



T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

PERTÜRBASYON METODUYLA PARABOLİK POTANSİYEL KUANTUM NOKTA YAPIDA RÖLATİVİSTİK DÜZELTME TERİMLERİNİN HESAPLANMASI

Oğuzhan GÜNDÜZ

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Haziran-2014

KONYA

Her Hakkı saklıdır

ÖZET

YÜKSEK LİSANS

PERTÜRBASYON METODUYLA PARABOLİK POTANSİYEL KUANTUM NOKTA YAPIDA RÖLATİVİSTİK DÜZELTME TERİMLERİNİN HESAPLANMASI

Oğuzhan GÜNDÜZ

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç.Dr. Bekir ÇAKIR

2014, 58 Sayfa

Jüri
Danışmanın: Doç.Dr. Bekir ÇAKIR
Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN
Doç. Dr. Yusuf YAKAR

Bu çalışmada merkezinde hidrojen benzeri safsızlık bulunan parabolik potansiyele sahip düşük boyutlu kuantum nokta yapısında rölativistik düzeltme terimlerini incelendik. Sınırlandırıcı potansiyeli sonsuz küresel bir kuyu şeklinde göz önüne alındı. Taban ve bazı uyarılmış seviyelerin enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları Kuantum Genetik Algoritma (KGA) ve Hartree-Fock Roothaan (HFR) yöntemi kullanılarak hesaplandı. Tek elektron atomik orbitaller Slater tipi baz setlerinin lineer toplamı şeklinde oluşturuldu. Pertürbasyon metodunu kullanarak kinetik enerji gelen rölativistik düzeltme, Darwin ve Spin-Yörünge düzeltme terimleri dot yarıçapının fonksiyonu olarak hesaplandı. Hesaplamalarda rölativistik etkilerin safsızlığa ve dot yarıçapına güçlü bir şekilde bağlı olduğu görüldü.

Anahtar Sözcükler: Kuantum nokta yapı, parabolic potansiyel, relativistik düzeltme terimi. Kuantum genetik algoritma.

ABSTRACT

MS THESIS

CALCULATION OF RELATIVISTIC TERMS OF PARAPOLIC POTENTIAL QUANTUM DOT USING PERTURBATION METHOD

Oğuzhan GÜNDÜZ

THE GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCE OF SELÇUK UNIVERSITY

Advisor: Ass. Prof. Dr. Bekir ÇAKIR

2014, 58 Pages

Jury
Advisor: Ass. Prof. Dr. Bekir ÇAKIR
Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN
Ass. Prof. Dr. Yusuf YAKAR

In this study, we investigated the relativistic correction terms of a hydrogenic impurity located at the center of a spherical quantum dot with parabolic potential. We take into account the confinement potential by assuming a spherically symmetric potential well. The wave functions and energy eigenvalues have been calculated by using Quantum Genetic Algorithm(QGA) and Hartree-Fock Roothaan(HFR) method. One-electron atomic orbitals are expressed as linear combinations of unnormalized Slater type basis sets. The relativistic correction term to the kinetic energy, Darwin term and spin-orbit correction term have been computed as a function of dot radius. It is clearly seen that the relativistic effects depend strongly on the impurity and the size of quantum dot.

.

Keywords: Quantum dot, Parabolic potential, relativistic correction terms, Quantum Gentic Algorithm.

ÖNSÖZ

Düşük boyutlu nanometre ölçekli sistemler son zamanlarda Yoğun Madde Fiziği'nde yeni araştırma alanları açmıştır. Malzeme üretimi ve karakterizasyonu alanındaki önemli teknolojik gelişmeler, iki boyutlu (kuantum kuyuları), tek boyutlu (kuantum telleri) ve sıfır boyutlu (kuantum noktaları) kuantum mekaniksel sistemlerin (nano yapıların) üretilebilmesini mümkün hale getirmiştir. Bu tür nano ölçekli kuantum mekaniksel sistemler gerek ilginç fiziksel özellikleri, gerekse teorik olarak bilim adamlarına geniş bir ufuk açması bakımından özellikle son yıllarda büyük ilgi toplamaya başlamıştır.

Bu tür yapıların fiziksel özelliklerinin belirlenmesi için farklı yöntemler geliştirilmiştir. Kuantum mekaniksel yapı içerisinde parçacık sayısının az olması durumunda fiziksel özelliklerin salt teorik yöntemlerle belirlenebilmesi mümkün iken parçacık sayısı arttıkça çeşitli sayısal ve istatistiksel yaklaşımlara gerek duyulmaya başlanmıştır. Yaygın olarak kullanılan yöntemlerden birisi varyasyonel yöntemdir. Nano ölçekli kuantum mekaniksel sistemler, teknolojik açıdan büyük gelecek vaad eden yapılar oldukları için bu yapıların çeşitli fiziksel özelliklerinin daha iyi anlaşılması açısından bu çalışmanın nano yapılarla ilgili çalışmalara önemli katkısı olacağına ve bu alanda yapılan deneysel çalışmalara katkı sunacağına inanmaktayım.

Bu çalışma süresince bilgi ve tecrübesiyle bana yön veren ve yardımcı olan kendisiyle çalışmaktan dolayı kendimi şanslı hissettiğim değerli danışmanım Doç. Dr. Bekir ÇAKIR'a teşekkür ederim. Ayrıca bu çalışmada emeği geçen Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN'e çok teşekkür ederim.

Çalışmalarım sırasında her zaman beni destekleyen ve yanımda olan Dr. Teoman ÖZTÜRK'e ve Dr. Ahmet Emre KAVRUK'a teşekkür ederim.

Bugüne dek bana maddi ve manevi desteklerini esirgemeyen annem, babam ve kardeşime sonsuz saygı ve teşekkürlerimi sunarım.

Oğuzhan GÜNDÜZ

KONYA-2014

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **iv**

ABSTRACT ..... **v**

ÖNSÖZ ..... **vi**

İÇİNDEKİLER ..... **vi**

SİMGELER VE KISALTMALAR ..... **viii**

1. GİRİŞ **1**

2. DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR VE ÜRETME TEKNİKLERİ **8**

2.1. Kuantum Kuyuları 9
2.2. Kuantum Telleri 10
2.3. Kuantum Nokta Yapılar 12
2.4. Kuantum Nokta Yapıların Üretim Teknikleri 13
2.4.1. Asitle Yakma Yöntemi (Etching) 13
2.4.2. Ayarlanmış Elektrik Alan Yöntemi 13
2.4.3. Kuantum Kuyusu ve Bariyer Arasında İç Difüzyon Yöntemi 14
2.4.4. Yarıiletken Mikrokristaller 15
2.4.5. Seçici Büyütme Yöntemi 15
2.4.6. Kendiliğinden Büyüme 16

3. KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ **17**

3.1. Sonsuz Küresel Simetrik Parabolik Potansiyelde Kuantum Nokta Yapının Elektronik Özellikleri 18

4. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ **21**

4.1. Yeniden Oluşum (Üretme) 21
4.2. Çaprazlama (Crossover) 22
4.3. Mutasyon 23

5. RÖLATİVİSTİK DÜZELTME TERİMLERİ **25**

6. HESAPLAMALAR, SONUÇLAR VE ÖNERİLER **28**

KAYNAKLAR **42**

ÖZGEÇMİŞ **49**

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

I :	Akım
j :	Akım yoğunluğu
k_B :	Boltzmann sabiti
$\vec{k}$:	Dalga vektörü
λ :	Dalga boyu
ψ :	Dalga fonksiyonu
ε :	Dielektrik sabiti
$\vec{E}$:	Elektrik alan
n_e :	Elektron yoğunluğu
e :	Elektron yükü
E :	Enerji özdeğeri
m^* :	Etkin kütle
υ_g :	Grup hızı
H_D :	Darwin terimi
H_K :	Rölativistik düzeltme terimi
H_{so} :	spin-yörünge düzeltme terimi
$\hbar$:	İndirgenmiş Planck sabiti
m_0 :	Elektron kütlesi
$\delta(\vec{r})$:	dirac delta fonksiyonu

Kısaltmalar

2BEG:	İki Boyutlu Elektron Gazı
MDE:	Moleküler Demet Epitaksi
GA :	Genetik Algoritma
KGA:	Kuantum Genetik Algoritma
MOCVD :	Metal-Organic Chemical Vapor Deposition
MOVPE:	Metal-Organic Vapor Phase Epitaxy
HFR :	Hartree-Fock Roothaan
MOS:	Metal oxide semiconduktor
MOSFET:	Metal oxide semiconduktor field effect transistor
QDIP:	Quantum dot infrared photo dedektor
DFT :	Yoğunluk Fonksiyon Teorsi
STO:	Slater Tipi Orbital
HSF :	Hiller, Sucher ve Feinberg

Şekiller dizini	Açıklama
Şekil 2.1	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)
Şekil 2.2	Bir kuantum kuyusunun şematik gösterimi
Şekil 2.3	İki boyutta hareketi sınırlı, tek boyutta serbest olan bir kuantum telinin şematik gösterimi
Şekil2.4	Kuantum nokta yapısının şematik gösterimi
Şekil 4.1	Rulet çarkının şematik gösterimi
Şekil 4.2	Çaprazlama işleminin şematik gösterimi
Şekil 4.3	İkilik kodlar üzerinden çaprazlama işlemi
Şekil 6.1	Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış seviyelerin enerjilerinin dot yarıçapına göre değişimi
Şekil 6.2	Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış seviyeleri için kütle-hız düzeltme teriminin dot yarıçapına göre değişimi.
Şekil 6.3	Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumlarının Darwin enerji düzeltmelerinin kuantum nokta yarıçapına göre değişimi.
Şekil 6.4	Bir elektronlu kuantum nokta yapının bazı seviyelerinin Spin-yörünge etkileşim terimlerinin dot yarıçapına göre değişimi.

Tablolar dizini	Açıklama
Tablo 6.1a	Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış s-orbitallerinin rölativistik olmayan beklenen enerjisi nokta yapının yarı çapına bağlı olarak hesaplanan değerleri.
Tablo 6.1b	Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış s-orbitallerinin rölativistik olmayan beklenen enerjisi nokta yapının yarı çapına bağlı olarak hesaplanan değerleri
Tablo 6.2	Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış seviyeleri için kütle-hız enerji düzeltme teriminin dot yarıçapına göre değerleri.
Tablo 6.3	Bir elektronlu kuantum nokta yapının bazı uyarılmış seviyeleri için kütle-hız enerji düzeltme teriminin dot yarıçapına göre değerleri.
Tablo 6.4	Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış s enerji seviyeleri için Darwin Enerji düzeltme değerleri
Tablo 6.5	Bir elektronlu kuantum nokta yapının bazı uyarılmış (*nl*) enerji seviyeleri için Darwin enerji düzeltme değerleri
Tablo 6.6	l=1 seviyeleri için Spin-Yörünge Enerji düzeltmeleri
Tablo 6.7	Bazı uyarılmış enerji seviyeleri için (l=2,3) Spin-Yörünge Enerji düzeltmeleri

1. GİRİŞ

Elektriğin keşfinden sonra bazı malzemelerin iyi bir iletken, bazı malzemelerin de kötü bir iletken olduğu anlaşıldı. Malzemeler elektrik yükü taşımalarına göre; iletkenliği 10^4-10^6 $(\Omega.cm)^{-1}$ aralığında olan malzemeler iletken, iletkenliği 10^{-10} $(\Omega.cm)^{-1}$ den daha az olan malzemeler de yalıtkan, iletkenliği 10^4 -10^{-10} $(\Omega.cm)^{-1}$ aralığında olan bazı katılar da yarı iletken olmak üzere üç sınıfa ayrılırlar. Yalıtkanlar çok yüksek sıcaklıklarda iletkenlik özelliği kazanırken, yarı iletkenler oda sıcaklığında elektriksel iletkenlik kazanırlar. 1873 yılında selenyumun fotoiletkenliğinin keşfedilmesiyle yarı iletken bilimi başlamış oldu (Smith 1873). Daha sonra 1940'lı yılların sonunda farklı fiziksel ve kimyasal özelliklere sahip yeni bir aygıt olan transistörün ortaya çıkmasıyla yarı iletken biliminde yeni bir dönem başladı (Bardenn ve Brattain 1948, Shockleey 1949). Hall ve arkadaşları (1962) tarafından yarı iletken lazerin icat edilmesi, birbirinden farklı en az iki yarı iletken kullanılarak oluşturulan heteroeklemlerin ortaya çıkışı (Anderson 1962) 1960 yıllarda kuantum mekaniğinin katıhal elektroniği üzerinde daha etkin bir rol oynamasına neden olmuştur.

Haberleşme ve iletişim teknolojilerinde gözlenen yoğun talep ve değişik özel uygulamaların ivme kazandırdığı deneysel ve teorik çalışmalar, yaklaşık yarım yüzyıldır yarı iletken malzeme bilimindeki ve teknolojisindeki gelişmelere büyük bir hız kazandırmıştır. Bununla birlikte hafıza ve hesaplama sistemlerine olan yoğun talep, sinyal iletim ve çalışma hızlarının yükseltilmesi yönündeki araştırmalar, yeni mikroelektronik ve optoelektronik aygıtların geliştirilmesine zemin hazırlanmıştır.

Yakın bir geçmişe kadar mikroelektronik tümüyle yüksek bir mekanik kararlılığa sahip, ısısal iletkenliği yüksek ve üretimi nispeten kolay bir malzeme olan Silisyum temelli bir bilim dalıydı. Çünkü bu tür malzemeler çok küçük yasak enerji aralığına sahip olduğundan pratik uygulamalar için oldukça elverişlidir. Sahip olduğu

bu eşsiz özellikler nedeniyle farklı elementlerle, alaşım ve katkı yapılarak çok farklı elektronik özelliklere sahip tek-kristal, polikristal ve amorf formlarda malzemeler üretilebilmektedir. Bu malzemelerde silisyumun yaygın olarak entegre devre teknolojisinde kullanılmaktadır.

Yarı iletken aygıtlar üzerinde kuantum sınırlandırmasının etkileri ile ilgili tartışmalar 1950 li yıllarda başlar. Schrieffer (1957) bir potansiyel kuyu içerisinde hapsedilmiş elektronların klasik olarak davranamayacaklarını ve bu elektronların enerji seviyelerinin sınırlandırmanın olduğu boyutta kesikli değerler alacağını ileri sürmüştür. 1975 yılında Cho ve Arthur (1975) tarafından moleküler demet kaplama (Molecular Beam Epitaxy (MBE)) yönteminin bulunuşu çoklu eklem kuantum yapılarında önemli gelişmelere ışık tutmuştur.

Kuantum kuyusu olarak adlandırılan iki boyutta sınırlandırılmış elektronik yapılar, daha yüksek iletim bandı enerjisine sahip aynı iki düzlem yarı iletken tabaka arasına düşük bant aralıklı yarı iletken bir düzlem tabakanın eklenmesiyle elde edilir. Kuantum kuyusunun çok ince bir yapıya sahip olması ve elektronun bu yapı içinde tutulması sistemin elektronik özelliklerinin incelenmesi açısından araştırmacıların ilgisini çekmiştir. Bu da yarı iletken teknolojisinin hızlı bir şekilde gelişmesine yol açmıştır.

Literatürde kuantum kuyularının enerji seviyelerinin kesikli olduğuna dair yapılmış çok sayıda çalışma vardır(Esaki ve Tsu 1970, Chang ve ark. 1974, Dingle ve ark. 1974, Dingle ve ark. 1978). Kuantum kuyusunun sınırlanması etkisine dayalı olarak çalışan rezonans tünelleme diyodu (Chang ve ark. 1974) ve kuantum kuyu lazeri (van der Ziel ve ark. 1975) optoelektronik cihazların ilk örnekleri olarak verilebilir.

İnce film büyütme tekniklerindeki gelişmeler, özellikle elektron demeti ve x-ışını litografisi gibi hassas malzeme üretim ve analiz tekniklerinin gelişimi, farklı

boyutlarda ve şekillerde kuantum yapılarının üretilmesine imkan sağlamıştır. Kısa zaman içerisinde bu gelişmeler kuantum tel olarak adlandırılan tek boyutlu yapıların üretilmesine olanak sağlamıştır(Petroff ve ark. 1982, Smith 1987, Hansen 1987). Kuantum kuyu ve kuantum tel aygıtlarındaki ilerlemeler, sınırlandırılmış sistemlerin elektronik yapılarının hesaplanmasında büyük bir ilgi odağı oluşturmuştur. Teknolojide, özellikle çok hassas litografik tekniklerdeki hızlı gelişmeler, elektronların tek boyutlu yapıda sınırlandırılmasına ve dolayısıyla kuantum tel yapıların üretilmesine imkan sağlamıştır(Petroff 1982). Kuantum telleri teknolojik olarak litografik yöntemlerle kuantum kuyusu içeren bir malzemeden çok dar şeritler kesilerek veya elektromanyetik yöntemle elektron hareketi kısıtlanarak elde edildi (Tandon ve Khokle 1994). Bu yapıların enine boyutları kuantum kuyusunun derinliğinden önemli ölçüde daha büyüktür (Jacak 1998). Kuantum telleri, yaygın olarak MOS ve MOSFET yapıların üretiminde kullanılmaktadır (Lai 1986). Ayrıca bu yapılarda kuantumlu balistik direnç etkisi gözlenmiştir(van Wees 1988).

Elektronların serbest hareketinin tüm boyutlarda sınırlandırılması, kuantum nokta yapıları olarak adlandırılan sıfır boyutlu nano yapıların ortaya çıkmasına yol açmıştır. İlk kuantum nokta yapısı Reed ve ark. (1986) tarafından üretilmiş olup, 250 nm kenar uzunluğu olan kare biçiminde bir geometrik yapıya sahiptir. Daha sonra 30-45 nm boyutlarına kadar kuantum nokta yapıları farklı geometrik (kübik, ellipsoid, küresel ve piramit) şekillerde üretilmiştir (Cibert ve ark. 1986, Temkin ve ark. 1987, Bimberg ve ark. 1999). Bu dönemde sıfır boyutlu nano yapılar olarak adlandırılan kuantum nokta yapıları daha çok teorik olarak çalışılmış ve sonrasında deneysel olarak gerçekleştirilmiştir (Ashoori ve ark. 1992, Murray ve ark.1993, Katari ve ark. 1994). Kuantum nokta yapılar çok verimli ve tam kontrol edilebilir laserlerin yapımında kullanıldı (Reed 1993). Böyle yapıların şekil ve boyutlarının deneysel olarak kontrol

edilebilmesi teknolojik uygulamada çok geniş bir alan açmıştır (Kouwenhoven ve Marcus 1998).

Tüm boyutlarda güçlü bir sınırlandırma sonucu elde edilen kuantum nokta yapıları kesikli enerji seviyelerine ve kabuk yapılarına sahip olduklarından dolayı yapay atom olarak da adlandırılırlar (Maksym ve Chakraborty 1990, Fujito ve ark. 1996). Üretilme aşamasında bu yapıların şekilleri, boyutları, enerji seviyeleri ve sınırlandırdıkları elektron sayıları kontrol edilebilir olduğundan teknolojik olarak daha ilgi çekicidir. Kuantum nokta yapıları kullanılarak kızıl ötesi foto dedektörler (QDIP), tek elektron transistorler, hafıza elemenları ve kuantum bilgisayarları gibi cihazlar geliştirilmeye başlanmıştır(Ryzhii 1996, Nomoto ve ark. 1998, Choi ve ark. 1998, Yusa ve Sakaki 1999, Gammon 2000, Sim ve ark. 2004).

