T.C.
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

HARTREE FOCK ROOTHAAN YAKLAŞIMI VE GENETİK ALGORİTMA YÖNTEMİNİN ÇOK ELEKTRONLU SINIRLANDIRILMIŞ SİSTEMLERE UYGULANMASI

Seyfullah Semih DOĞAN

YÜKSEK LİSANS

Fizik Anabilim Dalını

3Nisan-2019
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

HARTREE FOCK ROOTHAAN YAKLAŞIMI VE GENETİK ALGORİTMA YÖNTEMİNİN ÇOK ELEKTRONLU SINIRLANDIRILMIŞ SİSTEMLERE UYGULANMASI

Seyfullah Semih DOĞAN

Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü
Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Bekir ÇAKIR

2019, 66 Sayfa

Jüri
Prof. Dr. Bekir ÇAKIR
Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN
Prof. Dr. Yusuf YAKAR

Bu tez çalışmasında çok elektronlu kuantum nokta yapıların elektronik özellikleri Kuantum Genetik Algoritma(KGA) ve Hartree-Fock-Roothaan(HFR) yaklaşımlarının birleştirilmesi ile incelenmiştir. Hesaplamalarda Sonsuz derinlikli küresel simetrik sınırlayıcı potansiyel ile sınırlandırılmış helyum, lityum ve berilyum benzeri kuantum nokta yapılar ele alındı. Bu yapıların elektronik yapısı nokta yarıçapına ve safsızlık yüküne bağlı olarak incelendi. Bu yapıların elektronik yapısı ve bağlanma enerjileri safsızlık yüküne ve nokta yapı boyutlarına sıkı bir şekilde bağlı olduğu görüldü. Safsızlık yükü artarken bağlanma enerjisi artıyor ve enerji seviyeleri aşağıya kaydığı görülmüştür. Aynı zamanda nokta yarıçapı artarken enerji seviyelerinin hızlı bir şekilde azaldığı incelenmiştir.

Anahtar Kelimeler: Bağlanma Enerjisi, Çok Elektronlu Yapılar, Hartree-Fock-Roothaan Metod, Kuantum Nokta Yapı, Kuantum Genetik Algoritma, Slater Tipi Orbital

ABSTRACT

MS THESIS

APPLICATION OF HARTREE FOCK ROOTHAAN APPROXIMATIONAND GENETIC ALGORITHM METOD TO CONFINING SYSTEMS MANY ELECTRON

Seyfullah Semih DOĞAN

THE GRADUATE SCHOOL OF NATURAL AND APPLIED SCIENCEOF SELÇUK UNIVERSITY
THE DEGREE OF MASTER OF SCIENCE IN DEPERTMENT OF PHYSİCS

Advisor: Prof. Dr. Bekir ÇAKIR

2019, 66 Pages

Jury
Prof. Dr. Bekir ÇAKIR
Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN
Prof. Dr. Yusuf YAKAR

In this thesis, the electronic properties of many - electron quantum dot structures were investigated by the method which is a combination of the Quantum Genetic Algorithm (QGA) and Hartree Fock Roothaan (HFR). In the calculations, quantum dot structures such as helium, lithium and beryllium confined by spherical symmetric potential infinite depth were discussed. The electronic structure of these structures was investigated in terms dot redius and impurity change. The results show that. the binding energies of these structures were closely related to the impurity change quantum dot size. While the impurity load increased. The binding energies increass as the impurity change increased and the energy levels were shifted down. At the same time, as the dot radius increass, the energy levels decreas rapidly.

Keywords: Binding Energy, Multi-Electron Structures, Hartree-Fock Roothaan Method, Quantum Dot, Quantum Genetic Algorithm, Slater Type Orbital

ÖNSÖZ

Bu çalışma Selçuk Üniversitesi Fen bilimleri Enstitüsüne Yüksek Lisans tezi olarak sunulmuştur. Bu çalışmamızda günümüz teknolojisinde oldukça önem taşıyan Kuantum nokta yapıların elektronik özellikleri incelenmiştir. Nano ölçekli yapılarla ilgili çalışmaların neredeyse tamamı bir elektronlu yapılar üzerinde yapılmıştır. Yük sayısının fazla olduğu çalışmalar ise genellikle sayısal yöntemler üzerinde durularak incelenmiştir ve oldukça nadirdir. Sınırlandırılan parçacık sayısının fazla olduğu Kuantum Nokta Yapıların elektronik özelliklerinin belirlenmesi önemlidir. Bu tez çalışmasında Kuantum nokta yapı içerisindeki yük sayısının 1 den 4'e kadar arttırılarak elektronik yapısının KGA ve HFR tekniğiyle belirlendi. Sitemin elektronik durumu nokta yapının boyutlarına bağlı olarak hesaplandı. Günümüzde Kuantum nokta yapılar teknolojik alanda hafıza elemanları, infrared dedektörleri ve iletişim gibi alanlarda elektronik cihazların üretilmesinde kullanılmaktadır. Bu sebeple bilim insanlarının ilgisini çekmektedir. Yapılan bu çalışma Kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerinin belirlenmesinde olumlu katkı sağlaması amaçlanmıştır.

Çalışmalarım süresince üzerimden desteklerini esirgemeyen ve teşvik eden aileme teşekkürlerimi bir borç bilirim. Bu çalışmalarımda bilgi ve tecrübeleriyle bana her konuda yardımcı olan ve yön gösteren danışman hocam Sayın Prof. Dr. Bekir ÇAKIR'a en içten teşekkürlerimi sunarım. Ayrıca çalışmamın her safhasında bana sürekli yardımcı olan ve her konuda destek veren bölümümüz öğretim üyelerinden Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN hocama yardımlarından dolayı teşekkür ediyorum.

Seyfullah Semih DOĞAN
KONYA-2019

İÇİNDEKİLER

ÖZET ..... **iv**

ABSTRACT ..... **v**

ÖNSÖZ ..... **vi**

İÇİNDEKİLER ..... **vii**

SİMGELER VE KISALTMALAR ..... **ix**

1. GİRİŞ **1**

2. DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR **8**

2.1. Giriş 8
2.1. Düşük Boyutlu Yapılar 10
2.2.1. Kuantum Kuyuları 10
2.2.2. Kuantum Telleri 11
2.2.3. Kuantum Nokta Yapılar 13

3. KÜRESEL KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK YAPISI VE HESAPLAMA YÖNTEMLERİ **14**

3.1. Kuantum Nokta Yapının Elektronik Yapısı 14
3.2. Etkin Kütle Yaklaşımı 14
3.3. Genetik Algoritma(GA) 15
3.3.1.Yeniden Oluşum (Üretme) 18
3.3.2. Çaprazlama (Crossover) 19
3.3.3. Mutasyon 20
3.4. Hartree Yaklaşımı 21
3.5. Slater Determinant 24
3.6. Hartree-Fock Yaklaşımı 26
3.7. Hartree-Fock-Roothaan Yaklaşımı 30

4. ÇOK ELEKTRONLU KUANTUM NOKTA YAPILARDA GENETİK ALGORİTMA VE HARTREE FOCK ROOTHAAN YAKLAŞIMININ BİRLEŞTİRİLMESİ **33**

4.1. Hartree Fock Yaklaşımı 33

5. HESAPLAMA SONUÇLARI VE TARTIŞMALAR **39**

5.1. Giriş 39
5.2. Merkezinde Safsızlık Yükü Bulunan İki Elektronlu Sistemin Taban Durum Enerjisi 39
5.3. Merkezinde Farklı Safsızlık Yükü Bulunan Üç Elektronlu Sistemin Taban Durum Enerjisi 41
5.4. Merkezinde Farklı Safsızlık Yükü Bulunan Dört Elektronlu Sistemin Taban Durum Enerjisi 43

5.5. Bağlanma Enerjisi 45

KAYNAKLAR 49

ÖZGEÇMİŞ 56

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

Z :	Safsızlıktaki Pozitif Yük Sayısı
r_i :	Elektron ile Safsızlık Arasındaki Uzaklık
r_{ij} :	Elektronlar Arası Uzaklık
$V(r)$:	Dış Sınırlayıcı Potansiyel
a^* :	Etkin Bohr Yarıçapı
ψ :	Dalga fonksiyonu
ε :	Dielektrik Sabiti
F :	Elektrik Alan
R :	Nokta Yarıçapı
ζ_i :	Üstel Açılım Katsayısı
c_i :	Açılım Katsayısı
e :	Elektron Yükü
m^* :	Etkin Kütle

Kısaltmalar

MOS:	Metal Oxide Semiconductor
MOSFET:	Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor
STM:	Taramalı Tünelleme Mikroskopu
2BEG:	İki Boyutlu Elektron Gazı
STO:	Slater Tipi Orbital
GA:	Genetik Algoritma
KGA:	Kuantum Genetik Algoritma
HF:	Hartree-Fock
HFR:	Hartree-Fock-Roothaan
H:	Hamiltoniyen
MBE:	Moleküler Demet Epitaksi
QDIP:	Quantum Dot Infrared Photo Dedector
GTO	Gauss Tipi Orbital

1. GİRİŞ

Elektriğin keşfinden uzun yıllar sonra yirminci yüzyılın sonrasında işlevselliği arttırmak ve enerji tüketimini azaltmak için yarı iletken cihazlar üzerinde çalışmalar ivme kazanmıştır. Malzemeler iletkenliği $10^4 - 10^6 (\Omega.cm)^{-1}$ aralığında iletken, $10^{-10} (\Omega.cm)^{-1}$ den daha az olanlar yalıtkan ve $10^4 - 10^{-10} (\Omega.cm)^{-1}$ aralığında bazı katılar ise yarıiletken olarak adlandırılır. 1873 yılında selenyum atomunun fotoiletkenliğinin keşfiyle yarı iletken bilimi başlamış oldu(Smith, 1873). 1940'lı yıllara gelindiğinde transistörün keşfiyle bilimde yeni bir dönem başlamış oldu(Bardeen ve Brattain, 1948). 1950'li yıllarda yarı iletken aygıtların üzerinde kuantum sınırlandırmalarının etkileri ile ilgili tartışmalar başlamıştır. Schrieffer tarafından 1957 yılında belirli bir potansiyel kuyu içerisine hapsedilmiş elektronların klasik olarak davranamayacakları sınırlandırma olduğunda kesikli değerler alacağı ileri sürülmüştür(Schrieffer, 1957).

1970'li yıllarda kuantum kuyusu lazerlerinin geliştirilmesinden bu yana, yarı iletken nano yapıların en zengin uygulama alanları optoelektronik cihazların önemli iki alan ise yarıiletken lazerler ve dedektörlerdir.

Yirmi birinci yüzyıla girerken, nano boyutlu aktif elementlere dayalı cihazların ortaya çıkması ile yarıiletken nano yapılar elektronik, optoelektronik ve fotonik gibi birçok alanda devrim niteliğinde adımlar atılmıştır. Günümüz ihtiyaçları olan haberleşme, iletişim, veri depolama, hesaplama sistemleri, sinyal iletimi gibi gereksinimlere yönenilmiş keşifleri, minyatürleştirilmesi ve refine edilmesi konularında teorik ve deneysel çalışmalar ivme kazanmıştır.

Yarıiletken cihazlar elektriği manipüle edebilen milimetre büyüklüğündeki (örneğin, transistör) cihazlardan hem elektrik ve hem de ışığı idare edebilen mikrometre büyüklüğündeki (örneğin, ışık yayan diyotlar) cihazlara dönüşmüştür(T.D.Steiner, 2004).

Cho ve Arthur tarafından 1975 yılında moleküler demet kaplama (MolecularBeamEpitaxy (MPE)) yönteminin keşfi kuantum yapılarda önemli gelişmelere yol açmıştır(Cho ve Arthur, 1975). Kuantum kuyuları, yük hareketinin iki boyutta sınırlandırılmış birçok kuantum mekaniksel etkiyi gözlemleyebilen ve kontrol edebilen ince katmanlı yarı iletken yapılardır. Yüksek iletim bandı enerjisine sahip iki düzlem yarı iletken yapı arasına düşük iletim band aralıklı başka yarı iletken bir düzlem yapının yerleştirilmesiyle kuantum nokta yapıları elde edilir. Bu yapıların çok küçük

boyutlu olması ve elektronun bu yapı içinde tutulması yapının elektronik özelliklerinin incelenmesi açısından araştırmacıların ilgi odağı olmuştur. Bu da yarıiletken teknolojisinin hızlı bir şekilde gelişmesine yol açmıştır. Kuantum kuyusunun sınırlandırılması etkisine dayalı rezonans tünelleme diyodu ve kuantum kuyu lazeri optoelektronik cihazlara ilk örnekler olarak verilebilir(Chang ve ark., 1974; van der Ziel ve ark., 1975).

1980 li yıllarda ince film büyütme tekniğindeki ilerlemeler, elektron demeti ve x-ışını litografisi gibi çok hashas malzeme üretim ve analiz tekniklerinin gelişimi, farklı boyut ve şekillerde kuantum yapılarının üretilmesine olanak sağlamıştır. Bu gelişmeler sayesinde kuantum tel olarak adlandırılan tek boyutlu mezoskopik yapıların üretilmesi mümkün olmuştur(Smith, 1873; Petroff ve Denbaars, 1982; Hansen ve ark., 1987).

Yük taşıyıcıların serbest hareketlerinin tüm boyutlarda sınırlandırılmasıyla, kuantum nokta yapılar elde edilir. Kuantum nokta yapılara aynı zamanda sıfır boyutlu nano yapılar da denir. Bir kuantum nokta yapının içindeki yük taşıyıcılarının hareketi tüm boyutlarda sınırlı olduğundan dolayı atomlardaki gibi kesikli enerji seviyeleri oluşur. Dolayısıyla keskin durum yoğunluklarının oluşmasına sebep olur. Atomlara olan bu benzerliklerinden dolayı kuantum nokta yapılar, yapay atomlar, süper atomlar veya kuantum nokta atomları olarak da adlandırılır(Petroff ve Denbaars, 1982; Maksym ve Chakraborty, 1990a; 1990b; Pfannkuche ve ark., 1993; Adachi, 1994; Fujito ve ark., 1996; Choi ve ark., 1998; Nomoto ve ark., 1998; Gammon, 2000; Sim ve ark., 2001). Reed ve ark. 250 nm kenar uzunluğuna sahip kare biçimli bir geometrik yapıya sahip ilk kuantum nokta yapısını ürettiler(Cibert ve ark., 1986; Reed ve ark., 1986; Temkin ve ark., 1987; Bimberg ve ark., 1999). Daha sonra 30-45 nm boyutlarına kadar kuantum nokta yapıları farklı geometrik (kübik, ellipsoid, küresel ve piramit) şekillerde üretildi(Cibert ve ark., 1986; Temkin ve ark., 1987; Bimberg ve ark., 1999). Kuantum nokta yapılar, tam kontrol edilebilir ve çok verimli laserlerin yapımında kullanılmaya başlanıldı(Reed, 1993). Böyle yapıların boyut ve şekillerinin deneysel olarak kontrol edilebilmesi teknolojik uygulamada çok geniş bir alan açılmıştır (Kouwenhoven ve Marcus, 1998). Bu dönemde kuantum nokta yapıları üzerine birçok teorik ve deneysel çalışmalar gerçekleştirildi(Murray ve Bawendi, 1993; Katari ve ark., 1994). Kuantum nokta yapılar kızıl ötesi foto dedektörler (QDIP), tek elektron transistorler, hafıza elemenları ve kuantum bilgisayarları gibi cihazların geliştirilmesinde kullanılmaya başlanıldı(Choi ve ark., 1998; Nomoto ve ark., 1998; Yusa ve Sakaki, 1999; Gammon, 2000; Sim ve ark., 2004).

Bu yapılar hem atomik özellikler göstermesi hemde teknolojik olarak kullanıldığı için elektronik yapısının belirlenmesi önemlidir. Atomların elektronik yapısını belirlemede kullanılan yöntemler bu yapılar içinde kullanılmıştır. Tek veya çok elektronlu kuantum nokta yapıların elektronik özelliklerini belirlenmesinde varyasyon yöntemi, matris köşegenleştirme yöntemi, pertürbasyon yöntemi, yoğunluk fonksiyonel teorisi, Hartree-Fock(HF) yöntemi gibi birçok teknik kullanılmak suretiyle çalışmalar yapılmıştır. Bu yöntemler bir problem düşünüldüğünde yapılmak istenilen hesaplamalara göre birbirinden daha etkin olabilirler. Böylelikle bu yöntemler problemin farklı aşamalarında birlikte veya ayrı ayrı kullanılabilirler.

Bose ve ark. pertürbasyon yöntemini kullanarak GaAs küresel kuantum noktasının (QD) taban ve bazı uyarılmış seviyelerin bağlanma enerjilerini, nokta yapı boyutu ve yabancı madde pozisyonunun fonksiyonu olarak hesapladılar(Bose ve Sarkar, 1998a). Hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisi Bastard tarafından varyasyonel yöntemle hesaplandı(Bastard, 1984). Marin ve Cruz sonsuz küresel bir kuyu içinde hapsedilmiş harmonik salınıcı ve hidrojen atomu gibi yapıların Shrödinger denklemlerinin gelen çözümlerini varyasyonel yöntemle bularak, enerji seviyelerini belirlediler(Marin ve Cruz, 1991). Brownstein, Gauss teoremini kullanarak sınırlandırılmış sistemlerin enerji özdeğerlerini lineer varyasyon yöntemi ile belirledi(Brownstein, 1993). Merkezinde sıfır safsızlık bulunan küresel kuantum nokta yapının taban durum enerjilerini Varshni, varyasyonel yöntemlebasit bir dalga fonksiyonu ile hesapladı(Varshni, 1999). Bednarek ve ark. VeMcCharty Gauss Tipi Orbitalleri kullanarak çok elektronlu kuantum nokta yapının elektronik yapısını lineer varyasyonel yöntemle incelediler(Bednarek, 1999; Bednarek ve ark., 2001).Bazı araştırmacılar yoğunluk fonksiyonel teorisini (DFT) kullanarak çeşitli kuantum nokta yapılarının fiziksel özelliklerini incelediler (Lee ve ark., 1998; Sahin ve Tomak, 2005). Ceperley, Sim ve ark. Monte-Carlo yöntemi ile bazı kuantum nokta yapılarının fiziksel özelliklerini incelediler(Ceperley, 1978; Sim ve ark., 2004). Sonsuz küresel potansiyel ile sınırlandırılmış merkezinde He tipi safsızlık bulunan bir kuantum nokta yapının enerjisini ve iyonizasyon yarıçaplarını genelleştiren Hylleraasbaz setleri üzerinde varyasyonel yöntem ile belirlemiştir(Aquino ve ark., 2003). Anizotopik harmonik potansiyel tarafından sınırlandırılan helyum ve lityum atomların en düşük elektronik seviyeleri için potansiyel enerji eğrisi ve elektron yoğunluk dağılımı farklı sınırlandırma parametreleri için Gaussianbaz setleri ile configuration interaction metoduyla çalışıldı(Sako ve Diercksen, 2003). Dipol-dipol etkileşimleri tarafından çiftlenmiş bir

çift kuantum nokta yapısında uyarılmaların optiksel kontrolü çalışıldı(Unold ve ark., 2005). Küresel parobolik potansiyel kuyusu ile sınırlandırılmış helyum atomunun adiabatik aşırı küresel (hyperspherical) yaklaşım metodu uygulayarak taban ve bazı uyarılmış durumların enerjilerini hesaplandı(Xie, 2007). Kuantum Genetik Algoritma tekniği ile kuantum nokta yapıların elektronik yapılarını incelediler(Sahin.M, 2000; Cakir.b, 2007). He atomunun üç boyutlu küresel potansiyel kuyusu ve iki boyutlu disk şekilli potansiyel kuyusu içinde tam köşegenleştirme metodu uygulanarak taban ve bazı uyarılmış seviyelerin enerjilerini belirlendi(Borodulin ve ark., 2008). Flores ve ark. (Z=1,….,5) taban ve bazı uyarılmış triplet $\left({}^{3}S\right)$ seviyelerinin enerjilerini varyasyonel yöntem ile Hylleraas tipi baz setleri üzerinden hesaplamışlardır(Flores-Riveros ve Rodriguez-Contreras, 2008). İki elektronlu parabolik bir kuantum nokta yapıda dipol izinli optiksel soğurmayı tam köşegenleştirme tekniği ve düşük yoğunluk matris yaklaşımını kullanarak çalışıldı(Huang ve Libin, 2008). İki elektronlu yarı iletken kuantum nokta yapıların elektronik yapısına manyetik alan etkisini Raman spektroskopisi ile incelendi(Koppen ve ark., 2009). Sonsuz küresel bir kavitede sınırlandırılmış He atomunun rolativistik olmayan taban durumu enerjisini ve basıncını varyasyonel yöntem ile incelediler(Laughlin ve Chu, 2009). Kuantum nokta yapı içerisindeki Hidrojen tipi safsızlığını, elektronik yapısını varyasyonel yöntem ile güçlü pertürbasyon metodunu kullanarak çalışıldı(Mikhail ve Ismail, 2010). İki elektronlu kuantum nokta yapının linear ve nonlinear optiksel özelliklerini etkin kütle yaklaşımı içerisinde matris köşegenleştirme yöntemiyle hesaplandı. Yarıiletken Kuantum nokta yapılarda etkileşen iki elektronun spin özelliklerini konfigürasyon etkileşimi (configuration interaction) yöntemiyle incelendi(Wang ve ark., 2010). Pertürbasyon metodu kullanılarak parabolik potansiyeli olan bir küresel kuantum noktanın (QD) 1s, 2p, 3d ve 4f durumlarının bağlanma enerjilerini safsızlık konumuna göre araştırılmıştır(Yakar ve ark., 2013). Pertürbasyon yöntemi ile sonsuz potansiyel ile sınırlandırılmış küresel kuantum noktasının enerji seviyelerine rolativistik etkilerini araştırıldı(Ozmen ve ark., 2013). Geçilemeyen küresel bir kutu tarafından sınırlandırılmış helyum atomunun, yani sınırlı yükseklik ve aralığa sahip olan küresel bir Gauss potansiyel kuyusundaki, helyum atomunun elektronik yapısını matris köşegenleştirme metodu kullanılarak incelendi(Xie, 2007). Sonlu ve sonsuz GaAs-GaAlAs küresel kuantum nokta yapısının bağlama enerjileri, etkin kütle yaklaşımında farklı nokta yarıçapları için konumunun bir fonksiyonu olarak hesaplandı(Motenegro ve

Merchancano, 1992). Parabolik sınırlayıcı potansiyel ile küresel kuantum nokta yapıda hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisi, etkin kütle yaklaşımı içerisinde bir değişken yaklaşım kullanılarak hesaplandı(Bose ve Sarkar, 1998b). GaIn-AsGaAs kuantum noktalarındaki deşiklerin ve yüklü eksitonların bağlanma enerjilerinin perturbason ve varyasyonel tahminleri üzerine çalışma yapmışlardır(Lelong ve Bastard, 1996). Kare-kuyu potansiyeli (SWP) olan bir küresel kuantum nokta (QD) içindeki bir hidrojeniksafsızlığın bağlanma enerjisi pertürbasyon yöntemi kullanılarak hesaplanmıştır(C. Bose, 1998; C.Bose, 2000).

