautista ve ark., 2015

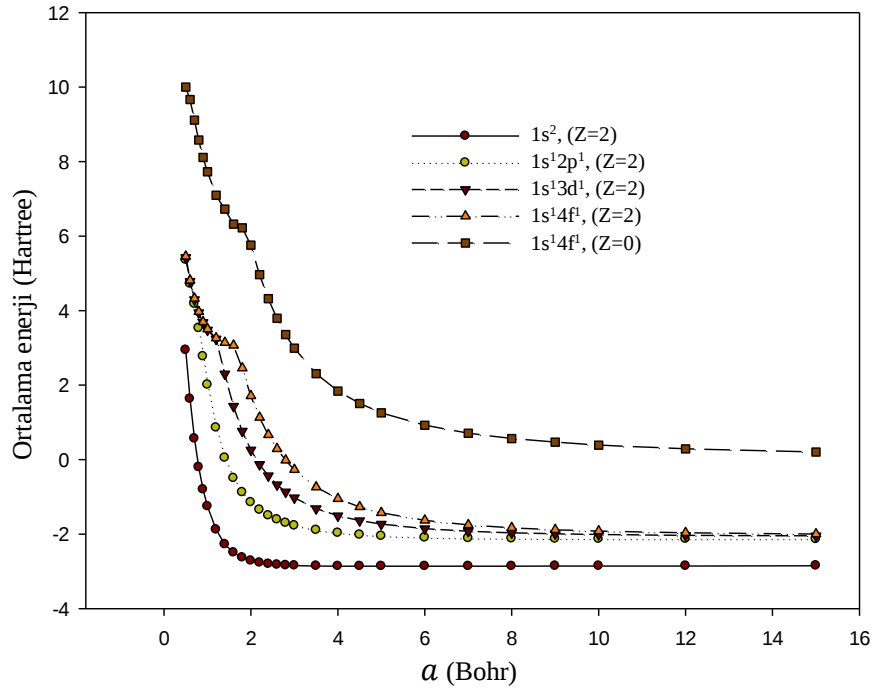
* Enerji ve yarıçap a.u (Hartree, Bohr) cinsinden verildi



Şekil 5.22. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$ ve $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjisi

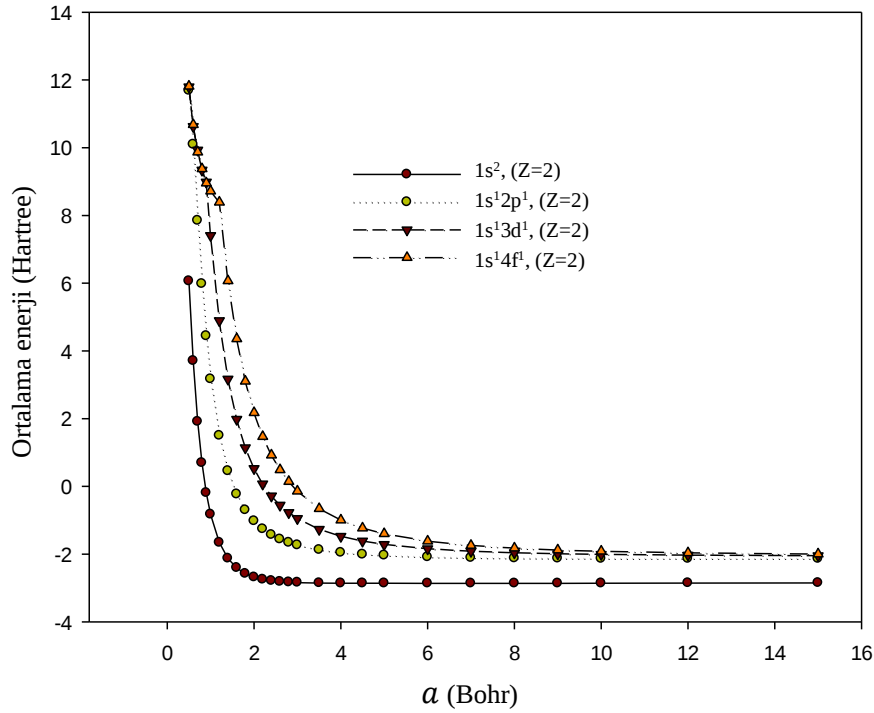
Sınırlama potansiyelin 5 Hartree olduğu küresel simetrik kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$, $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri $Z=2$ için ve $1s^14f^1$ konfigürasyonunun ortalama enerjisi $Z=0$ için Denk. (4.28) kullanılarak hesaplandı. Elde edilen sonuçların yarıçapa bağlı değişimi $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$, $1s^14f^1$ konfigürasyonları için **Şekil 5.23.**'de verildi. Grafikten görüldüğü gibi nokta yapının yarıçap değeri arttıkça sınırlama etkisinin zayıflanmasından dolayı ortalama enerji değeri serbest He atomunu enerji değerine yaklaştı. Sınırlama potansiyeli 1 Hartree ile 5 Hartree olduğu durumlar karşılaştırıldığında eğrilerde görülen çıkıntı 5 Hartree'de daha belirsiz hale geldi. Bu durumun sınırlama potansiyel enerjisinin artması nedeniyle uyarılmış elektronun kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değerinin küçülmesi ve 1s elektronunun kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değerine yaklaşmasından kaynaklandı. **Şekil 5.23.**'de ayrıca safsızlık yükünün sıfır olduğu $1s^14f^1$ konfigürasyonu için ortalama enerjinin yarıçapa bağlı değişimi de gösterildi. Safsızlık yükünün olmaması durumunda nükleer potansiyel enerjinin ortadan kalkması nedeniyle ortalama enerji değeri daha yüksek çıktı. Bununla birlikte safsızlık yükü içeren ve içermeyen sistemler için $1s^14f^1$ konfigürasyonunun ortalama enerjisinin yarıçapa bağlı olarak benzer bir değişim

sergiledi. Grafikte görülen çıkıntı ise ortalama enerjisinin artmasıyla birlikte elektronik potansiyel enerjisinin ortalama enerji içinde ağırlığının azalması nedeniyle biraz sönükleşti.



Şekil 5.23. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$ ve $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjisi

Kuyu derinliğinin 10 Hartree olduğu kuantum nokta yapılarda $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$, $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının $Z=2$ için ortalama enerji değerleri Denk. (4.28) ile hesaplandı. $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$ ve $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri **Şekil 5.24.**'te görüleceği üzere yarıçap arttıkça azaldı ve yarıçap dahada büyüyünce serbest atomların değerine yaklaşarak yatay hale geldi. **Şekil 5.22.** ve **Şekil 5.23.**'de gözlemlenen çıkıntı bu grafikte sadece $1s^14f^1$ konfigürasyonunda belli belirsiz oluştu ve çıkıntının olduğu yarıçap aralığı oldukça küçüldü. Bu durum 10 Hartree değerindeki sınırlama potansiyelinin etkisi ile düşük enerjili ve yüksek enerjili orbitallerde bulunan elektronların kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değerinin birbirine çok yaklaştığını gösterir. Bu durum sınırlama potansiyelinin çok şiddetlenmesinden kaynaklandı. Diğer taraftan sınırlandırma potansiyeli küçüldükçe kuyu içine elektronların girmeye başlayacağı yarıçap değeri büyüyeceği için çıkıntının gözlemlendiği yarıçap değeri büyük yarıçap değerlerine doğru kaydı.



Şekil 5.24. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^1 2p^1$, $1s^1 3d^1$ ve $1s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjisi

5.2.4. Sonlu kuantum nokta yapıların sınırlama potansiyel enerjileri

Sonlu potansiyel engeli ile sınırlandırılan iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^1 2p^1$, $1s^1 3d^1$, $1s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının orbitallerinin maruz kaldığı sınırlama potansiyel enerjileri $Z=2$ için Denk. (4.15) kullanılarak hesaplandı ve sonuçlar **Çizelge 5.17.** verildi.

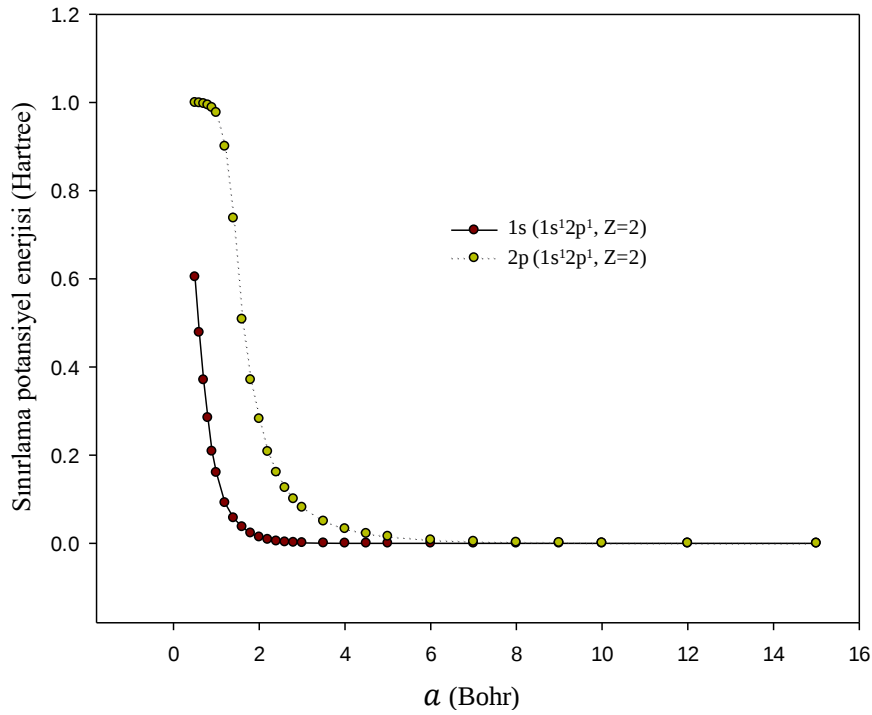
Ele alınan sistemlerde kuyu içindeki sınırlama potansiyeli sıfır kabul edildiği için sadece kuyu dışında bulunan elektronlar sınırlama potansiyel enerjisine maruz kalırlar. Bu nedenle herhangi bir elektronun maruz kaldığı sınırlama potansiyeli, elektronun kuyu dışındaki olasılık yoğunluğu ve siteme etki eden sınırlama potansiyelinin büyüklüğü ile doğru orantılıdır.

Sınırlama potansiyel enerjisinin 1 Hartree olduğu durumda $1s^1 2p^1$ konfigürasyonunu sınırlama potansiyel enerjisinin yarıçapa bağlı değişimi **Şekil 5.25.**'te verildi. Her iki elektronun da kuyu içinde bulunduğu yarıçap değerlerinde sınırlama potansiyel enerjileri sıfır değerlerini aldı. Elektronlar kuyu dışına çıkmaya başladıklarında ise sınırlama potansiyelinden etkilenmeye başladılar.

Çizelge 5.17. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1, 5, 10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu nokta yapıların taban ve bazı uyarılmış konfigürasyonlarının orbitallerinin maruz kaldığı sınırlama potansiyel enerjileri*

a	$1s^1 2p^1$ $\sigma = 5$ 1s Z=2 $V_C=1$	$1s^1 2p^1$ $\sigma = 5$ 2p Z=2 $V_C=1$	$1s^1 3d^1$ $\sigma = 5$ 1s Z=2 $V_C=1$	$1s^1 3d^1$ $\sigma = 5$ 3d Z=2 $V_C=1$	$1s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ 1s Z=2 $V_C=1$	$1s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ 4f Z=2 $V_C=1$	$1s^1 2p^1$ $\sigma = 5$ 1s Z=2 $V_C=5$	$1s^1 2p^1$ $\sigma = 5$ 2p Z=2 $V_C=5$	$1s^1 3d^1$ $\sigma = 5$ 1s Z=2 $V_C=5$	$1s^1 3d^1$ $\sigma = 5$ 3d Z=2 $V_C=5$	$1s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ 1s Z=2 $V_C=5$	$1s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ 4f Z=2 $V_C=5$	$1s^1 2p^1$ $\sigma = 5$ 1s Z=2 $V_C=10$	$1s^1 2p^1$ $\sigma = 5$ 2p Z=2 $V_C=10$	$1s^1 3d^1$ $\sigma = 5$ 1s Z=2 $V_C=10$	$1s^1 3d^1$ $\sigma = 5$ 3d Z=2 $V_C=10$	$1s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ 1s Z=2 $V_C=10$	$1s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ 4f Z=2 $V_C=10$
0.5	0.6043	0.9994	0.5981	1.0000	0.5975	1.0000	1.7673	4.9974	1.7508	5.0000	1.7582	5.0000	2.0571	9.9655	2.1245	10.0000	2.1131	10.0000
0.6	0.4779	0.9987	0.4694	1.0000	0.4678	1.0000	1.1969	4.9851	1.1708	5.0000	1.1713	5.0000	1.3731	6.4488	1.2622	10.0000	1.3288	10.0000
0.7	0.3704	0.9971	0.3580	1.0000	0.3585	1.0000	0.7902	4.7705	0.7865	5.0000	0.7923	5.0000	0.9097	3.6037	0.8999	10.0000	0.8098	10.0000
0.8	0.2845	0.9941	0.2693	1.0000	0.2705	1.0000	0.5934	3.2500	0.5519	5.0000	0.5716	5.0000	0.7519	2.4181	0.5706	10.0000	0.6222	10.0000
0.9	0.2085	0.9884	0.2029	1.0000	0.2017	1.0000	0.4369	2.1308	0.3796	5.0000	0.3663	5.0000	0.5484	1.6948	0.4178	4.5383	0.3669	10.0000
1.0	0.1601	0.9767	0.1514	1.0000	0.1518	1.0000	0.3156	1.5261	0.2588	4.9998	0.2590	5.0000	0.3039	1.2191	0.2963	3.0009	0.2847	10.0000
1.2	0.0919	0.9002	0.0855	1.0000	0.0851	1.0000	0.1994	0.8794	0.1345	4.9774	0.1340	5.0000	0.1612	0.7003	0.1565	1.5353	0.1503	3.3183
1.4	0.0574	0.7373	0.0484	0.9999	0.0461	1.0000	0.0958	0.5505	0.0899	1.4420	0.0795	5.0000	0.0899	0.4374	0.0871	0.9330	0.0845	1.7532
1.6	0.0371	0.5080	0.0254	0.9997	0.0271	1.0000	0.0551	0.3660	0.0516	0.8775	0.0452	5.0000	0.0512	0.2901	0.0489	0.6291	0.0444	1.0882
1.8	0.0230	0.3708	0.0153	0.9990	0.0139	1.0000	0.0321	0.2553	0.0294	0.6003	0.0278	1.1418	0.0299	0.2007	0.0274	0.4401	0.0261	0.7467
2.0	0.0139	0.2822	8.21e-3	0.9969	7.53e-3	1.0000	0.0197	0.1840	0.0171	0.4311	0.0154	0.7978	0.0174	0.1437	0.0162	0.3183	0.0149	0.5379
2.2	8.42e-3	0.2079	5.07e-3	0.9780	4.13e-3	1.0000	0.0119	0.1362	9.84e-3	0.3239	8.96e-3	0.5824	0.0106	0.1071	9.38e-3	0.2384	8.47e-3	0.3981
2.4	4.73e-3	0.1607	2.89e-3	0.6386	2.17e-3	1.0000	6.42e-3	0.1033	5.81e-3	0.2483	4.87e-3	0.4370	6.01e-3	0.0803	5.14e-3	0.1825	4.75e-3	0.3067
2.6	2.78e-3	0.1259	2.35e-3	0.4717	1.24e-3	1.0000	4.45e-3	0.0801	3.56e-3	0.1964	2.88e-3	0.3400	3.64e-3	0.0618	2.92e-3	0.1440	2.85e-3	0.2405
2.8	1.52e-3	0.1004	1.32e-3	0.3495	7.18e-4	0.9999	2.74e-3	0.0630	1.77e-3	0.1561	1.48e-3	0.2687	2.61e-3	0.0487	1.74e-3	0.1153	1.41e-3	0.1916
3.0	8.60e-4	0.0812	7.24e-4	0.2701	3.20e-4	0.9996	1.80e-3	0.0504	1.76e-3	0.1265	9.14e-4	0.2177	2.64e-3	0.0388	9.44e-4	0.0938	8.61e-4	0.1559
3.5	2.11e-4	0.0501	1.65e-4	0.1601	1.19e-4	0.3805	1.19e-3	0.0304	1.92e-4	0.0792	3.79e-4	0.1345	1.01e-3	0.2299	2.94e-4	0.0583	2.25e-4	0.0994
4.0	9.47e-5	0.0326	4.47e-5	0.1035	2.20e-5	0.2053	3.58e-4	0.0193	1.37e-4	0.0525	9.40e-5	0.0898	4.98e-4	0.0165	2.57e-4	0.0389	4.98e-5	0.0653
4.5	2.99e-5	0.0218	8.88e-6	0.0713	5.94e-6	0.1358	1.07e-4	0.0127	3.51e-5	0.0365	1.71e-5	0.0625	6.95e-5	9.92e-3	6.18e-5	0.0271	3.36e-5	0.0456
5.0	2.05e-5	0.0154	3.03e-6	0.0506	1.27e-6	0.0965	3.46e-5	8.70e-3	1.08e-5	0.0260	2.37e-6	0.0454	6.03e-5	9.12e-3	1.18e-5	0.0193	3.33e-6	0.0333
6.0	5.71e-6	7.48e-3	1.19e-7	0.0282	1.26e-8	0.0528	5.28e-6	4.37e-3	8.01e-7	0.0145	6.09e-8	0.0256	1.82e-5	3.38e-3	2.11e-6	0.0107	2.17e-7	0.0187
7.0	3.79e-7	4.01e-3	3.10e-8	0.0168	1.91e-9	0.0156	1.50e-6	2.15e-3	1.48e-8	8.63e-3	2.01e-9	0.0158	2.12e-6	0 . 1 7	6.41e-9	6.36e-3	6.59e-9	0.0114
8.0	1.16e-7	2.20e-3	8.91e-8	5.44e-3	1.75e-9	0.0208	6.00e-7	1.21e-3	5.90e-8	5.44e-3	1.04e-10	0.0102	1.49e-6	9.47e-4	9.32e-9	4.03e-3	1.40e-9	7.41e-3
9.0	8.64e-8	1.18e-3	2.22e-10	3.57e-3	8.99e-13	0.0141	1.95e-7	6.26e-4	2.56e-10	3.56e-3	2.90e-11	6.90e-3	5.12e-6	4.87e-4	8.93e-10	2.62e-3	2.26e-10	4.98e-3
10.0	1.93e-8	6.36e-4	1.69e-10	4.72e-3	3.89e-13	9.88e-3	7.90e-8	3.67e-4	1.38e-10	2.40e-3	8.57e-11	4.83e-3	2.87e-6	2.65e-4	1.12e-10	1.74e-3	3.42e-13	3.49e-3
12.0	1.26e-8	1.97e-4	3.65e-16	2.28e-3	5.07e-15	5.28e-3	5.70e-8	1.43e-4	1.44e-14	1.16e-3	1.33e-13	2.58e-3	2.08e-9	1.30e-4	9.66e-11	8.43e-4	3.12e-13	1.88e-3
15.0	7.04e-10	3.51e-5	2.42e-10	8.34e-4	1.43e-20	2.34e-3	1.96e-8	1.62e-5	3.04e-11	4.22e-4	4.10e-21	1.14e-3	4.13e-17	8.80e-6	6.14e-11	3.09e-4	6.53e-16	8.21e-4

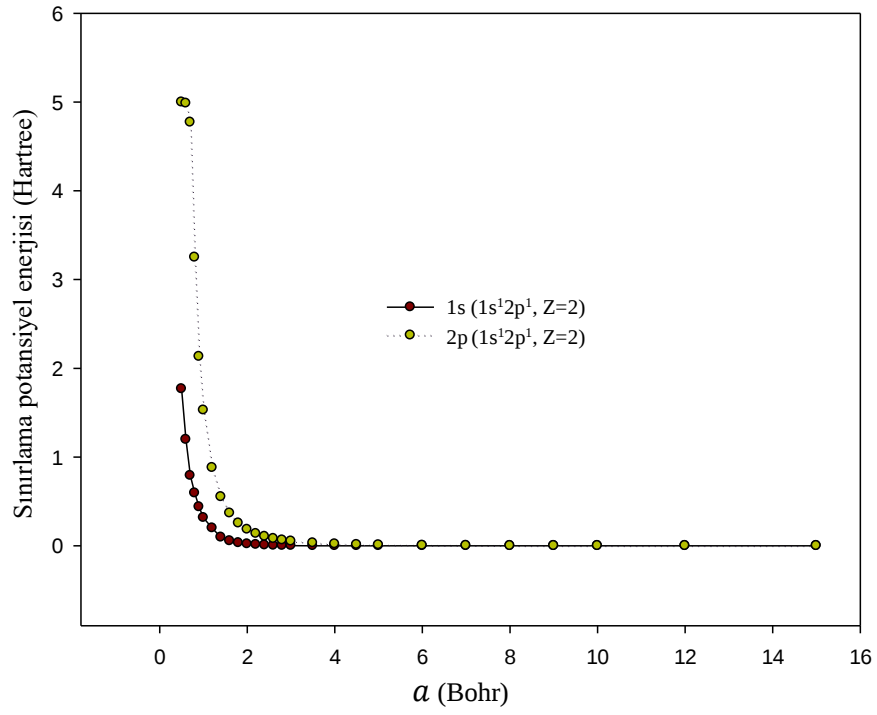
* Enerji ve yarıçap a.u (Hartree, Bohr) cinsinden verildi.



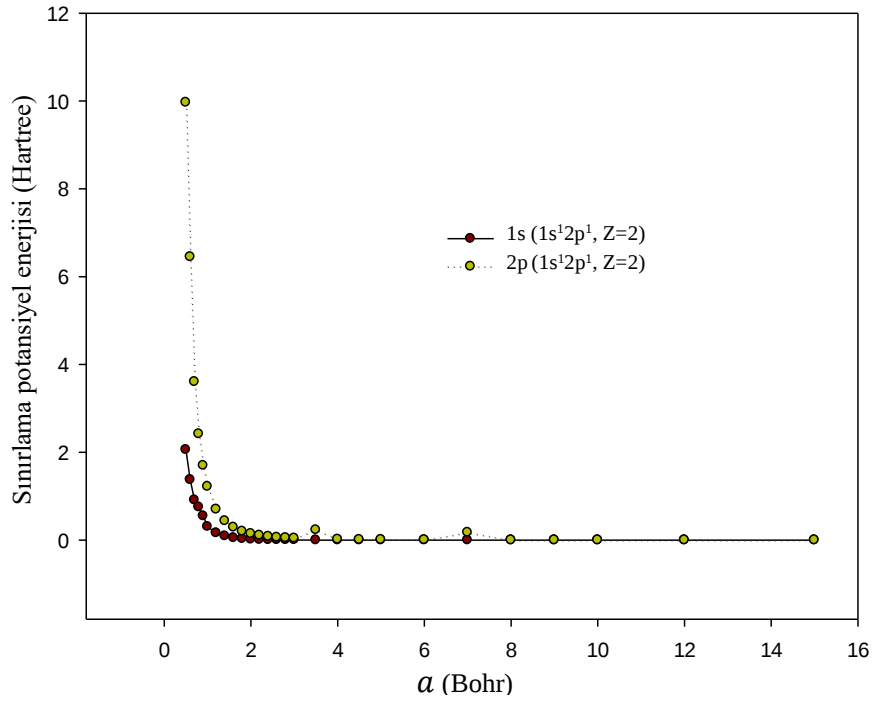
Şekil 5.25. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 2p^1$ konfigürasyonunun sınırlandırma potansiyel enerjileri

Şekil 5.25.'te 2p orbitalinin elektronunun maruz kaldığı sınırlandırma potansiyel enerjisinin daha büyük bir yarıçap değerinde artmaya başlaması, 1s orbitalinin elektronundan daha önce kuyu dışına çıkmasıdır. Ayrıca 2p orbitalinin sınırlandırma potansiyeli belli bir yarıçap değerinde pik noktasına ulaştı. Şayet daha küçük yarıçap değerlerinde de hesaplamalar yapılsaydı belli bir pik noktasından sonra 1s orbitalinin maruz kaldığı sınırlandırma potansiyel enerjisinin de sabit kaldığı görülecekti. Bu durumun nedeni çok küçük bir alana sıkıştırılan elektronların kuyu dışına kaçmasıdır.

Sınırlandırma potansiyelinin 5 Hartree ve 10 Hartree olduğu durumda iki elektronlu kuantum nokta yapının $1s^1 2p^1$ konfigürasyonunun orbitallerinin maruz kaldığı sınırlandırma potansiyel enerjisinin yarıçapa bağlı değişimi sırasıyla **Şekil 5.26.** ve **Şekil 5.27.**'de verildi. Bu grafiklerde sınırlandırma potansiyelinin yarıçapa bağlı değişimi **Şekil 5.25.**'te verilen grafiğe benzer bir değişim gösterdi. Bu grafiklerin farkı ise orbitallerin maruz kaldığı sınırlandırma potansiyel enerji değerlerinin birbirine daha yakın olmasıdır. Bu durumun nedeni sınırlandırma potansiyeli büyüdükçe 1s ve 2p orbitalindeki elektronların kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değerlerinin birbirine yaklaşmasıdır. Sınırlandırma potansiyeli arttıkça orbitallerin sınırlandırma potansiyelini hissetmeye başladıkları yarıçap değeri daha küçük değerlere doğru kaydı.



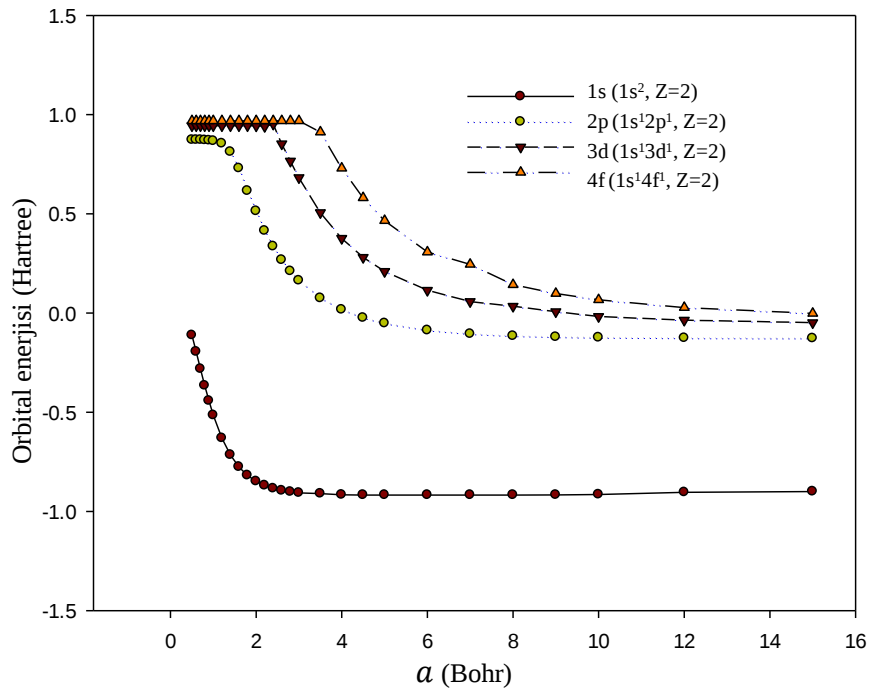
Şekil 5.26. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu nokta yapıların $1s^1 2p^1$ konfigürasyonunun sınırlama potansiyel enerjileri



Şekil 5.27. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu nokta yapıların $1s^1 2p^1$ konfigürasyonunun sınırlama potansiyel enerjileri

5.2.5. Sonlu kuantum nokta yapıların orbital enerjileri

Sonlu sınırlama potansiyeli ile sınırlandırılan kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^1 2p^1$, $1s^1 3d^1$, $1s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının her bir orbitalinin enerji değerleri $Z=2$ için Denk. (4.33) ile hesaplandı ve **Çizelge 5.18.**'de sonuçlar verildi. Sınırlama potansiyeli 1 Hartree olan iki elektronlu sistemin $Z=2$ için $1s^2$, $1s^1 2p^1$, $1s^1 3d^1$, $1s^1 4f^1$ konfigürasyonunun orbital enerjilerinin yarıçapa bağlı değişimi **Şekil 5.28.**'da verildi. Yarıçap değeri azaldıkça orbital enerjileri artarak bir limit değere gitti. Orbital enerjilerinin sabitlendiği bu yarıçap değeri uyarılmış elektronun küçük bir hacme sıkıştırılmak istenmesi sonucunda kuyu dışına kaçtığı yarıçapa karşılık gelir. Yarıçap küçülürken ilk önce 4f orbitali, sonra 3d orbitalinin ve en son da 2p orbitalinin enerjisinin maksimum değere ulaşmasının nedeni yüksek enerjili orbitallerde bulunan elektronların sınırlama potansiyelinden daha erken etkilenmesidir. Aynı grafikte $1s^2$ konfigürasyonu için 1s orbitalinin enerjisinin yarıçapa bağlı değişim grafiği de verildi. Grafikte bu orbitalin maksimum değere ulaştığının görülmemesinin nedeni bu orbitaldeki elektronun kuyu dışına fırlamasına neden olacak kadar küçük bir hacme sıkıştırılmamasıdır.