Kuantum nokta yapılarının fiziksel özelliklerini inceleyen çok sayıda teorik ve deneysel çalışmalar yapılmıştır. Bu çalışmalarda farklı hesaplama yöntemleri ve dalga fonksiyonları kullanılmıştır. Bu yöntemlerden birisi varyasyonel yöntem olup, bu tür kuantum mekaniksel yapıların incelenmesinde yoğun bir şekilde kullanılmaktadır: 1980 yıllarda Bastard (1984) hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisini varyasyonel yöntemle hesaplamıştır. Marin ve Cruz (1991) direkt varyasyonel metodunu kullanarak sonsuz küresel bir kuyuda sınırlandırılmış hidrojen atomu ve harmonik salınıcı gibi sistemlerin Shrödinger denklemlerine karşılık gelen çözümlerini bularak, enerji seviyelerini belirlemiştir. Brownstein (1993) sınırlandırılmış sistemlerin enerji özdeğerlerini Gauss teoremini kullanarak lineer varyasyon yöntem ile hesaplamıştır. Varshni (1999,2001) varyasyonel yöntemle küresel kuantum nokta yapının ve merkezindeki bir safsızlığın taban durum enerjilerini basit bir dalga fonksiyonu ile hesapladı. Slater Tipi Orbitalleri kullanarak Szafran ve ark. (1998,1999) iki ve üç elektronlu kuantum nokta yapısının elektronik özelliklerini inceledi. Bednarek ve ark.(1999, 2001) ve McCharty (2001)

Gauss Tipi Orbitalleri kullanarak çok elektronlu kuantum nokta yapının elektronik yapısını lineer varyasyonel yöntemle incelemişlerdir. Hartree-Fock yöntemini kullanarak (Jaskolski 1996, Connerade ve ark. 2000, Reusch ve Grabert 2003), yoğunluk fonksiyonel teorisini (DFT) kullanarak (Lee ve ark. 1998, Şahin ve Tomak 2005), Monte-Carlo yöntemini kullanarak (Ceperley 1978, Sim ve ark. 2004), pertürbasyon yöntemini kullanarak (Bose ve Sarkar 1998) çeşitli kuantum nokta yapılarının fiziksel özelliklerini incelediler.

Tek elektronlu ya da çok elektronlu kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerini araştırmak için varyasyon yöntemi, pertürbasyon yöntemi, matris köşegenleştirme yöntemi, yoğunluk fonksiyonel teorisi, Hartree-Fock yöntemi gibi birçok değişik teknik kullanılmaktadır. Her bir yöntemin, ele alınan probleme ve yapılmak istenen hesaplamalara bağlı olarak birbirinden daha etkin, daha başarılı olduğu durumlar vardır. Böyle durumlarda da birden çok tekniğin, problemin farklı aşamalarında ayrı ayrı veya birlikte kullanılması gerekebilir. Son zamanlarda nano yapılı sistemlerin elektronik yapılarının ve fiziksel özelliklerinin incelenmesinde en iyileme yöntemi olan KGA tekniği kullanılmaya başlanmıştır. GA, ortama iyi uyum sağlayan bireylerin hayatta kalması ve sağlayamayan bireylerin ise elenmesi olarak tanımlanabilir. GA tekniği ilk kez Holland (1975) tarafından kullanılmış olup, mühendislik ve malzeme biliminde yaygın olarak kullanılmaktadır(Venugopal ve Narendran 1992, Homair ve ark. 1994, Sahin ve ark. 2000, Kulkarni ve ark. 2004, Castro ve ark. 2004). Kuantumlu yapılarda kullanıldığında KGA olarak da adlandırılan bu yöntem varyasyon yönteminde olduğu gibi enerji minimizasyon ilkesine dayanır ve son zamanlarda fiziğin bir çok alanında, özellikle kuantum mekanik sistemlerin elektronik yapılarının belirlenmesinde kullanılmaya başlanılmıştır(Grigorenko ve Garcia (2000, 2001, 2002), Nakanishi ve Sugawara 2000, Saha ve ark. 2001, Chaudhury

ve Bhattacharyya 1998, Sahin ve Tomak 2002, Şafak ve ark. 2003, Şahin ve Tomak 2005, Çakır ve ark. 2006, Çakır ve ark. 2007, Yakar ve ark.2011)

Bu çalışmalardan Grigorenka ve Garcia Gaussian benzeri bir dalga fonksiyonu formunu ele alarak quantum sistemlerin taban ve birinci uyarılmış durum enerjilerini ve dalga fonksiyonunu hesapladılar. Şahin ve ark. (2003,2005) sonsuz ve sonlu potansiyelle sınırlandırılmış küresel kuantum nokta yapısının elektronik özelliklerini tek parametreli Gauss tipi dalga fonksiyonu kullanarak incelediler. Çakır ve ark. (2006,2007) kuantum genetik algoritma yöntemiyle HFR yönteminin birleşimini kullanarak, sonsuz derinlikli küresel simetrik sınırlayıcı potansiyele sahip merkezinde hidrojen ve helyum benzeri safsızlık bulunan bir ve iki elektronlu kuantum nokta yapısının elektronik özelliklerini Slater Tipi Orbitaller (STO) üzerinden incelediler.

Yakar ve ark. (2012) iki elektronlu farklı çekirdek yüklü sonsuz küresl potansiyelle sınırlandırılmış kuantum nokta yapısının bazı seviyelerin enerjilerini ve iyinlaşma enerjilerini hesapladılar. Bazı yazarlar (Özmen ve ark 2009, Yakar ve ark.2010, Yakar ve ark. 2010, Çakır ve ark.2010) bir elektronlu küresel kuantum nokta yapıların lineer ve nonlineer optiksel özelliklerini, rölativistik düzeltme terimlerini (Yakar ve ark. 2013, Özmen ve ark 2013), off-center problemini (Yakar ve ark. 2013) ve elektrik alan etkilerini(Çakır ve ark. 2013) araştırmışlardır.

Bu tez çalışmamızda KGA yöntemiyle bir elektronlu parabolik kuantum nokta yapısının taban ve bazı uyarılmış seviyelerin enerjileri ve dalga fonksiyonları belirlenecek. Belirlenen bu enerji değerleri ve dalga fonksiyonları kullanılarak, bir elektronlu parabolik kuantum nokta yapısının enerji seviyelerine rölativistik enerji düzeltme terimlerinin katkısını pertürbasyon yöntemiyle incelenecek.

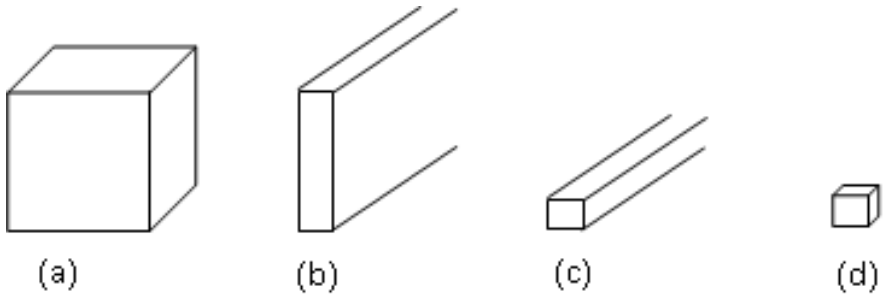
Bu yüksek lisans tezinin 2. bölümünde düşük boyutlu yapılar hakkında genel bir bilgi vererek, bu yapıların üretme tekniklerinden bahsedilmiştir. 3. bölümde sonsuz küresel simetrik potansiyele sahip kuantum nokta yapının elektronik özelliklerinden bahsedilmiştir. 4.Bölümde sonsuz küresel simetrik parabolik potansiyelli bir kuantum nokta yapının enerji özdeğerleri ve özfonksiyonlarının hesaplama tekniğinden bahsedilmiştir. 5. bölümde ise rölativistik düzeltme terimlerinden bahsedilmiş ve kuantum nokta yapı için analitik ifadeleri verilmiştirç VI. Bölümde sonuçlar ve öneriler verilmiştir.

2. DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR VE ÜRETME TEKNİKLERİ

Doğadaki yapılar, boyutlarına göre üç ana başlık altında incelenebilir. Bunlar; mikroskopik yapılar, makroskopik yapılar ve düşük boyutlu yapılardır.

Mikroskopik yapıları tanımlamak için kullanılan birimler genellikle mikrometre (μm) mertebesindedir. Makroskopik yapılar klasik mekaniğin sınırları içinde tanımlanır. Düşük boyutlu yapılar ise bu iki ölçek arasında bulunmakta olup sistemin boyutlarından en az birisi; ortalama serbest yol, Fermi dalga boyu ve faz durulma mesafesinden küçük olmalıdır. Ortalama serbest yol, bir elektron çarpışmadan sonra momentumunu değiştirmeden gidebileceği maksimum mesafe olarak tanımlanır. Fermi dalga boyu, elektronların kinetik enerjisi ile ilgilidir, yarıiletkenler için 10-100 nm mertebesinde metaller için ise 1nm den daha düşüktür. Faz durulma mesafesi ise elektronlar arasındaki faz dengesinin bozulmaya uğradığı mesafedir.

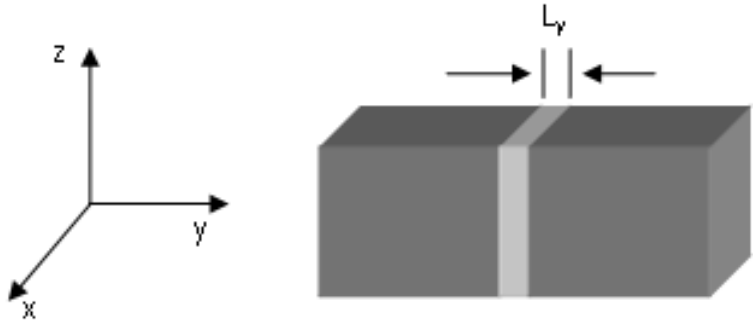
Düşük boyutlu yapılar, sistemin uzayın bir bölgesine sınırlandırılması ile oluşturulabilir. Yani bu tür sistemlerde elektronların iki veya daha az boyutta hareketi serbesttir. Boyut sayısına bağlı olarak sistemdeki elektronların hareketlerinin sınırlandırıldığı nano yapılar: Üç boyutlu bulk malzemeleri, Kuantum kuyuları (quantum wells), Kuantum telleri (quantum wires) ve Kuantum noktaları (quantum dots) olmak üzere 3 ayrı grupta sınırlandırılabilir. Bu yapılar Şekil 2.1'de gösterilmiştir.



Şekil 2.1 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) (Çakır 2007)

2.1. Kuantum Kuyuları

Elektronun hareketinin sadece bir boyutta sınırlandırıldığı, diğer iki boyutta hareketin serbest olduğu yapılara **kuantum kuyuları** denir. Bu yapılar, yasak enerji band aralığı farklı olan malzemeler arasındaki arayüzeyde şekillenir. Elektronların sadece iki boyutta serbest hareket edebildiği böyle yapılara iki boyutlu elektron gazı (2BEG) da denir. Sekil 2.2 de bir sınırlandırmanın sadece y-doğrultusunda olduğu bir kuantum kuyusu şematik gösterilmiştir. Sınırlandırma sadece y-doğrultusunda olduğundan kuantum etkisi sadece bu doğrultuda görülür.



Şekil1.2.2 Bir kuantum kuyusunun şematik gösterimi(Çakır 2007).

Elektron *y*-doğrultusunda sadece L_y aralığında hareket edebilirken, *x* ve *z* doğrultusunda herhangi bir sınırlandırmanın olmadığı böyle bir yapı için dalga fonksiyonu

$$\psi(x,y,z) = \exp(ik_x x + ik_z z) f(y) \qquad (2.1)$$

şeklinde yazılabilir. Burada k_x ve k_z sırasıyla x ve z yönündeki dalga vektörü bileşenleridir. $f(\mathrm{y})$ ise elektronun hareketinin sınırlandırıldığı yöndeki dalga fonksiyonudur.

Schrödinder denkleminin en genel hali

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla^2\right)\psi + V\psi = E\psi \qquad (2.2)$$

şeklindedir.

Burada Kartezyen koordinatlarda Laplasyen

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{2.3}$$

şeklinde olup Denk.(2.2)'de V sınırlayıcı potansiyeli için V_y alınıp yeniden yazılırsa

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi + V_y\psi = E\psi \tag{2.4}$$

denklemi elde edilir. Denk.(2.1) kullanılarak gerekli düzenlemeler yapılırsa

$$\frac{d^2 f(y)}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E_y - V_y) f(y) = 0 \tag{2.5}$$

denklemi elde edilir. Burada E_y ve V_y sırasıyla, y yönündeki harekete karşılık gelen enerji özdeğerleri ve sınırlayıcı potansiyeldir. Sınırlayıcı potansiyel sınırlarda sonsuz yükseklikte alınırsa, kuyu içinde V_y=0 olur. Kuyu sınırlarında sınır şartları uygulandığında $\vec{k}$ dalga vektörünün y bileşeni

$$k_{n_y} = \frac{n_y \pi}{L_y} \tag{2.6}$$

şeklindedir ve n_y bir tamsayıdır. Bu durumda kuyu içindeki enerji özdeğerleri

$$E_{n_y} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_y \pi}{L_y}\right)^2 \tag{2.7}$$

ile verilir. Bu durumda parçacığın toplam enerjisi, x ve z doğrultularındaki enerji bileşenleri de katılarak

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_z^2 + \left(\frac{n_y \pi}{L_y}\right)^2\right) \tag{2.8}$$

şeklinde yazılabilir.

2.2. Kuantum Telleri

Elektronların hareketlerinin iki boyutta y ve z doğrultusu sınırlı, tek boyutta x-doğrultusunda serbestçe hareket edebildiği sistemlere kuantum telleri denir. Şekil 2.3 de böyle bir sistem içindeki elektron x-yönünde serbestçe hareket edeceğinden elektrona eşlik eden dalga fonksiyonu

$$\psi(x, y, z) = \exp(ik_x x) f(y, z) \tag{2.9}$$

biçiminde yazılabilir. Burada $f(\mathrm{y},\mathrm{z})$ sınırlandırmanın olduğu yönlere karşılık gelen dalga fonksiyonudur.

Denk.(2.9), (2.4) denkleminde yerine koyulup sınırlayıcı potansiyel için $V(y,z)$ alınıp gerekli düzenlemeler yapılırsa sınırlandırmanın olduğu y ve z doğrultuları için Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}\right)\phi(y,z)+V(y,z)\phi(y,z)=E_{y,z}\phi(y,z) \qquad (2.10)$$

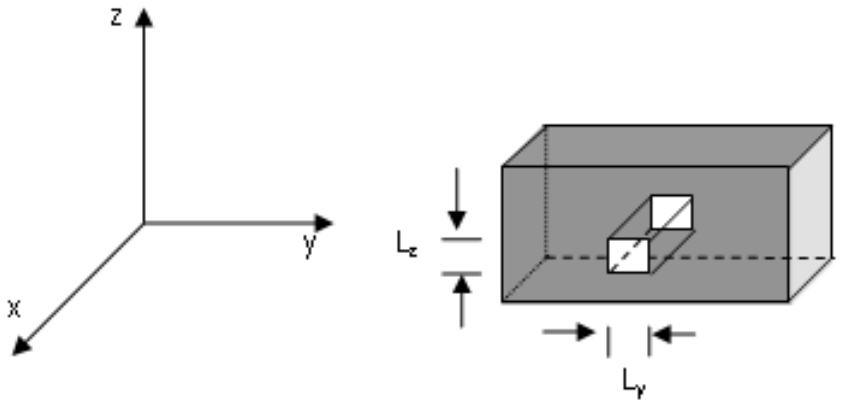
biçiminde yazılır. y ve z doğrultuları için sınırlayıcı potansiyelleri sonsuz yüksek alırsak kuyu içinde $V(\mathrm{y},\mathrm{z})=0$ olur. Bu durumda sınır şartları dalga fonksiyonuna uygulanırsa

$$k_{n_y}=\frac{n_y\pi}{L_y}, \quad \text{ve} \quad k_{n_z}=\frac{n_z\pi}{L_z} \qquad (2.11)$$

elde edilir ve kesikli enerji özdeğerleri

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2+\left(\frac{n_y\pi}{L_y}\right)^2+\left(\frac{n_z\pi}{L_z}\right)^2\right) \qquad (2.12)$$

şeklinde ifade edilir.



Şekil 2.3 İki boyutta hareketi sınırlı, tek boyutta serbest olan bir kuantum telinin şematik gösterimiÇakır 2007)

2.3. Kuantum Nokta Yapılar

Elektron hareketlerinin üç boyutta sınırlandırıldığı hetero yapılara kuantum nokta yapıları denir. Şekil 2.4 te bir kuantum nokta yapısı şematik olarak gösterilmiştir.Kuantum nokta yapı için Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dx^2}+\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}\right)\phi(x,y,z)+V(x,y,z)\phi(x,y,z)=E\phi(x,y,z) \qquad (2.13)$$

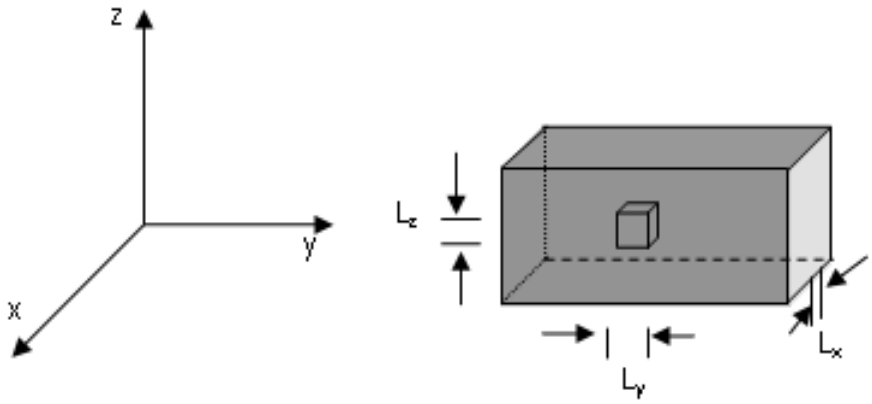
biçiminde yazılabilir. tüm boyutlardaki sınırlandırıcı potansiyeli sonsuz alırsak kuyu içinde V(x,y,z)=0 olur. Sınır şartlarından dalga vektörü bileşenleri

$$k_{n_x}=\frac{n_x\pi}{L_x} \quad , \quad k_{n_y}=\frac{n_y\pi}{L_y} \quad \text{ve} \quad k_{n_z}=\frac{n_z\pi}{L_z} \qquad (2.14)$$

şeklindedir. Enerji özdeğerleri ise

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\left(\frac{n_x\pi}{L_x}\right)^2+\left(\frac{n_y\pi}{L_y}\right)^2+\left(\frac{n_z\pi}{L_z}\right)^2\right) \qquad (2.15)$$

şeklinde elde edilir.



Şekil 2.4 Kuantum nokta yapısının şematik gösterimi(Çakır 2007)

2.4. Kuantum Nokta Yapıların Üretim Teknikleri

Kuantum nokta üretim teknikleri pek çok yöntem içermekte olup, bu kısımda bunların bazılarından bahsedeceğiz.

2.4.1. Asitle Yakma Yöntemi (Etching)

Kuantum nokta yapıların üretiminde kullanılan ilk yöntem, Reed ve ark. (1986) tarafından uygulanmış olan asitle yakma yöntemidir, bu işlem iki boyutlu elektron gazı içeren bir yapıda yapılmıştır. Bu yöntemde ilk önce bir ya da birden fazla kuantum kuyusunu içeren bir numunenin yüzeyi polimer bir maskeyle kaplanır. Sonra polimer maske elektron veya iyon demetine maruz bırakılır. Maruz bırakılan numune oluşturulan nano yapının şekline karşılık gelir. Yüksek çözünürlük gerektiği için maske görünür ışığa maruz bırakılmaz. Maruz kalan bölgelerden maske çıkartılır. Bir sonraki aşamada ise numunenin yüzeyi ince bir metal tabakayla kaplanır. Özel bir solüsyon kullanılarak polimer film ve koruyucu metal tabaka çıkartılır ve temiz bir numune yüzeyi elde edilir. Daha sonra metal maskeyle korunmamış bölgelerin kimyasal yakma ile aşındırılmasıyla kuantum kuyu parçaları içeren ince sütunlar/yarıklar oluşturulur.

