

**T.C.  
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**VİRİAL TEOREMİNİN KUANTUM  
NOKTA YAPILARA UYGULANMASI**

**YUSUF ÇANKAYA  
YÜKSEK LİSANS TEZİ  
FİZİK ANABİLİM DALI**

**KONYA, 2008**

**T.C.  
SELÇUK ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**VİRİAL TEOREMİNİN KUANTUM  
NOKTA YAPILARA UYGULANMASI**

**Yusuf ÇANKAYA**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**FİZİK ANABİLİM DALI**

Bu çalışma 29/08/2008 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oybirliği ile  
yüksek lisans tezi olarak kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Ülfet ATAV  
Başkan

Doç. Dr. Ayhan ÖZMEN  
Danışman

Yrd. Doç. Dr. Mustafa KOYUNCU  
Üye

## ÖZET

**Yüksek Lisans Tezi**

### **VİRİAL TEOREMİNİN KUANTUM NOKTA YAPILARA UYGULANMASI**

**Yusuf ÇANKAYA**

**Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü**

**Fizik Anabilim Dalı**

**Danışman: Doç. Dr. Ayhan ÖZMEN**

**2008, 139 Sayfa**

**Jüri: Prof. Dr. Ülfet ATAV**

**Doç. Dr. Ayhan ÖZMEN**

**Yrd. Doç. Dr. Mustafa KOYUNCU**

Bu tez çalışmasında, kuantum nokta yapılarda virial teoreminin uygulamaları yapıldı. Sonsuz ve sonlu küresel potansiyel engeli ile sınırlandırılmış merkezlerinde hidrojen benzeri safsızlık bulunan tek elektronlu kuantum nokta yapılar olmak üzere iki farklı sistem ele alındı. Bu sistemlerin taban ve bazı uyarılmış durumlarında dalga fonksiyonları ve özdeğer enerjileri Kuantum Genetik Algoritma (KGA) ve Hartree-Fock Roothaan (HFR) yöntemlerinin birleşimiyle belirlendi. Her iki sistemde taban ve bazı uyarılmış durumlarda virial katsayıları, kuantum nokta yarıçapına ve sınırlandırıcı potansiyelin derinliğine bağlı olarak hesaplandı. Hesaplanan virial katsayılarının kuantum nokta yapı yarıçapına ve sınırlandırıcı potansiyele göre çizilen eğrilerine fit yöntemiyle denklemler uyduruldu.

**Anahtar Kelimeler:** Virial teorem, Kuantum nokta yapı, Safsızlık, Kuantum genetik algoritma.

## **ABSTRACT**

**Ms Thesis**

### **APPLICATION OF VIRIAL THEOREM TO QUANTUM DOTS**

**Yusuf ÇANKAYA**

**Selçuk University Graduate School of Natural and Applied Sciences**

**Department of Physics**

**Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN**

**2008, 139 Pages**

**Jury: Prof. Dr. Ülfet ATAV**

**Assoc. Prof. Dr. Ayhan ÖZMEN**

**Asst. Prof. Dr. Mustafa KOYUNCU**

In this thesis, the applications of virial theorem to quantum dot structures have been done. Two different quantum dots with one-electron, confined with infinite and finite depth spherical potential and with on-center hydrogenic impurity are considered in calculations. For these systems, eigenvalues and eigenvectors of ground and some excited states are determined by using a combination of the Quantum Genetic Algorithm (KGA) and Hartree-Fock Roothaan (HFR) methods. For these two systems, virial coefficients in ground and some excited states are calculated with respect to quantum dot radius and confining potential depth. The equations are obtained by fitting method to curve which was drawn based on dot radius and confining potential of calculated virial coefficients.

**Key Words:** Virial theorem, Quantum dot, Impurity, Quantum genetic algorithm.

## ÖNSÖZ

Yüksek lisans tezi olarak sunulan bu çalışmada, virial teoreminin kuantum nokta yapılarıdaki uygulamaları yapılmıştır.

Virial teoremi, karmaşık sistemlerin enerjileri arasındaki ilişkiler hakkında bilgi verir. Bu sayede sistem içerisinde yapılan hesaplamaların kontrolünde bize yardımcı olur. Virial teoreminin kullanımı ile istatistiksel mekanikte, eşbölüşüm teoreminde, astrofizikle ilgili iç sıcaklık, kütle, yıldızların yarıçapı ve yıldızların kararlılık durumları ile ilgili bilgiler elde etmede, ortalama toplam kinetik enerji ile alakalı sistemin sıcaklık hesaplamaları gibi çok karmaşık hesaplamalarda kolaylık sağlanmıştır.

Teknolojideki son gelişmeler özellikle nano yapıların geliştirilmesine imkan sağlamış, bu yapıların istenilen fiziksel özellikte üretilmesi, araştırmaların bu yönde artmasına neden olmuştur. Bu sayede kuantum mekaniği ile ilgili çalışmaların çoğu nano yapılar kullanılarak test edilebilmektedir.

Bu çalışma, virial teoreminin kullanımı; özellikle kuantum nokta yapıların oluşumu, elektronik özelliklerinin anlaşılması ile ilgili olarak, gelecekte yapılacak çalışmalara ışık tutacaktır.

Bu çalışma süresince benden yardımlarını esirgemeyen ve bilgi birikimini paylaşan danışman hocam Sayın Doç. Dr. Ayhan ÖZMEN'e ve çalışmamla ilgili her konuda yardımlarını esirgemeyen Sayın Dr. Bekir ÇAKIR'a teşekkürlerimi sunarım.

Yine bu çalışmamın hazırlanması sırasında desteğini esirgemeyen eşime en içten şükranlarımı sunarım.

Yusuf ÇANKAYA  
Temmuz 2008, Konya

## İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	ii
ÖNSÖZ.....	iii
İÇİNDEKİLER.....	iv
<b>1. GİRİŞ.....</b>	<b>1</b>
<b>2. KLASİK MEKANİKSEL VİRİAL TEOREMİ.....</b>	<b>5</b>
2.1. Skaler Moment İfadesi ( I ) ve Virial Teoremin Elde Edilmesi.....	5
2.2. Virial Teoremi, Basınç ve İdeal Gaz İlişkisi.....	9
2.3. Atomik Sınırlarda Etkileşme Potansiyelleri ve Yüzey Basıncı.....	11
<b>3. KUANTUM MEKANİKSEL VİRİAL TEOREMİ.....</b>	<b>13</b>
3.1. Hipervirial Teoremi.....	13
3.2. Kuantum Virial Teoremi.....	14
3.3. Homojen Fonksiyonlar ve Euler Teoremi.....	15
<b>4. KUANTUM NOKTA YAPILAR.....</b>	<b>17</b>
4.1. Kuantum Nokta Yapıların Üretilmesi.....	17
4.2. Kuantum Nokta Yapılarda Safsızlığın Oluşturulması.....	20
4.3. Kuantum Nokta Yapılar için Teorik İfadeler.....	22
4.3.1. Etkin Kütle Yaklaşımı.....	22
4.3.2. Küresel Kuantum Nokta Yapılarda Sınır Şartları.....	23
4.3.3. Küresel Kuantum Nokta Yapının Elektronik Gösterimi.....	24
4.3.4. Sonsuz Potansiyelli Küresel Kuantum Nokta Yapı için Fiziksel İfadeler..	25
4.3.5. Sonlu Potansiyelli Küresel Kuantum Nokta Yapı için Fiziksel İfadeler...	30
<b>5. KÜRESEL KUANTUM NOKTA YAPILARDA SAYISAL ÇÖZÜMLER...33</b>	<b>33</b>
5.1. Kuantum Genetik Algoritma (KGA).....	34
5.2. Sonsuz Küresel Kuantum Nokta Yapı için Sayısal Çözümler.....	36
5.3. Sonlu Küresel Kuantum Nokta Yapı için Sayısal Çözümler.....	39
<b>6. HESAPLAMALAR, SONUÇ VE TARTIŞMA.....</b>	<b>44</b>
6.1. Sonsuz Küresel Kuantum Nokta Yapıda Hesaplamalar.....	45
6.2. Sonlu Küresel Kuantum Nokta Yapıda Hesaplamalar.....	49
6.2.1. Sabit Potansiyel, Farklı Yarıçap Değerleri için Hesaplamalar.....	50
6.2.2. Farklı Potansiyel, Farklı Yarıçap Değerleri için Hesaplamalar.....	53

6.2.3. Sabit Yarıçap, Farklı Potansiyel Değerleri için Hesaplamalar.....	59
6.3. Sonuç ve Tartışma.....	69
<b>KAYNAKLAR.....</b>	<b>72</b>
<b>EK-1. Sonsuz Küresel Kuantum Nokta Yapının Enerji Beklenen Değerlerini</b> Hesaplayan Fortran Programı.....	<b>79</b>
<b>EK-2. Sonsuz Küresel Kuantum Nokta Yapının Virial Katsayılarını Hesaplayan</b> Fortran Programı.....	<b>94</b>
<b>EK-3. Sonlu Küresel Kuantum Nokta Yapının Enerji Beklenen Değerlerini</b> Hesaplayan Fortran Programı.....	<b>104</b>
<b>EK-4. Sonlu Küresel Kuantum Nokta Yapının Virial Katsayılarını</b> Hesaplayan Fortran Programı.....	<b>126</b>

## 1. GİRİŞ

Virial, Latince güç manasındaki *vires* kelime kökünden gelmektedir. Klasik mekaniğe göre virial teoremi ile ilgili çalışmalar çok eski yıllara dayanmaktadır. Termodinamiğin kurucularından Rudolph Julius Emmanuel Clausius (1822–1888) klasik olarak virial teoremi bize anlatan ilk bilim adamlarının başında gelmektedir.

R.J.E.Clausius' a göre virial teoremi, sınırlı bir sistemin (tüm parçacıklarının, hızlarının ve konum vektörlerinin sonlu kaldığı sistem) kinetik enerjisinin zamana göre ortalamasını ifade eder. Clausius, bir sistemin ortalama kinetik enerjisinin, o sistemdeki her bir parçacığa etki eden kuvvet ile o parçacığın yer vektörünün skaler çarpımının toplamının  $-1/2$  katına eşit olduğunu ifade etmiştir. Burada kuvvetten potansiyel enerji türetilir. Böylece Clausius (1870) tarafından virial teoreminin teknik tanımı yapılmış oldu. Ayrıca Lord Rayleigh (1905) virial teoreminin gaz basıncı üzerine genelleştirilmesini yaparak yayımladı.

Virial teoremi, sistemin ortalama toplam kinetik ve potansiyel enerjileri arasında bir eşitlik oluşturur. Burada toplam kinetik enerji, tek parçacığın kinetik enerjisine göre önemli nicelikleri içerdiği için daha karmaşıktır. Bu bakımdan virial teoremi bize karmaşık sistemler ve bu sistemlerin oluşumu sırasında ortaya çıkan enerji değişimlerini anlatmaktadır. Henri Poincaré'nin (1911) virial teoremini kozmolojik kararlılığı belirleme problemine uygulaması, Fritz Zwicky'nin (1933) karanlık cisim keşfi, Ledoux'un (1945) virial teoreminin varyasyon formunu geliştirmesi, Parker'ın (1954) virial teoreminin tensor formunu geliştirmesi, virial teoreminin ilk kullanımı olarak sayılabilir. Ayrıca virial teoremi, istatistiksel mekanikte, eşbölüşüm teoreminde, ortalama toplam kinetik enerji ile ilgili sistemin sıcaklık hesaplamaları gibi çok karmaşık hesaplamalarda, astrofizikle ilgili olarakta iç sıcaklık, kütle, yıldızların yarıçapı ve yıldızların kararlılık durumları ile ilgili bilgiler elde etmede kolaylık sağlamıştır. Olağan dışı meydana gelen yıldız ışıma enerjileri ve büzüşme ya da soğumadan daha ziyade ısınma ile ilgili durumlar için virial teoremi daha basit ve makul olarak türetilmiş ve kullanılmaktadır. Ayrıca sıcaklıktan bağımsız ve termal dengede olmayan sistemler için de fikir vermiştir.



Aynı atomların ayırık halde iken ve molekül oluştururken sahip oldukları potansiyel ve kinetik enerji oranları ilgi çekicidir. Atom ve moleküllere ait hesaplamaların doğruluğunun kontrolünde, bazı hesaplamaların kolayca yapılması gibi birçok alanda bize yardımcı olacak bir teoremdir.

Teknolojideki son gelişmeler, nanometre ölçekli iki boyutlu (kuantum kuyuları), tek boyutlu (kuantum telleri) ve hatta sıfır boyutlu (kuantum noktaları) kuantum mekaniksel sistemlerin üretilmesini mümkün hale getirmiştir. Bu tür sistemlerin ilginç fiziksel özelliklerinin olması, deneysel ve teorik olarak bilim adamlarına geniş bir ufuk açması bakımından büyük ilgi toplamıştır (Kastner 1993, Chemla 1993, Reed 1993, Johnson 1995, McEuen 1997, Corcoran ve Zorpette 1997, Gammon 2000, Bukowski ve Simmons 2002).

Elektronların serbest hareketinin tüm boyutlarda sınırlandırılması, kuantum noktaları olarak adlandırılan nano yapıların ortaya çıkmasına yol açmıştır. İlk kuantum nokta yapı Reed ve ark. (1986) tarafından 250 nm kenar uzunluğuna sahip kare biçiminde bir geometriye sahip olarak üretilmiştir. Daha sonra üretilen kuantum noktaların boyutları 30–45 nm'ye kadar düşürülmüştür (Cibert ve ark. 1986, Temkin ve ark. 1987). Teknolojideki bu hızlı gelişmeler daha sonraları çok değişik geometrilere (küresel, piramit, kübik, elipsoidal, vb.) sahip kuantum nokta yapıların üretimine imkan sağlamıştır (Bimberg ve ark. 1999).

Üç boyutta güçlü sınırlandırmalar sonrasında ortaya çıkan kuantum nokta yapıları, kesikli enerji seviyelerine ve kabuk yapılarına sahip olduklarından dolayı yapay atom olarak da adlandırılırlar (Maksym ve Chakraborty 1990, Fujito ve ark. 1996). Üretilme aşamasında bu yapıların şekilleri, boyutları, enerji seviyeleri ve sınırlandırdıkları elektron sayıları kontrol edilebilir olduğundan teknolojik olarak daha ilgi çekicidir. Kuantum nokta yapıları kullanılarak kızıl ötesi fotodedektörler (QDIP), tek elektron transistörleri, hafıza elemanları ve kuantum bilgisayarları gibi cihazlar geliştirilmeye başlanmıştır (Ryzhii 1996, Nomoto ve ark. 1998, Choi ve ark. 1998, Yusa ve Sakaki 1999, Gammon 2000, Sim ve ark. 2004).

Yarıiletken malzemenin kristal örgüsü içerisine bir safsızlığın doğrudan yerleştirilmesi, bu malzemenin elektronik özelliklerinin kontrol edilmesinde ve geliştirilmesinde önemli teknolojik avantajlar sağlar. Eğer kristal örgü içerisine yerleştirilen bir atom, komşu atomlarla kimyasal bağ yapmak için gerekenden daha

fazla elektrona sahipse, bu fazlalık elektronlar kolayca iyonize olur ve kristale geçer. Böyle elektron vermeye yatkın atomlar donör diye adlandırılır. Eğer safsızlık atomlarının bağ oluşturacak yeterli elektronu yoksa kristal örgü içerisinde yakın bir bağdan elektron alabilir. Sonuç olarak valans bandında boş bir durum oluşur. Bu tip elektron almaya yatkın atomlar ise akseptör olarak bilinir (Harrison 1999).

Kuantum nokta yapıların fiziksel özelliklerini inceleyen çok sayıda teorik ve deneysel çalışma yapılmıştır. Değişik hesaplama yöntemleri ve dalga fonksiyonları bu çalışmalarda kullanılmıştır. Bu yöntemlerden en bilineni Varyasyon yöntemidir. Bastard (1984), hidrojenik safsızlığın bağlanma enerjisini Varyasyonel yöntemle hesaplamıştır. Marin ve Cruz (1991) aynı metodla sonsuz küresel kuyuda sınırlandırılmış hidrojen atomu ve harmonik salıncı gibi sistemlerin Schrödinger denklemlerine karşılık gelen çözümlerini bularak enerji seviyelerini belirlemiştir. Szafran ve ark. (1999) Slater Tipi Orbitaleri kullanarak iki üç elektronlu kuantum nokta yapısının elektronik özelliklerini inceledi. Jaskolski (1996), Connerade ve ark. (2000), Reusch ve Grabert (2003), Hartree-Fock yöntemini kullanarak, kuantum nokta yapıların fiziksel özelliklerini inceledi.

Son yıllarda nano yapıların fiziksel özelliklerinin incelenmesinde, bir en iyileme yöntemi olan Kuantum Genetik Algoritma (KGA) yöntemi kullanılmaktadır. Kuantum Genetik Algoritma, Genetik Algoritma yönteminin kuantum yapılara uyarlanmış şeklidir. Genetik Algoritma yöntemini ilk kez Holland (1975) kullanmıştır. Bu yöntem varyasyon yönteminde olduğu gibi enerji minimizasyon ilkesine dayanır. Son yıllarda özellikle kuantum mekanik sistemlerin elektronik yapılarının belirlenmesinde kullanılmaktadır (Nakanishi ve Sugawara 2000, Saha ve ark. 2001, Şahin ve Tomak 2005, Şafak ve ark. 2003, Çakır ve ark. 2007, 2008).

Bu tez çalışmasında küresel kuantum nokta yapılarda virial teoreminin uygulamaları yapıldı. Bunun için sonsuz ve sonlu derinlikte küresel potansiyel ile sınırlandırılmış merkezinde safsızlık bulunan iki ayrı kuantum nokta yapının virial katsayıları kuantum nokta yarıçaplarının ve sınırlandırıcı potansiyelin bir fonksiyonu olarak hesaplandı. Hesaplamalar, bir çeşit minimizasyon metodu olan KGA ve HFR yönteminin birleştirilmesiyle oluşturulan programlar (Çakır 2007(doktora tezi)) kullanılarak yapıldı. Hesaplanan virial katsayıları ile kuantum nokta yapının yarıçapına ve sınırlandırıcı potansiyele göre çizilen eğrilere uyan denklemler fit

yöntemiyle belirlendi. Elde edilen sonuçlar yorumlanarak kuantum nokta yapılarda çeşitli durumlarda virial katsayıları hakkında bilgi sahibi olundu. Bu çalışma ile ileride yapılacak çalışmalara ışık tutulmaktadır.

## 2. KLASİK MEKANİKSEL VİRİAL TEOREMİ

Mekanik içerisinde virial teoreminin, ortalama kinetik enerji  $\langle T \rangle$  ve ortalama potansiyel enerji  $\langle V \rangle$  niceliklerini içine alacak şekilde matematiksel ifadesi;

$$2 \langle T \rangle = - \sum_{k=1}^N (\vec{F}_k \cdot \vec{r}_k) \quad (2.1)$$

şeklinde yazılır (Clausius 1870) .

$\vec{F}_k$ , k. parçacığa uygulanan kuvveti,  $\vec{r}_k$ , bu parçacığın konumunu ifade eder. Buradaki kuvvetten potansiyel türetilir.

Eğer sistemde iki parçacık arasındaki kuvvetin  $V(r) = \alpha r^n$  gibi parçacıklar arası uzaklık r ile orantılı basit bir potansiyel ifadesinden oluştuğunu kabul edersek virial ifademiz aşağıdaki gibi yazılır.

$$2 \langle T \rangle = n \langle V_{Top} \rangle \quad (2.2)$$

Böylece iki ortalama toplam kinetik enerji, n tane ortalama toplam potansiyel enerjiye eşit olacaktır.  $V(r)$ , iki parçacık arasındaki potansiyel enerjiyi,  $V_{Top}$ , sistemin içindeki parçacık çiftlerinin arasındaki  $V(r)$  potansiyellerinin toplamını ifade eder.

Bilinen bir örnek olarak yerçekimi kuvveti etkisinde bir sistemde  $n = -1$  olacaktır ve virial teoremi bu sistem için,

$$2 \langle T \rangle = - \langle V_{Top} \rangle \quad (2.3)$$

şeklinde yazılabilir.

Şimdi klasik mekanikte virial teoreminin elde edilmesini görelim.

### 2.1. Skaler Moment İfadesi ( I ) ve Virial Teoreminin Elde Edilmesi

N parçacıklı bir sistem içinde, k. parçacığın kütlesi  $m_k$  ve konumu  $\vec{r}_k$  olmak üzere, I, skaler moment ifadesi,

$$I = \sum_{k=1}^N m_k \vec{r}_k^2 \quad (2.4)$$

biçiminde tanımlanır.  $I$ , skaler moment ifadesinin zamana göre türevini alarak elde edeceğimiz,  $G$  ifadesini tanımlayalım.

$$G = \sum_{k=1}^N \vec{p}_k \cdot \vec{r}_k \quad (2.5)$$

Burada  $\vec{p}_k$ ,  $k$ . parçacığın momentum vektörüdür. Şimdi  $I$ , skaler moment ifadesinden  $G$  ifadesini nasıl elde ettiğimizi görelim.

$$\begin{aligned} G &= \frac{1}{2} \frac{dI}{dt} \\ G &= \sum_{k=1}^N m_k \frac{d\vec{r}_k}{dt} \cdot \vec{r}_k \\ G &= \sum_{k=1}^N \vec{p}_k \cdot \vec{r}_k \end{aligned} \quad (2.6)$$

Şimdi de  $G$  ifademizin zamana göre türevini alalım.

$$\frac{dG}{dt} = \sum_{k=1}^N \vec{p}_k \cdot \frac{d\vec{r}_k}{dt} + \sum_{k=1}^N \frac{d\vec{p}_k}{dt} \cdot \vec{r}_k \quad (2.7)$$

$$\frac{dG}{dt} = \sum_{k=1}^N m_k \frac{d\vec{r}_k}{dt} \cdot \frac{d\vec{r}_k}{dt} + \sum_{k=1}^N \vec{F}_k \cdot \vec{r}_k \quad (2.8)$$

veya daha basit ifadeyle,

$$\frac{dG}{dt} = 2T + \sum_{k=1}^N \vec{F}_k \cdot \vec{r}_k \quad (2.9)$$

Burada  $\vec{F}_k$ ,  $m_k$  kütleli  $k$ . parçacığa uygulanan net kuvvet,  $T$  ise sistemin toplam kinetik enerjisidir.

$$T = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N m_k \vec{v}_k^2 = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N m_k \frac{d\vec{r}_k}{dt} \cdot \frac{d\vec{r}_k}{dt} \quad (2.10)$$

Şimdi de parçacıklar arasındaki etkileşim kuvvetiyle oluşan potansiyeli de düşünelim.