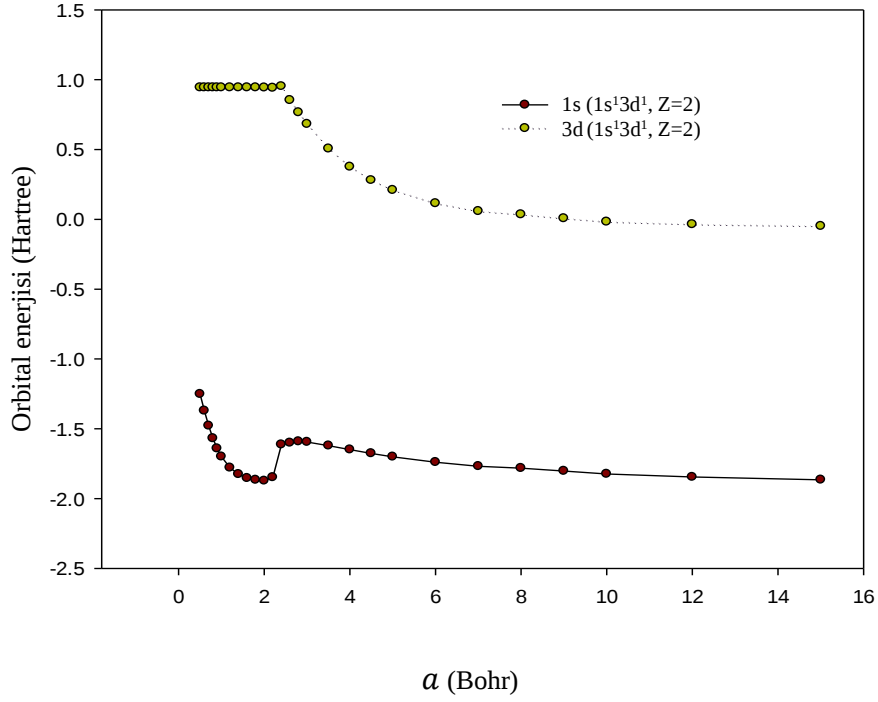
Şekil 5.28. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların 1s, 2p, 3d ve 4f orbitallerinin orbital enerjileri

Çizelge 5.18. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1, 5, 10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların taban ve bazı uyarılmış konfigürasyonlarının orbital enerjileri*

a	$1s^2$	$1s^2$	$1s^2$	$1s^12p^1$	$1s^12p^1$	$1s^12p^1$	$1s^13d^1$	$1s^13d^1$	$1s^13d^1$	$1s^14f^1$	$1s^14f^1$	$1s^14f^1$
	$\sigma =5, 1s$	$\sigma =5, 1s$	$\sigma =5, 1s$	$\sigma =5, 2p$	$\sigma =5, 2p$	$\sigma =5, 2p$	$\sigma =5, 3d$	$\sigma =5, 1s$	$\sigma =5, 1s$	$\sigma =5, 4f$	$\sigma =5, 4f$	$\sigma =5, 4f$
	Z=2 $V_C=1$	Z=2 $V_C=5$	Z=2 $V_C=10$	Z=2 $V_C=1$	Z=2 $V_C=5$	Z=2 $V_C=10$	Z=2 $V_C=1$	Z=2 $V_C=5$	Z=2 $V_C=10$	Z=2 $V_C=1$	Z=2 $V_C=5$	Z=2 $V_C=10$
0.3	0.0595	3.9434	7.6213	0.8729	4.8737	9.8743	0.9444	4.9444	9.9444	0.9688	4.9688	9.9688
0.4	0.0200	3.6312	5.8643	0.8730	4.8738	9.8735	0.9444	4.9444	9.9445	0.9687	4.9688	9.9688
0.5	-0.1122	2.4121	4.2103	0.8730	4.8735	9.8689	0.9444	4.9444	9.9444	0.9688	4.9688	9.9688
0.6	-0.1953	1.7410	2.9620	0.8728	4.8697	9.6136	0.9444	4.9444	9.9444	0.9688	4.9688	9.9688
0.7	-0.2816	1.1918	1.9895	0.8723	4.8608	8.2270	0.9444	4.9444	9.9444	0.9688	4.9688	9.9688
0.8	-0.3661	0.7665	1.3120	0.8713	4.6873	6.8232	0.9444	4.9444	9.9444	0.9688	4.9688	9.9688
0.9	-0.4428	0.4275	0.8084	0.8699	4.2338	5.6461	0.9444	4.9444	10.1235	0.9688	4.9687	9.9687
1.0	-0.5146	0.1662	0.4349	0.8670	3.6717	4.6983	0.9444	4.9444	8.8329	0.9687	4.9687	9.9688
1.2	-0.6308	-0.2104	-0.0642	0.8542	2.7320	3.3276	0.9444	4.9436	6.6376	0.9688	4.9687	10.0706
1.4	-0.7155	-0.4652	-0.3639	0.8123	2.0477	2.4246	0.9444	4.2217	5.0697	0.9688	4.9688	7.9232
1.6	-0.7760	-0.6148	-0.5511	0.7294	1.5561	1.8076	0.9442	3.4202	3.9583	0.9688	4.9688	6.2962
1.8	-0.8190	-0.7128	-0.6715	0.6156	1.1978	1.3733	0.9440	2.7807	3.1526	0.9687	4.4383	5.0859
2.0	-0.8484	-0.7782	-0.7509	0.5138	0.9357	1.0588	0.9433	2.2858	2.5545	0.9687	3.7128	4.1765
2.2	-0.8696	-0.8222	-0.8039	0.4149	0.7351	0.8254	0.9408	1.9006	2.1017	0.9687	3.1376	3.4791
2.4	-0.8841	-0.8524	-0.8400	0.3357	0.5773	0.6485	0.9525	1.5954	1.7492	0.9687	2.6741	2.9327
2.6	-0.8950	-0.8731	-0.8646	0.2679	0.4604	0.5122	0.8524	1.3511	1.4725	0.9687	2.2981	2.4993
2.8	-0.9014	-0.8873	-0.8815	0.2112	0.3648	0.4086	0.7659	1.1536	1.2499	0.9687	1.9905	2.1500
3.0	-0.9065	-0.8970	-0.8930	0.1638	0.2879	0.3220	0.6822	0.9915	1.0697	0.9686	1.7348	1.8645
3.5	-0.9099	-0.9099	-0.9084	0.0756	0.1503	0.1715	0.5061	0.6951	0.7437	0.9117	1.2638	1.3453
4.0	-0.9164	-0.9150	-0.9144	0.0166	0.0646	0.0784	0.3761	0.4997	0.5319	0.7295	0.9501	1.0038
4.5	-0.9173	-0.9161	-0.9151	-0.0240	8.14e-3	0.0172	0.2802	0.3657	0.3878	0.5802	0.7311	0.7681
5.0	-0.9177	-0.9172	-0.9165	-0.0521	-0.0302	-0.0185	0.2092	0.2702	0.2860	0.4651	0.5733	0.5999
6.0	-0.9178	-0.9178	-0.9177	-0.0870	-0.0758	-0.0728	0.1145	0.1482	0.1570	0.3070	0.3675	0.3825
7.0	-0.9179	-0.9181	-0.9179	-0.1055	-0.0997	-0.0978	0.0575	0.0777	0.0828	0.2447	0.2447	0.2539
8.0	-0.9179	-0.9166	-0.9180	-0.1156	-0.1124	-0.1112	0.0342	0.0342	0.0375	0.1425	0.1665	0.1726
9.0	-0.9169	-0.9134	-0.9180	-0.1211	-0.1193	-0.1187	6.29e-3	6.29e-3	8.42e-3	0.0980	0.1144	0.1184
10.0	-0.9146	-0.9152	-0.9142	-0.1240	-0.1231	-0.1226	-0.0179	-0.0123	-0.0108	0.0667	0.0781	0.0810
12.0	-0.9036	-0.9145	-0.9128	-0.1265	-0.1262	-0.1261	-0.0364	-0.0337	-0.0330	0.0273	0.0334	0.0349
15.0	-0.9001	-0.9068	-0.9074	-0.1274	-0.1274	-0.1270	-0.0485	-0.0476	-0.0473	-2.37e-3	3.37e-4	1.01e-3

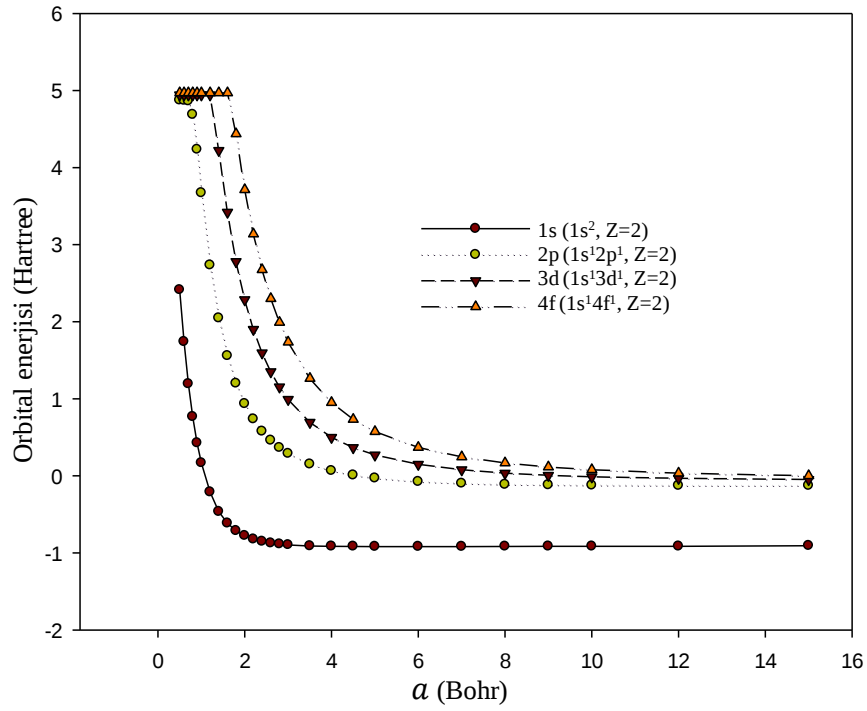
* Enerji ve yarıçap a.u (Hartree, Bohr) cinsinden verildi.

Kuyu derinliğinin 1 Hartree olduğu $1s^13d^1$ konfigürasyonunun ($Z=2$) 1s ve 3d orbitalinin enerjilerinin kıyaslandığı **Şekil 5.29.**'da 1s orbitalin enerjisinin, belli bir yarıçapta ortaya çıkan ani düşüş dışında, yarıçap küçüldükçe arttığı görüldü. Ani düşüşün nedeni uyarılmış elektronun kuyu dışına çıktığında birbirinden uzaklaşan elektronlar arasındaki etkileşmenin azalmasıdır ve gözlemlendiği kritik yarıçap değeri uyarılmış elektron daha yüksek enerjili orbitallere çıktıkça daha büyük değerler aldı.

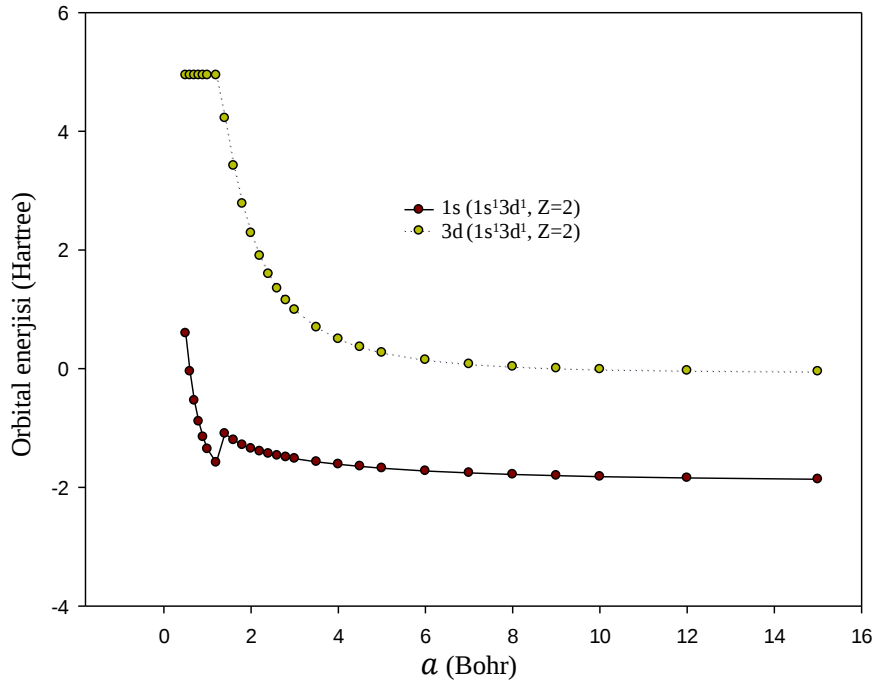


Şekil 5.29. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların 1s ve 3d orbitallerinin orbital enerjileri

Sınırlama potansiyeli 5 Hartree olan iki elektronlu nokta yapının $Z=2$ için $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$, $1s^14f^1$ konfigürasyonunun orbital enerjilerinin yarıçapa bağlı değişimi **Şekil 5.30.**'te verildi. Uyarılmış elektronun bulunduğu orbitalin enerji değerleri, sınırlama etkisinin zayıfladığı büyük yarıçap değerlerinde birbirine yaklaştı. Yarıçap değeri küçüldüğünde ise orbital enerjileri artarak bir limit değerine ulaştı. Sınırlama potansiyelinin 5 Hartree olduğu sistemde $1s^13d^1$ konfigürasyonunun 1s ve 3d orbitallerinin enerjilerinin yarıçapa bağlı değişimi **Şekil 5.31.**'de verildi. Beklendiği gibi 1s orbitalinin enerjisinde süregelen değişiminde ani bir düşme ortaya çıktı. Bu durumun meydana geldiği yarıçap uyarılmış elektronun kuyu içine girmeye başladığı değere karşılık gelir.

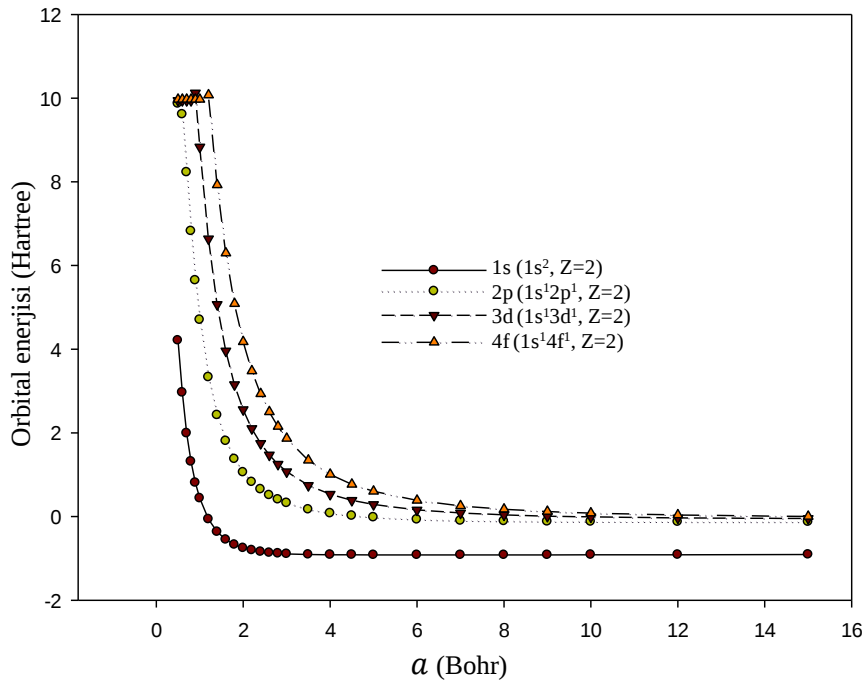


Şekil 5.30. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların 1s, 2p, 3d ve 4f orbitallerinin orbital enerjileri



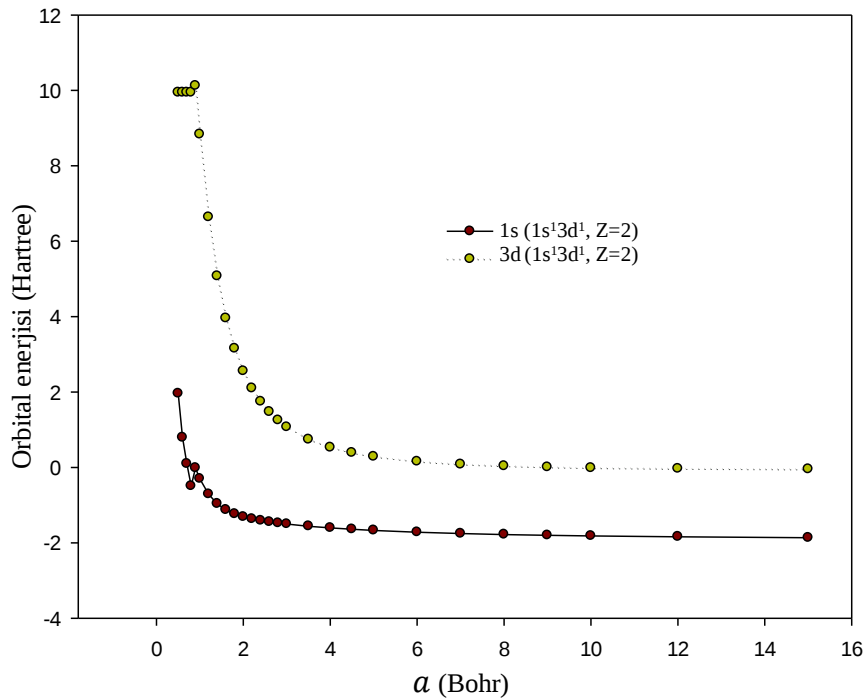
Şekil 5.31. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların 1s ve 3d orbitallerinin orbital enerjileri

Sınırlama potansiyelin 10 Hartree ve $Z=2$ olduğu durumda $1s^2$, $1s^1 2p^1$, $1s^1 3d^1$, $1s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının orbital enerjilerin değişimi **Şekil 5.32.**'de verildi. **Şekil 5.28.** ve **Şekil 5.30.** ile kıyaslandığında orbital enerjilerinin yarıçapa bağlı değişiminin benzer bir seyir izlediği görüldü. Ancak üç farklı sınırlama potansiyelinde de uyarılmış elektronların bulunduğu orbitallerin maksimum enerji değerlerinin birbirinden farklı olduğu görüldü. Bu durumun nedeni orbital enerjilerinin elektronların kuyu dışına çıktıkları andan itibaren maksimum değere ulaşırken bu kuyu dışına çıkmak için ihtiyaç duydukları enerji değerlerinin farklı olmasıdır. Bu üç grafik karşılaştırıldığında göze çarpan başka bir nokta ise sınırlandırma potansiyeli düşüken orbital enerji grafiklerinin daha yatay bir değişim gösterirken sınırlandırma etkisi arttıkça bu grafikleri daha keskin bir değişim göstermesidir. Bu duruma her ne kadar sınırlandırma potansiyelinin büyük olduğu durumlarda orbitallerin maksimum enerji değerlerinin büyük olması etkilese de asıl neden büyük sınırlandırma potansiyeline maruz kalan elektronların yarıçap küçülürken kuyu içine daha çabuk girmesinden dolayıdır. Zaten grafiklerden de görüleceği üzere sınırlama potansiyeli arttıkça uyarılmış elektronların kuyu içine girmeye başladığı yarıçap değerleri daha küçük değerlere doğru kaydı.



Şekil 5.32. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların 1s, 2p, 3d ve 4f orbitallerinin orbital enerjileri

Kuyu derinliğinin 10 Hartree olduğu durumda $Z=2$ için $1s^13d^1$ konfigürasyonunun orbital enerjilerinin değişimi **Şekil 5.33.**'te verildi. Aynı konfigürasyonun farklı sınırlama potansiyelleri için çizilen grafiklerle karşılaştırıldığında (**Şekil 5.29.**, **Şekil 5.31.**) $1s$ orbitalinde görülen ani değişimin meydana geldiği yarıçap aralığı sınırlama potansiyeli büyüdükçe daralmaktadır. Bu durum büyük sınırlama potansiyeli etkisi altındaki elektronların çabucak kuyu içine girmesinden kaynaklandı.



Şekil 5.33. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s$ ve $3d$ orbitallerinin orbital enerjileri

5.2.6. Sonlu kuantum nokta yapıların enerji seviyeleri

Sonlu sınırlama potansiyeli ile sınırlandırılmış kuantum nokta yapıların $V_C=1$ Hartree, $Z=2$ için $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$, $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının; $V_C=5$ Hartree, $Z=2$ için $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$, $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının; $V_C=5$ Hartree ve $Z=0$ için $1s^14f^1$ konfigürasyonunun; $V_C=10$ Hartree, $Z=2$ için $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$, $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının singlet ve triplet enerji seviyeleri Denk. (4.29) ile hesaplandı. Hesaplanan singlet enerji seviyeleri **Çizelge 5.19.**'de, triplet enerji değerleri **Çizelge 5.20.**'de verildi.

Çizelge 5.19. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1, 5, 10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların taban ve bazı uyarılmış konfigürasyonlarının singlet enerji seviyeleri*

a	$1s^2$ $\sigma=5$ $Z=2$ $V_C=1$	$1s^12p^1$ $\sigma=5$ $Z=2$ $V_C=1$	$1s^13d^1$ $\sigma=5$ $Z=2$ $V_C=1$	$1s^14f^1$ $\sigma=5$ $Z=2$ $V_C=1$	$1s^2$ $\sigma=5$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^12s^1$ $\sigma=7$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^13s^1$ $\sigma=7$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^12p^1$ $\sigma=5$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^13d^1$ $\sigma=5$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^14f^1$ $\sigma=5$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^14f^1$ $\sigma=5$ $z=0$ $V_C=5$	$1s^2$ $\sigma=5$ $Z=2$ $V_C=10$	$1s^12p^1$ $\sigma=5$ $Z=2$ $V_C=10$	$1s^13d^1$ $\sigma=5$ $Z=2$ $V_C=10$	$1s^14f^1$ $\sigma=5$ $Z=2$ $V_C=10$
0.5	-1.4155	-0.4696	-0.4182	-0.3943	2.9418	5.3495	5.3222	5.3682	5.4277	5.4534	10.0000	6.0602	11.7029	11.7944	11.8113
0.6	-1.6213	-0.5881	-0.5376	-0.5139	1.6273	4.6324	4.6500	4.7344	4.7862	4.8103	9.6657	3.7078	11.0433	10.6264	10.6763
0.7	-1.8188	-0.6928	-0.6449	-0.6206	0.5644	4.1320	4.1585	4.3044	4.2956	4.3228	9.1141	1.9082	9.1508	9.9312	9.8685
0.8	-1.9970	-0.7793	-0.7351	-0.7106	-0.2082	3.7764	3.8021	4.2047	3.9449	3.9682	8.5788	0.6914	7.2599	9.3380	9.3710
0.9	-2.1494	-0.8540	-0.8082	-0.7841	-0.8044	3.5163	3.5323	3.6705	3.6804	3.6940	8.1123	-0.1908	5.6477	9.4842	8.9509
1.0	-2.2829	-0.9026	-0.8663	-0.8416	-1.2554	3.2948	3.3193	2.9399	3.4792	3.5035	7.7274	-0.8309	4.3234	7.9596	8.7156
1.2	-2.4801	-0.9384	-0.9461	-0.9217	-1.8780	2.6680	2.9425	1.7233	3.2385	3.2615	7.0979	-1.6579	2.5049	5.4057	8.6410
1.4	-2.6157	-0.9342	-0.9934	-0.9700	-2.2778	1.7410	2.3889	0.8291	2.6290	3.1384	6.7259	-2.1298	1.3260	3.6114	6.3109
1.6	-2.6976	-0.9615	-1.0216	-0.9963	-2.4971	0.8883	1.9465	0.1975	1.7387	3.0637	6.3222	-2.4087	0.5265	2.3514	4.5617
1.8	-2.7586	-1.0805	-1.0364	-1.0126	-2.6319	0.1999	1.5649	-0.2625	1.0277	2.5807	6.2204	-2.5781	-0.0328	1.4464	3.2723
2.0	-2.7937	-1.1990	-1.0457	-1.0212	-2.7161	-0.2351	1.1934	-0.6080	0.4794	1.8176	6.0518	-2.6827	-0.4382	0.7814	2.3105
2.2	-2.8182	-1.3197	-1.0512	-1.0258	-2.7690	-0.6102	0.6958	-0.8705	0.0547	1.2163	5.2595	-2.7479	-0.7431	0.2785	1.5765
2.4	-2.8330	-1.4231	-1.0160	-1.0284	-2.8027	-0.8922	0.2782	-1.0708	-0.2844	0.7336	4.5984	-2.7896	-0.9747	-0.1102	1.0047
2.6	-2.8442	-1.5073	-1.1128	-1.0297	-2.8241	-1.1536	-0.0327	-1.2386	-0.5501	0.3427	4.0586	-2.8157	-1.1574	-0.4159	0.5526
2.8	-2.8497	-1.5858	-1.1999	-1.0304	-2.8378	-1.3447	-0.3705	-1.3294	-0.7677	0.0242	3.6080	-2.8324	-1.3095	-0.6618	0.1896
3.0	-2.8537	-1.6532	-1.2871	-1.0309	-2.8465	-1.4886	-0.6999	-1.4777	-0.9460	-0.2402	3.2319	-2.8430	-1.4255	-0.8588	-0.1058
3.5	-2.8568	-1.7829	-1.4731	-1.0838	-2.8568	-1.7973	-1.1769	-1.6702	-1.2678	-0.7239	2.5211	-2.8556	-1.6375	-1.2157	-0.6405
4.0	-2.8609	-1.8728	-1.6101	-1.2674	-2.8601	-1.9351	-1.4808	-1.7986	-1.4783	-1.0435	2.0301	-2.8597	-1.7760	-1.4439	-0.9889
4.5	-2.8614	-1.9360	-1.7107	-1.4179	-2.8609	-1.9960	-1.6833	-1.8854	-1.6208	-1.2655	1.6757	-2.8605	-1.8679	-1.5973	-1.2281
5.0	-2.8616	-1.9807	-1.7847	-1.5337	-2.8614	-2.0551	-1.8214	-1.9457	-1.7211	-1.4248	1.4118	-2.8610	-1.9265	-1.7045	-1.3979
6.0	-2.8617	-2.0315	-1.8825	-1.6926	-2.8616	-2.1070	-1.9709	-2.0130	-1.8478	-1.6319	1.0517	-2.8616	-2.0087	-1.8388	-1.6167
7.0	-2.8617	-2.0665	-1.9409	-1.7851	-2.8601	-2.1190	-2.0597	-2.0572	-1.9204	-1.7551	0.8229	-2.8617	-2.0486	-1.9150	-1.7458
8.0	-2.8617	-2.0835	-1.9647	-1.8574	-2.8598	-2.1402	-2.0366	-2.0784	-1.9647	-1.8334	0.6679	-2.8614	-2.0705	-1.9613	-1.8273
9.0	-2.8600	-2.0933	-1.9930	-1.9019	-2.8576	-2.1544	-2.0976	-2.0902	-1.9930	-1.8856	0.5559	-2.8617	-2.0848	-1.9908	-1.8816
10.0	-2.8586	-2.0982	-2.0174	-1.9333	-2.8581	-2.1394	-2.1205	-2.0968	-2.0118	-1.9219	0.4750	-2.8574	-2.0901	-2.0103	-1.9190
12.0	-2.8565	-2.1027	-2.0362	-1.9727	-2.8574	-2.1685	-2.1396	-2.1024	-2.0335	-1.9666	0.3600	-2.8547	-2.0982	-2.0328	-1.9651
15.0	-2.8503	-2.1047	-2.0484	-2.0024	-2.8506	-2.1677	-2.1458	-2.1047	-2.0474	-1.9997	0.2590	-2.8517	-2.0995	-2.0472	-1.9990

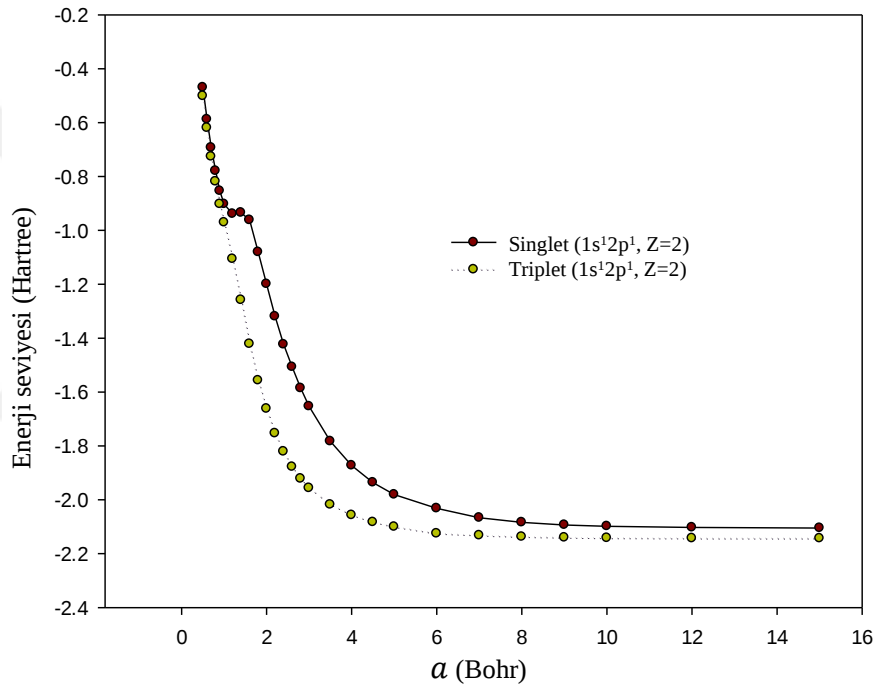
* Enerji ve yarıçap a.u (Hartree, Bohr) cinsinden verildi.

Çizelge 5.20. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1, 5, 10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların taban ve uyarılmış konfigürasyonlarının triplet enerji seviyeleri*

a	$1s^1 2s^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$ $V_C=1$	$1s^1 2p^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$ $V_C=1$	$1s^1 3d^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$ $V_C=1$	$1s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$ $V_C=1$	$1s^1 2s^1$ $\sigma = 7$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^1 3s^1$ $\sigma = 7$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^1 2p^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^1 3d^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$ $V_C=5$	$1s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z=0$ $V_C=5$	$1s^1 2p^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$ $V_C=10$	$1s^1 3d^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$ $V_C=10$	$1s^1 4f^1$ $\sigma = 5$ $Z=2$ $V_C=10$
0.5	-0.5478	-0.5011	-0.4183	-0.3943	5.2863	5.3180	5.3569	5.4277	5.4534	10.0000	11.6803	11.7944	11.8113
0.6	-0.6691	-0.6194	-0.5376	-0.5139	4.6165	4.6487	4.7149	4.7862	4.8103	9.6657	9.7759	10.6264	10.6763
0.7	-0.7770	-0.7262	-0.6449	-0.6206	4.1283	4.1565	4.1359	4.2956	4.3228	9.1141	7.4099	9.9312	9.8685
0.8	-0.8626	-0.8186	-0.7352	-0.7106	3.7701	3.7986	3.3040	3.9449	3.9682	8.5788	5.5504	9.3380	9.3710
0.9	-0.9411	-0.9024	-0.8083	-0.7841	3.5088	3.5279	2.4666	3.6804	3.6940	8.1123	4.0320	8.8174	8.9509
1.0	-0.9991	-0.9707	-0.8663	-0.8416	3.2790	3.3101	1.6985	3.4792	3.5035	7.7274	2.7804	7.2209	8.7156
1.2	-1.0810	-1.1060	-0.9462	-0.9217	2.6203	2.8932	0.5682	3.2350	3.2615	7.0979	1.1650	4.7210	8.3008
1.4	-1.1352	-1.2583	-0.9935	-0.9700	1.6104	2.2692	-0.2156	2.1899	3.1384	6.7259	0.1603	3.0215	5.9856
1.6	-1.1821	-1.4217	-1.0218	-0.9963	0.7389	1.8151	-0.7308	1.3304	3.0637	6.3222	-0.4890	1.8576	4.2867
1.8	-1.2432	-1.5572	-1.0367	-1.0126	0.0771	1.4570	-1.0850	0.6760	2.4095	6.2204	-0.9231	1.0371	3.0474
2.0	-1.3324	-1.6617	-1.0464	-1.0212	-0.4251	1.1236	-1.3279	0.1838	1.6749	5.6568	-1.2218	0.4413	2.1294
2.2	-1.4321	-1.7533	-1.0549	-1.0258	-0.7934	0.6703	-1.5062	-0.1921	1.0991	4.8700	-1.4322	-1.12e-3	1.4335
2.4	-1.5306	-1.8210	-1.0673	-1.0284	-1.0805	0.2512	-1.6433	-0.4833	0.6395	4.2284	-1.5852	-0.3401	0.8924
2.6	-1.6388	-1.8781	-1.1714	-1.0297	-1.2894	-0.0762	-1.7347	-0.7165	0.2691	3.7053	-1.6975	-0.6031	0.4658
2.8	-1.7146	-1.9214	-1.2590	-1.0304	-1.4578	-0.3870	-1.8093	-0.9025	-0.0332	3.2741	-1.7758	-0.8125	0.1227
3.0	-1.7483	-1.9562	-1.3408	-1.0310	-1.5879	-0.7165	-1.8676	-1.0537	-0.2837	2.9137	-1.8426	-0.9821	-0.1570
3.5	-1.8927	-2.0180	-1.5100	-1.0919	-1.8089	-1.1864	-1.9680	-1.3331	-0.7458	2.2385	-1.9542	-1.2871	-0.6660
4.0	-2.0022	-2.0571	-1.6346	-1.2731	-1.9447	-1.4867	-2.0262	-1.5173	-1.0552	1.7757	-2.0179	-1.4867	-1.0021
4.5	-2.0516	-2.0830	-1.7269	-1.4214	-2.0048	-1.6863	-2.0629	-1.6449	-1.2717	1.4482	-2.0593	-1.6239	-1.2352
5.0	-2.0728	-2.1005	-1.7956	-1.5358	-2.0630	-1.8229	-2.0870	-1.7366	-1.4283	1.2054	-2.0802	-1.7215	-1.4019
6.0	-2.1324	-2.1249	-1.8879	-1.6934	-2.1142	-1.9717	-2.1184	-1.8551	-1.6330	0.8760	-2.1161	-1.8463	-1.6181
7.0	-2.1573	-2.1323	-1.9437	-1.7855	-2.1520	-2.0621	-2.1288	-1.9239	-1.7555	0.6687	-2.1316	-1.9190	-1.7464
8.0	-2.1612	-2.1377	-1.9667	-1.8575	-2.1634	-2.0405	-2.1358	-1.9667	-1.8336	0.5298	-2.1393	-1.9635	-1.8275
9.0	-2.1582	-2.1403	-1.9943	-1.9020	-2.1590	-2.1156	-2.1394	-1.9943	-1.8857	0.4381	-2.1422	-1.9922	-1.8817
10.0	-2.1704	-2.1419	-2.0182	-1.9333	-2.1438	-2.1288	-2.1413	-2.0127	-1.9219	0.3586	-2.0901	-2.0112	-1.9190
12.0	-2.1724	-2.1430	-2.0366	-1.9728	-2.1733	-2.1672	-2.1427	-2.0340	-1.9666	0.2648	-2.1455	-2.0333	-1.9651
15.0	-2.1740	-2.1431	-2.0487	-2.0024	-2.1736	-2.1700	-2.1430	-2.0477	-1.9997	0.1843	-2.1465	-2.0474	-1.9990

* Enerji ve yarıçap a.u (Hartree, Bohr) cinsinden veri

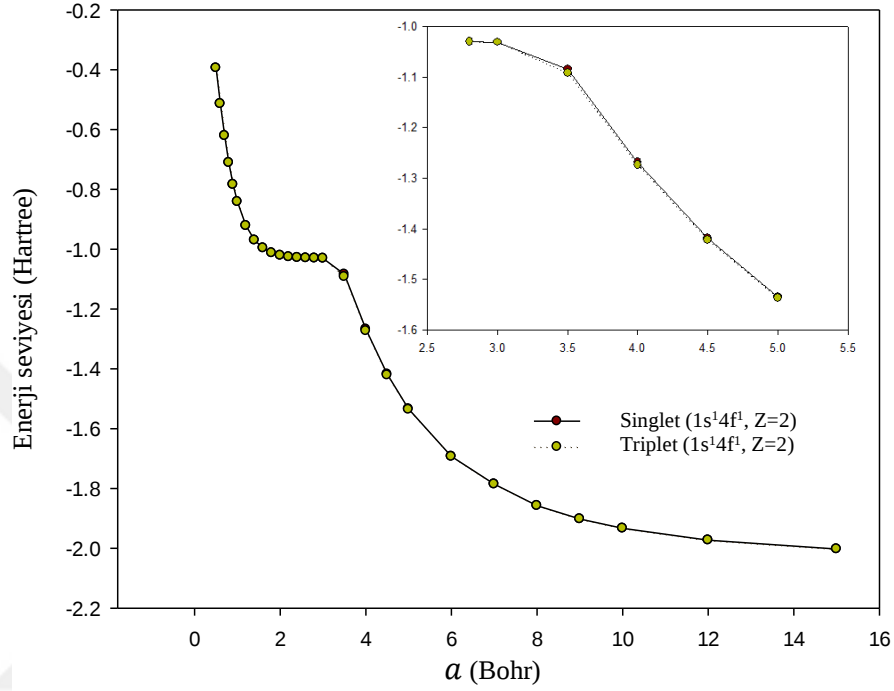
Sınırlama potansiyelinin 1 Hartree olduğu durumda $Z=2$ için $1s^1 2p^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri **Şekil 5.34.**'te verildi. Bu grafikte yarıçap değeri arttıkça enerji değerlerinin azaldığı ve singlet enerji seviyesi ile triplet enerji seviyesinin birbirine yaklaştığı görüldü. Bu durumun nedeni büyük yarıçap değerinde sınırlama etkisinin zayıflamasıyla birlikte daha büyük bir alana yayılan elektronların arasındaki mesafenin artmasıdır. Kaldı ki enerji seviyeleri arasındaki farkın oluşmasının ana nedeni elektronlar arasındaki exchange enerjisidir ve elektronlar arasındaki mesafenin artmasıyla bu enerji değerinin azalır. Bu nedenle elektronlar arasındaki uzaklık arttıkça singlet ve triplet enerji seviyeleri birbirine yaklaştı.