Bu yolla ilk başta kuantum kuyusunun düzlemine sınırlanmış elektronların hareketi 10-100 nm civarındaki bir yarıçapla küçük bir yarığa daha da sınırlanır (Jacak ve ark. 1998).

2.4.2. Ayarlanmış Elektrik Alan Yöntemi

Bu yöntem, kuantum kuyusu yüzeyi üzerine litografik teknikler yoluyla çok küçük elektrotlar yerleştirilmesi esasına dayanan bir yöntemdir. Elektrotlara uygun bir gerilimin uygulanması, elektronların hareketini küçük bir alana sınırlayan uzaysal olarak ayarlanmış bir elektrik alan oluşturur. Bu yolla oluşturulan enine sınırlama, kimyasal yakma yönteminde oluşan kenar kusurlarını göstermez. Kimyasal yakma ile elde edilmiş kuantum nokta civarında bir kapı oluşturulabilir, böylelikle en azından kenar kusurlarının yok edilmesi ve elektronların biraz daha ezilmesi sağlanabilir.

Bir kuantum kuyusunun yüzeyi boyunca ince bir elektrodu yayma işlemi, hem tek kuantum noktaları hem de noktaların geniş dizilimlerini oluşturabilir. Elektroda uygulanan bir gerilimle üretilen elektriksel potansiyelin ayarlanması, numunenin

yüzeyinde metal olmayan malzeme adacıklarının düzenli bir sırasının hazırlanmasıyla (litografik bir teknik kullanarak) anlaşılabilir. Sonuç olarak, elektrot (adacıklı yüzey boyunca uzanan ve kuantum kuyusunun düzlemi arasındaki mesafe ayarlanır ve elektronlar hazırlanan adacıklar altında küçük alanlarda sıçrama yaparlar/sekerler. Elektrot ve kuyu arasındaki mesafeyi ayarlamak yerine kuyunun üzerinde bir çift paralel ince elektrot yerleştirmek mümkündür. Alttaki elektrot düzenli bir şekilde kuantum noktalarının yaratıldığı deşiklere yerleştirilebilir. Eğer elektrot çiftine bir gerilim uygulanırsa, sonuç hem nokta boyutunda hem de sınırlayıcı potansiyelin derinliğinde bir değişimdir. Potansiyel derinliği sınırlayıcı elektronların sayısını etkiler. Ancak ilave elektrot kuantum kuyu tabakası ve katkılanmış tabaka arasına yerleştirilirse, elektronların sayısı ve potansiyel derinliği bağımsız olarak değişebilir.

Elektronları, elektrotlar ile üretilen elektrik alan ile sınırlanmış olan kuantum noktaların oldukça avantajlı bir özelliği bunların düzgün enine sınırlanmasıdır, yani kenar etkileri göstermez (Jacak ve ark. 1998).

2.4.3. Kuantum Kuyusu ve Bariyer Arasında İç Difüzyon Yöntemi

Bruner ve ark. (1992) kuantum noktaları elde etmek için, kuantum kuyusunun bir lazer demetiyle belirli bir bölgesinin ısıtılmasına dayanan bir yöntem tanımlamışlardır. Moleküler demet epitaksi yöntemi kullanılarak 3 nm kalınlıklı GaAs kuantum kuyusu oluşturulabilir. Daha sonra bu 20 nm kalınlıklı bir çift $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ bariyeri arasına yerleştirir. Sonra 10 nm kalınlığında GaAs tabakası, AlGaAs tabakası üzerine yerleştirilir. En üstteki GaAs kapak tabakası, yüzeyi lazer demetinin neden olabileceği erime veya oksitlenmeye karşı korumak için 100 nm lik Si_3N_4 ile kaplanır. Kuantum kuyusundaki bant aralığının ayarlanması, numunenin belirli bölgesinin lazer ile ısıtılması ile elde edilir. Isıtılan yüzeyin altında kalan kısımlarda galyum ile alüminyum atomları birbirine karışır ve malzeme bant yapısının yerel bir ayarlanmasının oluşmasına neden olur. Seçilen bölgenin altında kalan yasak enerji aralığı, ısıtılmayan bölgelerin yasak enerji aralığından daha küçüktür. Böyle bir işlem büyük boyutlu malzemelerde kullanılırsa, aralarında yasak enerji aralığı bulunan ve içinde elektron veya elektronların sınırlandığı kuantum noktaları elde edilir (Jacak ve ark. 1998, Çakır 2007).

2.4.4. Yarıiletken Mikrokristaller

Cam dielektrik malzemelerin içerisinde yarıiletken mikrokristaller şeklinde kuantum nokta yapılar oluşturmak mümkündür. Bunun için belli oranlarda CuCl, CdSe veya CdS gibi bileşikler silikat cam bileşiklerinin belirli oranlarıyla birkaç yüz santigrat derecede ısıtmaya tabi tutulur. Bu işlem hâlihazırda eşit boyutlu uygun mikrokristallerin şekillenmesine yol açar. Kristalin ortalama yarıçapı $\bar{a}$, ısıtma süresi t ve sıcaklık T olmak üzere

$$\bar{a}^3 \approx te^{-\varepsilon / k_B T} \tag{2.16}$$

bağıntısıyla üretilen kuantum nokta yapısının boyutu kontrol edilebilir, k_B burada Boltzmann sabitidir. Bu yöntem ile 1,2 nm ile 38 nm çaplı kuantum nokta yapıları üretilebilir (Ekimov ve ark. 1985, Jacak ve ark. 1998, Çakır 2007).

2.4.5. Seçici Büyütme Yöntemi

Kuantum nokta yapılar, daha geniş yasak enerji aralığına sahip bir malzemenin (AlGaAs) yüzeyinde daha dar yasak enerji aralıklı yarıiletken bir malzemenin (GaAs) seçici olarak büyütmesiyle oluşturulabilir (Fukui ve ark. 1991). Seçilen alanların büyütmesini sınırlamak, numune yüzeyinin bir maske (SiO_2) ile kaplanması ve kimyasal eritme yoluyla minyatür üçgenlerin oluşturulması ile elde edilir. Yüzeyde maske ile örtülü olmayan bu üçgenlere $700-800\ ^{\circ}C$ sıcaklıkta Metal-Organic Chemical Vapor Deposition (MOCVD) tekniği uygulanır. Sıcaklık etkisiyle hacimleri büyüyen üçgen yüzeyler tetrahedral piramit haline dönüşür ve böylece ilk kristalize tabaka AlGaAs tabakası olur ve sadece piramidin üstü GaAs'den oluşur, böylelikle büyütme tamamlanmış olur. Bu yöntemle elde edilmiş bir kuantum nokta yapısının boyutunun 100 nm'nin altında olması mümkündür (Jacak ve ark. 1998, Çakır 2007).

Seçici büyütme yönteminin farklı bir şekli ise $2\,\mu m$ kalınlıklı $Al_{0.38}Ga_{0.62}As$ alt tabaka üzerine 10 nm kalınlıklı GaAs'in bir tabakası yatırılır ve 20 nm'lik bir Si_3N_4 maskesiyle kaplanır. Maskenin seçilen kısımları daha sonra elektron demetiyle aydınlatılır ve plazma yakma yoluyla kaldırılır. Metal-Organic Vapor Phase Epitaxy (MOVPE) yöntemiyle yapılan büyütme işleminde GaAs maske ile örtülen alanların sadece dışında çökelir. Kristalize GaAs tabakalarının kalınlığı 100 nm olarak belirlenir. Yeni oluşturulmuş yapıyı bir $Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ tabakasıyla örttükten sonra 70-300 nm çaplı

kuantum nokta yapılar, 90-300 nm genişlikli ve yaklaşık 0,1mm uzunluklu kuantum kuyuları elde edilir (Jacak ve ark. 1998).

2.4.6. Kendiliğinden Büyüme

Bir maske üretimine gerek duymadan kuantum nokta yapıların kendiliğinden kristalizasyonu için başka bir yöntem geliştirilmiştir. Alt tabaka ve kristalleşen malzemenin örgü sabitleri oldukça farklılık gösteriyorsa; sadece ilk çökeltilen tekli tabakalar, alt tabakanınkine eşit örgü sabitli epitaksiyel gergin tabakalar şeklinde kristalize olurlar. Kritik kalınlık aşıldığında tabakada oluşan ciddi bir gerilme böyle düzenli bir yapının çökmesine ve düzgün şekilli ve benzer boyutlu rastgele dağılmış adacıkların kendiliğinden oluşmasına neden olur. Adacıkların şekli ve ortalama boyutu; örgü sabitlerinin uyumsuzluğuyla ilişkili olarak tabakadaki gerilme yoğunluğu, büyütme esnasındaki sıcaklık ve büyütme oranı gibi etkenlere büyük ölçüde bağlıdır. Epitaksiyel yapıdan rastgele adacıklar düzenine olan faz geçişi Stranski-Krastanow geçişi olarak adlandırılır. Stranski-Krastanow faz geçişinde şekillenen kuantum nokta yapıları kendi organize olan veya kendi oluşan kuantum nokta yapılar olarak adlandırılır. Kendiliğinde oluşan kuantum nokta yapıların küçük boyutları, makroskopik bir numunedeki homojen şekilleri ve boyutları, mükemmel kristal yapısı ve elektrotlara veya kimyasal yakmaya ihtiyaç duymayan oldukça elverişli büyütme işlemi bunların en büyük avantajları arasındadır. Bu nedenle bu yapıların elektronikte ve opto-elektronikteki uygulamaları büyük ümit vaat etmektedir (Jacak ve ark. 1998).

3. KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK ÖZELLİKLERİ

Kuantum nokta yapılarının elektronik özelliklerini incelemek için a yarıçaplı bir küresel kuyu içinde serbest hareket edebilen bir elektronu göz önüne almak uygun olacaktır.

Küresel sonsuz bir *V(r)* potansiyeli tarafından sınırlandırılmış küresel nokta yapısında hareket eden bir elektron için Schrördinger denklemi aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,\theta,\phi)+V(r)\psi(r,\theta,\phi)=E\psi(r,\theta,\phi)) \tag{3.1}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right\}\psi(r,\theta,\phi)+\mathrm{V(r)}\psi(r,\theta,\phi)=\mathrm{E}\psi(r,\theta,\phi) \tag{3.2}$$

elde edilir.

Burada:

$$\alpha=\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}\ \text{ve}\ \rho=\alpha r \tag{3.3}$$

dönüşümleri uygulanırsa,

$$\frac{d^2R_{n,\ell}(\rho)}{d\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{dR_{n,\ell}(\rho)}{d\rho}+\left\{1-\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right\}R_{n,\ell}(\rho)=0 \tag{3.4}$$

biçiminde küresel Bessel diferansiyel denklemi formunu alır. Böyle bir denklemin genel çözümü

$$R_{n,\ell}(\rho)=Aj_\ell(\rho)+Bn_\ell(\rho) \tag{3.5}$$

şeklinde olur. Buradaki *A* ve *B* normalizasyon katsayısı, $j_\ell(\rho)$ *ve* $n_\ell(\rho)$ fonksiyonları sırasıyla küresel Bessel ve Küresel Neumann fonksiyonları olup şu şekilde gösterilir:

$$j_\ell(\rho)=\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2}J_{l+1/2}(\rho) \tag{3.6}$$

$$n_\ell(\rho)=(-1)^{l+1}\left(\frac{\pi}{2\rho}\right)^{1/2}J_{-l-1/2}(\rho) \tag{3.7}$$

Denk. (3.5) düzenlenirse, çözüm

$$j_\ell(\rho)=(-1)^l\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l\left(\frac{\sin\rho}{\rho}\right) \tag{3.8}$$

şeklinde yazılabilir. Denk. (3.6) düzenlenirse, düzensiz çözüm

$$n_\ell(\rho)=-(-1)^l\left(\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\right)^l\left(\frac{\cos\rho}{\rho}\right) \tag{3.9}$$

şeklinde olur.

3.1. Sonsuz Küresel Simetrik Parabolik Potansiyelde Kuantum Nokta Yapının Elektronik Özellikleri

Merkezinde hidrojen tipi bir safsızlık bulunan çok elektronlu küresel bir kuantum nokta yapının elektronik Hamiltoniyeni H , etkin kütle yaklaşımıyla atomik birimlerde,

$$\mathrm{H}=\sum_{i=1}^{n}\left(-\frac{\nabla_i^2}{2m^*}-\frac{Z}{\varepsilon r_i}\right)+\sum_{i=1}^{n}\sum_{j>i=1}^{n}\frac{1}{\varepsilon r_{ij}}+V_c(r) \tag{3.10}$$

şeklindedir. Burada Z safsızlıktaki yük sayısını, r_i elektronun safsızlığa olan uzaklığı, r_{ij} elektronlar arasındaki uzaklığı, m^* etkin kütleyi, ε ortamın dielektrik sabitini göstermektedir. Buradaki $V_c(r)$ de dış sınırlayıcı potansiyeli olup, a nokta yarıçapı olmak üzere

$$V_c(r)=\begin{cases}\frac{1}{2}\alpha^2r^2\,, & r<a\\ \infty\,, & r\geq a\end{cases} \tag{3.11}$$

biçiminde sonsuz küresel simetrik parabolik potansiyel alınmıştır. Burada a dot yarıçapıdır. Böyle bir sistem için Schrödinger denklemi

$$\mathrm{H}\,\psi(1,2,...n)=E\,\psi(1,2,...n) \tag{3.12}$$

ile verilir. Burada antisimetrik ψ özfonksiyonu, tek-elektron spin fonksiyonu ϕ_p'lerin lineer kombinasyonu şeklindedir.

$$\psi(1,2,...n)=(1/n!)^{1/2}\det\left|\phi_1(1)\phi_2(2),...,\phi_p(n)\right| \tag{3.13}$$

yazılabilir. Burada 1,2,.. rakamları elektronları ve aynı zamanda elektronların kuantum sayıları $n_i l_i m_l m_s$ 'leri gösterir.

Denk.(3.1)'deki $\psi(r,\theta,\varphi)$ dalga fonksiyonunu

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi) \tag{3.14}$$

radyal ve küresel olmak üzere iki ayrı kısımda yazabiliriz. Bu durumda küresel simetrik potansiyel için denklem

$$\frac{1}{\mathrm{r}^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{n,\ell}(r)}{dr}\right)+\frac{2m^*}{\hbar^2}\left\{E - V(r) - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2m^*r^2}\right\}R_{n,\ell}(r) = 0 \tag{3.15}$$

Schrödinger denkleminin radyal kısmı

$$\frac{1}{\mathrm{r}^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{n,\ell}(r)}{dr}\right)+\frac{2\mathrm{m}^*}{\hbar^2}\left\{E - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2m^*r^2}\right\}R_{n,\ell}(r) = 0 \tag{3.16}$$

olur.

Kuantum nokta yapının enerjisinin beklenen değeri Hartree-Fock-Roothaan (HFR) yöntemine göre

$$E = \langle\psi|H|\psi\rangle = \sum_{p=1}^{n}\left(T_p + V_p\right)+V_c \tag{3.17}$$

ile verilir. Burada ψ ler ortonormalize dalga fonksiyonları, T_p kinetik enerji, V_p potansiyel enerjidir. Bu enerji integralleri tek-elektron atomik orbitalleri üzerinden atomik birimlerde,

$$V_p = \int\phi_p^*\left(\frac{-Z}{\varepsilon r}\right)\phi_p d^3r \tag{3.18}$$

$$T_p = \int\phi_p^*\left(\frac{-\nabla^2}{2m^*}\right)\phi_p d^3r \tag{3.19}$$

$$V_c = \int\phi_p^*\left(\frac{1}{2}\alpha^2r^2\right)\phi_p d^3r \tag{3.20}$$

şeklinde yazılabilir.

Burada p tek elektron atomik orbitallerinin kuantum sayılarını göstermektedir. Tek elektron atomik orbitalleri

$$\phi_p = \sum_{k=1}^{\sigma} c_{pk}\chi_k \tag{3.21}$$

Slater tipi orbitallerinin (STO) lineer kombinasyonu şeklinde yazılabilir. Burada χ_k, k inci STO' ları, k$\rightarrow n_i \ell_i m_i$ STO lar için kuantum sayılarını, σ orbital sayısını ve c_{ik} orbitallerin lineer toplam katsayılarını göstermektedir. STO ların genel formu

$$\chi_{n_i l_i m_i}(\zeta_i, r\theta\phi) = r^{n_i - 1} e^{-\zeta_i r} Y_{l_i m_i}(\theta, \phi) \tag{3.22}$$

ile verilir (Slater 1930, 1951, 1960). Burada ζ_i lar orbital üsteli, $Y_{l_i m_i}(\theta, \phi)$ de Condon-Shortly fazında kompleks küresel harmonik fonksiyonları göstermektedir

$$V_p = -\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c^*_{p n_i \ell_i m_i} c_{p n_j \ell_j m_j} \left\{ \frac{\zeta_i + \zeta_j}{n_i + n_j} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) + \frac{e^{-(\zeta_i+\zeta_j)a} a^{n_i+n_j}}{n_i + n_j} \right\} \tag{3.23}$$

$$\begin{aligned} T_p = \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c^*_{p n_i \ell_i m_i} c_{p n_j \ell_j m_j} \Bigg\{ & \frac{\left[\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)\right](\zeta_i+\zeta_j)^2}{2(n_i+n_j)(n_i+n_j-1)} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) + \\ & \frac{\left[\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)\right] e^{-(\zeta_i+\zeta_j)a} a^{n_i+n_j-1}}{2(n_i+n_j-1)} \left(1 + \frac{(\zeta_i+\zeta_j)a}{n_i+n_j}\right) + \\ & \frac{n_j \zeta_j (\zeta_i+\zeta_j)}{n_i+n_j} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) + \\ & \frac{n_j \zeta_j}{n_i+n_j} e^{-(\zeta_i+\zeta_j)a} a^{n_i+n_j} - \frac{(\zeta_j)^2}{2} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) \Bigg\} \end{aligned} \tag{3.24}$$

$$\begin{aligned} V_c = \gamma_p^2 \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c^*_{p n_i \ell_i m_i} c_{p n_j \ell_j m_j} \Bigg\{ & \frac{(n+n'+2)(n+n'+1)}{(\zeta_i+\zeta_j)^2} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) \\ & - \frac{a^{n_i+n_j+1}(n+n'+2) + a(\zeta_i+\zeta_j)}{(\zeta_i+\zeta_j)^2} e^{-(\zeta_i+\zeta_j)a} \Bigg\} \end{aligned} \tag{3.25}$$

burada

$$S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) = \int_0^a \chi^*_{n_i \ell_i m_i}(\zeta_i, a\theta\phi) \chi_{n_j \ell_j m_j}(\zeta_j, a\theta\phi)\, d^3 r \tag{3.26}$$

olup, örtüşme (overlap) integralidir.

4. HESAPLAMA YÖNTEMLERİ

Genetik algoritma (GA), ortama iyi uyum sağlayan bireylerin hayatta kalması, sağlayamayan bireylerin ise elenmesi olarak tanımlanabilen bir araştırma ve sayısal optimizasyon yöntemidir (Coley-2001). Son zamanlarda fiziğin birçok alanında, özellikle kuantum mekanik sistemlerin taban durum enerjisinin belirlenmesinde kullanılmaya başlanılmıştır, Kuantumlu yapılarda kullanıldığında Kuantum Genetik Algoritma (KGA) olarak da adlandırılan bu yöntem varyasyon yönteminde olduğu gibi enerji minimizasyon ilkesine dayanır ve kuantum mekaniksel sistemleri temsil eden Schrödinger denkleminin çözümlerini bulmak için de kullanılmaktadır. Bunların başlıcaları Şahin (2005), Çakır ve ark. (2007, 2007, 2010, 2011,2012), Özmen ve ark.(2009) ve Yakar ve ark. (2010, 2010, 2012) tarafından yapılmıştır.