Düşük boyutlu yapıların elektronik özelliklerini belirlemede kullanılan yöntemlerden biriside Genetik Algoritma (GA) tekniğidir. Bu yöntem ilk kez Holland tarafından 1975 yılında kullanıldıktan sonra mühendislik ve malzeme bilimi alanında yaygın olarak kullanılmıştır(Holland, 1975b; Venugopal ve Narendran, 1992; Homaifar ve ark., 1994; Yang ve Gen, 1994; Sen ve ark., 2001; Castro ve ark., 2004; Kulkarni ve ark., 2004a; Samanta, 2004b). Fizik biliminde de bir çok alanında kullanılmaya başlayan bu yöntem özellikle kuantum mekaniksel sistemlerin elektronik yapısının belirlenmesinde daha ön plana çıkmıştır(Judson ve ark., 1994; Wanschura ve ark., 1996a; Kariuki ve ark., 1997; Pullan, 1997; Zacharias ve ark., 1998; Sahin ve ark., 2000; Kim ve ark., 2001; Aydin ve Yildirim, 2004; Kudla, 2004).Düşük boyutlu kuantumlu yapıların durum incelemelerinde kullanıldığında Kuantum Genetik Algoritma (KGA) olarak da adlandırılan bu yöntem varyasyon yöntem gibi enerji minimizasyon ilkesine dayanır ve fiziğin bir çok alanında, özellikle düşük boyutlu sistemlerin elektronik yapılarının belirlenmesinde kullanılmaya başlanılmıştır(Chaudhury ve Bhattacharyya, 1998; Grigorenko ve ark., 2001; Grigorenko ve Garcia, 2001; 2002; Safak ve ark., 2002; Sahin ve Tomak, 2002).

Büyük ölçekli molekül hesaplamaları için temel fonksiyonlar olarak Gauss tipi orbitallerin kullanışlılığının güvenilir olup olmadığını atomik HF metodu ile incelenmiştir(Sigeru, 1965). Kapalı-kabuk atomik sistemlerin dipol polarizasyon özelliklerinin hesaplanmasında bir yöntem olan pertürbasyon yöntemiyle atomlarda HF dalga fonksiyonlarının doğrudan hesaplanabileceğini gösterilmiştir(H.D. ve J., 1965). HF teorisinde sanal orbitallerin keyfiliğini irdelemiş ve sanal orbitallerin enerji spektrumunun, yakınsamasını pertürbasyon teorisi ile iyileştirilebileceğini ve konfigürasyon etkileşiminin hesaplanabileceğini açıkça göstermişlerdir(Huzinaga ve Arnau, 1970). Genişletme yöntemini ile, birden fazla konfigürasyona sahip oksijen benzeri (O, Fe^{18+} , Hg^{72+}) atomik sistemler için geçiş frekansları göreceli HFR

yaklaşımını kullanarak yaptıkları teorik hesaplamaların deneylerle uyum sağladığını gösterilmiştir(Kagawa, 1980). Cr, Cu, Nb, Mo, Ru, Rh, Pd ve Ag atomlarının taban durum enerjilerini Slater tipi fonksiyonları kullanarak Hartree-Fock-Roothaan(HFR) yaklaşımıyla hesaplandı(Bunge ve ark., 1992). Atomik enerjileri, iyonizasyon potansiyelleri HF teorisini yoğunluk fonksiyonel teorisiyle birleştirerek hesaplandı(Becke, 1993). HF yaklaşımı kullanılarak bir manyetik alanda bulunan helyum tipi Kuantum Nokta Yapısının taban durum enerjisini ve korelasyon fonksiyonlarını hesaplandı taban durumunun parçacık yoğunluğunu incelenmiştir(Pfannkuche ve ark., 1993). Jaskolski, Connerade ve ark.,Reusch ve Grabert HF yöntemini kullanarak bazı kuantum nokta yapılarının fiziksel özelliklerini incelediler(Jaskolski, 1996; Connerade ve ark., 2000; Reusch ve Grabert, 2003). Elektron ve deşiğin aynı osilatör frekansı ile yarı parabolik potansiyel ile sınırlandırılan durumda kuvvetli sınırlandırma bölgesinden ve bir elektron varlığında doğrusal optik düzeltme katsayısı ile doğrusal olmayan optik düzeltme katsayısı arasında kapalı bir ilişki kurarak HF yaklaşımını ve potansiyel değiştirme yöntemini kullanılarak hesaplama yapıldı(Baskoutas ve ark., 2006). Çakır 2007 yılında merkezinde safsızlık bulunan bir elektronla kuantum yapısının taban durum enerjisini farklı sınırlandırıcı potansiyeli durumlarını göz önüne alarak KGA yöntemi ile HFR yöntemini kullanarak hesapladı(Cakir, 2007; Cakir ve ark.,2007). Parabolik potansiyeli olan bir küresel kuantum noktasının (QD) 1s, 1p, 1d ve 1f enerji durumlarının bağlanma enerjisi ve dalga fonksiyonları, optik geçişlere dayanan lineer ve nonlineeroptik soğurma katsayıları hesaplandı(Ozmen ve ark., 2009; Yakar ve ark., 2010a; 2010b; 2011; Cakir ve ark., 2012). Küresel bir kuantum noktasında (QD) tek bir eksitonun elektronik yapısını ve optik özelliklerini Coulomb potansiyeline bağlı olarak enerjiler üzerindeki değişiklikleri matris köşegenleştirme yöntemi ve etkin kütle yaklaşımı ile gösterildi(Sahin ve ark., 2009). Parabolik potansiyele sahip iki elektronlu küresel kuantum nokta yapısının doğrusal ve doğrusal olmayan soğurma katsayıları potansiyeli araştırılarak $1s^2$, 1s1p, 1s1d ve 1s1f elektronik durumlar, KGA ve HFR yaklaşımını kullanılarak hesaplandı(Cakir ve ark., 2014). İki elektronlu kuantum noktasının, taban durumu ve bazı uyarılmış enerji durumları üzerindeki parabolik sınırlandırılmış potansiyel etkilerini sonsuz küresel potansiyeli içindeki safsızlığının dalga fonksiyonu ve enerji özdeğerlerini KGA ve HFR metoduna dayanan modifiye bir varyasyonel optimizasyon prosedürü kullanılarak hesaplandılar(Yakar ve ark., 2015a). Singlet-singlet ve triplet-triplet durumları arasındaki S → P, P → D ve D → F izinli elektrik

dipol geçişlerini doğrusal, doğrusal olmayan ve toplam soğurma katsayılarını nokta yarıçapı ve foton enerjisinin bir fonksiyonu olarak küresel bir potansiyel yüzey ile sınırlı iki elektronlu kuantum noktasının optik özelliklerini araştırıldı(Yakar ve ark., 2015b). Pertürbasyon yöntemi ile HF yaklaşımı karşılaştırılmalı olarak $(H_2O)_2$ molekülünün enerji değerlerini hesaplandı(Valenti ve ark., 2016).

Yukarıda bahsettiğimiz nano ölçekli yapılarla ilgili çalışmaların neredeyse tamamı bir elektronlu yapılardır. Bu yapılar içerisindeki yük sayısı arttırıldığında sistemin elektronik yapısının belirlenmesi zorlaşmaktadır ve yaklaşık yöntemler kullanılmaktadır. Yük sayısının fazla olduğu çalışmalar nadirdir ve genellikle sayısal yöntemler kullanılmıştır. Sınırlandırılan parçacık sayısının fazla olduğu Kuantum nokta Yapıların elektronik özelliklerinin belirlenmesi önemlidir. Bu tez çalışmasında Kuantum nokta yapı içerisindeki yük sayısının 1 den 4'e kadar arttırılarak elektronik yapısının KGA ve HFR tekniğiyle belirlendi. Sitemin elektronik durumu yapının boyutlarına bağlı olarak hesaplandı. Her bir yapı için sistemin bağlanma enerjileri hesaplandı.

2. DÜŞÜK BOYUTLU YAPILAR

2.1. Giriş

Nano teknolojideki ilerlemeler, günümüzün vazgeçilmez teknolojileri arasında yer alan haberleşme, iletişim, savunma, endüstriyel, medikal alanda ve daha birçok özel uygulamarın bulunduğu deneysel çalışmalar ve bunlarla beraber devam eden teorik çalışmalar atomik boyutlu yapıların teknolojik alanda kullanılmasını arttırmıştır. Bu yapıların fiziksel özelliklerinin kontrol edilebilmesi kuantum mekanik sistemlerin üretilmesine zemin hazırlamıştır. Hesaplama ve hafıza sistemlerine ihtiyaç duyulması, sinyal iletimi ve işleme hızlarının yükseltilmesi amacıyla yapılan çalışmalar ve araştırmalar, yeni optoelektronik ve mikroelektronik yapıların üretilmesini kaçınılmaz kılmıştır(Davies, 1999; Mitin ve ark., 1999).

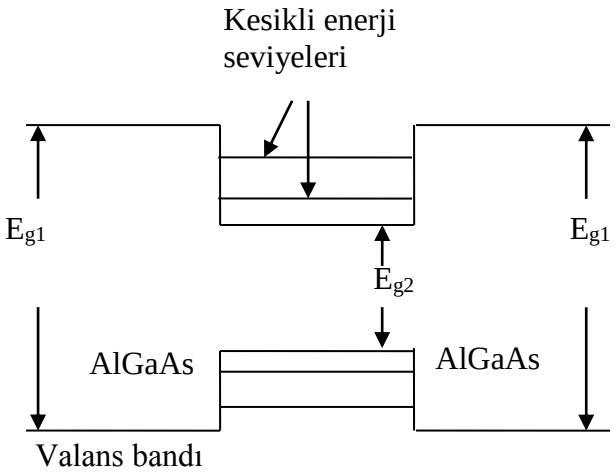
Mikroelektronik yapılardaki temel amaç, aygıt boyutlarının çok küçük olması ve çok iyi nitelikte entegre devre elemanlarının üretilmesidir. Bu tür yapıların boyutları küçüldüğünde aygıt, çalışma prensiplerinin de değişikliğe uğrayarak elektrik sinyalinin iletimini sağlayan yüklerin azımsanmayacak ölçüde azalmasına sebep olurken kuantum etkileri gözlemlenmeye başlar. Günümüzde üretimi yapılan bu tür nano ölçekli aygıtlar, tek elektron iletim esasına dayalı olarak çalışırlar. Tek-elektron aygıtları 3. ve 5. grup elementlerin katkılanmasıyla Si/Ge gibi farklı yarı iletkenlerden yapılmış eklemler kullanılarak üretilmektedir.

Tabiattaki tüm yapılar makroskopik, mikroskopik ve mezoskopik(düşük boyutlu yapılar) olmak üzere üç sınıfta incelenir. Parçacık hareketinin gözlemlenebilir ve ölçülebilir boyutta olup istatistiksel olarak tanımlanabilecek boyutlarda olan yapılar makroskopik yapı, çıplak gözle göremediğimiz atomik ölçülerdeki yapılara mikroskopik yapı denir. Boyutları makroskopik ile mikroskopik yapı arasında olan, boyutları 10-1000 $\mathring{A}$ arasında yer alan yapılara mezoskopik yapılar denir. Bir yapının mazoskopik yapı olabilmesi için, boyutlarından en az birinin, üç karakteristik uzunluk olan Fermi dalga boyu, faz durulma mesafesi ve ortalama serbest yoldan küçük olmalıdır.

İki boyutta elektron gazı için fermi dalga boyu $\lambda_f = (2\pi / n_e)^{1/2}$ ile tanımlanır. Faz durulma mesafesi ise yarıiletken malzeme için 10-100 nm mertebelerindedir. Metallerde ise bu faz durulma mesafesi 1 nm den daha küçüktür. Bunun sonucu olarak şu anlaşılabilir ki metalik yapılarda kuantum engeli oluşturmak, yarıiletken bir yapıda oluşturmaya göre çok daha zordur. Bir elektron malzeme içerisinde ilerlerken

çarpışmalar yapar. Elektronun malzeme içerisinde peş peşe yaptığı iki çarpışma arasında aldığı yola ortalama serbest yol denir. Elektronun çarpışma yapmadan ilerliyebilmesi için ortalama serbest yolun sistemin boyutlarından daha büyük olması gerekir. Başka bir söylemle elektronun iki çarpışma arasında momentumunu değiştirmeden ilerleyebileceği maksimum mesafedir. Elektronlar arasında faz dengesinin bozulmaya uğradığı mesafeye faz durulma mesafesi denir. Bir yapının boyutları faz durulma mesafesinden veya ortalama serbest yoldan küçükse, elektronun hareketi tek dalga fonksiyonu ile ifade edilir.

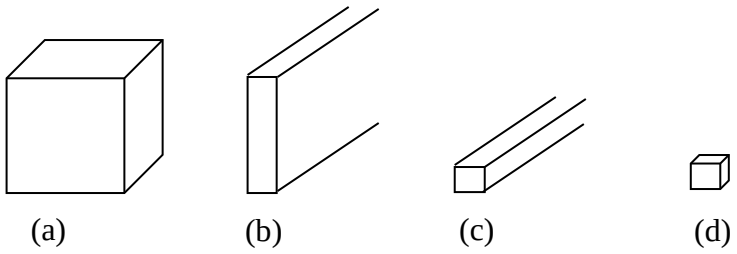
Mezoskopik yapılar deneysel olarak taşıyıcı hareketlerinin engelleyici potansiyel alan ile sınırlandırılarak oluşturulabilir. Böyle bir potansiyel engeli dielektrik ve yarıiletken malzemelerin yasak enerji aralığı farklılığından dolayı ara yüzeyde oluşturulabilir. Bu engel yarı iletken içerisinde yük taşıyıcılarının hareketlerini sınırlandırabilir(Cakir, 2007). Şekil. 2.1 de de görülebileceği gibi yasak enerji aralığı (E_{g1}) büyük olan bir yarı iletken malzeme içerisinde, daha küçük yasak enerji aralığına (E_{g2}) sahip diğer bir yarı iletken melzeme atom katmanları olarak yerleştirildiğinde aradaki yüzeyde bir potansiyel engeli oluşur. Engel, elektronların ve deşiklerin bölgede sınırlandırılmasına neden olur. Birçok farklı yarı iletken malzeme, günümüzde teknolojinin farklı alanlarında yaygın olarak kullanılmaktadır. Yarı iletkenlerde AlAs, GaAs, InSb, InAs, AlGaAs ve CdSe benzeri yarıiletken malzemeler örnek verilebilir



Şekil 2.1. Kuantum hetero yapısı (kuantum kuyusu)'nın şematik gösterimi.

Taşıyıcı hareketinin boyut sayısına bağlı olarak sınırlandırıldığı nano yapılar, Şekil 2.2 de gösterilmiştir. Üç boyutlu (3D) hacimsel bulk malzeme (a), bir boyutta

sınırlandırılmış iki boyutlu serbest (2D) kuantum kuyusu (b), iki boyutta sınırlandırılmış tek boyutta serbest (1D) kuantum teli (c) ve üç boyutta sınırlandırılmış kuantum nokta yapısı (0D) gösterilmiştir

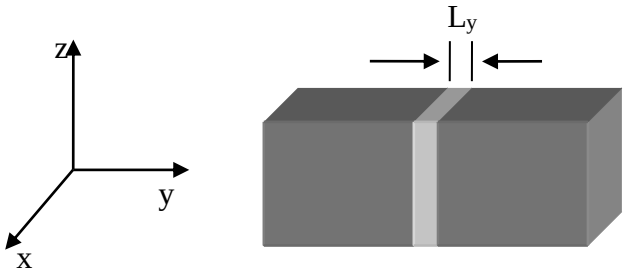


Şekil 2.2. Sınırlandırılmış bulk malzeme (a), kuantum kuyusu (b), kuantum teli (c) ve kuantum nokta yapısı (a) yapıların şematik gösterimi.

2.1. Düşük Boyutlu Yapılar

2.2.1. Kuantum Kuyuları

Yük taşıyıcılarının hareketinin tek boyutta sınırlandırıldığı ve diğer iki boyutta serbestçe hareket edebildiği yapılara kuantum kuyuları denir. Yük taşıyıcılarının hareketinin sınırlandığı yapılarda tek boyutta kuantum etkisi görülür ve enerjileri kesikli değerler alır.Kuantum kuyuları yasak enerji aralığı büyük olan bir malzemenin içerisine,yasak enerji aralığı küçük olan başka malzemenin ince bir tabaka şeklinde yerleştirilmesiyle elde edilir.



Şekil 2.3. Bir kuantum kuyusunun şematik gösterimi.

Şekil 2.3 deki kuantum kuyusunun şematik gösteriminde elektron yalnızca y-doğrultusundaki hareketini sınırlandırılmaktadır ve kuantum etkisi sadece sınırlandırmanın olduğu y-doğrultusunda görülür. Bu yapı iki boyutlu elektron gazı

(2BEG) olarak da adlandırılır. Elektron y-düzleminde yalnız L_y aralığında hareket edebilir. Diğer iki doğrultuda herhangi bir sınırlandırma olmadığı için serbest hareket eder. Böyle bir yapının içerisinde bir parçacığı temsil eden dalga fonksiyonu, bir parçacık için

$$\psi(x, y, z) = \exp(ik_x x + ik_z z)\phi(y) \tag{2.1}$$

Biçiminde iki dalga fonksiyonunun çarpımı olarak yazılabilir. Bu eşitlikte $k_x$vek_z, dalga vektörünün x- ve z-doğrultusundaki bileşkesidir. $\phi(y)$ise y-doğrultusundaki sınırlandırmaya karşılık gelen dalga fonksiyonudur. y-doğrultusu için Schrödinger dalga denklemi

$$\frac{d^2\phi(y)}{dy^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E_y - V_y)\phi(y) = 0. \tag{2.2}$$

şeklinde yazılabilir. Burada E_y, y-doğrultusundaki hareketinkesikli enerjisi ve V_y ise enerji boyutunda sınırlayıcı potansiyeldir. Sınırlayıcı potansiyel sınırlarda sonsuz yükseklikte ve kuyu içinde 0 alınabilir. Bu durumda sınır şartları uygulanırsa dalga vektörünün y- bileşeni

$$k_{n_y} = \frac{n_y \pi}{L_y} \tag{2.3}$$

değerini alır. Gözlemlendiği gibi dalga vektörü kesikli değerler aldığı için kuyu içerisinde kesikli enerji özdeğerleri

$$E_{n_y} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n_y \pi}{L_y}\right)^2 \tag{2.4}$$

olur. Böylelikle kuyu içerisindeki parçacığın toplam enerjisi aşağıdaki gibi verilir.

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_z^2 + \left(\frac{n_y \pi}{L_y}\right)^2\right) \tag{2.5}$$

2.2.2. Kuantum Telleri

Yük taşıyıcılarının hareketinin iki boyutta sınırlandırıldığı ve bir boyutta serbest hareket ettiği yapılara kuantum telleri denir. Kuantum tellerinde yük taşıyıcılarının hareketinin sınırlandığı her iki boyutta da kuantum etkisi gözlemlenir. Şekil 2.4' de y- ve z- doğrultularında sınırlanmanın olduğu bir kuantum teli şematik olarak

gösterilmiştir. Yük taşıyıcıları böyle bir yapıda tek serbestlik derecesine sahip olurlar. Bu yapı içerisinde hareket eden yük taşıyıcısına eşlik eden dalga fonksiyonu,

$$\psi(\mathrm{x},\mathrm{y},\mathrm{z}) = \exp(\mathrm{ik}_x \mathrm{x})\phi(\mathrm{y},\mathrm{z}) \tag{2.6}$$

biçiminde yazılabilir. $\phi(\mathrm{y},\mathrm{z})$ sınırlandırmanın olduğu y- ve z-doğrultularına karşılık gelen dalga fonksiyonu olarak tanımlanır. Sınırlandırmanın olduğu y- ve z-boyutları için Schrödinger denklemi

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dy^2}+\frac{d^2}{dz^2}\right)\phi(y,z)+V(y,z)\phi(y,z)=E_{y,z}\phi(y,z) \tag{2.7}$$

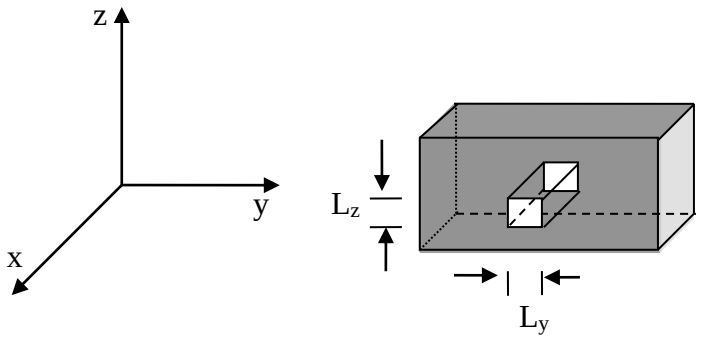
biçiminde yazılır. Sınırlandırmanın olduğu y- ve z- doğrultularına uygulanan sınırlayıcı potansiyeli sonsuz yüksek kabul edersek, kuyu içerisinde V(y,z)=0alınabilir. Böylelikle dalga fonksiyonuna sınır şartları uygulanarak

$$k_{n_y}=\frac{n_y\pi}{L_y}, \quad \text{ve} \quad k_{n_z}=\frac{n_z\pi}{L_z} \tag{2.8}$$

elde edilir. Böylelikle kesikli enerji özdeğerleri

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2+\left(\frac{n_y\pi}{L_y}\right)^2+\left(\frac{n_z\pi}{L_z}\right)^2\right) \tag{2.9}$$

şeklinde yazılabilir.