Toplam kuvvet  $\vec{F}_k$ ,  $k$ . parçacığa diğer parçacıkların uyguladıkları kuvvet,  $\vec{F}_{jk}$ ,  $j$ . parçacığın  $k$ . parçacığın üzerine uyguladığı kuvvet olmak üzere,

$$\vec{F}_k = \sum_{j=1}^N \vec{F}_{jk} \quad (2.11)$$

Kuvvet ifademizi türetirsek,

$$\sum_{k=1}^N \vec{F}_k \cdot \vec{r}_k = \sum_{k=1}^N \sum_{j=1}^N \vec{F}_{jk} \cdot \vec{r}_k \quad (\vec{F}_{jk} = 0, j = k) \quad (2.12)$$

$$\sum_{k=1}^N \vec{F}_k \cdot \vec{r}_k = \sum_{k=1}^N \sum_{j < k} \vec{F}_{jk} \cdot \vec{r}_k + \sum_{j > k} \vec{F}_{jk} \cdot \vec{r}_k \quad (2.13)$$

Newton'un 3. hareket kanununu ( $\vec{F}_{jk} = -\vec{F}_{kj}$ ) burada düşünecek olursak,

$$\sum_{k=1}^N \vec{F}_k \cdot \vec{r}_k = \sum_{k=1}^N \sum_{j < k} \vec{F}_{jk} \cdot (\vec{r}_k - \vec{r}_j) \quad (2.14)$$

şeklini alır.

Aralarında  $r_{jk}$  mesafesi bulunan j. ve k. nokta parçacıkları arasında oluşan V potansiyelinden kuvveti türetebiliriz. Potansiyel enerjinin gradyenti bize kuvveti verir.

$$\vec{F}_{jk} = -\vec{\nabla}_{r_k} V$$

$$\vec{F}_{jk} = -\frac{dV}{dr} \left( \frac{\vec{r}_k - \vec{r}_j}{r_{jk}} \right) \quad (2.15)$$

Bu son ifadeyi (2.14)'te yerine koyalım.

$$\sum_{k=1}^N \vec{F}_k \cdot \vec{r}_k = \sum_{k=1}^N \sum_{j < k} \vec{F}_{jk} \cdot (\vec{r}_k - \vec{r}_j) = -\sum_{k=1}^N \sum_{j < k} \frac{dV}{dr} \frac{(\vec{r}_k - \vec{r}_j)^2}{r_{jk}} = -\sum_{k=1}^N \sum_{j < k} \frac{dV}{dr} r_{jk} \quad (2.16)$$

Böylece G ifadesinin türevi aşağıdaki gibi olacaktır.

$$\frac{dG}{dt} = 2T + \sum_{k=1}^N \vec{F}_k \cdot \vec{r}_k = 2T - \sum_{k=1}^N \sum_{j < k} \frac{dV}{dr} r_{jk} \quad (2.17)$$

İki parçacık arasındaki potansiyelin, daha önceden bildiğimiz parçacıklar arası mesafenin n. kuvveti ile orantılı olan, (2.18)'de verilen ifadeye eşit olduğunu düşünelim.

$$V(r_{jk}) = \alpha r_{jk}^n \quad (2.18)$$

Burada  $\alpha$  ve n sabit sayılar olmak üzere,

$$-\sum_{k=1}^N \vec{F}_k \cdot \vec{r}_k = \sum_{k=1}^N \sum_{j < k} \frac{dV}{dr} r_{jk} = \sum_{j < k}^N nV(r_{jk}) = nV_{Top} \quad (2.19)$$

$V_{Top}$ , sistemin toplam potansiyel enerjisidir.

$$V_{Top} = \sum_{k=1}^n \sum_{j < k} V(r_{jk}) \quad (2.20)$$

(2.20) ifadesini (2.17)'deki ifadede kullanırsak,

$$\frac{dG}{dt} = 2T + \sum_{k=1}^N \vec{F}_k \cdot \vec{r}_k = 2T - nV_{Top} \quad (2.21)$$

şeklinde ifademizi geliştirmiş oluruz.

$G$ 'nin türevinin ortalamasını bulmak için  $\tau$  zaman aralığında aşağıdaki integrali tanımlayalım.

$$\left\langle \frac{dG}{dt} \right\rangle_{\tau} = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} \frac{dG}{dt} dt = \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} dG = \frac{G(\tau) - G(0)}{\tau} \quad (2.22)$$

Böylece kesin denkleminize yani Virial Teoremine ulaştığımız olacağız.

$$\left\langle \frac{dG}{dt} \right\rangle_{\tau} = 2 \langle T \rangle_{\tau} + \sum_{k=1}^N \langle \vec{F}_k \cdot \vec{r}_k \rangle_{\tau} \quad (2.23)$$

Eğer  $\left\langle \frac{dG}{dt} \right\rangle_{\tau} = 0$  olursa, o zaman Virial Teoremi,

$$2 \langle T \rangle_{\tau} = - \sum_{k=1}^N \langle \vec{F}_k \cdot \vec{r}_k \rangle_{\tau} \quad (2.24)$$

şeklinde olacaktır.

$\left\langle \frac{dG}{dt} \right\rangle_{\tau} = 0$  eşitliğinin olduğu birçok durum vardır. Bu eşitliğin bağlı sistemlerde nasıl oluştuğunu görelim.

$G^{bagh}$  ifadesinin ortalaması genellikle çok büyük sınırlar arasında  $G_{\min}$  ve  $G_{\max}$  değerlerinde yani çok büyük zaman aralığında ( $\tau \rightarrow \infty$ ), limiti sifıra gider.

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \left| \left\langle \frac{dG^{bagh}}{dt} \right\rangle_{\tau} \right| = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \left| \frac{G(\tau) - G(0)}{\tau} \right| \leq \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{G_{\max} - G_{\min}}{\tau} = 0 \quad (2.25)$$

Öyle ise G ifadesinin ortalamasını ( $\langle \frac{dG}{dt} \rangle_{\tau} \approx 0$ ) yaklaşık olarak sıfıra eşit kabul edebiliriz. Sonuç olarak virial teoremimizi aşağıdaki gibi yazabiliriz.

$$\langle T \rangle_{\tau} = -\frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \langle \vec{F}_k \cdot \vec{r}_k \rangle_{\tau} = \frac{n}{2} \langle V_{Top} \rangle \quad (2.26)$$

Yerçekimi kuvvetinin etkidiği sistemlerde  $n = -1$  olduğundan virial teoremi bu tür sistemlerde,

$$\langle T \rangle_{\tau} = -\frac{1}{2} \langle V_{Top} \rangle_{\tau} \quad (2.27)$$

şeklinde olacaktır. Solar sistemlerde veya galaksiler gibi kompleks sistemlerde bu genel sonucun kullanımı faydalı olmuştur.

Virial teoremi klasik mekanik için türetilbildiği gibi kuantum mekaniği için de türetilir.

## 2.2. Virial Teoremi, Basınç ve İdeal Gaz İlişkisi

N parçacıktan oluşan kenar uzunlukları  $a$ ,  $b$ ,  $c$  olan 3 boyutlu dikdörtgen şeklindeki kapalı sistemi ele alalım. Basitçe kuvvet ifadesini ve virial teoremini aşağıdaki gibi düşünelim.

$$\vec{F}_k = -\vec{\nabla}V \quad (2.28)$$

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2} \langle \vec{\nabla}V \cdot \vec{r}_k \rangle \quad (2.29)$$

Burada (2.28) ve (2.29) eşitliklerimizi göz önüne aldığımızda hıza bağlı sürtünme kuvvetleri viriale hiçbir katkı yapmayacaktır.

Ele aldığımız sistem için parçacığa etkileyen  $\vec{F}_k$  kuvveti iki tipte olabilir. Parçacığa etkileyen birinci kuvvet, potansiyel duvarları tarafından oluşan basınca bağlı kuvvetlerdir. Bu durumda  $P$ , basınç,  $A$  yüzey alanı,  $V_h$ , hacim olmak üzere x eksenini boyunca;

$$\sum_k \langle \vec{r}_k \cdot \vec{F}_k \rangle = \left( -\frac{a}{2} (PA) + \frac{a}{2} (-PA) \right) = -PV_h \quad (2.30)$$



olur. y ve z eksenleri de göz önüne alındığında,

$$-\frac{1}{2} \sum_k \langle \vec{r}_k \cdot \vec{F}_k \rangle = \frac{3}{2} PV_h \quad (2.31)$$

olur.

Parçacığa etkiyen ikinci kuvvet ise parçacıklar arası oluşan kuvvet olabilir. Bu kuvvetleri korunumlu alırsak, potansiyel enerji fonksiyonu  $U = U(r_1, r_2, \dots, r_n)$  şeklinde olmalıdır. Parçacığa etkiyen kuvvet ise,

$$\vec{F}_k = -\frac{\partial U}{\partial r_k} \cdot \hat{r}_k \quad (2.32)$$

şeklinde verilebilir. Burada potansiyel enerji fonksiyonu  $U$ , Euler Teoremine göre (Chisholm ve Morris 1966) n. dereceden homojen bir fonksiyon ise,

$$\sum_k \vec{r}_k \cdot \vec{F}_k = -\sum_k \vec{r}_k \frac{\partial U}{\partial r_k} \cdot \hat{r}_k = -nU \quad (2.33)$$

olacaktır. Bundan sonra (2.31) ve (2.33) ifadelerini birleştirirsek,

$$\frac{3}{2} PV_h = \langle T \rangle - \frac{n}{2} \langle U \rangle \quad (2.34)$$

Parçacığın ideal gaz durumunda potansiyel enerjisinin sıfır, kinetik enerjisinin de termal denge durumunda,  $\langle T \rangle = \frac{3}{2} NkT_s$  olduğunu düşünürsek, virial teoremimiz ideal gaz kanununa çıkmış olur. Burada sıcaklık  $T_s$  olarak verilmiştir.

$$PV_h = NkT_s \quad (2.35)$$

Parçacıkları kendi davranışları dışında dış kuvvetlerden izole edersek ( $P=0$ ) ve coulomb kuvvetleriyle birbirini etkiyen her bir parçacık için  $n = -1$  alırsak virial teoremimiz en basit halini alır. Bu ifade kuantum mekaniksel olarak geçerlidir (Cowan 1981).

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2} \langle U \rangle \quad (2.36)$$

### 2.3. Atomik Sınırlarda Etkileşme Potansiyelleri ve Yüzey Basıncı

Virial teoreminin, toplam kinetik enerji ile toplam potansiyel enerji cinsinden basit eşitliğini biliyoruz. Toplam kinetik enerji  $E_{kin}$ , toplam potansiyel enerji  $U$  olmak üzere virial,

$$2E_{kin} = U \quad (2.37)$$

olacaktır. Toplam potansiyel enerjiyi basitçe,

$$U = \langle \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i \rangle \quad (2.38)$$

şeklinde yazalım. Atomik yapı içerisinde toplam potansiyel, elektron-elektron arası, çekirdek-elektron arası ya da atomik sınırlar ile etkileşme gibi etkileşmelerden meydana gelir. Sırasıyla bu etkileşmeler  $ee$ ,  $en$  ve  $eb$  olarak sembolleştirilebilir. Etkileşme potansiyelleri için bu sembolleri kullanarak toplam potansiyel enerjiyi,

$$U = U^{ee} + U^{en} + U^{eb} \quad (2.39)$$

şeklinde yazabiliriz. Şimdi sırayla etkileşme potansiyellerini inceleyelim.

Atomik yapının merkezinden  $r = r_0$  için küre yüzeyinde oluşan atomik sınırlar ile etkileşmeden doğan potansiyeli,

$$U^{eb} = - \langle \sum_i \vec{r}_i \cdot \vec{F}_i^{eb} \rangle$$

$$U^{eb} = r_0 \langle \sum_i F_i^{eb} \rangle$$

$$U^{eb} = r_0 (4\pi r_0^2 P) \quad (2.40)$$

şeklinde ifade edebiliriz. Kürenin hacminin  $V_h = \frac{4}{3}\pi r_0^3$  olduğunu hatırlayacak olursak, potansiyelimizi basınç ve hacim elemanı cinsinden,

$$U^{eb} = 3PV_h \quad (2.41)$$

şeklinde yazabiliriz.

Elektron-çekirdek arası etkileşmelerden doğan kuvveti,  $Z$  çekirdek yükü olmak üzere,

$$\vec{F}_i^{en} = -\frac{Ze^2}{\vec{r}_i^3} \vec{r}_i \quad (2.42)$$

şeklinde yazabiliriz. Buradaki negatiflik kuvvetin merkeze göre yönünü ifade eder. Bu etkileşmeden doğan toplam etkileşme potansiyeli ise,

$$U^{en} = \left\langle \sum_i \frac{Ze^2}{\vec{r}_i} \right\rangle = -E_{pot}^{en} \quad (2.43)$$

şeklindedir.

Elektron-elektron etkileşmesinden doğan kuvvet,

$$\vec{F}_i^{ee} = e^2 \sum_j \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^3} \quad (2.44)$$

ile verilir.

Burada  $j \neq i$ , olmak şartıyla diğer j'lerin tüm olası değerleri için potansiyel,

$$U^{ee} = -e^2 \left\langle \sum_i \sum_j \frac{\vec{r}_i \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^3} \right\rangle = -\frac{e^2}{2} \left\langle \sum_i \sum_j \frac{(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|^3} \right\rangle = -\frac{e^2}{2} \sum_i \sum_j \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = -E_{pot}^{ee} \quad (2.45)$$

şeklinde yazılır. Burada  $E_{pot}^{ee}$ , elektron-elektron etkileşmesinden doğan potansiyel enerjiyi göstermektedir.

Bulduğumuz  $U^{eb}$ ,  $U^{en}$ ,  $U^{ee}$  potansiyel değerlerine karşılık bulduğumuz potansiyel enerji değerlerini (2.39)'da yerine koyarsak ve de (2.37) virial ifademizle birleştirecek, atomik yapı içerisinde yüzey basıncı cinsinden toplam potansiyelimiz (2.46)'deki gibi bulunur (Eliezer 1987 ).

$$2E_{kin} + E_{pot}^{en} + E_{pot}^{ee} = 3PV_h \quad (2.46)$$

### 3. KUANTUM MEKANİKSEL VİRİAL TEOREMİ

Bu bölümde daha önceden klasik olarak tanımlanan virial teoreminin kuantum mekaniksel tanımını öğreneceğiz. Hipervirial teoremi, kuantum mekaniksel virial teoreminin kök teoremidir. Hipervirial teoreminin tanımlanmasından sonra operatörler ve komutasyon özelliklerini de hatırlayarak kuantum virial teoremine ulaşacağız (Levine 2000).

#### 3.1. Hipervirial Teoremi

Virial teoremi ifadesini elde etmek için hipervirial teoremi ile başlangıç yapacağız.

$\Psi$ ; bağlı kararlı durum dalga fonksiyonu.

$\hat{H}$ ; zamandan bağımsız hamiltonien

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (3.1)$$

olduğunu biliyoruz.  $\hat{A}$ ; lineer zamandan bağımsız bir operatör olsun.

$$\int \Psi^* [\hat{H}, \hat{A}] \Psi d\tau = \langle \Psi | \hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{H} | \hat{A}\Psi \rangle - E \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \quad (3.2)$$

( a )                      ( b )

$\hat{H}$  hermityen olduğundan; ( a ) ifadesi,

$$\langle \Psi | \hat{H} | \hat{A}\Psi \rangle = \langle \hat{A}\Psi | \hat{H} | \Psi \rangle^* = E^* \langle \hat{A}\Psi | \Psi \rangle^* = E \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \quad (3.3)$$

şeklinde olur. Bu ifadenin ( b ) ifadesine eşit olması sebebiyle,

$$\int \Psi^* [\hat{H}, \hat{A}] \Psi d\tau = 0 \quad (3.4)$$

olduğu görülür. (3.4) ifadesi Hipervirial Teoremi olarak adlandırılır (Hirschfelder 1960, Epstein and Epstein 1962). Bu ifadeyi bulurken hamiltoniyenin hermityenliğini kullandık.  $\hat{H}$ 'nin hermityen oluşu  $\Psi$  dalga fonksiyonunun  $\pm \infty$  da sifıra gitmesini gerektirir. Dolayısıyla hipervirial teoremi  $\infty$  da sifıra gitmeyen sürekli sistemlere uygulanamaz. Sadece bağlı (kesikli) sistemlere uygulanabilir.

Şimdi hipervirial teoremini kullanarak virial teoremi elde edeceğiz.

### 3.2. Kuantum Virial Teoremi

$\hat{A}$  operatörünü;

$$\sum_i q_i p_i = -i\hbar \sum_i q_i \frac{\partial}{\partial q_i} \quad (3.5)$$

şeklinde seçelim.

n parçacıklı bir sistemde 3n tane koordinat vardır. Böyle bir sistem üzerinde duralım.  $p_i$  momentum bileşenlerini  $q_i$  ise kartezyen koordinatlarını göstermek üzere,  $[\hat{H}, \hat{A}]$ ' yi elde edelim.

$$[\hat{H}, \hat{A}] = [\hat{H}, \sum_i q_i p_i]$$

$$[\hat{H}, \hat{A}] = \sum_i [\hat{H}, q_i p_i]$$

$$[\hat{H}, \hat{A}] = \sum_i q_i [\hat{H}, p_i] + \sum_i [\hat{H}, q_i] p_i$$

$$[\hat{H}, \hat{A}] = i\hbar \sum_i q_i \frac{\partial V}{\partial q_i} - i\hbar \sum_i \frac{1}{m_i} p_i^2 = i\hbar \sum_i q_i \frac{\partial V}{\partial q_i} - 2i\hbar \hat{T} \quad (3.6)$$

Burada aşağıdaki (3.7) ve (3.8) ifadelerini hatırlamamız yerinde olacaktır.

$$[\hat{x}, \hat{H}] = [\hat{x}, \hat{T} + \hat{V}] = [\hat{x}, \hat{T}] = [\hat{x}, \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2)] = \frac{1}{2m} 2\hbar^2 \frac{\partial}{\partial x} \quad (3.7)$$

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = [\hat{p}_x, \frac{1}{2m} (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2) + \hat{V}(x,y,z)]$$

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = \frac{1}{2m} [\hat{p}_x, \hat{p}_x^2] + \frac{1}{2m} [\hat{p}_x, \hat{p}_y^2] + \frac{1}{2m} [\hat{p}_x, \hat{p}_z^2] + [\hat{p}_x, \hat{V}(x,y,z)]$$

Burada,  $\frac{1}{2m} [\hat{p}_x, \hat{p}_x^2] = \frac{1}{2m} [\hat{p}_x, \hat{p}_y^2] = \frac{1}{2m} [\hat{p}_x, \hat{p}_z^2] = 0$  olmak üzere,

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = (-i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \Psi + i\hbar V \frac{\partial}{\partial x} \Psi) = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial x} \quad (3.8)$$

olacaktır.

$\hat{T}$  ve  $\hat{V}$  sistemin kinetik ve potansiyel enerji operatörleridir. (3.6) eşitliğini hipervirial teoremden yerine koyarsak,

$$\langle \Psi | \sum_i q_i \frac{\partial V}{\partial q_i} | \Psi \rangle = 2 \langle \Psi | \hat{T} | \Psi \rangle \quad (3.9)$$

Bulduğumuz bu denklem Kuantum Virial Teoremi olarak adlandırılır. Bu ifade sadece bağlı durumlar için geçerlidir. Bazı durumlarda bu eşitlik daha sade bir hal alabilir.

### 3.3. Homojen Fonksiyonlar ve Euler Teoremi

Herhangi bir  $f(x_1, x_2 \dots x_j)$  fonksiyonunu;

$$f(sx_1, sx_2 \dots sx_j) = s^n f(x_1, x_2 \dots x_j) \quad (3.10)$$

eşitliğini sağlıyorsa n. dereceden homojen olduğu söylenir.

Örnek olarak;  $g = \frac{1}{x^3} + \frac{1}{y^3} + \frac{1}{z^3} + \frac{x}{y^2 z^2}$  denklemi  $n = -3$ . dereceden

homojendir. Çünkü,

$$g(sx, sy, sz) = \frac{1}{s^3 x^3} + \frac{1}{s^3 y^3} + \frac{1}{s^3 z^3} + \frac{sx}{s^2 y^2 s^2 z^2} = s^{-3} g(x, y, z)$$

Şimdi de Euler'in homojen fonksiyonlar teoremini inceleyelim.

Eğer  $f(x_1, x_2 \dots x_j)$  n. dereceden homejense,

$$sx_1 = u_1, \quad sx_2 = u_2, \quad \dots, \quad sx_j = u_j$$

$$f(sx_1, sx_2 \dots sx_j) = s^n f(x_1, x_2 \dots x_j) \quad (3.11)$$

(3.11) denkleminin sol tarafına kısmi türev uygulandığında;

$$\frac{\partial f(u_1, u_2, \dots, u_j)}{\partial s} = \frac{\partial f}{\partial u_1} \frac{\partial u_1}{\partial s} + \frac{\partial f}{\partial u_2} \frac{\partial u_2}{\partial s} + \dots + \frac{\partial f}{\partial u_j} \frac{\partial u_j}{\partial s}$$

$$\frac{\partial f(u_1, u_2, \dots, u_j)}{\partial s} = x_1 \frac{\partial f}{\partial u_1} + x_2 \frac{\partial f}{\partial u_2} + \dots + x_j \frac{\partial f}{\partial u_j}$$

$$\frac{\partial f(u_1, u_2, \dots, u_j)}{\partial s} = \sum_{k=1}^j x_k \frac{\partial f(u_1, u_2, \dots, u_j)}{\partial u_k} \quad (3.12)$$

olacaktır. Şimdi de denkleminin sağ tarafına kısmi türev uygulayalım.

$$\frac{\partial s^n f(x_1, x_2, \dots, x_j)}{\partial s} = ns^{n-1} f(x_1, x_2, \dots, x_j) \quad (3.13)$$

Bulduğumuz (3.12) ve (3.13) ifadelerini (3.11) denkleminde yerine koyarsak;

$$\sum_{k=1}^j x_k \frac{\partial f(u_1, u_2, \dots, u_j)}{\partial u_k} = ns^{n-1} f(x_1, x_2, \dots, x_j) \quad (3.14)$$

Burada  $s=1$  ve  $u_i = x_i$  seçersek,

$$\sum_{k=1}^i x_k \frac{\partial f}{\partial x_k} = nf \quad (3.15)$$

bulunur ve ispat tamamlanmış olur.