KGA yeniden oluşum (veya kopyalama), çaprazlama ve mutasyon olmak üzere üç temel üzerine kurulmuştur.

4.1. Yeniden Oluşum (Üretme)

Yeniden üretme sürecinde yeni nesil oluşturmak için her bir bireyin uygunluk değerlerine bakılır ve uygunluk değeri büyük olan bireyler yeni nesle aktarılırken uygunluk değeri küçük olan bireyler elenir. Herhangi bir i. bireyin enerji beklenen değeri E_i aşağıdaki gibi eşitlikle uygun (fitness) bir F_i değerine dönüştürülür.

$$F_i = e^{-\beta(E_i-\overline{E})/(\overline{E}-E_{\min})} \tag{4.1}$$

Burada $\overline{E}$ ve $E_{\min}$ ortalama ve minimum enerjileri gösterir ve β ayar parametresidir. Yeniden oluşumda yeni nüfus bireyleri bir önceki nesilden seçilir. Her bir bireyin gelme olasılığı P_i, o bireyin uygunluk değeri olan F_i ile orantılıdır. Örneğin, bir nüfus içindeki birey sayısı N_{pop} olmak üzere

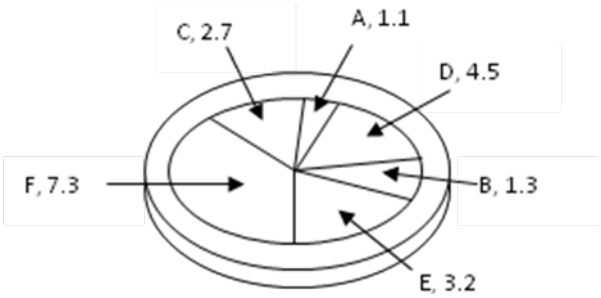
$$P_i = \frac{F_i}{\sum_{i=1}^{N_{pop}} F_i} \tag{4.2}$$

bu işlemde bazı bireylerin gelme olasılığı birden fazla olurken bazı bireylerin de gelmeme olasılığı vardır. Yani P_i değeri büyük olan bireyin yeni nesle aktarılma olasılığı daha çok, küçük olan bireyin yeni nesle aktarılma olasılığı daha az olacaktır.

Bunun için bir seçim işlemi uygulanır. Bu işlem için farklı yöntemler uygulanabilir. Bunlardan en yaygın olarak kullanılanları *rulet çarkı* yöntemidir.

Rulet çarkı yöntemiyle seçim yapmak için öncelikle Denk.(5.2) dan elde edilen uygunluk değerleri kullanılarak bir rulet çarkı oluşturulur. Bu uygunluk değerleri kullanılarak oluşturulan rulet çarkı şematik olarak Şekil 5.1 de gösterilmiştir.

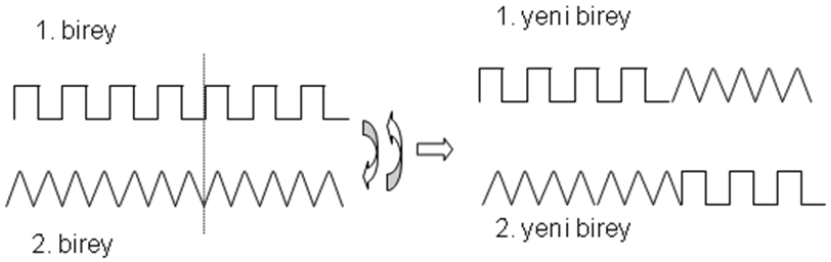
Şekil.5.1 den de görüleceği gibi uygunluk değeri 7.3 olan bireylerin gelme olasılığı fazla iken uygunluk değeri 1.1 olan bireylerin gelme olasılığı çok az olacaktır. Böylece uygunluk değerleri yüksek olan bireyler yeni nesle daha çok aktarılacaktır. Çark nüfus sayısı kadar çevrilerek yeni bireyler elde edilir.



Şekil 4.1 Rulet çarkının şematik gösterimi.

4.2. Çaprazlama (Crossover)

Biyolojik süreçte gerçekleşen çaprazlama işlemi, iki kromozomun genlerinin birbiriyle değiştirmelerini sağlayan bir işlemdir. Çaprazlama işlemi yeniden oluşturma işlemiyle oluşturulan yeni bireyleri üzerinden yapılarak yeni kuşak için çok daha iyi bir nesil oluşturmak için yapılır. Bunun için nüfus içinden rastgele iki birey seçilerek, bu iki birey arasında biyolojik süreçteki çaprazlama işlemine benzer bir işlem yürütülür. Çaprazlama işlemini rastgele seçilen iki birey arasında nasıl gerçekleştirildiği şematik olarak Şekil 5.2 deki gibi gösterilebilir.



Şekil 4.2 Çaprazlama işleminin şematik gösterimi.

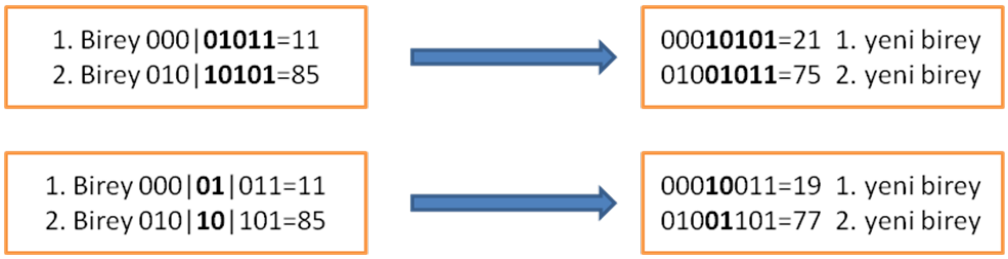
Seçilen iki birey rastgele belirlenen bir noktadan kesilerek birbiriyle yer değiştirilir. Böylece iki yeni birey elde edilmiş olur. Belirlenen iki yeni birey, farklı oranlarda hem birinci bireyin hem de ikinci bireyin bilgilerini taşımaktadır. Rastgele kesme işlemi sadece bir noktadan yapılacağı gibi birden fazla noktadan da kesilebilir

Dalga fonksiyonları için çaprazlama işlemi şöyle yapılır: Rastgele seçilen iki dalga fonksiyonu $\psi_1(c_i,\zeta_i)$ ve $\psi_2(c_i,\zeta_i)$ kendi aralarında çaprazlama işlemi

$$\begin{aligned}\psi_1'(c_i,\zeta_i) &= \psi_1(c_i,\zeta_i)S(c_i,\zeta_i)+\psi_2(c_i,\zeta_i)(1-S(c_i,\zeta_i))\\ \psi_2'(c_i,\zeta_i) &= \psi_2(c_i,\zeta_i)S(c_i,\zeta_i)+\psi_1(c_i,\zeta_i)(1-S(c_i,\zeta_i))\end{aligned} \qquad (4.3)$$

biçiminde bir işlemle yapılabilir. Böylece elde edilen yeni bireylerin her biri, bir önceki iki bireyin bilgisini taşımış olur.

Parametre eniyilemesi yönteminde çaprazlama işlemi, parametrelerin sayısal değerlerine karşılık gelen ikilik kodlar üzerinden gerçekleştirilir. İkilik kodlar üzerinden hem tek noktadan hem de iki ayrı noktadan kesilerek yapılan bir çaprazlama işlemi aşağıdaki gibidir.



Şekil 4.3 İkilik kodlar üzerinden çaprazlama işlemi.

4.3. Mutasyon

Genetik algoritmanın diğer bir süreci olan mutasyon işlemi, çaprazlama işleminden sonra oluşturulmuş yeni nesil içinden rastgele seçilen bir bireye uygulanır. Mutasyon işlemi sistemi düştüğü yerel minimumlardan kurtarılması açısından önemli bir rol oynar. İki kodlama sisteminde rastgele üretilmiş bir başlangıç popülasyonun tüm bireylerinin ilk rakamı sıfır olabilir. Böyle bir durumda çaprazlama işlemiyle ilk rakamı 1 olan bir birey elde etmek mümkün değildir. Yani çaprazlama işlemiyle ikilik

kodlamada 12 hanelik bir sayının değeri 0111 1111 1111=2047 olacaktır. Oysa ikilik kodlamada 12 hanelik bir sayının en büyük değeri 1111 1111 1111= 4095 tir. Böyle bir minimumdan kurtulmak için mutasyon işlemi uygulanır. Mutasyon işleminin anlamı; ikilik kodlamada, değeri 1 olan bir kromozomu 0, değeri 0 olan bir kromozomu 1 yapmak demektir.

Dalga fonksiyonu eniyilemesinde çok şiddetli bir mutasyon uygulamak dalga fonksiyonunda istenmeyen kırıklıklara veya yanlış çözümlere neden olabilir. O yüzden mutasyon şiddetini küçük seçmek gerekir. Eğer rastgele seçilmiş bir $\psi_1(c_i,\zeta_i)$ dalga fonksiyonuna mutasyon uygulanırsa,

$$\psi_1'(c_i,\zeta_i)=\psi_1(c_i,\zeta_i)+\psi_m(c_i,\zeta_i) \tag{4.4}$$

biçiminde bir mutasyon uygulanabilir. Burada $\psi_m(c_i,\zeta_i)$ mutasyon fonksiyonudur.

5. RÖLATİVİSTİK DÜZELTME TERİMLERİ

Etkin kütle yaklaşımında küresel simetrik V_C sınırlayıcı potansiyeline sahip tek elektronlu kuantum noktanın merkezinde bulunan hidrojenik safsızlık için rölativistik olmayan Hamiltoniyen

$$\mathrm{H}_0 = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m^*} - \frac{ke^2}{\varepsilon r} + V_c(r) \tag{5.1}$$

şeklinde yazılabilir. Burada *k*, m^*, ε sırasıyla elektrik sabiti, etkin kütle ve ortamın dielektrik sabitidir. $V_c(r)$ terimi Denk.(3.11) de verilen sınırlayıcı potansiyeldir.

Rölativistik olmayan Hamiltoniyenin özdeğeri; kütle-hız, Darwin ve spin-orbit terimleri gibi rölativistik düzeltmeler kullanılarak daha ileri götürülebilir. Rölativistik terimler pertürbatif olarak hesaplanabilir. Çünkü pertürbe olmamış özdeğerin büyüklüğü ile karşılaştırıldığında nispeten küçüktürler. Bu durumda rölativistik hesaplama için Hamiltoniyen

$$H = \mathrm{H}_0 + H' \tag{5.2}$$

şeklinde yazılabilir, burada H_0 Denk. (3.10) da verilen pertürbe olmamış Hamiltoniyen, H' rölativistik pertürbasyon terimidir ve bu terim

$$H' = H_K + H_D + H_{SO} \tag{5.3}$$

şeklinde verilir. Burada H_K klasik kinetik enerjisi için kütle-hız terimi olup,

$$H_K = -\frac{p^4}{8\left(m^*\right)^3 c^2} \tag{5.4}$$

ile verilir [Greiner 1987]. Parçacığın momentumunun hesabı Kinetik enerjisi $K = \frac{p^2}{2m^*}$

$$p^4 = 4(m^*)^2\left[H_0 + \frac{kZe^2}{\varepsilon r} - V_0\right]^2 \tag{5.5}$$

şeklinde olduğu göz önüne alınırsa, H_K nın beklenen değeri

$$E_K = \left\langle \phi_{n\ell m}\left|\frac{-p^4}{8(m^*)^3c^2}\right|\phi_{n'\ell'm'}\right\rangle$$

$$= -\frac{1}{2m^*c^2}\left\langle \phi_{n\ell m}\left|H_0^2 + \frac{k^2Z^2e^4}{\varepsilon^2r^2} + V_0^2 + 2H_0\frac{kZe^4}{\varepsilon r} - 2H_0V_0 - 2\frac{kZe^2}{\varepsilon r}V_0\right|\phi_{n'\ell'm'}\right\rangle \tag{5.6}$$

$$E_K = -\frac{1}{2m^*c^2}\Bigg\{E_0^2 + \frac{k^2Z^2e^4}{\varepsilon^2}\sum_{kk'} c_{ik}c_{ik'}A_{n_c+n_c'-2} + (V_0^2 - 2E_0V_0) \times \sum_{kk'} c_{ik}c_{ik'}A_{n_c+n_c'} + (2E_0\frac{kZe^2}{\varepsilon} - 2V_0\frac{kZe^2}{\varepsilon})\sum_{kk'} c_{ik}c_{ik'}A_{n_c+n_c'-1}\Bigg\}\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} \tag{5.7}$$

ifadesiyle verilir [Yakar ve ark. (2013)]. Denk.(5.3) deki ikinci terim H_D Darwin terimidir ve elektronun rölativistik olarak indüklenmiş elektrik momentinden kaynaklandığı düşünülür ve

$$H_D = \left(\frac{kZe^2}{\varepsilon}\right)\frac{\pi\hbar^2}{2\left(m^*\right)^2c^2}\delta(\vec{r}) \tag{5.8}$$

ile verilir [Greiner 1987, Yakar ve ark. (2013)]. Burada $\delta(\vec{r})$ dirac delta fonksiyonudur. Elektrik yük yoğunluğu ρ , dirac delta fonksiyon operatörü $\delta(\vec{r})$ nin beklenen değerinden hesaplanabilir. Koordinat sisteminin merkezinde $\rho^{\delta}(0) = \langle\phi|\delta(\vec{r})|\phi\rangle$ dir. Delta fonkisyon operatörünün beklenen değeri s tipi orbitallerde sıfırdan farklı, diğer seviyeler için sfirdır. Delta fonksiyonunun hesaplamasında uygun fonksiyon seçilmezse orjinde önemli dercede hesaplama hatası getirebilir. Hiller, Sucher ve Feinberg (HSF) delta fonksiyon operatörü ρ^{δ} global operatör ρ^{HSF} ile yer değiştirlirse, orijindeki elektronik yük yoğunluğu hesaplanabilir Hiller ve ark. (1978). Bunun için Delta Fonksiyon operatörünü Hiller, Sucher ve Feinberg in kullandığı

$$\rho^{HSF}(0) = \begin{cases} \dfrac{1}{2\pi}\left\langle\phi_{n\ell m}\left|\dfrac{\partial V}{\partial r} - \dfrac{L^2}{r^3}\right|\phi_{n'\ell'm'}\right\rangle, & \ell \neq 0 \\ \dfrac{1}{2\pi}\left\langle\phi_{n\ell m}\left|\dfrac{\partial V}{\partial r_i}\right|\phi_{n'\ell'm'}\right\rangle, & \ell = 0 \end{cases} \tag{5.9}$$

fonksiyonu kullanıldı. Burada V toplam potansiyel operatörü, L ise açısal momentum operatörüdür. Bu durumda Darwin teriminin beklenen değeri,

$$E_D = \left(\frac{kZe^2}{\varepsilon}\right)\frac{\pi\hbar^2}{2(m^*)^2c^2}\frac{1}{2\pi}\left\langle\phi_{n\ell m}\left|\frac{\partial V}{\partial r} - \frac{L^2}{r^3}\right|\phi_{n'\ell'm'}\right\rangle = \left(\frac{kZe^2}{\varepsilon}\right)\frac{\pi\hbar^2}{2(m^*)^2c^2}\sum_{kk'} c_{ik}c_{ik'}\left(A_{n_c+n_c'-2} - \ell'(\ell'+1)A_{n_c+n_c'-3}\right)\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'} \tag{5.10}$$

şeklinde yazılabilir.

Son düzeltme terimi spin-orbit etkileşim terimidir. Bu terime göre hareket eden elektronun spini enerji seviyelerini değiştirir. Spin-orbit etkileşim terimi

$$H_{SO} = \left(\frac{kZe^2}{\varepsilon}\right)\frac{1}{2\left(m^*\right)^2c^2r^3}\vec{S}\cdot\vec{L} \tag{5.11}$$

şeklinde verilir[Greiner 1987, Yakar ve ark. (2013)]. $\vec{L}$ ve $\vec{S}$ sırasıyla orbital ve spin açısal momentum operatörleridir. Bu Hamiltoniyenin beklenen değeri ise

$$E_{SO} = \frac{kZe^2}{2\varepsilon(m^*)^2c^2}\left\langle \phi_{n\ell jm_j}\left|\frac{\vec{\boldsymbol{S}}.\vec{\boldsymbol{L}}}{r^3}\right|\phi_{n'\ell'j'm'_j}\right\rangle,$$

$$E_{SO} = \frac{kZe^2\hbar^2}{2\varepsilon(m^*)^2c^2}\left[j'(j'+1) - \ell'(\ell'+1) - \frac{3}{4}\right]\sum_{kk'} c_{ik}c_{ik'}A_{n_c+n'_c-3}\delta_{\ell\ell'}\delta_{jj'}\delta_{m_jm'_j} \qquad (5.12)$$

olur. Yukarıdaki Denk.(5.7), (5.8) ve (5.9) daki A_N incomplette gama integrali olup,

$$A_N = \int_0^R r^N e^{-(\zeta+\zeta')r}\,dr \qquad (5.13)$$

ile verilir (Arfken 1985). Burada $\phi_{n\ell jm_j}$ yi Clebsch-Gordon katsayıları kullanılarak $\phi_{n\ell m_l m_s}$ açılışından tanımlanırsa

$$\phi_{n\ell jm_j} = \sum_{m_s m_l}\left\langle lsm_l m_s \,\middle|\, jm_j\right\rangle \phi_{nlm_l m_s} \qquad (5.14)$$

[Yakar ve ark. (2013)] ile verilir.

4. HESAPLAMALAR, SONUÇLAR VE ÖNERİLER

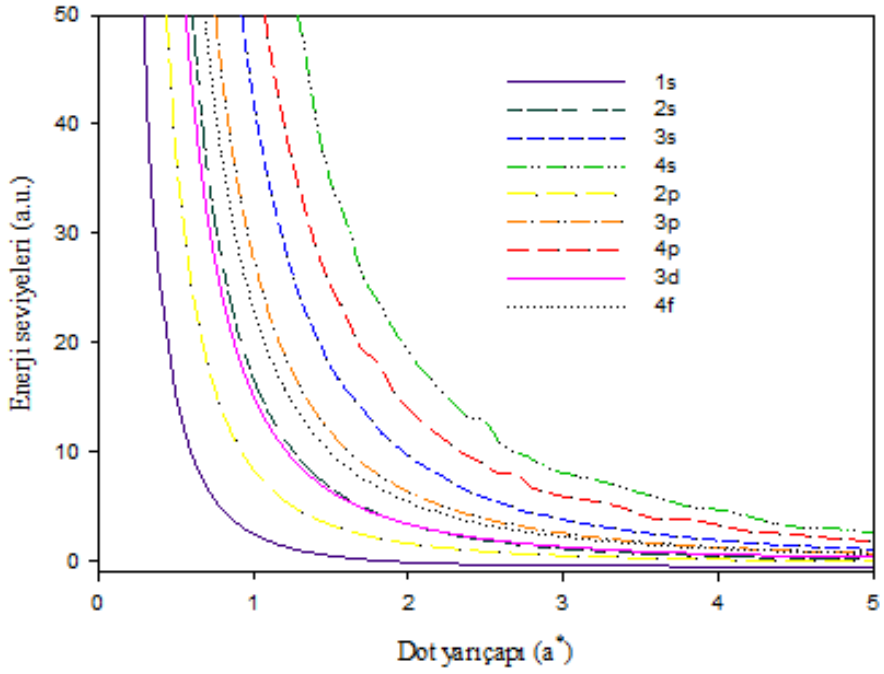
Merkezinde Hidrojen tipi bir safsızlık bulunan bir elektronlu ve parabolik potansiyele sahip küresel kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumlarının enerji özdeğerleri ve özfonksiyonları Kuantum Genetik Algoritma(KGA) ve Hartree-Fock Roothan yöntemi ile hesaplandı. Hesaplamalarda tek-elektron dalga fonksiyonları Slater tipi orbitallerin (STO) lineer bileşiminden oluşturuldu. Bu yapının taban ve bazı uyarılmış seviyelerinin enerji özdeğerleri dot yarıçapına göre hesaplandı. Hesaplamalarda kullanılan baz seti sayısı yedi seçildi ve hesaplamalarda atomik birimler kullanıldı. Atomik birimlerde etkin 1 Bohr yarıçapı $a^*\approx100$ Å ve etkin Rydberg enerjisi $R_y^*=5.72$ meV seçildi. Materyal parametreleri olan etkin kütle $m^*=0.067m_0$ ve dielektrik sabiti $\varepsilon=13,18$ olarak alındı. Parabolik potansiyel parametresi $\alpha = \hbar\omega/2R_y^*$ ifadesi ile belirlendi.