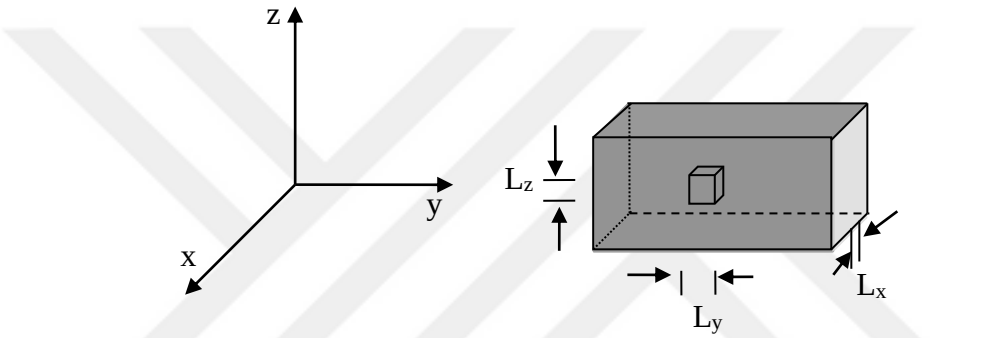


Şekil.2.4. Yük taşıyıcısının hareketinin iki boyutta sınırlı, tek boyutta Serbest olan bir kuantum telinin şematik gösterimi.

2.2.3. Kuantum Nokta Yapılar

Yük taşıyıcılarının hareketinin tüm boyutlarda sınırlandırıldığı hetero yapılara kuantum nokta yapılar denir. Böyle bir sistemde her üç boyutta da kuantum etkisi gözlemlenir. Kuantum nokta yapısı Şekil 2.5' de gösterilmiştir. Schrödinger denklemi Kuantum nokta yapı için aşağıdaki gibi yazılabilir.

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



Şekil 2.5. Yük taşıyıcıların hareketinin tüm boyutlarda sınırlandırıldığı kuantum nokta yapısının şematik gösterimi.

Tüm boyutlarda sınırlandırıcı potansiyel sonsuz alınarak, kuyu içerisinde V(x,y,z)=0 olur. Sınır şartlarından dolayı dalga vektörü bileşenleri

$$k_{n_x}=\frac{n_x\pi}{L_x} \quad , \quad k_{n_y}=\frac{n_y\pi}{L_y} \quad \text{ve} \quad k_{n_z}=\frac{n_z\pi}{L_z} \tag{2.11}$$

olarak verilir ve enerji özdeğerleri ise

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

şeklinde elde edilir.

3. KÜRESEL KUANTUM NOKTA YAPILARIN ELEKTRONİK YAPISI VE HESAPLAMA YÖNTEMLERİ

3.1. Kuantum Nokta Yapının Elektronik Yapısı

Atomlarda bulunan çekirdeğin çekici Coulomb potansiyelinde hareket eden elektronlar atoma bağlı kalmaktadır. Bunun sonucu olarak baş kuantum sayısı n yörünge açısal momentum kuantum sayısı ℓ den hiçbir zaman küçük olamaz. Baş kuantum sayısı $n\,1,2,...,\infty$ değerlerini alırken, açısal momentum kuantum sayısı l $0,1,...,(n-1)$ değerlerini alabilir. Böylece atomların kabuk yapısı n ve l ye bağlı olarak *1s, 2s, 2p,…*şeklinde oluşur. Elektronun hareketinin üç boyutta sınırlandırıldığı kuantum nokta yapıda çekirdeğin elektronlara uyguladığı coulomb potansiyeline ihtiyaç duyulmadan sınırlandırıcı bir potansiyel engeli ile elektron bir nokta yapı içinde tutmaya yetecektir. Elektronlar küresel kuantum nokta yapıda çekici bir potansiyel olmadığı için yörünge açısal momentum kuantum sayısı üzerindeki kısıtlamayı ortadan kaldıracaktır. Yani açısal momentum kuantum sayısı*l*0 ile ∞ aralığında değerler alabilir. Bunun sonucu olarak küresel bir kuantum noktasındaki bağıl durumların kabuk yapısı *1s, 1p,1d,…*şeklinde oluşur. Seviyelerin enerjileri ise $E_{n,\ell}$ biçiminde etiketlenebilir.

Kuantum nokta yapılarının kabuk yapılarının gösterilmesinde kullanılan diğer bir gösterim ise, baş kuantum sayısı *n* yi *n*+ℓ şeklinde ifade edilmesidir. Dolayısıyla *1s* kabuğu aynı kalırken üst kabuklarda *1p* kabuğunu yerine *2p* olarak ve *1d* kabuğunun yerine *3d* olarak adlandırılmaktadır. Küresel bir kuantum nokta yapıda bağlı durumlar için kabuk yapısı *1s, 2p, 3d, 2s, 4f, 3p*, … şeklinde gösterilmektedir. Enerji seviyeleri ise $E_{n+\ell,\ell}$ şeklinde etiketlenebilir.

3.2. Etkin Kütle Yaklaşımı

Serbest bir parçacığın enerji ile dalga vektörü arasındaki ilişkiyi göz önüne alacak olursak, momentumu $\vec{p}=\hbar\vec{k}$ olan serbest bir elektronun kinetik enerjisi

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{3.1}$$

dir. Elektron kristal yapının periyodik potansiyeli içinde hareket ettiğinden dolayı kristal yapı içinde elektronun momentumu serbest haldeki momentumundan farklıdır.

Bu momentuma kristal momentumu denir. Kristal yapının periyodik potansiyeli içinde hareket eden bir elektrona bir $\vec{F}_i$ kuvveti etki eder. Bu elektrona dışarıdan bir $\vec{F}_d$ kuvvet uygulanırsa, elektron

$$\vec{F}_d + \vec{F}_i = m\frac{d\vec{v}}{dt} = m\vec{a} \tag{3.2}$$

toplam kuvveti etkisinde ivmelenecektir elektrona etki eden toplam kuvvet $\vec{F}_T$ tanımlanırsa elektronun hareket denklemi

$$\vec{F}_T = m^* \frac{d\vec{v}}{dt} = m^*\vec{a} \tag{3.3}$$

olur. Buradaki m^*, iç kuvveti de içine alan elektronun kristal yağı içindeki kütlesidir ve etkin kütle olarak tanımlanır.

Böyle bir kristal yapı içerisinde dış kuvvetin etkisi altında hareket eden elektronun grup hızı

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}\left(\frac{E}{\hbar}\right) = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk} \tag{3.4}$$

biçiminde yazılabilir. Denk.(3.1), Denk.(3.3) ve Denk.(3.4) birleştirilirse kristal yapı içindeki elektronun etkin kütlesi

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2E/dk^2} \tag{3.5}$$

bulunur. Denk. (3.5) kütle boyutunda olmakla birlikte *E(k)* fonksiyonunun ikinci türevine bağlıdır.

3.3. Genetik Algoritma(GA)

GA ilk defa 1975 yılında Holland tarafından mühendislik ve malzeme biliminde kullanılması için ileriye sürülmüş bir hesaplama metodudur(Holland, 1975a). Daha

sonra 2001 yılında Coley tarafından bir sayısal optimizasyon yöntemi olarak kullanılabileceği ileri sürüldükten sonra birkaç alanda hesaplama yöntemi olarak kullanılmaya başlanmıştır(Venugopal ve Narendran, 1992; Homaifar ve ark., 1994; Yang ve Gen, 1994; Castro ve ark., 2004; Kulkarni ve ark., 2004b; Samanta, 2004a). Bu yöntem fizik biliminde düşük boyutlu yapıların elektronik yapısının belirlenmesinde bir optimizasyon yöntemi olarak kullanılmaya başlanmıştır(Wanschura ve ark., 1996b; Kariuki ve ark., 1997; Pullan, 1997; Zacharias ve ark., 1998; Sahin ve ark., 2000; Kim ve ark., 2001; Aydin ve Yildirim, 2004; Kudla, 2004; Samanta ve ark., 2004). Daha sonraları bu yöntem kuantum mekaniksel sistemler için Schrödinger denkleminin çözümlerinin belirlenmesinde kullanılmaya başlanmış ve Kuantum Genetik algoritma (KGA) olarak literatüre girmiştir(Chaudhury ve Bhattacharyya, 1998; Grigorenko ve Tregubenko, 2000; Grigorenko ve Garcia, 2000; 2001; Saha ve ark., 2001; Sahin ve Tomak, 2002; Safak ve ark., 2003; Sahin ve ark., 2005). KGA varyasyon yöntemi gibi genel bir araştırma ve optimizasyon yöntemidir. Fakat varyasyon tekniğinden biraz farklıdır. Çünkü varyasyon yöntemi belli kurallara bağlı iken, KGA yöntemi ise rastgeleliğe dayanır. Varyasyon yöntemi problemin çözümlerini bulmak için teek bir nokta dan başlarken, KGA problemin olası çözümlerini oluşturan noktalar kümesinden başlar. KGA yönteminde analitik ifadeler üzerinde de varyasyonel yöntemde olduğu gibi sınırlamalar yoktur. Varyasyon yönteminde parametreler sıralı bir biçimde değiştirilirken, KGA yönteminde tamamen rastgele değiştirilir. Varyasyon yönteminde tek bir parametre değiştirilirken, KGA yönteminde tüm parametreler aynı anda değiştirilebilir. Varyasyonel yöntemde genelde ikilik kodlama sistemi kullanılırken, KGA parametreler farklı şekillerde kodlanabilir.

KGA üç temel süreç üzerine kurulur. Bunlardan birincisi yeniden oluşum (Kopyalama), ikincisi çaprazlama(Crossover) ve üçüncüsü mutasyondur(Coley, 2001). Yeniden oluşum sürecinde tüm bireylerin hayatta kalma olasılığı belirlenir. Hayatta kalma olasılığı yüksek bireyler bir sonraki kuşağa aktarılırken hayatta kalma olasılığı düşük olan bireyler ise elenirler. Bu işlemin yapılabilmesi için bazı seçim yöntemleri uygulanması gerekir. İkinci süreç olan çaprazlama işlemi tıpkı biyoloji biliminde kullanıldığı gibi bir işleme tabi tutulurlar. Çaprazlama işlemi yeniden oluşum sürecinden sonra oluşan yeni bireyler üzerine uygulanır. Bu bireyler içerisinden rastgele seçilen iki birey üzerinde yürütülür. Seçilen bu iki bireyin genetik bilgileri rastgele herhangi bir noktada kesilerek çaprazlama işlemi yapılır. Birinci bireyin kesilen noktanın sağında kalan kısmı ile ikinci bireyin solunda kalan kısmı, birinci bireyin

solunda kalan kısmı ile ikinci bireyin sağında kalan kısmının birleştirilmesiyle elde yapılır. Böylece her iki bireyinde genetik bilgileri birbirine taşınmış olur. GA 'nın üçüncü aşaması olan mutasyon işlemi çaprazlama işlemine tabi tutulan bireyler içerisinden rastgele seçilen herhangi bir bireye uygulanır. Mutasyon işlemi sistemin yerel minimumlardan kurtarılması için hayati önem taşımaktadır. Eğer mutasyon işlemi uygulanmışsa sistem yerel minimumlara takılıp kalabilir.

Hem çaprazlama hem de mutasyon işlemleri süreç olarak tamamen rastgeleliğe dayanır ve bu işlem gerçekleşmesi için bir gerçekleştirme olasılığı belirlenir. Bu olasılık çaprazlama işleminde büyük olurken mutasyon işleminde küçük seçilmesi problemin yanlış çözümlere gitmesini engeller.

KGA tekniği uygulanırken parametre en iyilemesi ve dalga fonksiyonu en iyilemesi tercih edilebilir. Sistemi temsil eden schrödinger denkleminin olası çözümü $\psi(c_1, c_2, ..., c_n, \zeta_1, \zeta_2, ..., \zeta_n)$ dalga fonksiyonu olsun parametre eniyilemesi yapılıp c_i ve ζ_i değerleri belirlenecekse bu durumda başlangıç nufusunun bireyleri c_i ve ζ_i lerin tamamen rastgele belirlenmiş değerlerinden oluşturulur.

Bu değerler dalga fonksiyonunun analitik ifadesinde kullanılır ve elde edilen bu analitik ifade kullanılarak hesaplamalar yapılır. Eğer dalga fonksiyonu eniyilemesi tercih edilecekse, c_i ve ζ_i'lerin tamamen rastgele belirlenen değerleri alıp dalga fonksiyonunun sayısal değerleri elde edilir. Bu sayısal başlangıç nüfusu oluşturur ve bu dalga fonksiyonlarının her biri bir birey alınır. İşlemler dalga fonksiyonun bu sayısal değerleri üzerinden yapılır. Böylece analitik ifade, c_i ve ζ_i ler bir kez kullanılmış olur. Toplam birey sayısı nüfus büyüklülüğü veya sayısı olarak adlandırılır.

Oluşturulan başlangıç nüfusu içindeki her bir birey, A_n herhangi bir bireyin normalizasyon sabiti olmak üzere

$$A_n^2 \langle \psi_n | \psi_n \rangle = A_n^2 \int \psi_n^* \psi_n dV = 1 \qquad (3.6)$$

ifadesiyle her bir birey normalize edilir. Normalize olmuş bu dalga fonksiyonu nüfusu kullanılarak her bir birey için enerjinin beklenen değeri hesaplanır. Elde edilen bu enerji değerleri kullanılarak her bir bireyin uygunluk değerine bakılır ve genetik işlemler bu uygunluk değeri üzerinden yürütülür.

3.3.1.Yeniden Oluşum (Üretme)

KGA yönteminde yeni nesil oluşturmak için yeniden üretme sürecinde her bir bireyin uygunluk değerlerinin belirlenebilmesi gerekir.Herhangi bir i. Bireyin uygunluk değerleri F_i ve enerji beklenen değeri ise E_i olsun. Bu bireyin uygunluk değerleri

$$F_i = e^{-\alpha(E_i-\overline{E})/(\overline{E}-E_{\min})} \tag{3.7}$$

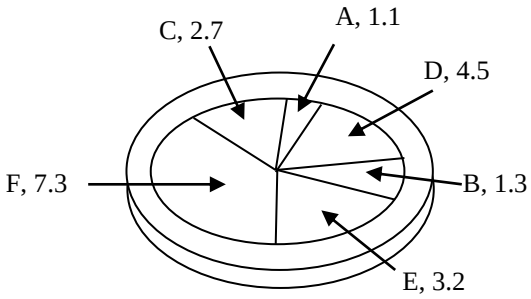
İfadesi ile belirlenir. Burada $\overline{E}$ ortalama enerji ve $E_{\min}$ ise minimum enerjiyi gösterir ve α bir sabit olup, ayar parametresidir. Bu süreçte yeni neslin bireyleri bir önceki nesilden rastgele uygunluk değerine bağlı olarak seçilir. Herhangi bir i. Bireyin seçilme olasılığı P_i aşağıdaki ifadeyle belirlenebilir.

$$P_i = \frac{F_i}{\sum_{i=1}^{N_{pop}} F_i} \tag{3.8}$$

Burada N_{pop} bir nesildeki popülasyon sayısıdır. Böyle bir 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 olurken, küçük olan bireyin yeni nesle aktarılma olasılığı daha az olacaktır. Bunun için bir seçim işlemi uygulanır. Böyle bir işlem için yaygın olarak kullanılanları *uygunluk- oranı* ve *rulet çarkı* yöntemidir(Coley, 2001; Goldberg, 1999).

Rulet çarkı yöntemiyle seçim yapmak için öncelikle Denk.(3.8) den elde edilen uygunluk değerleri kullanılarak bir rulet çarkı oluşturulur. Bu uygunluk değerleri kullanılarak oluşturulan rulet çarkı şematik olarak Şekil 3.1 de gösterilmiştir.

Şekil 3.1 den de görüleceği gibi uygunluk değeri 6.5 olan bireylerin gelme olasılığı birden fazla iken uygunluk değeri 0.9 olan bireylerin gelme olasılığı çok az olacaktır. Böylece uygunluk değerleri yüksek olan bireyler yeni nesle daha çok aktarılacaktır. Bu seçme işlemi çark nüfus sayısı kadar çevrilerek yeni bireyler elde edilir.

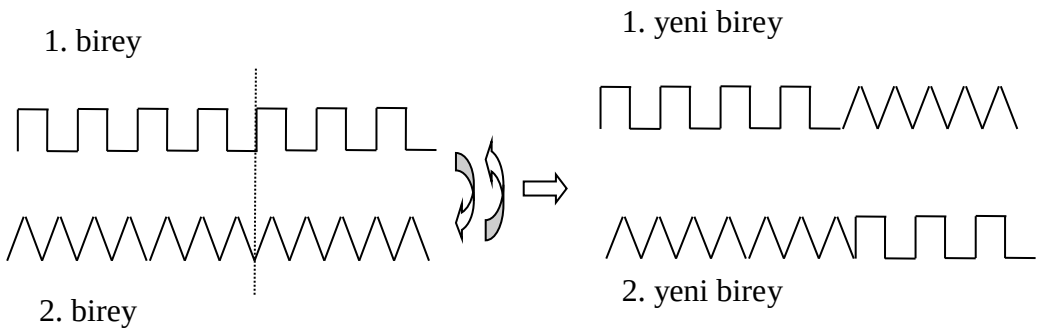


Şekil 3.1. Rulet çarkının şematik gösterimi.

3.3.2. Çaprazlama (Crossover)

Çaprazlama işlemi biyolojik süreçte, iki kromozomun genlerinin birbiriyle yer değiştirmesini sağlayan bir işlemdir. Çaprazlama işlemi yeniden oluşturma sürecinde oluşturulan yeni bireyleri üzerine uygulanır. Bunun için nüfus içinden rastgele iki birey seçilerek, bu iki birey arasında biyolojik süreçteki çaprazlama işlemine benzer bir işlem yürütülür. Çaprazlama işleminin nasıl gerçekleştirildiği rastgele seçilen iki birey arasında şematik olarak Şekil 3.2 deki gibi gösterilebilir.

Seçilen iki birey rastgele belirlenen bir noktadan kesilerek birbiriyle çaprazlama yapılır. Böylece iki yeni birey elde edilmiş olur. Belirlenen iki yeni birey, önceki nesilden seçilen iki bireyin farklı oranlarda bilgilerini taşımaktadır. Rastgele kesme işlemi sadece bir noktadan yapılacağı gibi birden fazla noktadan da kesilebilir.



Şekil 3.2. Çaprazlama işleminin şematik gösterimi.

Dalga fonksiyonu eniyilemesi ileri yürütülen KGA yönteminde çaprazlama işlemi, dalga fonksiyonunu oluşturan sayısal değerleri üzerinden yürütülür. Rastgele seçilen iki dalga fonksiyonu $\psi_1(c_i,\zeta_i)$ ve $\psi_2(c_i,\zeta_i)$ kendi aralarında çaprazlama işlemi

$$\begin{aligned}\psi_1'(c_i,\zeta_i) &= \psi_1(c_i,\zeta_i)S(c_i,\zeta_i)+\psi_2(c_i,\zeta_i)(1-S(c_i,\zeta_i))\\ \psi_2'(c_i,\zeta_i) &= \psi_2(c_i,\zeta_i)S(c_i,\zeta_i)+\psi_1(c_i,\zeta_i)(1-S(c_i,\zeta_i))\end{aligned} \tag{3.9}$$

biçiminde bir işlemle yapılabilir. Böylece elde edilen yeni bireylerin her biri, bir önceki iki bireyin bilgisini taşımış olur. Böyle bir işlem yapılırken $S(c_i,\zeta_i)$ çok iyi seçilmelidir. Çünkü dalga fonksiyonlarının belirli ağırlıkları alınıp, birleştirilerek yeni dalga fonksiyonları elde edilirken, fonksiyonlarının türevlerinde bir süreksizliğe neden olabilir. Bu da kuantum mekaniğinin postülalarına ters düşen bir durumdur ve yanlış çözümlere götürebilir. Bunu önlemek için çaprazlama işleminde $S(c_i,\zeta_i)$ ya yumuşak geçişli bir fonksiyon ((Grigorenko ve Garcia, 2002)ya da değerini (0,1) arasında rastgele bir sayı seçilmelidir. Böylece dalga fonksiyonundaki istenmeyen kırılmalar önlemmiş olur.

Parametre eniyilemesi yönteminde çaprazlama işlemi dalga fonksiyonu eniyilemesi yönteminin tersine, parametrelerin sayısal değerlerine karşılık gelen ikilik kodlar üzerinden gerçekleştirilir. İkilik kodlar üzerinden tek bir noktadan kesilebileceği gibi birden fazla noktadanda kesilerek yapılan çaprazlama işlemi:

1. birey 11010/1100100=3428 $\rightarrow$ 11010**0010111** =3351 1. yeni birey
2. birey 01010/0010111=1303 $\rightarrow$ 01010**1100100**=1380 2. yeni birey

veya

1. birey 11010/110/0100=3428 $\rightarrow$ 11010**0010100** =3348 1. yeni birey
2. birey 01010/001/0111=1303 $\rightarrow$ 01010**1100111**=1383 2. yeni birey

biçiminde yapılabilir(Çakır, 2007).

3.3.3. Mutasyon

Genetik algoritmanın en son aşaması olan mutasyon işlemi, çaprazlama işlemi yapılmış olan yeni kuşak içinden sonra oluşturulmuş yeni kuşak içinden rasgele seçilen herhangi bir bireye uygulanır. Mutasyon işlemi sistemi düştüğü yerel minimumlardan kurtarılmasını sağlayan önemli bir aşamadır. 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,

$$\psi_1'(c_i,\zeta_i)=\psi_1(c_i,\zeta_i)+\psi_m(c_i,\zeta_i) \tag{3.10}$$

biçiminde bir mutasyon uygulanabilir. Burada $\psi_m(c_i,\zeta_i)$ mutasyon fonksiyonudur. Çeşitli mutasyon fonksiyonları kullanılabilir. Kuantum mekanik sistemlerin taban durum enerjisinin belirlenmesinde Grigorenko ve Garcia (2000) Gauss tipi bir fonksiyon kullanmışlardır. Chaudhury ve Bhattacharyya(1999) çok boyutlu yüzeylerdeki yerel kritik noktaların belirlenmesinde dalga fonksiyonunun değerini belli oranlarda rastgele artırarak veya azaltılarak uygulamıştır.