Şimdi virial teoreme geri dönelim.  $V$ ,  $n$ . dereceden homojen bir fonksiyon ise Euler teoreminin kartezyen koordinatlardaki eşitliğinden,

$$\sum_i q_i \frac{\partial V}{\partial q_i} = nV \quad (3.16)$$

elde edilir ve bu denklem virial teoremini sadeleştirir.

$$n \langle V \rangle = 2 \langle T \rangle \quad (3.17)$$

$$\langle T \rangle + \langle V \rangle = E \quad (3.18)$$

(3.18)'da verilen toplam enerji ifadesi kullanılarak ortalama potansiyel ve kinetik enerjiler bulunur.

$$\langle V \rangle = \frac{2E}{n+2} \quad (3.19)$$

$$\langle T \rangle = \frac{nE}{n+2} \quad (3.20)$$

## 4. KUANTUM NOKTA YAPILAR

Kuantum nokta yapılar, üç uzay boyutunda kuantum mekaniksel olarak hapsedilmiş sıfır boyutlu sistemler olarak bilinir. Bu yapılarda doğal uzunluk ölçeği, dev atomlarla benzer ölçülerde birkaç nanometre mertebesindedir. Kuantum nokta yapılar, doğal atomlar gibi istenildiğinde değiştirilebilen kesikli elektron sayısı içerir ve enerji seviyeleri kararlı olup kesikli spektruma sahiptirler. Bu yüzden kuantum nokta yapılar yapay atomlar olarak adlandırılır.

Kuantum nokta yapılar, insan yapımıdır ve laboratuvarlarda tasarlanıp üretilmektedirler. Bu sistemleri yeterince ilginç yapan, çok küçük boyutlu olmalarına rağmen kuvvetli kuantum etkilerinin ortaya çıkmasıdır. Gerçekten, kuantum nokta yapılar hacimsel benzerlerinden oldukça farklı yeni fiziksel etkiler göstermektedir. Bu nedenle son zamanlarda, teorik ve deneysel araştırmaların çoğunda özellikle elektronik özellikleri olmak üzere bu sistemlerin çeşitli fiziksel özelliklerini incelemek ve anlamak için çalışmalar yapılmaktadır.

Aslında kuantum nokta yapısı, kuantum mekaniğinin çalışıldığı küçük bir laboratuvar gibi düşünülebilir. Bu nedenle kuantum nokta yapılar kuantum mekaniğini test etmek için mükemmel bir saha sağlayabilir. Ayrıca kuantum nokta yapıları iki ve üç boyutta anlamakta mümkündür (Kervan 2004).

### 4.1. Kuantum Nokta Yapıların Üretilmesi

1970'li yıllarda boyutu ikiye sınırlandırılmış kuantum kuyuları olarak bilinen sistemlerin elektronik yapıları üzerinde araştırmalar başladı (Chang ve ark. 1974, Dingle ve ark.1974). Bir kuantum kuyusunda elektronlar iki uzaysal yönde hareket edebilirler. Diğer yöndeki hareketleri yasaklanmıştır. Bu sebeple bir kuantum kuyu yapıda elektronlar iki boyutumsu elektron gazı oluşturur denir. Kuantum kuyusu yüksek iletkenlik bant enerjisine sahip iki yarıiletken tabaka arasına yerleştirilmiş çok ince düz bir yarıiletken tabaka olup, iki malzemenin iletkenlik bandı enerjileri



arasındaki fark, elektronları ince bir tabakaya kısıtlar. Genel olarak kuantum kuyuları oluşturmak için kullanılan malzeme GaAs'dır ve bariyer olarak kullanılan da  $Al_{1-x}Ga_xAs$ 'dir.

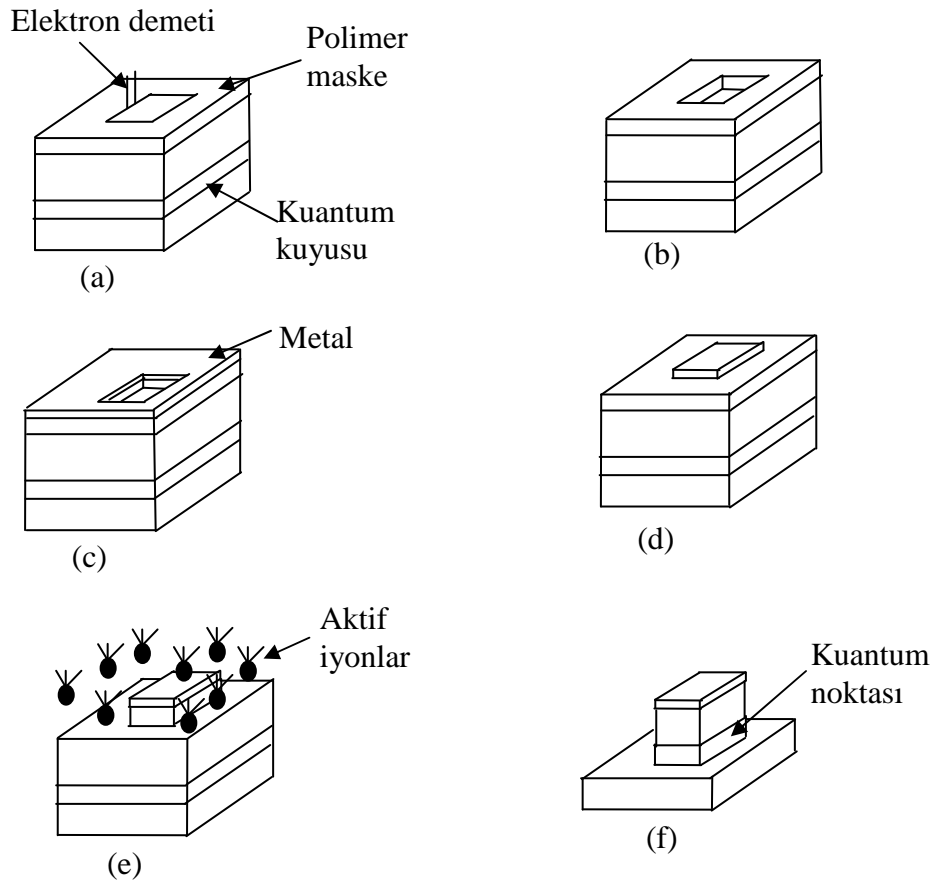
1980'li yıllarda teknolojideki gelişmeler neticesinde elektronları kuantum telleri olarak adlandırılan bir boyutlu yapılara hapsedmeyi mümkün kılmıştır (Petroff ve ark. 1982). Kuantum telleri kuantum kuyusu içeren bir numunede kazıma yapılarak minyatür çizgiler şeklinde üretilir. Kuantum telinde elektronlar tek bir yönde özgürce hareket ederken diğer iki yönde hareketleri sınırlıdır. Elektronların böyle bir sistemi bir boyutumsu elektron gazı olarak adlandırılır.

Kuantum noktaları üç yönde hapsedilmiş nano yapılar olduğu için kuantum kuyusu ve kuantum tellerinden mantıksal ilerlemeyi gösterir. Bir kuantum nokta yapısında elektronlar hiç serbest yöne sahip değildir ve elektronların de Broglie dalga boyu hapsedilme uzunluğu ile aynı uzunluk ölçeğindedir.

Kuantum nokta yapılar birçok teknik kullanılarak üretilebilir. Ancak, başlıca amaç elektronları küçük bir bölgeye hapsedmektir (Jacak ve ark. 1998). Bu hapsi yapmanın bir yolu, örneğin metal plakayı yalıtıcı ile kaplayarak malzemenin sınırlarını kullanmaktır. Aynı zamanda, elektrik alan uygulayarak elektronların hareketini yarıiletken içinde küçük bir bölgeye hapsedmek de mümkündür (Kastner 1993). Kuantum nokta yapıları üretmek için kullanılan tekniklerin çoğunda başlangıç noktası, örneğin GaAs gibi yarıiletken bir kuantum kuyusunda iki boyutlu elektron gazının oluşturulmasıdır. Bir kuantum nokta yapı, şimdi ilave yanal bir hapis kullanılırsa böyle bir sistemden oluşur. Moleküler demet epitaksi gibi modern üretim tekniklerinin gelişmesiyle, GaAs gibi yarıiletken bir kristalin atomik tabakasını üretmek mümkündür.

İki boyutlu elektron gazı, GaAs'dakinden daha geniş bant aralıklı bir yarıiletkenin daha kalın tabakaları arasına GaAs gibi bir yarıiletkenin ince tabakası (~10nm) sıkıştırılarak oluşturulabilir. Kristal yapısı ve örgü sabiti hemen hemen GaAs'inki ile aynı olduğundan bu amaç için AlGaAs seçilir. Bu iki malzemenin örgüsü birbirine uyduğu için, iç yüzeyde çok az bir gerginlik olacak ve adeta kusursuz iç yüzeylere sahip olunabilecektir. GaAs'da elektronlar serbestçe hareket edebilirken, AlGaAs bir yalıtıcı olarak görev yapar. GaAs/AlGaAs iç yüzeylerinde enerji basamaklarının potansiyel kuyulara ve böylece iletkenlik ve valans bantlarının

her ikisinde kesikli enerji seviyelerine neden olduğu görülebilir. GaAs kuantum kuyusunda hapsili elektron gazı aslında iki boyutludur. Kuantum kuyusu öyle incedir ki, düşük sıcaklıkta yalnız en düşük kuantum enerji durumu veya daha teknik olarak en düşük alt bant elektronlar tarafından işgal edilmiştir. Elektronlar kuyuda dikey yönde hareket etmek için serbest değildir, yalnızca yanlamasına hareket edebilirler. Kuantum nokta yapıları bu kuantum kuyu tabakalı yapıdan elde edilebilir. Kuantum nokta yapılar ilk olarak Reed ve arkadaşları tarafından (Reed ve ark. 1986) iki boyutlu elektron gazı içeren bir yapıda kazıma yapılarak elde edilmiştir. Bu yöntemin aşamaları Şekil 4.1.'de gösterilmiştir.



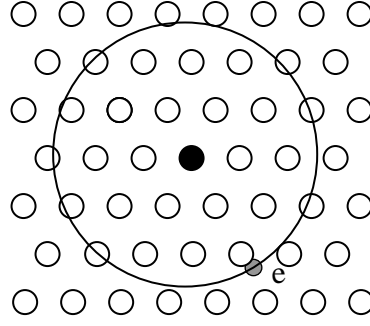
Şekil 4.1. Kuantum noktasının kazıma yöntemi ile elde edilmesi (Reed 1993).

Bir veya daha fazla kuantum kuyusu içeren bir numunenin yüzeyi polimer bir maske ile kaplanır ve kısmen ışığa tutulur (Şekil 4.1.a). Işığa tutulan kalıp, oluşturulacak olan nano yapının şekline karşılık gelir. Yüksek çözünürlük gerektirdiğinden dolayı, maske görünür ışıkla kesilmez, elektron veya iyon demetine maruz bırakılır. Kesilen bölgede maske kaldırılır (Şekil 4.1.b). Daha sonra, tüm yüzey ince metal tabaka ile kaplanır (Şekil 4.1.c). Özel bir çözücü kullanılarak, polimer film ve koruyucu metal tabaka kaldırılır. Metal tabakanın bırakıldığı yer olan daha önce kesilen bölge dışında numunenin temiz bir yüzeyi elde edilir (Şekil 4.1.d). Sonra, maskeyle korunmayan bölgenin kimyasal aktif iyonlarla aşındırılmasıyla (Şekil 4.1.e), kuantum kuyu parçaları içeren ince sütunlar oluşturulur (Şekil 4.1.f). Bu yolla, ilk olarak kuantum kuyusunun düzleminde hapsedilmiş elektronların hareketi, çapı 10–100 nm mertebesinde olan küçük sütunlara kısıtlanmıştır (Kervan 2004).

#### **4.2. Kuantum Nokta Yapılarda Safsızlığın Oluşturulması**

Kuantum nokta yapıların içerisine safsızlığın yerleştirilmesi, bu yapılarda çalışma sahasını geliştirmiştir. Bu yapıların içerisine konulan yabancı bir atomun elektron sayısı, kimyasal bağ yapmak için gerekenden fazla ise, fazlalık elektronlar kolayca iyonize olur ve iyonize olan elektronlar kristale geçer. Böyle elektron vermeye yatkın atomlara donör adı verilir. Eğer safsızlık atomunun bağ yapmaya yetecek kadar elektronu yoksa kristal örgü içerisinden yakın bir bağdan elektron alabilir. Bu tip elektron almaya yatkın atomlara ise akseptör adı verilir (Harrison 1999).

Donör atomlar örgü içerisine fazlalık elektronlarını bırakarak, akseptör atomlar ise kristal örgü içerisinden elektron alarak safsızlığı oluştururlar. Şekil 4.2’de donör safsızlığa bir örnek gösterilmektedir.



**Şekil 4.2.** Yarıiletken içerisindeki yüksüz bir donör safsızlığı

Silisyum içerisinde bir donör safsızlığa fosfor örnek olarak verilebilir. GaAs gibi bileşik yarıiletkenlerde safsızlık, bir pozitif yük merkezi gibi davranır. GaAs bileşik yarıiletkeninde, Si tipik bir donör safsızlığıdır. Bu safsızlık Si'nin fazlalık elektronunu örgüye bırakması ile oluşur.

Şekil 4.2.'den görülebileceği gibi yüksüz donör, bir hidrojen atomundaki elektron proton çiftine benzemektedir (Harrison 1999). Buradaki fazlalık elektron coulomb potansiyelinde hareket eder ve Schrödinger denklemi etkin kütle yaklaşımı da kullanılarak,

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r} \right) \psi = E\psi \quad (4.1)$$

şeklinde yazılır.  $\epsilon_0$ , boşluğun dielektrik geçirgenliği,  $\epsilon_r$ , ortamın bağıl dielektrik katsayısı,  $r$  safsızlık ile elektron arası mesafedir (Mitin ve ark.1999). (4.1) eşitliği hidrojen atomu için yazılan Schrödinger denkleminde oldukça benzemektedir.

Eğer safsızlık kuantum noktasının merkezinde olursa, bu durumda sınırlandırıcı potansiyelle birlikte pozitif bir coulomb merkezi gibi davranan safsızlık potansiyeli de denkleminin içine girer. Schrödinger denkleminin aşağıdaki gibi yazılır.

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r} + V(r) \right) \psi = E\psi \quad (4.2)$$

Bu denklemler çözülerek bir kuantum noktası içindeki yüksüz hidrojen tipi safsızlığın enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonları bulunur (Şahin 2005).

### 4.3. Kuantum Nokta Yapılar için Teorik İfadeler

Kuantum mekaniksel bir sistemin fiziksel özelliklerini belirlemek için, öncelikle sistemin iyi bir teorik modele oturtulması ve Schrödinger denkleminin yazılması gerekir. Bu, sistemin özelliklerine bağlı olarak etkin kütle yaklaşımı gibi bazı fiziksel yaklaşımlar kullanılarak yapılır. Ayrıca sistemin tek ya da çok parçacıklı olmasına göre bir takım yaklaşımlar yapmak gerekir. Buna ilaveten sistemin sınır şartlarının da iyi tanımlanması gerekir. Matematiksel model oluşturulurken kuantum mekaniğinin temel varsayımlarına dikkat etmek gerekir. Aksi halde yapılan hesaplamalar yanlış sonuçlara neden olabilir.

#### 4.3.1. Etkin Kütle Yaklaşımı

Yarıiletken malzeme içerisinde hareket eden elektronun sahip olduğu kütle, serbest haldeyken sahip olduğu kütleden farklıdır. Serbest olarak hareket eden elektronun momentumu ve kinetik enerjisinin,  $\vec{k}$ , dalga vektörü olmak üzere,

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (4.3)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4.4)$$

olduğunu biliyoruz.

Eğer elektron, periyodik bir potansiyelde hareket ediyorsa, serbest haldeki momentumundan farklı olarak kristal momentumu olarak adlandırılan farklı bir momentumla hareket eder.

Periyodik bir örgüde hareket eden bir elektrona bir dış kuvvet ( $\vec{F}_d$ ) uygulanacak olursa elektrona etkiyen kuvvet aşağıdaki gibi olacaktır.

$$\vec{F}_d + \vec{F}_i = m \frac{d\vec{v}}{dt} = m\vec{a} \quad (4.5)$$

Burada  $\vec{F}_i$ , örgü atomlarının oluşturduğu kristal potansiyelinin elektrona uyguladığı net kuvvettir. Şimdi  $\vec{F}_i$  kuvvetini de içerecek şekilde yeni bir dış kuvvet tanımlayalım.

$$\vec{F}'_d = m^* \frac{d\vec{v}}{dt} = m^* \vec{a} \quad (4.6)$$

Burada  $m^*$ , etkin kütle olarak adlandırılır ve elektronun üzerine etkiyen iç kuvvetlerin etkisini de içerir (Harrison 1999, Davies 1999, Mitin ve ark. 1999).

Diğer taraftan kristal yapı içerisinde dış kuvvetin etkisi altında hareket eden elektronun grup hızı aşağıdaki gibi yazılabilir.

$$v_s = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk} \left( \frac{E}{\hbar} \right) = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \quad (4.7)$$

Böylece elektronun etkin kütlesi,

$$m^* = \frac{\hbar^2}{d^2 E / dk^2} \quad (4.8)$$

bulunur.

Kuantum noktası içerisinde elektron için zamandan bağımsız Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi = E \psi \quad (4.9)$$

gibi olur ve bu etkin kütle yaklaşımı olarak bilinir. Enerji özdeğerleri ise,

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (4.10)$$

ifadesiyle verilir (Harrison 1999).

### 4.3.2. Küresel Kuantum Nokta Yapılarda Sınır Şartları

Kuantum nokta yapılar en az iki yarı iletken malzemeden üretilmektedir. Yarı iletken malzemeler farklı olduğu için bunların etkin kütleleri, dielektrik sabitleri ve örgü sabitleri de farklı olur. Sonlu potansiyel engeline sahip bir kuantum nokta yapısındaki bir elektronun potansiyel engelini aşması olasılığı vardır. Bu durumda

elektronun hareketini incelerken hem kuyu içinde hem de kuyu dışında Schrödinger denkleminin, etkin kütle göz önüne alınarak oluşturulması gerekir. Potansiyel engeli yüksekliği  $V_0$ , yarıçapı  $a$  olan bir kuantum nokta yapısındaki bir elektronun kuyu içindeki etkin kütlesi  $m_1^*$ , kuyu dışındaki etkin kütlesi  $m_2^*$  olsun. Bu elektron için Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1^*}\nabla^2\psi_1 = E\psi_1 \quad , \quad r < a \quad (4.11)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2^*}\nabla^2\psi_2 + V_0\psi_2 = E\psi_2 \quad , \quad r > a \quad (4.12)$$

şeklinde yazılabilir. Burada  $\psi_1$  ve  $\psi_2$  sırasıyla kuyu içindeki ve dışındaki dalga fonksiyonlarıdır. Kuantum mekaniğinin madde akımı sürekliliği varsayımına göre, etkin kütle farklılığı olmayan böyle bir sistem için sınır şartı,

$$\psi_1|_{r=a} = \psi_2|_{r=a} \quad \text{ve} \quad \left. \frac{d\psi_1}{dr} \right|_{r=a} = \left. \frac{d\psi_2}{dr} \right|_{r=a} \quad (4.13)$$

şeklinde dalga fonksiyonunun kendisi ve birinci türevinin sınırlarda sürekli olmasıdır. Etkin kütle farklılığı olan sistemler için bu sınır şartı,

$$\psi_1|_{r=a} = \psi_2|_{r=a} \quad \text{ve} \quad \left. \frac{1}{m_1} \frac{d\psi_1}{dr} \right|_{r=a} = \left. \frac{1}{m_2} \frac{d\psi_2}{dr} \right|_{r=a} \quad (4.14)$$

biçiminde tanımlanır. Bu sınır şartı BenDaniel-Duke (1966) şartı olarak bilinir.

### 4.3.3. Küresel Kuantum Nokta Yapının Elektronik Gösterimi

Kuantum nokta yapı içerisinde elektronu tutmak için potansiyelden başka bir engele gerek yoktur. Böyle bir sistemde elektronik kabuk yapı bağlı durumlar için, atomlarda olduğu gibi  $n$  baş kuantum sayısı ve  $\ell$  açıl momentum kuantum sayısı ile belirlenir. Atomlar coulomb potansiyeli içerisinde olduklarından dolayı açıl momentum kuantum sayısı hiçbir zaman baş kuantum sayısından büyük olamaz.  $\ell$  en fazla  $n-1$  değerini alabilir. (1s, 2s, 2p, 3s, 3p...) (Zhu ve ark.1990, Zhu ve Chen 1994). Küresel bir kuantum nokta yapıda ise elektronlar bir coulomb

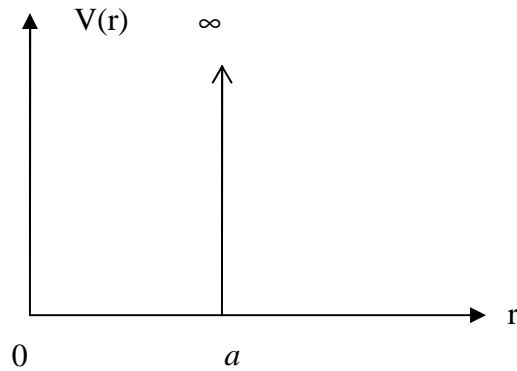
potansiyeli altında olmadıklarından dolayı böyle bir sınırlama yoktur ve kabuk yapı 1s,1p,1d,2s,1f,2p, ... şeklindedir. Enerji seviyeleri de  $E_{n,\ell}$  biçiminde gösterilir.

Kuantum nokta yapılarında farklı olarak, baş kuantum sayısı (n),  $n+\ell$  şeklinde yazılabilir. Bu durumda 1s durumu aynen kalırken 1p, 2p olarak adlandırılır. Öyle ise küresel kuantum nokta yapılarında bağlı durumlar için kabuk yapı 1s,2p,3d,2s,4f, ... şeklindedir. Enerji seviyeleri ise  $E_{n+\ell,\ell}$  şeklinde gösterilir.

#### 4.3.4. Sonsuz Potansiyelli Küresel Kuantum Nokta Yapı için Fiziksel İfadeler

Kuantum kuyusu yapımında, kullanılan yarıiletken malzemenin etrafının yalıtkan bir malzeme ile kaplanması, yani bileşik yapması durumunda, yarıiletken malzeme etrafındaki sınırlandırıcı potansiyel sonsuz olacaktır.