Şekil 5.34. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 2p^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri

Kuyu derinliğinin 1 Hartree olduğu durumda $Z=2$ için $1s^1 4f^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri **Şekil 5.35.**'te verildi. Bu konfigürasyonda $1s$ ve $4f$ orbitallerinin arasındaki mesafenin $1s$ ve $2p$ orbitallerine kıyasla daha fazla olması elektronlar arasındaki etkileşmenin zayıflamasına neden olur. Elektronlar arasındaki etkileşmenin zayıflaması da enerji seviyeleri birbirine yaklaştırdı. Hatta fark o kadar azaldı ki büyük yarıçap değerlerinde enerji seviyeleri neredeyse üst üste bindi. Ek olarak her iki grafikte de (Şekil 5.34., Şekil 5.35.) nokta yapının yarıçapı küçülürken belli bir yarıçap değerinde bir çıkıntı ortaya çıktı. Bu durumun nedeni tıpkı ortalama enerjide olduğu gibi kuyu

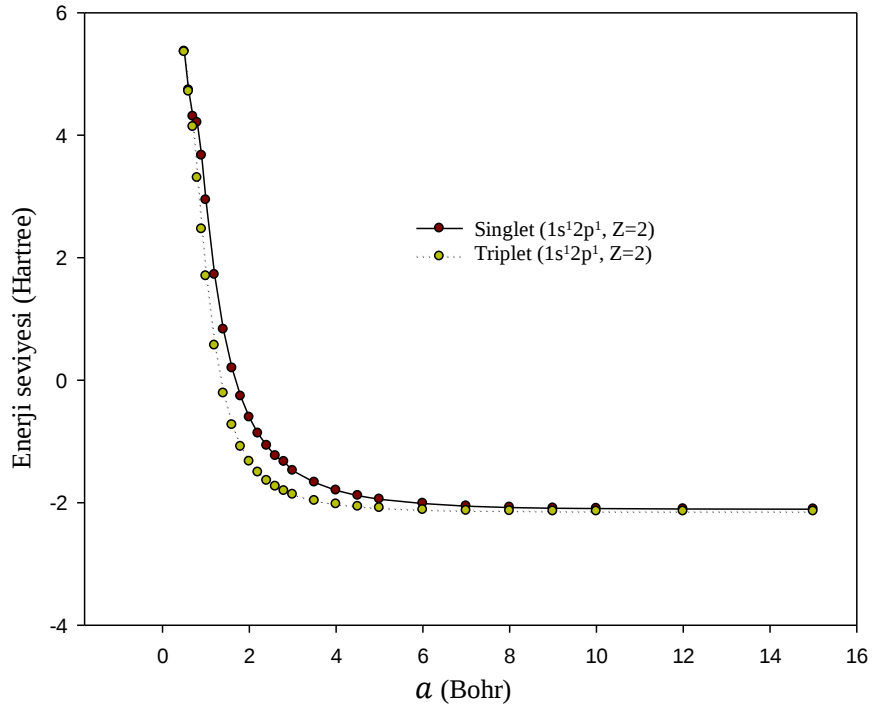
dışında bulunan uyarılmış elektronun kuyu içine girerken halihazırda kuyu içinde bulunan elektronla daha şiddetli etkileşmesidir. Bu durumun gözlemlendiği yarıçap değeri uyarılmış elektronun kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değerine karşılık gelmektedir.



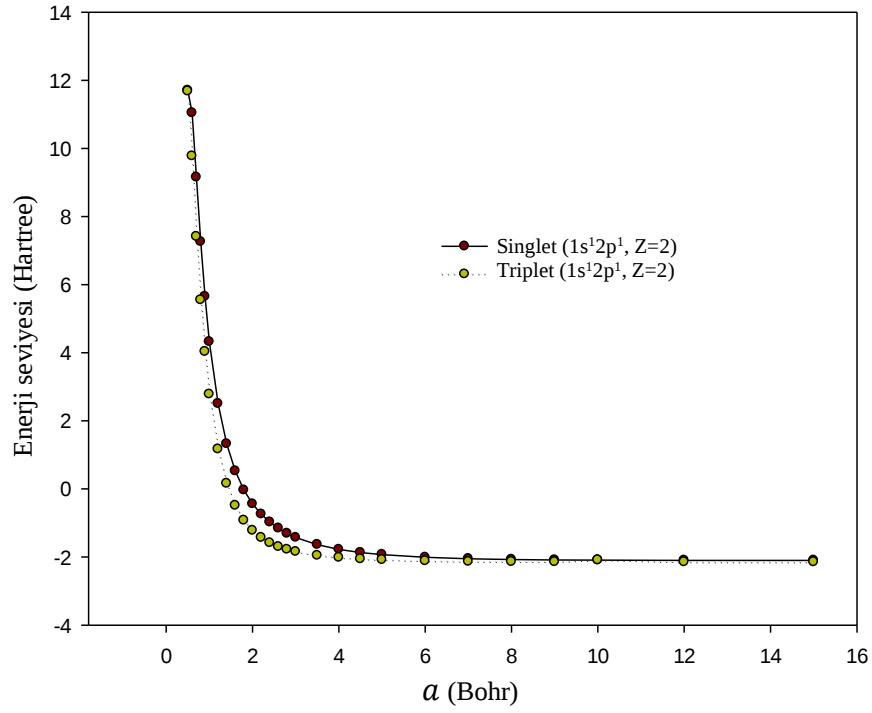
Şekil 5.35. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 4f^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri

Sınırlama potansiyelinin 5 Hartree olduğu durumda $Z=2$ için $1s^1 2p^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri **Şekil 5.36.**'da verildi. Yarıçap arttıkça singlet ve triplet enerji değerleri küçülerek birbirine yaklaştı. Bu durumun nedeni sınırlama potansiyelinin etkisinin zayıflamasıdır.

Kuyu derinliğinin 10 Hartree ve $Z=2$ olduğu durumda, **Şekil 5.37.**'de görüldüğü gibi, enerji seviyeleri yarıçap arttıkça birbirine yaklaştı. **Şekil 5.34.** ve **Şekil 5.36.**'dan farklı olarak enerji seviyelerinin birbirine daha çok yaklaştı ve grafikte ortaya çıkan çıkıntının olduğu yarıçap değeri küçüldü. Singlet ve triplet enerji seviyelerinin birbirine yaklaşmasının nedeni sınırlama potansiyeli arttıkça sistemin ortalama enerjisinin artması ve exchange enerjisinin ortalama enerji içindeki ağırlığının azalmasıdır.



Şekil 5.36. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 2p^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri



Şekil 5.37. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 2p^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri

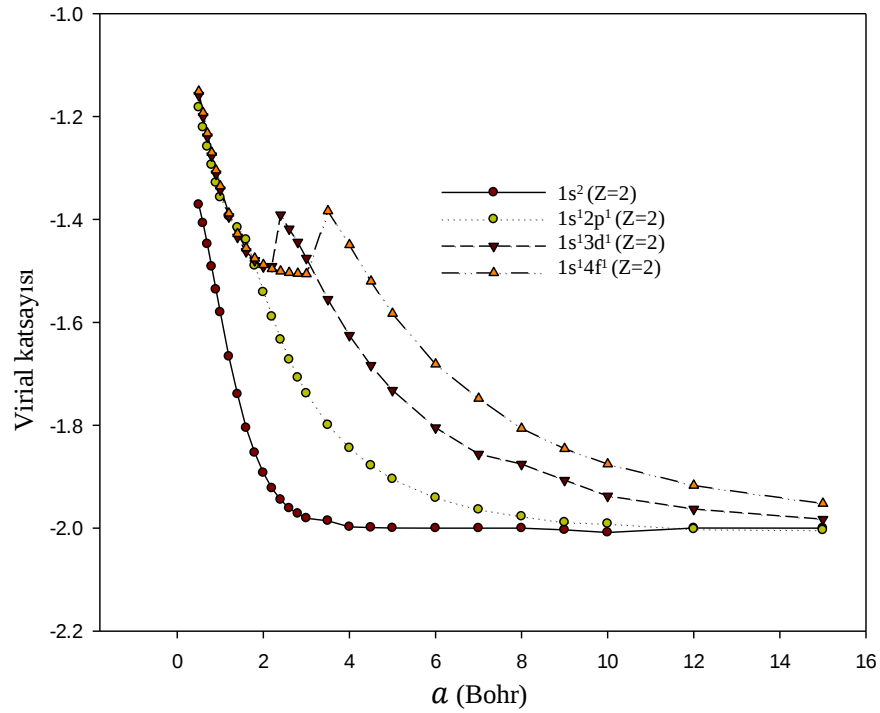
5.2.7. Sonlu kuantum nokta yapıların virial katsayıları

Sonlu potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^1 2p^1$, $1s^1 3d^1$, $1s^1 4f^1$ konfigürasyonlarında sistemin virial katsayıları $Z=2$ ve üç farklı kuyu derinliği ($V_C=1, 5, 10$ Hartree) için Denk. (4.41) kullanılarak hesaplandı ve sonuçlar **Çizelge 5.21.**'de verildi. **Şekil 5.38.**'de görüldüğü üzere, sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış kuantum nokta yapılarda olduğu gibi, $1s^2$, $1s^1 2p^1$, $1s^1 3d^1$, $1s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının virial katsayıları yarıçap büyüdükçe -2 değerine yaklaştı. Uyarılmış elektronun daha düşük enerjili orbitallerde bulunduğu konfigürasyonlarda virial katsayıları artan yarıçap değeri ile daha hızlı bir şekilde -2 değerine yaklaştı. Nokta yarıçapının çok küçüldüğü durumlarda elektronların kuyu dışına kaçması nedeni ile virial katsayıları birbirine yaklaştı. Ancak $1s$ orbitalindeki elektron kuyu içinde iken uyarılmış elektronun kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değerinde, iki elektron arasındaki etkileşmenin keskin bir şekilde değişmesi nedeniyle, virial katsayılarının yarıçapa bağlı değişiminde kırılmalar meydana geldi. Bu kırılmanın en fazla $1s^1 4f^1$ konfigürasyonunda belirgin olması, birbirinden uzakta durmayı tercih eden $1s$ ve $4f$ orbitalindeki elektronların kuyu içine girdiklerinde birbirlerine yakın durmaya zorlanmaları ve dolayısıyla etkileşimlerinin şiddetlenmesidir. Ayrıca $1s^1 4f^1$ konfigürasyonunda daha açık bir şekilde görüleceği üzere yarıçap azaldıkça üstel olarak konfigürasyonun virial katsayısı artar ve kritik yarıçap değerinde pik noktası oluşturur ve daha sonra düşmeye başlar. Bu durumun nedeni $4f$ orbitalinin elektronu kuyu içine girmeye başladığında negatif toplam potansiyel enerjinin içinde pozitif işaretli sınırlandırma potansiyel enerjisinin ortadan kalkmasıyla toplam potansiyel enerjinin daha küçük hale gelmesidir. Bu yüzden pik noktadan sonra virial katsayısı, genel gidişatın aksine azalmaya başlar. Ancak yerel bir minimum noktasına ulaştıktan sonra dar bir alana sıkışan elektronların etkileşmesinin şiddetlenmesi sonucunda pozitif işaretli elektronik potansiyel enerjinin artması toplam potansiyel enerjinin yükselmesine ve dolayısı ile virial katsayısının tekrar artmaya başlamasına neden oldu. Bu durum $1s^1 2p^1, 1s^1 3d^1$ konfigürasyonlarında da meydana geldi. Ancak bu konfigürasyonlarda uyarılmış elektronun nokta yapı içine girmeye başladığı kritik yarıçap değeri $4f$ orbitalindeki elektronun kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değerinden daha küçük olması değişimin sönükleşmesine neden oldu. Ayrıca $1s^2$ konfigürasyonunda her iki elektronunda aynı orbitalde bulunması virial katsayılarındaki bu kırılmanın oluşmasını engelledi.

Çizelge 5.21. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1, 5, 10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların taban ve bazı uyarılmış konfigürasyonlarının virial katsayıları*

a	$1s^2$	$1s^1 2p^1$	$1s^1 3d^1$	$1s^1 4f^1$	$1s^2$	$1s^1 2s^1$	$1s^1 3s^1$	$1s^1 2p^1$	$1s^1 3d^1$	$1s^1 4f^1$	$1s^2$	$1s^1 2p^1$	$1s^1 3d^1$	$1s^1 4f^1$
	$\sigma = 5$	$\sigma = 5$	$\sigma = 5$	$\sigma = 5$	$\sigma = 5$	$\sigma = 7$	$\sigma = 7$	$\sigma = 5$	$\sigma = 5$	$\sigma = 5$	$\sigma = 5$	$\sigma = 5$	$\sigma = 5$	$\sigma = 5$
	$Z=2$	$Z=2$	$Z=2$	$Z=2$	$Z=2$	$Z=2$	$Z=2$	$Z=2$	$Z=2$	$Z=2$	$Z=2$	$Z=2$	$Z=2$	$Z=2$
	$V_C=1$	$V_C=1$	$V_C=1$	$V_C=1$	$V_C=5$	$V_C=5$	$V_C=5$	$V_C=5$	$V_C=5$	$V_C=5$	$V_C=10$	$V_C=10$	$V_C=10$	$V_C=10$
0.5	-1.3712	-1.1823	-1.1589	-1.1512	-0.6525	0.0387	0.0959	0.0563	0.0873	0.0996	-0.5323	0.6128	0.6727	0.6795
0.6	-1.4073	-1.2211	-1.2001	-1.1927	-0.8011	-0.0573	-0.0216	-0.0311	6.18e-3	0.0166	-0.6753	-0.0745	0.6954	0.7196
0.7	-1.4478	-1.2586	-1.2394	-1.2327	-0.9273	-0.0968	-0.0657	-0.1516	-0.0236	-0.0114	-0.8110	-0.3413	0.7852	0.8079
0.8	-1.4916	-1.2939	-1.2766	-1.2700	-1.0292	-0.0960	-0.0716	-0.4590	-0.0224	-8.24e-4	-0.9219	-0.4545	0.9194	0.9641
0.9	-1.5364	-1.3287	-1.3115	-1.3046	-1.1240	-0.1011	-0.0623	-0.6083	-7.69e-3	6.37e-3	-1.0244	-0.5518	-0.1810	1.1038
1.0	-1.5803	-1.3569	-1.3424	-1.3356	-1.2103	-0.1573	-0.0720	-0.7048	0.0223	0.0373	-1.1195	-0.6430	-0.3120	1.2498
1.2	-1.6664	-1.3938	-1.3947	-1.3882	-1.3678	-0.5728	-0.2425	-0.8563	0.0836	0.1150	-1.2915	-0.7907	-0.4736	-0.2223
1.4	-1.7397	-1.4158	-1.4343	-1.4280	-1.5122	-0.7550	-0.4236	-0.9912	-0.6257	0.1893	-1.4409	-0.9239	-0.5930	-0.3764
1.6	-1.8050	-1.4393	-1.4623	-1.4557	-1.6261	-0.8770	-0.4987	-1.1101	-0.7460	0.2645	-1.5680	-1.0466	-0.7001	-0.4827
1.8	-1.8534	-1.4897	-1.4797	-1.4757	-1.7188	-0.9811	-0.5522	-1.2178	-0.8495	-0.6001	-1.6724	-1.1592	-0.8012	-0.5747
2.0	-1.8924	-1.5413	-1.4917	-1.4883	-1.7923	-1.0735	-0.6290	-1.3135	-0.9440	-0.6959	-1.7564	-1.2615	-0.8961	-0.6615
2.2	-1.9224	-1.5889	-1.4911	-1.4962	-1.8499	-1.1595	-0.8139	-1.3986	-1.0309	-0.7811	-1.8220	-1.3528	-0.9849	-0.7442
2.4	-1.9447	-1.6335	-1.3911	-1.5010	-1.8919	-1.2443	-0.9256	-1.4738	-1.1106	-0.8613	-1.8717	-1.4335	-1.0678	-0.8231
2.6	-1.9613	-1.6722	-1.4183	-1.5037	-1.9238	-1.3223	-1.0236	-1.5374	-1.1845	-0.9354	-1.9095	-1.5032	-1.1438	-0.8980
2.8	-1.9719	-1.7076	-1.4439	-1.5053	-1.9468	-1.3913	-1.1090	-1.5928	-1.2501	-1.0045	-1.9364	-1.5624	-1.2134	-0.9686
3.0	-1.9806	-1.7382	-1.4754	-1.5062	-1.9633	-1.4471	-1.2289	-1.6400	-1.3094	-1.0691	-1.9558	-1.6100	-1.2767	-1.0347
3.5	-1.9858	-1.7994	-1.5552	-1.3837	-1.9858	-1.6005	-1.4420	-1.7315	-1.4369	-1.2107	-1.9830	-1.7128	-1.4101	-1.1813
4.0	-1.9975	-1.8444	-1.6252	-1.4495	-1.9950	-1.7030	-1.6169	-1.7970	-1.5359	-1.3282	-1.9935	-1.7848	-1.5149	-1.3035
4.5	-1.9989	-1.8782	-1.6835	-1.5205	-1.9967	-1.7525	-1.7170	-1.8443	-1.6143	-1.4256	-1.9941	-1.8348	-1.5985	-1.4055
5.0	-1.9997	-1.9046	-1.7320	-1.5832	-1.9988	-1.8250	-1.7816	-1.8791	-1.6780	-1.5066	-1.9975	-1.8683	-1.6647	-1.4899
6.0	-1.9999	-1.9412	-1.8047	-1.6815	-1.9998	-1.8886	-1.8922	-1.9264	-1.7706	-1.6307	-1.9996	-1.9223	-1.7618	-1.6188
7.0	-2.0000	-1.9637	-1.8561	-1.7481	-2.0082	-1.9441	-1.9772	-1.9539	-1.8329	-1.7183	-1.9998	-1.9518	-1.8270	-1.7095
8.0	-2.0000	-1.9771	-1.8757	-1.8063	-2.0050	-1.9547	-1.9916	-1.9737	-1.8760	-1.7811	-2.0017	-1.9706	-1.8718	-1.7749
9.0	-2.0032	-1.9885	-1.9068	-1.8458	-2.0084	-2.0175	-2.0079	-1.9849	-1.9067	-1.8272	-2.0000	-1.9859	-1.9038	-1.8229
10.0	-2.0082	-1.9914	-1.9374	-1.8757	-2.0069	-2.0805	-2.0147	-1.9907	-1.9290	-1.8620	-2.0065	-1.9927	-1.9268	-1.8586
12.0	-1.9998	-2.0019	-1.9629	-1.9170	-2.0129	-1.9957	-1.9858	-1.9972	-1.9582	-1.9089	-2.0212	-2.0018	-1.9568	-1.9064
15.0	-1.9999	-2.0040	-1.9827	-1.9522	-2.0231	-1.9808	-2.0160	-2.0049	-1.9805	-1.9481	-2.0180	-1.9993	-1.9800	-1.9470

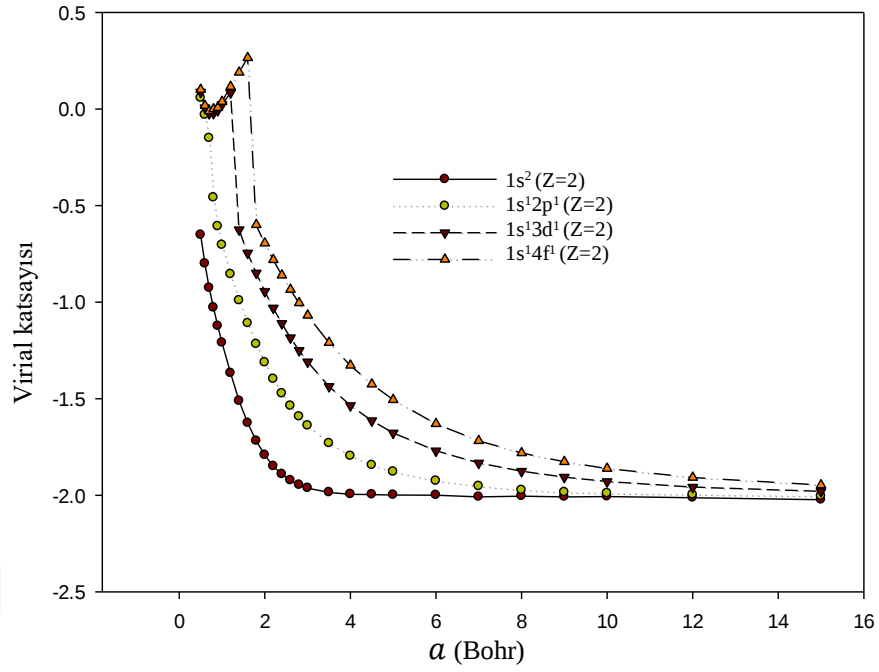
* Yarıçap a.u (Bohr) cinsinde



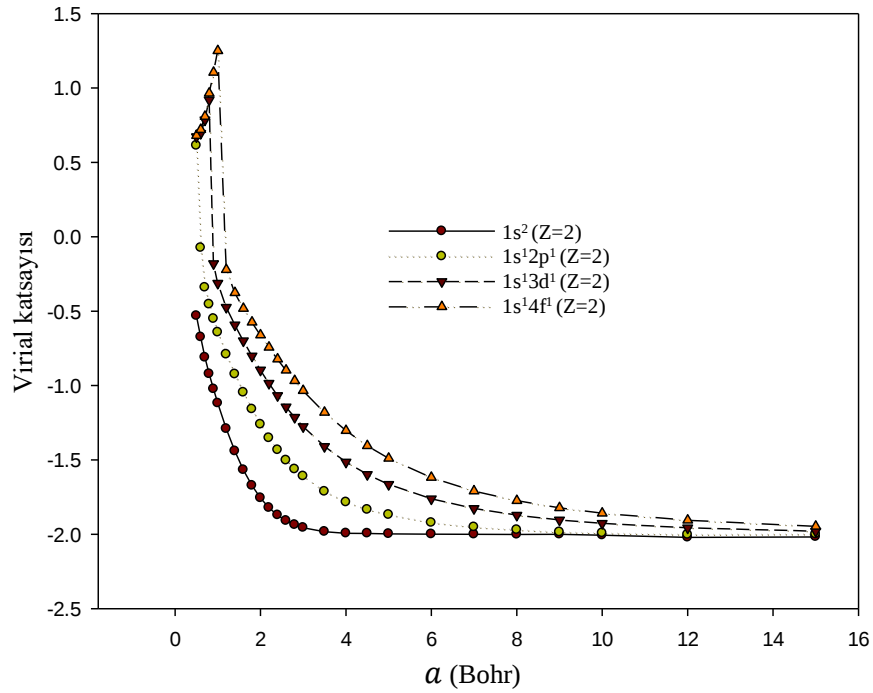
Şekil 5.38. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$ ve $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının virial katsayıları

Kuyu derinliğinin 5 Hartree olduğu iki elektronlu kuantum nokta yapıların $Z=2$ için $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$, $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının virial katsayılarının yarıçapa bağlı değişimi **Şekil 5.39.**'da verildi. Nokta yarıçapı büyüdükçe virial katsayıları atomik sistemlerde olduğu gibi küçülerek -2 değerine yaklaştı. **Şekil 5.38.**'deki grafiğe benzer şekilde $1s^12p^1$, $1s^13d^1$ ve $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının belli yarıçap değerlerinde kırılmalar görüldü. Ancak kırılmaların görüldüğü yarıçap değerleri birbirine daha yakın çıktı. Bu durum sınırlama potansiyelinin artmasıyla birlikte uyarılmış elektronun kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değerlerinin küçülüp $1s$ orbitalindeki elektronun kuyu içine girmeye başladığı kritik yarıçap değerine yaklaşmasıdır.

Kuyu derinliğinin 10 Hartree olduğu iki elektronlu kuantum nokta yapıların $Z=2$ için $1s^2$, $1s^12p^1$, $1s^13d^1$, $1s^14f^1$ konfigürasyonlarının virial katsayılarının yarıçapa bağlı değişimi **Şekil 5.40.**'ta verildi. Nokta yarıçapı büyüdükçe virial katsayıları küçülerek -2 değerine yaklaştı. Sınırlama potansiyeli **Şekil 5.38.** ve **Şekil 5.39.**'a göre büyük olmasından dolayı grafikte görülen kırılmalar daha küçük yarıçap değerine kaydı ve daha dar bir yarıçap aralığında gerçekleşti. Bu da virial katsayılarındaki kırılmaların görünürlüğünü azalttı.



Şekil 5.39. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^1 2p^1$, $1s^1 3d^1$ ve $1s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının virial katsayıları



Şekil 5.40. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^1 2p^1$, $1s^1 3d^1$ ve $1s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının virial katsayıları

Virial katsayılarının yarıçapa bağılı değişimleri (**Şekil 5.38.**, **Şekil 5.39.** ve **Şekil 5.40.**) incelendiğinde dikkat çeken bir nokta sınırlama potansiyelinin artmasıyla beraber virial katsayılarının yerel maksimuma ulaştığı andaki değer ile bir önceki değer arasındaki farkın birden artmasıdır. Bu durum sınırlama potansiyeli ne kadar büyükse uyarılmış elektronun kuyu içine girmesinin o kadar çabuk olmasından kaynaklanır.



6. SONUÇLAR VE ÖNERİLER

Bu tez çalışmasında sonlu ve sonsuz küresel simetrik potansiyel engeli ile sınırlandırılmış açık kabuğunda/kabuklarında en fazla iki elektron bulunan ve toplam elektron sayısı iki ile dört arasında değişen kuantum nokta yapıların elektronik özellikleri incelendi. Elde edilen sonuçların, sınırlama etkisinin çok zayıfladığı büyük yarıçap değerlerinde, serbest atomlar için hesaplanan değerlere yaklaşması ve literatürdeki benzer çalışmaların sonuçları (Bhattacharyya ve ark., 2013; Montgomery Jr ve Pupyshev, 2013; Rodriguez-Bautista ve ark., 2015; Sañu-Ginarte ve ark., 2019) ile örtüşmesi hesaplamaları doğrular niteliktedir. Ek olarak sonlu potansiyel engeli ile sınırlandırılmış kuantum nokta yapıların enerji değerlerinin ve virial katsayılarının yarıçapa bağlı değişimlerinin kritik yarıçap değerlerinde ani kırılmalar göstermesinin elektronların olasılık yoğunlukları ile kolayca açıklanabilmesi izlenen yöntemlerin başarısını gösterir. Öte yandan kullanılan algoritmanın ortalama enerjinin minimizasyonu üzerinden kurulması, ortalama enerjinin hesaplanmasında ulaşılan başarıya kinetik ve potansiyel enerjinin hesaplanmasında da ulaşılmasını engellemiştir. Bu yüzden bazı konfigürasyonların kinetik ve potansiyel enerjilerinin yarıçapa bağlı değişiminde, doğal olarak, ihmal edilemeyecek dalgalanmalar ortaya çıktı.

Kuantum nokta yapıların ortalama enerjilerinin hesaplanmasında karşılaşılan önemli bir sorun uzaysal orbitallerin dikleştirilmesinde ortaya çıktı. Gram-Schmidt dikleştirme yöntemi ile aynı yörünge açısız momentum kuantum sayısına sahip iki elektronun dikleştirilmesinde oldukça iyi sonuçlar elde edildi ancak dikleştirilecek bu orbitallerin sayısının artması, uzaysal orbitallerin parametrelerinin çok büyük ya da çok küçük değerler de alabilmesine neden oldu. Bu nedenle parametrelerin bilgisayarın hassasiyet sınırlarının dışında kalması yeterince iyi sonuçların elde edilmesini engelledi. Bu sorun baz fonksiyonlarının ve iterasyon sayısının arttırılmasıyla aşıldı. Karşılaşılan bir başka sorun ise konfigürasyonun birden fazla aynı yörünge açısız momentum kuantum sayısına sahip uzaysal orbitalleri içermesi durumunda, bu orbitallerin birbirinden ayırt edememesinden kaynaklandı. Bu yüzden kullanılan algoritma, sisteminin ortalama enerjisini minimize edebilmek için orbital enerjisi büyük olan orbitali, boş ya da az sayıda elektron içeren orbital olarak atama eğilimindedir. Bu hatanın önüne geçmek için aynı yörünge açısız momentum kuantum sayısına sahip olan orbitallerden daha büyük baş kuantum sayısına sahip olanın daha büyük enerjili olacağı kabulünden hareketle, bu orbitaller algoritma içinde enerjilerine göre tekrar sıralandı.