Belirlenen enerji özdeğerleri ve dalga fonksiyonları kullanılarak taban ve bazı uyarılmış durumları rölativistik düzeltme terimleri olan kütle-hız düzeltmesi H_k, Darvin H_d ve spin-orbit etkileşim H_{SO} Hamiltoniyen terimleri pertürbasyon yöntemiyle dot yarıçapına göre hesaplandı. Hesaplamalarda atomik birimler kullanılmıştır.

Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumları için hesaplanan enerjisi kuantum nokta yapının yarı çapına bağlı olarak Çizelge 6.1a ve Çizelge 6.1b de nümerik olarak verildi. Ayrıca bu enerji seviyelerinin nokta yarıçapına göre değişimleri Şekil 6.1 de gösterildi.

Çizelge 6.1 ve Şekil 6.1 den görüleceği gibi kuantum nokta yarıçapı *a* 'nın değeri artarken enerjinin beklenen değerleri azalmakta ve hidrojen atomunun enerji değerlerine gitmektedir. Çünkü Merkezinde safsızlık bulunan bir elektronlu sonsuz küresel simetrik potansiyelle sınırlandırılan parabolik kuantum nokta yapısı, parabolik

potansiyel olsa bile yapı olarak hidrojen atomuna benzediği için beklenen bir sonuçtur.. Taban durumda (1s) kuantum nokta yapının yarı çapı yaklaşık 1.85 a^* da, uyarılmış durumlar (2s) için 6.5 a^* da, (3s) için 14 a^* de, (4s) için 25 a^* da, (2p) için 5 a^* da, (3p) için 12 a^* da, (4p) için 25 a^* da, (3d) için 10 a^* da ve (4f) için 16 a^* da elektronun enerjisi negatife düşmektedir. Bunun anlamı elektronun hidrojen benzeri safsızlığa bağlandığı görülmektedir. Yine Şekil 6.1 ve Çizelge 6.1 den görüleceği gibi küçük dot yarı çaplarında sınırlandırmanın etkisinin arttığı, dot yarıçapının büyüdükçe bu etkinin azaldığı görülmektedir. Küçük dot yarıçaplarında enerji seviyeleri arasındaki fark artarken büyük dot yarıçaplarında bu fark giderek azalmaktadır.



Şekil 6.1 Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış seviyelerin enerjilerinin dot yarıçapına göre değişimi.

Çizelge 6.1a Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış s-orbitallerinin rölativistik olmayan beklenen enerjisi nokta yapının yarı çapına bağlı hesaplanan değerleri. Değerler Hartree (H) birimindedir.

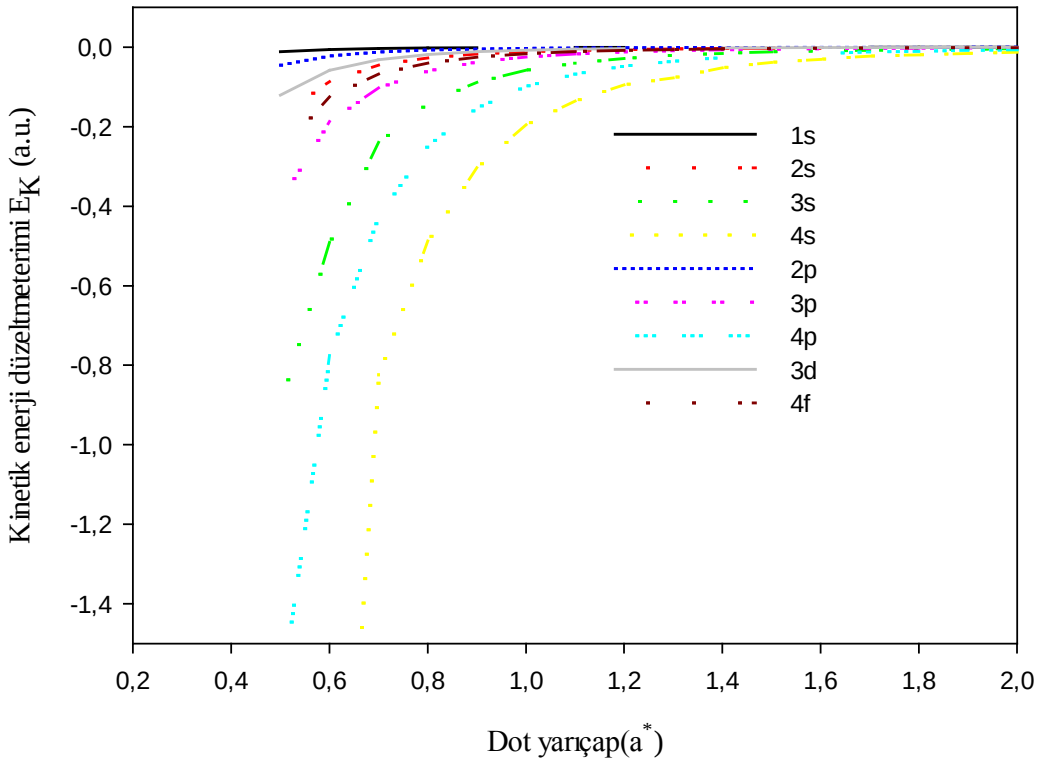
R	E_{1s}	E_{2s}	E_{3s}	E_{4s}
0,5000	15,2840	73,6955	176,0196	340,4965
0,6000	9,9002	51,2824	128,8290	298,7838
0,7000	6,7372	36,2278	89,0138	169,9225
0,8000	4,7455	27,3893	67,5944	130,1891
0,9000	3,4199	21,0688	52,9289	101,9703
1,0000	2,5001	16,7388	42,3713	81,2388
1,1000	1,8405	13,5725	34,7938	67,3744
1,2000	1,3546	11,2699	28,9620	55,8877
1,3000	0,9887	9,3573	24,1767	49,2222
1,4000	0,7080	7,8821	20,8837	40,9037
1,5000	0,4893	6,7447	17,8314	34,7405
1,6000	0,3166	5,7790	15,6830	31,1082
1,7000	0,1786	5,0140	14,0611	26,4087
1,8000	0,0673	4,3680	12,1536	23,9682
1,9000	-0,0234	3,8254	10,8035	21,3527
2,0000	-0,0978	3,3738	9,6871	19,2280
2,3000	-0,2530	2,3624	7,0930	14,3343
2,6000	-0,3445	1,7010	5,3358	10,7391
3,0000	-0,4140	1,1336	3,7840	8,0523
3,2000	-0,4355	0,9320	3,2739	7,4876
3,8000	-0,4722	0,5247	2,1702	5,0399
4,0000	-0,4788	0,4322	1,9156	4,7097
4,6000	-0,4905	0,2354	1,3385	2,9950
5,0000	-0,4943	0,1487	1,0773	2,6202
7,0000	-0,4992	-0,0478	0,4022	1,1139
8,0000	-0,4996	-0,0821	0,2519	0,8054
9,0000	-0,4998	-0,1009	0,1574	0,5817
10,0000	-0,4998	-0,1110	0,0939	0,4800
12,0000	-0,4999	-0,1202	0,0318	0,2420
15,0000	-0,5000	-0,1240	-0,0203	0,1099
20,0000	-0,5000	-0,1246	-0,0353	0,1641

Çizelge 6.1b Bir elektronlu kuantum nokta yapının bazı uyarılmış durumların rölativistik olmayan beklenen enerjisi nokta yapının yarı çapına bağlı olarak hesaplanan değerleri. Değerler Hartree (H) birimindedir

R	E_{2p}	E_{3p}	E_{4p}	E_{3d}	E_{4f}
0,5000	37,4071	115,4374	241,6138	64,0364	95,6037
0,6000	25,4527	79,8466	165,9625	44,0275	65,9925
0,7000	18,3164	58,4586	121,9573	32,0017	48,1569
0,8000	13,7286	44,3489	92,8410	24,2525	36,6501
0,9000	10,6133	34,6237	72,5822	18,9584	28,7652
1,0000	8,4062	27,8118	57,9246	15,1874	23,1514
1,1000	6,7897	22,7528	47,6922	12,4174	19,0071
1,2000	5,5727	18,9633	39,8446	10,3173	15,8627
1,3000	4,6352	15,9932	34,0269	8,6934	13,4284
1,4000	3,8990	13,6905	29,0172	7,4115	11,4975
1,5000	3,3108	11,8046	25,1589	6,3825	9,9479
1,6000	2,8349	10,3290	22,3835	5,5445	8,6834
1,7000	2,4440	9,0172	19,4053	4,8540	7,6392
1,8000	2,1217	7,9917	18,2157	4,2776	6,7696
1,9000	1,8492	7,1224	15,5954	3,7937	6,0285
2,0000	1,6202	6,3662	14,0097	3,3819	5,4046
2,3000	1,1139	4,6406	10,4095	2,4647	3,9999
2,6000	0,7840	3,5261	8,0372	1,8523	3,0617
3,0000	0,5001	2,5557	5,8949	1,3166	2,2312
3,2000	0,4001	2,1813	5,4789	1,1238	1,9300
3,8000	0,1989	1,4447	3,7511	0,7264	1,3045
4,0000	0,1536	1,2731	3,3256	0,6343	1,1580
4,6000	0,0567	0,8985	2,2881	0,4311	0,8317
5,0000	0,0138	0,7156	1,8472	0,3373	0,6788
7,0000	-0,0847	0,2623	0,8311	0,1006	0,2823
8,0000	-0,1025	0,1602	0,5866	0,0491	0,1914
9,0000	-0,1123	0,0948	0,4308	0,0163	0,1315
10,0000	-0,1178	0,0510	0,3186	$-5{,}267\times10^{-3}$	0,0905
11,0000	-0,1209	0,0211	0,3138	-0,0199	0,0614
12,0000	-0,1226	$-3{,}106\times10^{-3}$	0,1831	-0,0301	0,0403
15,0000	-0,1245	-0,0342	0,0779	-0,0459	$3{,}6466\times10^{-3}$
20,0000	-0,1249	-0,0512	$8{,}6339\times10^{-3}$	-0,0537	-0,0195

Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumların kütle-hız enerji düzeltme terimleri için nokta yapı yarı çapına bağlı hesaplanan değerleri Çizelge 6.2 ve Çizelge 6.3 de verildi. Ayrıca bu enerji düzeltme terimleri nokta yarıçapına göre değişimleri Şekil 6.2 de gösterildi.

Çizelge 6.2, Çizelge 6.3 ve Şekil 6.2 den görüleceği gibi büyük dot yarıçapından küçük dot yarıçapına gidildikçe kütle-hız enerji düzeltme terimi negatif olarak büyümektedir. Buradaki negatiflik, Denk. 5-4 ten görüleceği gibi formülasyondan kaynaklanmaktadır. Bu düzeltme terimi aşağı yukarı nokta yapı yarıçapı 1.2 a^* den daha küçük değerlerde görülmektedir.Yani kütle-hız rölativistik düzeltme terimi güçlü sınırlandırmanın olduğu bölgede etkilidir. Güçlü sınırlandırma olduğu zaman parçacığın hızı artmakta, bu da kinetik enerjiye bir katkı getirmektedir. Taban enerji seviyesinde bu terimin katkısı çok küçük olurken, yukarı enerji seviyelerine doğru gidildikçe katkısı artmaktadır. Yani elektronun hızı taban enerji seviyesinde daha düşük olurken yukarı enerji seviyelerine doğru gidilirken güçlü sınırlandırmanın olduğu bölgede parçacığın hızı artmakta, bu da kütle-hız düzeltme terimini arttırmaktadır.



Şekil 6.2 Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış seviyeleri için kütle-hız enerji düzeltme teriminin dot yarıçapına göre değişimi.

Çizelge 6.2 Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış seviyeleri için kütle-hız enerji düzeltme teriminin dot yarıçapına göre değerleri. Değerler Hartree (H) birimindedir

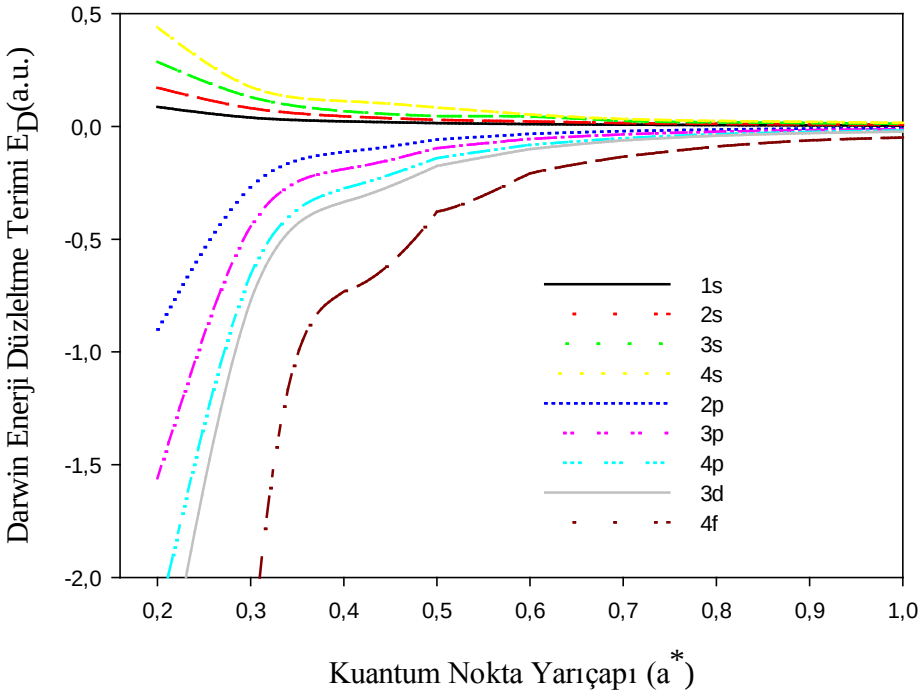
R	1s	2s	3s	4s
0.5	-0.0115	-0.1718	-0.8977	-3.2820
0.6	-5.6764×10^{-3}	-0.0862	-0.4910	-2.6319
0.7	-3.1487×10^{-3}	-0.0448	-0.2394	-0.8238
0.8	-1.9066×10^{-3}	-0.0268	-0.1405	-0.4873
0.9	-1.2355×10^{-3}	-0.0165	-0.0879	-0.3030
1.0	-0.000845924	-0.0109	-0.0576	-0.1947
1.1	-6.0602×10^{-4}	-7.5122×10^{-3}	-0.0396	-0.1352
1.2	-4.5077×10^{-4}	-5.4359×10^{-3}	-0.0280	-0.0944
1.3	-0.000346484	-3.9441×10^{-3}	-0.0197	-0.0769
1.4	-2.7413×10^{-4}	-2.9450×10^{-3}	-0.0152	-0.0516
1.5	-0.000222074	-2.2808×10^{-3}	-0.0112	-0.0378
1.6	-0.000184030	-1.7656×10^{-3}	-8.9699×10^{-3}	-0.0304
1.7	-1.5533×10^{-4}	-1.4043×10^{-3}	-7.5689×10^{-3}	-0.0223
1.8	-1.3344×10^{-4}	-1.1349×10^{-3}	-5.5978×10^{-3}	-0.0190
1.9	-1.1636×10^{-4}	-9.2409×10^{-4}	-4.5628×10^{-3}	-0.0152
2.0	-1.0286×10^{-4}	-7.6707×10^{-4}	-3.7328×10^{-3}	-0.0124
2.1	-9.2033×10^{-5}	-6.4085×10^{-4}	-3.0889×10^{-3}	-0.0104
2.2	-8.4347×10^{-5}	-5.4684×10^{-4}	-2.4970×10^{-3}	-8.1640×10^{-3}
2.3	-7.6008×10^{-5}	-4.5986×10^{-4}	-2.1696×10^{-3}	-7.1240×10^{-3}
2.5	-6.5080×10^{-5}	-3.4664×10^{-4}	-2.5328×10^{-3}	-9.8014×10^{-3}
2.6	-6.0854×10^{-5}	-2.9677×10^{-4}	-1.3395×10^{-3}	-4.2695×10^{-3}
2.7	-5.7219×10^{-5}	-2.6098×10^{-4}	-1.1099×10^{-3}	-3.7481×10^{-3}
2.8	-5.4275×10^{-5}	-2.3201×10^{-4}	-9.5092×10^{-4}	-3.3598×10^{-3}
2.9	-5.1686×10^{-5}	-2.0674×10^{-4}	-8.6681×10^{-4}	-2.7670×10^{-3}
3.0	-4.9433×10^{-5}	-1.8387×10^{-4}	-7.4978×10^{-4}	-2.4779×10^{-3}
3.2	-4.5754×10^{-5}	-1.4663×10^{-4}	-5.9427×10^{-4}	-2.1686×10^{-3}
3.4	-4.3007×10^{-5}	-1.2006×10^{-4}	-4.7009×10^{-4}	-1.7411×10^{-3}
3.6	-4.0934×10^{-5}	-9.9897×10^{-5}	-3.7402×10^{-4}	-1.4338×10^{-3}
3.8	-3.9254×10^{-5}	-8.4545×10^{-5}	-3.1344×10^{-4}	-1.0604×10^{-3}
4.0	-3.8303×10^{-5}	-7.2094×10^{-5}	-2.6716×10^{-4}	-9.3924×10^{-4}
4.2	-3.6930×10^{-5}	-6.2241×10^{-5}	-2.1797×10^{-4}	-7.5904×10^{-4}
4.4	-3.6190×10^{-5}	-5.4513×10^{-5}	-1.8087×10^{-4}	-5.7762×10^{-4}
4.6	-3.5598×10^{-5}	-4.8070×10^{-5}	-1.6095×10^{-4}	-4.5205×10^{-4}
4.8	-3.4982×10^{-5}	-4.2171×10^{-5}	-1.3825×10^{-4}	-4.1026×10^{-4}
5.0	-3.4655×10^{-5}	-3.7589×10^{-5}	-1.2137×10^{-4}	-3.4099×10^{-4}
6.0	-3.3691×10^{-5}	-2.2823×10^{-5}	-6.5617×10^{-5}	-1.7981×10^{-4}
7.0	-3.3362×10^{-5}	-1.5565×10^{-5}	-4.0218×10^{-5}	-1.0303×10^{-4}
8.0	-3.3306×10^{-5}	-1.1601×10^{-5}	-2.6802×10^{-5}	-7.1529×10^{-4}
9.0	-3.3302×10^{-5}	-9.1627×10^{-6}	-1.9036×10^{-5}	-4.8523×10^{-5}
10.0	-3.3288×10^{-5}	-7.9117×10^{-6}	-1.4497×10^{-5}	-4.4238×10^{-5}
11.0	-3.3296×10^{-5}	-1.5613×10^{-6}	-0.0175×10^{-5}	-0.0416×10^{-5}
12.0	-3.3289×10^{-5}	-6.2528×10^{-6}	-1.1230×10^{-5}	-1.6780×10^{-5}
15.0	-3.3286×10^{-5}	-5.6647×10^{-6}	-6.2397×10^{-6}	-9.7676×10^{-5}
20.0	-3.3283×10^{-5}	-5.6375×10^{-6}	-4.7556×10^{-6}	-2.0920×10^{-5}