Küresel kuantum nokta yapı içerisinde potansiyelin sıfır, dışarısında sonsuz olması durumunda, kuantum nokta yapı içerisindeki elektron ve varsa pozitif iyon gibi davranan safsızlığın tünelleme yapma gibi bir olasılığı yoktur. Yani küresel kuantum nokta yapı içerisinde sınırlandırılmış olup, dışarı çıkamazlar. Elektronun ait dalga fonksiyonu bulunurken sadece kuyu içerisi göz önüne alınır. Kuyu dışında elektronun bulunma olasılığı olmaması sebebiyle dalga fonksiyonu da olmayacaktır.



Şekil 4.3. Sonsuz potansiyelli küresel kuyu



Böyle bir sistemde,  $m^*$ , elektronun etkin kütlesi olmak üzere Schrödinger denklemi ve küresel koordinatlardaki ifadesi sırasıyla aşağıdaki gibi yazılır.

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2\psi+V(r)\psi=E\psi \quad (4.15)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+V(r)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]\psi=E\psi \quad (4.16)$$

Burada  $\psi$  dalga fonksiyonu  $(r, \theta, \varphi)$  koordinatlarının bir fonksiyonudur. Bu dalga fonksiyonunu küresel ve radyal olmak üzere iki kısma ayırıp yazabiliriz.

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{n,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad (4.17)$$

Burada  $Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)$  açısıl kısım olup çözümü,  $\ell$ ,  $m$  ile verilen yörünge açısıl momentum kuantum sayısı ve manyetik kuantum sayılarına bağlıdır.  $R(r)$  ise dalga fonksiyonunun radyal kısmıdır.

Kısmi türevleri alındıktan sonra eşitliğin her iki tarafı  $RY$  ile bölünüp,  $r$  ye bağlı terimler bir tarafa ayrılırsa,

$$\frac{1}{R_{n,\ell}(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{n,\ell}(r)}{dr}\right)+\frac{2m^*r^2}{\hbar^2}[E-V(r)]= -\frac{1}{Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2 Y_{\ell,m}(\theta, \varphi)}{\partial\varphi^2}\right] \quad (4.18)$$

eşitliğin sol tarafının  $r$ 'ye, sağ tarafının ise  $(\theta, \varphi)$ 'ye bağlı olduğu, sağ ve sol tarafın eşitliği görülür. Bu eşitliğin çözümü için  $V(r)$  potansiyelinin bilinmesi gerekir (Karaoğlu 1994).

(4.18) ile verilen eşitlik  $\lambda$  gibi bir sabite eşitlenerek çözümlerse, küresel harmoniklere bağlı kısmın  $\ell(\ell+1)$  açısıl momentum özdeğerlerini verdiği görülür (Karaoğlu 1994, Merzbacher 1998, Liboff 1998). Bu durumda tüm küresel simetrik potansiyeller için, radyal Schrödinger denkleminde  $\lambda = \ell(\ell+1)$  özdeğeri, yerine konulursa,

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR_{n,\ell}(r)}{dr}\right)+\frac{2m^*r^2}{\hbar^2}\left[E-V(r)-\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2m^*r^2}\right]R_{n,\ell}(r)=0 \quad (4.19)$$

ifadesi elde edilir.

Sistem sonsuz küresel potansiyel kuyusuyla sınırlandırılırsa ve potansiyel,

$$V(r) = \begin{cases} 0 & , r < a \\ \infty & , r \geq a \end{cases} \quad (4.20)$$

seçilirse, radyal Schrödinger denklemi küresel koordinatlarda,

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_{n,\ell}(r)}{dr} \right) + \left[ \frac{2m^* E}{\hbar^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_{n,\ell}(r) = 0 \quad (4.21)$$

şeklinde olur. Burada  $k = -\sqrt{\frac{2m^* E}{\hbar^2}}$  ve  $\rho = kr$  dönüşümü yapılırsa Schrödinger

denkleminiz,

$$\frac{d^2 R_{n,\ell}(\rho)}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{dR_{n,\ell}(\rho)}{d\rho} + \left[ 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right] R_{n,\ell}(\rho) = 0 \quad (4.22)$$

şeklini alır. Bu denklem küresel Bessel diferansiyel denklemi formundadır. Bu denklemin genel çözümü,

$$R_{n,\ell}(\rho) = A j_\ell(\rho) + B n_\ell(\rho) \quad (4.23)$$

şeklinindedir. Burada  $j_\ell(\rho)$  ve  $n_\ell(\rho)$  fonksiyonları sırasıyla küresel Bessel ve küresel Neumann fonksiyonlarıdır (Abromowitz and Stegun 1970, Arfken 1985).

Tablo 4.1'de küresel Bessel ve küresel Neumann fonksiyonlarına birkaç örnek verilmiştir (Karaoğlu 1994).

**Tablo 4.1.** Küresel Bessel ve küresel Neumann fonksiyonları

Küresel Bessel Fonksiyonları	Küresel Neumann Fonksiyonları
$j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}$	$n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho}$
$j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho}$	$n_1(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho}$
$j_2(\rho) = \left( \frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \sin \rho - \frac{3}{\rho^2} \cos \rho$	$n_2(\rho) = -\left( \frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho} \right) \cos \rho - \frac{3}{\rho^2} \sin \rho$

$r = 0$  için Neumann fonksiyonları ıraksak olduğundan  $B = 0$  olur. Böylece dalga fonksiyonumuz,

$$R_\ell(r) = A j_\ell(kr) \quad (4.24)$$

olur.

$r = a$  durumunda ise sınırlandırıcı potansiyel sonsuz olduğu için elektron kuyu dışına çıkamaz ve  $j_\ell(ka) = 0$  sınır şartı olmalıdır. Bu durumda  $\ell$ 'nin alacağı değerlere göre Bessel fonksiyonlarının köklerinden parçacığın kuyu içindeki enerji değerleri belirlenebilir (Karaoğlu 1994).

$\ell = 0$  durumunda,

$$j_0(ka) = \frac{\sin(ka)}{ka} = 0 \quad (4.25)$$

olması için  $ka = n\pi$  ( $n=1,2,3,\dots,\infty$ ) olması gerektiğinden,  $k = n\pi/a$  olur. Buradan da enerji özdeğerleri,

$$E_{n,0} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (4.26)$$

bulunur.

$\ell = 1$  durumunda ise,

$$j_1(ka) = \frac{\sin(ka)}{(ka)^2} - \frac{\cos(ka)}{(ka)} = 0 \quad (4.27)$$

olur. Bu denklemin kökleri ise sayısal ve grafik yöntemle 4,493 , 7,723 , 10,904 , ... (Karaoğlu 1994) olarak bulunmuştur. Bu durumda Bessel fonksiyonunun ilk kökü için enerji özdeğeri,

$$E_{1,1} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{4,493}{a} \right)^2 \quad (4.28)$$

elde edilir. Benzer şekilde  $\ell$ 'nin diğer değerleri için enerji özdeğerleri hesaplanabilir.

Eğer potansiyel engeli ile sınırlandırılmış  $a$  yarıçaplı küresel kuantum noktası içerisinde elektronun bağlanabileceği pozitif yük gibi davranan bir safsızlık mevcut ise Schrödinger denklemi,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi + V_c(r) \psi + V(r) \psi = E \psi \quad (4.29)$$

şeklinde verilir (Karaoğlu 1994, Montenegro Merchancano 1992). Bu şekilde verilen diferansiyel denklemin çözümü açısal momentum öz fonksiyonları ve Legendre polinomları kullanarak

$$H = \frac{P_r^2}{2m^*} + V_c(r) + V(r) + \hbar^2 \frac{\ell(\ell+1)}{2m^* r^2} \quad (4.30)$$

biçiminde elde edilir. Bu ifadede  $P_r$ , kuantum noktası içerisindeki elektronun momentum operatörü,  $m^*$ , elektronun etkin kütlesi,  $V_c$ , elektron ile pozitif yüklü safsızlık arasındaki etkileşme potansiyeli,  $V$ , elektron hareketinin sınırlandırılmasını sağlayan potansiyeldir. Ayrıca  $\hbar^2 \frac{\ell(\ell+1)}{2m^* r^2}$  ifadesi merkezkaç potansiyeli olarak

bilinir. Bu terim  $\ell \neq 0$  durumunda önem kazanır. Bu terim küresel kuantum noktası içerisinde sınırlandırılan ve pozitif yüklü safsızlığa bağlı olan elektronun kuvvet merkezine bir anlamda bağlı olduğu safsızlığa yaklaşmasını engelleyerek yeniden birleşmeyi önler (Dereli ve Verçin 1988). Toplam potansiyel enerji ifadesi etkin potansiyel olup,

$$V_{\text{etk.}}(r) = -\frac{e^2}{\varepsilon |\vec{r} - \vec{r}_0|} + \hbar^2 \frac{\ell(\ell+1)}{2m^* r^2} + V(r) \quad (4.31)$$

şeklinde yazılabilir. Burada  $\varepsilon$ , yarıiletken kuantum noktasının üretildiği malzemenin dielektrik geçirgenlik sabitidir.  $r_0$  ise kuantum noktası merkezine göre pozitif yüklü safsızlığın konumudur. (4.32) ifadesi kullanılarak (4.31) hamiltoniyen ifadesi yeniden düzenlenirse,

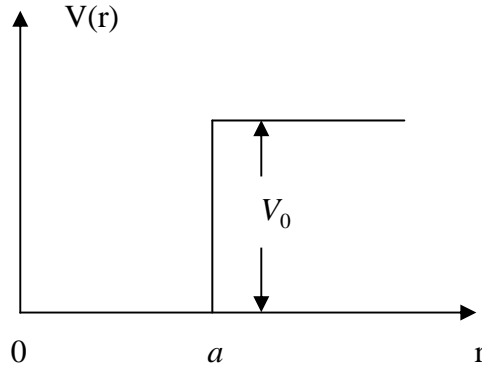
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right) - \frac{e^2}{\varepsilon |\vec{r} - \vec{r}_0|} + V(r) \quad (4.32)$$

şeklinde yazılır.

Safsızlık varken de tek elektron durumunda olduğu gibi Schrödinger denkleminin çözümü bizi Bessel diferansiyel denkleminin köklerine götürecektir. Bu köklerin çözümü ile de enerji özdeğerleri belirlenebilir (Yılmaz 2004).

#### 4.3.5. Sonlu Potansiyelli Küresel Kuantum Nokta Yapı için Fiziksel İfadeler

Eğer kuantum kuyusu yapımında kullanılan yarıiletken malzemenin dış yüzeyleri, malzemenin iletkenliğini azaltacak bir başka malzeme ile bileşik yaparsa bu durumda yarıiletken içerisinde meydana getirilen kuantum noktası etrafında bir potansiyel engeli oluşacaktır. Bu potansiyel engeli, malzeme yalıtkan olmadığı için sonlu olacaktır. Yani küresel kuantum noktası içerisindeki elektron tünelleme gerçekleştirebilecektir. Bu durumda elektronun kuantum noktası içinde de dışında da olma olasılığı vardır. O halde her iki bölgede de elektrona ait dalga fonksiyonları ve enerji değerleri bulmamız olasıdır.



Şekil 4.4. Sonlu potansiyelli küresel kuyu

Sonlu potansiyel engeli bulunan küresel kuantum noktayı kare kuyunun benzeri olarak ifade edebiliriz.  $a$  küresel kuantum noktasının yarıçapı olmak üzere potansiyel ifadesi;

$$V(r) = \begin{cases} V_0 & r \leq a \\ 0 & r > a \end{cases} \quad (4.33)$$

şeklinde yazılır. Burada potansiyel sonlu olduğu için kuyu içinde de dışında da elektronun bulunma olasılığı vardır. Potansiyel küresel simetrik olduğu için Schrödinger denklemi,

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{n,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta, \varphi) \quad (4.34)$$

gibi yazılabilir.

O halde iki bölge için de Schrödinger denkleminin radyal kısmını yazalım (Karaoğlu 2004).

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR_{n,\ell}(r)}{dr}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[ (E + V_0) - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R_{n,\ell}(r) = 0 \quad , \quad r \leq a \quad (4.35a)$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR_{n,\ell}(r)}{dr}\right) + \frac{2mr^2}{\hbar^2} \left[ E - \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} \right] R_{n,\ell}(r) = 0 \quad , \quad r > a \quad (4.35b)$$

Parçacığın enerjisi pozitif ise ( $E > 0$ ) serbest olur. Küre içerisinde  $\alpha = 2m(E - V_0)/\hbar^2$  parametresini tanımlarsak, çözüm yine küresel Bessel fonksiyonu olur.

$$U_\ell^1 = A_\ell j_\ell(\alpha r) \quad r \leq a \quad (4.36)$$

Kuyu dışında,  $r \neq 0$  olduğundan artık Neumann fonksiyonlarının da ıraksak olma endişesi yoktur. O halde küre dışında  $k^2 = 2mE/\hbar^2$  şeklinde bir ifade kullanımıyla en genel çözüm,

$$U_\ell^2 = B_\ell j_\ell(kr) + C_\ell n_\ell(kr) \quad (4.37)$$

şeklinde olur.

Bu iki bölgede dalga fonksiyonlarının ve birinci türevlerinin  $r = a$ 'da sürekli olma koşulları yazılırsa  $B_\ell$  ve  $C_\ell$  sabitleri  $A_\ell$  cinsinden bulunabilir. Böylece yansımaya ve geçme katsayıları hesaplanabilir.

Parçacığın enerjisi ( $-V_0 < E < 0$ ) ise bağlı durumlar oluşur. Yine kuyu içindeki bölgede pozitif  $\alpha^2 = 2m(E + V_0)/\hbar^2$  parametresini tanımlarsak, çözümler doğrudan yazılabilir.

$$U_\ell^1 = A_\ell j_\ell(\alpha r) \quad r \leq a \quad (4.38)$$

Kuyu dışında ise ( $E < 0$ ) olduğundan  $k = -2mE/\hbar^2$  gibi pozitif bir sabit tanımlarsak 2. bölgedeki denklem,

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dR_{n,\ell}(r)}{dr}\right) + \left[ -k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] R_{n,\ell}(r) = 0 \quad (4.39)$$

olur. Bu denklem serbest parçacık için bulunan Bessel denklemine benzemektedir. Ancak  $k^2$  yerine  $-k^2$  gelmiştir.  $-k^2 = (ik)^2$  eşitliğini kullanırsak, küresel Bessel ve Neumann fonksiyonlarının sanal değişken  $(ikr)$  cinsinden yazıldığı çözümleri buluruz.

$$U_\ell^2 = B_\ell j_\ell(ikr) + C_\ell n_\ell(ikr) \quad r > a \quad (4.40)$$

Burada  $B_\ell$  ve  $C_\ell$  sınır koşullarından elde edilebilir (Karaoğlu 2004).

## 5. KÜRESEL KUANTUM NOKTA YAPILARDA SAYISAL ÇÖZÜMLER

Fiziğin geliřimiyle her geen gn daha karmařık sistemler ele alınmakta bu sistemlerle ilgili problemlerin analitik zmleri imkansız olabilmektedir. Problemleri zebilmek iin bazı yaklařıklıkla ele almak gerekmektedir. Bu tr problem zmlerinde birok fiziksel yaklařım yntemleri geliřtirilmiřtir. rnek olarak Varyasyon yntemi, Pertrbasyon yntemi, Thomas Fermi yaklařımı sayılabilir. Ancak bazı durumlarda bu tr analitik yntemlerde yetersiz kalmakta, zm iin Newton-Raphson yntemi, İnterpolasyon teknikleri, Matris kşegenleřtirme teknikleri gibi geleneksel sayısal zm teknikleri kullanılmaktadır. Bu geleneksel sayısal zm teknikleri yanında, son yıllarda kuantum mekaniksel problemlerin zmlerinde Genetik Algoritma (GA) teknięi yaygın olarak kullanılmaya bařlanmıřtır. Hazırlanan bilgisayar programlarıyla da sayısal yntemler daha verimli kullanılmakta olup hesaplama hataları sonucun doęruluęunu etkilemeyecek oranlara gelmektedir.

Bu blmde Genetik Algoritmanın kuantum mekaniksel uygulamaları olan Kuantum Genetik Algoritma (KGA) hakkında bilgiler verilmektedir. Ayrıca Kuantum Genetik Algoritma (KGA) ile Hartree-Fock Roothaan (HFR) yntemlerinin birleřimiyle oluřturulan zm yolu ile sonsuz ve sonlu kresel potansiyel engeli ile sınırlandırılmıř kuantum nokta yapıların sayısal zmleri incelenmektedir. Bu sayısal zmler yapılırken her iki yapıda da dalga fonksiyonu olarak STO'ların lineer birleřiminden oluřan tek elektron spin orbitalleri kullanılmıř, Schrdinger denkleminin olası zmleri olan dalga fonksiyonları KGA yntemi ile, bu dalga fonksiyonları kullanılarak her iki yapının enerji beklenen deęerleri HFR metoduyla bulunmuřtur (akır 2007).



## 5.1. Kuantum Genetik Algoritma (KGA)

İlk kez Holland (1975) tarafından kullanılan Genetik Algoritma yöntemi, biyolojideki genetik süreçlerden ilham alan ortama iyi uyum sağlayan bireylerin hayatta kalması diğerlerinin elenmesi olarak tanımlanan bir araştırma ve sayısal optimizasyon (en iyi olanı seçme) yöntemidir (Coley 2001). Bu yöntem mühendislik bilimlerinde yaygın olarak kullanılmakla birlikte son zamanlarda fiziğin birçok alanında kullanılmaya başlanmıştır. Kuantum mekaniksel uygulamaları Kuantum Genetik Algoritma (KGA) olarak adlandırılan bu yöntem kuantum mekaniksel sistemlerin taban durum enerji seviyelerinin hesaplanmasında ve Schrödinger denkleminin çözümünde kullanılmıştır (Chaudhury ve Bhattacharyya 1998, Nakanishi ve Sugawara 2000, Grigorenko ve Garcia 2000, Saha ve ark. 2001, Şahin ve Tomak 2002, Şafak ve ark. 2003).

KGA uygulamaları, Varyasyon yöntemine benzer şekilde enerji minimizasyon ilkesine dayanır. Ancak varyasyon yönteminden farklı olarak;

- Çok daha iyi sonuçlar vermektedir.
- Rastgeleliğe dayanır.
- Tek bir noktadan hareket etmek yerine, olası çözümleri oluşturan noktalar topluluğu ile işe başlar.
- Parametreler kodlanarak kullanılır. Çok farklı kodlama sistemleri kullanılır.
- Herhangi bir analitik ifadeyle sınırlı kalmaz.
- Çoklu parametre eniyilemesi yaparken aynı anda tüm parametre değerleri değiştirilerek hız artırılır.

KGA, yeniden oluşum (kopyalama), çaprazlama ve mutasyon olmak üzere üç temel süreç üzerine kurulmuştur (Coley 2001). Yeniden oluşum sürecinde bireylerin hayatta kalma olasılıkları belirlenir. Hayatta kalma olasılığı yüksek olan bireyler bir sonraki nesle aktarılırken hayatta kalma olasılığı düşük olan bireyler ise elenir. Bu işlem için her nesilde bazı seçim operasyonunun uygulanması gerekir. Çaprazlama işlemi, yeniden oluşumda elde edilen bireyler üzerine uygulanır. Bu bireyler içinden seçilen iki birey üzerinden yürütülür. Bu iki bireyin genetik bilgileri rastgele bir noktadan kesilerek, birinci bireyin kesilen noktanın solunda kalan bilgiler, ikinci

bireyin kestiğimiz noktanın sağında kalan bilgilerle, birinci bireyin kesilen noktanın sağında kalan bilgiler, ikinci bireyin kestiğimiz noktanın solunda kalan bilgilerle eşleştirilir. Böylece her iki birey de birbirlerinin genetik bilgilerini taşımış olurlar. Mutasyon, yerel minimumlardan kurtulmak için uygulanan bir süreçtir. Mutasyon işlemi nüfus içinden rastgele seçilen bir birey üzerinden gerçekleştirilir. Çaprazlama ve mutasyon süreçlerinin uygulanmasında bir gerçekleştirme olasılığı belirlenir. Çaprazlama sürecinde gerçekleştirme olasılığı nüfustaki çeşitliliği artırmak için yüksek seçilir. Mutasyon sürecinde gerçekleştirme olasılığı yanlış çözümlere gitmemek için düşük seçilir.

KGA yöntemi uygulanırken parametre eniyilemesi ve dalga fonksiyonu eniyilemesi olmak üzere iki yaklaşımdan bahsedilebilir.  $\Psi(c_1, c_2, \dots, c_n, \zeta_1, \zeta_2, \dots, \zeta_n)$ , kuantum mekanik sistemi temsil eden Schrödinger denkleminin olası çözümü olsun. Eğer varyasyon tekniğinde olduğu gibi parametre eniyilemesi yapıp  $c_i$  ve  $\zeta_i$  değerleri belirlenecekse bu durumda başlangıç nüfusunun bireyleri  $c_i$  ve  $\zeta_i$ 'lerin rastgele belirlenmiş değerlerinden oluşur. Bu değerler dalga fonksiyonunun analitik ifadesinde kullanılır ve elde edilen bu analitik ifade kullanılarak hesaplamalar yapılır. Eğer dalga fonksiyonu eniyilemesi yapılacaksa  $c_i$  ve  $\zeta_i$ 'lerin rastgele belirlenen değerleri kullanılarak dalga fonksiyonunun sayısal değerlerinden oluşan başlangıç nüfusu oluşturulur ve bu dalga fonksiyonlarının her biri bir birey alınır. Hesaplamalar bu sayısal dalga fonksiyonu üzerinden yapılır. Böylece analitik ifade  $c_i$  ve  $\zeta_i$ 'ler bir kez kullanılmış olur. Toplam birey sayısı nüfus büyüklüğü ya da sayısı olarak adlandırılır.

$A_n$ , herhangi bir bireyin normalizasyon sabiti olmak üzere,

$$A_n^2 \langle \psi_n | \psi_n \rangle = A_n^2 \int_{\text{tümuzay}} \psi_n^* \psi_n dV = 1 \quad (5.1)$$

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.