3.4. Hartree Yaklaşımı

Hartree, schrödinger denkleminin bulunmasında iki yıl sonra 1928'de, çoklu elektron sistemleri için bu denklemi temel fiziksel ilkelere dayandıran bir çözüm önerdi(Hartree, 1928). Hartree helyum atomunun hareketini göz önüne alarak bu atomun Hamilton operatörünü atomik birimlerde Denk.(3.11) daki gibi tanımladılar

$$\hat{H}=-\frac{\nabla_1^2}{2}-\frac{\nabla_2^2}{2}+V_{ne}(\boldsymbol{r_1})+V_{ne}(\boldsymbol{r_2})+V_{ee}(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2}) \tag{3.11}$$

Burada r_i *i.* elektronun pozisyon vektörü ve ∇_i *i.* elektronun gradient operatörüdür. Eşitliğin sağ tarafında ilk iki terim kinetik enerji operatörünü, üçüncü ve dördüncü terim çekirdek ile elektron arasındaki coulomb potansiyel enerji operatörünü verir. Son terim ise elektron elektron arasındaki coulomb potansiyel enerji operatörüdür. Atomik birimler genellikle elektron yük hesaplamalarında kullanılan bir sistem birimidir. Bu

sistemde elektronun kütlesi m_e , elektron yükü e ve Planck sabiti $\hbar = h/2\pi$ 1 olarak kabul edilir. Denk.(3.11) deki çekirdek-elektron ve elektron-elektron etkileşim potansiyel enerji operatörleri sırası ile

$$V_{ne}(\boldsymbol{r_1}) = -\frac{1}{r} \tag{3.12.a}$$

ve

$$V_{ee}(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r_2}) = \frac{1}{r_{12}} \tag{3.12.b}$$

ile verilir. Bu eşitliklerde $r = |\boldsymbol{r}|$ ve $r_{12} = |\boldsymbol{r_2} - \boldsymbol{r_1}|$ dir. Burada Hartree, n elektronlu bir sistem için her bir elektronun kendisi dışındaki elektronların oluşturduğu ortalama bir potansiyelinde ($V_{et}(r)$) hareket ettiği yaklaşımı ileri sürerek her bir elektron için

$$\hat{H} = \left\{ -\frac{\nabla_1^2}{2} + V_{ne}(\boldsymbol{r_1}) + V_{et}(\boldsymbol{r_1}) \right\} + \left\{ -\frac{\nabla_2^2}{2} + V_{ne}(\boldsymbol{r_2}) + V_{et}(\boldsymbol{r_2}) \right\}$$

$$= \hat{h}(\boldsymbol{r_1}) + \hat{h}(\boldsymbol{r_2}) \tag{3.13}$$

biçiminde yazılır. Burada $\hat{h}(\boldsymbol{r_1})$ birinci elektron için ve $\hat{h}(\boldsymbol{r_2})$ ise ikinci elektron için tek elektron hamiltoniyen operatörüdür. Bu hamiltoniyen operatöründe, dalga fonksiyonu, her bir elektronun dalga fonksiyonlarının çarpımı şeklinde aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$\psi(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r_2}) = \phi_1(\boldsymbol{r_1})\phi_2(\boldsymbol{r_2}) \tag{3.14}$$

Bu durumda, Hamiltoniyen operatörünün beklenen değeri

$$E = \frac{\int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \psi^*(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r_2}) \hat{H} \psi(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r_2})}{\int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \psi^*(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r_2}) \psi(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r_2})}$$

$$= \sum_{i=1}^{2} \frac{\int d^3\mathbf{r}_i \phi_i^*(\boldsymbol{r_i}) \hat{h}_i \phi_i(\boldsymbol{r_i})}{\int d^3\mathbf{r}_i \phi_i^*(\boldsymbol{r_i})(\boldsymbol{r_i}) \phi_i(\boldsymbol{r_i})} \tag{3.15}$$

şeklinde verilir. Varyasyon yöntemi ile, beklenen değer bir elektron dalga fonksiyonu kümesini elde etmek için Schrödinger denklemi

$$\hat{h}(\boldsymbol{r_i})\phi_i(\boldsymbol{r_i}) = \in_i \phi_i(\boldsymbol{r_i}) \tag{3.16}$$

olarak gösterilir. Denk.(3.16) da $\in_i$ *i.* elektronun hareketi için özenerji olarak yorumlandığında, toplam dalga fonksiyonu her elektron için özdeğer denklemi çözülerek elde edilebilir. Aynı zamanda bu denklem, toplam özenerjinin farklı elektronik hareketlere karşılık gelen yörünge enerjilerinin toplamıdır. Bu yöntem Hartree yaklaşımı olarak adlandırılır.

$$\hat{H}\psi = (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)\phi_1\phi_2 = \varepsilon\psi \tag{3.17}$$

Denk.(3.13) de dalga fonksiyonuna tekabül eden etkin potansiyel ise

$$V_{et}(\bar{\boldsymbol{r}}_i) = \sum_j \int d^3\boldsymbol{r}_j \frac{\left|\phi_j(\boldsymbol{r}_j)\right|^2}{\left|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j\right|} \tag{3.18}$$

Bu etkin potansiyel Hartreenin yaklaşımı için geçerlidir, gerçekte olan elektronların hareketleri bu potansiyelden bağımsızdır. Hartree nin bu denkleminin çözümü görüldüğü gibi basit değildir. Çünkü Denk.(3.18) diğer elektronların dalga fonksiyonu ile temsil edilmektedir. Yani Denk.(3.16) bu denklemin çözümüne bağlı olduğu doğrusal bir denklemdir. Hartree bu denklemin çözümü için kendi içerisinde tutarlı olan öz uyum alan (self consistent field(SCF)) yöntemini uygulamıştır. Bu yöntemle Schrödinger denklemi her bir elektron için ayrı ayrı çözülür ve elde edilen dalga fonksiyonu, daha önce hesaplanan dalga fonksiyonu ile uyumuna bakılır bu yüzden bu metod öz uyum alan metodu olarak adlandırılır(Karabulut.A, 2008). Bununla birlikte, bu yöntemin elektronlar arası (spin-spin, spin-yörünge, görelilik etkileri) gibi etkileri incelenemediği için verilen enerjilerin kimyasal reaksiyonların ve özelliklerin analizlerinde kullanılamayacak kadar yanlış olduğu tespit edilmiştir.

3.5. Slater Determinant

Kuantum Nokta yapıların fiziksel özelliklerinin belirlenmesi için sisteme ait Schrödinger denkleminin çözümüne ait dalga fonksiyonlarının belirlenmesi gerekir. Kuantum Nokta yapıların elektronik özellikleri atomik yapıyı andırdığı için bunlar aynı zamanda yapay atom olarak adlandırılırlar(Cakir.b, 2007). Sitemdeki parçacık sayısı sistemin elektronik yapısını belirleyeceğinden çok sayıda ortogonellik ve varyasyonel parametresi içerdiği için, varyasyonel yöntem ile Schrödinger denkleminin çözümünü bulmak zorlaşır.

Sınırlandırılmış yapılar atomik özellik gösterdiği için sistemin dalga fonksiyonlarını inşa ederken Slater Tipi Atomik Orbitaller (STO) kullanılabilir. Sistemin dalga fonksiyonu Slater determinant dalga fonksiyonları şeklinde kurulabilir. Basit olarak iki elektronlu bir nokta yapıyı ele alırsak sistemin Hamiltoniyenine bağlı olarak elektronların ayırt edilmez ilkesine göre

$$\hat{H}(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2}) = \hat{H}(\boldsymbol{r_2},\boldsymbol{r_1}) \tag{3.19}$$

dir. Schrödinger denklemi ise

$$\hat{H}(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2})\Psi(\boldsymbol{r_2},\boldsymbol{r_1}) = E\Psi(\boldsymbol{r_2},\boldsymbol{r_1}) \tag{3.20}$$

ile verilir. Hamiltoniyen operatörünün pozisyonu iki elektron P_{12} değişim operatörüyle değiştirilebilir.

$$\hat{H}(r_1,r_2)\hat{P}_{12}\Psi(r_1,r_2) = \hat{P}_{12}\hat{H}(r_1,r_2)\Psi(r_1,r_2) \tag{3.21}$$

$$\left[\hat{H},\hat{P}_{12}\right]\Psi = \left(\hat{H}\hat{P}_{12} - \hat{P}_{12}\hat{H}\right)\Psi = 0 \tag{3.22}$$

Bu, Hamiltoniyen ve exchange operatörlerinin eşzamanlı özvarlıklarına sahip olduklarını gösterir. Ayrıca, iki elektronun konumlarının değiştirilmesi göz önüne alındığında $\hat{P}_{12}^2 = 1$ bulunmuştur. Bu, $\hat{P}_{12}$ nin özdeğerlerinin $\pm$ olmasına yol açar. Bu nedenle $\hat{P}_{12}$ için iki farklı dalga fonksiyonu vardır. $+1$ özdeğerine karşılık gelen simetrik dalga fonksiyonu,

$$\Psi^{(S)}(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\Psi(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2}) + \Psi(\boldsymbol{r_2},\boldsymbol{r_1})\} \tag{3.23}$$

ve -1 özdeğerine karşılık gelen antisimetrik dalga fonksiyonu

$$\Psi^{(A)}(r_1, r_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\Psi(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2}) - \Psi(\boldsymbol{r_2},\boldsymbol{r_1})\} = -\Psi^{(A)}(\boldsymbol{r_2},\boldsymbol{r_1}) \tag{3.24}$$

Burada $\frac{1}{\sqrt{2}}$ normalizasyon sabitidir ve Hartree'nin denkleminde uygulanırsa simetrik ve antisimetrik dalga fonksiyonları

$$\Psi^{(S)}(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\phi_1(\boldsymbol{r_1})\phi_2(\boldsymbol{r_2}) + \phi_1(\boldsymbol{r_2})\phi_2(\boldsymbol{r_1})\} \tag{3.25}$$

ve

$$\Psi^{(A)}(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\phi_1(\boldsymbol{r_1})\phi_2(\boldsymbol{r_2}) - \phi_1(\boldsymbol{r_2})\phi_2(\boldsymbol{r_1})\} \tag{3.26}$$

yazılır. Simetrik dalga fonksiyonları Pauli dışarlama ilkesini karşılayamaz iken, antisimetrik dalga fonksiyonu Pauli dışarlama ilkesini karşılar. Bunun nedeni aynı elektronun aynı yörüngede bulunduğu durumda dalga fonksiyonlarının sıfır olmasıdır Yani $r_1 = r_2$ dir. Sonuç olarak, elektronik hareketler için sistemin dalga fonksiyonu her zaman antisimetrik dalga fonksiyonları olmalıdır. Antisimetrik dalga fonksiyonu aşağıdaki gibi determinant şeklinde yazılabilir.

$$\Psi(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \phi_1(\boldsymbol{r_1}) & \phi_1(\boldsymbol{r_2}) \\ \phi_2(\boldsymbol{r_1}) & \phi_2(\boldsymbol{r_2}) \end{vmatrix} \tag{3.27}$$

Çok elektronlu bir sistem için antisimetrik dalga fonksiyonu Slater determinant formunda aşağıdaki gibi tanımlanabilir.

$$\Psi(\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2},.....\boldsymbol{r_N}) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \phi_1(\boldsymbol{r_1}) & \phi_1(\boldsymbol{r_2}) & \cdots & \phi_1(\boldsymbol{r_N}) \\ \phi_2(\boldsymbol{r_1}) & \phi_2(\boldsymbol{r_2}) & \cdots & \phi_2(\boldsymbol{r_N}) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_N(\boldsymbol{r_1}) & \phi_N(\boldsymbol{r_2}) & \cdots & \phi_N(\boldsymbol{r_N}) \end{vmatrix} \tag{3.28}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left|\phi_1(\boldsymbol{r_1})\phi_2(\boldsymbol{r_2}).....\phi_N(\boldsymbol{r_N})\right| \tag{3.29}$$

STO' lar atomların ve küçük moleküllerin hesaplamaları için temel fonksiyonlar olarak kullanılabilir. Bununla birlikte uygulamada daha elverişli olduğu için moleküler hesaplamalar için çok daha kullanışlıdır. Fakat STO ler ile yapılan hesaplamalarda temel güçlük çok merkezli integrallerin hesaplanmasıdır. Bu durum, çok parçacıklı sistemeler için ciddi problemler oluşturmaktadır.

3.6. Hartree-Fock Yaklaşımı

Fock 1930'da, Slater belirleyicisini Hartree yöntemine uyguladı ve kuantum kimyasındaki ana kuramlardan biri olan Hartree-Fock yöntemini önerdi(Fock, 1930). N elektrona sahip kapalı kabuk sistemlerini gözleme alalım. Kapalı-kabuk sistemleri için Slater determinant dalga fonksiyonu orbitallerin uzaysal ve spin koordinatlarının fonksiyonları olarak aşağıdaki gibi verilebilir.

$$\psi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\sigma}) = \frac{1}{\sqrt{(2N)!}} \det\left|\phi_1(\boldsymbol{r_1},\alpha)\phi_1(\boldsymbol{r_2},\beta)...\phi_n(\boldsymbol{r_{2n-1}},\alpha)\phi_n(\boldsymbol{r_{2n}},\beta)\right| \tag{3.30}$$

Burada $\phi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\sigma})$ tek elektron spin orbitalleridir. Bu durumda Hamiltoniyen operatörüne karşılık gelen enerji değerleri

$$E = \frac{1}{(2N)!}\int d^3r d\sigma \det\left|\phi_1^*(r_1,\alpha)...\phi_N^*(r_{2N},\beta)\right|\hat{H} \times \det\left|\phi_1\,(r_1,\alpha)...\phi_N(r_{2N},\beta)\right| \tag{3.31}$$

ile hesaplanabilir. Burada $d^3r = d^3r_1...d^3r_{2N}$ ve $d\sigma = d\sigma_1...d\sigma_{2N}$ dir. Elektronlar birbirinden ayırt edilemez olduğundan, bir elektron operatörü(bir elektron integrali) için integraller 2N tanedir ve iki elektron operatörü için integraller(iki elektronlu integraller) $\{2N(2N-1)/2\}$ tane değer dönüştürülür.

$$E = \frac{1}{(2N)!}\int d^3r d\boldsymbol{\sigma} \det\left|\phi_1^*(\boldsymbol{r_1},\alpha)...\phi_N^*(\boldsymbol{r_{2N}},\beta)\right|\hat{H} \times \det\left|\phi_1\,(\boldsymbol{r_1},\alpha)...\phi_n(\boldsymbol{r_{2N}},\beta)\right|$$

$$= \frac{1}{(2N-1)!}\int d^3r d\sigma \det\left|\phi_1^*(\boldsymbol{r_1},\alpha)...\phi_n^*(\boldsymbol{r_{2N}},\beta)\right| \times \left(-\frac{\nabla^2}{2} + V_{ne}\right) \det\left|\phi_1(\boldsymbol{r_1},\alpha)...\phi_N(\boldsymbol{r_{2N}},\beta)\right|$$

$$+ \frac{1}{2(2N-2)!}\int d^3r d\boldsymbol{\sigma} \det\left|\phi_1^*(\boldsymbol{r_1},\alpha)...\phi_N^*(\boldsymbol{r_{2N}},\beta)\right| \frac{1}{r_{12}} \times \det\left|\phi_1(\boldsymbol{r}_1,\alpha)...\phi_N(\boldsymbol{r_{2N}},\beta)\right| \qquad (3.32)$$

Denk.(3.27) deki eşitliğin sağ tarafındaki birinci terim tek elektron integrali, ikinci terim ise iki elektron integrali olarak tanımlanır. Buradan ortonormalizasyon bağıntıları

$$\int d^3r_\lambda d\sigma \phi_k^*(\boldsymbol{r_\lambda},\sigma)\phi_l(\boldsymbol{r_\lambda},\sigma) = \delta_{kl} \qquad (3.33)$$

ve

$$\int d^3r_\lambda d\sigma \phi_k^*(\boldsymbol{r_\lambda},\sigma)\phi_l(\boldsymbol{r_\lambda},\sigma' \neq \sigma) = 0 \qquad (3.34)$$

ile verilir. Burada α ve β için aynı orbitaller kullanıldığı için Denk.(3.32) deki tek elektron integralleri spinsiz olarak tanımlanabilir. Yani

$$2\sum_i^N \int d^3\boldsymbol{r}\phi_i^*(\boldsymbol{r})\left\{-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{ne}(\boldsymbol{r})\right\}\phi_i(\boldsymbol{r}) = 2\sum_i^N h_i \qquad (3.35)$$

olur. Denk.(3.25) den Denk.(3.34) deki $\phi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\sigma})$ spin orbitallerinden uzaysal orbital $\phi_k(\boldsymbol{r})$ ye geçilmiştir. Denk.(3.32) deki iki elektron integrallerinde farklı spin terimlerinin kombinasyonu için hesaba katmaya gerek yoktur. Çünkü onlar aynı şartlar altında sıfırdır. Öte yandan uzaysal terimler için, iki elektronun değişiminde kombinasyonları, onların aynı uzaysal terimlerin yanında kalır. Bu elektron çiftlerinin kombinasyon sayısı $(N-2)!$ dir. Bu durumda iki elektron integralleri şu şekilde yazılabilir.

$$\sum_{ij}^{N}(2J_{ij}-K_{ij}) \tag{3.36}$$

dir. Burada J_{ij} ve K_{ij} coulomb ve exchange enerji integralleri olup

$$j_{ij}=\int d^3\boldsymbol{r}_1 d^3\boldsymbol{r}_2 \phi_i^*(\boldsymbol{r_1})\phi_j^*(\boldsymbol{r_2})\frac{1}{r_{12}}\phi_i(\boldsymbol{r_1})\phi_j(\boldsymbol{r_2})=\langle ij\,|\,ij\rangle \tag{3.37}$$

$$K_{ij}=\int d^3\boldsymbol{r_1} d^3\boldsymbol{r_2} \phi_i^*(\boldsymbol{r}_1)\phi_j^*(\boldsymbol{r_2})\frac{1}{r_{12}}\phi_j(\boldsymbol{r_1})\phi_i(\boldsymbol{r_2})=\langle ij\,|\,ji\rangle \tag{3.38}$$

dir. Hamilton operatörünün beklenen değerini

$$\left\{h_i+\sum_{ij}^{N}(2\hat{j}_{ij}-\hat{K}_{ij})\right\}\phi_i=\sum_j \phi_j \in_{ji} \tag{3.39}$$

$$\left\{h_i^*+\sum_{ij}^{N}(2\hat{j}_{ij}^*-\hat{K}_{ij}^*)\right\}\phi_i^*=\sum_j \phi_j^* \in_{ji}^* \tag{3.40}$$

dir. Varyasyonel ilkesinden $\hat{j}_{ij}$ ve $\hat{K}_{ij}$ sırasıyla coulomb ve exchange enerji integralleri olarak adlandırılır ki onlarda aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$j_j(\boldsymbol{r_1})\phi_i(\boldsymbol{r_1})=\int d^3\boldsymbol{r_2}\phi_j^*(\boldsymbol{r_2})\phi_j(\boldsymbol{r_2})\frac{1}{r_{12}}\phi_i(\boldsymbol{r_1}) \tag{3.41}$$

$$K_j(\boldsymbol{r_1})\phi_i(\boldsymbol{r_1})=\int d^3\boldsymbol{r_2}\phi_j^*(\boldsymbol{r_2})\phi_i(\boldsymbol{r_2})\frac{1}{r_{12}}\phi_j(\boldsymbol{r_1}) \tag{3.42}$$

Hamiltoniyen operatörü reel bir operatör olduğundan gerçek özenerjiyi veren bir operatörüdür.

$$\varepsilon_{ji}=\varepsilon_{ij}^* \tag{3.43}$$

Bu denklem bize Denk.(3.40)' in Denk.(3.39)'un komplex konjigesi olduğunu gösterir. Fock matrisi aşağıdaki gibi tanımlanır

$$\hat{F} = \hat{h}_i + \sum_{ij}^{N} (2\hat{J}_{ij} - \hat{K}_{ij}) \tag{3.44}$$

Bu durumda bir- elektron denklemi de

$$\hat{F}\phi_i = \in_i \phi_i \tag{3.45}$$

yazılabilir. Denk.(3.45), Hartree-Fock denklemi olarak adlandırılır ve $\hat{F}$ operatörüne Fock operatörü denir. Denk.(3.45) kullanılarak, orbital enerjisi,

$$\in_i = \int d^3 r_1 \phi_i^*(r_1) \hat{F} \phi_i(r_1) = h_i + \sum_{ij}^{N} (2J_{ij} - K_{ij}) \tag{3.46}$$

şeklinde hesaplanır. Bu orbital enerjilerinden sistem toplam enerjisi

$$E = 2\sum_{i}^{n} \in_i - \sum_{i,j}^{n} (2J_{ij} - K_{ij}) = \sum_{i}^{n} (\in_i + h_i) \tag{3.47}$$

biçiminde yazılır. Sistemin toplam enerjisi orbital enerjilerinin toplamına eşit olmadığı görülür. Çünkü elektron-elektron etkileşimlerini iki kez hesaba katılmıştır. Toplam enerji, çekirdek-çekirdek itme enerjileri eklenerek hesaplanır.

$$E_{toplam} = E + \sum_{A \neq B} \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} \tag{3.48}$$

Hartree-Fock denklemini Hartree eşitliğinde olduğu gibi nonlineer bir denklem olduğu için genellikle öz uyum alan(SCF) yöntemi ile çözülür. Hartree-Focköz uyum yöntemi aşağıda belirtilen işlem basamakları ile gerçekleştirilir ve çözümü arar.

I. Hesaplanan moleküler sistem (nükleer koordinatlar, nükleer yükler ve elektron sayısı) ve ilk referans molekül orbitalleri hakkında bir bilgi oluşturulur
II. Fock denkleminde Denk(3.44) referans orbitalleri kullanılarak eşitlik operatörünün iki elektronlu operatörleri hesaplanır.
III. Denk.(3.45)'in çözümü yapılır.

IV. Bulunan molekül orbitalleri referans orbitalleri ile karşılaştırılır ve orbitallerin bu denklemin özfonksiyonları olup olmadığına bakılır. Verilen yörüngeler, verilen orbitallerin karşılık gelen referans orbitallerine olan farklılıklarının belirli bir eşik değerinden düşük olması halinde, özfonksiyonlar olarak alınır. Orbitallerin eşik değerinden daha farklı olması durumunda ikinci adıma tekrar dönülür ve değer istenilen eşik değere gelinceye kadar devam edilir.

Genel olarak, Hartree-Fock yaklaşımı SCF yöntemine bağlı bir yaklaşımdır. Hartree-Fock yöntemi prosedürün basit olmasına rağmen, bilgisayarsız çözmek moleküller için imkansızdır. Hartree-Fock yaklaşımının moleküller için çözülmesi, günümüz bilgisayar teknolojilerini beklemek zorunda kaldı.