Çalışmada kullanılan yöntemler gelişime oldukça açıktır. Sunulan yöntemler ile açık kabuğunda/kabuklarında en fazla iki elektron bulunan sistemlerin enerji seviyeleri incelenebilir. Bu noktada karşılaşılan zorluk öngörülen enerji seviyelerinin hepsinin izinli olmamasıdır. Ancak aynı yöntemler geliştirilerek açık kabuğunda/kabuklarında daha fazla elektron içeren sistemlere de uygulanarak çalışmanın kapsamı genişletilebilir. Dahası KGA yöntemi ile belirlenen parametreler, HFR prosedüründe gerekli olan başlangıç parametreleri olarak kullanılabilir. Bu noktada çiftlenimli dalga fonksiyonlarının kullanılması önemli cebirsel kolaylıklar sağlayacaktır. Böylece bu parametreler optimize edilerek daha hassas sonuçlar elde edilebilir. Ayrıca bu “en iyilenmiş” dalga fonksiyonları kullanılarak ele alınan sistemin çoklu konfigürasyonu oluşturulabilir ve konfigürasyon etkileşim yöntemi sisteme kolaylıkla uygulanabilir. Böylece HFR yönteminin eksiklerinden biri olan elektron korelasyonu sağlanabilir.

Yapılan hesaplamalarda merkezinde safsızlık bulunan her bir konfigürasyon için virial katsayıları da hesaplandı. Bu virial katsayıların nokta yarıçapı arttıkça atomik sistemlere yaklaşacağı düşünülerek bir otokontrol mekanizması olarak kullanıldı. Ancak kullanılan algoritma sadece ortalama enerjinin minimizasyonu üzerinden kuruldu. Başka bir deyişle dalga fonksiyonlarının parametrelerinin belirlenmesinde virial teoremi dikkate alınmadı. Oysa yapılacak daha kapsamlı bir çalışmada hem virial ilişkisinin hem de enerji minimizasyonunun aynı anda sağlanmasına olanak sağlayacak şekilde dalga fonksiyonları ölçeklendirilerek algoritmanın işleyişine dahil edilebilir. Böylece çok daha iyi sonuçlar elde edilebilir. Dahası böyle bir yöntem izlenirse sistemin toplam potansiyel enerjisi, toplam kinetik enerjisi ve toplam elektronik potansiyel enerjisi daha hassas hesaplanabilir ve bu enerji değerlerinin yarıçapa bağlı grafiklerinde karşılaşılan dalgalanmalar azaltılabilir. Hem böylece elde edilen sonuçların “gerçek” sistemlere daha yakın olacağı aşikardır.

Sonuç olarak bu tez çalışmasında kullanılan/ geliştirilen yöntemlerin halihazırdaki yararlılıklarının yanı sıra çok daha karmaşık sistemlere uyarlanabilir ve çok daha “doğru” sonuçlar elde edilebilir.

KAYNAKLAR

- Acioli, P. H., 1997, Review of quantum Monte Carlo methods and their applications, *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 394 (2-3), 75-85.
- Al, E., Kasapoglu, E., Sakiroglu, S., Sari, H., Sökmen, I. ve Duque, C., 2020, Binding energies and optical absorption of donor impurities in spherical quantum dot under applied magnetic field, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 119, 114011.
- Alivisatos, A. P., 1996, Semiconductor clusters, nanocrystals, and quantum dots, *science*, 271 (5251), 933-937.
- Amini, M., Soleimani, M. ve Ehsani, M., 2017, Electronic and optical properties of GaAs/AlGaAs Fibonacci ordered multiple quantum well systems, *Superlattices and Microstructures*, 112, 680-687.
- Anderson, R., 1962, Solid State Electron. 5, 341, *Anderson, RL*, 197 (1).
- Aquino, N., Garza, J., Flores-Riveros, A., Rivas-Silva, J. ve Sen, K., 2006, Confined helium atom low-lying S states analyzed through correlated Hylleraas wave functions and the Kohn-Sham model, *The Journal of chemical physics*, 124 (5), 054311.
- Attila, S. ve Ostlund, N. S., 1982, Modern quantum chemistry, MacMillan Publ., p.
- Aydin, E. ve Yildirim, R., 2004, Optimizing the performance of single-mode laser diode system using genetic algorithm, *Optics and lasers in engineering*, 42 (1), 41-46.
- Badaeva, E., Feng, Y., Gamelin, D. R. ve Li, X., 2008, Investigation of pure and Co²⁺-doped ZnO quantum dot electronic structures using the density functional theory: choosing the right functional, *New Journal of Physics*, 10 (5), 055013.
- Bagalkot, V., Zhang, L., Levy-Nissenbaum, E., Jon, S., Kantoff, P. W., Langer, R. ve Farokhzad, O. C., 2007, Quantum dot- aptamer conjugates for synchronous cancer imaging, therapy, and sensing of drug delivery based on bi-fluorescence resonance energy transfer, *Nano letters*, 7 (10), 3065-3070.
- Band, Y. B. ve Avishai, Y., 2013, Quantum mechanics with applications to nanotechnology and information science, Academic Press, p.
- Banyai, L. ve Koch, S. W., 1993, Semiconductor Quantum Dots World Scientific Series on Atomic, Molecular and Optical Physics, vol. 2, World Scientific, Singapore.
- Bardeen, J. ve Brattain, W. H., 1948, The transistor, a semi-conductor triode, *Physical Review*, 74 (2), 230.
- Beacham, T. D. ve Murray, C. B., 1993, Acceleration of Maturity of Pink Salmon (*Oncorhynchus-Gorbuscha*) Using Photoperiod Control, *Aquaculture*, 109 (3-4), 315-325.

- BenDaniel, D. ve Duke, C., 1966, Space-charge effects on electron tunneling, *Physical Review*, 152 (2), 683.
- Bera, D., Qian, L., Tseng, T.-K. ve Holloway, P. H., 2010, Quantum dots and their multimodal applications: a review, *Materials*, 3 (4), 2260-2345.
- Bhattacharyya, S., Saha, J., Mukherjee, P. ve Mukherjee, T., 2013, Precise estimation of the energy levels of two-electron atoms under spherical confinement, *Physica Scripta*, 87 (6), 065305.
- Biju, V., Itoh, T. ve Ishikawa, M., 2010, Delivering quantum dots to cells: bioconjugated quantum dots for targeted and nonspecific extracellular and intracellular imaging, *Chemical Society Reviews*, 39 (8), 3031-3056.
- Bimberg, D., Grundmann, M. ve Ledentsov, N. N., 1999, Quantum dot heterostructures, John Wiley & Sons, p.
- Bolton, F., 1996, Fixed-phase quantum Monte Carlo method applied to interacting electrons in a quantum dot, *Physical Review B*, 54 (7), 4780.
- Boz, F. K., Nisanci, B., Aktas, S. ve Okan, S. E., 2016, Energy levels of GaAs/Al_xGa_{1-x}As/AlAs spherical quantum dot with an impurity, *Applied Surface Science*, 387, 76-81.
- Bruchez, M., Moronne, M., Gin, P., Weiss, S. ve Alivisatos, A. P., 1998, Semiconductor nanocrystals as fluorescent biological labels, *science*, 281 (5385), 2013-2016.
- Brus, L. E., 1984, Electron–electron and electron-hole interactions in small semiconductor crystallites: The size dependence of the lowest excited electronic state, *The Journal of chemical physics*, 80 (9), 4403-4409.
- Cakir, B., Yakar, Y. ve Özmen, A., 2011, Linear and nonlinear refractive index changes in spherical quantum dot, *Progress In Electromagnetics Research M*, 21, 77-92.
- Castano-Yepes, J. D. ve Amor-Quiroz, D., 2020, Super-statistical description of thermomagnetic properties of a system of 2D GaAs quantum dots with gaussian confinement and Rashba spin–orbit interaction, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 548, 123871.
- Chan, W. C. ve Nie, S., 1998, Quantum dot bioconjugates for ultrasensitive nonisotopic detection, *science*, 281 (5385), 2016-2018.
- Cho, A. Y. ve Arthur, J., 1975, Molecular beam epitaxy, *Progress in solid state chemistry*, 10, 157-191.
- Choi, B. H., Hwang, S. W., Kim, I. G., Shin, H. C., Kim, Y. ve Kim, E. K., 1998, Fabrication and room-temperature characterization of a silicon self-assembled quantum-dot transistor, *Applied Physics Letters*, 73 (21), 3129-3131.

- Cibert, J., Petroff, P., Dolan, G., Pearton, S., Gossard, A. ve English, J., 1986, Optically detected carrier confinement to one and zero dimension in GaAs quantum well wires and boxes, *Applied Physics Letters*, 49 (19), 1275-1277.
- Coulson, C. ve Bell, R., 1945, Kinetic energy, potential energy and force in molecule formation, *Transactions of the Faraday Society*, 41, 141-149.
- Cowan, R. D., 1981, The theory of atomic structure and spectra, 3, Univ of California Press, p.
- Çakır, B., Sezer, M. Ö., Yakar, Y., Özmen, A. ve Yüksel, H., 2009, Hidrojen Tipi Kuantum Nokta Yapının Taban Durumunun Kuantum Genetik Algoritma Yöntemiyle İncelenmesi, *Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fen Dergisi*, 2 (33), 45-50.
- Çakır, B., Yakar, Y., Özmen, A., Sezer, M. Ö. ve Şahin, M., 2010, Linear and nonlinear optical absorption coefficients and binding energy of a spherical quantum dot, *Superlattices and Microstructures*, 47 (4), 556-566.
- Çakır, B., Yakar, Y. ve Özmen, A., 2012, Refractive index changes and absorption coefficients in a spherical quantum dot with parabolic potential, *Journal of Luminescence*, 132 (10), 2659-2664.
- Çakır, B., Yakar, Y. ve Özmen, A., 2013, Calculation of oscillator strength and the effects of electric field on energy states, static and dynamic polarizabilities of the confined hydrogen atom, *Optics communications*, 311, 222-228.
- Çakır, B., Yakar, Y. ve Özmen, A., 2015, Linear and nonlinear optical absorption coefficients of two-electron spherical quantum dot with parabolic potential, *Physica B: Condensed Matter*, 458, 138-143.
- Çakır, B., Atav, Ü., Yakar, Y. ve Özmen, A., 2016a, Calculation of Zeeman splitting and Zeeman transition energies of spherical quantum dot in uniform magnetic field, *Chemical Physics*, 475, 61-68.
- Çakır, B., Özmen, A. ve Yakar, Y., 2016b, Computation of hyperfine energies of hydrogen, deuterium and tritium quantum dots, *Physica B: Condensed Matter*, 481, 32-37.
- Çakır, B., Yakar, Y. ve Özmen, A., 2017a, Investigation of magnetic field effects on binding energies in spherical quantum dot with finite confinement potential, *Chemical Physics Letters*, 684, 250-256.
- Çakır, B., Yakar, Y. ve Özmen, A., 2017b, Linear and nonlinear absorption coefficients of spherical quantum dot inside external magnetic field, *Physica B: Condensed Matter*, 510, 86-91.
- Çakır, B., Yakar, Y. ve Özmen, A., 2020, Calculation of electric field gradient in spherical quantum dots, *Philosophical Magazine*, 100 (2), 248-266.

- Çakir, B. r., Özmen, A., Atav, Ü., Yüksel, H. n. ve Yakar, Y., 2007, Investigation of electronic structure of a quantum dot using slater-type orbitals and quantum genetic algorithm, *International Journal of Modern Physics C*, 18 (01), 61-72.
- Çakir, B. r., Özmen, A., Atav, Ü., Yüksel, H. n. ve Yakar, Y., 2008, Calculation of electronic structure of a spherical quantum dot using a combination of quantum genetic algorithm and Hartree–Fock–Roothaan method, *International Journal of Modern Physics C*, 19 (04), 599-609.
- Ekimov, A. ve Onushchenko, A., 1982, Quantum size effect in the optical-spectra of semiconductor micro-crystals, *Soviet Physics Semiconductors-USSR*, 16 (7), 775-778.
- El Ghazi, H. ve Jorio, A., 2014, Relaxation time and impurity effects on linear and nonlinear refractive index changes in (In, Ga) N–GaN spherical QD, *Physica B: Condensed Matter*, 450, 21-24.
- El Ghazi, H., Jorio, A. ve Zorkani, I., 2014a, Pressure-dependent of linear and nonlinear optical properties of (In, Ga) N/GaN spherical QD, *Superlattices and Microstructures*, 71, 211-216.
- El Ghazi, H., Jorio, A. ve Zorkani, I., 2014b, Linear and nonlinear intra-conduction band optical absorption in (In, Ga) N/GaN spherical QD under hydrostatic pressure, *Optics communications*, 331, 73-76.
- El Ghazi, H. ve Peter, A. J., 2015, Threshold pump intensity effect on the refractive index changes in InGaN SQD: Internal constitution and size effects, *Physica B: Condensed Matter*, 462, 30-33.
- Errol, G. L., 2011, Computational Chemistry: Introduction to the theory and applications of molecular and quantum mechanics, *Springer, New York*, 43, 44-45.
- Esaki, L. ve Tsu, R., 1970, Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors, *IBM Journal of Research and Development*, 14 (1), 61-65.
- Faraday, M., 1833, XX. Experimental researches in electricity.—fourth series, *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* (123), 507-522.
- Fernández, F. M. ve Castro, E. A., 1981, The virial theorem for systems subjected to sectionally defined potentials, *The Journal of chemical physics*, 75 (6), 2908-2913.
- Fernández, X. L., 2004, Theoretical study of the basicity and the redox properties of heteropolyanions, *Universitat Rovira i Virgili*.
- Flores-Riveros, A., Aquino, N. ve Montgomery Jr, H., 2010, Spherically compressed helium atom described by perturbative and variational methods, *Physics Letters A*, 374 (10), 1246-1252.

- Fock, V., 1930a, Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems, *Zeitschrift für Physik*, 61 (1-2), 126-148.
- Fock, V., 1930b, „Selfconsistent field “mit Austausch für Natrium, *Zeitschrift für Physik*, 62 (11), 795-805.
- Frasco, M. F. ve Chaniotakis, N., 2009, Semiconductor quantum dots in chemical sensors and biosensors, *Sensors*, 9 (9), 7266-7286.
- Fujito, M., Natori, A. ve Yasunaga, H., 1996, Many-electron ground states in anisotropic parabolic quantum dots, *Physical Review B*, 53 (15), 9952.
- Gammon, D., 2000, Semiconductor physics - Electrons in artificial atoms, *Nature*, 405 (6789), 899-900.
- Gheshlaghi, N., Pisheh, H. S. ve Ünlü, H., 2017, Composition and strain effects in type i and type ii heterostructure ZnSe/Cd (Zn) S and ZnSe/Cd_{1-x}Zn_xS core/shell quantum dots, *Superlattices and Microstructures*, 111, 156-165.
- Hall, R. N., Fenner, G. E., Kingsley, J., Soltys, T. ve Carlson, R., 1962, Coherent light emission from GaAs junctions, *Physical review letters*, 9 (9), 366.
- Hansen, W., Horst, M., Kotthaus, J., Merkt, U., Sikorski, C. ve Ploog, K., 1987, Intersubband resonance in quasi one-dimensional inversion channels, *Physical review letters*, 58 (24), 2586.
- Hanson, R., Kouwenhoven, L. P., Petta, J. R., Tarucha, S. ve Vandersypen, L. M., 2007, Spins in few-electron quantum dots, *Reviews of modern physics*, 79 (4), 1217.
- Hartree, D. R., 1928, The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and methods, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 89-110.
- Hoggan, P. E., 2018, Novel Electronic Structure Theory: General Innovations and Strongly Correlated Systems, Academic Press, p.
- Hohenberg, P. ve Kohn, W., 1965, Rev. 136, 864 (1964); W, *J. Phys. Rev.*, 140, 1133.
- Holland, J., 1975, Adaptation in natural and artificial systems, univ. of mich. press, *Ann Arbor*.
- Huang, J. ve Chen, G., 2018, Effect of the charges of impurity on the absorption of quantum dot with magnetic field, *International Journal of Modern Physics B*, 32 (16), 1850202.
- Jang, E., Kim, S. ve Koh, W.-G., 2012, Microfluidic bioassay system based on microarrays of hydrogel sensing elements entrapping quantum dot–enzyme conjugates, *Biosensors and Bioelectronics*, 31 (1), 529-536.

- Judson, R. S., Jaeger, E. P. ve Treasurywala, A. M., 1994, A Genetic Algorithm-Based Method for Docking Flexible Molecules, *Journal of Molecular Structure-Theochem*, 114, 191-206.
- Kariuki, B. M., Serrano-Gonzalez, H., Johnston, R. L. ve Harris, K. D. M., 1997, The application of a genetic algorithm for solving crystal structures from powder diffraction data, *Chemical Physics Letters*, 280 (3-4), 189-195.
- Kasapoglu, E., Duque, C., Mora-Ramos, M., Restrepo, R., Ungan, F., Yesilgul, U., Sari, H. ve Sökmen, I., 2015, Combined effects of intense laser field, electric and magnetic fields on the nonlinear optical properties of the step-like quantum well, *Materials Chemistry and Physics*, 154, 170-175.
- Kes, H., Bilekkaya, A., Aktas, S. ve Okan, S., 2017, Binding energy of a hydrogenic impurity in a coaxial quantum wire with an insulator layer, *Superlattices and Microstructures*, 111, 966-975.
- Kim, E. S., Oh, C., Lee, S., Lee, B. ve Yun, I., 2001, Modeling and optimization of process parameters for GaAs/AlGaAs multiple quantum well avalanche photodiodes using genetic algorithms, *Microelectronics Journal*, 32 (7), 563-567.
- Kim, T.-H., Cho, K.-S., Lee, E. K., Lee, S. J., Chae, J., Kim, J. W., Kim, D. H., Kwon, J.-Y., Amaratunga, G. ve Lee, S. Y., 2011, Full-colour quantum dot displays fabricated by transfer printing, *Nature photonics*, 5 (3), 176-182.
- Kouwenhoven, L. ve Marcus, C., 1998, Quantum dots, *Physics World*, 11 (6), 35.
- Krebs, S., 1999, A review on the derivation of the spin-Restricted Hartree—Fock (RHF) Self-Consistent Field (SCF) equations for open-shell systems. Description of different methods to handle the off-diagonal Lagrangian multipliers coupling closed and open shells, *Computer Physics Communications*, 116 (2-3), 137-277.
- Kudla, A., 2004, Application of the genetic algorithms in spectroscopic ellipsometry, *Thin Solid Films*, 455, 804-808.
- Kumar, A., 2018, Fundamentals of quantum mechanics, Cambridge University Press, p.
- Levine, I. N., Busch, D. H. ve Shull, H., 2009, Quantum chemistry, Pearson Prentice Hall Upper Saddle River, NJ, p.
- Li, X.-C., Ye, C.-B., Gao, J. ve Wang, B., 2020, Optical absorption in asymmetrical Gaussian potential quantum dot under the application of an electric field, *Chinese Physics B*, 29 (8), 087302.
- Lindgren, I., 2014, Development of many-body perturbation theory: How to combine with quantum electrodynamics, *International Journal of Quantum Chemistry*, 114 (18), 1176-1182.
- Liu, H. C., Cheng, H. H., Tirunagaru, V., Sofer, L. ve Burnside, J., 2001, A strategy to identify positional candidate genes conferring Marek's disease resistance by

- integrating DNA microarrays and genetic mapping, *Animal Genetics*, 32 (6), 351-359.
- Lott, J., Ledentsov, N., Ustinov, V., Egorov, A. Y., Zhukov, A., Kop'ev, P., Alferov, Z. I. ve Bimberg, D., 1997, Vertical cavity lasers based on vertically coupled quantum dots, *Electronics Letters*, 33 (13), 1150-1151.
- Löwdin, P.-O., 1959, Scaling problem, virial theorem, and connected relations in quantum mechanics, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 3 (1-6), 46-66.
- Ludeña, E. V., 1978, SCF Hartree–Fock calculations of ground state wavefunctions of compressed atoms, *The Journal of chemical physics*, 69 (4), 1770-1775.
- Makhlouf, D., Choubani, M., Saidi, F. ve Maaref, H., 2018, Enhancement of transition lifetime, linear and nonlinear optical properties in laterally coupled lens-shaped quantum dots for Tera-Hertz range, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 103, 87-92.
- Maksym, P. ve Chakraborty, T., 1990, Quantum dots in a magnetic field: Role of electron-electron interactions, *Physical review letters*, 65 (1), 108.
- Martínez-Flores, C. ve Cabrera-Trujillo, R., 2020, High pressure effects on the excitation spectra and dipole properties of Li, Be⁺, and B²⁺ atoms under confinement, *Matter and Radiation at Extremes*, 5 (2), 024401.
- McKinney, B. ve Watson, D., 2000, Semiclassical perturbation theory for two electrons in a D-dimensional quantum dot, *Physical Review B*, 61 (7), 4958.
- Mirjalili, S., Dong, J. S., Sadiq, A. S. ve Faris, H., 2020, Genetic algorithm: Theory, literature review, and application in image reconstruction, *Nature-inspired optimizers*, 69-85.
- Mitroy, J., 1999, A Hartree–Fock Program for Atomic Structure Calculations, *Australian journal of physics*, 52 (6), 973-997.
- Montgomery Jr, H. ve Pupyshev, V. I., 2013, Confined helium: excited singlet and triplet states, *Physics Letters A*, 377 (40), 2880-2883.
- Naifar, A., Zeiri, N., Nasrallah, S. A.-B. ve Said, M., 2020, Linear and nonlinear optical properties of CdSe/ZnTe core/shell spherical quantum dots embedded in different dielectric matrices, *Photonics and Nanostructures-Fundamentals and Applications*, 40, 100789.
- Nanni, L., 2015, The hydrogen atom: A review on the birth of modern quantum mechanics, *arXiv preprint arXiv:1501.05894*.
- Nasa, S. ve Purohit, S., 2020, Linear and third order nonlinear optical properties of GaAs quantum dot in terahertz region, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 118, 113913.

- Niculescu, E., Stan, C., Cristea, M. ve Truscă, C., 2017, Magnetic-field dependence of the impurity states in a dome-shaped quantum dot, *Chemical Physics*, 493, 32-41.
- Nomoto, K., Ugajin, R., Suzuki, T., Taira, K. ve Hase, I., 1998, Quantum-dot based optoelectronic device, *IEEE Transactions on Electronics*, E81c (1), 8-15.
- Öksel, C., Yıldız, K., Yağlı, H. ve Ali, K., 2018, Kuantum Noktalı Güneş Hücreleri, *Nevşehir Bilim ve Teknoloji Dergisi*, 7 (2), 174-182.
- Özmen, A., Yakar, Y., Çakır, B. ve Atav, Ü., 2009, Computation of the oscillator strength and absorption coefficients for the intersubband transitions of the spherical quantum dot, *Optics communications*, 282 (19), 3999-4004.
- Özmen, A., Çakır, B. ve Yakar, Y., 2013, Electronic structure and relativistic terms of one-electron spherical quantum dot, *Journal of Luminescence*, 137, 259-268.
- Pal, S., Ghosh, M. ve Duque, C., 2019, Impurity related optical properties in tuned quantum dot/ring systems, *Philosophical Magazine*, 99 (19), 2457-2486.
- Peter, A. J., Karthikeyan, N. ve Lee, C. W., 2020, Effects of External Magnetic Fields on Optical Properties of an Oxide Quantum Dot Using the Smorodinsky–Winternitz Potential, *Journal of Electronic Materials*, 49 (3), 2257-2264.
- Petroff, P., Gossard, A., Logan, R. ve Wiegmann, W., 1982, Toward quantum well wires: Fabrication and optical properties, *Applied Physics Letters*, 41 (7), 635-638.
- Reed, M., Bate, R., Bradshaw, K., Duncan, W., Frensley, W., Lee, J. ve Shih, H., 1986, Spatial quantization in GaAs–AlGaAs multiple quantum dots, *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics Processing and Phenomena*, 4 (1), 358-360.
- Reed, M. A., 1993, Quantum dots, *Scientific American*, 268 (1), 118-123.
- Reimann, S. M. ve Manninen, M., 2002, Electronic structure of quantum dots, *Reviews of modern physics*, 74 (4), 1283.
- Rodriguez-Bautista, M., Díaz-García, C., Navarrete-López, A. M., Vargas, R. ve Garza, J., 2015, Roothaan's approach to solve the Hartree-Fock equations for atoms confined by soft walls: Basis set with correct asymptotic behavior, *The Journal of chemical physics*, 143 (3), 034103.
- Rodríguez-Magdaleno, K., Pérez-Álvarez, R. ve Martínez-Orozco, J., 2018, Intraminiband absorption coefficient in GaAs/Al_xGa_{1-x}As core/shell spherical quantum dot, *Journal of Alloys and Compounds*, 736, 211-215.
- Roothaan, C., 1960, Self-consistent field theory for open shells of electronic systems, *Reviews of modern physics*, 32 (2), 179.
- Röthlisberger, U., 2015, Introduction to electronic structure methods, *EPFL, Lausanne*.

- Sadeghi, E., 2009, Impurity binding energy of excited states in spherical quantum dot, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 41 (7), 1319-1322.
- Safarpour, G., Izadi, M., Novzari, M., Niknam, E. ve Golshan, M., 2014, Simultaneous Effects of External Electric Field and Conduction Band Nonparabolicity on Optical Properties of a GaAs Quantum Dot Embedded at the Center of a GaAlAs Nano-Wire, *Communications in Theoretical Physics*, 61 (6), 765.
- Sahin, O., Sayan, P. ve Bulutcu, A. N., 2000, Application of genetic algorithm for determination of mass transfer coefficients, *Journal of Crystal Growth*, 216 (1-4), 475-482.
- Sañu-Ginarte, A., Ferrer-Galindo, L., Rosas, R., Corella-Madueño, A., Betancourt-Riera, R., Ferrer-Moreno, L. ve Riera, R., 2018, Confined beryllium atom electronic structure and physicochemical properties, *Journal of Physics Communications*, 2 (1), 015001.
- Sañu-Ginarte, A., Guillén-Romero, E., Ferrer-Galindo, L., Ferrer-Moreno, L., Betancourt-Riera, R. ve Riera, R., 2019, New approach to obtain the analytical expression of the energy functional in free or confined atoms, *Results in Physics*, 13, 102261.
- Sarıkaya, M. D., Çakır, B., Özmen, A. ve Yakar, Y., 2017, Tek Elektronlu Kuantum Nokta Yapılarda Manyetik Alan Etkisinin Pertürbasyon Yöntemiyle İncelenmesi, *Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fen Dergisi*, 43 (1), 75-90.
- Sarsa, A. ve Le Sech, C., 2011, Variational Monte Carlo method with dirichlet boundary conditions: application to the study of confined systems by impenetrable surfaces with different symmetries, *Journal of chemical theory and computation*, 7 (9), 2786-2794.
- Schermann, J.-P., 2007, Spectroscopy and modeling of biomolecular building blocks, Elsevier, p.
- Schrieffer, J., 1957, Semiconductor surface physics, *Ed.) RH Kingston (Uni)*, 55.
- Shao, S., Guo, K.-X., Zhang, Z.-H., Li, N. ve Peng, C., 2010, Studies on the third-harmonic generations in cylindrical quantum dots with an applied electric field, *Superlattices and Microstructures*, 48 (6), 541-549.
- Shi, L., Hernandez, B. ve Selke, M., 2006, Singlet oxygen generation from water-soluble quantum dot– organic dye nanocomposites, *Journal of the American Chemical Society*, 128 (19), 6278-6279.
- Sim, J. S., Ryu, S. W., Chung, Y. D., Kim, S. B. ve Kim, J., 2004, Fabrication of a four-channel monolithic integrated laser array with asymmetric sampled grating lasers, *Semiconductor Science and Technology*, 19 (5), 561-564.
- Slater, J. C., 1930, Note on Hartree's method, *Physical Review*, 35 (2), 210.

- Smith, A. M., Duan, H., Rhyner, M. N., Ruan, G. ve Nie, S., 2006, A systematic examination of surface coatings on the optical and chemical properties of semiconductor quantum dots, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 8 (33), 3895-3903.
- Stevanović, L., Filipović, N. ve Pavlović, V., 2019, Effect of magnetic field on absorption coefficients, refractive index changes and group index of spherical quantum dot with hydrogenic impurity, *Optical Materials*, 91, 62-69.
- Stojanović, D. ve Kostić, R., 2011, Binding energy of the hydrogenic impurity in CdTe/ZnTe spherical quantum dot, *Acta Physica Polonica A*, 120 (2), 234-237.
- Temkin, H., Dolan, G., Panish, M. ve Chu, S., 1987, Low-temperature photoluminescence from InGaAs/InP quantum wires and boxes, *Applied Physics Letters*, 50 (7), 413-415.
- Türker, A., Çakır, B., Özmen, A. ve Yakar, Y., 2016, İki Elektronlu Kuantum Nokta Yapılarda Elektrik Alan Etkisinin Pertürbasyon Yöntemiyle İncelenmesi, *Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fen Dergisi*, 42 (1), 64-76.
- Varga, K., Navratil, P., Usukura, J. ve Suzuki, Y., 2001, Stochastic variational approach to few-electron artificial atoms, *Physical Review B*, 63 (20), 205308.
- Wang, X.-Q., Chen, Y.-J. ve Xiao, J.-L., 2019, Effects of temperature and magnetic field on the ground state binding energy of the strong coupling magneto-polaron in an RbCl asymmetrical semi-exponential quantum well, *International Journal of Modern Physics B*, 33 (21), 1950239.
- Wanschura, T., Coley, D. A. ve Migowsky, S., 1996, Ground-state energy of the $\pm j$ spin glass with dimension greater than three, *Solid State Communications*, 99 (4), 247-248.
- Wilson, A. H., 1931, The theory of electronic semi-conductors, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 133 (822), 458-491.
- Wilson, C., Montgomery Jr, H., Sen, K. ve Thompson, D., 2010, Electron correlation energy in confined two-electron systems, *Physics Letters A*, 374 (43), 4415-4419.
- Wu, J., Mangham, S. C., Reddy, V., Manasreh, M. ve Weaver, B., 2012, Surface plasmon enhanced intermediate band based quantum dots solar cell, *Solar energy materials and solar cells*, 102, 44-49.
- Yakar, Y., Cakir, B. ve Özmen, A., 2010a, Linear and nonlinear optical properties in spherical quantum dots, *Communications in Theoretical Physics*, 53 (6), 1185.
- Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2010b, Calculation of linear and nonlinear optical absorption coefficients of a spherical quantum dot with parabolic potential, *Optics communications*, 283 (9), 1795-1800.

- Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2011, Computation of ionization and various excited state energies of helium and helium-like quantum dots, *International Journal of Quantum Chemistry*, 111 (15), 4139-4149.
- Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2013a, Off-center hydrogenic impurity in spherical quantum dot with parabolic potential, *Superlattices and Microstructures*, 60, 389-397.
- Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2013b, Computation of relativistic terms in a spherical quantum dot, *Journal of Luminescence*, 134, 778-783.
- Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2015a, Linear and nonlinear absorption coefficients of spherical two-electron quantum dot, *Computer Physics Communications*, 188, 88-93.
- Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2015b, Calculation of hyperfine interaction in spherical quantum dot, *Superlattices and Microstructures*, 86, 20-28.
- Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2015c, Electronic structure of two-electron quantum dot with parabolic potential, *Philosophical Magazine*, 95 (3), 311-325.
- Yakar, Y., Özmen, A. ve Çakır, B., 2016, Computation of energy states of hydrogenic quantum dot with two-electrons, *AIP Conference Proceedings*, 110001.
- Yakar, Y., Çakır, B., Yilmazer, F. ve Özmen, A., 2017, Zeeman transitions in spherical quantum dot, *AIP Conference Proceedings*, 030018.
- Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2018a, Magnetic field effects on oscillator strength, dipole polarizability and refractive index changes in spherical quantum dot, *Chemical Physics Letters*, 708, 138-145.
- Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2018b, Dipole and quadrupole polarizabilities and oscillator strengths of spherical quantum dot, *Chemical Physics*, 513, 213-220.
- Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2020, Polarizability and electric field gradient of two-electron quantum dots, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 137, 109214.
- Yakar, Y., Çakır, B., Demir, C. ve Özmen, A., 2021, Energy states, oscillator strengths and polarizabilities of many electron atoms confined by an impenetrable spherical cavity, *International Journal of Quantum Chemistry*, 121 (13), e26658.
- Yeniay, Ö., 2001, An overview of genetic algorithms, *Anadolu Üniversitesi Bilim ve Teknoloji Dergisi: A-Uygulamalı Bilimler ve Mühendislik*, 2 (1), 37-49.
- Yilmaz, S. ve Kirak, M., 2018, An investigation on the effect of impurity position on the binding energy of quantum box under electric field with pressure and temperature, *International Journal of Modern Physics B*, 32 (13), 1850154.

- Yilmazer, F., Yakar, Y., Cakir, B. ve Ozmen, A., 2017, Electronic structure and binding energy of spherical quantum dot, *Aksaray University Journal of Science and Engineering*, 1 (1), 41-50.
- Young, D. C., 2001, A practical guide for applying techniques to real-world problems, *Computational Chemistry*, New York, 9, 390.
- Yusa, G. ve Sakaki, H., 1999, InAs quantum dot field effect transistors, *Superlattices and Microstructures*, 25 (1-2), 247-250.
- Zacharias, C. R., Lemes, M. R. ve Pino, A. D., 1998, Combining genetic algorithm and simulated annealing: a molecular geometry optimization study, *Theochem-Journal of Molecular Structure*, 430, 29-39.
- 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 x As, *Physical Review B*, 41 (9), 6001.
- Zhu, J.-L. ve Chen, X., 1994, Spectrum and binding of an off-center donor in a spherical quantum dot, *Physical Review B*, 50 (7), 4497.
- Zhu, L., Ang, S. ve Liu, W.-T., 2004, Quantum dots as a novel immunofluorescent detection system for *Cryptosporidium parvum* and *Giardia lamblia*, *Applied and environmental microbiology*, 70 (1), 597-598.

EKLER

EK-1 Elektronun yörünge açısal ve spin açısal momentumunun toplanması

M_J , m_l ve m_s ve sırasıyla toplam, yörünge ve spin açısal momentum kuantum sayısı olmak üzere açısal momentum kuantum sayıları ile temsil edilen bir özfonksiyona toplam açısal momentum operatörü $\hat{J}_z$ etki ederse

$$\begin{aligned}\hat{J}_z |lsJM_J\rangle &= (\hat{L}_z + \hat{S}_z) \sum C(lsm_l m_s JM_J) |lm_l\rangle |sm_s\rangle \\ &= \sum C(lsm_l m_s JM_J) \hat{L}_z |lm_l\rangle |sm_s\rangle \\ &\quad + \sum C(lsm_l m_s JM_J) \hat{S}_z |lm_l\rangle |sm_s\rangle\end{aligned}\quad (E.1)$$

denklemini elde edilir. Diğer taraftan

$$\hat{J}_z |lsJM_J\rangle = M_J |lsJM_J\rangle \quad (E.2)$$

$$\hat{L}_z |lsJM\rangle = m_l |lm_l\rangle \quad (E.3)$$

$$\hat{S}_z |lsJM\rangle = m_s |sm_s\rangle \quad (E.4)$$

ifadeleri Denk. (E.1)'de yerine yazılırsa

$$\begin{aligned}M_J \hbar |lsJM_J\rangle &= \sum C(lsm_l m_s JM_J) m_l \hbar |lm_l\rangle |sm_s\rangle \\ &\quad + \sum C(lsm_l m_s JM_J) m_s \hbar |lm_l\rangle |sm_s\rangle\end{aligned}\quad (E.5)$$

ifadesi elde edilir. Denk. (3.24) kullanılarak Denk. (E.5)

$$\sum C(lsm_l m_s JM_J) (m_l + m_s - M_J) |lm_l\rangle |sm_s\rangle = 0 \quad (E.6)$$

şeklinde yeniden yazılabilir. Denk. (E.6)'da verilen ifadenin geçerli olabilmesi için

$$m_l + m_s = M_J \quad (E.7)$$

koşulunu sağlaması gerekir.

EK-2 Çiftlenimli dalga fonksiyonları

Elektronik konfigürasyonu $1s^2 2s^1 2p^1$ olan dört elektronlu bir kuantum nokta yapı örnek olarak ele alınsın. Açık kabuktaki elektronlar özdeş olmadığı için Pauli dışarlama ilkesi nedeniyle açısal momentum değerlerinde bir sınırlama olmaz. Böyle bir sistemin terim sembolleri 1P ve 3P olacaktır. Eğer spin-yörünge etkileşimi dikkate alınırsa atomik terim J 'nin farklı değerlerine sahip olan level enerjilerine ayrılır. Bu durumda 1P teriminde J sadece 1 değerini alabilir. 3P teriminde ise J 0, 1 ve 2 değerlerini alabilir. Son olarak sistem bir dış manyetik alana maruz bırakılırsa her bir level enerji seviyesi $2S + 1$ state enerji seviyesine ayrılır. Bu sayede 12 ayrı state enerji seviyesi ortaya çıkar ve konfigürasyondaki dejenerelik ortadan kalkar. Buradaki her bir state enerji seviyesine bir dalga fonksiyonu karşılık gelir. Dalga fonksiyonları açık kabuklar kullanılarak $s_{m_l}^{m_s} p_{m_l}^{m_s}$ ile etiketlenirse bu fonksiyonlar Slater determinantı formunda

$$s_0^{\frac{1}{2}} p_1^{\frac{1}{2}} = \left| \psi_{1,0,0,\frac{1}{2}}(1) \psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}(2) \psi_{2,0,0,\frac{1}{2}}(3) \psi_{2,1,1,\frac{1}{2}}(4) \right|$$

$$s_0^{\frac{1}{2}} d_1^{\frac{1}{2}} = \left| \psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}(2) \psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}(2) \psi_{2,0,0,\frac{1}{2}}(3) \psi_{2,1,1,-\frac{1}{2}}(4) \right|$$

$$s_0^{\frac{1}{2}} p_1^{-\frac{1}{2}} = \left| \psi_{1,0,0,\frac{1}{2}}(1) \psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}(2) \psi_{2,0,0,\frac{1}{2}}(3) \psi_{2,1,1,-\frac{1}{2}}(4) \right|$$

$$s_0^{\frac{1}{2}} p_0^{\frac{1}{2}} = \left| \psi_{1,0,0,\frac{1}{2}}(1) \psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}(2) \psi_{2,0,0,\frac{1}{2}}(3) \psi_{2,1,0,\frac{1}{2}}(4) \right|$$

$$s_0^{\frac{1}{2}} p_0^{-\frac{1}{2}} = \left| \psi_{1,0,0,\frac{1}{2}}(1) \psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}(2) \psi_{2,0,0,\frac{1}{2}}(3) \psi_{2,1,0,-\frac{1}{2}}(4) \right|$$

$$s_0^{\frac{1}{2}} p_{-1}^{\frac{1}{2}} = \left| \psi_{1,0,0,\frac{1}{2}}(1) \psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}(2) \psi_{2,0,0,\frac{1}{2}}(3) \psi_{2,1,-1,\frac{1}{2}}(4) \right|$$

$$s_0^{\frac{1}{2}} p_{-1}^{-\frac{1}{2}} = \left| \psi_{1,0,0,\frac{1}{2}}(1) \psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}(2) \psi_{2,0,0,\frac{1}{2}}(3) \psi_{2,1,-1,-\frac{1}{2}}(4) \right|$$

$$\begin{aligned}
s_0^{-\frac{1}{2}} p_1^{\frac{1}{2}} &= \left| \psi_{1,0,0,\frac{1}{2}}(1) \psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}(2) \psi_{2,0,0,-\frac{1}{2}}(3) \psi_{2,1,1,\frac{1}{2}}(4) \right| \\
s_0^{-\frac{1}{2}} p_{-1}^{-\frac{1}{2}} &= \left| \psi_{1,0,0,\frac{1}{2}}(1) \psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}(2) \psi_{2,0,0,-\frac{1}{2}}(3) \psi_{2,1,1,-\frac{1}{2}}(4) \right| \\
s_0^{-\frac{1}{2}} p_1^{\frac{1}{2}} &= \left| \psi_{1,0,0,\frac{1}{2}}(1) \psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}(2) \psi_{2,0,0,-\frac{1}{2}}(3) \psi_{2,1,0,\frac{1}{2}}(4) \right| \\
s_0^{-\frac{1}{2}} p_0^{-\frac{1}{2}} &= \left| \psi_{1,0,0,\frac{1}{2}}(1) \psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}(2) \psi_{2,0,0,-\frac{1}{2}}(3) \psi_{2,1,0,-\frac{1}{2}}(4) \right| \\
s_0^{-\frac{1}{2}} p_{-1}^{\frac{1}{2}} &= \left| \psi_{1,0,0,\frac{1}{2}}(1) \psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}(2) \psi_{2,0,0,-\frac{1}{2}}(3) \psi_{2,1,-1,\frac{1}{2}}(4) \right| \\
s_0^{-\frac{1}{2}} p_{-1}^{-\frac{1}{2}} &= \left| \psi_{1,0,0,\frac{1}{2}}(1) \psi_{1,0,0,-\frac{1}{2}}(2) \psi_{2,0,0,-\frac{1}{2}}(3) \psi_{2,1,-1,-\frac{1}{2}}(4) \right|
\end{aligned} \tag{E.8}$$

şeklinde yazılabilir. Burada $\psi_{nlm_l m_s}$ tek bir elektronun spin dalga fonksiyonudur. Bu dalga fonksiyonlarının lineer kombinasyonu Denk. (3.24)'de göre alınarak normalize edilmiş ve çiftlenimli baz fonksiyonları

$$\begin{aligned}
\psi_{1011} &= S_0^{\frac{1}{2}} P_1^{-\frac{1}{2}} \\
\psi_{1010} &= S_0^{\frac{1}{2}} P_0^{-\frac{1}{2}} \\
\psi_{101-1} &= S_0^{\frac{1}{2}} P_{-1}^{-\frac{1}{2}} \\
\psi_{1100} &= 0.5773 \times S_0^{\frac{1}{2}} P_{-1}^{\frac{1}{2}} - 0.5773 \times S_0^{\frac{1}{2}} P_0^{-\frac{1}{2}} + 0.5773 \times S_0^{-\frac{1}{2}} P_1^{-\frac{1}{2}} \\
\psi_{1111} &= -0.7071 \times S_0^{\frac{1}{2}} P_0^{\frac{1}{2}} + 0.7071 \times S_0^{\frac{1}{2}} P_1^{-\frac{1}{2}} \\
\psi_{1110} &= -0.7071 \times S_0^{\frac{1}{2}} P_{-1}^{\frac{1}{2}} + 0.7071 \times S_0^{-\frac{1}{2}} P_1^{-\frac{1}{2}} \\
\psi_{111-1} &= -0.7071 \times S_0^{\frac{1}{2}} P_{-1}^{-\frac{1}{2}} + 0.7071 \times S_0^{-\frac{1}{2}} P_0^{-\frac{1}{2}} \\
\psi_{1122} &= S_0^{\frac{1}{2}} P_1^{\frac{1}{2}} \\
\psi_{1121} &= 0.7071 \times S_0^{\frac{1}{2}} P_0^{\frac{1}{2}} + 0.7071 \times S_0^{\frac{1}{2}} P_1^{-\frac{1}{2}}
\end{aligned}$$

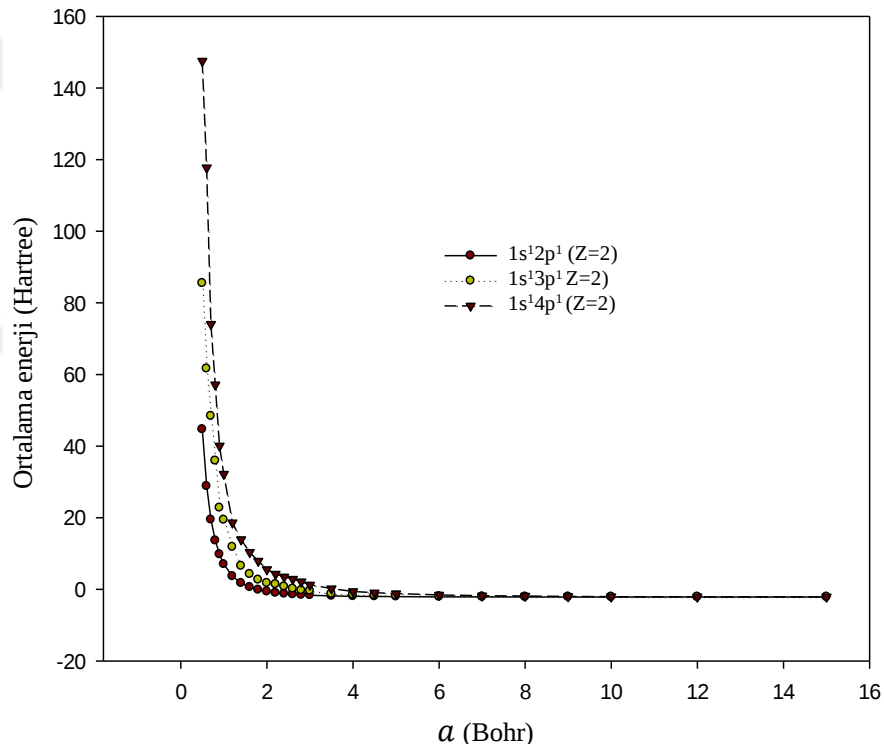
$$\Psi_{1120}=0.4082\times S_0^{\frac{1}{2}}P_{-1}^{\frac{1}{2}}+0.8165\times S_0^{\frac{1}{2}}P_0^{-\frac{1}{2}}+0.4082\times S_0^{-\frac{1}{2}}P_1^{-\frac{1}{2}}$$

$$\Psi_{112-1}=0.7071\times S_0^{\frac{1}{2}}P_{-1}^{-\frac{1}{2}}+0.7071\times S_0^{-\frac{1}{2}}P_0^{-\frac{1}{2}}$$

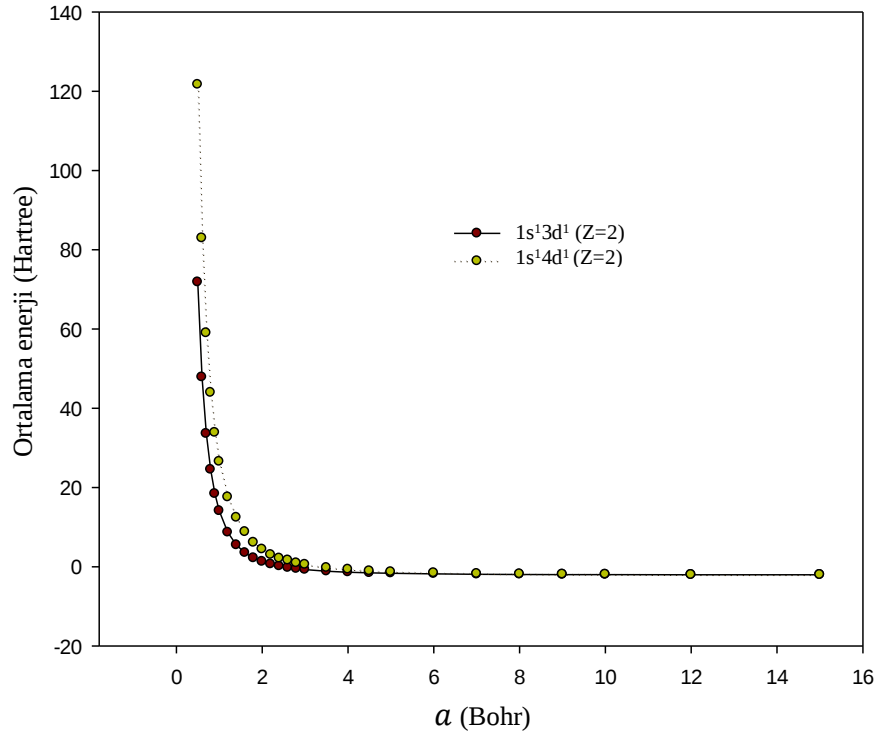
$$\Psi_{112-2}=S_0^{-\frac{1}{2}}P_{-1}^{-\frac{1}{2}} \quad (E.9)$$

şeklinde oluşturulur.

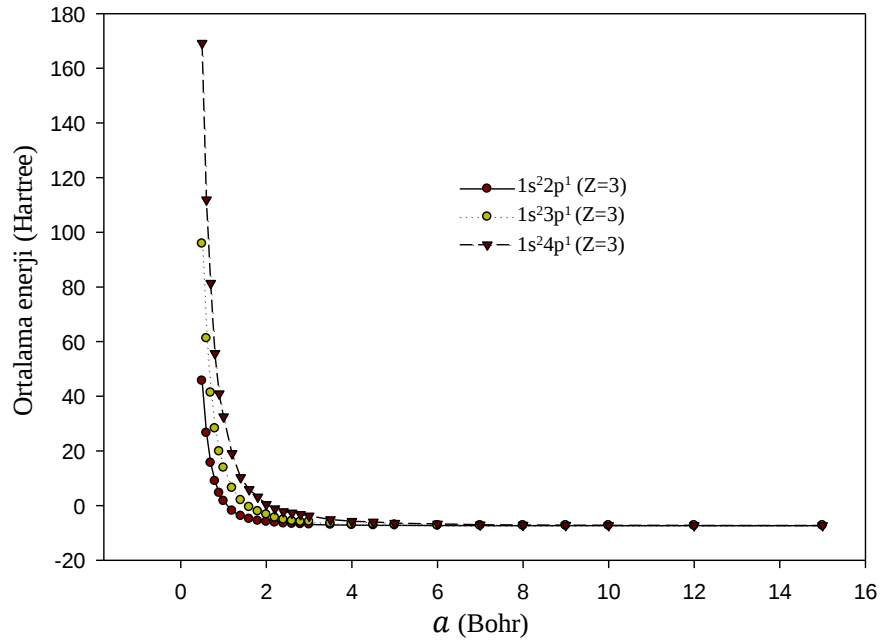
EK-3 Grafikler



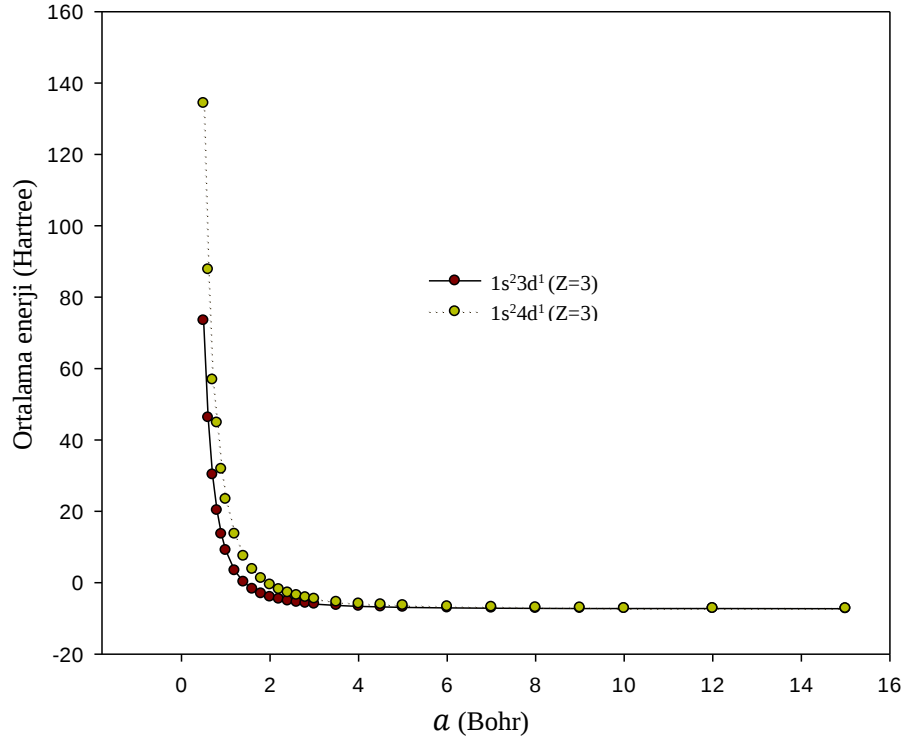
Şekil Ek 3.1. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 2p^1$, $1s^1 3p^1$ ve $1s^1 4p^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri



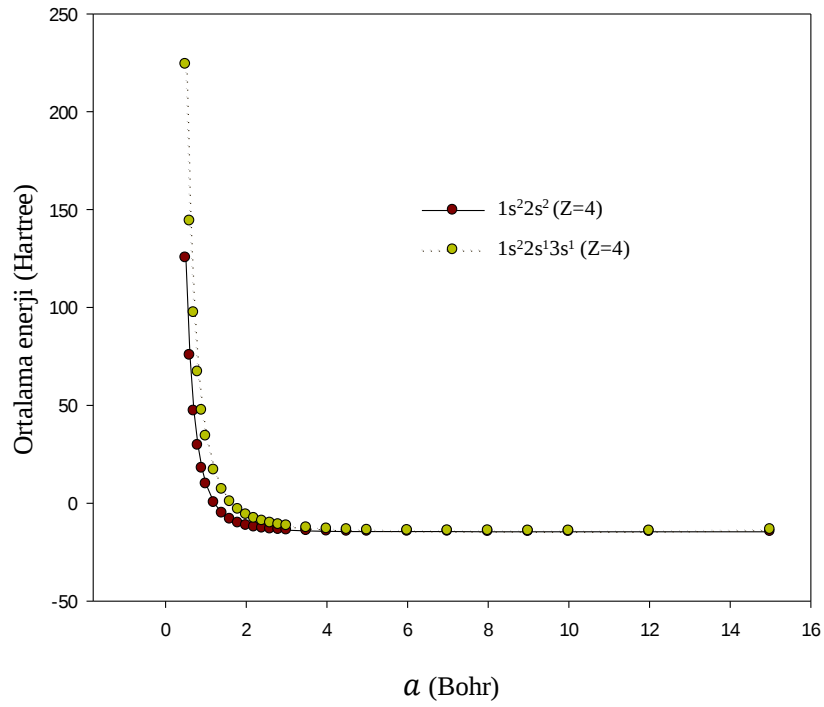
Şekil Ek 3.2. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 3d^1$ ve $1s^1 4d^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri



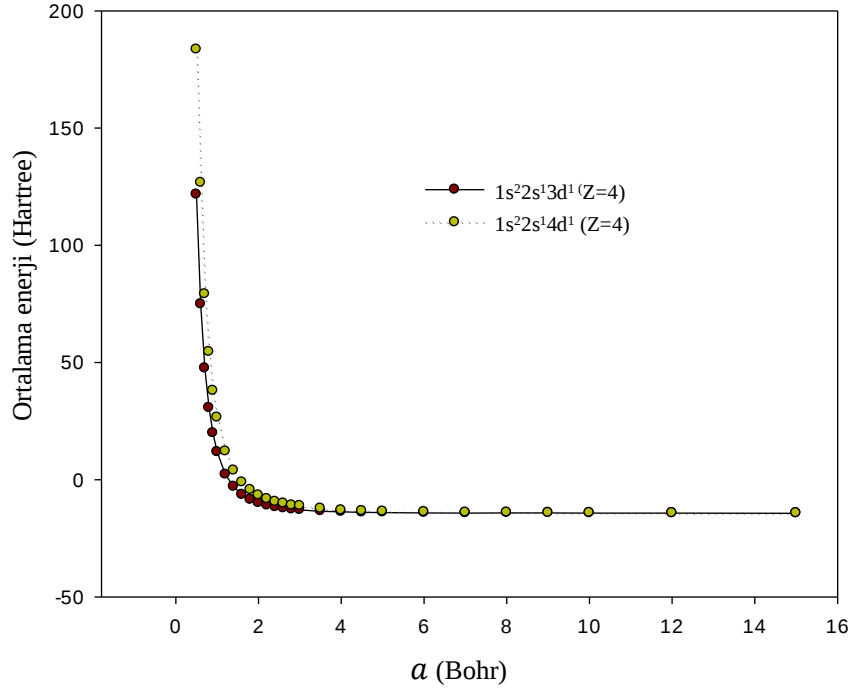
Şekil Ek 3.3. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış üç elektronlu kuantum nokta yapının $1s^2 2p^1$, $1s^2 3p^1$ ve $1s^2 4p^1$ konfigürasyonunun ortalama enerjileri



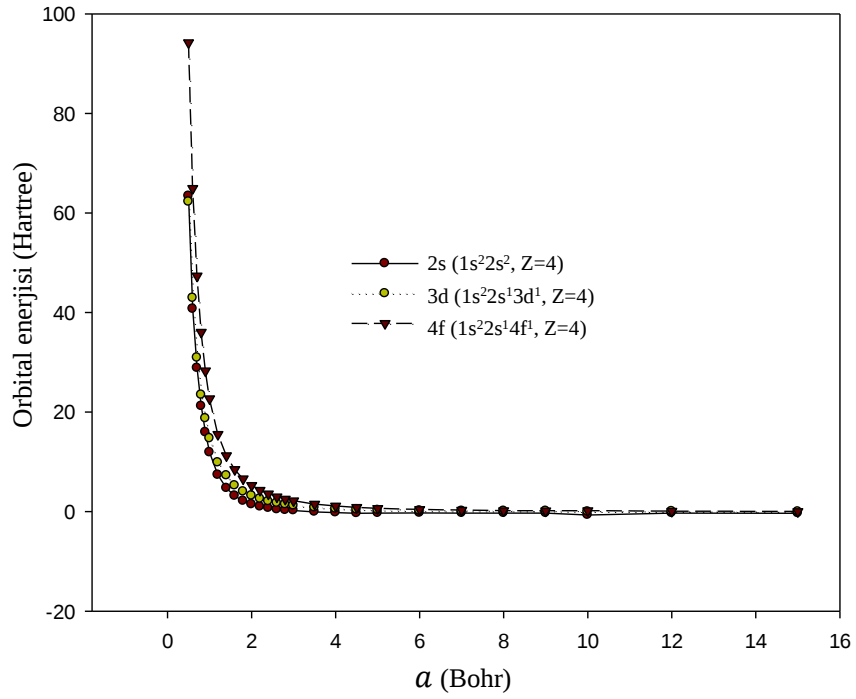
Şekil Ek 3.4. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış üç elektronlu kuantum nokta yapının $1s^2 3d^1$ ve $1s^2 4d^1$ konfigürasyonunun ortalama enerjileri



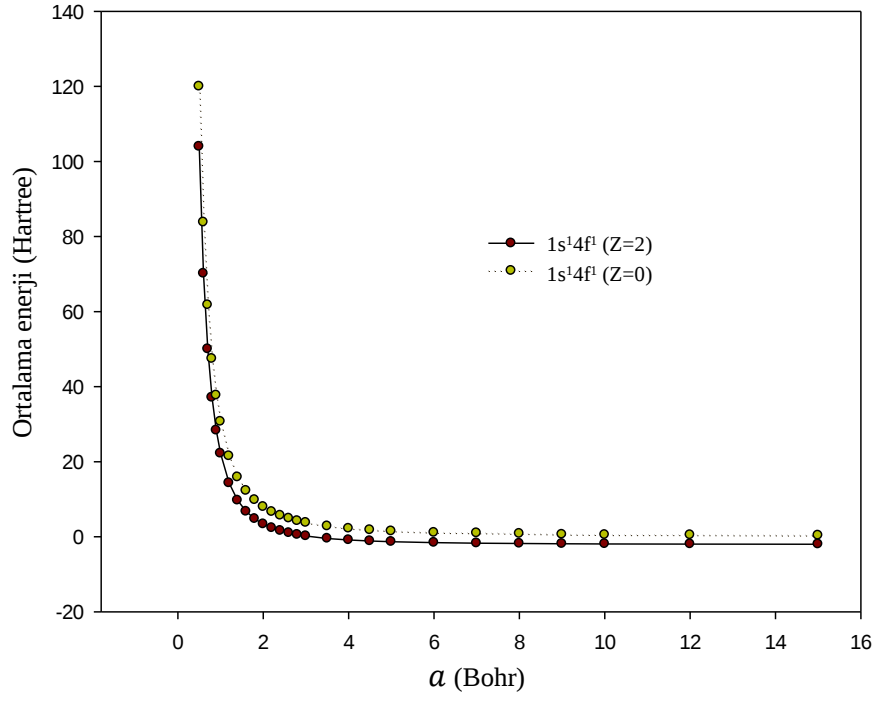
Şekil Ek 3.5. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2 2s^2$ ve $1s^2 2s^1 3s^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri



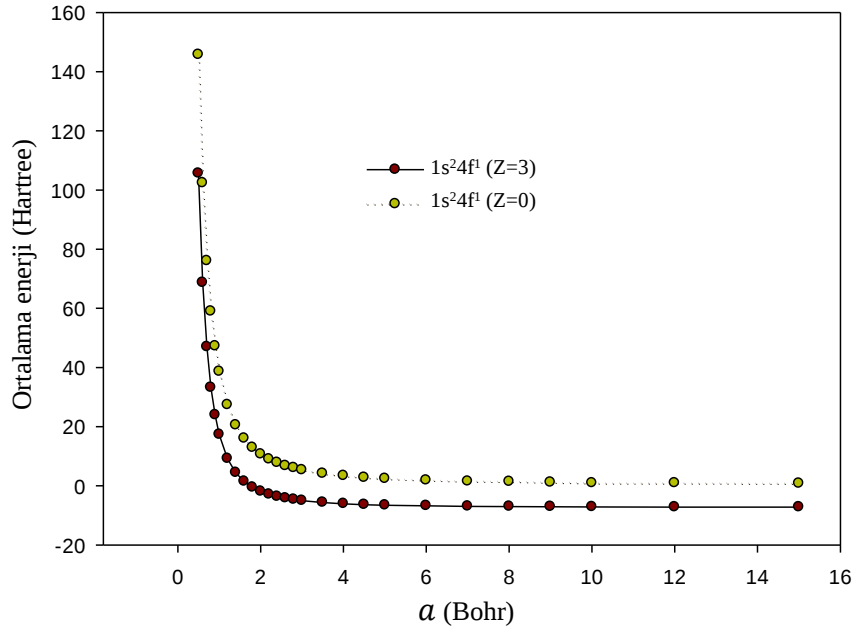
Şekil Ek 3.6. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2 2s^1 3d^1$ ve $1s^2 2s^1 4d^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri



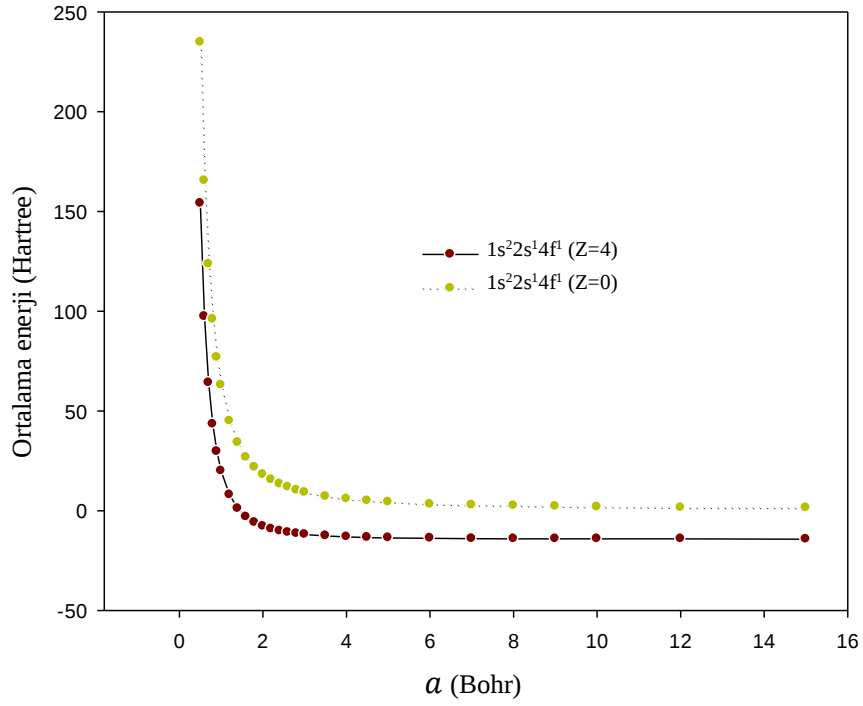
Şekil Ek 3.7. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların 2s, 3d ve 4f orbitallerinin orbital enerjileri