## 5.2. Sonsuz Küresel Kuantum Nokta Yapı için Sayısal Çözümler

Merkezinde hidrojen tipi bir safsızlık bulunan küresel bir kuantum nokta yapının elektronik hamiltoniyeni  $H$ , etkin kütle yaklaşımıyla atomik birimlerde,

$$H = \sum_{i=1}^n \left( -\frac{\nabla_i^2}{2m^*} - \frac{Z}{\epsilon r_i} \right) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{1}{\epsilon r_{ij}} + V(r) \quad (5.2)$$

şeklindedir. Burada  $Z$ , safsızlıktaki yük sayısı,  $r_i$ , elektronun safsızlığa olan uzaklığı,  $r_{ij}$ , elektronlar arası uzaklığı,  $m^*$ , etkin kütle,  $\epsilon$ , ortamın dielektrik sabitini göstermektedir.  $V(r)$ , dış sınırlayıcı potansiyel olup,  $a$  nokta yarıçapı olmak üzere,

$$V(r) = \begin{cases} 0 & , r < a \\ \infty & , r \geq a \end{cases} \quad (5.3)$$

biçiminde sonsuz küresel simetrik potansiyel alınmıştır. Hamiltoniyen için Schrödinger denklemi,

$$H\psi(1,2,\dots,n) = E\psi(1,2,\dots,n) \quad (5.4)$$

ile verilir. Burada  $E$  hamiltoniyen operatörünün enerji özdeğeri ve  $\psi$ 'de bu operatörün öz fonksiyonudur. Antisimetrik  $\psi$  özfonksiyonu, kapalı kabuk sistemler için tek elektron spin orbitallerinden,  $\phi_p$ , oluşan slater determinant dalga fonksiyonu şeklinde ifade edilebilir ve kısaca,

$$\psi(1,2,\dots,n) = (1/n!)^{1/2} \det|\phi_1(1)\phi_2(2),\dots,\phi_p(n)| \quad (5.5)$$

biçiminde gösterilebilir. Burada  $(1/n!)^{1/2}$ , normalizasyon katsayısı,  $p \rightarrow n\ell m_\ell m_s$ , kuantum sayılarını,  $1,2,\dots,n$  sayıları da elektronları göstermektedir. Kuantum nokta yapının enerjisinin beklenen değeri HFR yöntemiyle,

$$E = \langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_{p=1}^n (T_p + V_p) + \sum_{p=1}^n \sum_{p=1}^n (J_{pq} + \delta_{m_s, m'_s} K_{pq}) \quad (5.6)$$

ifadesiyle verilir. Burada  $T_p$ , kinetik enerji,  $V_p$ , potansiyel enerji,  $J_{pq}$ , coulomb enerjisi ve  $K_{pq}$ , değiş tokuş enerjisidir. Bu integraller atomik sistemler için birçok

fizikçi tarafından çalışılmıştır (Joy ve Parr 1957, Yakar ve ark. 2006). Bu enerji integralleri tek elektron spin orbitalleri üzerinden atomik birimde,

$$V_p = \int \phi_p^*(1) \left( \frac{-Z}{\epsilon r} \right) \phi_p(1) d^3 r_1 \quad (5.7)$$

$$T_p = \int \phi_p^*(1) \left( \frac{-\nabla^2}{2m^*} \right) \phi_p(1) d^3 r_1 \quad (5.8)$$

$$J_{p,q} = \int \phi_p^*(1) \phi_q^*(2) \left( \frac{1}{\epsilon r_{12}} \right) \phi_p(1) \phi_q(2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (5.9)$$

$$K_{p,q} = \int \phi_p^*(1) \phi_q^*(2) \left( \frac{1}{\epsilon r_{12}} \right) \phi_p(1) \phi_q(2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (5.10)$$

şeklinde yazılır. Burada  $p$  ve  $q$  tek elektron spin orbitallerinin kuantum sayılarını göstermektedir. (5.5) ifadesinde slater determinantını oluşturan tek elektron spin orbitallerinin uzaysal kısmı  $\phi_p$ ,  $\chi_k$  ile gösterilen STO'ların lineer toplamı ile

$$\phi_p = \sum_{k=1}^{\sigma} c_{pk} \chi_k \quad (5.11)$$

biçiminde yazılabilir. Burada  $\chi_k$ ,  $k$ . STO'ları,  $k \rightarrow n_i \ell_i m_i$ , STO'lar için kuantum sayılarını,  $\sigma$ , orbital sayısını ve  $c_{ik}$ , orbitallerin lineer toplam katsayılarını göstermektedir. STO'ların genel formu,

$$\chi_{n_i \ell_i m_i}(\zeta_i, r\theta\phi) = N_{n_i}(\zeta_i) r^{n_i-1} e^{-\zeta_i r} Y_{\ell_i m_i}(\theta, \phi) \quad (5.12)$$

ile verilir (Slater 1930, 1951, 1960). Burada  $\zeta_i$ , orbital üsteli,  $Y_{\ell_i m_i}(\theta, \phi)$  de Condon-Shortly fazında kompleks küresel harmonik fonksiyonları göstermektedir.  $N_{n_i}(\zeta_i)$  ise normalizasyon katsayıları olup  $a$  yarıçaplı bir nokta için,

$$N_{n_i}(\zeta_i) = \frac{(2\zeta_i)^{n_i+1/2}}{[\gamma(2n_i+1, 2\zeta_i a)]^{1/2}} \quad (5.13)$$

biçimindedir. Burada  $\gamma(a+1, x)$ 'lar tam olmayan (incomplete) gama fonksiyonları olarak bilinir (Arfken 1985). (5.11) ve (5.12), (5.7) ve (5.8)'de yerlerine konulursa potansiyel ve kinetik enerji integralleri overlap (örtüşme) integralleri cinsinden yazılabilir.

$$V_p = -\sum_{i=1}^{\sigma} \sum_{j=1}^{\sigma} c_{p n_i \ell_i m_i}^* c_{p n_j \ell_j m_j} \left\{ \frac{\zeta_i + \zeta_j}{n_i + n_j} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) + N_{n_i}(\zeta_i) N_{n_j}(\zeta_j) \frac{e^{-(\zeta_i + \zeta_j) a} a^{n_i + n_j}}{n_i + n_j} \right\} \quad (5.14)$$

$$T_p = \sum_{i=1}^{\sigma} \sum_{j=1}^{\sigma} c_{p n_i \ell_i m_i}^* c_{p n_j \ell_j m_j} \left\{ \frac{[\ell_j(\ell_j + 1) - n_j(n_j - 1)](\zeta_i + \zeta_j)^2}{2(n_i + n_j)(n_i + n_j - 1)} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) + \frac{[\ell_j(\ell_j + 1) - n_j(n_j - 1)] N_{n_i}(\zeta_i) N_{n_j}(\zeta_j) e^{-(\zeta_i + \zeta_j) a} a^{n_i + n_j - 1}}{2(n_i + n_j - 1)} \left( 1 + \frac{(\zeta_i + \zeta_j) a}{n_i + n_j} \right) + \frac{n_j \zeta_j (\zeta_i + \zeta_j)}{n_i + n_j} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) + N_{n_i}(\zeta_i) N_{n_j}(\zeta_j) \bullet \frac{n_j \zeta_j}{n_i + n_j} e^{-(\zeta_i + \zeta_j) a} a^{n_i + n_j} - \frac{(\zeta_j)^2}{2} S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) \right\} \quad (5.15)$$

(5.14) ve (5.15)'de verilen denklemlerde  $S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j)$  integrali  $a$  yarıçaplı bir hidrojen benzeri safsızlık için örtüşme integrali olup, tam olmayan gama fonksiyonları cinsinden,

$$S_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) = \int_0^a \chi_{n_i \ell_i m_i}^*(\zeta_i, a \theta \phi) d^3 r = \frac{N_{n_i}(\zeta_i) N_{n_j}(\zeta_j)}{(\zeta_i + \zeta_j)^{n_i + n_j + 1}} \gamma(n_i + n_j + 1, (\zeta_i + \zeta_j) a) \delta_{\ell_i \ell_j} \delta_{m_i m_j} \quad (5.16)$$

şeklinde tanımlanabilir. Burada  $\delta_{ij}$ , kronecker delta fonksiyonudur. Aynı şekilde (5.11) ve (5.12), (5.9) ve (5.10)'da yerine taşınarak coulomb integrali ve değiş tokuş integrali tam olmayan gama fonksiyonları cinsinden yazılabilir (Çakır 2007(doktora tezi)). Yapacağımız hesaplamalarda tek elektron durumu ele alınacağından bu fonksiyonların ayrıntısına girmeyeceğiz.

### 5.3. Sonlu Küresel Kuantum Nokta Yapı için Sayısal Çözümler

Merkezinde hidrojen tipi bir safsızlık bulunan, sonlu küresel bir potansiyel engeline sahip  $GaAs / Al_xGa_{1-x}As$  kuantum nokta yapının elektronik hamiltoniyeni  $H$ , atomik birimlerde etkin kütle yaklaşımıyla,

$$H = \sum_{i=1}^n \left( -\frac{\nabla_i^2}{2m^*} - \frac{Z}{\epsilon r_i} \right) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{1}{\epsilon r_{ij}} + V(r) \quad (5.17)$$

şeklindedir. Burada  $Z$ , safsızlıktaki yük sayısı,  $r_i$ , elektronun safsızlığa olan uzaklığı,  $r_{ij}$  elektronlar arası uzaklığı,  $m^*$ , etkin kütle,  $\epsilon$ , ortamın dielektrik sabitini göstermektedir.  $V(r)$ , dış sınırlayıcı potansiyel olup,  $a$  nokta yarıçapı olmak üzere,

$$V(r) = \begin{cases} 0 & , r < a \\ V & , r \geq a \end{cases} \quad (5.18)$$

biçiminde sonlu küresel simetrik potansiyel alınmıştır. Bu durumda hamiltoniyen ifadesi nokta yapının içinde ve dışında ayrı ayrı yazılmalıdır.

$$H^{r < a} = \sum_{i=1}^n \left( -\frac{\nabla_i^2}{2m_1} - \frac{Z}{\epsilon_1 r_i} \right) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{1}{\epsilon_1 r_{ij}} \quad , \quad r < a \quad (5.19a)$$

$$H^{r > a} = \sum_{i=1}^n \left( -\frac{\nabla_i^2}{2m_2} - \frac{Z}{\epsilon_2 r_i} \right) + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \frac{1}{\epsilon_2 r_{ij}} + V \quad , \quad r \geq a \quad (5.19b)$$

Toplam hamiltoniyeni kuyu içindeki ve kuyu dışındaki hamiltoniyenlerin toplamı şeklinde yazabiliriz.

$$H = H^{r < a} + H^{r > a} \quad (5.20)$$

Bu durumda Schrödinger denklemi,

$$H\psi(1,2,\dots,n) = E\psi(1,2,\dots,n) \quad (5.21)$$

biçiminde yazılır.  $E$ , hamiltoniyen operatörünün enerji özdeğeri ve  $\psi$ 'de bu operatörün özfonksiyonudur. Burada asimetrik  $\psi(1,2,\dots,n)$  özfonksiyonları, kapalı

kabuk sistemler için tek elektron spin orbitalleri  $\phi_p$ 'nin oluşturduğu slater determinant dalga fonksiyonu şeklinde ifade edilebilir.

$$\psi(1,2,\dots,n) = (1/n!)^{1/2} \det|\phi_1(1)\phi_2(2),\dots,\phi_p(n)| \quad (5.22)$$

Burada  $(1/n!)^{1/2}$ , normalizasyon katsayısı,  $p \rightarrow n\ell m_\ell m_s$ , kuantum sayılarını, 1,2,...,n sayıları da elektronları göstermektedir. Tek elektron spin orbitalleri cinsinden kuantum nokta yapısının enerjisi,

$$E = \langle \psi^{r<a} | H^{r<a} | \psi^{r<a} \rangle + \langle \psi^{r>a} | H^{r>a} | \psi^{r>a} \rangle = \sum_{p=1}^n (T_p + V_p) + \sum_{p=1}^n \sum_{p<q}^n (J_{pq} + \delta_{m_s, m'_s} K_{pq}) \quad (5.23)$$

ile verilir. Burada  $T_p$ , kinetik enerji,  $V_p$ , potansiyel enerji,  $J_{pq}$ , coulomb enerjisi ve  $K_{pq}$ , değiş tokuş enerjisi olmak üzere,

$$V_p = V_p^{r<a} + V_p^{r>a} \quad (5.24)$$

$$T_p = T_p^{r<a} + T_p^{r>a} \quad (5.25)$$

$$J_{p,q} = J_{p_{\eta<a}, q_{r_2<a}} + J_{p_{\eta<a}, q_{r_2>a}} + J_{p_{\eta>a}, q_{r_2<a}} + J_{p_{\eta>a}, q_{r_2>a}} \quad (5.26)$$

$$K_{p,q} = K_{p_{\eta<a}, q_{r_2<a}} + K_{p_{\eta<a}, q_{r_2>a}} + K_{p_{\eta>a}, q_{r_2<a}} + K_{p_{\eta>a}, q_{r_2>a}} \quad (5.27)$$

biçiminde yazılabilir. Atomik birimlerde bu enerji integralleri,

$$V_p^{r<a} = \int \phi_{pi}^*(1) \left( \frac{-Z}{\epsilon_1 r} \right) \phi_{pi}(1) d^3 r_1 \quad (5.28a)$$

$$V_p^{r>a} = \int \phi_{pd}^*(1) \left( \frac{-Z}{\epsilon_2 r} + V \right) \phi_{pd}(1) d^3 r_1 \quad (5.28b)$$

$$T_p^{r<a} = \int \phi_{pi}^*(1) \left( \frac{-\nabla^2}{2m_1} \right) \phi_{pi}(1) d^3 r_1 \quad (5.29a)$$

$$T_p^{r>a} = \int \phi_{pd}^*(1) \left( \frac{-\nabla^2}{2m_2} \right) \phi_{pd}(1) d^3 r_1 \quad (5.29b)$$

$$J_{p_{\eta<a}, q_{r_2<a}} = \int_{r<a} \phi_{pi}^*(1) \phi_{qi}^*(2) \left( \frac{1}{\epsilon_1 r_{12}} \right) \phi_{pi}(1) \phi_{qi}(2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (5.30a)$$

$$J_{p_{\eta < a}, q_{r_2 > a}} = \int_{r_1=0}^a \int_{r_2=a}^{\infty} \phi_{pi}^*(1) \phi_{qd}^*(2) \left( \frac{1}{\epsilon_1 r_{12}} \right) \phi_{pi}(1) \phi_{qd}(2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (5.30b)$$

$$J_{p_{\eta > a}, q_{r_2 < a}} = \int_{r_2=0}^a \int_{r_1=a}^{\infty} \phi_{pd}^*(1) \phi_{qi}^*(2) \left( \frac{1}{\epsilon_1 r_{12}} \right) \phi_{pd}(1) \phi_{qi}(2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (5.30c)$$

$$J_{p_{\eta > a}, q_{r_2 > a}} = \int_{r > a} \phi_{pd}^*(1) \phi_{qd}^*(2) \left( \frac{1}{\epsilon_2 r_{12}} \right) \phi_{pd}(1) \phi_{qd}(2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (5.30d)$$

$$K_{p_{\eta < a}, q_{r_2 < a}} = \int_{r < a} \phi_{pi}^*(1) \phi_{qi}^*(2) \left( \frac{1}{\epsilon_1 r_{12}} \right) \phi_{pi}(1) \phi_{qi}(2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (5.31a)$$

$$K_{p_{\eta < a}, q_{r_2 > a}} = \int_{r_1=0}^a \int_{r_2=a}^{\infty} \phi_{pi}^*(1) \phi_{qd}^*(2) \left( \frac{1}{\epsilon_1 r_{12}} \right) \phi_{pi}(1) \phi_{qd}(2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (5.31b)$$

$$K_{p_{\eta > a}, q_{r_2 < a}} = \int_{r_2=0}^a \int_{r_1=a}^{\infty} \phi_{pd}^*(1) \phi_{qi}^*(2) \left( \frac{1}{\epsilon_1 r_{12}} \right) \phi_{pd}(1) \phi_{qi}(2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (5.31c)$$

$$K_{p_{\eta > a}, q_{r_2 > a}} = \int_{r > a} \phi_{pd}^*(1) \phi_{qd}^*(2) \left( \frac{1}{\epsilon_2 r_{12}} \right) \phi_{pd}(1) \phi_{qd}(2) d^3 r_1 d^3 r_2 \quad (5.31d)$$

şeklinde yazılabilir. Burada  $p$  ve  $q$  tek elektron spin orbitallerinin kuantum sayılarını,  $i$  ve  $d$  sırasıyla kuyu içindeki ve dışındaki dalga fonksiyonunu göstermektedir. Kuantum nokta yapısı küresel simetrik ve merkezinde bir safsızlık yükü bulunduğu için atomik yapıya benzemektedir. Atomlar için (5.22)'de verilen slater determinantını oluşturan tek elektron spin orbitallerinin uzaysal kısmı  $\phi_p$ , çekirdek yakınlarında ve uzaklarında iyi davranışlı  $\chi_k$  ile gösterilen ve tam bir set olan slater tipi orbitallerin lineer toplamı olarak,

$$\phi_p^{r < a} = \sum_{k=1}^{\sigma} c_{pk} \chi_k \quad (5.32a)$$

$$\phi_p^{r > a} = \sum_{k=1}^{\beta} c_{pk} \chi_k \quad (5.32b)$$

şeklinde yazılabilir. Dolayısı ile kuantum nokta yapılarının elektronik özelliklerini hesaplamak için böyle bir dalga fonksiyonu kullanılabilir. Burada  $\chi_k$ ,  $k$ . STO'ları



$k \rightarrow n_i \ell_i m_i$ , STO'lar için kuantum sayılarını,  $\sigma$ , orbital sayısını ve  $c_{ik}$ , orbitallerin lineer toplam katsayılarını göstermektedir.(5.32a) ve (5.32b) ifadeleri,

$$\int_{r<a} |\phi_p^{r<a}| dv + \int_{r>a} |\phi_{pd}^{r>a}| dv = 1 \quad (5.33)$$

Normalizasyon şartını ve sınırlarda süreklilik şartları olan,

$$\begin{aligned} \psi_p^{r<a}(r=a) &= \psi_p^{r>a}(r=a) \\ \frac{d}{m_1 dr} [\psi_p^{r<a}(r=a)] &= \frac{d}{m_2 dr} [\psi_p^{r>a}(r=a)] \end{aligned}$$

şeklinde dalga fonksiyonunun kendisinin ve birinci türevinin sürekliliğini sağlar.

(5.32)'deki normalize olmayan STO'ların genel formu,

$$\chi_{n_i \ell_i m_i}(\zeta_i, r\theta\phi) = r^{n_i-1} e^{-\zeta_i r} Y_{\ell_i m_i}(\theta, \phi) \quad (5.34)$$

ile verilir. Burada  $\zeta_i$ , orbital üsteli,  $Y_{\ell_i m_i}(\theta, \phi)$ , Condon-Shortly fazında kompleks küresel harmonik fonksiyonlarıdır. (5.32) ve (5.34), (5.28) ve (5.29)'da yerlerine konulursa overlap integralleri cinsinden potansiyel ve kinetik enerji integralleri,

$$V_p^{r<a} = - \sum_{i=1}^{\sigma} \sum_{j=1}^{\sigma} c_{pn_i \ell_i m_i}^* c_{pn_j \ell_j m_j} \left\{ \frac{\zeta_i + \zeta_j}{n_i + n_j} S^{r<a}{}_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) - \frac{e^{-(\zeta_i + \zeta_j)a} a^{n_i + n_j}}{n_i + n_j} \right\} \quad (5.35a)$$

$$V_p^{r>a} = - \sum_{i=1}^{\beta} \sum_{j=1}^{\beta} c_{pn_i \ell_i m_i}^* c_{pn_j \ell_j m_j} \left\{ \frac{\zeta_i + \zeta_j}{n_i + n_j} S^{r>a}{}_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) - \frac{e^{-(\zeta_i + \zeta_j)a} a^{n_i + n_j}}{n_i + n_j} \right\} \quad (5.35b)$$

$$\begin{aligned} T_p^{r<a} &= \sum_{i=1}^{\sigma} \sum_{j=1}^{\sigma} \frac{c_{pn_i \ell_i m_i}^* c_{pn_j \ell_j m_j}}{m_i} \left\{ \frac{[\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)](\zeta_i + \zeta_j)^2}{2(n_i + n_j)(n_i + n_j - 1)} S^{r<a}{}_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) + \right. \\ &\quad \left. \frac{[\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)] e^{-(\zeta_i + \zeta_j)a} a^{n_i + n_j - 1}}{2(n_i + n_j - 1)} \left( 1 + \frac{(\zeta_i + \zeta_j)a}{n_i + n_j} \right) + \right. \\ &\quad \left. \frac{n_j \zeta_j (\zeta_i + \zeta_j)}{n_i + n_j} S^{r<a}{}_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) + \right. \\ &\quad \left. \frac{n_j \zeta_j}{n_i + n_j} e^{-(\zeta_i + \zeta_j)a} a^{n_i + n_j} - \frac{(\zeta_j)^2}{2} S^{r<a}{}_{n_i \ell_i m_i, n_j \ell_j m_j}(\zeta_i, \zeta_j) \right\} \quad (5.36a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_p^{r>a} = & \sum_{i=1}^{\beta} \sum_{j=1}^{\beta} \frac{c_{pn_i, m_i}^* c_{pn_j, l_j, m_j}}{m_2} \left\{ \frac{[\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)](\zeta_i + \zeta_j)^2}{2(n_i + n_j)(n_i + n_j - 1)} S_{n_i, m_i, n_j, l_j, m_j}^{r>a}(\zeta_i, \zeta_j) + \right. \\
& \frac{[\ell_j(\ell_j+1) - n_j(n_j-1)] e^{-(\zeta_i + \zeta_j)a} a^{n_i + n_j - 1}}{2(n_i + n_j - 1)} \left( -1 - \frac{(\zeta_i + \zeta_j)a}{n_i + n_j} \right) + \\
& \left. \frac{n_j \zeta_j (\zeta_i + \zeta_j)}{n_i + n_j} S_{n_i, m_i, n_j, l_j, m_j}^{r>a}(\zeta_i, \zeta_j) - \right. \\
& \left. \frac{n_j \zeta_j}{n_i + n_j} e^{-(\zeta_i + \zeta_j)a} a^{n_i + n_j} - \frac{(\zeta_j)^2}{2} S_{n_i, m_i, n_j, l_j, m_j}^{r>a}(\zeta_i, \zeta_j) \right\} \quad (5.36b)
\end{aligned}$$

yazılabilir. Buradaki  $S_{n_i, m_i, n_j, l_j, m_j}^{r<a}(\zeta_i, \zeta_j)$  ve  $S_{n_i, m_i, n_j, l_j, m_j}^{r>a}(\zeta_i, \zeta_j)$  sırasıyla  $a$  yarıçaplı sonlu potansiyelle sınırlandırılmış bir kuantum nokta yapısının içindeki ve dışındaki örtüşme integralleri olup, tam olmayan gama fonksiyonları cinsinden,

$$\begin{aligned}
S_{n_i, m_i, n_j, l_j, m_j}^{r<a}(\zeta_i, \zeta_j) &= \int_0^a \chi_{n_i, l_i, m_i}^*(\zeta_i, a\theta\phi) \chi_{n_j, l_j, m_j}(\zeta_j, a\theta\phi) d^3r \\
&= \frac{\gamma(n_i + n_j + 1, (\zeta_i + \zeta_j)a)}{(\zeta_i + \zeta_j)^{n_i + n_j + 1}} \delta_{l_i, l_j} \delta_{m_i, m_j} \quad (5.37a)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_{n_i, m_i, n_j, l_j, m_j}^{r>a}(\zeta_i, \zeta_j) &= \int_a^\infty \chi_{n_i, l_i, m_i}^*(\zeta_i, a\theta\phi) \chi_{n_j, l_j, m_j}(\zeta_j, a\theta\phi) d^3r \\
&= \frac{\Gamma(n_i + n_j + 1, (\zeta_i + \zeta_j)a)}{(\zeta_i + \zeta_j)^{n_i + n_j + 1}} \delta_{l_i, l_j} \delta_{m_i, m_j} \quad (5.37b)
\end{aligned}$$

şeklinde tanımlanabilir. Burada  $\delta_{ij}$ 'ler Kronecker delta fonksiyonları,  $\gamma(a+1, x)$  ve  $\Gamma(a+1, x)$ 'ler tam olmayan gama fonksiyonlarıdır (Arfken 1985). Aynı şekilde (5.32) ve (5.34), (5.30) ve (5.31)'da yerlerine konulursa coulomb integrali ve değiş tokuş integrali tam olmayan gama fonksiyonları cinsinden yazılabilir (Çakır 2007(doktora tezi)).