3.7. Hartree-Fock-Roothaan Yaklaşımı

Ticari bilgisayarların 1950 yılında pratik olarak kullanılmaya başlamasıyla, bilgisayar tabanlı bilim hazırlığı ivme kazanmıştır. International Business Machines(IBM) araştırmacısı olan Roothaan, 1951 yılında Hartree-Fock denklemini kendi yaklaşımıyla yorumlamıştır. Roothaan'ın yaklaşımı Hartree-Fock hesaplamalarının hesaplama süresini önemli ölçüde azalttı. Bu yöntemin geliştirilmesinden sonra kuantum kimyası, bilgisayar gücünün büyümesini takip eden ilerleme kaydetmeye başladı. Tek elektron ϕ_i orbitali genişletilirse

$$\phi_i(r) = \sum_{p=1}^{n_{AO}} c_{pi}\chi_p(r) \tag{3.49}$$

burada n_{AO} atomik orbitallerin sayısını χ_p, p inci STO' ları, $k \rightarrow n_i \ell_i m_i$ STO lar için kuantum sayılarını ve c_{pi} orbitallerin lineer açılım katsayılarını göstermektedir. Hartree-Fock denklemi, Roothaan yaklaşımında molekül orbitallerinin açılımlarını kullanarak Hartree-Fock eşitlikleri

$$\mathbf{F}C_i = \in_i \mathbf{S}C_i \tag{3.50}$$

Bu eşitlikte F Fock operatörü ve S ise overlap matris elemanıdır. Bunlar sırasıyla aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$F_{pq} = \int d^3\mathbf{r}\chi_p^*(\mathbf{r})\hat{F}\chi_q(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}\chi_p^*(\mathbf{r})\hat{h}\chi_q(\mathbf{r}) + \sum_{j=1}^{N}\int d^3\mathbf{r}\chi_p^*(\mathbf{r})(2\hat{\mathrm{J}}_j - \hat{\mathrm{K}}_j)\chi_q(\mathbf{r})$$

$$= h_{pq} + \sum_{r,s=1}^{\sigma_{bas}} P_{sr}(\langle pr \mid qs\rangle - \frac{1}{2}\langle pr \mid sq\rangle) \tag{3.51}$$

$$S_{pq} = \int d^3r\chi_p^*(r)\chi_q(r) \tag{3.52}$$

Bu eşitliklerde, σ_{baz} baz fonksiyonların sayısıdır ayrıca h_{pq} integrali, $\langle pr \mid qs\rangle$ ve $\langle pr \mid sq\rangle$ ifadeleri aşağıdaki tanımlanır.

$$h_{pq} = \int d^3r\chi_p^*(r)\left\{-\frac{1}{2}\nabla_r^2 + V_{ne}(r)\right\}\chi_q(r) \tag{3.53}$$

$$\langle pr \mid qs\rangle = \int d^3r_1 d^3r_2 \chi_p^*(r_1)\chi_r^*(r_2)\frac{1}{r_{12}}\chi_q(r_1)\chi_s(r_2) \tag{3.54}$$

$$\langle pr \mid sq\rangle = \int d^3r_1 d^3r_2 \chi_p^*(r_1)\chi_r^*(r_2)\frac{1}{r_{12}}\chi_s(r_1)\chi_q(r_2) \tag{3.55}$$

P_{pq}, moleküler orbital katsayılarını kullanılarak tanımlanan yoğunluk matrisi olarak adlandırılır ve

$$P_{pq} = 2\sum c_{pj}c_{qj}^* \tag{3.56}$$

şeklinde verilir. Yoğunluk matrislerinin köşegen elemanları P_p bir elektronun p inci moleküler orbitalde bulunma olasılığını verir. Yoğunluk matrisi, istatistiksel sistemlerin kuantum mekanik değerlerini tanımlamak için von Neumann ve Landau tarafından ilk defa tanıtılmıştır(Landau, 1927; Neumann, 1927). Denk.(3.50)'deki, katsayı matrisi C_i 'nin sıfır olmayan çözümlerini bulmak için

$$|\mathbf{F} - \varepsilon_i\mathbf{S}| = 0 \tag{3.57}$$

koşulunu sağlamak gerekir. Denk.(3.57), Denk.(3.50) 'in çözümü için kullanılır. Yani Fock matrisi F, matris F'yi vermek üzere dönüştürülür.

$$\left|F^{'} - \varepsilon_i E\right| = 0 \tag{3.58}$$

Burada E birim matristir. Bu dönüşümle Denk.(3.57) $F^{'}$ matrisinin köşegenleştirilmesiyle çözülebilir. Denk.(3.58)'i çözmenin en basit yolu, normalize edilmiş baz setlerini kullanmaktır. Örtüşme matrisi S için birim matrisi E olan baz setleri kullanılırsa, Denk(3.58), Fock matrisinin köşegenleştirilmesi ile kolayca çözülebilir. Böyle bir temel küme dönüşümü aslında birçok kuantum kimya hesaplamalarında çokça kullanılmaktadır. Roothaan denklemi SCF yöntemiyle aşağıdaki işlem basamaklarıyla çözümlenir.

I. Hesaplanan moleküler sistem için (nükleer koordinat, nükleer yük ve elektron sayısı) ve χ_p (ortonormal bas seti sayısı) belirlenir.

II. Bir ve iki elektron integralleri (h_{pq}, $\langle pr \mid qs \rangle$ ve $\langle pr \mid sq \rangle$) hesaplanır.

III. Moleküler yörünge katsayısı (C_i) ile yoğunluk matrisini P belirlenir.

IV. Denk(3.51)'de verilen Fock matrisi hesaplanır.

V. Fock matrisi diyagonelleştirilerek orbital enerjisi $(\in_i)$ ve moleküler orbital katsayısı (C_i) belirlenir.

VI. Yoğunluk matrisini, $(P^{'})$'yi yeni moleküler yörünge katsayılarıyla $(C_i^{'})$ yeniden hesaplanır.

VII. Hesaplanan yoğunluk matrisinin bir önceki değer ile uyumuna bakılır. Yoğunluk matrisleri $(P^{'})$ ve (P) arasındaki fark belirli bir eşik değerden düşük ise sonuç kabul edilir.Eğer eşik değerden büyük ise dördüncü adıma geri dönülür ve istenilen sonuç elde edilene kadar hesaplama devam eder.

Hartree ve Hartree-Fock'un yapmış olduğu SCF yaklaşımları içerisinde Roothaan'ın yapmış olduğu hesaplaması molekül orbitallerinin üniter dönüşümü ile toplam elektronik enerjiyi düşürür. Bu nedenle, bu moleküler orbitalleri daha da rahatlatan bir yaklaşımdır. Yoğunluk matrisi P'yi, Fock matrisi F'yi ve tek elektronlu integrali kullanarak, toplam elektronik enerji

$$E = \frac{1}{2} \sum_{p,q=1}^{n_{bas}} P_{pq}(h_{pq} + F_{pq}) \tag{3.59}$$

hesaplanır.

4. ÇOK ELEKTRONLU KUANTUM NOKTA YAPILARDA GENETİK ALGORİTMA VE HARTREE FOCK ROOTHAAN YAKLAŞIMININ BİRLEŞTİRİLMESİ

4.1. Hartree Fock Yaklaşımı

Üçüncü bölümde Hartree, HF ve HFR yaklaşımlarını tek ve iki elektronlu yapılar için inceledik. Bu bölümde ise sınırlandırılmış çok elektronlu sistemler için GA ve HFR yaklaşımlarının birleştirilmesini ele alacağız.

N elektronlu bir sistemin toplam Hamiltoniyeni

$$\hat{H} = 2\sum_{p}^{N/2} h_p + \sum_{pq}^{N/2}(2J_{pq} - K_{pq}) + f\left\{2\sum_{m}^{N/2} h_m + \sum_{m}^{N/2}(2aJ_{mn} - bK_{mn}) + 2\sum_{m}^{N/2}(2J_{km} - K_{km})\right\} \quad (4.1)$$

olarak yazılır. Burada p ve q kapalı kabuk kısmını, m ve n de açık kabuk kısmını ve a, b ve f sayısal sabitlerdir. Bu denklemin sağ tarafındaki ilk iki terim dolu(kapalı) kabuk terimi, üçüncü ve dördüncü terim ise açık kabuk terimi ve son terim ise kapalı kabuktaki elektronlar ile açık kabuktaki elektronların etkileşimlerden gelen terimdir. Öncelikle kapalı kabuk kısmını ele alırsak N parçacık sayısı olmak üzere h_p tek elektron operatörü, J_{pq} ve K_{pq} ler de iki elektron operatörü olup, sırasıyla Coulamb ve Exchange enerji operatörleridir. Tek elektron operatörü,

$$h_k = 2\left(\sum_{k=1}^{\frac{N}{2}}(-\frac{1}{2m^*}\nabla_k^2) - \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}}(\frac{Z}{r_k\varepsilon_i})\right) + V_C \quad (4.2)$$

şeklinde yazılır. Burada birinci terim kinetik enerji operatörü, ikinci terim safsızlık ile elektron arasındaki Coulomb potansiyeli enerji operatörü, Z safzılık yükü ve V_C ise sınırlandırıcı potansiyeli olup,

$$V_C = \begin{cases} 0, & r < R \\ \infty, & r \geq R \end{cases} \quad (4.3)$$

dir. N elektronlu bir sistemin dalga fonksiyonu Slater determinantı

$$\psi(r_1, r_2, ...r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix} \phi_1(r_1) & \phi_1(r_2) & \dots & \phi_1(r_N) \\ \phi_2(r_1) & \phi_2(r_2) & \dots & \phi_2(r_N) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_N(r_1) & \phi_N(r_2) & \cdots & \phi_N(r_N) \end{vmatrix} \quad (4.4)$$

şeklinde yazılır. Burada $\phi_p(r)$ ler tek elektron spin orbitalleri olup, Slater Tipi Orbitallerin (STO) lineer kombinasyonu şeklinde

$$\phi_i(r) = \sum_{i=1}^{\sigma} c_{pi}\chi_p(r) \tag{4.5}$$

yazılabilir. Bu eşitlikte σ STO ların baz seti sayısı, χ_p ise p inci STO' ları, $k \rightarrow n_i l_i m_i$ STO' ların için kuantum sayılarını ve c_{pi} orbitallerin lineer açılım katsayılarını göstermektir. STO lar

$$\chi_{nlm} = r^{n-1}e^{-\xi r}Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{4.6}$$

biçiminde tanımlanır. Burada $Y_{lm}(\theta,\phi)$ Condon-Shortly fazında komplex küresel harmoniklerdir. STO lar cinsinde kinetik enerji ifadesi

$$\langle \psi_p | -\frac{1}{2}\nabla^2 | \psi_p \rangle = \langle \phi_p | -\frac{1}{2}\nabla^2 | \phi_p \rangle \tag{4.7}$$

$$= \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c_{pi}^* c_{pj} \langle \chi_{n_i l_i m_i} | -\frac{\nabla^2}{2} | \chi_{n_j l_j m_j} \rangle$$

$$= \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c_{pi}^* c_{pj} \left[-\int_0^R \left(\frac{n_j(n_j-1) - l_j(l_j-1)}{2} \right) \times r^{n_i-1} r^{n_j-3} e^{-\xi_i r} e^{-\xi_j r} \right.$$

$$\times Y_{l_i m_i}^*(\theta,\phi) Y_{l_j m_j}(\theta,\phi) dV + \xi_j n_j \int_0^R r^{n_i-1} r^{n_j-2} e^{-\xi_i r} e^{-\xi_j r} \tag{4.8}$$

$$\left. \times Y_{l_i m_i}^*(\theta,\phi) Y_{l_j m_j}(\theta,\phi) dV - \frac{\xi_j^2}{2} \int_0^R r^{n_i-1} r^{n_j-2} e^{-\xi_i r} e^{-\xi_j r} Y_{l_i m_i}^*(\theta,\phi) Y_{l_j m_j}(\theta,\phi) dV \right]$$

elde edilir. Sonuç olarak kinetik enerji ifadesini overlap integralleri cinsinden

$$\langle \psi_p | -\frac{1}{2}\nabla^2 | \psi_p \rangle = \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} \frac{c_{pi}^* c_{pj}}{m^*} \left\{ \left[\frac{l_j(l_j-1) - n_j(n_j-1)}{2} \right] \times \right.$$

$$\left[\frac{(\xi_i+\xi_j)^2}{(n_i+n_j)(n_i+n_j-1)} S_{n_i l_i m_i, n_j l_j m_j}(\xi_i,\xi_j) + \frac{e^{-(\xi_i+\xi_j)R} R^{n_i+n_j-1}}{n_i+n_j-1} \left(1 + \frac{R(\xi_i+\xi_j)}{n_i+n_j} \right) \right] \tag{4.9}$$

$$\left. + \xi_i n_j \left[\frac{\xi_i+\xi_j}{n_i+n_j} S_{n_i l_i m_i, n_j l_j m_j}(\xi_i,\xi_j) + \frac{e^{-(\xi_i+\xi_j)R} R^{n_i+n_j}}{n_i+n_j} \right] - \frac{\xi_j^2}{2} S_{n_i l_i m_i, n_j l_j m_j}(\xi_i,\xi_j) \right\}$$

yazılır. Potansiyel enerji ifadesi

$$\langle \psi_p \mid -\frac{Z}{r_k} \mid \psi_p \rangle = -\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c_{pi}^{*} c_{pj} \frac{Z}{\varepsilon_i} \langle \chi_{n_i l_i m_i} \mid \frac{1}{r} \mid \chi_{n_j l_j m_j} \rangle$$

$$= -\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c_{pi} c_{pj} \frac{Z}{\varepsilon_i} \int_0^R r^{n_i-1} e^{-\xi_i r} \frac{1}{r} r^{n_j-1} e^{-\xi_j r} r^2 dr \delta_{l_i l_j} \delta_{m_i m_j} \tag{4.10}$$

dir. Overlap integralleri cinsinden potansiyel enerji ifadesi

$$\langle \psi_p \mid -\frac{Z}{r_k} \mid \psi_p \rangle = -\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c_{pi}^{*} c_{pj} \frac{Z}{\varepsilon_0} \left(\frac{(\xi_i + \xi_j)}{n_i + n_j} S_{n_i l_i m_i, n_j l_j m_j}(\xi_i, \xi_j) + \frac{e^{-(\xi_i+\xi_j)R} R^{n_i+n_j-1}}{n_i + n_j} \right) \tag{4.11}$$

şeklinde yazılır. Denk.(4.9) ve Denk.(4.11) deki *S* overlap integrali

$$S_{n_i l_i m_i, n_j l_j m_j} = \int_0^R r^{n_i+n_j-2} e^{-(\xi_i+\xi_j)r} r^2 dr \delta_{l_i l_j} \delta_{m_i m_j}$$

$$= \frac{(n_i + n_j)!}{(\xi_i + \xi_j)^{n_i+n_j+1}} \left(1 - \sum_{s=0}^{n_i+n_j} \frac{(\xi_i + \xi_j)^s R^s}{s!} e^{-(\xi_i+\xi_j)R} \right) \delta_{l_i l_j} \delta_{m_i m_j} \tag{4.12}$$

dir. Bu durumda kinetik enerji ve potansiyel enerji ifadelerinin toplamı olan tek elektron integrali

$$\langle \psi_{n_i l_i m_i} \mid h_k \mid \psi_{n_j l_j m_j} \rangle = 2 \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}} \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} \frac{c_{pi}^{*} c_{pj}}{m^{*}} \langle \chi_{n_i l_i m_i} \mid h_k^N \mid \chi_{n_j l_j m_j} \rangle$$

$$= \sum_{k=1}^{\frac{N}{2}} \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} \frac{c_{pi}^{*} c_{pj}}{m^{*}} c_{pi}^{*} c_{pj} \left\{ \left[\frac{l_j(l_j-1) - n_j(n_j-1)}{2} \right] \right.$$

$$\times \left[\frac{(\xi_i + \xi_j)^2}{(n_i + n_j)(n_i + n_j - 1)} S_{n_i l_i m_i, n_j l_j m_j}(\xi_i, \xi_j) + \frac{e^{-(\xi_i+\xi_j)R} R^{n_i+n_j-1}}{n_i + n_j - 1} \left(1 + \frac{R(\xi_i + \xi_j)}{n_i + n_j} \right) \right]$$

$$\left. + \xi_i n_j \left[\frac{\xi_i + \xi_j}{n_i + n_j} S_{n_i l_i m_i, n_j l_j m_j}(\xi_i, \xi_j) + \frac{e^{-(\xi_i+\xi_j)R} R^{n_i+n_j}}{n_i + n_j} \right] - \frac{\xi_j^2}{2} S_{n_i l_i m_i, n_j l_j m_j}(\xi_i, \xi_j) \right\} \tag{4.13}$$

$$- \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma} c_{pi}^{*} c_{pj} \frac{Z}{\varepsilon_0} \left(\frac{(\xi_i + \xi_j)}{n_i + n_j} S_{n_i l_i m_i, n_j l_j m_j}(\xi_i, \xi_j) + \frac{e^{-(\xi_i+\xi_j)R} R^{n_i+n_j-1}}{n_i + n_j} \right)$$

elde edilir.

p ve q atomik orbitallerinde bulunan iki elektron arasındaki coulomb enerji integrali terimi J_{pq}

$$J_{pq} = \langle \phi_p(r_1)\phi_q(r_2) | \frac{1}{r_{12}} | \phi_p(r_1)\phi_q(r_2) \rangle = \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma}\sum_{k=1}^{\sigma}\sum_{l=1}^{\sigma} c_{pi}^* c_{pj} c_{qk}^* c_{ql}$$

$$\times \int_0^R \chi_{n_i l_i m_i}^*(r_1)\chi_{n_j l_j m_j}^*(r_2)\frac{1}{r_{12}}\chi_{n_k l_k m_k}(r_1)\chi_{n_l l_l m_l}(r_2)dV_1 dV_2 \qquad (4.14)$$

olur. Denk. 4.14 de STO ları kullanılırsa

$$J = \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma}\sum_{k=1}^{\sigma}\sum_{l=1}^{\sigma} c_{pi}^* c_{pj} c_{qk}^* c_{ql} \int_{r_1}^{R}\int_{r_2}^{R} r_1^{n_i+n_k-2} e^{-(\xi_i+\xi_k)r_1} Y_{l_i m_i}^*(\theta_1,\phi_1) Y_{l_k m_k}(\theta_1,\phi_1)\frac{1}{r_{12}}$$

$$\times r_2^{n_j+n_l-2} e^{-(\xi_j+\xi_l)r_2} Y_{l_j m_j}^*(\theta_2,\phi_2) Y_{l_l m_l}(\theta_2,\phi_2) dV_1 dV_2 \qquad (4.15)$$

olur. Burada $\frac{1}{r_{12}}$ yi iki küresel harmoniğin açılımı şeklinde

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{t=0}^{\infty}\sum_{s=-t}^{t}\frac{4\pi}{2t+1}\frac{r_<^t}{r_>^{t+1}} Y_{ts}(\theta_1,\phi_1) Y_{ts}^*(\theta_2,\phi_2) \qquad (4.16)$$

yazılabilir, Coulomb enerji integrali iki küresel harmoniğin çarpımını

$$Y_{l_i m_i}^*(\theta_1,\phi_1) Y_{l_k m_k}(\theta_1,\phi_1) = \sum_{L1=0}^{\infty}\sum_{Ml=-L1}^{L1}\sqrt{\frac{2L1+1}{4\pi}} C_{l_i m_i, l_k m_k}^{L1} Y_{L_1 M_i}^*(\theta_1,\phi_1)\delta_{M_1, m_i - m_k} \qquad (4.17a)$$

$$Y_{l_j m_j}^*(\theta_2,\phi_2) Y_{l_l m_l}(\theta_2,\phi_2) = \sum_{L_2=0}^{\infty}\sum_{M_2=-L_2}^{L_2}\sqrt{\frac{2L_2+1}{4\pi}} C_{l_l m_l, l_j m_j}^{L_2} Y_{L_2 M_2}^*(\theta_2,\phi_2)\delta_{M_2, m_l - m_j} \qquad (4.17b)$$

olursa ve Denk.(4.15)

$$J = \sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma}\sum_{k=1}^{\sigma}\sum_{l=1}^{\sigma}\frac{c_{pi}^* c_{pj} c_{qk}^* c_{ql}}{m^*}\sum_{t=0}^{\infty}\sum_{t=-s}^{s}\frac{4\pi}{2t+1}\sum_{L_1}\sum_{L_2}\sqrt{\frac{2L_1+1}{4\pi}}\sqrt{\frac{2L_2+1}{4\pi}} C_{l_i m_i, l_k m_k}^{L_1} C_{l_l m_l, l_j m_j}^{L_2}$$

$$\times \int_{r_1}\int_{r_2} r_1^{n_i+n_k-2} r_2^{n_j+n_k-2} e^{-(\xi_i+\xi_k)r_1} e^{-(\xi_j+\xi_l)r_2}\frac{r_<^t}{r_>^{t+1}} r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 \int_{\Omega_1} Y_{L_1, m_1 - m_k}^*(\theta_1,\phi_1) Y_{ts}(\theta_1,\phi_1) d\Omega_1 \delta_{M_1, m_i - m_k}$$

$$\times \int_{\Omega_2} Y_{ts}^*(\theta_2,\phi_2) Y_{L_2, m_l - m_j}(\theta_2,\phi_2) d\Omega_2 \delta_{M_2, m_l - m_j} \qquad (4.18)$$

şeklinde yazılır.