Çizelge 6.3 Bir elektronlu kuantum nokta yapının bazı uyarılmış seviyeleri için kütle-hız enerji düzeltme teriminin dot yarıçapına göre değerleri. Değerler Hartree (H) birimindedir

R	2p	3p	4p	3d	4f
0.5	-0.0452	-0.3848	-1.6313	-0.1207	-0.2591
0.6	-0.0218	-0.1872	-0.7753	-0.0583	-0.1251
0.7	-0.0118	-0.1021	-0.4234	-0.0314	-0.0675
0.8	-6.918×10^{-3}	-0.0598	-0.2476	-0.0184	-0.0396
0.9	-4.326×10^{-3}	-0.0371	-0.1526	-0.0115	-0.0247
1.0	-2.843×10^{-3}	-0.0244	-0.0982	-7.5571×10^{-3}	-0.0162
1.1	-1.9459×10^{-3}	-0.0166	-0.0674	-5.1656×10^{-3}	-0.0111
1.2	-1.3771×10^{-3}	-0.0117	-0.0474	-3.6473×10^{-3}	-7.820×10^{-3}
1.3	-1.0024×10^{-3}	-8.5031×10^{-3}	-0.0351	-0.00264927	-5.6815×10^{-3}
1.4	-7.4756×10^{-4}	-6.3494×10^{-3}	-0.0257	-1.9707×10^{-3}	-4.2220×10^{-3}
1.5	-5.6889×10^{-4}	-4.8112×10^{-3}	-0.01954542	-1.4964×10^{-3}	-3.2036×10^{-3}
1.6	-4.4106×10^{-4}	-3.7553×10^{-3}	-0.0157	-1.1565×10^{-3}	-2.4757×10^{-3}
1.7	-3.4716×10^{-4}	-2.9201×10^{-3}	-0.0118	-9.0809×10^{-4}	-1.9431×10^{-3}
1.8	-2.7779×10^{-4}	-2.3450×10^{-3}	-0.0104	-7.2240×10^{-4}	-1.5474×10^{-3}
1.9	-2.2438×10^{-4}	-1.8953×10^{-3}	-7.8385×10^{-3}	-5.8284×10^{-4}	-1.2450×10^{-3}
2.0	-1.8360×10^{-4}	-1.5454×10^{-3}	-6.4001×10^{-3}	-4.7500×10^{-4}	-1.0151×10^{-3}
2.1	-1.5174×10^{-4}	-1.2794×10^{-3}	-5.2493×10^{-3}	-3.9135×10^{-4}	-8.3464×10^{-4}
2.2	-1.2874×10^{-4}	-1.0441×10^{-3}	-5.0861×10^{-3}	-3.2895×10^{-4}	-7.1633×10^{-3}
2.3	-1.0655×10^{-4}	-8.7487×10^{-4}	-3.6541×10^{-3}	-2.7283×10^{-4}	-5.8088×10^{-4}
2.4	-9.0383×10^{-5}	-7.5310×10^{-4}	-3.0837×10^{-3}	-2.3004×10^{-4}	-4.9002×10^{-4}
2.6	-6.6415×10^{-5}	-5.3971×10^{-4}	-2.2464×10^{-3}	-1.6715×10^{-4}	-3.5598×10^{-4}
2.7	-5.7460×10^{-5}	-4.8931×10^{-4}	-2.2191×10^{-3}	-1.4415×10^{-4}	-3.0598×10^{-4}
2.8	-5.0054×10^{-5}	-4.0462×10^{-4}	-1.6102×10^{-3}	-1.2460×10^{-4}	-2.6473×10^{-4}
2.9	-4.3818×10^{-5}	-3.5429×10^{-4}	-1.4446×10^{-3}	-1.0840×10^{-4}	-2.3019×10^{-4}
3.0	-3.8555×10^{-5}	-3.1044×10^{-4}	-1.2644×10^{-3}	-9.4754×10^{-5}	-2.0109×10^{-4}
3.2	-3.0241×10^{-5}	-2.3650×10^{-4}	-1.1500×10^{-3}	-7.3313×10^{-5}	-1.5527×10^{-4}
3.4	-2.4160×10^{-5}	-1.8684×10^{-4}	-9.0309×10^{-4}	-5.7686×10^{-5}	-1.2185×10^{-4}
3.6	-1.9607×10^{-5}	-1.5005×10^{-4}	-5.8308×10^{-4}	-4.6032×10^{-5}	-9.6904×10^{-5}
3.8	-1.6100×10^{-5}	-1.218×10^{-4}	-5.8083×10^{-4}	-3.7245×10^{-5}	-7.8292×10^{-5}
4.0	-1.3427×10^{-5}	-9.9472×10^{-5}	-4.7135×10^{-4}	-3.0412×10^{-5}	-6.3901×10^{-5}
4.2	-1.1295×10^{-5}	-8.2391×10^{-5}	-3.0393×10^{-4}	-2.5081×10^{-5}	-5.2606×10^{-5}
4.4	-9.6301×10^{-5}	-6.9762×10^{-5}	-2.7713×10^{-4}	-2.0935×10^{-5}	-4.3710×10^{-5}
4.6	-8.2816×10^{-6}	-5.8852×10^{-5}	-2.3358×10^{-4}	-1.7590×10^{-5}	-3.6621×10^{-5}
4.8	-7.1858×10^{-6}	-4.9324×10^{-5}	-1.8732×10^{-4}	-1.4901×10^{-5}	-3.0966×10^{-5}
5.0	-6.2868×10^{-6}	-4.2354×10^{-5}	-1.5930×10^{-4}	-1.2735×10^{-5}	-2.6280×10^{-5}
6.0	-3.6065×10^{-6}	-2.1409×10^{-5}	-7.9799×10^{-5}	-6.2953×10^{-6}	-1.2767×10^{-5}
7.0	-2.4004×10^{-6}	-1.2248×10^{-5}	-4.4173×10^{-5}	-3.5126×10^{-6}	-6.9545×10^{-6}
8.0	-1.7883×10^{-6}	-7.5733×10^{-6}	-2.5891×10^{-5}	-2.1414×10^{-6}	-4.1084×10^{-6}
9.0	-1.4523×10^{-6}	-5.0726×10^{-6}	-1.7147×10^{-5}	-1.4106×10^{-6}	-2.6037×10^{-6}
10.0	-1.2571×10^{-6}	-3.5910×10^{-6}	-1.1395×10^{-5}	-9.8197×10^{-7}	-1.7280×10^{-6}
11.0	-1.1424×10^{-6}	-2.6928×10^{-6}	-1.4755×10^{-5}	-7.1851×10^{-7}	-1.2062×10^{-6}
12.0	-1.0716×10^{-6}	-2.0460×10^{-6}	-6.0923×10^{-6}	-5.4876×10^{-7}	-8.6537×10^{-7}
15.0	-9.9147×10^{-6}	-1.0954×10^{-6}	-2.8215×10^{-6}	-3.0172×10^{-7}	-3.8202×10^{-7}
20.0	-9.7334×10^{-7}	-5.8127×10^{-7}	-1.1599×10^{-6}	-1.8264×10^{-7}	-1.4586×10^{-7}

Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumların Darwin düzeltme terimlerinin nokta yapı yarı çapına bağlı olarak hesaplanan değerleri Çizelge 6.4 ve Çizelge 6.5 de verildi. Ayrıca bu enerji düzeltme terimleri nokta yarıçapına göre değişimleri Şekil 6.3 de çizildi.

Çizelge 6.4, Çizelge 6.5 ve Şekil 6.3 den görüleceği gibi büyük dot yarıçaından küçük dot yarıçapına gidildikçe, kuantum nokta için Darwin enerji düzeltme terimi artmaktadır. Darwin düzelteme terimi güçlü sınırlandırmanın olduğu bölgelerde görülmektedir yani hemen hemen tüm seviyeler için dot yarıçapı 1.4 a^* dan küçük değerlerde görülmektedir. *ns* seviyelerine gelen Darwin düzeltme terimleri pozitif iken, diğer *np, nd* ve *nf* seviyelerine gelen katkılar negatif olduğu grafikten ve şekilden görülebilir. Darwin enerji düzeltme teriminin değeri taban seviyeden yukarı seviyelere doğru gidildikçe mutlak değer olarak artmaktadır.



Şekil 6.3. Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış durumların Darwin enerji düzeltmesinin kuantum nokta yarıçapına göre değişimi.

Tablo 6.4 Bir elektronlu kuantum nokta yapının taban ve bazı uyarılmış s enerji seviyeleri için Darwin Enerji düzeltme değerleri. Değerler Hartree (H) birimindedir

Dot yarı çapı	1s	2s	3s	4s
0.5	0,014957	0,029503	0,046375	0,083657
0.6	0,010619	0,022235	0,043828	0,053171
0.7	$8{,}080759\times10^{-3}$	0,015411	0,024958	0,033439
0.8	$6{,}368951\times10^{-3}$	0,011959	0,018962	0,024842
0.9	$5{,}181524\times10^{-3}$	$9{,}687569\times10^{-3}$	0,015164	0,020683
1.0	$4{,}326392\times10^{-3}$	$7{,}929876\times10^{-3}$	0,012428	0,016289
1.1	$3{,}687769\times10^{-3}$	$6{,}639491\times10^{-3}$	0,010335	0,013734
1.2	$3{,}194988\times10^{-3}$	$5{,}620975\times10^{-3}$	$8{,}665083\times10^{-3}$	0,011702
1.3	$2{,}809451\times10^{-3}$	$4{,}937940\times10^{-3}$	$7{,}198622\times10^{-3}$	0,014290
1.4	$2{,}504007\times10^{-3}$	$4{,}279386\times10^{-3}$	$6{,}507805\times10^{-3}$	$8{,}779953\times10^{-3}$
1.6	$2{,}048375\times10^{-3}$	$3{,}362768\times10^{-3}$	$5{,}073139\times10^{-3}$	$6{,}706373\times10^{-3}$
1.7	$1{,}876343\times10^{-3}$	$2{,}989223\times10^{-3}$	$5{,}805989\times10^{-3}$	$6{,}137268\times10^{-3}$
1.8	$1{,}732449\times10^{-3}$	$2{,}742953\times10^{-3}$	$3{,}987330\times10^{-3}$	$5{,}940318\times10^{-3}$
1.9	$1{,}610170\times10^{-3}$	$2{,}474592\times10^{-3}$	$3{,}639837\times10^{-3}$	$5{,}249761\times10^{-3}$
2.0	$1{,}505420\times10^{-3}$	$2{,}277748\times10^{-3}$	$3{,}305762\times10^{-3}$	$4{,}682197\times10^{-3}$
2.1	$1{,}415154\times10^{-3}$	$2{,}088285\times10^{-3}$	$3{,}030168\times10^{-3}$	$4{,}481209\times10^{-3}$
2.2	$1{,}343826\times10^{-3}$	$1{,}938687\times10^{-3}$	$2{,}939311\times10^{-3}$	$3{,}727896\times10^{-3}$
2.3	$1{,}268164\times10^{-3}$	$1{,}774461\times10^{-3}$	$2{,}578400\times10^{-3}$	$3{,}476078\times10^{-3}$
2.4	$1{,}208969\times10^{-3}$	$1{,}656650\times10^{-3}$	$2{,}341479\times10^{-3}$	$3{,}520811\times10^{-3}$
2.6	$1{,}109543\times10^{-3}$	$1{,}422898\times10^{-3}$	$2{,}057819\times10^{-3}$	$2{,}828239\times10^{-3}$
2.8	$1{,}032310\times10^{-3}$	$1{,}272162\times10^{-3}$	$1{,}743234\times10^{-3}$	$2{,}676751\times10^{-3}$
2.9	$1{,}000146\times10^{-3}$	$1{,}200678\times10^{-3}$	$1{,}643068\times10^{-3}$	$2{,}296861\times10^{-3}$
3.0	$9{,}711627\times10^{-4}$	$1{,}127543\times10^{-3}$	$1{,}611782\times10^{-3}$	$2{,}095304\times10^{-3}$
3.2	$9{,}217271\times10^{-4}$	$9{,}790220\times10^{-4}$	$1{,}361695\times10^{-3}$	$2{,}322167\times10^{-3}$
3.4	$8{,}829175\times10^{-4}$	$8{,}793933\times10^{-4}$	$1{,}213762\times10^{-3}$	$2{,}089816\times10^{-3}$
3.6	$8{,}523139\times10^{-4}$	$7{,}946585\times10^{-4}$	$1{,}034906\times10^{-3}$	$2{,}047233\times10^{-3}$
3.8	$8{,}264592\times10^{-4}$	$7{,}221453\times10^{-4}$	$9{,}894925\times10^{-4}$	$1{,}490032\times10^{-3}$
4.0	$8{,}112321\times10^{-4}$	$6{,}581668\times10^{-4}$	$9{,}469742\times10^{-4}$	$1{,}379624\times10^{-3}$
4.2	$7{,}888612\times10^{-4}$	$6{,}029683\times10^{-4}$	$8{,}410210\times10^{-4}$	$1{,}404851\times10^{-3}$
4.4	$7{,}763388\times10^{-4}$	$5{,}582433\times10^{-4}$	$7{,}793787\times10^{-4}$	$1{,}145092\times10^{-3}$
4.6	$7{,}659897\times10^{-4}$	$5{,}157184\times10^{-4}$	$7{,}592784\times10^{-4}$	$9{,}887508\times10^{-4}$
4.8	$7{,}555538\times10^{-4}$	$4{,}705380\times10^{-4}$	$6{,}731643\times10^{-4}$	$8{,}602975\times10^{-4}$
5.0	$7{,}496884\times10^{-4}$	$4{,}355792\times10^{-4}$	$6{,}338944\times10^{-4}$	$7{,}604413\times10^{-4}$
6.0	$7{,}322492\times10^{-4}$	$3{,}039580\times10^{-4}$	$4{,}519024\times10^{-4}$	$6{,}275805\times10^{-4}$
7.0	$7{,}260992\times10^{-4}$	$2{,}254851\times10^{-4}$	$3{,}396606\times10^{-4}$	$4{,}644407\times10^{-4}$
8.0	$7{,}249606\times10^{-4}$	$1{,}770354\times10^{-4}$	$2{,}618853\times10^{-4}$	$3{,}998717\times10^{-4}$
10.0	$7{,}246470\times10^{-4}$	$1{,}273913\times10^{-4}$	$1{,}718955\times10^{-4}$	$3{,}316503\times10^{-4}$
11.0	$7{,}247602\times10^{-4}$	$5{,}780779\times10^{-4}$	0,012149	0,011865
12.5	$7{,}246243\times10^{-4}$	$1{,}079118\times10^{-4}$	$1{,}251385\times10^{-4}$	$2{,}907060\times10^{-4}$
15.0	$7{,}245923\times10^{-4}$	$9{,}445409\times10^{-5}$	$8{,}785315\times10^{-5}$	$9{,}445409\times10^{-5}$
20.0	$7{,}245477\times10^{-4}$	$9{,}399434\times10^{-5}$	$6{,}872829\times10^{-5}$	$9{,}399434\times10^{-5}$

Tablo 6.5 Bir elektronlu kuantum nokta yapının bazı uyarılmış (*nl*) enerji seviyeleri için Darwin enerji düzeltme değerleri. Değerler Hartree (H) birimindedir

R	2p	3p	4p	3d	4f
0.5	-0,057166	-0,095309	-0,139562	-0,175203	-0,378182
0.6	-0,032516	-0,054746	-0,081033	-0,100362	-0,207407
0.7	-0,020379	-0,034150	-0,051231	-0,061560	-0,133171
0.8	-0,013506	-0,022832	-0,033982	-0,040982	-0,088098
0.9	$-9{,}36987\times10^{-3}$	-0,015957	-0,023784	-0,029225	-0,060949
1.0	$-6{,}71614\times10^{-3}$	-0,011540	-0,017264	-0,022629	-0,048501
1.1	$-4{,}99144\times10^{-3}$	$-8{,}6536\times10^{-3}$	-0,012940	-0,016111	-0,038430
1.2	$-3{,}80630\times10^{-3}$	$-6{,}6071\times10^{-3}$	$-9{,}9057\times10^{-3}$	-0,012623	-0,028162
1.3	$-2{,}96256\times10^{-3}$	$-5{,}1703\times10^{-3}$	$-7{,}8012\times10^{-3}$	$-9{,}5109\times10^{-3}$	-0,025598
1.4	$-2{,}35067\times10^{-3}$	$-4{,}1141\times10^{-3}$	$-6{,}2042\times10^{-3}$	$-7{,}7196\times10^{-3}$	-0,017478
1.6	$-1{,}55711\times10^{-3}$	$-2{,}7296\times10^{-3}$	$-4{,}1320\times10^{-3}$	$-4{,}9304\times10^{-3}$	-0,011102
1.7	$-1{,}27101\times10^{-3}$	$-2{,}2642\times10^{-3}$	$-3{,}4330\times10^{-3}$	$-4{,}1303\times10^{-3}$	$-9{,}12539\times10^{-3}$
1.8	$-1{,}04557\times10^{-3}$	$-1{,}8732\times10^{-3}$	$-2{,}8825\times10^{-3}$	$-3{,}3272\times10^{-3}$	-0,010334
1.9	$-9{,}000955\times10^{-4}$	$-1{,}6092\times10^{-3}$	$-2{,}4358\times10^{-3}$	$-2{,}8924\times10^{-3}$	$-6{,}34866\times10^{-3}$
2.0	$-7{,}648101\times10^{-4}$	$-1{,}3716\times10^{-3}$	$-2{,}0911\times10^{-3}$	$-2{,}4703\times10^{-3}$	$-5{,}44390\times10^{-3}$
2.1	$-6{,}518545\times10^{-4}$	$-1{,}1772\times10^{-3}$	$-1{,}7905\times10^{-3}$	$-2{,}1104\times10^{-3}$	$-4{,}62173\times10^{-3}$
2.2	$-5{,}611071\times10^{-4}$	$-1{,}0399\times10^{-3}$	$-1{,}5312\times10^{-3}$	$-1{,}7548\times10^{-3}$	$-9{,}60825\times10^{-3}$
2.3	$-4{,}851944\times10^{-4}$	$-8{,}8285\times10^{-4}$	$-1{,}3616\times10^{-3}$	$-1{,}6801\times10^{-3}$	$-3{,}51131\times10^{-3}$
2.4	$-4{,}223726\times10^{-4}$	$-7{,}7877\times10^{-4}$	$-1{,}1940\times10^{-3}$	$-1{,}3913\times10^{-3}$	$-3{,}05137\times10^{-3}$
2.6	$-3{,}236320\times10^{-4}$	$-6{,}0322\times10^{-4}$	$-9{,}3322\times10^{-4}$	$-1{,}1602\times10^{-3}$	$-2{,}39547\times10^{-3}$
2.8	$-2{,}517261\times10^{-4}$	$-4{,}7862\times10^{-4}$	$-7{,}4062\times10^{-4}$	$-9{,}1831\times10^{-4}$	$-2{,}06048\times10^{-3}$
2.9	$-2{,}256146\times10^{-4}$	$-4{,}2576\times10^{-4}$	$-6{,}6544\times10^{-4}$	$-7{,}7823\times10^{-4}$	$-1{,}70242\times10^{-3}$
3.0	$-2{,}014048\times10^{-4}$	$-3{,}8455\times10^{-4}$	$-5{,}9913\times10^{-4}$	$-6{,}9647\times10^{-4}$	$-1{,}52984\times10^{-3}$
3.2	$-1{,}586225\times10^{-4}$	$-3{,}1136\times10^{-4}$	$-4{,}8832\times10^{-4}$	$-5{,}4052\times10^{-4}$	$-3{,}03480\times10^{-3}$
3.4	$-1{,}302237\times10^{-4}$	$-2{,}5686\times10^{-4}$	$-3{,}9997\times10^{-4}$	$-4{,}5916\times10^{-4}$	$-2{,}48442\times10^{-3}$
3.6	$-1{,}068079\times10^{-4}$	$-2{,}1367\times10^{-4}$	$-3{,}3052\times10^{-4}$	$-3{,}8191\times10^{-4}$	$-8{,}86625\times10^{-3}$
3.8	$-8{,}816222\times10^{-5}$	$-1{,}8057\times10^{-4}$	$-2{,}8508\times10^{-4}$	$-3{,}3736\times10^{-4}$	$-1{,}73997\times10^{-3}$
4.0	$-7{,}395556\times10^{-5}$	$-1{,}5160\times10^{-4}$	$-2{,}4422\times10^{-4}$	$-2{,}7482\times10^{-4}$	$-1{,}47990\times10^{-3}$
4.2	$-6{,}174241\times10^{-5}$	$-1{,}2854\times10^{-4}$	$-2{,}0865\times10^{-4}$	$-2{,}3565\times10^{-4}$	$-3{,}68056\times10^{-4}$
4.4	$-5{,}297865\times10^{-5}$	$-1{,}1216\times10^{-4}$	$-1{,}8056\times10^{-4}$	$-2{,}0447\times10^{-4}$	$-4{,}57483\times10^{-4}$
4.6	$-4{,}508208\times10^{-5}$	$-9{,}6771\times10^{-5}$	$-1{,}5698\times10^{-4}$	$-1{,}7625\times10^{-4}$	$-3{,}95483\times10^{-4}$
4.8	$-3{,}836279\times10^{-5}$	$-8{,}3553\times10^{-5}$	$-1{,}3777\times10^{-4}$	$-1{,}5305\times10^{-4}$	$-3{,}27692\times10^{-4}$
5.0	$-3{,}287038\times10^{-5}$	$-7{,}3725\times10^{-5}$	$-1{,}1998\times10^{-4}$	$-1{,}3187\times10^{-4}$	$-2{,}63467\times10^{-4}$
6.0	$-1{,}623121\times10^{-5}$	$-3{,}9520\times10^{-5}$	$-6{,}6847\times10^{-5}$	$-7{,}1585\times10^{-5}$	$-1{,}55927\times10^{-4}$
7.0	$-8{,}526352\times10^{-6}$	$-2{,}3246\times10^{-5}$	$-4{,}0601\times10^{-5}$	$-4{,}2108\times10^{-5}$	$-9{,}30113\times10^{-5}$
8.0	$-4{,}649999\times10^{-6}$	$-1{,}4259\times10^{-5}$	$-2{,}5812\times10^{-5}$	$-2{,}7878\times10^{-5}$	$-6{,}40956\times10^{-5}$
10.0	$-1{,}447423\times10^{-6}$	$-6{,}2931\times10^{-6}$	$-1{,}2237\times10^{-5}$	$-1{,}2416\times10^{-5}$	$-2{,}97147\times10^{-5}$
11.0	$-8{,}546447\times10^{-7}$	$-4{,}3324\times10^{-6}$	$-8{,}9446\times10^{-6}$	$-9{,}4170\times10^{-6}$	$-5{,}77901\times10^{-5}$
12.5	$-3{,}236127\times10^{-7}$	$-2{,}5510\times10^{-6}$	$-5{,}6300\times10^{-6}$	$-5{,}3848\times10^{-6}$	$-1{,}31370\times10^{-5}$
15.0	$-1{,}237809\times10^{-7}$	$-1{,}1131\times10^{-6}$	$-2{,}8660\times10^{-6}$	$-2{,}4471\times10^{-6}$	$-9{,}24740\times10^{-6}$
20.0	$-3{,}696234\times10^{-9}$	$-2{,}1918\times10^{-7}$	$-8{,}9201\times10^{-7}$	$-4{,}3204\times10^{-7}$	$-3{,}09557\times10^{-6}$