## 6. HESAPLAMALAR, SONUÇ VE TARTIŞMA

Virial teoreminin atomlarda potansiyel ve yarıçapla olan doğrudan ilişkisini biliyoruz. Buradan yola çıkarak karmaşık sistemlerin yapısı ve oluşumu ile ilgili bilgi sahibi olabiliriz. Kimyasal birleşmelerde, atomlar ayrık iken ve birleşik oluştururken sahip oldukları potansiyel ve kinetik enerji oranları dikkat çekmektedir. Böyle sistemler oluşurken özellikle enerji değişimleri bize fikir vermektedir.

Teknolojideki son gelişmelerle araştırmalar farklı büyüklüklerdeki yapılara genişlemiştir. Son yıllarda özellikle nano yapılar üzerine çalışmalar yoğunlaşmıştır.

Bilgisayar teknolojisinin süratle ilerlemesi bilim adına yeni ufuklar açmaktadır. Hazırlanan bilgisayar programları ile hesaplamalar çok kısa sürelerde yapılmakta, çözüm yolları kolaylıkla önceden kestirilmektedir. Çözülmesi imkansız problemler bu sayede kolaylıkla çözülebilmektedir.

Bu bölümde yapılan hesaplamalarda sayısal çözüm tekniklerinden KGA yöntemi ve HFR yöntemi kullanılarak hazırlanmış Ek-1, Ek-2, Ek-3, Ek-4'te verilen programlar (Çakır 2007(doktora tezi)) kullanıldı. Hesaplamalarda merkezinde hidrojen tipi safsızlık bulunan tek elektronlu sonsuz ve sonlu küresel simetrik potansiyelle sınırlandırılmış iki farklı kuantum nokta yapı ele alındı. Her iki yapıda da dalga fonksiyonları, bir minimizasyon yöntemi olan KGA yönteminin HFR yöntemiyle birleştirilmesiyle elde edildi. Bu dalga fonksiyonları kullanılarak sistemin potansiyel ve kinetik enerji değerleri bulunarak bunların oranı olan virial katsayıları elde edildi. Her iki yapısında  $1s(1s)$ ,  $1p(2p)$  ve  $1d(3d)$  enerji seviyelerinde virial katsayıları belirlendi. Hesaplamalarda;

- 1- Sonsuz küresel kuantum nokta yapıda, farklı yarıçap değerlerine,
- 2- Sonlu küresel kuantum nokta yapıda ise,
  - a) Sabit potansiyel, farklı yarıçap değerlerine,
  - b) Farklı potansiyel, farklı yarıçap değerlerine,
  - c) Sabit yarıçap, farklı potansiyel değerlerine,

karşılık gelen virial katsayıları bulunmuştur. Her durum için, elde edilen virial katsayılarının farklı nokta yarıçapı ve farklı sınırlandırıcı potansiyel değerlerine göre çizilen grafikleri fit edilerek, eğrilere karşılık gelen denklemler yazılmıştır.

## 6.1.Sonsuz Küresel Kuantum Nokta Yapıda Hesaplamalar

Sonsuz derinlikte potansiyel engeli ile sınırlandırılmış içerisinde hidrojen tipi safsızlık bulunan tek elektronlu küresel kuantum nokta için daha önceden KGA ve HFR yöntemi kullanılarak hazırlanmış programlar (Çakır 2007(doktora tezi)) ile hesaplamalar yapıldı. Hesaplamalarda atomik birimler kullanıldı. Atomik birimlerde 1 Bohr yarıçapı  $a^* = 100 \text{ \AA}$ , etkin Rydberg enerjisi  $R_y = 5,72 \text{ meV}$ , materyal parametreleri; etkin kütle  $m^* = 0,067 m_0$  ve  $\epsilon = 13,18$  (Adachi, 1994) olarak alındı.

Bu hesaplamalarda 1s(1s), 1p(2p), 1d(3d) durumları için nokta yarıçapı  $R = 0,5 a^*$ 'dan  $R = 50 a^*$ 'a kadar değiştirilerek, bu yarıçaplara karşılık gelen dalga fonksiyonları Ek-1'de verilen bilgisayar programı kullanılarak elde edildi. Dalga fonksiyonları hesaplanırken 3000-5000 arasında iterasyon yapılarak, sonuçlar en iyi hassasiyet sağlanana kadar sürdürüldü. Toplam potansiyel enerji, toplam kinetik enerji ve bunların oranı ile virial katsayıları Ek-2'de verilen bilgisayar programı kullanılarak ayrıca hesaplandı. Elde edilen sonuçlarla oluşturulan grafiklerdeki eğrilere uyan denklemler ve denklem katsayıları fit yöntemiyle belirlendi. Çizilen eğrilerin fit edilmesiyle bulunan denklemler %98-%100 aralığında değişen hassasiyetle uyum sağlamaktadır.

Tablo 6.1.'de sonsuz küresel potansiyel ile sınırlandırılmış bir elektronlu kuantum nokta yapının 1s, 1p ve 1d durumları için farklı kuantum nokta yarıçaplarında hesaplanan virial katsayıları verildi. Bu katsayıların 1s, 1p, 1d durumları için nokta yapı yarıçapına göre değişimi ve fit yöntemiyle elde edilen eğrileri sırasıyla Şekil 6.1., Şekil 6.2. ve Şekil 6.3.'de çizildi. Bu tablo ve şekiller incelendiğinde yarıçap arttıkça virial katsayıları gittikçe azalarak hidrojen atomunun virial katsayı olan -2 limitine gitmektedir. Kuantum nokta yarıçapı 1s durumunda  $R = 7,5 a^*$ , 1p durumunda  $R = 20 a^*$ , 1d durumunda  $R = 35 a^*$ , değerlerinde ve daha büyük yarıçap değerlerinde virial katsayıları yaklaşık -2 limitinde hesaplandı.

Tablo 6.1.'de görüldüğü gibi kuantum nokta yapının 1p ve 1d uyarılmış seviyelerinde küçük yarıçap değerlerindeki virial katsayıları 1s taban durumundaki değerlere göre daha büyüktür. Kuantum nokta yapının 1p ve 1d uyarılmış

durumlarında toplam potansiyele merkezkaç potansiyeli de pozitif katkı sağlamaktadır. Böylece hidrojen atomunun virial limiti olan -2 değerine, daha büyük yarıçaplarda ulaşılmaktadır. Hidrojen atomu durumunun olduğu yarıçaplarda sınırlandırıcı potansiyelin etkisi çok azdır. Bu durumda elektron safsızlığa bağlı bulunmaktadır.

**Tablo 6.1.** Sonsuz potansiyel ile sınırlandırılmış içerisinde safsızlık bulunan bir elektronlu küresel kuantum noktada 1s, 1p, 1d durumlarında hesaplanan virial katsayıları.

R(dot)( a <sup>*</sup> )	Virial Katsayıları		
	1s durumu	1p durumu	1d durumu
0,5	-0,255969	-0,092781	-0,049479
1,0	-0,532094	-0,186971	-0,099214
1,5	-0,802974	-0,284506	-0,148573
2,0	-1,056442	-0,380578	-0,199659
2,5	-1,339763	-0,480315	-0,251064
3,0	-1,541584	-0,580325	-0,302158
3,5	-1,721545	-0,682379	-0,354190
4,0	-1,849275	-0,779806	-0,407516
4,5	-1,898652	-0,882765	-0,460037
5,0	-1,947011	-0,982270	-0,511719
5,5	-1,969117	-1,080141	-0,563659
6,0	-1,985894	-1,176138	-0,618404
6,5	-1,992022	-1,267601	-0,671180
7,0	-1,996084	-1,354407	-0,722408
7,5	-2,001541	-1,435638	-0,775577
8,0	-2,000410	-1,527954	-0,827827
8,5	-1,999688	-1,603455	-0,886492
9,0	-2,000365	-1,665661	-0,934564
9,5	-2,000151	-1,694865	-0,986843
10	-2,000992	-1,764749	-1,037949
15	-2,001552	-2,026433	-1,511377
20	-1,999996	-1,996614	-1,822140
25	-2,000011	-1,999659	-1,988026
30	-1,999917	-2,000288	-1,994171
35	-1,999999	-1,999985	-1,996499
40	-1,999999	-1,999987	-1,999556
45	-1,999999	-2,000010	-2,000185
50	-1,999986	-2,000000	-1,999490

1s, 1p, 1d durumlarında Şekil 6.1., Şekil 6.2., ve Şekil 6.3.'de çizilen virial katsayılarının kuantum nokta yarıçapına göre değişimi ve fit yöntemiyle uydurulan eğriler görülmektedir. Fit yöntemiyle uydurulan fonksiyon üstel fonksiyon yapısında olup,

$$y = y_0 + ae^{-bx^2}$$

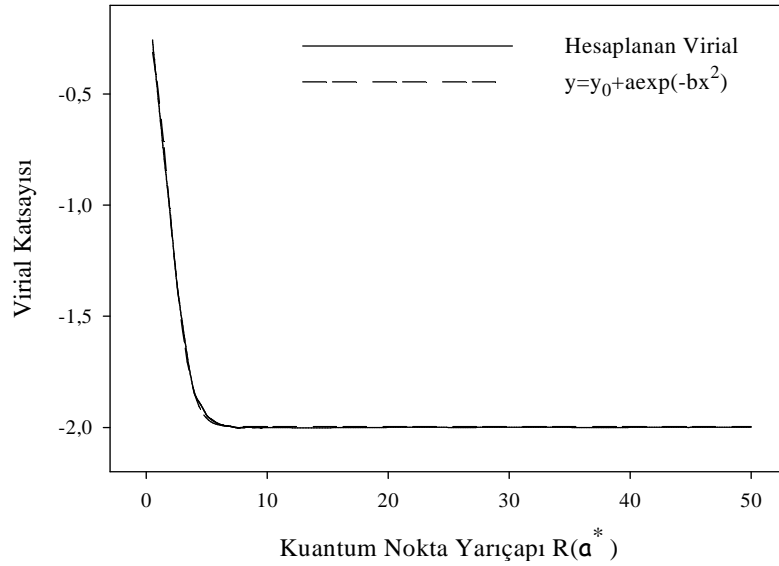
ile değişmektedir. Burada  $y_0$ , a ve b sabit denklem katsayıları olmak üzere,

1s durumunda,  $y_0 = -1,9963$ ,  $a = 1,7508$ ,  $b = 1,1552$ ,

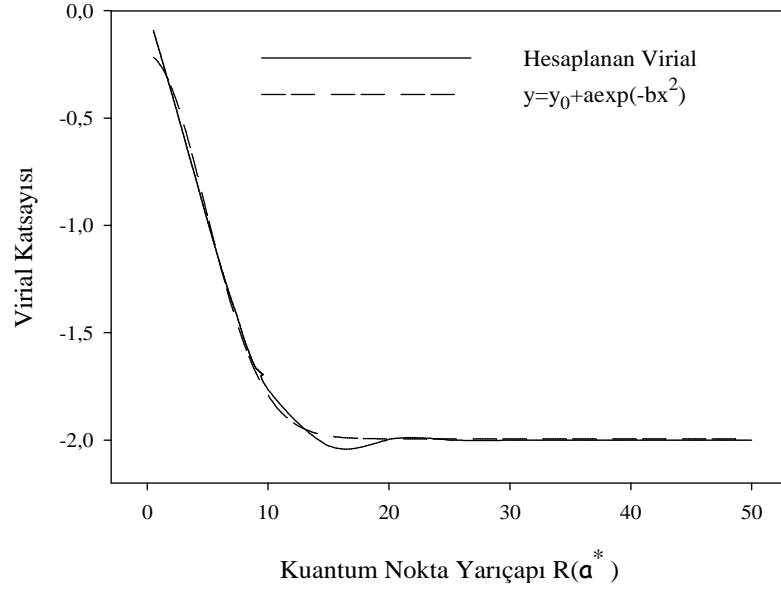
1p durumunda,  $y_0 = -1,9945$ ,  $a = 1,7867$ ,  $b = 0,0217$ ,

1d durumunda,  $y_0 = -1,9870$ ,  $a = 1,8162$ ,  $b = 0,0069$ ,

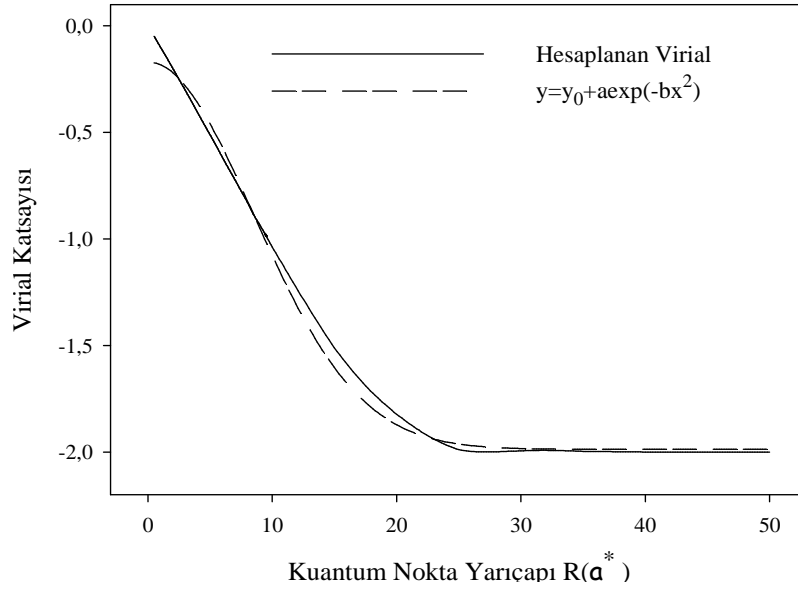
olarak bulundu.



**Şekil 6.1.** Sonsuz potansiyel ile sınırlandırılmış küresel kuantum noktası için 1s durumunda virialin yarıçapa göre değişimi.



**Şekil 6.2.** Sonsuz potansiyel ile sınırlandırılmış küresel kuantum noktası için 1p durumunda virialin yarıçapa göre değişimi.



**Şekil 6.3.** Sonsuz potansiyel ile sınırlandırılmış küresel kuantum noktası için 1d durumunda virialin yarıçapa göre değişimi.

## 6.2. Sonlu Küresel Kuantum Nokta Yapıda Hesaplamalar

Sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış içerisinde safsızlık bulunan tek elektronlu küresel kuantum nokta için 1s(1s), 1p(2p), 1d(3d) durumlarında KGA ve HFR yöntemleri kullanılarak dalga fonksiyonları belirlendi. Her bir seviyenin virial katsayıları belirlenen bu dalga fonksiyonları ile hesaplandı. Hesaplamalar merkezinde hidrojen tipi safsızlık bulunan GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As yapısı için yapıldı. Hesaplamalarda atomik birimler kullanıldı. Atomik birimlerde GaAs için etkin Bohr yarıçapı  $a^* = 100 \text{ \AA}$ , etkin Rydberg enerjisi  $R_y = 5,72 \text{ meV}$ , kuyu içinde GaAs'ın, kuyu dışında ise AlGaAs'ın materyal parametreleri alınmıştır. Bu parametreler;  $m_{GaAs} = 0,0665 m_0$ ,  $\epsilon_{GaAs} = 13,18$  ve  $m_{AlGaAs} = 0.0665 + 0.0835x$ ,  $\epsilon_{AlGaAs} = 13,18 - 3,12x$  olarak alınmıştır (Adachi, 1994). Burada  $m_0$ , serbest elektron kütlesi ve  $x$ , katkılanma oranıdır. Potansiyel engeli yüksekliği ise GaAs ve AlGaAs enerji bant yapılarının birbirlerine göre durumunu düzenleyen katkılanma oranı  $x$ 'e bağlı olarak  $V_0 = 0,2278 \text{ eV}$  olarak seçilmiştir.

İlk olarak sabit bir  $V_0$  potansiyel engeli ile sınırlandırılmış kuantum nokta yapı için, nokta yarıçapı  $R = 0,5 a^*$ 'dan  $R = 50 a^*$ 'a kadar değiştirilerek, bu yarıçaplara karşılık gelen dalga fonksiyonları Ek-3'de (Çakır 2007(doktora tezi)) verilen bilgisayar programı kullanılarak elde edildi. Toplam potansiyel enerji, toplam kinetik enerji ve bunların oranı ile virial katsayıları Ek-4'de (Çakır 2007(doktora tezi)) verilen bilgisayar programı kullanılarak ayrıca hesaplandı. Hesaplanan virial katsayıları grafiğe dökülerek, kuantum nokta yarıçapına göre virial değişimi incelendi. Bulunan eğrilere karşılık gelen fonksiyon denklemleri ve katsayıları fit yöntemi ile bulundu.

İkinci olarak farklı sınırlandırıcı potansiyel değerlerinde ( $V_0$ 'ın katlarında), yine kuantum nokta yarıçapı  $R = 0,5 a^*$ 'dan  $R = 50 a^*$ 'a kadar değiştirilerek virial katsayıları ayrı ayrı hesaplanmış, her durum için hesaplanan virial katsayıları aynı grafikte gösterilmiştir. Böylece çeşitli potansiyel değerleri için virial katsayılarının sınırlandırıcı potansiyele göre değişimi de incelendi.



Son olarak 1s, 1p ve 1d enerji seviyeleri için ayrı ayrı seçilen kuantum nokta yapı yarıçaplarında farklı sınırlandırıcı potansiyel değerlerine karşılık virial katsayıları hesaplandı. Hesaplanan virial katsayılarının farklı sınırlandırıcı potansiyel değerlerine göre çizilen eğrilerine uyan fonksiyon denklemleri fit yöntemiyle bulundu.

### 6.2.1. Sabit Potansiyel, Farklı Yarıçap Değerleri için Hesaplamalar

Tablo 6.2.'de sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış küresel kuantum nokta yapının 1s, 1p, 1d durumları için farklı kuantum nokta yarıçapına göre hesaplanan virial katsayıları görülmektedir. Hesaplanan bu virial katsayılarının farklı kuantum nokta yarıçapına göre değişimi ve fit yöntemiyle elde edilen eğriler 1s, 1p, 1d durumları için sırasıyla Şekil 6.4., Şekil 6.5. ve Şekil 6.6.'da çizildi.

Tablo 6.2.'de görüldüğü gibi kuantum nokta yapının 1s taban durumu  $R=0,5 a^*$ , 1p durumu  $R=0,5 a^*$ ,  $1 a^*$ , 1d durumu  $R=0,5 a^*$ ,  $1 a^*$ ,  $1,5 a^*$ , yarıçap değerlerinde virial katsayıları pozitif hesaplandı. Bu kuantum nokta yarıçap değerlerinde etkileşme potansiyelinin potansiyel engelinden büyük olduğu, böyle bir durumda elektronun kuantum nokta yapı dışında olacağı söylenebilir. Bu da bağlı olmayan durumların oluştuğunu göstermektedir. Küçük kuantum nokta yarıçapı değerlerinde hesaplanan virial katsayıları üst enerji seviyelerine gidildikçe pozitif olarak artmaktadır. Üst enerji seviyelerinde sistemin enerjisi potansiyel engelini aşacak miktarlara çıkmaktadır.

Virial katsayıları, 1s taban durumu için  $R=8 a^*$ , 1p birinci uyarılmış durum için  $R=25 a^*$  ve 1d ikinci uyarılmış durum için  $R=35 a^*$  yarıçap değerleri ve daha büyük yarıçap değerlerinde hidrojen atomu virial limiti olan -2 değerinde hesaplanmaktadır.