Burada $L_1=L_2$, $m_i-m_k=s=m_l-m_j=M_1=M_2$ dir. Burada $C_{l_i m_i, l_k m_k}^{L_1}$ gaunt katsayılarıdır. Bu durumda Coulomb enerjisi

$$J_{pq}=\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma}\sum_{k=1}^{\sigma}\sum_{l=1}^{\sigma}\frac{c_{pi}^{*}c_{pj}c_{qk}^{*}c_{ql}}{\varepsilon}$$

$$\times\left\{\sum_{L_1=\max\left[(l_i-l_k),(l_j-l_l)\right]}^{L_1=\min\left[(l_i+l_k),(l_j+l_l)\right]}C_{l_im_i,l_km_k}^{L_1}C_{l_lm_l,l_jm_j}^{L_1}\left\{\frac{(n_i+n_k+L_1)!}{(\xi_i+\xi_k)^{n_i+n_k+L_1+1}}\times\frac{(n_j+n_k-L_1)!}{(\xi_j+\xi_l)^{n_j+n_l-L_1}}\times\right.\right.$$

$$\left.\times\left(1-e^{(\xi_j+\xi_l)R}\sum_{p=0}^{n_j+n_l-L_1-1}\frac{(\xi_i+\xi_j+\xi_k+\xi_l)^pR^p}{p!}\right)-R^4e^{(\xi_i+\xi_k)R}\frac{(n_l+n_j+L_1)!}{(\xi_j+\xi_l)^{(n_l+n_j+L_1+1)}}\times\right.$$

$$\left.\left.\times\left(1-e^{-(\xi_j+\xi_l)R}\sum_{p=0}^{n_j+n_l+L_1}\frac{(\xi_j+\xi_l)^pR^p}{p!}\right)\right\}\delta_{m_i-m_k,m_l-m_j}\right. \tag{4.19}$$

elde edilir. Bu ifadeyi incomplate Gama fonksiyonu cinsinden

$$J=\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma}\sum_{k=1}^{\sigma}\sum_{l=1}^{\sigma}\frac{c_{pi}^{*}c_{pj}c_{qk}^{*}c_{ql}}{\varepsilon}$$

$$\times\sum_{L_1=\max\left[(l_i-l_k),(l_j-l_l)\right]}^{L_1=\min\left[(l_i+l_k),(l_j+l_l)\right]}\frac{4\pi}{2L_1+1}\left\langle l_im_i\,|\,l_km_k\,|L_1,m_i-m_k\right\rangle\left\langle l_lm_l\,|\,l_jm_j\,|L_1,m_l-m_j\right\rangle\times$$

$$\times\left\{\frac{(n_i+n_k+L_1)!}{(\xi_i+\xi_k)^{n_i+n_k+L_1}}\left[\frac{\gamma\left(n_j+n_l-L_1,(\xi_j+\xi_l)R\right)}{(\xi_j+\xi_l)^{n_j+n_l-L_1}}-\sum_{u=0}^{n_i+n_k+L_1}\frac{(\xi_i+\xi_k)^u}{u!}\times\right.\right.$$

$$\left.\left.\times\frac{\gamma(n_j+n_l+u-L_1,(\xi_i+\xi_j+\xi_k+\xi_l)R}{(\xi_i+\xi_j+\xi_k+\xi_l)^{n_j+n_l+u-L_1}}\right]+\sum_{u=0}^{n_i+n_k-L_i-1}\frac{(n_i+n_k-L_i-1)!}{u!(\xi_i+\xi_k)^{n_i+n_k-L_1-u}}\times\right.$$

$$\left.\times\left[\frac{\gamma(n_j+n_l+u+L_1+1,(\xi_i+\xi_j+\xi_k+\xi_l)R}{(\xi_i+\xi_j+\xi_k+\xi_l)^{n_j+n_l+u+L_1+1}}-\frac{R^ue^{-(\xi_i+\xi_k)R}\gamma(n_l+n_j+L_1+1,(\xi_j+\xi_l)R)}{(\xi_j+\xi_l)^{n_l+n_j+L_1+1}}\right]\right\}$$

$$\times\delta_{m_i-m_k,m_l-m_j} \tag{4.20}$$

şeklinde yazılır. Parçacığın Exchange enerji ifadesi ise

$$K_{pq}=\langle\phi_p(r_1)\phi_q(r_2)\,|\,\frac{1}{r_{12}}\,|\,\phi_p(r_2)\phi_q(r_1)\rangle$$

$$K_{pq}=\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma}\sum_{k=1}^{\sigma}\sum_{l=1}^{\sigma}\frac{c_{pi}^{*}c_{qk}c_{qj}^{*}c_{pl}}{\varepsilon}\int_{r_2<R}\int_{r_1<R}\chi_{pi}^{*}(r_1)\chi_{qk}(r_1)\frac{1}{r_{12}}\chi_{qj}^{*}(r_2)\chi_{pl}(r_2)dV_1dV_2 \tag{4.21}$$

olur. Coulomb teriminden yürütülen prosedürle Exchange integralleri

$$K_{pq}=\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma}\sum_{k=1}^{\sigma}\sum_{l=1}^{\sigma}c_{pi}^{*}c_{qk}c_{qj}^{*}c_{pl}\int_{r_2<R}\int_{r_1<R}r_1^{n_{pi}+n_{qk}}r_2^{n_{pi}+n_{ql}}e^{-(\xi_{i}+\xi_{k})r_1}e^{-(\xi_{j}+\xi_{l})r_2}\frac{r_{<}^{t}}{r_{>}^{t+1}}dr_1dr_2 \qquad (4.22)$$

Exchange enerji integrali incomplate gama fonksiyonu cinsinden

$$K_{pq}=\sum_{i=1}^{\sigma}\sum_{j=1}^{\sigma}\sum_{k=1}^{\sigma}\sum_{l=1}^{\sigma}c_{pi}^{*}c_{qk}c_{qj}^{*}c_{pl}\sum_{t=\max\left[(l_i-l_k),(l_j-l_l)\right]}^{t=\min\left[(l_i+l_k),(l_j+l_l)\right]}(-1)^{|m_k-m_i|}C^{t}(l_im_i,l_km_k)C^{t}(l_jm_j,l_lm_l)$$

$$\times\frac{(n_i+n_k+t)!}{(\xi_i+\xi_k)^{n_i+n_k+t+1}}\left[\gamma_1(n_j+n_l-t,R,\xi_j+\xi_l)-\sum_{u=0}^{n_i+n_k+t}\frac{(\xi_i+\xi_k)^{u}}{u!}\gamma_1(n_j+n_l+u-t,R,\xi_T)\right]+$$

$$+\sum_{u_1=0}^{n_i+n_k-t-1}\frac{(n_i+n_k-t-1)!}{u_1!(\xi_i+\xi_k)^{n_i+n_k-t-u_1}}\left[\gamma_1(n_j+n_l+t+u_1+1,R,\xi_T)-\right.$$

$$\left.-R^{u_1}e^{-(\xi_i+\xi_k)R}\gamma_1(n_j+n_l+t+1,R,\xi_j+\xi_l)\right. \qquad (4.23)$$

elde edilir. Burada γ incomplate gama fonksiyonu, $\xi_T=\xi_i+\xi_k+\xi_j+\xi_l$ dır(Arfken,1985).

Sistemin toplam enerjisi Denk.(4.13), (4,20) ve (4.23) den

$$E=2\sum_{p=1}^{N/2}h_p+\sum_{pq}^{N/2}(2J_{pq}-K_{pq}) \qquad (4.24)$$

elde edilir.

5. HESAPLAMA SONUÇLARI VE TARTIŞMALAR

5.1. Giriş

Hesaplamalarımızda sonsuz küresel çok elektronlu GaAs kuantum yapısı ele alındı. Bu yapının merkezinde farklı safsızlık yükü bulunması durumuna göre taban durum enerjileri incelendi. GaAs yapısı için etkin Bohr yarıçapı $a^* = 100\,\dot{A}$, etkin Rydberg enerjisi Ry=5.72 meV ve etkin kütle $m_{GaAs}=0.0665m_0$ alındı. Bu yapının taban durum enerjileri ve dalga fonksiyonları KGA yöntemi ile belirlendi. Taban durum için dalga fonksiyonu tek elektron spinorbitallerinden oluşan single Slater determinantı olarak alınmıştır. Tek elektron spinorbitalleri STO lerin lineer kombinasyonu şeklinde oluşturuldu. Ortonormallik şartını sağlayabilmek için aynı tip atomik orbitallerinorbital üstelleri aynı atomik orbitallerden oluşturuldu. Yani *s* tipi atomik orbitaller *s*' lerden ve *p* tipi atomik orbitaller p'lerden oluşturuldu. Hesaplamalarımızda 2, 3 ve 4 elektronlu KN yapılar göz önüne alındı. Her bir yapının merkezinde safsızlık yükü elektron sayısından başlayarak sıfıra kadar azaltılarak her bir durum için taban durum enerjileri ve bağlanma enerjileri hesaplandı. İki elektronlu sistemin merkezi safsızlık yükü (Z=0,1,2), üç elektronlu bir sistemin (Z=0,1,2,3) ve dört elektronlu bir sistemin (Z=0,1,2,3,4) alındı. Her bir durum için taban durum enerjileri nokta yarı çapına göre hesaplandı.

Sınırlandırılmış He atomu için $1s^2(^1S_0)$ singlet durumu Li atumu için $1s^2 2p$ durumu için $(^1P_0)$ singlet durum ve Be atomu için $1s^2 2p^2$ $(^1S_0)$ singlet durum için hesaplamalar yapıldı.

5.2. Merkezinde Safsızlık Yükü Bulunan İki Elektronlu Sistemin Taban Durum Enerjisi

Merkezinde Z=0,1,2 safsızlık yükü bulunan iki elektronlu kuantum nokta yapısının KGA yöntemiyle hesaplanan durum enerjilerinin kuantum nokta yarıçapına göre değerleri Tablo 1'de, grafiği ise Şekil 1' de verilmiştir. Bu grafik ve tablodan görüleceği gibi farklı safsızlık yükleri için kuantum nokta yarıçapı arttığında, seviyelerin enerji değerleri hızla düşerek belli bir sabit değere gittiği ve enerji seviyelerinde birbirine yaklaştığı görülmektedir. İki elektronlu sistemlerde safsızlık yükü Z=2 için nokta yapı sınırlandırılmış *He* olduğundan büyük dot yarıçaplarında sistemin taban durum enerjisini *He* atomunun taban durum enerjisine gittiği

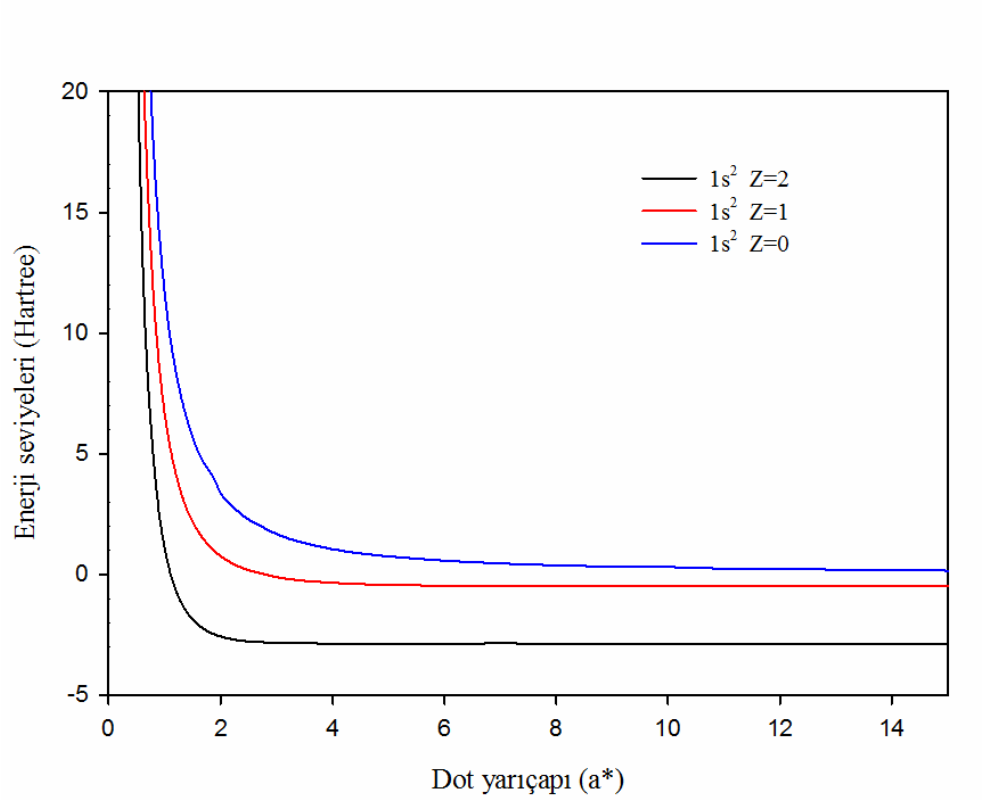
görülmektedir. Aynı şekilde iki elektronlu sistemlerde safsızlık yükü Z=1 alındığında yapı Hidrpjen iyonu (H^-) olacağından dot yarıçapı arttığında taban durum enerjisi Hidrojen iyonunun atomunun taban durum enerjisine gitmektedir.

Çekirdek yükü arttıkça elektronların daha küçük dot yarıçaplarında safsızlığa bağlandığı görülmektedir. Tablo.1 den de görülebileceği gibi safsızlık yükü Z=2 de elektron safsızlığa dot yarıçapı R=1.2 a* değerinde ve Z=1 de R=3 a*değerinde safsızlığa bağlanmıştır. Güçlü sınırlandırma bölgesinde kinetik enerji ve elektron-elektron arası Coulomb etkileşimlerden dolayı enerji pozitif olurken, zayıf sınırlandırma bölgesinde elektron kinetik enerjisi ve elektronlar arası etkileşimler azaldığı için sistemin enerji de azalmaktadır ve negatif değere düşmektedir.

Sistemin enerjisi safsızlık yüküne güçlü bir şekilde bağlıdır. Safsızlık yükünü arttırdığımızda çekici potansiyel artacağından taban durum enerjisi azalmaktadır. Yani sistemin enerjisi daha aşağı seviyelere indiği görülmektedir.

Tablo 5.1. He atomunun farklı safsızlıklar değeri (Z=2,1,0) için hesaplanan taban durumu enerjilerinin bazı nokta yarıçaplarına (R(a*)) karşılık gelen değerleri verilmiştir. Enerji birimi Hartree, nokta yarıçapı etkin Bohr yarıçapı a* cinsindendir.

R(a*)	$1s^2(^1S_0)$ Z=2 Enerjisi(Hartree)	$1s^2(^1S_0)$ Z=1 Enerjisi(Hartree)	$1s^2(^1S_0)$ Z=0 Enerji (Hartree)
0.5	22.8100317	33.4554597	43.0996395
0.6	13.3771661	22.6150745	30.7001556
0.7	7.97873085	15.8640516	22.8725043
0.8	4.76213973	11.5202445	17.6444742
1	1.08306972	6.63932795	11.6487332
1.5	-1.86417503	2.18034588	5.67389367
2	-2.56256701	0.767032631	3.36924983
2.5	-2.76657347	0.180082719	2.28137093
3.5	-2.8516275	-0.255323604	1.30380512
5	-2.86130457	-0.425813953	0.7565897
8.5	-2.8616767	-0.482975329	0.35082988
10	-2.86167455	-0.485679449	0.31316253
15	-2.86167751	-0.487685244	0.16510096
20	-2.86167247	-0.487786665	0.11497801



Şekil 5.1. Merkezide safsızlık yükü Z=0,1,2 (He benzeri) için iki elektronlu bir sistemin taban durum enerjisinin nokta yarıçapına göre değişim grafiği.

5.3. Merkezinde Farklı Safsızlık Yükü Bulunan Üç Elektronlu Sistemin Taban Durum Enerjisi

Merkezinde (Z=3,2,1,0) safsızlık yükü bulunan üç elektronlu sonsuz potansiyelle sınırlandırılmış nokta yapının KGA yöntemiyle taban durum dalga fonksiyonları belirlendi. Bu dalga fonksiyonları ile Hartree-Fock-Roothaan yaklaşımı ile taban durum enerjileri hesaplandı.

Nokta yapının taban durumu enerjilerinin kuantum nokta yarıçapına göre hesaplama değerleri Tablo 1'de, grafiği ise Şekil 1' de verilmiştir. Bu grafik ve tablodan görüldüğü gibi kuantum nokta yarıçapı arttırılırsa, taban durum enerjisi hızla düşer ve belli bir sabit değere gider. Ayrıca dot yarıçapı arttıkça farklı safsızlık yükleri için hesaplanan taban durum enerjileri arasındaki fark azalırken, dot yarıçapı küçülürken bu seviyeler arasındaki fark artmaktadır. Safsızlık yükü artarken bağlanma enerjisinin azaldığı görülmektedir. Safsızlık yükü arttırıldığında safsızlık ile elektronlar arası çekim potansiyel enerjisi Z ile orantılı olduğu için artacaktır.

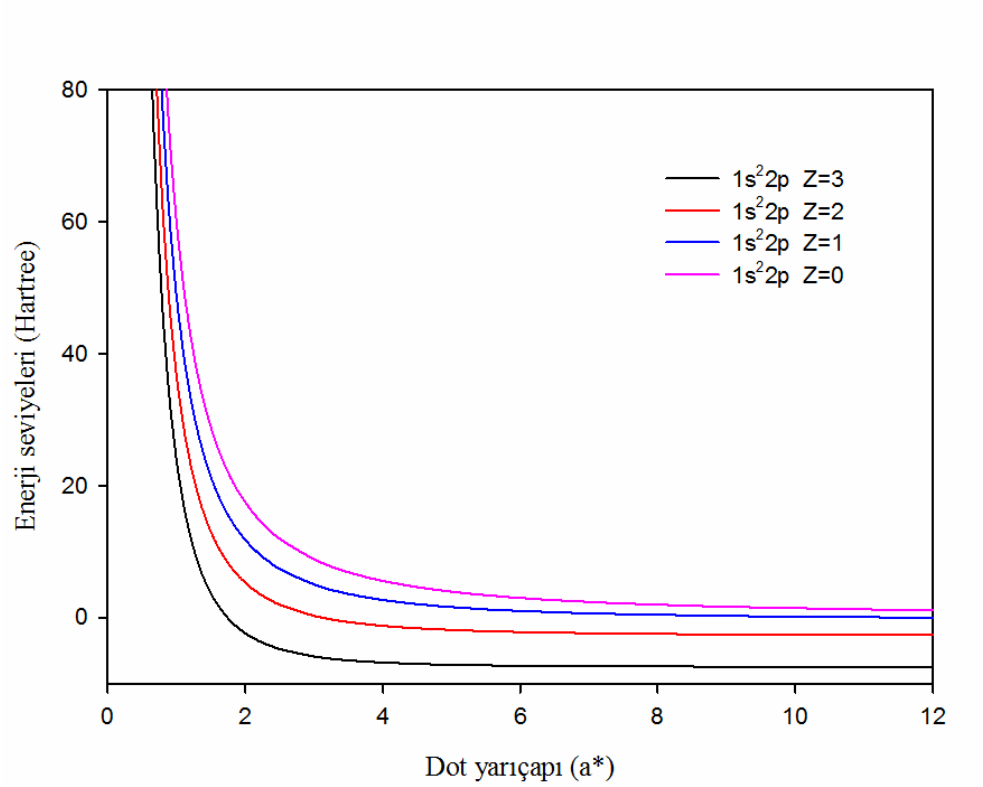
Safsızlık yükü azalırken sistemin taban durum enerjisi arttığı görülmektedir. Safsızlık yükü Z=3 için sistem sınırlandırılmış lityum atomuna benzer. Z=3 için küçük

dot yarıçaplarında sistemin taban durum enerjisi farklı olmasına rağmen büyük dot yarıçaplarında sistemin enerjisi lityum atomunun taban durum nerjisine gittiği görülmektedir. Küçük dot yarıçaplarında yani güçlü sınırlandırma bölgesinde elektronların kinetik enerjisi ve elektronlar arası etkileşim enerjileri arttığı arttığı için lityum atomunda taban durum enerjisi büyük olmaktadır. Büyük dot yarıçaplarında sınırlandırma etkisi fazla görülmektedir. Yani sistem serbest lityum atomu gibi davranır. Aynı şekilde safsızlık yükü Z=2 alındığında yapı He^{-} iyonunun taban durumuna ve Z=1 de H^{-2} olacağından büyük yapılarda Hidrojen atomunun taban durumuna gitmektedir.

Çekirdek yükü azaldıkça daha büyük dot yarıçaplarında elektron safsızlığa bağlanmaktadır. Tablo 2 den de görülebileceği gibi safsızlık yükü Z=3 de elektron safsızlığa dot yarıçapı R=1.8 a* değerinde, Z=2 de R=3.5 a*, Z=1 de R=13 a*değerinde safsızlığa bağlanmıştır.

Tablo 5.2. Üç elektronlu bir sistemin farklı safsızlık yük değeri (Z=3,2,1,0) için hesaplanan taban durumu enerjilerinin bazı nokta yarıçaplarına R(a*) karşılık gelen değerleri verilmiştir. Enerji birimi Hartree, nokta yarıçapı etkin Bohr yarıçapı a* cinsindendir.

R(a*)	$1s^2 2p\ (^2P_0)$ Z=3 Enerjisi(Hartree)	$1s^2 2p\ (^2P_0)$ Z=2 Enerjisi(Hartree)	$1s^2 2p\ (^2P_0)$ Z=1 Enerjisi(Hartree)	$1s^2 2p\ (^2P_0)$ Z=0 Enerji(Hartree)
0.5	149.468203	173.239853	196.368763	218.772357
0.6	96.4242741	116.626605	136.004976	154.699219
0.7	65.4333799	82.973234	99.7059266	115.743876
0.8	45.8422573	61.4034815	76.1567332	90.2459356
1	23.6878548	36.5434314	48.5159796	59.7578931
1.5	3.66769918	12.9857978	21.2773516	28.8022421
2	-2.34027749	5.30449919	11.7864665	17.5048461
2.5	-4.72040419	1.99539162	7.41672056	11.9630533
3.5	-6.4359862	-0.629098747	3.62753637	6.90551804
5	-7.10837363	-1.83664509	1.63057941	3.96597849
8.5	-7.38300051	-2.47323668	0.376193416	1.83031964
10	-7.39841401	-2.56393291	0.18714009	1.4606034
15	-7.42299115	-2.69270208	-0.082283107	0.8514405
20	-7.42731778	-2.73556516	-0.204054165	0.58998494



Şekil 5.2. Üç elektronlu bir sistemin merkezinde safsızlık yükü Z=0,1,2,3 (Li benzeri) için taban durum enerjilerinin nokta yarıçapına göre değişim grafiği.