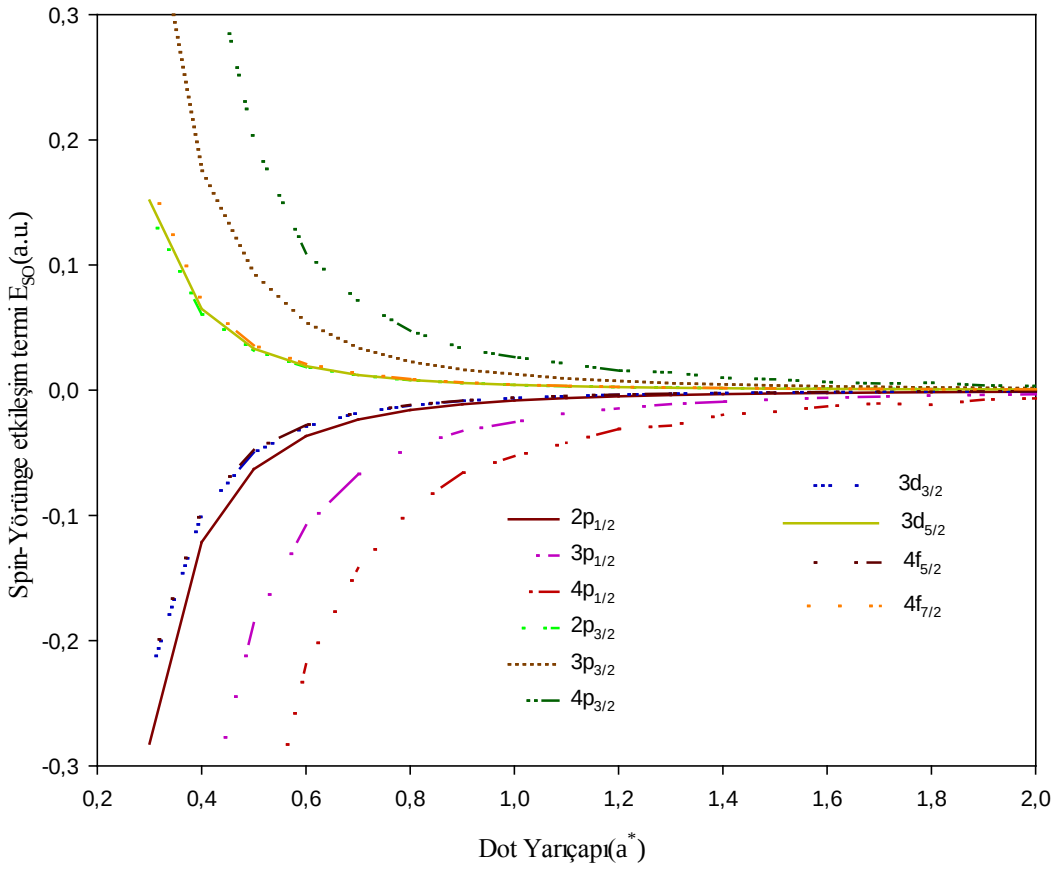
Çizelge 6.6 l=1 seviyeleri için Spin-Yörünge Enerji düzeltmeleri. Değerler Hartree (H) birimindedir

R	$2p_{1/2}$	$3\ p_{1/2}$	$4\ p_{1/2}$	$2\ p_{3/2}$	$3\ p_{3/2}$	$4\ p_{3/2}$
0.5	-0.0630	-0.1860	-0.3961	0.0315	0.0930	0.1981
0.6	-0.0366	-0.1079	-0.2190	0.0183	0.0539	0.1095
0.7	-0.0234	-0.0672	-0.1421	0.0117	0.0336	0.0711
0.8	-0.0158	-0.0453	-0.0948	7.9164×10^{-3}	0.0226	0.0474
0.9	-0.0112	-0.0326	-0.0661	5.6096×10^{-3}	0.0163	0.0330
1.0	-8.222×10^{-3}	-0.0254	-0.0526	4.1110×10^{-3}	0.0127	0.0263
1.1	-6.2433×10^{-3}	-0.0184	-0.0420	3.1217×10^{-3}	9.1998×10^{-3}	0.0210
1.2	-4.8647×10^{-3}	-0.0146	-0.0311	2.4323×10^{-3}	7.2827×10^{-3}	0.0155
1.3	-3.8700×10^{-3}	-0.0112	-0.0283	1.9350×10^{-3}	5.5781×10^{-3}	0.0141
1.4	-3.1384×10^{-3}	-9.1513×10^{-3}	-0.0196	1.5692×10^{-3}	4.5756×10^{-3}	9.8216×10^{-3}
1.5	-2.5796×10^{-3}	-7.4547×10^{-3}	-0.0172	1.2898×10^{-3}	3.7273×10^{-3}	8.6048×10^{-3}
1.6	-2.1680×10^{-3}	-6.0407×10^{-3}	-0.0129	1.0840×10^{-3}	3.0203×10^{-3}	6.4631×10^{-3}
1.7	-1.8149×10^{-3}	-5.1110×10^{-3}	-0.0106	9.0746×10^{-3}	2.5555×10^{-3}	5.2845×10^{-3}
1.8	-1.5345×10^{-3}	-4.2149×10^{-3}	-0.0118	7.6727×10^{-3}	2.1075×10^{-3}	5.8899×10^{-3}
1.9	-1.3418×10^{-3}	-3.6896×10^{-3}	-7.5996×10^{-3}	6.7089×10^{-3}	1.8448×10^{-3}	3.7998×10^{-3}
2.0	-1.1662×10^{-3}	-3.1927×10^{-3}	-6.5835×10^{-3}	5.8312×10^{-4}	1.5964×10^{-3}	3.2918×10^{-3}
2.1	-1.0182×10^{-3}	-2.7740×10^{-3}	-5.6440×10^{-3}	5.0911×10^{-4}	1.3870×10^{-3}	2.8220×10^{-3}
2.3	-7.9478×10^{-4}	-2.2280×10^{-3}	-4.3769×10^{-3}	3.9739×10^{-4}	1.1140×10^{-3}	2.1885×10^{-3}
2.4	-7.0871×10^{-4}	-1.9052×10^{-3}	-3.8398×10^{-3}	3.5435×10^{-4}	9.5261×10^{-4}	1.9199×10^{-3}
2.5	-6.3534×10^{-4}	-1.703×10^{-3}	-3.4209×10^{-3}	3.1767×10^{-4}	8.5164×10^{-4}	1.7105×10^{-3}
2.6	-5.7094×10^{-4}	-1.5960×10^{-3}	$-3.0691\text{x}10^{-3}$	2.8547×10^{-4}	7.9798×10^{-4}	1.5345×10^{-3}
2.7	-5.1158×10^{-4}	-1.767×10^{-3}	$-5.496\ \text{x}10^{-3}$	2.5579×10^{-4}	8.8355×10^{-4}	2.7482×10^{-3}
2.8	-4.6810×10^{-4}	-1.2981×10^{-3}	$-2.6156\text{x}10^{-3}$	2.3405×10^{-4}	6.4904×10^{-4}	1.3078×10^{-3}
2.9	-4.2880×10^{-4}	-1.1339×10^{-3}	$-2.2407\text{x}10^{-3}$	2.1440×10^{-4}	5.6697×10^{-4}	1.1204×10^{-3}
3.0	-3.9269×10^{-4}	-1.0308×10^{-3}	-2.0361×10^{-3}	1.9635×10^{-4}	5.1542×10^{-4}	1.0180×10^{-3}
3.2	-3.2893×10^{-4}	-8.2797×10^{-4}	-3.6965×10^{-3}	1.6447×10^{-4}	4.1399×10^{-4}	1.8483×10^{-3}
3.4	-2.8356×10^{-4}	-7.1822×10^{-4}	-3.0674×10^{-3}	1.4178×10^{-4}	3.5911×10^{-4}	1.5337×10^{-3}
3.6	-2.4586×10^{-4}	-6.1694×10^{-4}	-1.2322×10^{-3}	1.2293×10^{-4}	3.0847×10^{-4}	6.1610×10^{-4}
3.8	-2.1473×10^{-4}	-5.5295×10^{-4}	-2.2039×10^{-3}	1.0737×10^{-4}	2.7648×10^{-4}	1.1020×10^{-4}
4.0	-1.9029×10^{-4}	-4.6810×10^{-4}	-1.9020×10^{-3}	9.5146×10^{-5}	2.3405×10^{-4}	9.5100×10^{-4}
4.2	-1.6884×10^{-4}	-4.1264×10^{-4}	-5.8726×10^{-4}	8.4421×10^{-5}	2.0632×10^{-4}	2.9363×10^{-4}
4.4	-1.5241×10^{-4}	-3.6911×10^{-4}	-7.0057×10^{-4}	7.6205×10^{-5}	1.8456×10^{-4}	3.5029×10^{-4}
4.6	-1.2490×10^{-4}	-2.9186×10^{-4}	$-5.2368\times10^{-4-}$	6.2448×10^{-5}	1.4593×10^{-4}	2.6184×10^{-4}
4.8	-1.2490×10^{-4}	-2.9186×10^{-4}	-5.2368×10^{-4}	6.2448×10^{-5}	1.4593×10^{-4}	2.6184×10^{-4}
5.0	-1.1404×10^{-4}	-2.6122×10^{-4}	-4.4013×10^{-4}	5.7022×10^{-5}	1.3061×10^{-4}	2.2007×10^{-4}
6.0	-7.8297×10^{-5}	-1.6523×10^{-4}	-2.8810×10^{-4}	3.9149×10^{-5}	8.2613×10^{-5}	1.4405×10^{-4}
7.0	-5.9173×10^{-5}	-1.1387×10^{-4}	-1.9262×10^{-4}	2.9587×10^{-5}	5.6934×10^{-5}	9.6308×10^{-5}
8.0	-4.8089×10^{-5}	-8.4339×10^{-5}	-1.4011×10^{-4}	2.4045×10^{-5}	4.2170×10^{-5}	7.0054×10^{-5}
9.0	-4.1366×10^{-5}	-6.5041×10^{-5}	-1.0518×10^{-4}	2.0683×10^{-5}	3.2520×10^{-5}	5.2590×10^{-5}
10.	-3.7106×10^{-5}	-5.0785×10^{-5}	-8.1230×10^{-4}	1.8553×10^{-5}	2.5393×10^{-5}	4.0615×10^{-5}
11.	-3.4497×10^{-5}	-4.2282×10^{-5}	-1.3709×10^{-4}	1.7249×10^{-5}	2.1141×10^{-5}	6.8546×10^{-5}
12.	-3.2727×10^{-5}	-3.3979×10^{-5}	-5.3050×10^{-5}	1.6364×10^{-5}	1.6989×10^{-5}	2.6525×10^{-5}
15.	-3.0753×10^{-5}	-2.1131×10^{-5}	-3.4655×10^{-5}	1.5377×10^{-5}	1.0565×10^{-5}	1.7328×10^{-5}
17.	-3.0321×10^{-5}	-1.6271×10^{-5}	-2.5347×10^{-5}	1.5161×10^{-5}	8.1356×10^{-6}	1.2674×10^{-5}

Çizelge 6.7 Bazı uyarılmış enerji seviyeleri için (*l=2,3*) Spin-Yörünge Enerji düzeltmeleri . Değerler Hartree (H) birimindedir

R	$3d_{3/2}$	$3d_{5/2}$	$4f_{5/2}$	$4f_{7/2}$
0.5	-0.0498	0.0332	-0.0477	0.0209
0.6	-0.0288	0.0192	-0.0278	0.0133
0.7	-0.0182	0.0121	-0.0177	8.8416×10^{-3}
0.8	-0.0122	8.1645×10^{-3}	-0.0118	6.2197×10^{-3}
0.9	-8.6365×10^{-3}	5.7576×10^{-3}	-8.2929×10^{-3}	4.5378×10^{-3}
1.0	-6.3036×10^{-3}	4.2024×10^{-3}	-6.0504×10^{-3}	3.4185×10^{-3}
1.1	-4.7691×10^{-3}	3.1794×10^{-3}	-4.5580×10^{-3}	2.6306×10^{-3}
1.2	-3.6757×10^{-3}	2.4505×10^{-3}	-3.5075×10^{-3}	2.0821×10^{-3}
1.3	-2.9030×10^{-3}	1.9353×10^{-3}	-2.7762×10^{-3}	1.6647×10^{-3}
1.4	-2.3317×10^{-3}	1.5545×10^{-3}	-2.2196×10^{-3}	1.3462×10^{-3}
1.5	-1.9047×10^{-3}	1.2698×10^{-3}	-1.7949×10^{-3}	1.1202×10^{-3}
1.6	-1.5762×10^{-3}	1.0508×10^{-3}	-1.4936×10^{-3}	9.3558×10^{-4}
1.7	-1.3198×10^{-3}	8.7985×10^{-4}	-1.2474×10^{-3}	7.8970×10^{-4}
1.8	-1.1037×10^{-3}	7.3579×10^{-4}	-1.0529×10^{-3}	6.7097×10^{-4}
1.9	-9.5565×10^{-4}	6.3710×10^{-4}	-8.9463×10^{-4}	5.7888×10^{-4}
2.0	-8.2242×10^{-4}	5.4828×10^{-4}	-7.7184×10^{-4}	4.9850×10^{-4}
2.1	-7.1287×10^{-4}	4.7525×10^{-4}	-6.6467×10^{-4}	3.8298×10^{-4}
2.3	-5.4568×10^{-4}	3.6379×10^{-4}	-5.1065×10^{-4}	3.3765×10^{-4}
2.4	-4.8529×10^{-4}	3.2353×10^{-4}	-4.5020×10^{-4}	2.9901×10^{-4}
2.5	-4.2736×10^{-4}	2.8490×10^{-4}	-3.9868×10^{-4}	2.6674×10^{-4}
2.6	-3.8357×10^{-4}	2.5572×10^{-4}	-3.5566×10^{-4}	2.3895×10^{-4}
2.7	-3.4788×10^{-4}	2.3192×10^{-4}	-3.1860×10^{-4}	2.1403×10^{-4}
2.8	-3.1042×10^{-4}	2.0695×10^{-4}	-2.8537×10^{-4}	1.9333×10^{-4}
2.9	-2.7934×10^{-4}	1.8623×10^{-4}	-2.5777×10^{-4}	1.7502×10^{-4}
3.0	-2.5450×10^{-4}	1.6967×10^{-4}	-2.3336×10^{-4}	1.4427×10^{-4}
3.2	-2.1056×10^{-4}	1.4037×10^{-4}	-1.9236×10^{-4}	1.1961×10^{-4}
3.4	-1.7731×10^{-4}	1.1821×10^{-4}	-1.5948×10^{-4}	1.0005×10^{-4}
3.6	-1.5067×10^{-4}	1.0045×10^{-4}	-1.3341×10^{-4}	8.7132×10^{-4}
3.8	-1.2997×10^{-4}	8.6646×10^{-4}	-1.1618×10^{-4}	7.5462×10^{-4}
4.0	-1.1170×10^{-4}	7.4466×10^{-5}	-1.006×10^{-4}	6.5239×10^{-5}
4.2	-9.6912×10^{-4}	6.4608×10^{-5}	-8.6985×10^{-5}	5.7073×10^{-5}
4.4	-8.6112×10^{-5}	5.7408×10^{-5}	-7.6097×10^{-5}	4.4568×10^{-5}
4.6	-6.7277×10^{-5}	4.4851×10^{-5}	-5.9423×10^{-5}	4.4568×10^{-5}
4.8	-6.7277×10^{-5}	4.4851×10^{-5}	-5.9423×10^{-5}	3.9299×10^{-5}
5.0	-6.0585×10^{-5}	4.0390×10^{-5}	-5.2399×10^{-5}	3.4913×10^{-5}
6.0	-3.6670×10^{-5}	2.4447×10^{-5}	-3.1017×10^{-5}	1.8599×10^{-5}
7.0	-2.4447×10^{-5}	1.6298×10^{-5}	-2.0051×10^{-5}	1.2484×10^{-5}
8.0	-1.7262×10^{-5}	1.1508×10^{-5}	-1.3640×10^{-5}	8.7077×10^{-6}
9.0	-1.3070×10^{-5}	8.7132×10^{-6}	-9.9343×10^{-6}	5.5578×10^{-6}
10.0	-1.0178×10^{-5}	6.7851×10^{-6}	-7.4103×10^{-6}	4.3513×10^{-6}
11.0	-8.2281×10^{-6}	5.4854×10^{-6}	-5.8017×10^{-6}	3.8365×10^{-6}
12.0	-6.8456×10^{-6}	4.5638×10^{-6}	-4.5675×10^{-6}	3.0852×10^{-6}
15.0	-4.5296×10^{-6}	3.0198×10^{-6}	-2.5876×10^{-6}	1.6556×10^{-6}
17.0	-3.7682×10^{-6}	2.5122×10^{-6}	-1.9131×10^{-6}	9.9822×10^{-7}

Çizelge 6.6 da p orbitalleri (ℓ=1) için j=1/2 ve 3/2 değerlerine karşılık gelen, Çizelge 6.7 de ise d orbitali (ℓ =2) için j=3/2 ve 5/2 ve f orbitali (ℓ =3) için j=5/2 ve 7/2 değerlerine karşılık gelen spin-yörünge etkileşiminden kaynaklanan enerji düzeltmeleri belirli dot yarıçapları için hesaplanan değerler verilmiştir. Şekil 6.4 de ise bu değerlerin dot yarıçapına göre değişim grafiği çizilmiştir. $nP_{1/2}$, $3D_{3/2}$ ve $4F_{5/2}$ orbitalleri için hesaplanan spin-yörünge etkileşim düzeltme terimleri negatif katkı getirdiği, $nP_{3/2}$, $3D_{5/2}$ ve $4F_{7/2}$ orbitalleri için hesaplanan spin-yörünge etkileşim düzeltme terimleri pozitif katkı getirdiği Şekil 6.4 ve Çizelge 6.6 ve 6.7 den görülmektedir.