1s, 1p ve 1d durumları için hesaplanan virial katsayılarının nokta yapı yarıçapına göre değişimi ile oluşturulan eğrilere karşılık, fit yöntemiyle uydurulan fonksiyonlar da sonsuz küresel kuantum nokta hesaplamalarında elde edilen fonksiyonlarla aynı olup,

$y = y_0 + ae^{-bx^2}$  biçiminde üstel fonksiyondur. Burada  $y_0$ ,  $a$  ve  $b$  sabit denklemin katsayılarıdır. Bu sabitlerin değeri,

1s durumunda,  $y_0 = -1.9823$ ,  $a = 2.1336$ ,  $b = 0.2271$ ,

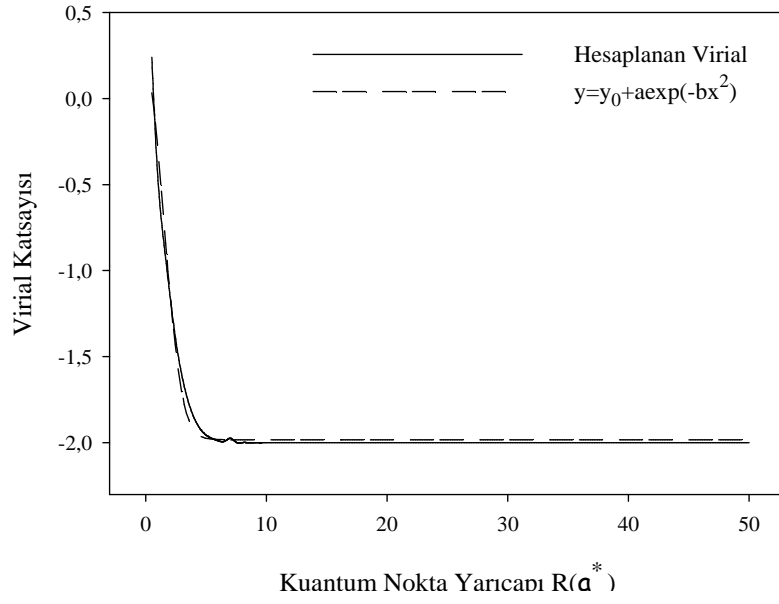
1p durumunda,  $y_0 = -1.9774$ ,  $a = 1.8890$ ,  $b = 0.0248$ ,

1d durumunda,  $y_0 = -1.9657$ ,  $a = 1.9383$ ,  $b = 0.0084$ ,

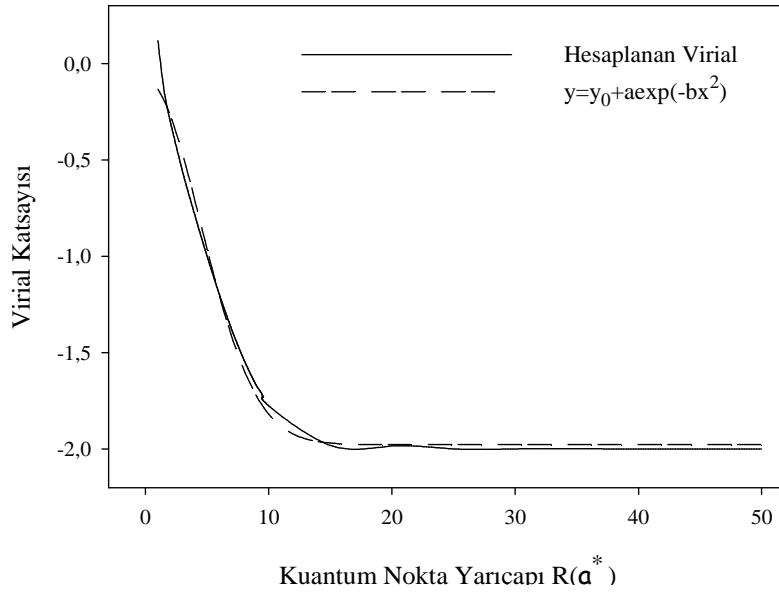
olarak bulundu.

**Tablo 6.2.** Sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış içerisinde safsızlık bulunan bir elektronlu küresel kuantum noktada 1s, 1p, 1d durumlarında hesaplanan virial katsayıları.

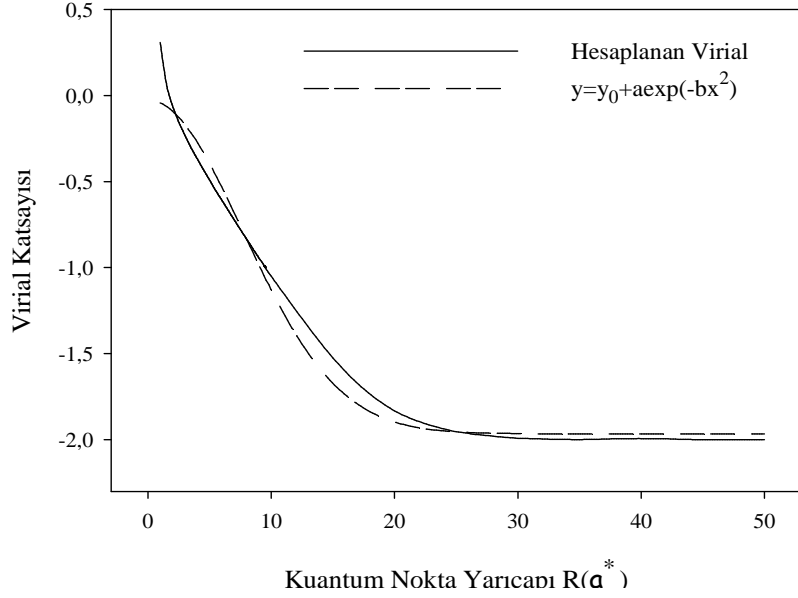
R(dot)( a <sup>*</sup> )	Virial Katsayıları		
	1s durumu	1p durumu	1d durumu
0,5	0,239366	1,225158	447,0172
1,0	-0,456274	0,119398	0,308159
1,5	-0,839530	-0,138608	0,068117
2,0	-1,140405	-0,299823	-0,060640
2,5	-1,411396	-0,433374	-0,154364
3,0	-1,611218	-0,560639	-0,231308
3,5	-1,756883	-0,677225	-0,303741
4,0	-1,855222	-0,786996	-0,367493
4,5	-1,919287	-0,896352	-0,430682
5,0	-1,956885	-1,001585	-0,491001
5,5	-1,976422	-1,102230	-0,552709
6,0	-1,989263	-1,200382	-0,608592
6,5	-1,993312	-1,293333	-0,666113
7,0	-1,994205	-1,381937	-0,722742
7,5	-1,998209	-1,463518	-0,778718
8,0	-1,999011	-1,539708	-0,834202
8,5	-1,999367	-1,608749	-0,888878
9,0	-1,999245	-1,672209	-0,943744
9,5	-1,999888	-1,728530	-0,997502
10	-2,000211	-1,776379	-1,050445
15	-2,000005	-1,982341	-1,524984
20	-1,999999	-1,984601	-1,832024
25	-1,999993	-1,999993	-1,953755
30	-1,999992	-1,999943	-1,991862
35	-1,999998	-1,999724	-1,999127
40	-1,999999	-2,000019	-1,993841
45	-2,000000	-1,999998	-1,999993
50	-2,000000	-2,000003	-1,999947



**Şekil 6.4.** Sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış küresel kuantum noktası için 1s durumunda virialin yarıçapa göre değişimi.



**Şekil 6.5.** Sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış küresel kuantum noktası için 1p durumunda virialin yarıçapa göre değişimi.



**Şekil 6.6.** Sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış küresel kuantum noktası için 1d durumunda virialin yarıçapa göre değişimi.

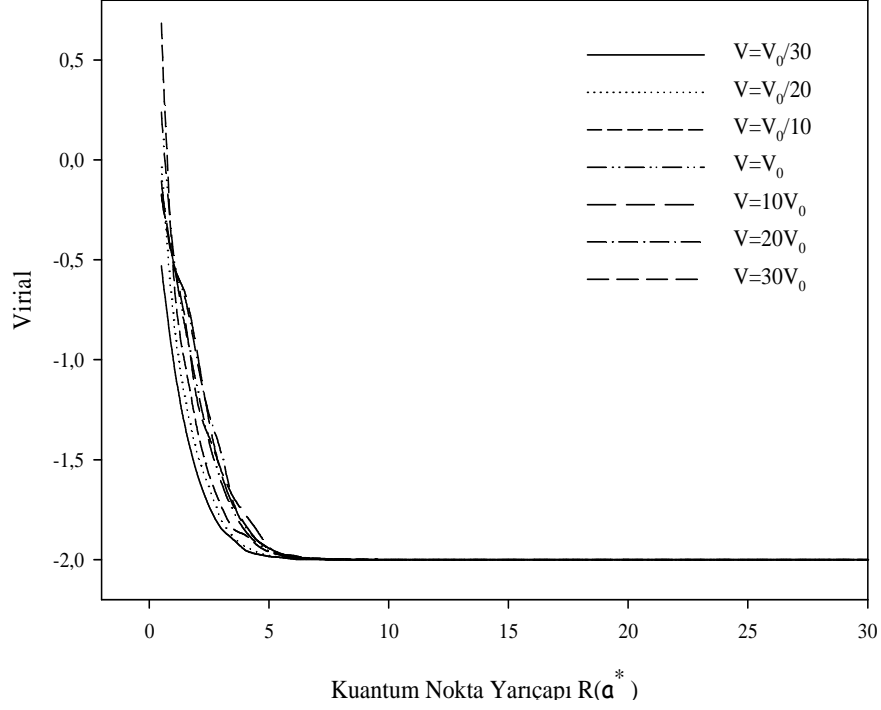
### 6.2.2. Farklı Potansiyel, Farklı Yarıçap Değerleri için Hesaplamalar

Sonlu potansiyel engeline sahip küresel kuantum nokta yapı için farklı potansiyel değerlerinde ( $V_0$ 'ın katlarında)  $R=0,5 a^*$ 'dan  $R=50 a^*$ 'a kadar yarıçap değerleri değiştirilerek 1s, 1p ve 1d seviyelerinin virial katsayıları incelendi. Her potansiyel değeri için bulunan eğriler tek grafikte gösterildi. Sınırlandırıcı potansiyelin küçük değerlerinde 1s, 1p ve 1d seviyelerinin virial katsayıları çok küçük kuantum nokta yarıçaplarında ( $0,1-0,5 a^*$  değerlerinde) fiziksel bir anlam taşımadığı için  $0,5 a^*$  yarıçap değeri için bulunan sonuçlar dikkate alınmadı. 1d durumunda seçilen çok küçük ve çok büyük potansiyel değerlerinde hesaplamalarda hataların artması ve öngörülen hassasiyette virial katsayıların bulunamaması sebebiyle potansiyel değerleri 1s ve 1p durumundan farklı olarak  $V_0$ 'ın daha küçük katlarında seçilmiştir.

1s taban durumu için hesaplanan virial katsayıları Tablo 6.3.'de verildi. Bu durumda çeşitli sınırlandırıcı potansiyel değerlerinde virial katsayılarının nokta yapının yarıçapına göre değişimi Şekil 6.7.'de görülmektedir. Sınırlandırıcı potansiyel ve nokta yarıçapı arttıkça virial katsayıları küçülmektedir. Tablo 6.3. ve Şekil 6.7.'den de görülebileceği gibi her potansiyel değeri için virial katsayıları hidrojen atomu virial limitinde kısmen aynı yarıçap değerlerinde hesaplanmaktadır. Bulunan eğriler üstel fonksiyona ait eğrilerdir.

**Tablo 6.3.** Sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış içerisinde safsızlık bulunan küresel kuantum noktada 1s durumunda farklı (V) potansiyel değerleri için farklı yarıçap (R) değerlerinde hesaplanan virial katsayıları ( $V_0=0,2278\text{eV}$ ).

R(dot) ( $a^*$ )	$V_0/30$ (eV)	$V_0/20$ (eV)	$V_0/10$ (eV)	$V=V_0$ (eV)	$10V_0$ (eV)	$20V_0$ (eV)	$30V_0$ (eV)
1,0	-1,00063	-0,78667	-0,54835	-0,45627	-0,50860	-0,51362	-0,50915
1,5	-1,33904	-1,19998	-1,02514	-0,83953	-0,66938	-0,69358	-0,80029
2,0	-1,57253	-1,47262	-1,34923	-1,14040	-0,96279	-1,00241	-1,20363
2,5	-1,73507	-1,64334	-1,57702	-1,41139	-1,30763	-1,27367	-1,38712
3,0	-1,84394	-1,80132	-1,73124	-1,61121	-1,56724	-1,46270	-1,55273
3,5	-1,89857	-1,88599	-1,84512	-1,75688	-1,72761	-1,70800	-1,68528
4,0	-1,95207	-1,93425	-1,87722	-1,85522	-1,82483	-1,83474	-1,77387
4,5	-1,97232	-1,96145	-1,92802	-1,91928	-1,90422	-1,90372	-1,85482
5,0	-1,98390	-1,98029	-1,96196	-1,95688	-1,94549	-1,94507	-1,93859
5,5	-1,98912	-1,98554	-1,97779	-1,97642	-1,97367	-1,97425	-1,97085
6,0	-1,99672	-1,99516	-1,99415	-1,98926	-1,98537	-1,98012	-1,98691
6,5	-1,99883	-1,99737	-1,99322	-1,99331	-1,99385	-1,99261	-1,99152
7,0	-1,99891	-1,99672	-1,99715	-1,99420	-1,99597	-1,99661	-1,99675
7,5	-1,99951	-1,99880	-1,99895	-1,99821	-1,99728	-1,99828	-1,99902
8,0	-1,99963	-1,99980	-1,99763	-1,99901	-1,99909	-1,99903	-1,99920
8,5	-1,99989	-1,99967	-2,00014	-1,99936	-1,99949	-1,99953	-1,99927
9,0	-1,99991	-2,00003	-1,99947	-1,99924	-1,99965	-1,99961	-2,00028
9,5	-1,99988	-1,99977	-2,00009	-1,99988	-1,99979	-1,99957	-1,99965
10	-2,00004	-1,99982	-1,99973	-2,00021	-1,99994	-2,00007	-1,99992
15	-1,99999	-1,99999	-2,00000	-2,00000	-1,99998	-1,99997	-2,00002
20	-2,00000	-2,00000	-1,99991	-2,00000	-1,99996	-1,99998	-2,00000
25	-2,00000	-2,00000	-1,99999	-1,99999	-1,99999	-2,00000	-2,00000
30	-2,00000	-1,99999	-2,00001	-1,99999	-1,99998	-2,00000	-2,00000
35	-2,00000	-2,00000	-2,00000	-1,99999	-1,99999	-1,99998	-1,99999
40	-2,00000	-2,00000	-2,00000	-2,00000	-2,00000	-1,99999	-1,99999
45	-2,00000	-2,00000	-2,00000	-2,00000	-2,00000	-2,00000	-2,00000
50	-2,00000	-2,00000	-2,00000	-2,00000	-2,00000	-2,00004	-1,99842



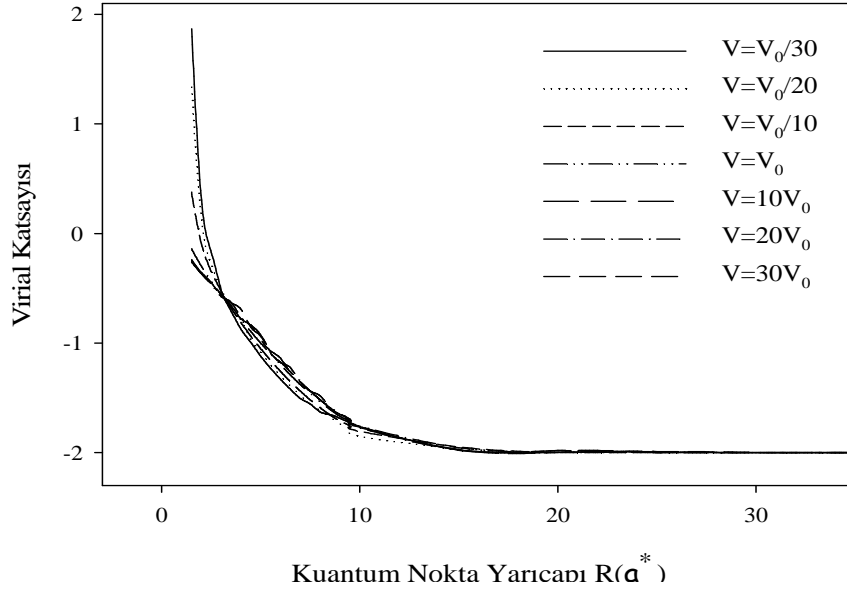
**Şekil 6.7.** Sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış küresel kuantum noktası için 1s durumunda farklı potansiyel değerleri için virialin yarıçapa göre değişimi.

Tablo 6.4. ve Tablo 6.5. sırasıyla 1p ve 1d durumlarında hesaplanan virial katsayılarını vermektedir. Şekil 6.8 ve Şekil 6.9.'da bu tablolara ait grafikler çizilmiştir.

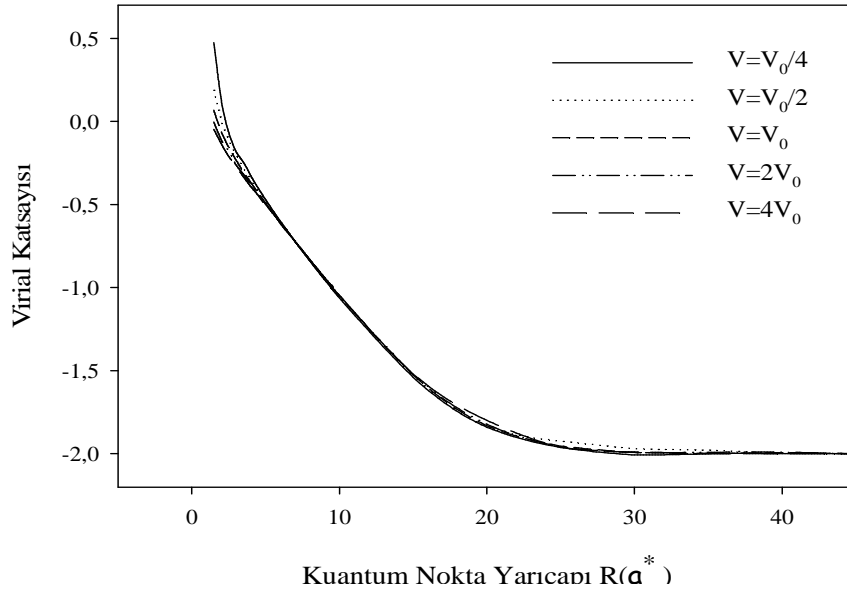
1p ve 1d durumlarında da benzer grafikler oluşmuştur. Eğriler üstel fonksiyona ait eğrilerdir. Bu durumlara ait tablo ve grafiklerden de görülebileceği gibi çok küçük potansiyel değerleri için yapılan hesaplamalarda, küçük yarıçaplarda virial katsayıları pozitif değerlerde çıkmaktadır. Sistem içerisinde elektron bağlanamamaktadır. Yine bu yarıçap değerlerinde sınırlandırıcı potansiyel arttıkça etkin hale gelmekte ve virial katsayılarının küçülerek negatif değerler aldığı görülmektedir.

**Tablo 6.4.** Sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış içerisinde safsızlık bulunan küresel kuantum noktada 1p durumunda farklı (V) potansiyel değerleri için farklı yarıçap (R) değerlerinde hesaplanan virial katsayıları ( $V_0=0,2278\text{eV}$ ).

R(dot) ( $a^*$ )	$V_0/30$ (eV)	$V_0/20$ (eV)	$V_0/10$ (eV)	$V=V_0$ (eV)	$10V_0$ (eV)	$20V_0$ (eV)	$30V_0$ (eV)
1,0	8,41174	6,42549	5,68022	0,11939	-0,11456	-0,12302	-0,14568
1,5	1,86987	1,33603	0,37888	-0,13860	-0,23887	-0,25862	-0,24604
2,0	0,30542	0,13289	-0,08930	-0,29982	-0,35729	-0,36607	-0,36717
2,5	-0,17272	-0,29011	-0,34480	-0,43337	-0,44864	-0,46578	-0,46036
3,0	-0,52204	-0,52062	-0,52731	-0,56063	-0,57271	-0,57716	-0,55582
3,5	-0,71132	-0,69362	-0,68099	-0,67722	-0,65725	-0,62939	-0,63438
4,0	-0,87598	-0,79130	-0,81486	-0,78699	-0,77961	-0,76353	-0,69279
4,5	-0,99738	-0,97249	-0,93821	-0,89635	-0,84051	-0,83791	-0,85687
5,0	-1,12337	-1,08513	-1,05273	-1,00158	-0,96889	-0,92847	-0,93927
5,5	-1,23302	-1,19995	-1,16011	-1,10223	-1,07417	-1,08275	-1,09281
6,0	-1,33365	-1,30084	-1,26084	-1,20038	-1,14035	-1,17963	-1,17694
6,5	-1,42493	-1,39398	-1,35425	-1,29333	-1,27113	-1,22681	-1,26562
7,0	-1,50841	-1,47933	-1,44114	-1,38193	-1,35645	-1,36020	-1,35930
7,5	-1,55875	-1,55650	-1,52101	-1,46351	-1,44112	-1,43890	-1,44152
8,0	-1,63085	-1,61729	-1,59329	-1,53970	-1,52248	-1,52004	-1,48357
8,5	-1,65498	-1,68100	-1,65865	-1,60874	-1,59317	-1,58490	-1,59213
9,0	-1,68975	-1,74138	-1,71619	-1,67221	-1,65730	-1,64900	-1,65364
9,5	-1,73688	-1,79037	-1,76722	-1,72853	-1,71941	-1,70657	-1,71162
10	-1,77083	-1,85544	-1,80911	-1,77637	-1,76477	-1,76155	-1,76340
15	-1,97403	-1,96471	-1,95129	-1,98234	-1,97913	-1,95750	-1,98067
20	-1,99829	-1,99865	-1,99956	-1,98460	-1,98162	-1,99796	-1,99903
25	-1,99948	-1,99991	-1,99985	-1,99999	-1,99678	-1,99947	-1,99167
30	-1,99987	-2,00001	-2,00000	-1,99994	-2,00003	-1,99987	-1,99997
35	-1,99996	-1,99987	-1,99999	-1,99972	-2,00000	-1,99982	-1,99994
40	-1,99998	-2,00000	-2,00000	-2,00001	-1,99997	-2,00001	-2,00000
45	-2,00000	-2,00000	-2,00000	-1,99999	-1,99997	-1,99992	-1,99996
50	-2,00000	-2,00000	-1,99998	-2,00000	-1,99066	-1,99998	-1,99996



**Şekil 6.8.** Sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış küresel kuantum noktası için  $1p$  durumunda farklı potansiyel değerleri için virialin yarıçapa göre değişimi.



**Şekil 6.9.** Sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış küresel kuantum noktası için  $1d$  durumunda farklı potansiyel değerleri için virialin yarıçapa göre değişimi.



**Tablo 6.5.** Sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış içerisinde safsızlık bulunan küresel kuantum noktada 1d durumunda farklı (V) potansiyel değerleri için farklı yarıçap (R) değerlerinde hesaplanan virial katsayıları ( $V_0=0,2278\text{eV}$ ).