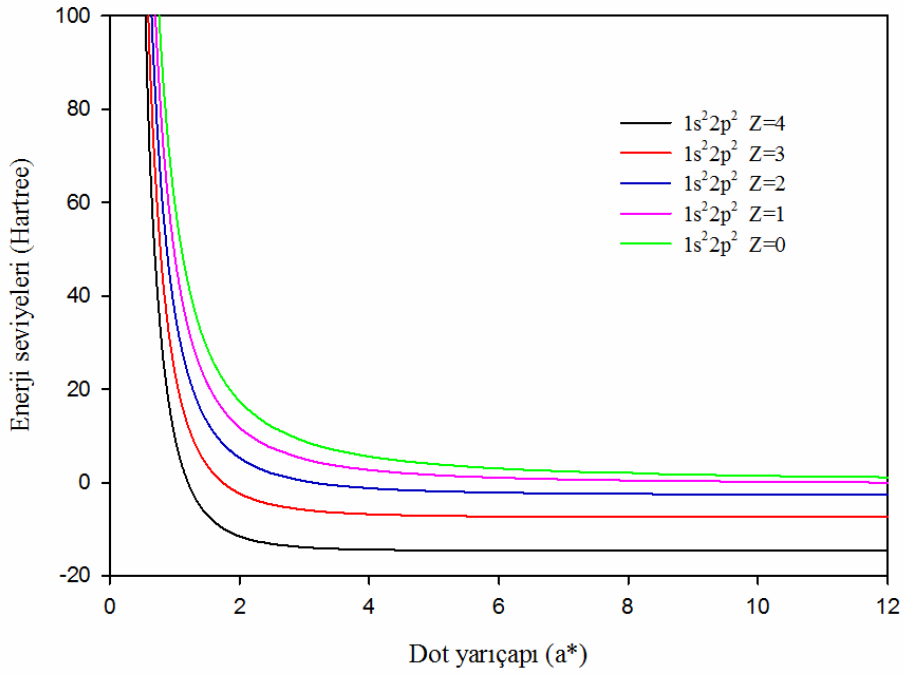
5.4. Merkezinde Farklı Safsızlık Yükü Bulunan Dört Elektronlu Sistemin Taban Durum Enerjisi

Merkezinde (Z=4,3,2,1,0) safsızlık yükü bulunan dört elektronlu sonsuz küresel potansiyelle sınırlandırılmış bir sistemin taban durum dalga fonksiyonu KGA tekniği ile belirlendi. Bu dalga fonksiyonları üzerinden HFR metodu ile nokta yarıçaplarına göre hesaplanan enerji değerleri Tablo 3'de, grafiği ise Şekil 3' de verilmiştir. Bu grafik ve tablodan görüldüğü gibi kuantum nokta yarıçapı arttığında, enerji değerleri düşerek belli bir sabite gidecektir. Safsızlık yükü Z=4 için büyük dot yarıçaplarında *Be* atomunun taban durum enerjisine gittiği görülmektedir. Aynı şekilde safsızlık yükü Z=3 alındığında yapı Li^{-}, Z=2 alındığında He^{-2} ve Z=1 de H^{-3} olacağından büyük yapılarda bu sistemin enerjisi bu yapıların taban durumuna gitmektedir. Çekirdek yükü azaldıkça daha büyük dot yarıçaplarında elektron safsızlığa bağlanabilir. Tablo 2 den de görülebileceği gibi safsızlık yükü Z=4 de elektron safsızlığa dot yarıçapı R=1.3 a* değerinde, Z=3 de R=1.8 a*, Z=2 de R=3.5 a*değerinde ve Z=1 de R=13 a* safsızlığa bağlanmıştır. Güçlü sınırlandırma bölgesinde kinetik enerji ve elektron-elektron arası coulomb etkileşimlerden dolayı enerji pozitif olurken, zayıf sınırlandırma bölgesinde

elektron kinetik enerjisine ve elektronlar arası bu etkileşimler azaldığı için enerji azalmaktadır. Safsızlık yükü azalırken taban durum enerjisi artmaktadır.

Tablo 5.3. Sınırlandırılmış dört elektronlu bir sistemin(Be Benzeri atomunun) farklı safsızlık değerleri(Z=4,3,2,1,0) için hesaplanan taban durumu enerjilerinin bazı nokta yarıçaplarına (R(a*)) karşılık gelen değerleri verilmiştir.Enerji birimi Hartree, nokta yarıçapı etkin Bohr yarıçapı a* cinsindendir.

R(a*)	$1s^2 2p^2 ({}^1S_0)$ Z=4 Enerjisi(Hartree)	$1s^2 2p^2 ({}^1S_0)$ Z=3 Enerjisi(Hartree)	$1s^2 2p^2 ({}^1S_0)$ Z=2 Enerjisi(Hartree)	$1s^2 2p^2 ({}^1S_0)$ Z=1 Enerjisi(Hartree)	$1s^2 2p^2 ({}^1S_0)$ Z=0 Enerji(Hartree)
0.5	124.623184	149.667951	173.179946	196.264437	218.856046
0.6	75.3684175	96.4344246	116.627629	135.956624	155.492878
0.7	46.9590806	65.7360942	82.9614026	99.7590626	115.777754
0.8	29.2832799	45.8324735	61.4168765	76.1591876	90.2254818
1	9.77070915	23.6846966	36.5536152	48.5382446	59.8329891
1.5	-6.93964992	3.67306793	12.9888582	21.283102	28.8033761
2	-11.506122	-2.33765889	5.30970105	11.7887771	17.4499738
2.5	-13.1549893	-4.72046068	1.99603888	7.41584336	11.9630299
3.5	-14.1950165	-6.43740404	-0.619940755	3.6296989	6.91361134
5	-14.5066442	-7.10410685	-1.83520277	1.63021263	3.96941562
8.5	-14.5614204	-7.37946858	-2.47440236	0.376757207	1.83146764
10	-14.5716553	-7.405766	-2.56960784	0.187260751	1.46121702
15	-14.5710744	-7.42495995	-2.69225142	-0.08877272	0.85709206
20	-14.5706912	-7.42195472	-2.74330848	-0.202438041	0.59856933



Şekil 5.3. Dört elektronlu bir sistemin merkezinde safsızlık yükü Z=0,1,2,3,4 (Be benzeri) için taban durum enerjilerinin nokta yarıçapına göre değişim grafiği.

5.5. Bağlanma Enerjisi

Bağlanma enerjisi, aslında en genel haliyle bütün bir sistemi parçalamak için gereken enerjidir. Atomik yapılarda düşünüldüğünde, serbest elektronlara ve bir çekirdeğe parçalanması için verilmesi gereken enerjidir. Bir atom düşünüldüğünde sistemin parçalanmış haldeki enerjisi, bağlı bir sistemin enerjisine oranla çok daha yüksektir. Çalışmamızın bu kısmında atomların safsızlıklarının sıfır $(Z=0)$ olduğu durumlarda yapılan hesaplamalar ile safsızlıkların sıfır olmadığı $(Z\neq 0)$ durumlar için yapılan hesaplamaların farkı alınarak bağlanma enerjileri hesaplanacaktır.

Elektronların safsızlığa bağlanma enerjisi

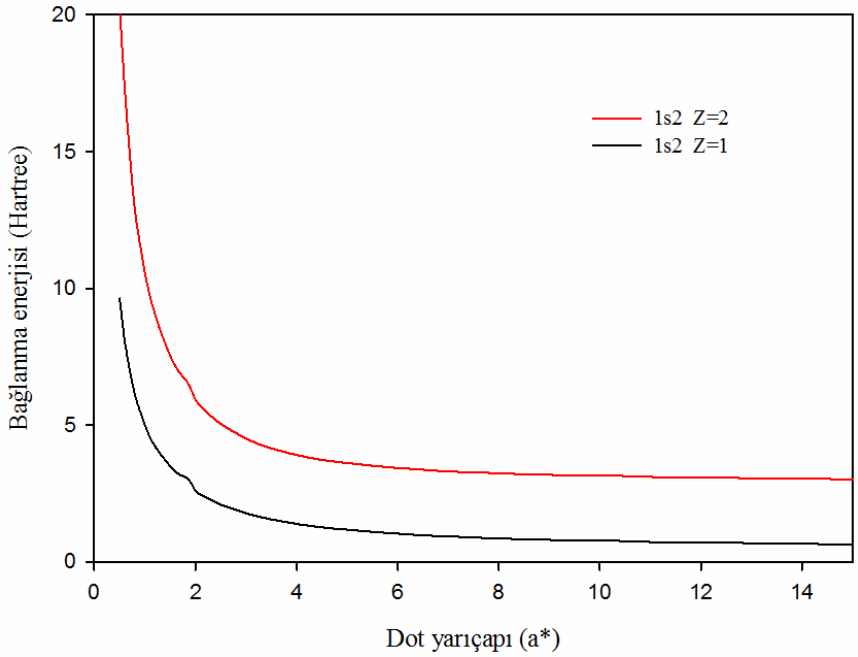
$$E_{BA\breve{G}} = E(Z=0) - E(Z\neq 0) \tag{5.1}$$

ile verilir(Cakir.b, 2008). Burada $E(Z=0)$ çekirdek yükünün olmadığı durumdur. Tablo 4'de sırasıyla iki elektronlu(He benzeri), üç elektronlu(Li) ve dört elektronlu(Be) benzeri yapıların bağlanma enerjileri nokta yarıçaplarına göre verilmiştir.

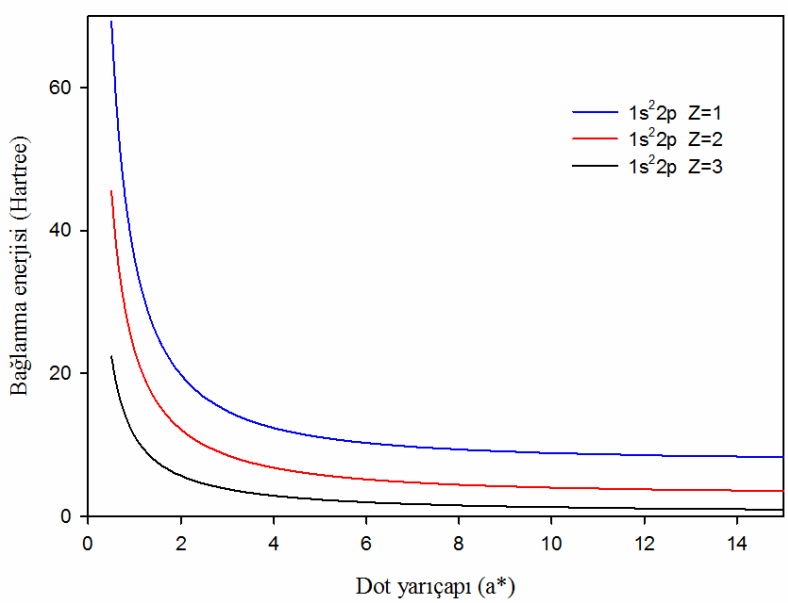
Tablo 5.4. İki elektronlu (He benzeri), üç elektronlu(Li benzeri) ve dört elektronlu(Be benzeri) yapılar içinfarklı safsızlık yük değerlerinde naokta yarıçapına göre hesaplanan bağlanma enerjilerinin değerleri verilmiştir. Enerji birimi Hartree, nokta yarıçapı etkin Bohr yarıçapı a^* cinsindendir.

	R(a^*)	**E(Z=0)-E(Z=1) Enerji(Hartree)**	**E(Z=0)-E(Z=2) Enerji(Hartree)**	**E(Z=0)-E(Z=3) Enerji(Hartree)**	**E(Z=0)-E(Z=4) Enerji(Hartree)**
$1s^2$ (He) Benzeri Safsızlık	0.5	9.6441798	20.2896078		
	0.6	8.0850811	17.3229895		
	0.7	7.0084527	14.89377345		
	0.8	6.1242297	12.88233447		
	1	5.00940525	10.56566348		
	1.5	3.49354779	7.5380687		
	2	2.602217199	5.93181684		
	2.5	2.101288211	5.0479444		
	3.5	1.559128724	4.15543262		
	5	1.182403651	3.617894268		
	8.5	0.833805207	3.212506578		
	10	0.798841981	3.174837082		
	15	0.652786208	3.026778474		
	20	0.602764676	2.976650481		
$1s^22p$ Li Benzeri Safsızlık	0.5	22.403594	45.532504	69.304154	
	0.6	18.694243	38.072614	58.2749449	
	0.7	16.0379494	32.770642	50.3104961	
	0.8	14.0892024	28.8424541	44.4036783	
	1	11.2419135	23.2144617	36.0700383	
	1.5	7.5248905	15.8164443	25.13454292	
	2	5.7183796	12.2003469	19.84512359	
	2.5	4.54633274	9.96766168	16.68345749	
	3.5	3.27798167	7.53461679	13.34150424	
	5	2.33539908	5.80262358	11.07435212	
	8.5	1.45412622	4.30355632	9.21332015	
	10	1.27346331	4.02453631	8.85901741	
	15	0.93372361	3.54414258	8.27443165	
	20	0.79403911	3.3255501	8.017302722	

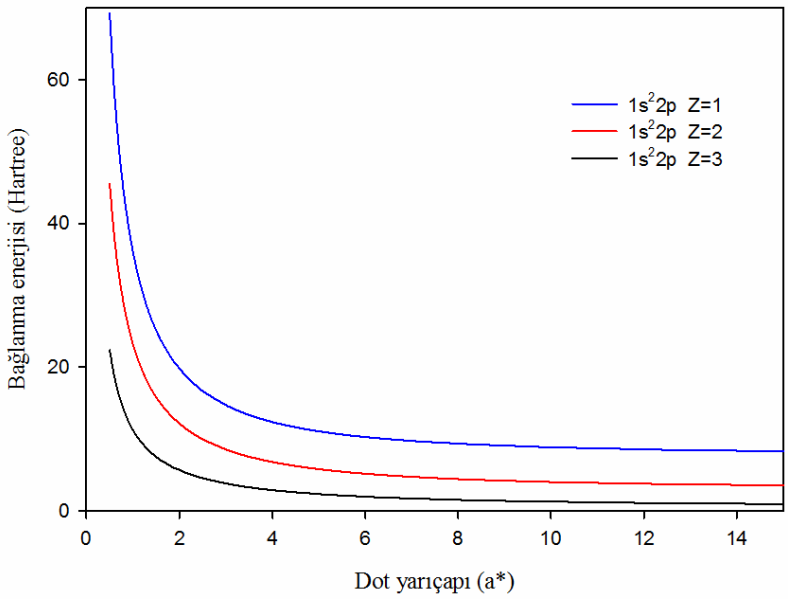
$1s^2 2p^2$ (Be) Benzeri Safsızlık	0.5	22.591609	45.6761	69.188095	94.232862
	0.6	19.536254	38.865249	59.0584534	80.1244605
	0.7	16.0186914	32.8163514	50.0416598	68.8186734
	0.8	14.0662942	28.8086053	44.3930083	60.9422019
	1	11.2947445	23.2793739	36.1482925	50.06228
	1.5	7.5202741	15.8145179	25.1303082	35.743026
	2	5.6611967	12.1402728	19.7876327	28.9560958
	2.5	4.54718654	9.96699102	16.6834906	25.1180192
	3.5	3.28391244	7.5335521	13.3510154	21.1086278
	5	2.33920299	5.80461839	11.0735225	18.4760598
	8.5	1.45471043	4.30587	9.21093622	16.392888
	10	1.27395627	4.03082486	8.86698302	16.0328723
	15	0.94586477	3.54934348	8.28205201	15.4281665
	20	0.80100737	3.34187781	8.02052405	15.1692605



Şekil 5.4. İki elektronlu bir sistemin farklı safsızlık yükleri için (Z=1,2 (He benzeri)) için bağlanma enerjilerinin nokta yarıçapına göre değişim grafiği.



Şekil 5.5. Üç elektronlu bir sistemin farklı safsızlık yükleri için (Z=1,2,3 (Li benzeri)) için bağlanma enerjilerinin nokta yarıçapına göre değişim grafiği



Şekil 5.6. Dört elektronlu bir sistemin farklı safsızlık yükleri için (Z=1,2,3,4 (Be benzeri)) için bağlanma enerjilerinin nokta yarıçapına göre değişim grafiği.

Yukarıda Tablo 5.4 te sırasıyla iki elektronlu (He benzeri), üç elektronlu (Li benzeri) ve dört elektronlu (Be benzeri) yapılar için farklı safsızlık değerlerine karşılık gelen bağlanma enerji değerleri verilmiştir veBu enerji değerlerinin nokta

yapıyarıçapına göre değişim grafiklerisırasıyla şekil 5.5, Şekil 5.6, ve şekil 5.7 de çizilmiştir. Bu verilere göre dot yarıçapı arttıkça bağlanma enerjilerinin düştüğü görülmektedir. Bunun sebebi ise bağlanma enerjisi *Z/r* ile orantılı olmasıdır. Çekirdek yükü (safsızlık yükü) arttıkça bağlanma enerjisi artmaktadır. Güçlü sınırlandırma bölgesinde bağlanma enerjisi büyük iken zayıf sınırlandırma bölgesinde bağlanma enerjisi azalmaktadır. Tablo 5.4'de ve Şekil 5.4-5.5-5.6'da görülebileceği gibi safsuzlık yüküne bağlı olarak çok elektronlu sistemlerin bağlanma enerjileri değişmektedir. Dot yarıçapı arttıkça iki elektronlu yapıda safsızlık yükü Z=2 olduğu zaman bağlanma enerjisi He atomununtaban durum iyonlaşma enerjisine, Z=1 için H^- iyonunun taban durum iyonlaşma enerjisine gittiği gözlenmektedir. Benzer durum üç elektronlu ve dört elektronlu sistem içinde vardır. Üç elektronlu sistemde Z=3 için Li atomun iyonlaşma enerjisi *Z*=2 için He^- iyonunun iyonlaşma enerjisi *Z*=1 için H^{-2} iyonunun iyonlaşma enerjisine gittiği görülmektedir. Aynı şekilde dört elektronlu sistemde de *Z*=4 için Be atomunun taban durumu iyonlaşma enerjisi, Z=3 için Li^- iyonunun iyonlaşma enerjisi, *Z*=2 için He^{-2} iyonuunun taban durum iyonlaşma enerjisini ve *Z*=1 için H atomunun taban durum iyonlaşma enerjisine gittiği görülmektedir.

Sonuç olarak hesaplamalarımızın birinci bölümünde Tablo 5.1, Tablo 5.2 ve Tablo 5.3'de Helyum, Lityum ve Berilyum atomlarının farklı safsızlık değerlerinde enerjileri Hartree cinsinden Kuantum Genetik Algoritma (KGA) yöntemiyle hesaplanmıştır. Elde edilen değerler literatürle uyumlu olup, KGA ve HFR yönteminin böyle sınırlandırılmış sistemlere uygulanabileceğini göstermiştir. Hesaplamalarda kullandığımız yöntemin çok elektronlu sınırlandırılmış sistemlerde iyi sonuç verdiği görülmektedir. Sistemin enerjisi nokta yapının boyutlarına sıkıbir şekilde bağlıdır. Yapının yarıçapı arttırıldığında sistemin enerjisi azalmaktadır.

Çalışmamızda sınırlandırılmış sistemlerin elektronik yapılarının belirlenmesi bu alanda çalışılan deneysel ve teorik çalışmalara ışık tutacak niteliktedir.

Ayrıca bu yapıların safsızlık yüküne bağlı olarak bağlanma enerjileride belirlenmiştir. Bu değerler bize gösteriyorki safsızlık yükü azaldıkça elektronların çekirdeğe bağlanması zorlaşır. Nokta yapının boyutlarının azaltılmasında bağlanma enerjisinde büyük bir etkiye sahip olduğu görülmektedir. Nokta yarıçapı azalırken bağlanma enerjisi azalmaktadır.

KAYNAKLAR

Adachi, S., 1994, GaAs and Related Materials: Bulk semiconducting and superlattice properties, World Scientific, p.

Aquino, N., Flores-Riveros, A. ve Rivas-Silva, J. F., 2003, The compressed helium atom variationally treated via a correlated Hylleraas wave function, *Physics Letters A*, 307 (5-6), 326-336.

Aydin, E. ve Yildirim, R., 2004, Optimizing the performance of single-mode laser diode system using genetic algorithm, *Optics and Lasers in Engineering*, 42 (1), 41-46.

Bardeen, J. ve Brattain, W. H., 1948, The transistora semi conductor tride, *Physical Review*, 230-191, 74.

Baskoutas, S., Paspalakis, E. ve Terzis, A. F., 2006, Effects of excitons in nonlinear optical rectification in semiparabolic quantum dots, *Physical Review B*, 74 (15).

Bastard, G., 1984, Quantum-Size Effects in the Continuum States of Semiconductor Quantum Wells, *Physical Review B*, 30 (6), 3547-3549.

Becke, A. D., 1993, A New Mixing of Hartree-Fock and Local Density-Functional Theories, *Journal of Chemical Physics*, 98 (2), 1372-1377.

Bednarek, S., 1999, The giant magnetostriction in ferromagnetic composites within an elastomer matrix, *Applied Physics a-Materials Science & Processing*, 68 (1), 63-67.

Bednarek, S., Szafran, B. ve Adamowski, J., 2001, Theoretical description of electronic properties of vertical gated quantum dots, *Physical Review B*, 64 (19).

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

Borodulin, K. M., Evenson, K. R., Wen, F., Herring, A. H. ve Benson, A. M., 2008, Physical Activity Patterns during Pregnancy, *Medicine and Science in Sports and Exercise*, 40 (11), 1901-1908.

Bose, C. ve Sarkar, C. K., 1998a, Perturbation calculation of donor states in a spherical quantum dot, *Solid-State Electronics*, 42 (9), 1661-1663.

Bose, C. ve Sarkar, C. K., 1998b, Effect of a parabolic potential on the impurity binding energy in spherical quantum dots, *Physica B*, 253 (3-4), 238-241.

Brownstein, K. R., 1993, Variational Principle for Confined Quantum-Systems, *Physical Review Letters*, 71 (9), 1427-1430.

Bunge, C. F., Barrientos, J. A., Bunge, A. V. ve Cogordan, J. A., 1992, Hartree-Fock and Roothaan-Hartree-Fock Energies for the Ground-States of He through Xe, *Physical Review A*, 46 (7), 3691-3696.

C. Bose, C. K. S., 1998, Effect of a Parabolic Potential On The İmpurity Binding Energy in Spherical Quantum Dots, *Physica B*, 238-241.

C.Bose, C. K. S., 2000, Binding Energy of Impurity States in Spherical GaAs-Ga1xAlxAs Quantum Dots, *Wiley Online Library*.

Cakir, B., 2007, Çok Elektronlu Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi, doktara, *Selçuk Üniversitesi*.

Cakir, B., Ozmen, A., Atav, U., Yuksel, H. ve Yakar, Y., 2008, Calculation of electronic structure of a spherical quantum dot using a combination of quantum genetic algorithm and Hartree-Fock-Roothaan method, *International Journal of Modern Physics C*, 19 (4), 599-609.

Cakir, B., Yakar, Y. ve Ozmen, A., 2012, Refractive index changes and absorption coefficients in a spherical quantum dot with parabolic potential, *Journal of Luminescence*, 132 (10), 2659-2664.