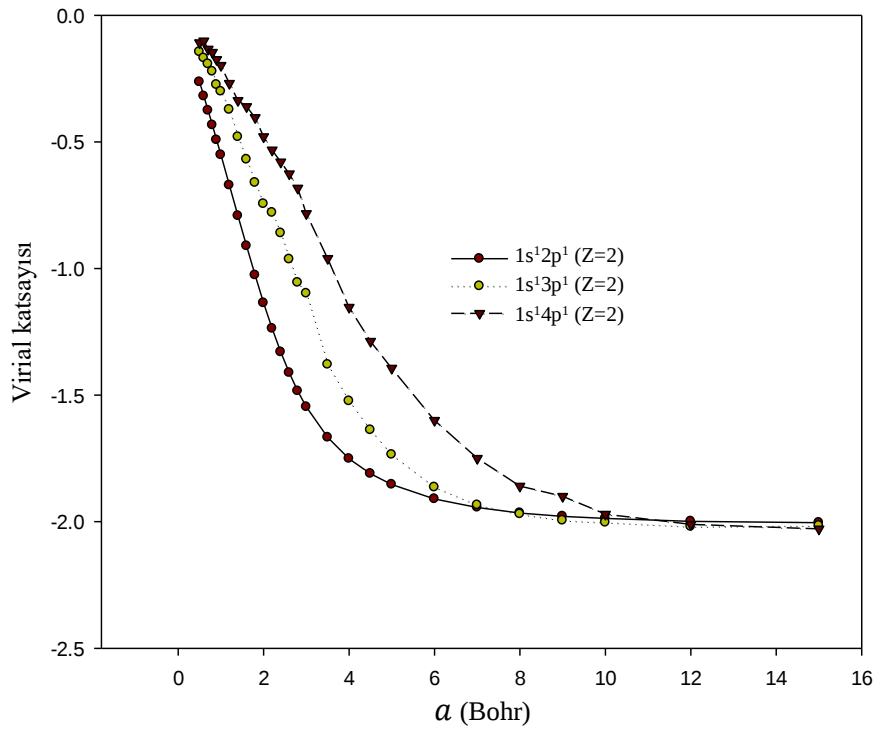
Şekil Ek 3.8. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri



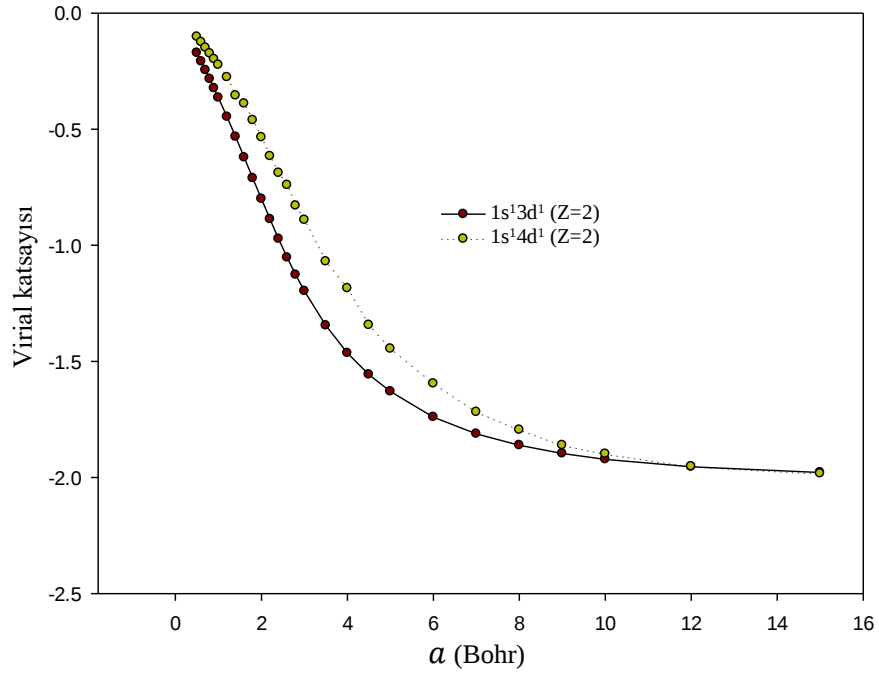
Şekil Ek 3.9. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış üç elektronlu kuantum nokta yapının $1s^2 4f^1$ konfigürasyonunun ortalama enerjileri



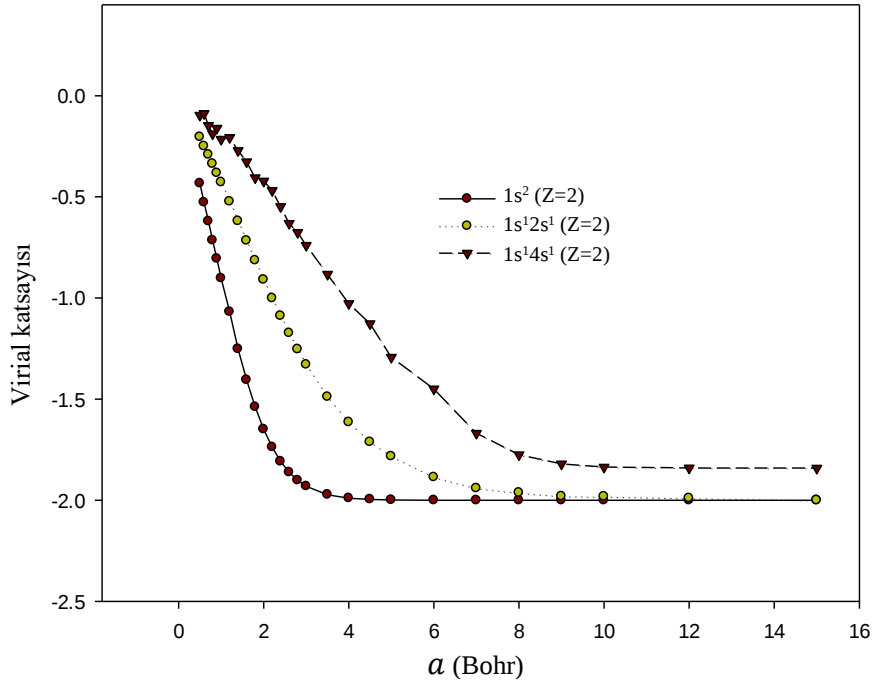
Şekil Ek 3.10. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2 2s^1 4f^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjileri



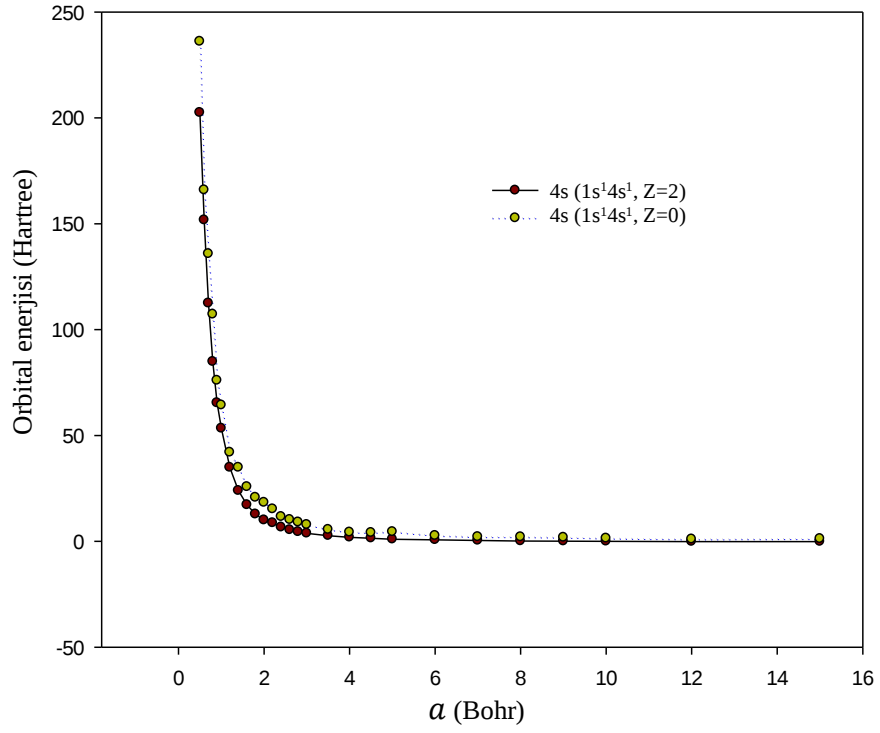
Şekil Ek 3.11. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 2p^1$, $1s^1 3p^1$ ve $1s^1 4p^1$ konfigürasyonlarının virial katsayıları



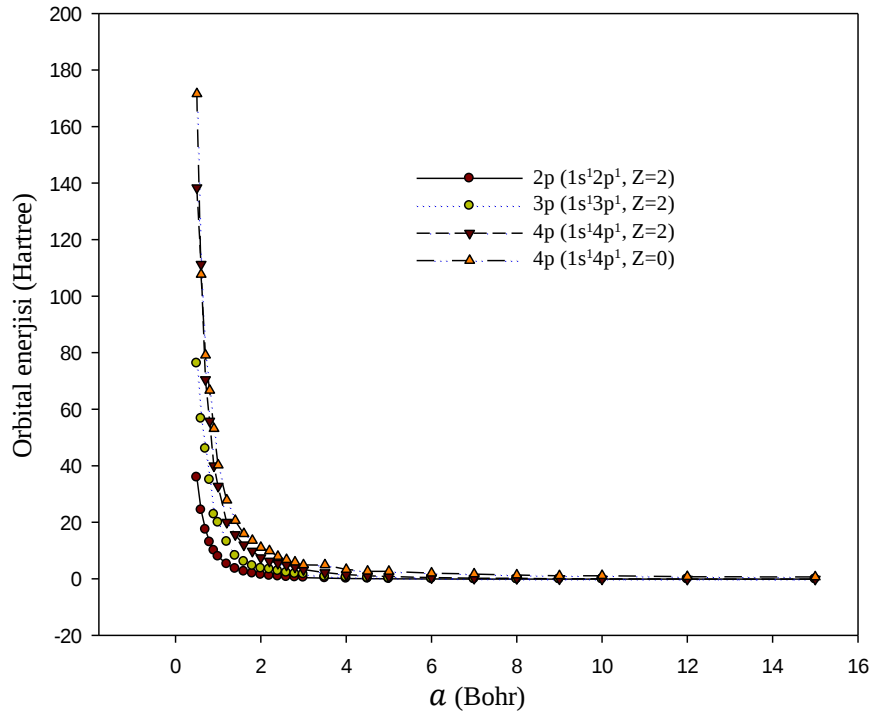
Şekil Ek 3.12. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 3d^1$ ve $1s^1 4d^1$ konfigürasyonlarının virial katsayıları



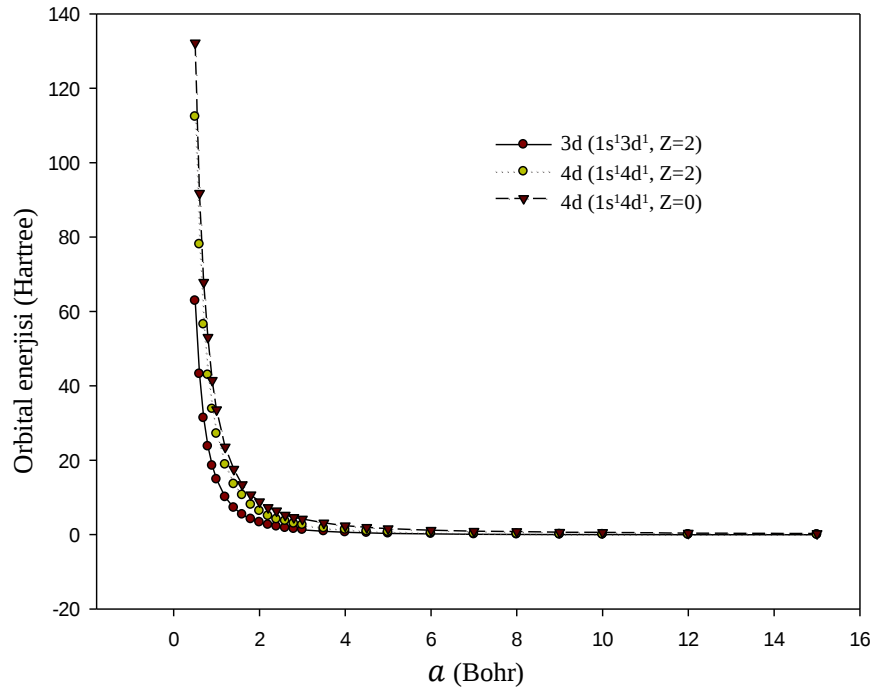
Şekil Ek 3.13. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$, $1s^1 2s^1$ ve $1s^1 4s^1$ konfigürasyonlarının virial katsayıları



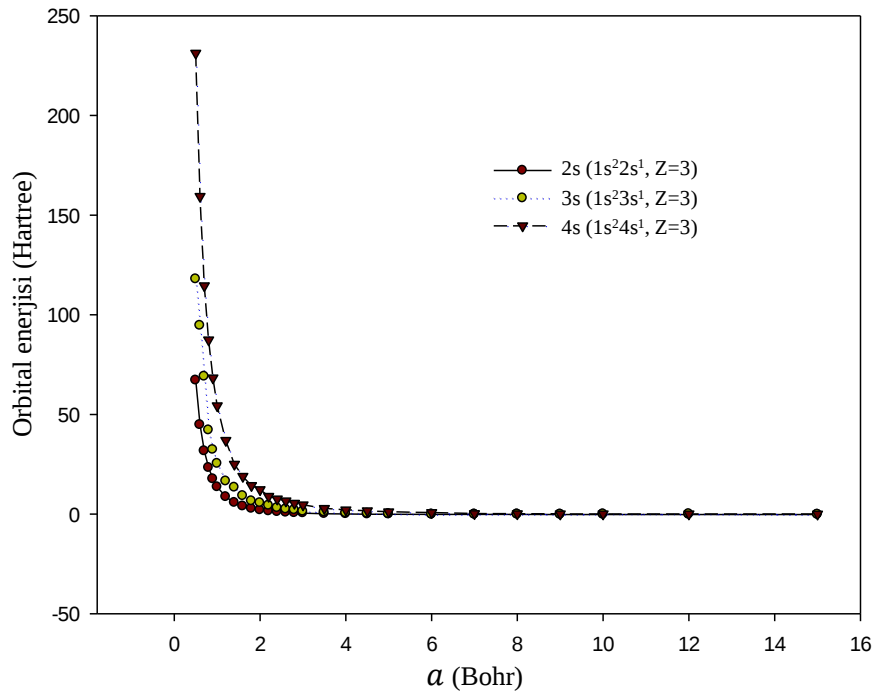
Şekil Ek 3.14. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların 4s orbitallerinin orbital enerjisi



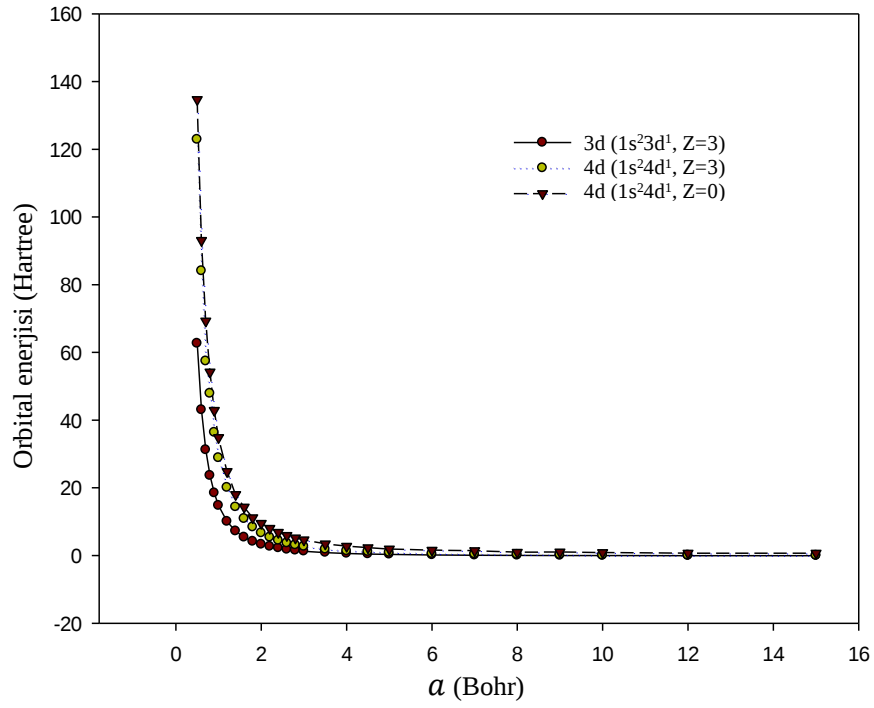
Şekil Ek 3.15. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların 1p, 3p, 4p orbitallerinin orbital enerjileri



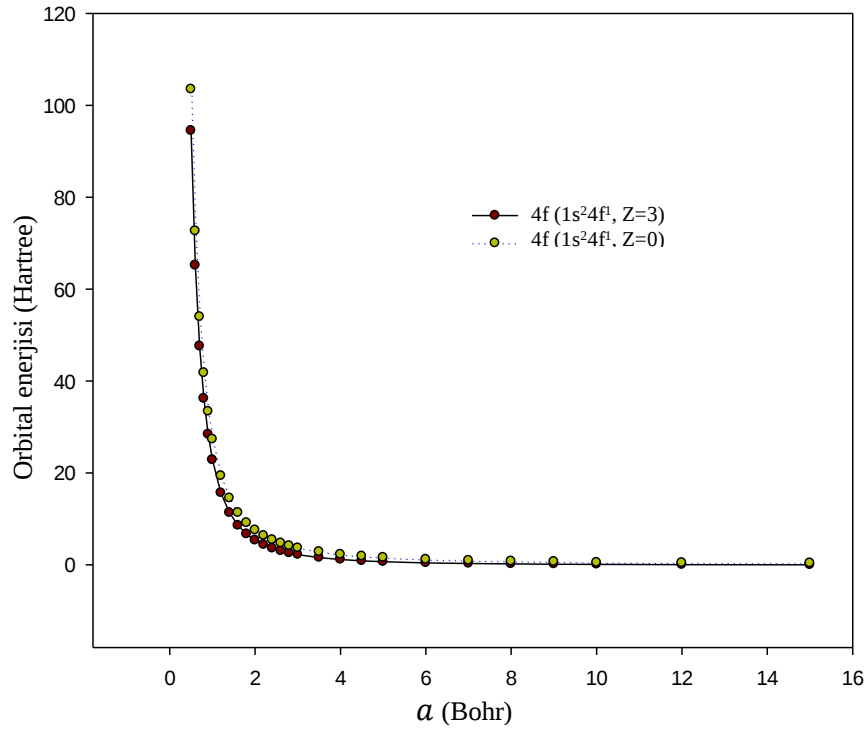
Şekil Ek 3.16. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların 3d ve 4d orbitallerinin orbital enerjileri



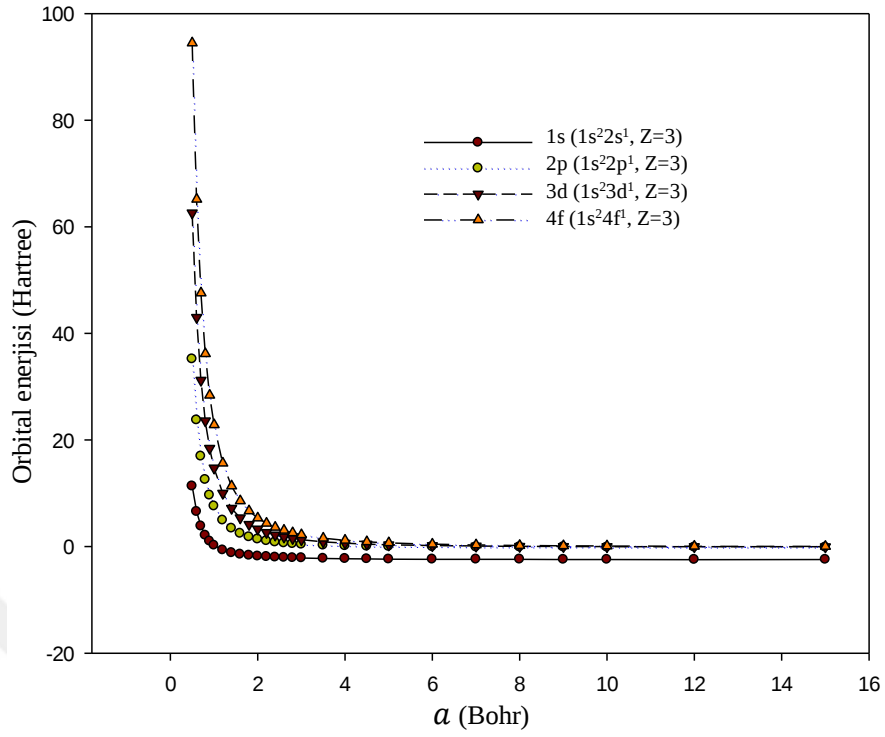
Şekil Ek 3.17. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış üç elektronlu kuantum nokta yapıların 2s, 3s ve 4s orbitallerinin orbital enerjileri



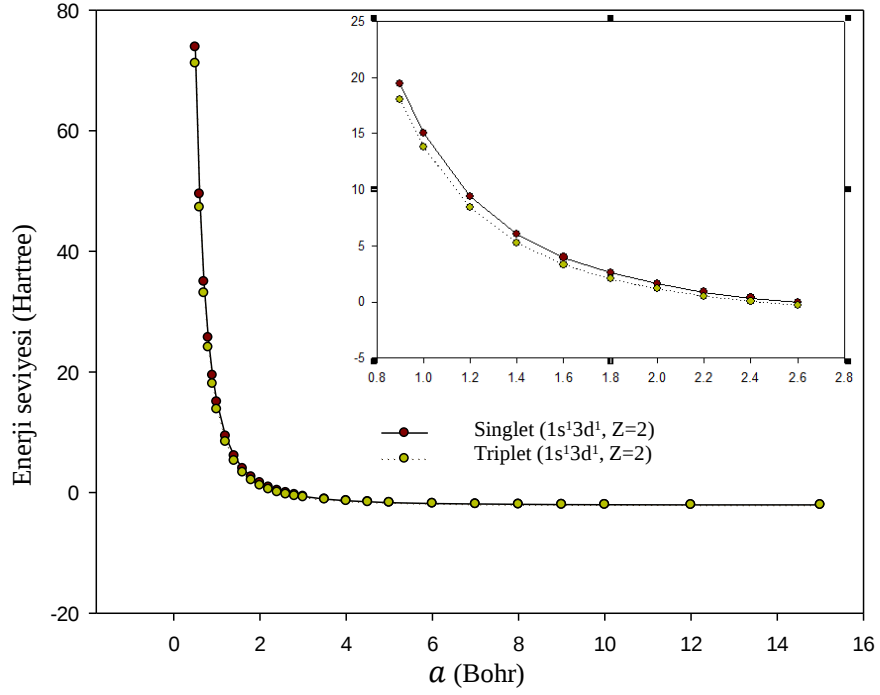
Şekil Ek 3.18. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış üç elektronlu kuantum nokta yapıların 3d ve 4d orbitallerinin orbital enerjileri



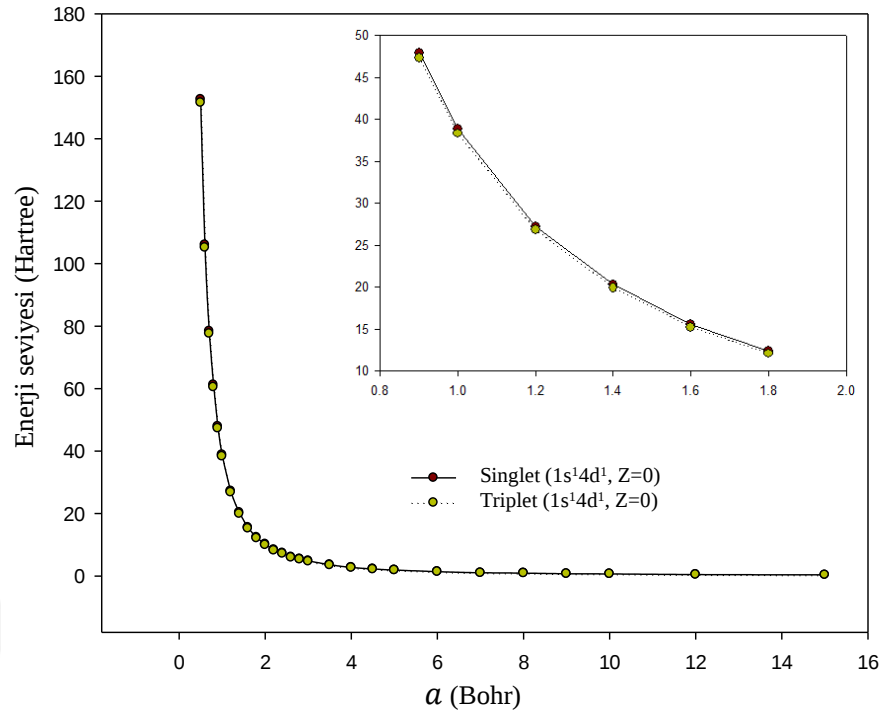
Şekil Ek 3.19. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış üç elektronlu kuantum nokta yapıların 4f orbitallerinin orbital enerjileri



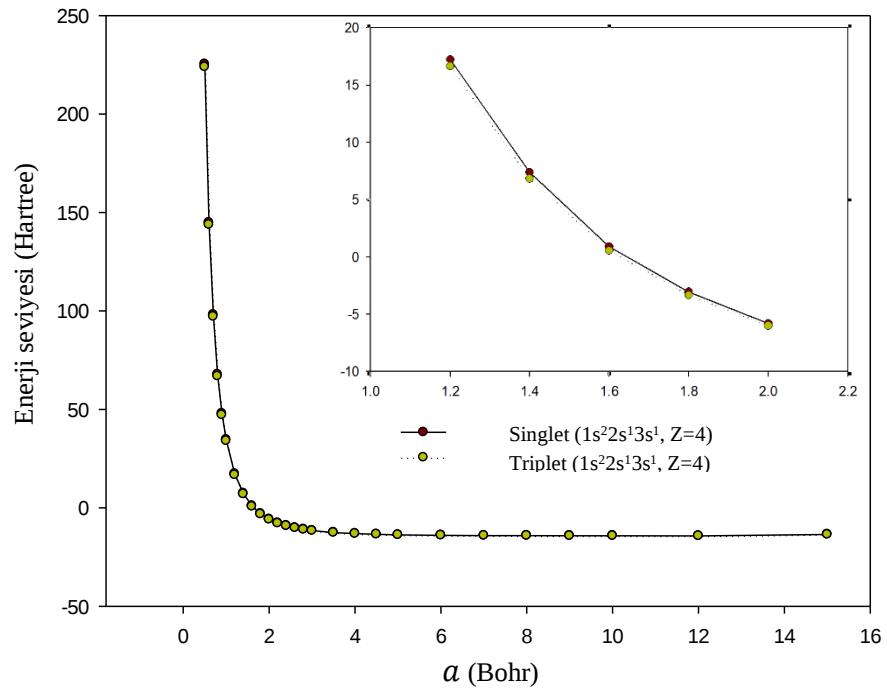
Şekil Ek 3.20. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış üç elektronlu kuantum nokta yapıların 1s, 2p, 3d ve 4f orbitallerinin orbital enerjileri



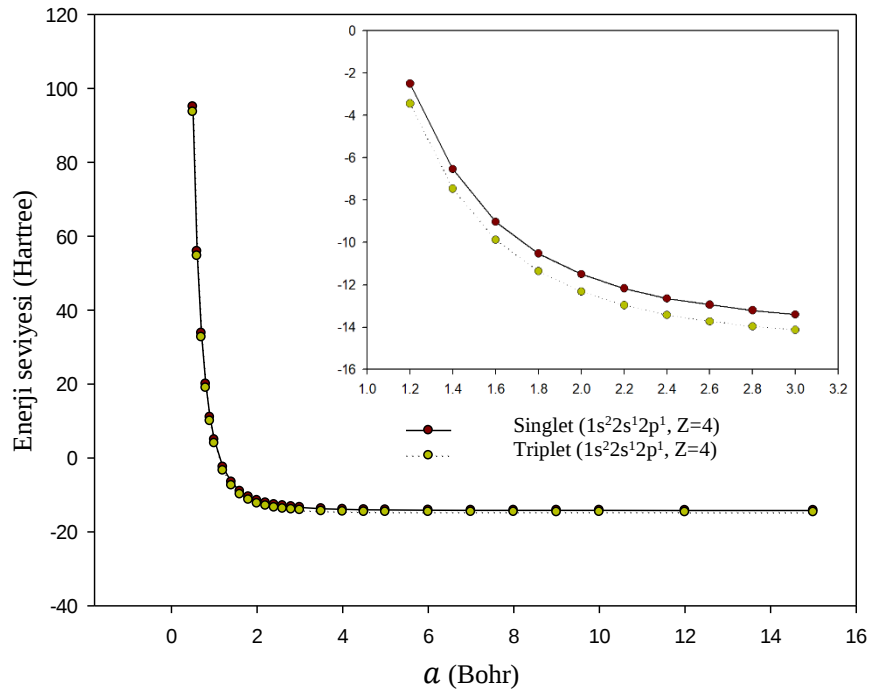
Şekil Ek 3.21. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapının $1s^1 3d^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri



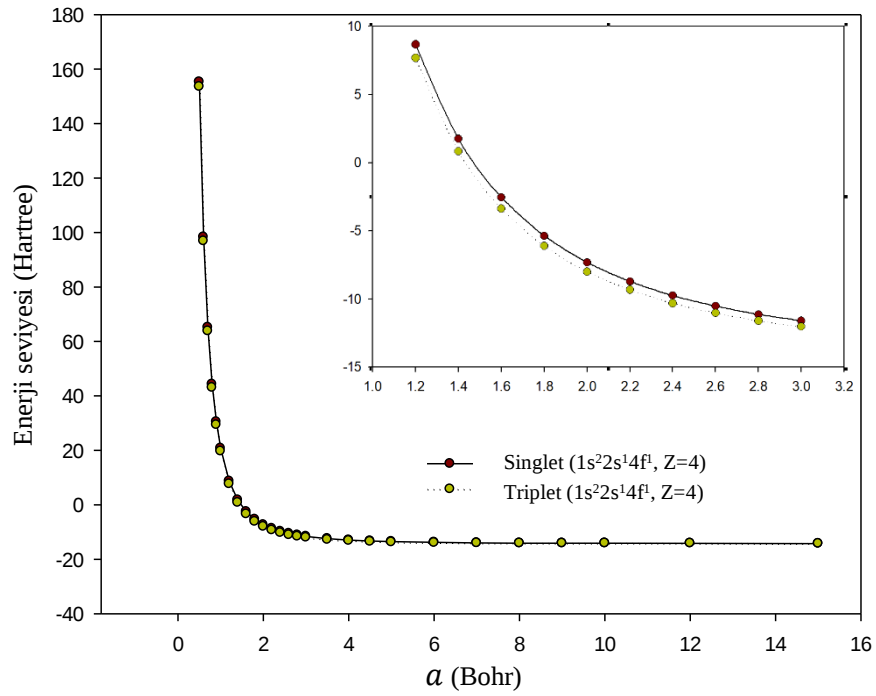
Şekil Ek 3.22. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapının $1s^1 4d^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri



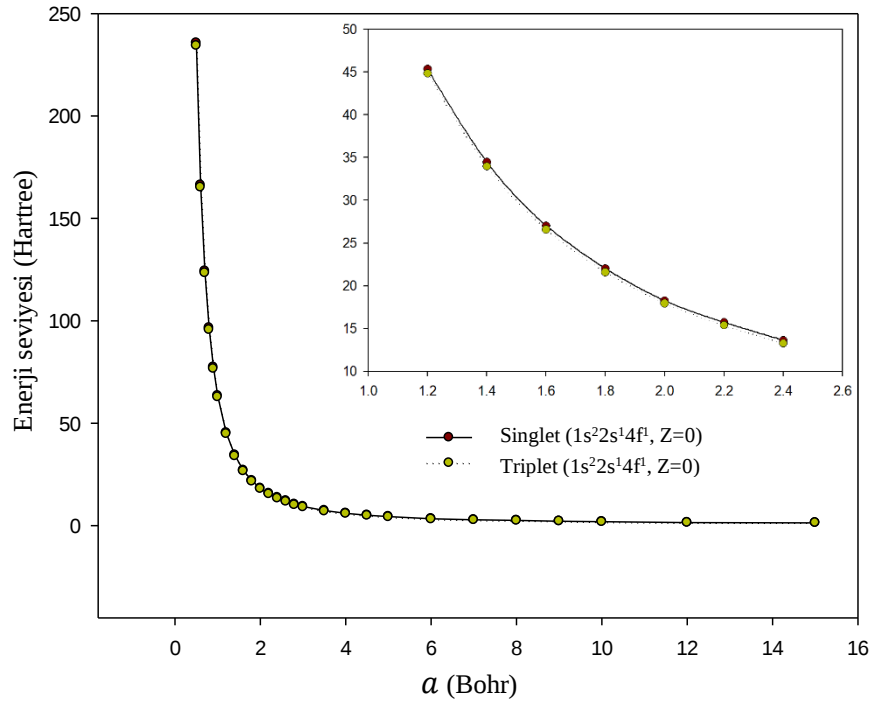
Şekil Ek 3.23. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2 2s^1 3s^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri



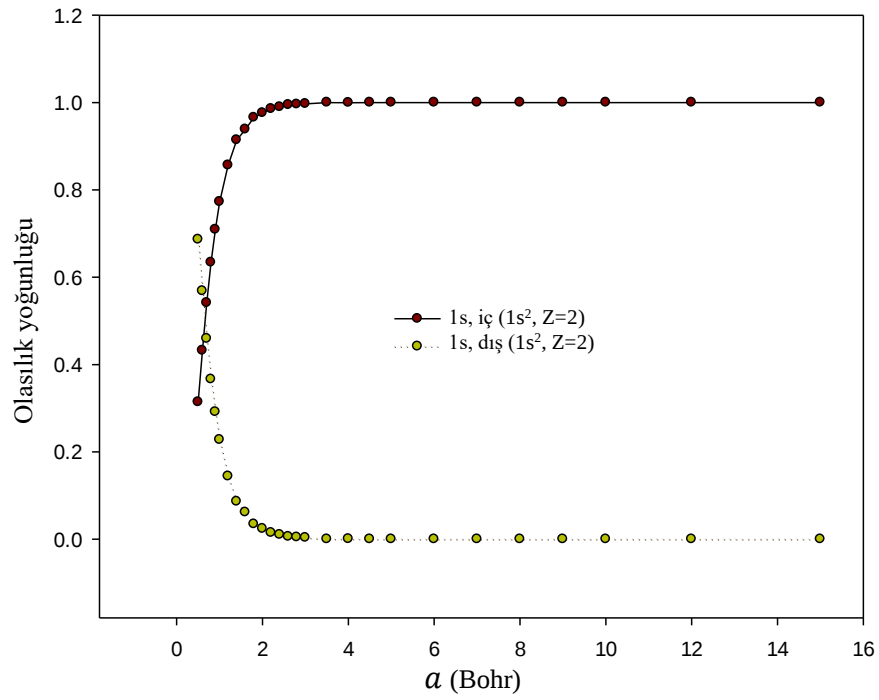
Şekil Ek 3.24. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2 2s^1 2p^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri



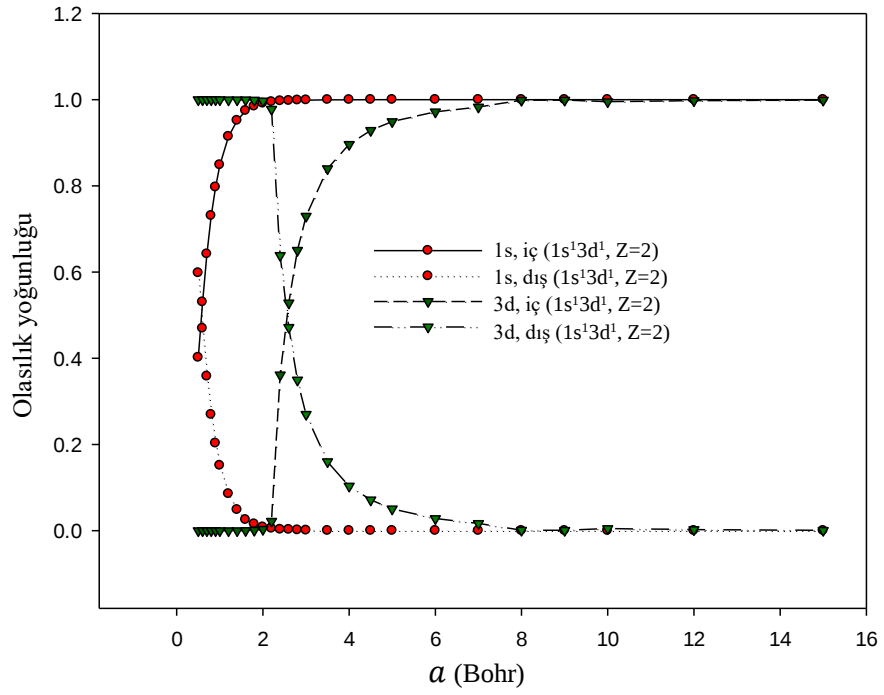
Şekil Ek 3.25. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2 2s^1 4f^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri



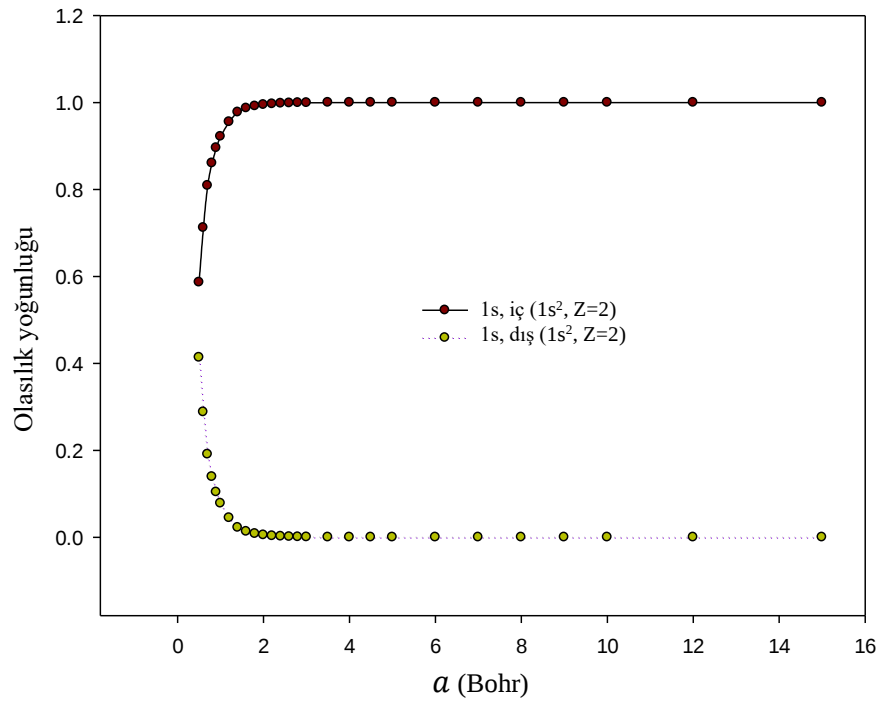
Şekil Ek 3.26. Sonsuz potansiyel engeli ile sınırlandırılmış dört elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2 2s^1 4f^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri



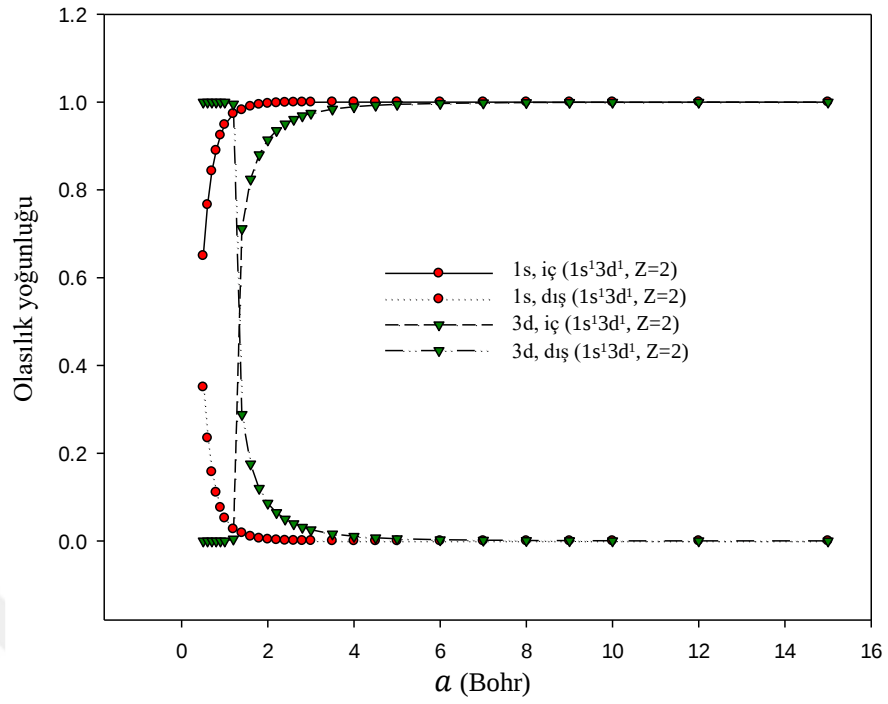
Şekil Ek 3.27. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$ konfigürasyonundaki elektronların olasılık yoğunluğu



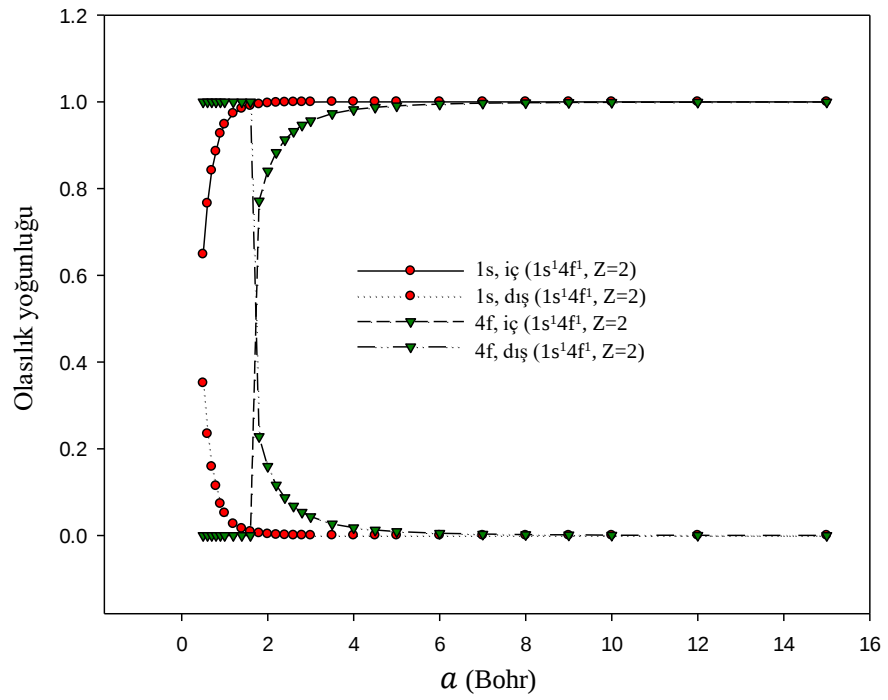
Şekil Ek 3.28. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^13d^1$ konfigürasyonundaki elektronların olasılık yoğunluğu



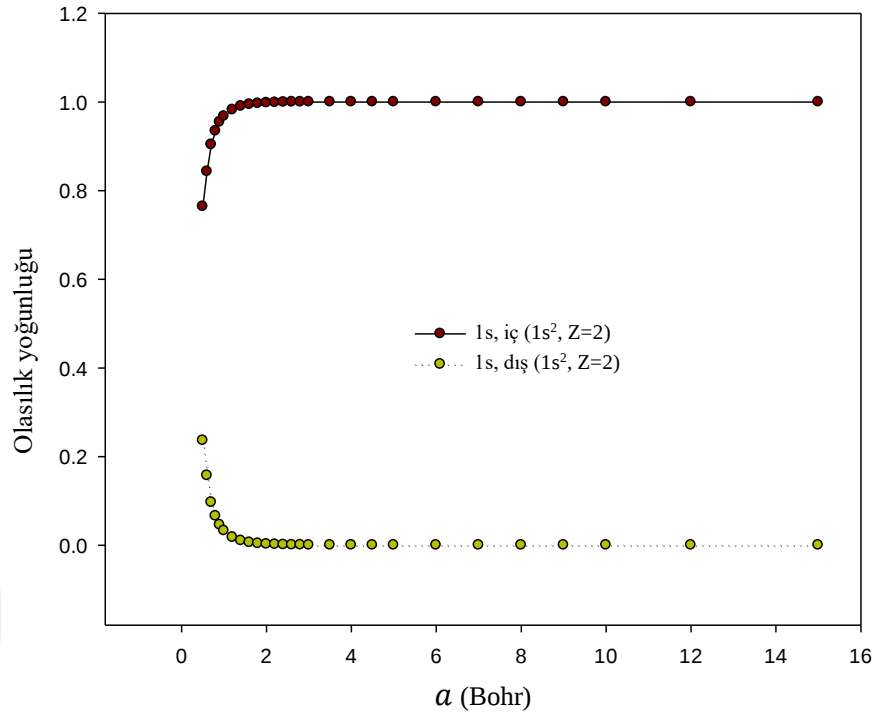
Şekil Ek 3.29. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$ konfigürasyonundaki elektronların olasılık yoğunluğu



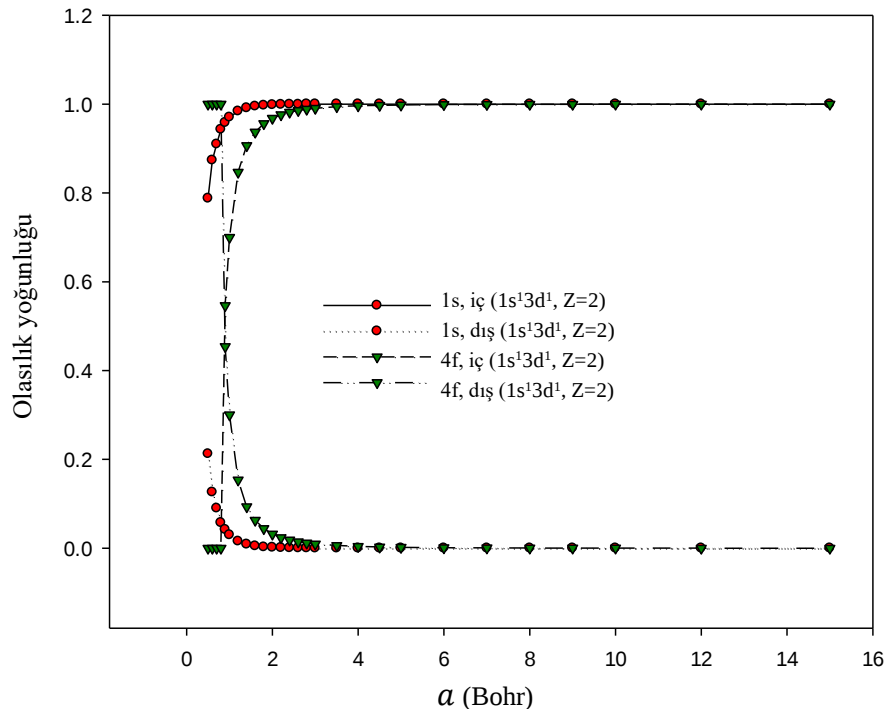
Şekil Ek 3.30. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 3d^1$ konfigürasyonundaki elektronların olasılık yoğunluğu



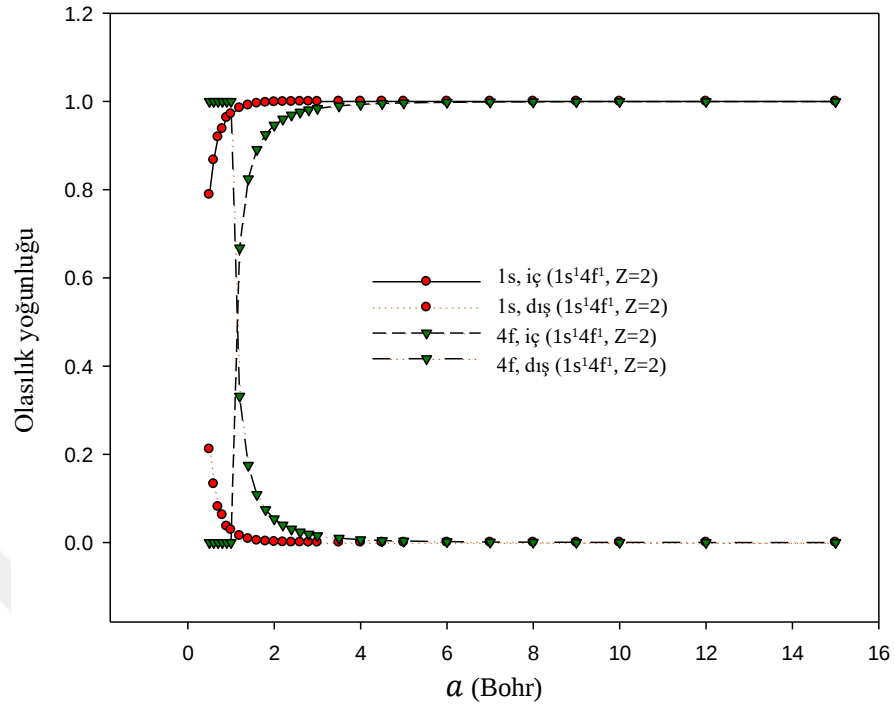
Şekil Ek 3.31. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 4f^1$ konfigürasyonundaki elektronun olasılık yoğunluğu



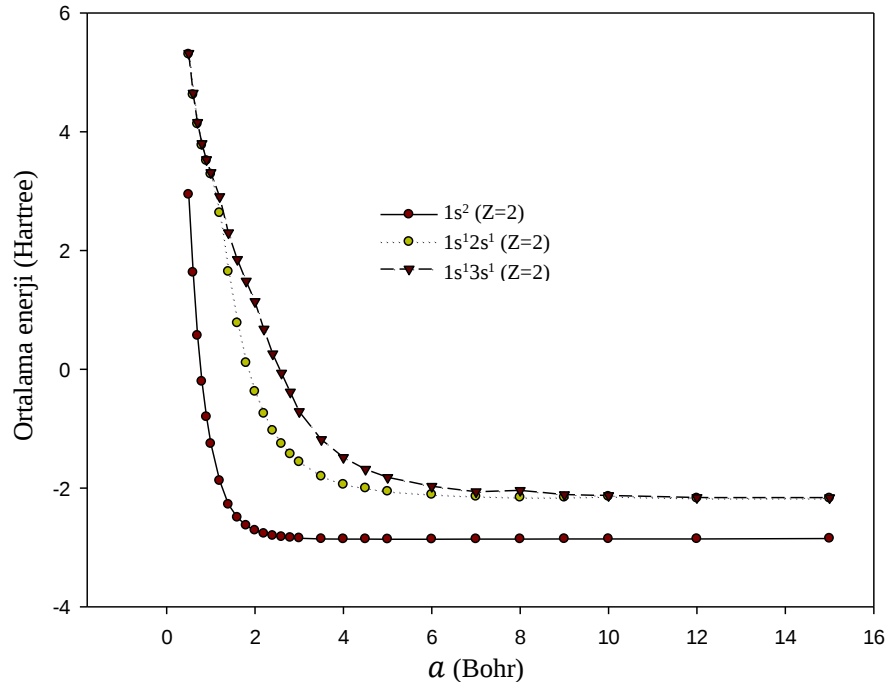
Şekil Ek 3.32. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$ konfigürasyonundaki elektronların olasılık yoğunluğu



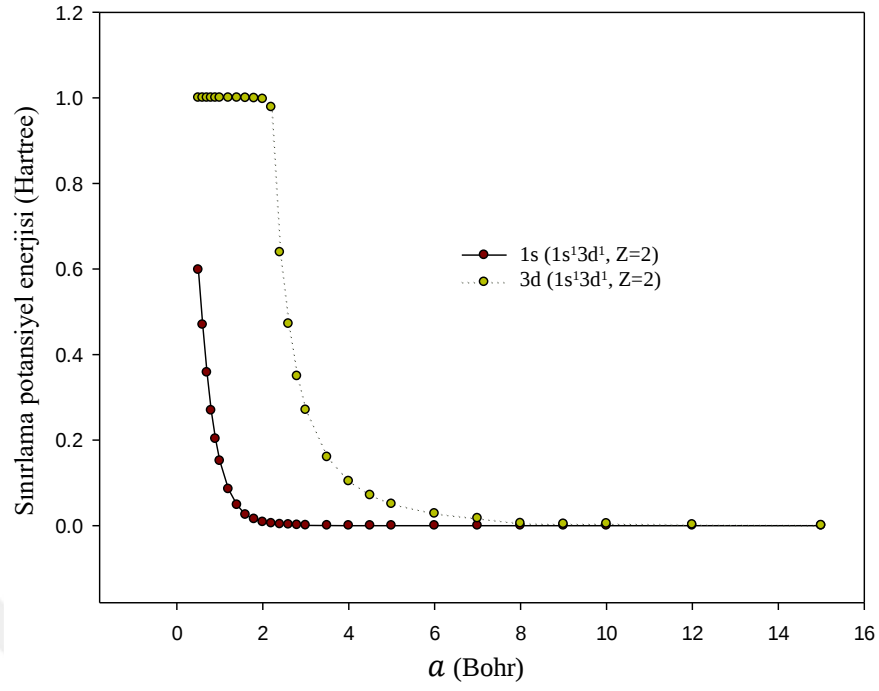
Şekil Ek 3.33. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^13d^1$ konfigürasyonundaki elektronların olasılık yoğunluğu



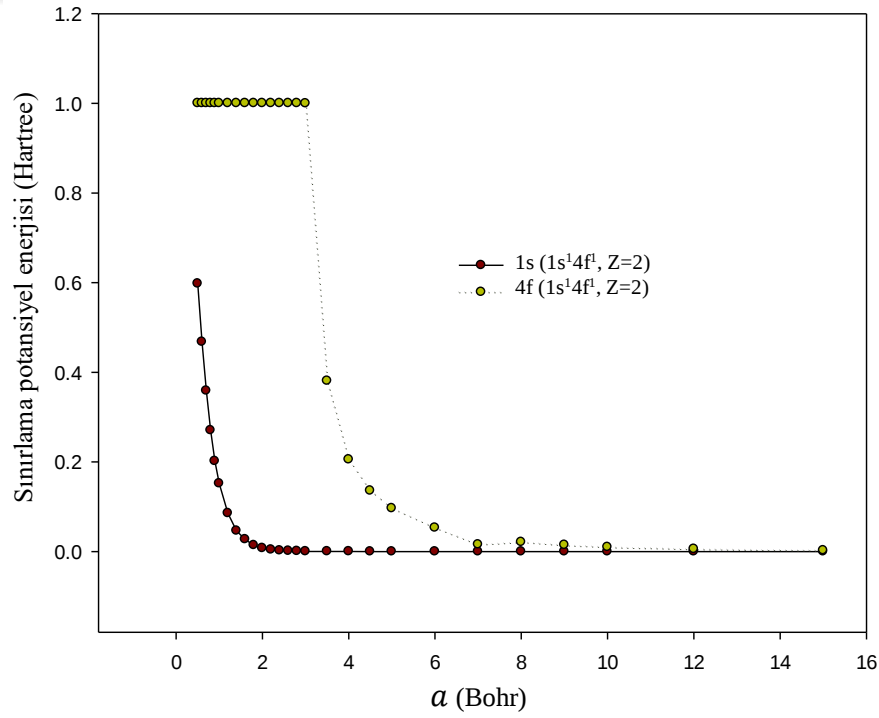
Şekil Ek 3.34. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 4f^1$ konfigürasyonundaki elektronların olasılık yoğunluğu



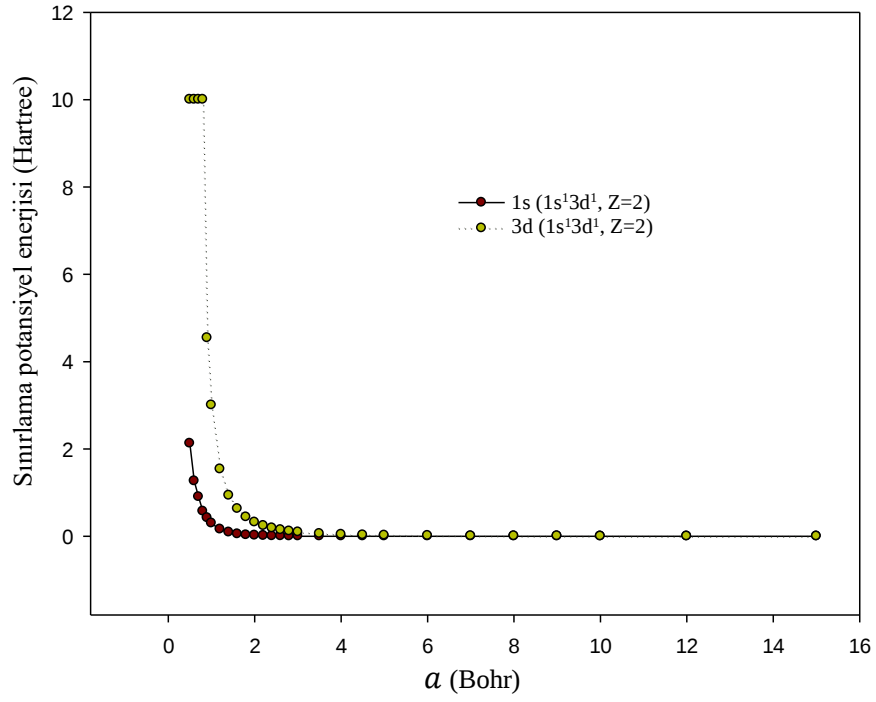
Şekil Ek 3.35. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^2$ ve $1s^1 2s^1$, $1s^1 3s^1$ konfigürasyonlarının ortalama enerjisi



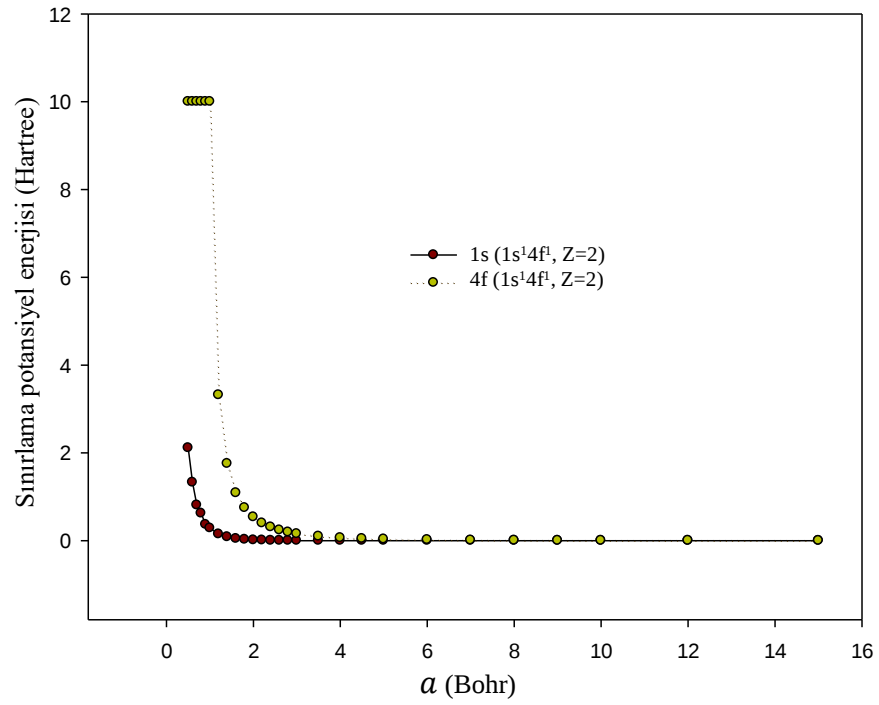
Şekil Ek 3.36. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^13d^1$ konfigürasyonunun sınırlama potansiyel enerjileri



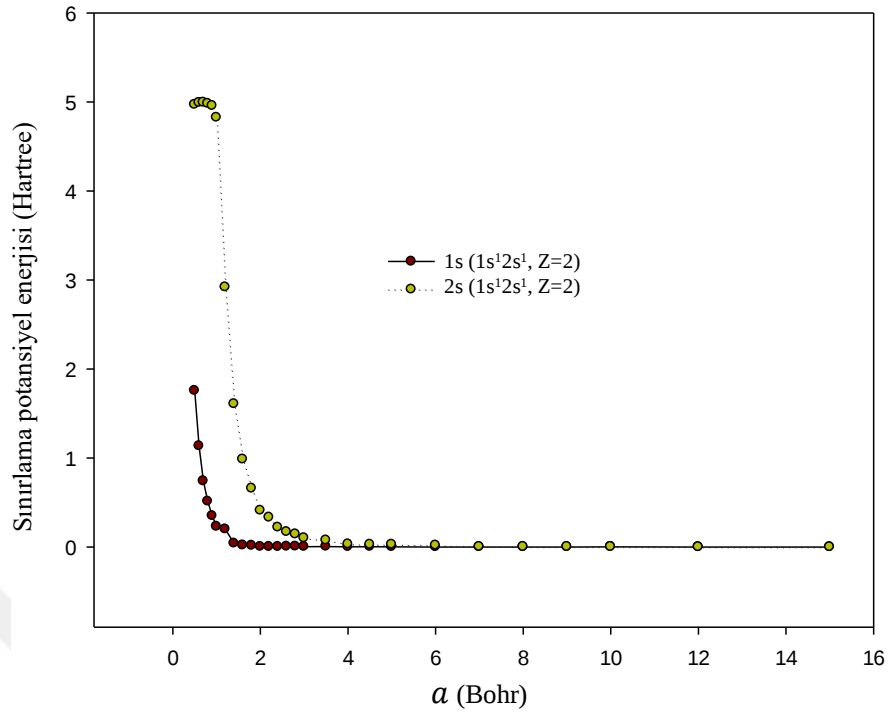
Şekil Ek 3.37. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^14f^1$ konfigürasyonunun sınırlama potansiyel enerjileri