Şekil 6.4 Bir elektronlu kuantum nokta yapının bazı seviyelerin Spin-Yörünge etkileşim terimlerinin dot yarıçapına göre değişimi.

Baş kuantum sayısı n si büyük olan orbitallerden gelen katkı büyük olurken, baş kuantum sayısı küçüldükçe bu katkı azalmaktadır. Kuantum nokta yapının boyutları(yarıçapı) küçüldükçe spin-yörünge enerji düzeltme teriminin mutlak değeri artmaktadır. Bunun tersine dot yarıçapı büyüdükçe bu değer çok küçük olmaktadır. Küçük dot yarıçaplarında spin-yörünge enerji düzeltme teriminin değerinin büyük olmasının sebebi; dot yarıçapı küçüldükçe güçlü sınırlandırma olduğu için parçacığın dağılım fonksiyonunun dar bir bölgeye sıkıştırılmasıdır. Yani parçacığın hızı artmaktadır. Bu da spin-yörünge enerji düzeltme teriminin değerini arttırmaktadır. Dot yarıçapı büyüdükçe olasılık fonksiyonu daha geniş bir bölgeye yayılmaktadır. Bu da spin-yörünge etkileşim teriminin değerini düşürmektedir.

Sonuç olarak, Bir elektronlu parabolik potansiyele sahip sonsuz küresel potansiyelle sınırlandırılmış kuantum nokta yapının elektronik yapısına rölativistik düzeltme terimlerinin (Kinetik enerji, Darvin ve Spin-Yörünge) etkisi incelendi. Taban ve bazı uyarılmış durumlar için enerji özdeğerleri, dalga fonksiyonları ve rölativistik düzeltme terimleri hesaplandı. Çok küçük dot yarıçaplarında enerji özdeğerleri hidrojen atamunun enerji özdeğerlerine yaklaşmaktadır. Safsızlığın varlığı elektronun hareketlerini etkilediğinden dolayı rölativistik terimler üzerine büyük bir katkısı oluğu görülmektedir. Ayrıca rölativistik düzeltme terimleri küçük dot yarıçaplarında daha çok etkili olduğu görülmektedir.

KAYNAKLAR

Anderson, R. L., 1962, Experiments on Ge-GaAs heterojunctions. Solid-State Electron, 5: 341-344.

Ashoori, R. C., Stommer, H. L., Weiner, J. S., Pfieffer, L.N., Pearton, S. L., Baldwin, K. W. and West, K.W., 1992, Single electron capacitances spectroscopy of discrete quantum levels, Physical Rewiev Letters, 68: 3082-3092.

Bardeen, J., Brattain, W. H., 1948, The transistor, a semi-conductor triode, Physical Review, 74: 230-231.

Bastard, G., 1984, Self-Consistent variational calculations and alloy scattering in semiconductor heterojunctions, Surface Science,142: 284-289.

Bednarek, S., Szafran, B., Adamowski, J., 1999, Many-electron artificial atoms, Physical review B, 59: 13036-13042.

Bednarek, S., Szafran, B., Adamowski, J., 2001, Theorical Description of electronic properties of vertical gated quantum dots, Physical Review B, 64: 195303(1-13).

Bimberg, D., Grundmann, M., Ledentsov, N. N., 1999, Quantum dot heterostructures, John Wiley & Sons Ltd, Chichester.

Bose, C., and Sarkar, C. K., 1998, Effect of a parabolic potetial on the impurity binding energy in spherical quantum dots, Pyhsica B, 253: 238-241.

Bruner, J., Menczigar, U., Gail, M., Friess, E., Abstreiter, G., 1992, Band gap luminescence in pseudomorphic $Si_{1-x}Ge_x$ quantum wells grown by molecular beam epitaxy, Thin Solid Films, 222:1, 27-29.

Brownstein, K. R., 1993, Variational principle for confined quantum systems, Physical Rewiev Letters, 71: 1427-1230.

Castro, C. F., António, C. A. C., Sousa, L. C., 2004, Optimisation of shape and process parameters in metal forging using genetic algorithms, Journal of Materials Processing Technology, 146: 356-364.

Ceperley, D. M., 1978, Ground state of the fermion one-component plasma: A Monte Carlo study in two and three dimensions, Physical Review B, 18: 3126-3138.

Chang, L. L., Esaki, L., Tsu, R., 1974, Resonant tunneling in semiconductor double barriers, Applied Physics Letters, 24:593-595.

Chaudhury, P. and Bhattacharyya, S. P., 1998, Numerical solutions of the Schrödinger equation directly or perturbatively by a genetic algorithm: test cases, Chemical Physics Letters, 296: 51-60.

Cho, A. Y., Arthur, J. R., 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., Kim, E.K., 1998, Fabrication and room-temperature characterization of a silicon self-assembled quantum-dot transistor, Applied Physics Letters,73: 3129-3131.

Cibert, J., Petroff, P. M., Dolan, G. J., Pearton, S. J., Gossard, A. C., English, J. H., 1986, Optically detected carrier confinement to one and zero dimension in GaAs quantum well wires and boxes, Applied Physics Letters, 49: 1275-1277.

Connerade, J.P., Dolmatov, V.K. and Lakshmi, P.A., 2000, The filling of shells in compressed atoms, Journal Physics B: At.Mol. Opt. Phys., 33: 251-264.

Coley, D. A., 2001 An Introduction to Genetic Algorithms for Scientists and Engineers, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore

Cakir, B., Yakar, Y.,Ozmen, A., 2012, Refractive index changes and absorption coefficients in a spherical quantum dot with parabolic potential, *Journal Of Luminescence*, 132, 2659-2664

Çakır, B., Özmen, A., Atav, Ü., Yüksel, H. and Yakar, Y., 2007, Investigation of electronic structure of a quantum dot using Slater-type orditals and quantum genetic algorithm, International Journal of Modern Physics C., 18: 61-72.

Çakır, B., 2007, Çok Elektronlu Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi, Doktora Tezi, *Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü*, Konya

Çakır, B., Özmen, A., Şahin, M., Yakar, Y., Atav, Ü. and Yüksel, H., 28-30 August. 2006, Determination of wave functions of a quantum dot using the genetic algorithm, Proceedings of the international conference on modeling and simulation, Konya,Turkey, paper No:B032

Dingle, R., Störmer, H. L., Gossard, A. C., Wiegmann, W., 1978, Electron mobilities in modulation-doped semiconductor heterojunction superlattices, Applied Physics Letters, 33: 665-667.

Dingle, R., Wiegmann, W., Henry, C. H., 1974, Quantum states of confined carriers in very thin $Al_xGa_{1-x}As$-GaAs-$Al_xGa_{1-x}As$ heterostructures, Physical Review Letters, 33: 827-830.

Ekimov, A. I., Efros, A. L., Onushchenko A. A., 1985, Quantum size effect in semiconductor microcrystals, Solid State Communication, 56: 921-924.

Esaki, L., Tsu, R., 1970, Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors, IBM Journal of Research and Development, 14: 61-65.

Fujito, M., Natori, A.,and Yasunaga, H., 1996, Many-electron ground states in anisotropic parabolic quantum dots, Physical Rewiev B , 53: 9952-9958.

Fukui, T., Ando, S., Tokura, Y., 1991, GaAs Tetrahedral Quantum dot Structures Fabricated Using selection area metalorganic Vapor Deposition, Appl. Physics Letters, 58: 2018.

Gammon, D., 2000, Semiconductor physics: Electrons in artificial atoms, Nature, 405: 899-900.

Greiner, W., 1987, Relativistic Quantum Mechanics,Springer, Berlin.

Grigorenko, I., Garcia M. E., 2000, An evolutionary algorithm to calculate the ground state of a quantum system, Physica A, 284: 131-139.

Grigorenko, I., Garcia M. E., 2001, Ground-state wavefunctions of two-particle systems determined using quantum genetic algorithms, Physica A, 291: 439-448.

Grigorenko, I., Garcia M. E., 2002, Calculation of the parttition function using quantum genetic algorithms, Physica A, 313: 463-470.

Hall, R. N., Fenner, G. E., Kingsley, J. D., Soltys, T. J., Carlson, R. O., 1962, Coherent light elemission from GaAs junctions, Physical Review Letters, 9: 366-368.

Hansen, W. ,Horst. M., Kotthaus, J.P., Merkt, U. And Sikorski, Ch., 1987, Intersubband Resonance in quasi one-dimensional inversion channels, Physical Rewiev Letters, 58:2586-2589.

Hiller, J., Sucher, J., Feinberg, G., 1978, New Techniques for evaluating parity-conserving and parity-violating contact interactions, Phys. Rev. A 18, 2399.

Holland, J. H., 1975, Adaptation in Natural and Artificial Systems, University of Michigan, Ann Arbor, MI.

Homaifar, A., Lai, H. Y., McCormick, E., 1994, System optimization of turbofan engines using genetic algorithms, Applied Mathematical Modelling, 18: 72-83.

Jacak, L., Hawrylak, P., Wojs, A., 1998, Quantum dots, SpringerVerlag, Berlin, Hiedelberg.

Jaskolski, W., 1996, Confined many-electron systems, Physics Reports, 271: 1-66.

Katari, J. E. B., Colvin, V. L., Alvisatos, A. P., 1994, X-ray photoelectron spectroscopy of CdSe nanocrystals with applications to sdudies of the nanocrystal surface, Journal of Physical Chemistry, 98: 4109-4117.

Kouwenhoven, L., Marcus, C., 1998 Quantum dots, Physics World, 11:35-39

Kulkarni, A. J., Krishnamurthy, K., Deshmukh, S. P., Mishra R. S., 2004, Microstructural optimization of alloys using a genetic algorithm, Materials Science and Engineering A, 372: 213-220.

Lai, W. Y., Das Sarma, S., 1986, Ground-state variational wave function for the quasi-one-dimensional semiconductor quantum wire, Physical Review B, 33: 8874-8877.

Lee, I-H., Rao, V., Martin, R.M., Leburton, J-P., 1998, Shell filling of artificial atoms within density-functional theory, Physical Review B, 57: 9035-9041.

Maksym, P. A., Chakraborty, T., 1990, Quantum dots in a magnetic field: role of electron-electron interactions, American Physical Society, 65: 108-111

Marin, J. L., Cruz, S. A., 1991, Enclosed quantum systems:use of direct variatinal method, Jornal Physics B: At. Mol.Opt. Phys., 24:2899-2907.

McCharty, S. A., Wnag, J.B., Abbott, P.C., 2001, Electronic structure calculation for N-electron quantum dots, Computer Physics Communications, 141: 175-204.

Murray, C. B., Norris, D. J. And Bowerdi, M. G., 1993, Synthesis and characterization of nearly monodisperse CdE(E=sulfur, selenium, tellurium) semiconductor nanocrystallites, Journal of American Chemical Society, 115: 8706.

Nakanishi, H., Sugawara, M., 2000, Numerical solution of the Schrodinger equation by a microgenetic algorithm, Chemical Physics Letters, 327 429-438.

Nomoto, K., Ugajin, R., Suzuki, T., Taira, K., Hase, I., 1998, Quantum-dot based opto-electronic device, IEICE Transactions on Electronics E, 81C: 8-15.

Ozmen, A., Yakar, Y., Cakır B., Atav, U., 2009, *Optics Communications*, 282, 3999–4004.

Petroff, P. M., Gossard, A. C., Logan, R. A., Wiegmann, W., 1982, Toward quantum well wires: Fabrication and optical properties, Applied Physics Letters, 41, 635-638.

Reed, M.A., 1993, Quantum dots, Scientific American, 268: 118-123.

Reed, M.A., Bate, R. T., Bradshaw, K., Duncan, W. M., Frensley, W. M., Lee, J. W., Smith, H. D., 1986, Spatial quantization in GaAs-AlGaAs multiple quantum dots, Journal of Vacuum Science & Technology, B 4: 358-360.

Reusch, B., Grabert, H., 2003, Unrestricted Hartree-Fock for quantum dots. Physical Review B, 68: 045309.Modern Physics, 23: 69-89.

Ryzhii, V., 1996, The theory of quantum-dot infrared phototransistors, Semiconductor Science and Technology, 11: 759-765.

Saha, R., Chaudhury, P., Bhattacharyya, S. P., 2001, Direct solution of Schrodinger equation by genetic algorithm: test cases, Physics Letters A, 291: 397-406.

Schrieffer, J. R., 1957, In Semiconductor Surface Physics, Kingston, R. H. (ed), p.55, University of Pennsylvania Press, Philadelphia.

Shockleey, W., 1949, Bell System, Technical Journal, 28: 435.

Sim, J. S., Kong, J., Lee, J. D., Park, B. G., 2004, Monte Carlo simulation of single-electron nanocrystal memories, Japanese Journal of Applied Physics, 43: 2041-2045. York.

Smith, W., 1873, J.Soc.Telegr. Eng.2:31

Smith, T.P., Arnot, H., Hong, J.M., Knoedler, C.M., Laux, S. E. And Schmid, H., 1987, Capacitance oscillations in one-diemensional electron systems, Physical Letters, 59: 2802-2805.

Szafran, B., Adamowski, J., Stebe, B. 1998 Energy spectrum of D^- centres in spherical quantum dots. Journal of Physics: Condensed Matters 10: 7575-7586.

Szafran, B., Adamowski, J., Bednarek, S., 1999, Ground and excited states of few-electron systems in spherical quantum dots, Physica E, 4: 1-10

Şafak, H., Şahin, M., Gülveren, B., Tomak, M., 2003, Efficiency of genetic algorithm and determination of ground state energy of impurity in a spherical quantum dot, International Journal of Modern Physics C, 14: 775-784.

Şahin, M., Tomak, M., 2002, Self-consistent calculation of semiconductor heterojunctions using quantum genetic algorithm, International Journal of Modern Physics B, 16: 3883-3893.

Şahin, M. and Tomak, M. 2005, Electronic structure of a many-electron spherical quantum dot with an impurity, Physical rewiev B, 72: 125323(1-6)

Şahin, Ö., Sayan, P., Bulutcu, A. N., 2000, Application of genetic algorithm for determination of mass transfer coefficients. Journal of Crystal Growth 216: 475-482.

Tandon, U. S., Khokle, W. S., 1994, Patterning of Material Layers in Submicron Region, John Wiley & Sons Ltd, New York.

Temkin, H., Dolan, G. J., Panish, M. B., Chu, S. N. G., 1987, Low-temperature photoluminescence from InGaAs/InP quantum wires and boxes, Applied Physics Letters, 50, 413-415.

Vander Ziel, J.P., Miller, R.C., Wiegmam, W., Nordland, W.A., 1975, Laser oscillation from states in very thin Laser oscillation from quantum states in very thin GaAs−Al0.2Ga0.8As multilayer structures, Appilied Physics Letters, 26:463-465

van Wees, B. J., van Houten, H. Beenakker, C. W., Williamson, J. G., Kouwenhoven, L. P, van der Marel, D., Foxon, C. T., 1988, Quantized conductanceof point contacts a two-dimensional electron gas, Physics Review Letters, 60: 848-850 .

Varshni, Y. P., 1999, Accurate wavefunctions for hydrogenic donors in GaAs-(GaAl)As quantum dots, Physics Letters A, 252: 248-250.

Varshni, Y. P., 2001, Binding energy of a screened donor in a spherical quantum dot with a parabolic potential, Superlattices and microstructures, 29: 233-238.

Venugopal, V., Narendran, T.T., 1992, A genetic algorithm approach to the machine-component grouping problem with multiple objectives, Computers & Industrial Engineering, 22: 469-480.

Yakar, Y., Özmen, A., Atav, Ü., 2006, Evaluarion of two-center one- and two-electron ıntegral over Slayter type orbitals, Chinise Journal of Chemistry, 24: 603-608.

Yakar, Y., 2007, Evaluation of orbital-and Ground stated energies of some open-and closed shell atoms over integer and noninteger Slater type orbitals. Chinise Journal of Chemistry ,25:25-31.

Yakar, Y., Cakır, B., Ozmen, A., 2010, Linear and Nonlinear Optical Properties in Spherical Quantum Dots, *Commun. Theor. Phys.* , 53, 1185–1189

Yusuf Yakar, Bekir Çakır, Ayhan Özmen, 2011 International Journal of Quantum Chemestry Vol.111, 4139-4149

Yusuf Yakar, Bekir Çakır, Ayhan Özmen, Computation of relativistic terms in a spherical quantum dot, *Journal of Luminescence* ,134 (2013) 778–783

Yusa, G., Sakaki, H., 1999, InAs quantum dot field effect transistors, Superlattices and Microstructures, 25: 247-250.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

Adı Soyadı	**:**	Oğuzhan GÜNDÜZ
Uyruğu	**:**	T.C
Doğum Yeri ve Tarihi	**:**	ELAZIĞ- 01/10/1980
Telefon	**:**	
Faks	**:**	
e-mail	**:**	oguzhanfizik@windowslive.com

EĞİTİM

Derece		**Adı, İlçe, İl**	**Bitirme Yılı**
Lise	:	**Konya İmam Hatip Lisesi Selçuklu /KONYA**	**1999**
Üniversite	:	**Selçuk Üniversitesi F.E.F Fizik Bölümü Selçuklu /KONYA**	**2007**
Yüksek Lisans	:	**Selçuk Üniversitesi F.E.F Fizik Bölümü Selçuklu /KONYA**	**Devam ediyor**
Doktora	:		

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	**Kurum**	**Görevi**
2008-2011	Konya uğur dersanesi	Öğretmen
2011-2013	Konya Koç Eğitim Dersanesi	Öğretmen
2013-2014	Konya Sınav Dersanesi	Öğretmen