Cakir, B., Yakar, Y. ve Ozmen, A., 2014, Calculation of oscillator strength. and the effects of electric field on energy states, static and dynamic polarizabilities of the confined hydrogen atom, *Optics Communications*, 311, 222-228.

Cakir.b, O. A., Atav.U, Yuksel.H, Yakar.Y, 2007, INVESTIGATION OF ELECTRONIC STRUCTURE OF A QUANTUM DOT USING SLATER-TYPE ORBITALS AND QUANTUM GENETIC ALGORITHM, *International Journal of Modern Physics C*|.

Cakir.b, O. A., Atav.U, Yuksel.H, Yakar.Y., 2008, Calculation of Electronic Structure of a Spherical Quantum Dot Using a Combination of Quantum Genetic Algorithm and Hartree-Fock-Roothaan Method, *Modern Physics C*.

Castro, C. F., Antonio, C. A. C. ve Sousa, L. C., 2004, Optimisation of shape and process parameters in metal forging using genetic algorithms, *Journal of Materials Processing Technology*, 146 (3), 356-364.

Ceperley, D. M., 1978, Ground state of the fermion one-component plasma: A monte carlo study in two and three dimensions, *Physical Rewiev Letters*, 3126-3138, 18.

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

Chaudhury, P. ve Bhattacharyya, S. P., 1998, Numerical solutions of the Schrodinger equation directly or perturbatively by a genetic algorithm: test cases, *Chemical Physics Letters*, 296 (1-2), 51-60.

Cho, A. Y. ve Arthur, J. R., 1975, Molecular beam epitaxy, *Progress in solid state Chemistry*, 157-191, 10.

Choi, B. H., Hwang, S. W., Kim, I. G., Shin, H. C., Kim, Y. ve Kim, E. K., 1998, Fabrication and room-temperature characterization of a silicon self-assembled quantum-dot transistor, *Applied Physics Letters*, 73 (21), 3129-3131.

Cibert, J., Petroff, P. M., Dolan, G. J., Pearton, S. J., Gossard, A. C. ve English, J. H., 1986, Optically Detected Carrier Confinement to One and Zero Dimension in Gaas Quantum-Well Wires and Boxes, *Applied Physics Letters*, 49 (19), 1275-1277.

Coley, D. A., 2001, The Kyoto diet, *New Scientist*, 171 (2303), 52-52.

Connerade, J. P., Gerchikov, L. G., Ipatov, A. N. ve Senturk, S., 2000, Resonance effects in inelastic scattering of low-energy electrons from metallic clusters, *Journal of Physics B-Atomic Molecular and Optical Physics*, 33 (22), 5109-5120.

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

Davies, J. H., 1999, Quantum dots induced by strain from buried and surface stressors, *Applied Physics Letters*, 75 (26), 4142-4144.

Flores-Riveros, A. ve Rodriguez-Contreras, A., 2008, Compression effects in helium-like atoms (Z=1,...,5) constrained by hard spherical walls, *Physics Letters A*, 372 (40), 6175-6182.

Fock, V. Z., 1930, Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems, 126, 61.

Fujito, M., Natori, A. ve Yasunaga, H., 1996, Many-electron ground states in anisotropic parabolic quantum dots, *Physical Review B*, 53 (15), 9952-9958.

Fukui, K., 1952, Molecular Orbital Theory of Orientation in Aromatic, Heteroaromatic, and Other Conjugated Molecules, 33-42.

Gammon, D., 2000, Semiconductor physics - Electrons in artificial atoms, *Nature*, 405 (6789), 899-900.

Goldberg, D. E., 1999, Using time efficiently: Genetic-evolutionary algorithms and the continuation problem, *Gecco-99: Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference*, 212-219.

Grigorenko, A. N., Howells, G. D., Bending, S. J., Bekaert, J., Van Bael, M. J., Van Look, L., Moshchalkov, V. V., Bruynseraede, Y., Borghs, G., Kaya, I. I. ve Stradling, R. A., 2001, Direct imaging of commensurate vortex structures in ordered antidot arrays, *Physical Review B*, 63 (5).

Grigorenko, A. Y. ve Tregubenko, T. V., 2000, Numerical and experimental analysis of natural vibrations of rectangular plates with variable thickness, *International Applied Mechanics*, 36 (2), 268-270.

Grigorenko, I. ve Garcia, M. E., 2000, An evolutionary algorithm to calculate the ground state of a quantum system, *Physica a-Statistical Mechanics and Its Applications*, 284 (1-4), 131-139.

Grigorenko, I. ve Garcia, M. E., 2001, Ground-state wave functions of two-particle systems determined using quantum genetic algorithms, *Physica a-Statistical Mechanics and Its Applications*, 291 (1-4), 439-448.

Grigorenko, I. ve Garcia, M. E., 2002, Calculation of the partition function using quantum genetic algorithms, *Physica a-Statistical Mechanics and Its Applications*, 313 (3-4), 463-470.

H.D., C. ve J., R. C., 1965, Electric Dipole Polarizability of Atoms by the Hartree—Fock Method. I. Theory for Closed- Shell Systems, *The Journal of Chemical Physics*, 34, 43.

Hansen, W., M., H., Kotthaus, J. P., Merkt, U. ve Sikorski, C., 1987, Intersubband Resonance in quasi ane-dimensional inversion channels, *Physical Rewiev Letters*, 2586-2589, 58.

Hartree, D. R., 1928, The Wave Mechanics of an Atom with a Non-Coulomb Central Field., 89-110.

Holland, J., 1975a, Adaption in natural and artificial systems, *Ann Arbor MI: The University of Michigan Press*.

Holland, J. H., 1975b, adaptation in Natural and Arficial Systems, *University of Michigan*.

Homaifar, A., Lai, H. Y. ve Mccormick, E., 1994, System Optimization of Turbofan Engines Using Genetic Algorithms, *Applied Mathematical Modelling*, 18 (2), 72-83.

Huang, J. S. ve Libin, 2008, Dipole-allowed optical absorption in a parabolic quantum dot with two electrons, *Physics Letters A*, 372 (23), 4323-4326.

Hund, F., 1926, Zur Deutung einiger Erscheinungen in den Molekelspektren, *Zeitschrift für Physik*, 36.

Huzinaga, S. ve Arnau, C., 1970, Virtual Orbitals in Hartree-Fock Theory, *Physical Review*, 1285.

Jaskolski, W., 1996, Confined many-electron systems, *Physics Reports-Review Section of Physics Letters*, 271 (1), 1-66.

Judson, R. S., Jaeger, E. P. ve Treasurywala, A. M., 1994, A Genetic Algorithm-Based Method for Docking Flexible Molecules, *Journal of Molecular Structure-Theochem*, 114, 191-206.

Kagawa, T., 1980, Multiconfiguration Relativistic Hartree-Fock-Roothaan Theory for Atomic Systems, *Physical Review A*, 22 (6), 2340-2354.

Karabulut.A, B. G., 2008, Kuantum Fiziği 2, p.

Kariuki, B. M., Serrano-Gonzalez, H., Johnston, R. L. ve Harris, K. D. M., 1997, The application of a genetic algorithm for solving crystal structures from powder diffraction data, *Chemical Physics Letters*, 280 (3-4), 189-195.

Katari, J. E. B., Colvin, V. L. ve Alivisatos, A. P., 1994, X-Ray Photoelectron-Spectroscopy of Cdse Nanocrystals with Applications to Studies of the Nanocrystal Surface, *Journal of Physical Chemistry*, 98 (15), 4109-4117.

Kim, E. S., Oh, C., Lee, S., Lee, B. ve Yun, I., 2001, Modeling and optimization of process parameters for GaAs/AlGaAs multiple quantum well avalanche photodiodes using genetic algorithms, *Microelectronics Journal*, 32 (7), 563-567.

Koppen, T., Franz, D., Schramm, A., Heyn, C., Heitmann, D. ve Kipp, T., 2009, Resonant Raman Transitions into Singlet and Triplet States in InGaAs Quantum Dots Containing Two Electrons, *Physical Review Letters*, 103 (3).

Kouwenhoven, L. ve Marcus, C., 1998, Quantum dots, *Physics World*, 11 (6), 35-39.

Kudla, A., 2004, Application of the genetic algorithms in spectroscopic ellipsometry, *Thin Solid Films*, 455, 804-808.

Kulkarni, A. J., Krishnamurthy, K., Deshmukh, S. P. ve Mishra, R. S., 2004a, Effect of particle size distribution on strength of precipitation-hardened alloys, *Journal of Materials Research*, 19 (9), 2765-2773.

Kulkarni, A. J., Krishnamurthy, K., Deshmukh, S. P. ve Mishra, R. S., 2004b, Microstructural optimization of alloys using a genetic algorithm, *Materials Science and Engineering a-Structural Materials Properties Microstructure and Processing*, 372 (1-2), 213-220.

Landau, L., 1927, Das Dämpfungsproblem in der Wellenmechanik, *Zeitschrift für Physik*, 430-441.

Laughlin, C. ve Chu, S. I., 2009, A highly accurate study of a helium atom under pressure, *Journal of Physics a-Mathematical and Theoretical*, 42 (26).

Lee, I. W., Ahn, S. K., Choi, E. H. ve Lee, S. H., 1998, Urticarial reaction following the inhalation of nicotine in tobacco smoke, *British Journal of Dermatology*, 138 (3), 486-488.

Lelong, P. ve Bastard, G., 1996, Binding energies of excitons and charged excitons in GaAs/Ga(In)As quantum dots, *Solid State Communications*, 98 (9), 819-823.

M.Born, R. O., 1927, Investigation of Electronic Structure of a Quantum Dot Using Slater Type Orbitals and Quantum Genetic Algorithm, *Modern Physics C*, 18.

Maksym, P. A. ve Chakraborty, T., 1990a, Quantum Dots in a Magnetic-Field - Role of Electron-Electron Interactions, *Physical Review Letters*, 65 (1), 108-111.

Maksym, P. A. ve Chakraborty, T., 1990b, Quantum Dots in a Magnetic-Field - Role of Electron-Electron Interactions, *Physical Review Letters*, 65, 108-111.

Marin, J. L. ve Cruz, S. A., 1991, Enclosed Quantum-Systems - Use of the Direct Variational Method, *Journal of Physics B-Atomic Molecular and Optical Physics*, 24 (13), 2899-2907.

Mikhail, I. F. I. ve Ismail, I. M. M., 2010, Hydrogenic impurity in a quantum dot: Comparison between the variational and strong perturbation methods, *Superlattices and Microstructures*, 48 (4), 388-400.

Mitin, V. V., Pipa, V. I. ve Stroscio, M. A., 1999, Contribution of effective mass variation to electro-acoustic phonon interaction in semiconductor nanostructures, *Microelectronic Engineering*, 47 (1-4), 373-375.

Motenegro, N. ve Merchancano, S. T., 1992, Hydrogenic impurities in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots, *Physical Review*, 9780-9783, 46.

Mulliken, R. S., 1927, Electronic States and Band Spectrum Structure in Diatomic Molecules, *Physical Review*, 481, 21.

Murray, C. B. ve Bawendi, M. G., 1993, Synthesis and Physical Characterization of Ii-Vi-Semiconductor Nanocrystallites (Quantum Dots), *Abstracts of Papers of the American Chemical Society*, 205, 136-Phys.

Neumann, J. V., 1927, Mathematische Begründung der Quantenmechanik, *Physikalische Klasse*, 245-272.

Nomoto, K., Ugajin, R., Suzuki, T., Taira, K. ve Hase, I., 1998, Quantum-dot based opto-electronic device, *Ieice Transactions on Electronics*, E81c (1), 8-15.

Ozmen, A., Yakar, Y., Cakir, B. ve Atav, U., 2009, Computation of the oscillator strength and absorption coefficients for the intersubband transitions of the spherical quantum dot, *Optics Communications*, 282 (19), 3999-4004.

Ozmen, A., Cakir, B. ve Yakar, Y., 2013, Electronic structure and relativistic terms of one-electron spherical quantum dot, *Journal of Luminescence*, 137, 259-268.

Pauli, W., 1925, Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren, *W. Z. Physik*, 765, 31.

Petroff, P. M. ve Denbaars, S. P., 1982, MBE and MOCVD Growth And Properties Of Self-Assembling Quantum Dot Arrays İn 3-5 Semiconductor Structures, *Superlattices and Microstructures*, 15-21, 15.

Pfannkuche, D., Gerhardts, R. R., Maksym, P. A. ve Gudmundsson, V., 1993, Theory of Quantum-Dot Helium, *Physica B*, 189 (1-4), 6-15.

Pullan, W. J., 1997, Genetic operators for the atomic cluster problem, *Computer Physics Communications*, 107 (1-3), 137-148.

Reed, M. A., Bate, R. T., Bradshaw, K., Duncan, W. M., Frensley, W. R., Lee, J. W. ve Shih, H. D., 1986, Spatial Quantization in Gaas-Algaas Multiple Quantum Dots, *Journal of Vacuum Science & Technology B*, 4 (1), 358-360.

Reed, M. A., 1993, Quantum Dots, *Scientific American*, 268 (1), 118-123.

Reusch, B. ve Grabert, H., 2003, Unrestricted Hartree-Fock for quantum dots, *Physical Review B*, 68 (4).

Safak, H., Sahin, M. ve Yuksel, O. F., 2002, Analysis of I-V measurements on Ag/p-SnS and Ag/p-SnSe Schottky barriers, *Solid-State Electronics*, 46 (1), 49-52.

Safak, H., Sahin, M., Gulveren, B. ve 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 (6), 775-784.

Saha, R., Chaudhury, P. ve Bhattacharyya, S. P., 2001, Direct solution of Schrodinger equation by genetic algorithm: test cases, *Physics Letters A*, 291 (6), 397-406.

Sahin, M., Tekin, S., Aksoy, F., Vatansev, H., Seker, M., Avunduk, M. C. ve Kartal, A., 2000, The effects of splenic artery ligation in an experimental model of secondary hypersplenism, *Journal of the Royal College of Surgeons of Edinburgh*, 45 (3), 148-152.

Sahin, M. ve Tomak, M., 2002, Self-consistent calculation of semiconductor heterojunctions using quantum genetic algorithm, *International Journal of Modern Physics B*, 16 (26), 3883-3893.

Sahin, M., Atav, U. ve Tomak, M., 2005, Quantum genetic algorithm method in self-consistent electronic structure calculations of a quantum dot with many electrons, *International Journal of Modern Physics C*, 16 (9), 1379-1393.

Sahin, M. ve Tomak, M., 2005, Electronic structure of a many-electron spherical quantum dot with an impurity, *Physical Review B*, 72 (12).

Sahin, M., Nizamoglu, S., Kavruk, A. E. ve Demir, H. V., 2009, Self-consistent computation of electronic and optical properties of a single exciton in a spherical

quantum dot via matrix diagonalization method, *Journal of Applied Physics*, 106 (4).

Sahin.M, 2000, Yarıiletken Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi, *selçuk üniversitesi*.

Sako, T. ve Diercksen, G. H. F., 2003, Confined quantum systems: spectral properties of two-electron quantum dots, *Journal of Physics-Condensed Matter*, 15 (32), 5487-5509.

Samanta, B., 2004a, Artificial neural networks and genetic algorithms for gear fault detection, *Mechanical Systems and Signal Processing*, 18 (5), 1273-1282.

Samanta, B., 2004b, Gear fault detection using artificial neural networks and support vector machines with genetic algorithms, *Mechanical Systems and Signal Processing*, 18 (3), 625-644.

Samanta, B., Al-Balushi, K. R. ve Al-Araimi, S. A., 2004, Bearing fault detection using artificial neural networks and genetic algorithm, *Eurasip Journal on Applied Signal Processing*, 2004 (3), 366-377.

Schrieffer, J. R., 1957, In Semiconductor Surface Physics, Philadelphia, *University of Pennsylvania Press*.

Sen, Z., Oztopal, A. ve Sahin, A. D., 2001, Application of genetic algorithm for determination of Angstrom equation coefficients, *Energy Conversion and Management*, 42 (2), 217-231.

Sigeru, H., 1965, Gaussian- Type Functions for Polyatomic Systems. I, *Published Online*, 1239, 42.

Sim, J. S., Kong, J., Lee, J. D. ve Park, B. G., 2004, Monte Carlo simulation of single-electron nanocrystal memories, *Japanese Journal of Applied Physics Part 1-Regular Papers Short Notes & Review Papers*, 43 (4b), 2041-2045.

Sim, S. K. H., Liu, H. C., Shen, A., Gao, M., Lee, K. F., Buchanan, M., Ohno, Y., Ohno, H. ve Li, E. H., 2001, Effect of barrier width on the performance of quantum well infrared photodetector, *Infrared Physics & Technology*, 42 (3-5), 115-121.

Smith, W., 1873, Soc.Telegr.eng, 2:31.

T.D.Steiner, 2004, Semiconductor Nanostructures for Optoelectronic Applications, p. 422.

Temkin, H., Chu, S. N. G., Panish, M. B. ve Logan, R. A., 1987, Thermal-Stability of Ingaas Inp Quantum-Well Structures Grown by Gas Source Molecular-Beam Epitaxy, *Applied Physics Letters*, 50 (15), 956-958.

Unold, T., Mueller, K., Lienau, C., Elsaesser, T. ve Wieck, A. D., 2005, Optical control of excitons in a pair of quantum dots coupled by the dipole-dipole interaction, *Physical Review Letters*, 94 (13).

Valenti, E. L., Brenes, J., Hernandez, A., Vaswani, A. R., Beltra, L., Vicente, E., Cejuela, M. ve Rejas, D., 2016, Antineoplastic therapy near the end of life: A retrospective analysis of the clinical practice in oncological adult patients, *Annals of Oncology*, 27.

van der Ziel, J. P., R.C., M., Wiegmann, W. ve Nordland, W. A., 1975, Low temperature photoluminescence from quamtum states in very thin GaAs-$Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ multiplayer structures, *Applied Physics Letters*, 463-465, 26.

Varshni, Y. P., 1999, Accurate wavefunctions for hydrogenic donors in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots, *Physics Letters A*, 252 (5), 248-250.

Venugopal, V. ve Narendran, T. T., 1992, A Genetic Algorithm Approach to the Machine-Component Grouping Problem with Multiple Objectives, *Computers & Industrial Engineering*, 22 (4), 469-480.

Wang, L. M., Cheng, S. X., Chen, R. F. ve Chang, J. B., 2010, Absolute Configurations and CD Spectra of Axially Chiral Biphenyls Prepared in a Facile Manner by Crystallization-Induced Configuration Transformation, *Chirality*, 22 (8), 744-753.

Wanschura, M., Kuhlmann, H. C. ve Rath, H. J., 1996a, Three-dimensional instability of axisymmetric buoyant convection in cylinders heated from below, *Journal of Fluid Mechanics*, 326, 399-415.

Wanschura, T., Coley, D. A. ve Migowsky, S., 1996b, Ground-state energy of the +/-j spin glass with dimension greater than three, *Solid State Communications*, 99 (4), 247-248.

Xie, W. F., 2007, Three-electron quantum dots in zero magnetic field, *Communications in Theoretical Physics*, 48 (6), 1115-1118.

Xie.W, 2010, Linear And Nonlinear Optical Absorptions Of aTwo-Electron Quantum Dot, *Physica B.*

Yakar, Y., Ozmen, A., Cakir, B. ve Yuksel, H., 2007, Computation of rotation matrices making lined-up to the local Cartesian coordinates, *Journal of the Chinese Chemical Society*, 54 (5), 1139-1144.

Yakar, Y., Cakir, B. ve Ozmen, A., 2010a, Linear and Nonlinear Optical Properties in Spherical Quantum Dots, *Communications in Theoretical Physics*, 53 (6), 1185-1189.

Yakar, Y., Cakir, B. ve Ozmen, A., 2010b, Calculation of linear and nonlinear optical absorption coefficients of a spherical quantum dot with parabolic potential, *Optics Communications*, 283 (9), 1795-1800.

Yakar, Y., Cakir, B. ve Ozmen, A., 2011, Computation of Ionization and Various Excited State Energies of Helium and Helium-Like Quantum Dots, *International Journal of Quantum Chemistry*, 111 (15), 4139-4149.

Yakar, Y., Cakir, B. ve Ozmen, A., 2013, Computation of relativistic terms in a spherical quantum dot, *Journal of Luminescence*, 134, 778-783.

Yakar, Y., Cakir, B. ve Ozmen, A., 2015a, Electronic structure of two-electron quantum dot with parabolic potential, *Philosophical Magazine*, 95 (3), 311-325.

Yakar, Y., Cakir, B. ve Ozmen, A., 2015b, Linear and nonlinear absorption coefficients of spherical two-electron quantum dot, *Computer Physics Communications*, 188, 88-93.

Yang, X. F. ve Gen, M., 1994, Evolution Program for Bicriteria Transportation Problem, *Computers & Industrial Engineering*, 27 (1-4), 481-484.

Yusa, G. ve Sakaki, H., 1999, InAs quantum dot field effect transistors, *Superlattices and Microstructures*, 25 (1-2), 247-250.

Zacharias, C. R., Lemes, M. R. ve Pino, A. D., 1998, Combining genetic algorithm and simulated annealing: a molecular geometry optimization study, *Theochem-Journal of Molecular Structure*, 430, 29-39.

ÖZGEÇMİŞ

KİŞİSEL BİLGİLER

AdıSoyadı : Seyfullah Semih DOĞAN
Uyruğu : Türkiye Cumhuriyeti
DoğumYeriveTarihi : KONYA 20.08.1989
Telefon : 05070960209
Faks : -
e-mail : ssdseyfullahsemih@gmail.com

EĞİTİM

Derece		Adı, İlçe, İl	BitirmeYılı
Lise	:	**Envar, Karatay, Konya**	**2007**
Üniversite	:	**Selçuk, Selçuklu, Konya**	**2013**
YüksekLisans	:	**Selçuk, Selçuklu, Konya**	**2019**

İŞ DENEYİMLERİ

Yıl	Kurum	Görevi
2012	**Pem Dershanesi**	**Asistan**
2018	**Bşr Obir Eğitim Kursu**	**Öğretmen**

UZMANLIK ALANI

Kuantum Nokta Yapıların Optiksel Özellikleri
Kuantum Nokta Yapıların Teknolojik Uygulamaları

YAYINLAR

Turkish Physical Society 33rd International Physics Congress Bodrum/Turkey September 6.10.2017 Binding Energies of many electron Quantum Dots B.Çakır, Y.Yakar, S.S.Doğan, A.Özmen