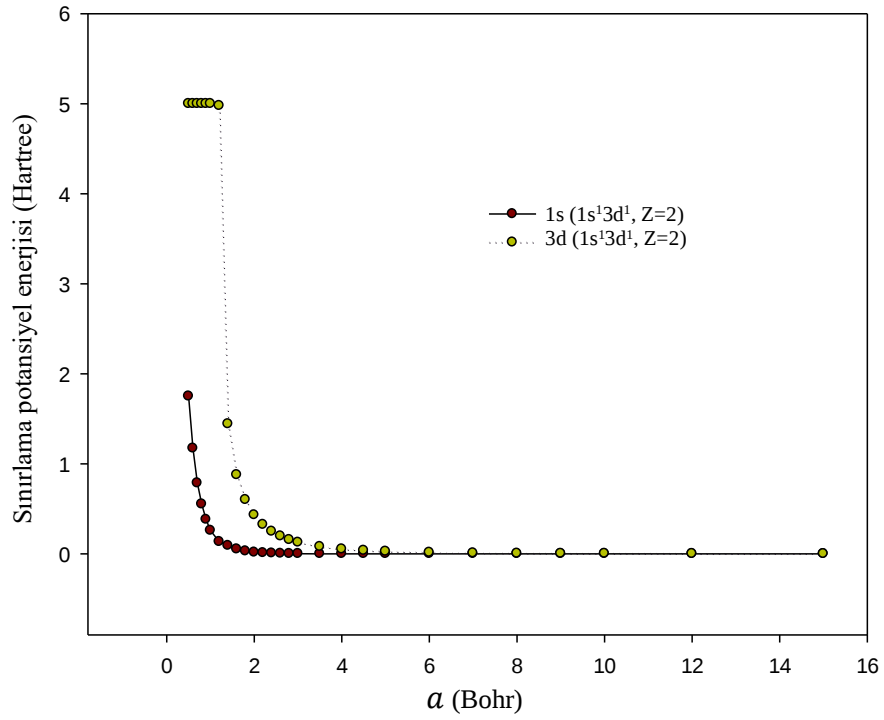
Şekil Ek 3.38. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^13d^1$ konfigürasyonunun sınırlama potansiyel enerjileri



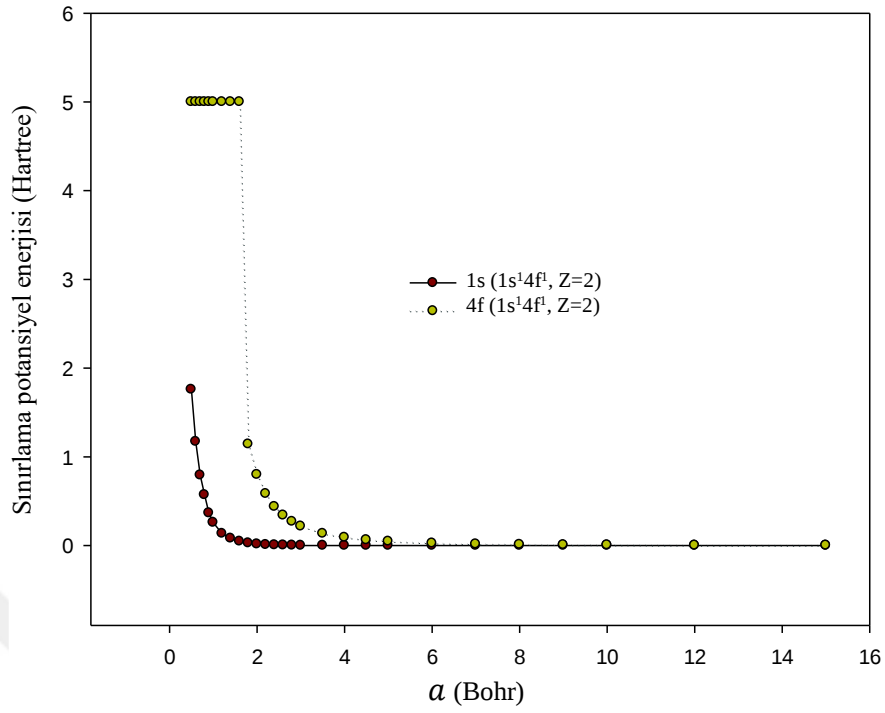
Şekil Ek 3.39. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^14f^1$ konfigürasyonunun sınırlama potansiyel enerjileri



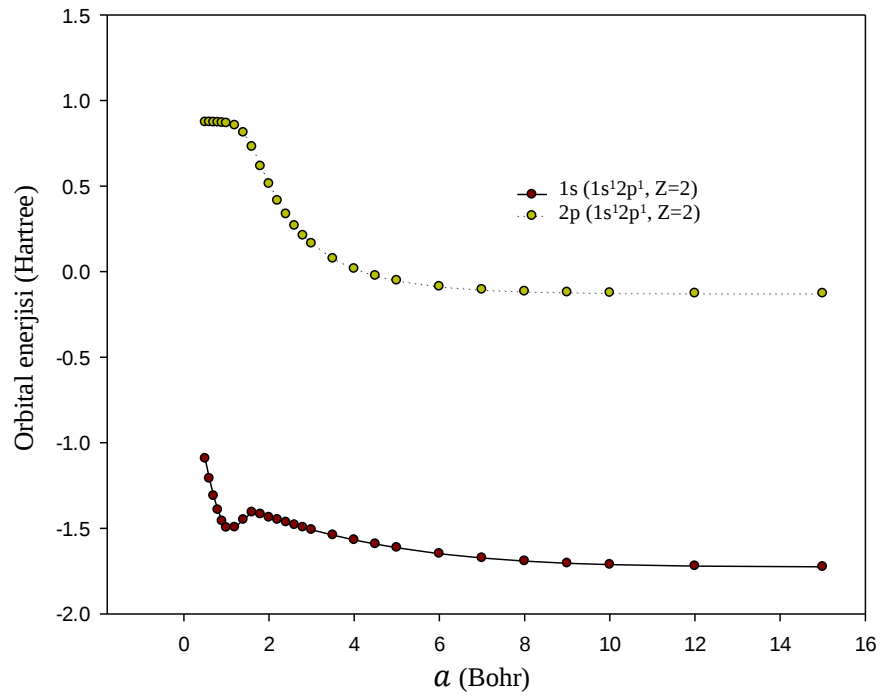
Şekil Ek 3.40. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 2s^1$ konfigürasyonunun sınırlama potansiyel enerjileri



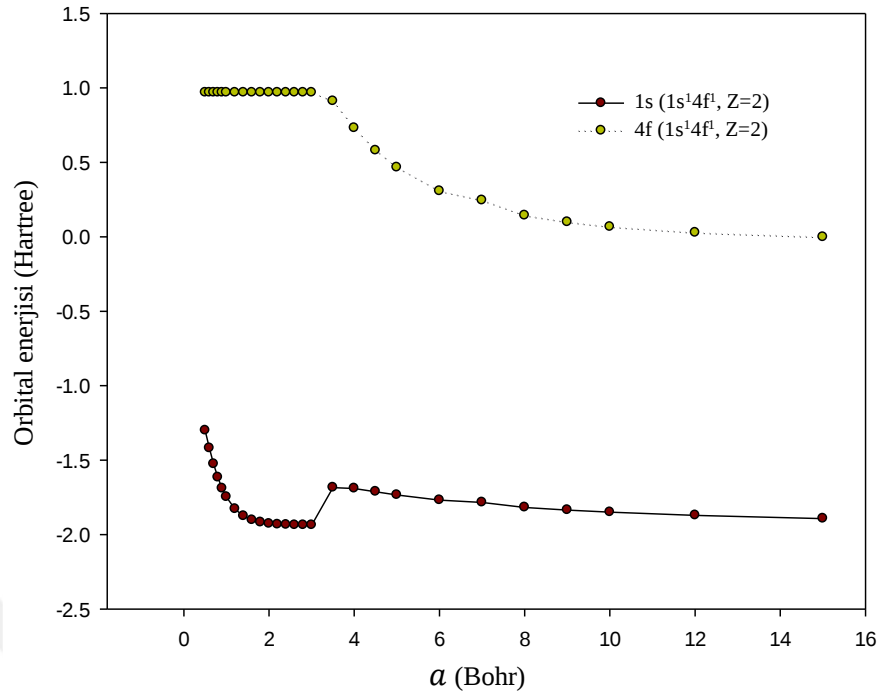
Şekil Ek 3.41. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 3d^1$ konfigürasyonunun sınırlama potansiyel enerjileri



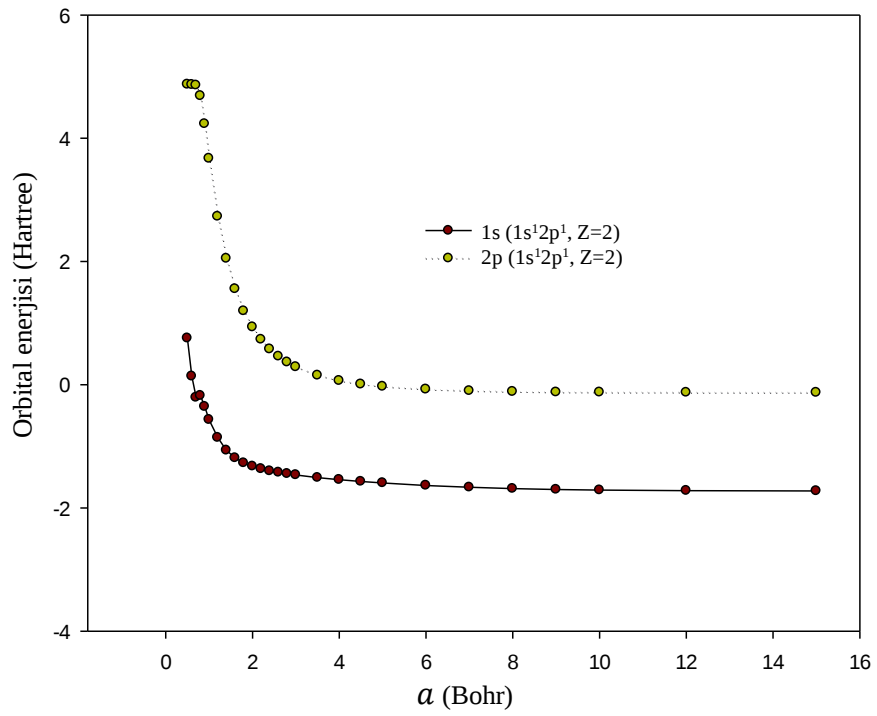
Şekil Ek 3.42. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 4f^1$ konfigürasyonunun sınırlama potansiyel enerjileri



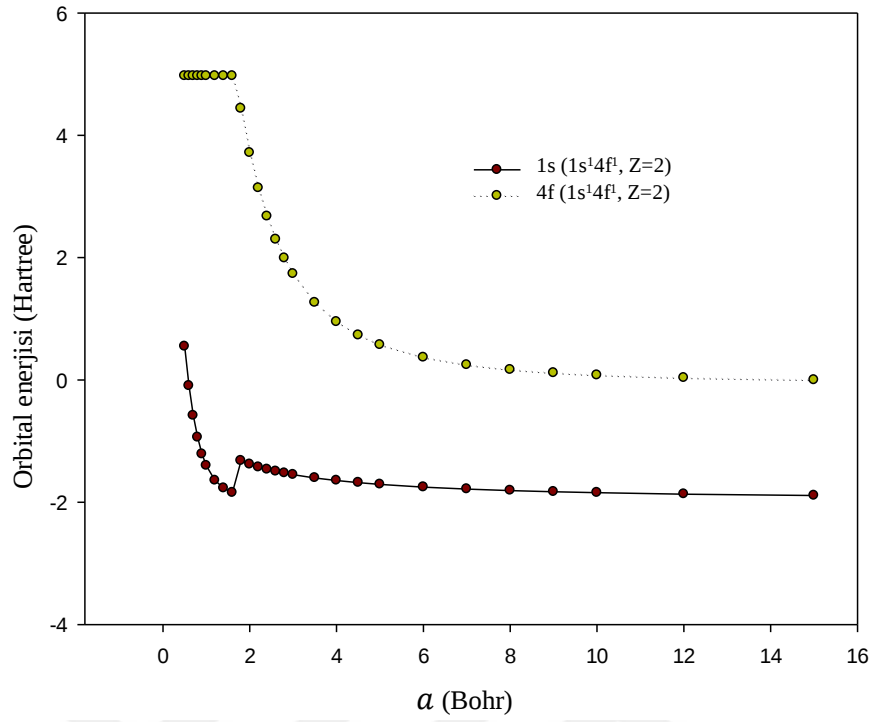
Şekil Ek 3.43. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların 1s ve 2p orbitallerinin orbital enerjileri



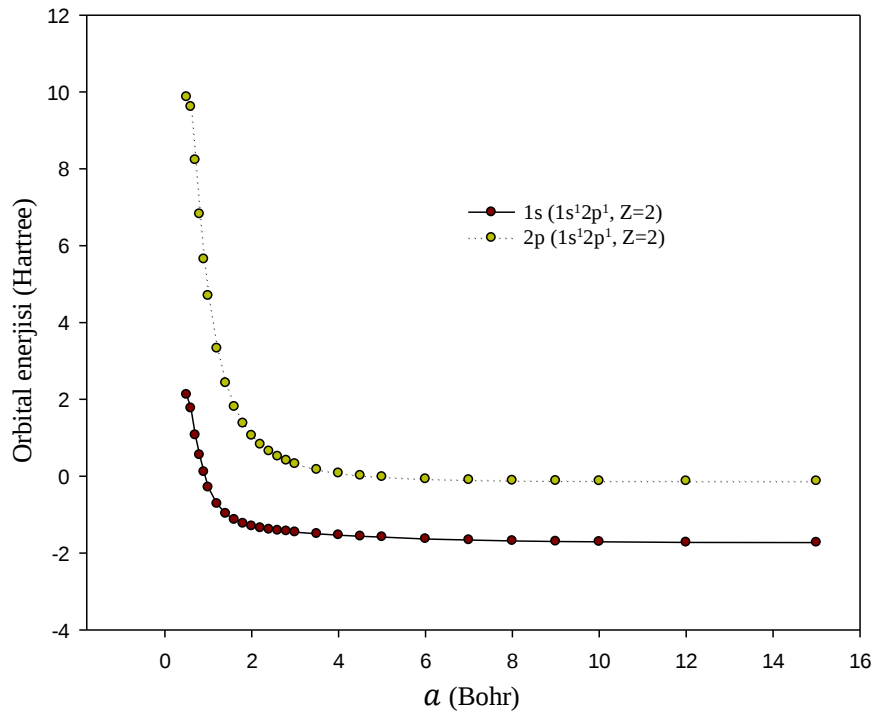
Şekil Ek 3.44. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=1$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların 1s ve 4f orbitallerinin orbital enerjileri



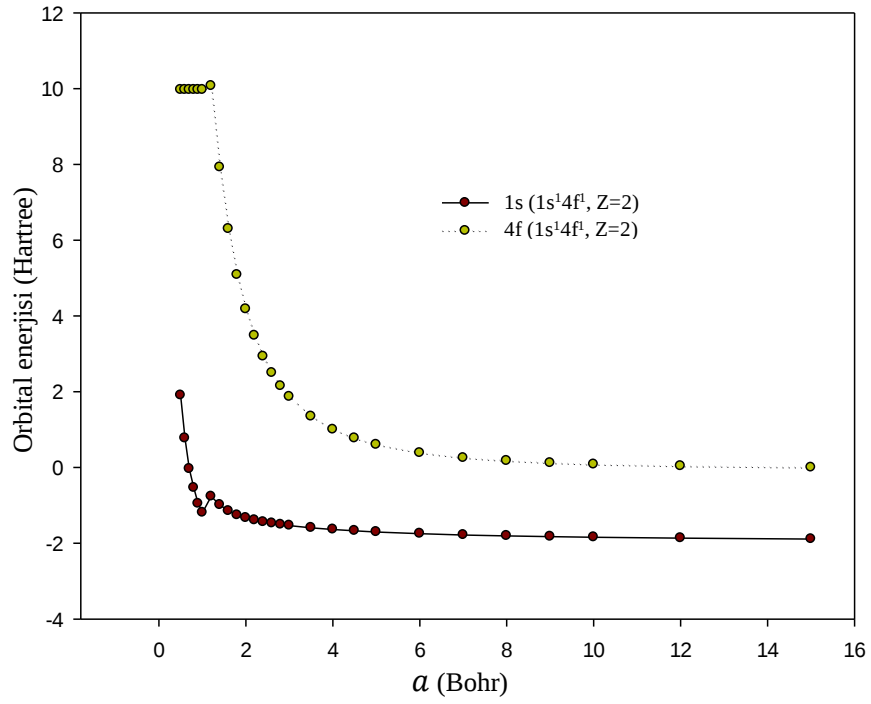
Şekil Ek 3.45. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların 1s ve 2p orbitallerinin orbital enerjileri



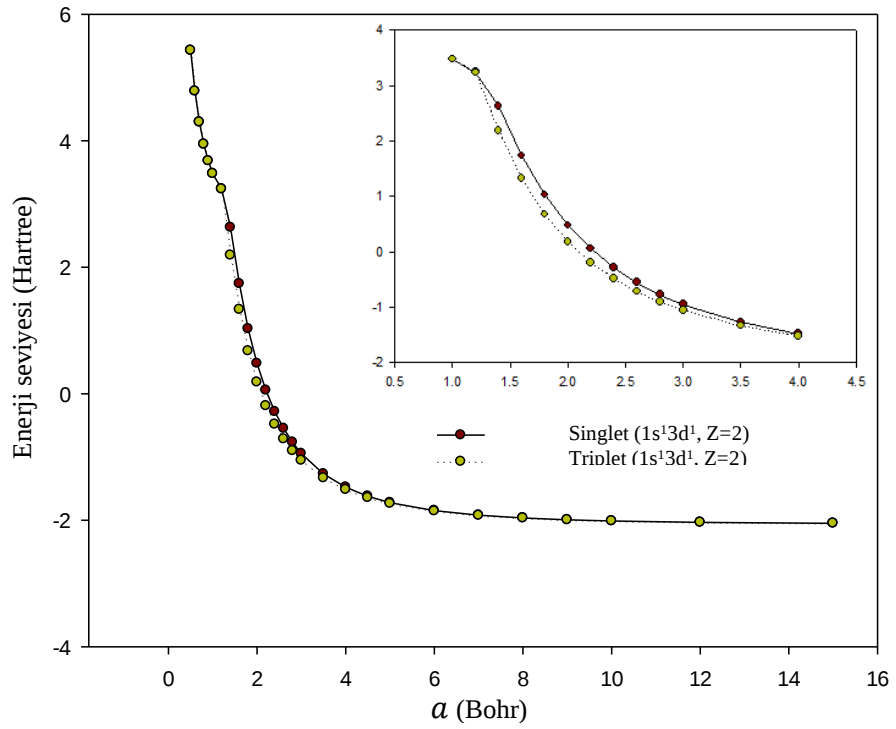
Şekil Ek 3.46. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s$ ve $4f$ orbitallerinin orbital enerjileri



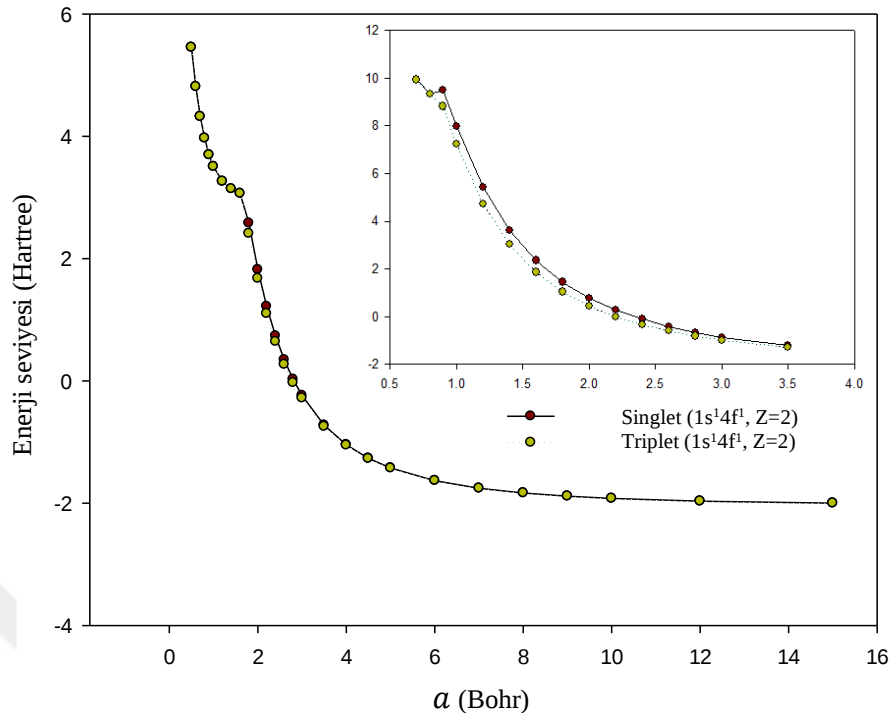
Şekil Ek 3.47. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s$ ve $2p$ orbitallerinin orbital enerjileri



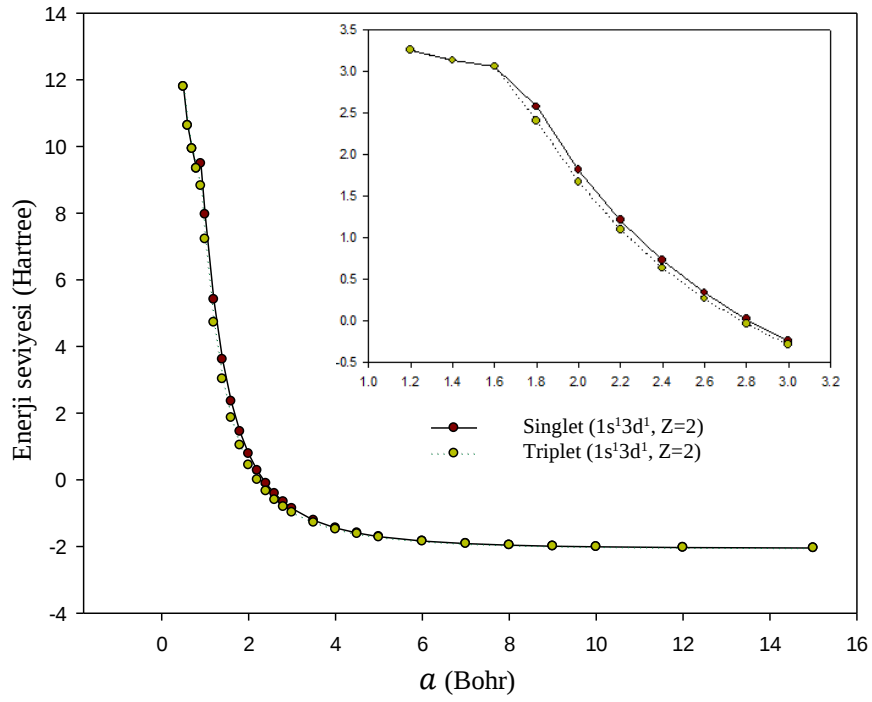
Şekil Ek 3.48. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s$ ve $4f$ orbitallerinin orbital enerjileri



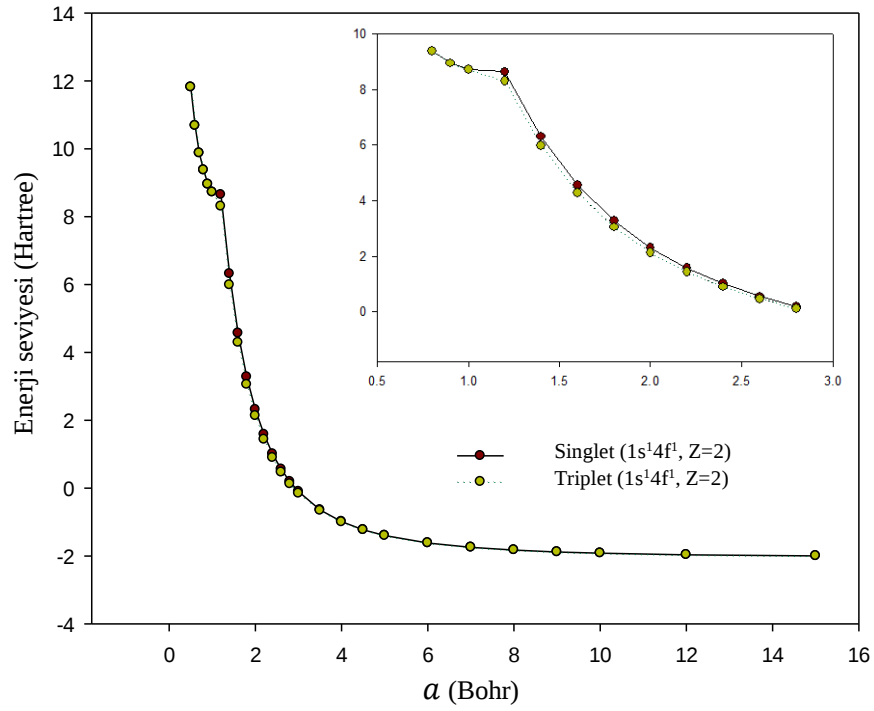
Şekil Ek 3.49. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 3d^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri



Şekil Ek 3.50. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=5$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 4f^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri



Şekil Ek 3.51. Sonlu potansiyel engeli ($V_C=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 3d^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri



Şekil Ek 3.52. Sonlu potansiyel engeli ($V_c=10$ Hartree) ile sınırlandırılmış iki elektronlu kuantum nokta yapıların $1s^1 4f^1$ konfigürasyonunun enerji seviyeleri

EK-4

Konfigürasyon: $1s^2 2s^1 3s^1$

Konfigürasyon ortalama enerjisi = -14.229778236154399

Safsızlık yükü = 4

Nokta yapı yarıçapı = 10

Virial katsayısı = -1.9612459023164148

İterasyon sayısı = 20001

Atomik orbitallerin üstelleri

s

0.2206284055D+01

0.1774177705D+01

0.9059512708D+00

0.8406304225D+00

0.3878566844D+01

0.6868724169D+00

0.8343504805D+00

Atomik orbitallerin açılım katsayıları

1s	2s	3s
0.1667255061D+01	0.1460299023D+01	-0.7220344321D+02
-0.1130820280D+01	0.2731392685D+01	0.9189978655D+02
0.2548309984D+01	0.6918222514D+00	-0.1977528803D+03
0.2148120370D+01	0.2371987360D+01	0.1324912291D+03
0.1336524423D+02	0.1444107172D+01	0.1166713920D+02
0.3091147630D+00	0.8932682253D+00	-0.1915498175D+02
-0.4613488969D+01	-0.6469580775D+01	0.5591617441D+02

Atomik orbitallerin kinetik enerjileri

1s	2s	3s
0.6730417E+01	0.7212002E+00	0.6214394E+00

Atomik orbitallerin nükleer potansiyel enerjileri

1s	2s	3s
-0.1466810E+02	-0.2455831E+01	-0.1477707E+01

Atomik orbitallerin Coulomb enerjileri

1 s	1 s	2.2718585724829441
1 s	2 s	0.55323070418071274
1 s	3 s	0.33264897459897691
2 s	3 s	0.26764663634638541

Atomik orbitallerin exchange enerjisi

1 s	2 s	3.76683229917273779E-002
1 s	3 s	2.03740922910022881E-002
2 s	3 s	3.34886909968057367E-002

Atomik orbitallerin toplam enerjisi

1 s	-4.8089619048518717
2 s	-0.41493517427782112
3 s	3.95585534344559120E-002

Konfigürasyonun enerji seviyeleri

¹ S	-14.179545199659476
³ S	-14.246522581653087

Konfigürasyon: $\text{He}1s^12p^1$

Virial katsayısı = -1.8790501031078024

Safsızlık yükü = 2.0000000000000000

Nokta yapı yarıçapı = 5.0000000000000000

Kuyu içinde sınırla potansiyeli = 0.0000000000000000

Kuyu dışında sınırla potansiyeli = 5.0000000000000000

Atomik orbitallerin üstelleri

s	p
0.1368814038D+01	0.7066884223D+00
0.1308446957D+01	0.6954515884D+00
0.1368447958D+01	0.3118011759D-02
0.1366431182D+01	0.7019984598D+00
0.2095050456D+01	0.6996576444D+00
0.2148093438D+01	0.1878873231D+01
0.1749558227D+01	0.2630399336D+01
0.1571703920D+01	0.2387329545D+01
0.2470697609D+01	0.1715654127D+01
0.1429355291D+01	0.3437316586D+01

Atomik orbitallerin açılım katsayıları

1s	2p
0.1800802889D+00	0.1032302786D+00
0.2383897030D-01	0.1787683959D+00
0.8418898630D-01	0.1672301206D-01
0.3636355269D+00	0.2583993202D+00
0.4891395451D+01	-0.1218962665D+01
0.2431783633D+00	0.2072646647D+00
0.3560219910D+00	0.3138078647D+00
0.4041607855D+00	0.3309538625D+00
0.4144479183D+00	0.2261574799D+00
0.7958464888D+00	-0.1224972297D+06

Elektronların kuyu içinde bulunma olasılığı

1s	2p
0.99999307E+00	0.99825836E+00

Elektronların kuyu dışında bulunma olasılığı

1s	2p
0.69277966E-05	0.17416449E-02

Atomik orbitallerin kinetik enerjileri

1s	2p
0.19065560E+01	0.42743200E+00

Atomik orbitallerin iç kinetik enerjileri

1s	2p
0.19065617E+01	0.43553094E+00

Atomik orbitallerin dış kinetik enerjileri

1s	2p
-0.57074488E-05	-0.80989371E-02

Atomik orbitallerin nükleer potansiyel enerjileri

1s	2p
-0.39044916E+01	-0.89248421E+00

Atomik orbitallerin iç nükleer potansiyel enerjileri

1s	2p
-0.39044890E+01	-0.89180866E+00

Atomik orbitallerin dış nükleer potansiyel enerjileri

1s	2p
-0.25848546E-05	-0.67554866E-03

Atomik orbitallerin sınırlama potansiyel enerjileri

1s	2p
0.34638983E-04	0.87082244E-02

Atomik orbitallerin Coulomb enerjisi

1s, 2p 0.43788147E+00

Atomik orbitallerin exchange enerjisi

1s, 2p 0.70657738E-01

Atomik orbitallerin toplam enerjisi

1 s -1.5953483802599375
2 p -3.02385719045224488E-002

Konfigürasyonların enerji seviyeleri

¹ P -1.9457057575545949
³ P -2.0870212340088403

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı : Celalettin Demir
Uyruğu : T.C
Doğum Yeri ve Tarihi :
Telefon :
Faks :
e-mail :

EĞİTİM

Derece	Adı, İlçe, İl	Bitirme Yılı
Lise	: Yunuskent Lisesi, Merkez, KARAMAN	2004
Üniversite	: Selçuk Üniversitesi, Meram, KONYA	2010
Yüksek Lisans	: Atatürk Üniversitesi, Yakutiye, ERZURUM	2015
Doktora	: Selçuk Üniversitesi, Selçuklu, KONYA	2022

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	Kurum	Görevi
2011	Milli Eğitim Bakanlığı	Öğretmen

UZMANLIK ALANI

Kuantum nokta yapılar

YABANCI DİLLER

İngilizce

BELİRTMEK İSTEĞİNİZ DİĞER ÖZELLİKLER

YAYINLAR

Demir, C., Yakar, Y., Çakır, B. ve Özmen, A., 2022, Excited state energies, orbital energies and virial coefficients in Confined multi-electron systems, *Journal of Luminescence*, 119185.

Yakar, Y., Çakır, B., Demir, C. ve Özmen, A., 2021, Energy states, oscillator strengths and polarizabilities of many electron atoms confined by an impenetrable spherical cavity, *International Journal of Quantum Chemistry*, 121 (13), e26658.

Yakar, Y., Çakır, B., Demir, C. ve Özmen, A., 2021, Relativistic effects in confined helium-like atoms, *Journal of Luminescence*, 239, 118346.