R(dot) ( $a^*$ )	$V_0/4$ (eV)	$V_0/2$ (eV)	$V_0$ (eV)	$2V_0$ (eV)	$4V_0$ (eV)
1	105,8026	0,77962	0,30816	0,15625	0,05846
1,5	0,47549	0,18789	0,06811	-0,00369	-0,04802
2	0,12658	0,00511	-0,06064	-0,10989	-0,13322
2,5	-0,06592	-0,11132	-0,15436	-0,18131	-0,20895
3	-0,18295	-0,20233	-0,23131	-0,26056	-0,27021
3,5	-0,24658	-0,28076	-0,30374	-0,31766	-0,33286
4	-0,32755	-0,35078	-0,36749	-0,37915	-0,39200
4,5	-0,40174	-0,41799	-0,43068	-0,43556	-0,44510
5	-0,47064	-0,48309	-0,4910	-0,49655	-0,50339
5,5	-0,53747	-0,54446	-0,55271	-0,55447	-0,54774
6	-0,60084	-0,60417	-0,60859	-0,60881	-0,61317
6,5	-0,66178	-0,66431	-0,66611	-0,6669	-0,66814
7	-0,72287	-0,72211	-0,72274	-0,72278	-0,72309
7,5	-0,78193	-0,77957	-0,77872	-0,77545	-0,77784
8	-0,83964	-0,8364	-0,83420	-0,83297	-0,83212
8,5	-0,89686	-0,89239	-0,88888	-0,88728	-0,88606
9	-0,95276	-0,94735	-0,94374	-0,9413	-0,93945
9,5	-1,00811	-1,00174	-0,9975	-0,99453	-0,99248
10	-1,06231	-1,05527	-1,05045	-1,04727	-1,04490
15	-1,53951	-1,53049	-1,52498	-1,52046	-1,51873
20	-1,8401	-1,83678	-1,83202	-1,82297	-1,80013
25	-1,96225	-1,92553	-1,95376	-1,95828	-1,96020
30	-2,00661	-1,96898	-1,99186	-1,99257	-1,99014
35	-2,00043	-1,97890	-1,99913	-1,99185	-1,99872
40	-1,99932	-1,99659	-1,99384	-1,99017	-1,99968
45	-1,99980	-1,99945	-1,99999	-2,00019	-1,99985
50	-1,99994	-2,00001	-1,99995	-1,99965	-2,00014

### 6.2.3. Sabit Yarıçap, Farklı Potansiyel Değerleri için Hesaplamalar

Sonlu potansiyel engeline sahip küresel kuantum nokta yapının sabit bir yarıçap değerinde virial katsayısının sınırlayıcı potansiyele göre değişimi incelendi. Tek elektronlu kuantum nokta yapının taban durumu (1s), birinci uyarılmış durumu (1p) ve ikinci uyarılmış durumu (1d) için üç ayrı yarıçap değeri ele alınarak virial katsayıları hesaplandı. Farklı yarıçap değerleri ile yapılan hesaplamalar neticesinde üç karakterde grafik oluşmaktadır. Ele aldığımız yarıçap değerleri bu hesaplamalar için fikir verebilecek grafikleri bize daha net göstermektedir. Ayrıca büyük yarıçap değerlerinde tüm sınırlayıcı potansiyel değerlerinde hidrojen atomu için virial limiti olan -2 değeri hesaplanmaktadır. Büyük yarıçap değerlerinde hesaplanan virial katsayıları grafikte bize  $y = -2$  doğrusunu göstereceğinden bu durumlarda hesaplanan virial katsayıları tablolarda gösterilmiş ancak grafikleri çizilmemiştir. Diğer yarıçap değerleri için çizilen grafiklere karşılık fit yoluyla bulunan fonksiyon denklemleri ve katsayılar %98-%100 aralığında tutarlılıkta elde edilmiştir.

Tablo 6.6.'da 1s taban durumunda küresel kuantum nokta yarıçapının  $R=0,5 a^*$ ,  $R=1,5 a^*$  ve  $R=30 a^*$  değerlerinde farklı sınırlayıcı potansiyel değerleri için hesaplanan virial katsayıları verildi. Bu virial katsayılarının farklı potansiyel değerlerine göre değişimi ve bunlara uydurulan eğriler  $R=0,5 a^*$  kuantum nokta yarıçapı için Şekil 6.10.'da,  $R=1,5 a^*$  kuantum nokta yarıçapı için ise Şekil 6.11.'de çizildi.

Tablo 6.6.'da görüleceği gibi 1s durumunda  $R=0,5 a^*$  ve  $R=1,5 a^*$  yarıçaplarında çok küçük potansiyel değerleri için yaklaşık olarak virial katsayılarının hidrojen atomu için virial limit değeri olan -2 limit değerinde hesaplandığı görülmektedir. Sınırlayıcı potansiyelin çok küçük değerlerinde beklenen değeri çok küçük olduğundan sistem üzerine katkısı neredeyse hiç yoktur. Bu durumda sistem hidrojen atomu gibi davranır ve virial katsayısı -2 limitine gitmektedir. 1s durumunda  $R=0,5 a^*$  yarıçap değerinde sınırlayıcı potansiyelin 0,03-0,7 eV aralığındaki değerlerinde nokta yarıçapı küçük olduğu için sınırlayıcı potansiyelin sistem üzerine etkisi çok fazla olmakta ve toplam potansiyel enerjinin beklenen değeri pozitif çıkmaktadır. Bu durumda virial katsayısı pozitif çıkmaktadır.

Başka bir deyişle elektron safsızlığa bağlanmamaktadır. Sınırlandırıcı potansiyelin 0,7eV'dan daha büyük değerlerinde bağlı durumlar oluşmaktadır ve virial katsayısı negatif çıkmaktadır. Sınırlandırıcı potansiyelin daha büyük değerlerinde ise elektronla safsızlık arasındaki coulomb potansiyeli etkin olmaya başlamaktadır.

Kuantum nokta yapının  $R=0,5 a^*$  yarıçapında 1s durumunda sınırlandırıcı potansiyelin 500eV değerinden daha büyük değerleri için virial katsayıları yaklaşık olarak sonsuz potansiyel için 1s durumunda yapılan hesaplamalardan  $R=0,5 a^*$  yarıçapına karşılık hesaplanan virial katsayısı -0,255969 limit değerinde,  $R=1,5 a^*$  yarıçapında ise sınırlandırıcı potansiyelin 5eV değerinden daha büyük değerleri için virial katsayıları yaklaşık olarak sonsuz potansiyel için 1s durumunda yapılan hesaplamalardan  $R=1,5 a^*$  yarıçapına karşılık hesaplanan virial katsayısı -0,802974 limit değerinde hesaplanmaktadır.

1s durumunda  $R=30 a^*$  yarıçap değerinde ise tüm potansiyel değerlerine karşılık yaklaşık olarak virial katsayıları -2 limit değerinde hesaplandı. Bu durumda yarıçap çok büyük olduğu için sınırlandırıcı potansiyelin etkisinin azaldığı söylenebilir. Burada hidrojen atomu durumu oluşmaktadır.

1s durumunda  $R=0,5 a^*$  ve  $R=1,5 a^*$  yarıçap değerlerinde farklı sınırlandırıcı potansiyel değerleri için hesaplanan virial katsayılarının farklı potansiyel değerlerine göre değişimi ve fit edilerek bulunan eğriler sırasıyla Şekil 6.10. ve Şekil 6.11.'de görülmektedir. Bu eğrilerin ilk bakışta farklı fonksiyon karakterinde olduğu düşünülse de her iki eğrinin fit edilmesiyle rasyonel fonksiyona ait eğriler olduğu görüldü. Bulunan eğri denklemleri,

$$y = \frac{(a + bx)}{(1 + cx + dx^2)}$$

şeklindedir. Burada a, b, c, d sabit denklemler katsayılarıdır. Bu katsayılar,

$R=0,5 a^*$  yarıçap değeri için,

$$a = -1,72, \quad b = 144,34, \quad c = -4,91, \quad d = 2502,27,$$

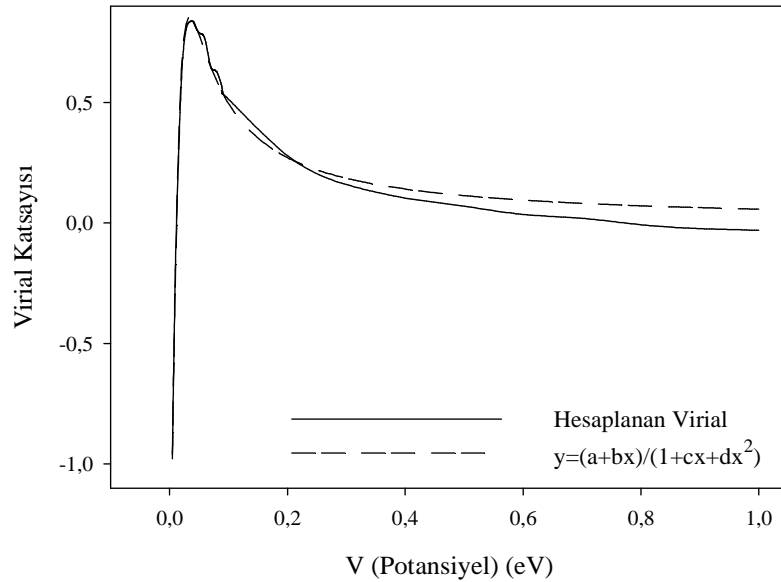
$R=1,5 a^*$  yarıçap değeri için,

$$a = -2,37, \quad b = -211,16, \quad c = 259,11, \quad d = -2,85$$

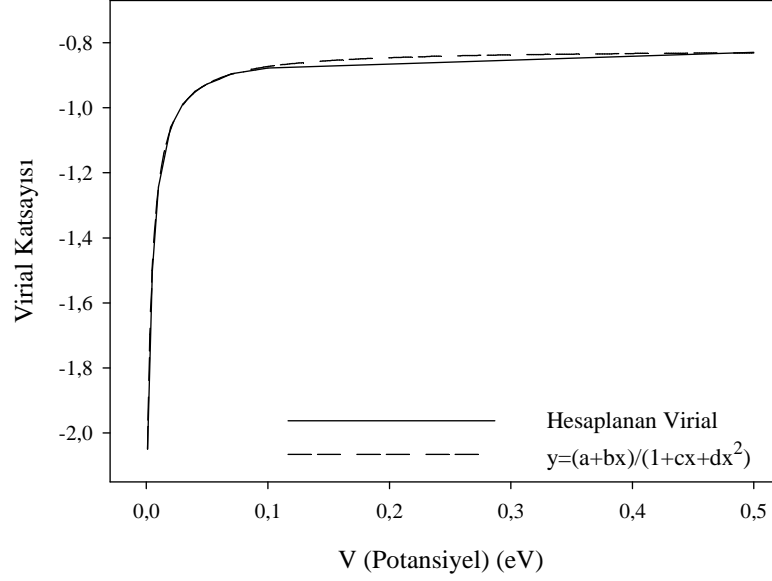
olarak bulundu.

**Tablo 6.6.** Sonlu küresel kuantum nokta yapının  $R=0,5 a^*$ ,  $R=1,5 a^*$ ,  $R=30 a^*$  yarıçapı değerlerinde 1s durumunda farklı potansiyel değerleri için hesaplanan virial katsayıları

$R=0,5 a^*$		$R=1,5 a^*$		$R=30 a^*$	
V(Pot.) (eV)	Virial	V(Pot.) (eV)	Virial	V(Pot.) (eV)	Virial
0,0001	-2,022947	0,0001	-2,072950	0,0001	-1,999980
0,0005	-2,016482	0,001	-2,048776	0,0005	-1,999999
0,001	-1,881571	0,005	-1,501130	0,001	-2,000000
0,005	-0,979131	0,01	-1,244692	0,005	-2,000000
0,01	-0,195009	0,02	-1,059764	0,01	-1,999999
0,05	0,790111	0,03	-0,988803	0,05	-2,000001
0,1	0,513789	0,04	-0,949571	0,1	-2,000004
0,3	0,159534	0,05	-0,927043	0,5	-2,000000
0,5	0,069015	0,06	-0,911779	1	-2,000004
0,7	0,019339	0,07	-0,895179	5	-2,000000
0,9	-0,023504	0,08	-0,889986	10	-2,000000
1	-0,030047	0,09	-0,883519	20	-2,000000
5	-0,163578	0,1	-0,878132	40	-1,999999
10	-0,193640	0,5	-0,830067	60	-1,999999
50	-0,226701	5	-0,815824	800	-2,000002
100	-0,235969	10	-0,796546	100	-1,999999
500	-0,248194	50	-0,799090	200	-1,999993
1000	-0,259569	100	-0,799817	500	-1,999996



**Şekil 6.10.** Yarıçapı  $R=0,5 a^*$  olan sonlu küresel kuantum nokta yapıda 1s durumunda farklı potansiyel değerleri için hesaplanan virial.



**Şekil 6.11.** Yarıçapı  $R=1,5 a^*$  olan sonlu küresel kuantum nokta yapıda 1s durumunda farklı potansiyel değerleri için hesaplanan virial.

Kuantum nokta yapının birinci uyarılmış durumu (1p) için  $R=1,5 a^*$ ,  $R=5 a^*$  ve  $R=40 a^*$  yarıçapları için farklı potansiyel değerlerinde hesaplanan virial katsayıları Tablo 6.7.'de verildi.  $R=1,5 a^*$ ,  $R=5 a^*$  yarıçapları için hesaplanan virial katsayılarının potansiyele göre değişimi ve buna uydurulan eğriler sırasıyla Şekil 6.12 ve Şekil 6.13'de çizildi. Tablo 6.7.'de görülebileceği gibi taban durum için hesaplanan virial katsayılarının benzeri olarak virial katsayıları, çok küçük potansiyel değerlerinde hidrojen atomu için virial limit değeri olan -2 değerinde hesaplandı.

Tablo 6.7.'de görüleceği gibi kuantum nokta yarıçapı  $R=1,5 a^*$  iken sınırlandırıcı potansiyelin 0,003-0,05eV arası değerlerinde virial katsayıları pozitif hesaplandı. Burada sınırlandırıcı potansiyelin sistem üzerine etkisi oldukça artarak toplam potansiyeli pozitif değerlere ulaştırmıştır. Sınırlandırıcı potansiyelin 0,05eV değerinden daha büyük değerlerinde ise virial katsayıları negatif hesaplandı. Bu bağlı durumların oluştuğunu göstermektedir.

Kuantum nokta yapının  $R=1,5 a^*$  yarıçapında 1p durumunda sınırlandırıcı potansiyelin 100eV değerinden daha büyük değerleri için virial katsayıları yaklaşık

olarak sonsuz potansiyel için 1p durumunda yapılan hesaplamalardan  $R=1,5 a^*$  yarıçapına karşılık hesaplanan virial katsayısı  $-0,284506$  limit değerinde,  $R=5 a^*$  yarıçapında ise sınırlandırıcı potansiyelin  $10eV$  değerinden daha büyük değerleri için virial katsayıları yaklaşık olarak sonsuz potansiyel için 1p durumunda yapılan hesaplamalardan  $R=5 a^*$  yarıçapına karşılık hesaplanan virial katsayısı  $-0,982270$  limit değerinde hesaplanmaktadır.

Tablo 6.7.'de görüleceği gibi 1p durumunda kuantum nokta yarıçapı  $R=40 a^*$  değerinde farklı sınırlayıcı potansiyel değerlerine göre hesaplanan virial katsayıları yaklaşık olarak  $-2$  limit değerinde çıkmaktadır. Bu durumda coulomb potansiyeli etkin olup, hidrojen atomu durumu oluşmaktadır.

1p durumunda kuantum nokta yapının  $R=1,5 a^*$  ve  $R=5 a^*$  yarıçap değerlerinde hesaplanan virial katsayılarının farklı potansiyel değerine göre değişimi eğrilerinin elde edilmesi ile bulunan fonksiyon rasyonel fonksiyon yapısında olup,

$$y = \frac{(a + bx)}{(1 + cx + dx^2)}$$

biçimindedir. Burada a, b, c, d sabit katsayıları,

$R=1,5 a^*$  yarıçap değeri için,

$$a = -1,91, \quad b = 838,02, \quad c = -173,82, \quad d = 49485,90$$

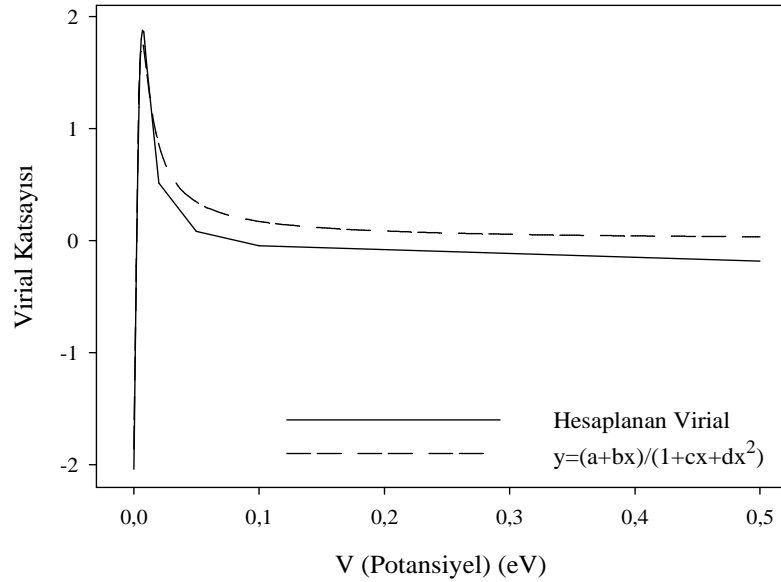
$R=5 a^*$  yarıçap değeri için,

$$a = -2,37, \quad b = -1541,40, \quad c = 1524,47, \quad d = 57,05$$

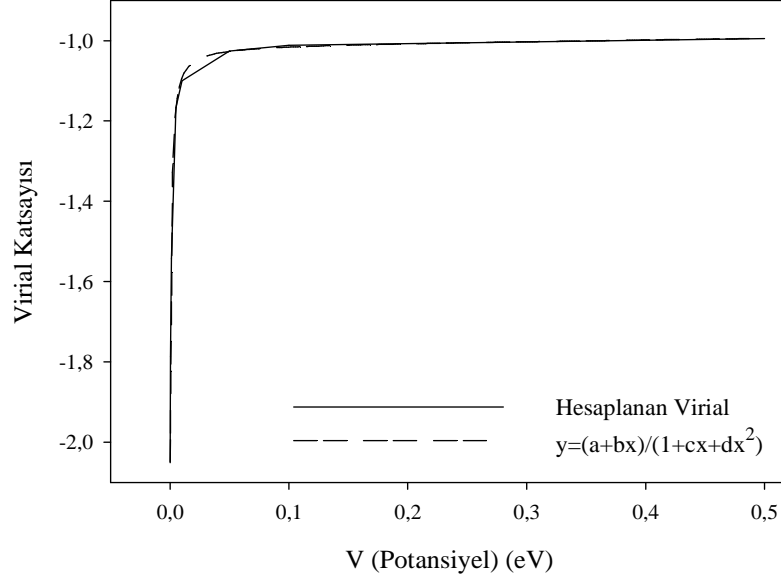
olarak bulundu.

**Tablo 6.7.** Sonlu küresel kuantum nokta yapının  $R=1,5 a^*$ ,  $R=5 a^*$ ,  $R=40 a^*$  yarıçapı değerlerinde 1p durumunda farklı potansiyel değerleri için hesaplanan virial katsayıları

$R=1,5 a^*$		$R=5 a^*$		$R=40 a^*$	
V(Pot.) (eV)	Virial	V(Pot.) (eV)	Virial	V(Pot.) (eV)	Virial
0,0001	-2,039821	0,00001	-2,064578	0,0001	-2,000062
0,0005	-1,598351	0,0001	-2,054256	0,0005	-2,000074
0,001	-1,079627	0,0002	-2,049021	0,001	-2,000001
0,002	-0,166365	0,0005	-1,787516	0,005	-2,000045
0,003	0,590653	0,001	-1,542444	0,01	-2,000008
0,004	1,192734	0,005	-1,167277	0,05	-2,000045
0,005	1,579227	0,01	-1,100468	0,1	-2,000023
0,007	1,878439	0,05	-1,026504	0,5	-2,000028
0,01	1,600529	0,1	-1,012114	1	-2,000036
0,05	0,081620	0,5	-0,995072	5	-2,000035
0,1	-0,045350	1	-0,990819	10	-2,000000
0,5	-0,183691	5	-0,986380	20	-2,000002
1	-0,216059	10	-0,985242	30	-2,000024
10	-0,261147	20	-0,984476	40	-2,000003
100	-0,255592	30	-0,984425	50	-2,000082
200	-0,284456	50	-0,984520	100	-2,000005



**Şekil 6.12** Yarıçapı  $R=1,5 a^*$  olan sonlu küresel kuantum nokta yapıda 1p durumunda farklı potansiyel değerleri için hesaplanan virial



**Şekil 6.13** Yarıçapı  $R=5 a^*$  olan sonlu küresel kuantum nokta yapıda  $1p$  durumunda farklı potansiyel değerleri için hesaplanan virial.

Kuantum nokta yapının 1d ikinci uyarılmış durumu için  $R=2,5 a^*$ ,  $R=10 a^*$ ,  $R=50 a^*$  yarıçaplarında farklı potansiyel değerlerine karşılık hesaplanan virial katsayıları Tablo 6.8.'de verildi.  $R=2,5 a^*$ ,  $R=10 a^*$  yarıçapları için hesaplanan virial katsayılarının potansiyele göre değişimi ve buna uydurulan eğriler sırasıyla Şekil 6.14 ve Şekil 6.15'de gösterildi.

Tablo 6.8.'de görüleceği gibi virial katsayıları çok küçük potansiyel değerlerinde yaklaşık -2 limit değerinde hesaplandı. Bu durumlarda sınırlandırıcı potansiyel çok küçük olduğu için coulomb potansiyeli etkisiyle elektron safsızlığa bağlı bulunmaktadır.

1d durumunda  $R=2,5 a^*$  yarıçapı için yaklaşık olarak sınırlandırıcı potansiyelin 0,001-0,03eV aralığındaki değerlerinde virial katsayıları pozitif hesaplandı. Burada bağlı olmayan durumlar oluşmaktadır. Sınırlandırıcı potansiyelin 0,03eV değerinden büyük değerlerinde bağlı durumlar oluşmaktadır.

Kuantum nokta yapının  $R=2,5 a^*$  yarıçapında 1d durumunda sınırlandırıcı potansiyelin 20eV değerinde ve daha büyük değerleri için virial katsayıları yaklaşık



olarak sonsuz potansiyel için 1d durumunda yapılan hesaplamalardan  $R=2,5 a^*$  yarıçapına karşılık hesaplanan virial katsayısı  $-0,251064$  limit değerinde,  $R=10 a^*$  yarıçapında ise sınırlandırıcı potansiyelin  $3eV$  değerinde ve daha büyük değerleri için virial katsayıları yaklaşık olarak sonsuz potansiyel için 1d durumunda yapılan hesaplamalardan  $R=10 a^*$  yarıçapına karşılık hesaplanan virial katsayısı  $-1,037949$  limit değerinde hesaplanmaktadır.

1d durumunda kuantum nokta yapının  $R=50 a^*$  yarıçap değerinde Tablo 6.8.'de verilen sınırlandırıcı potansiyel değerlerine karşılık hesaplanan tüm virial katsayıları 1s ve 1p durumlarında büyük yarıçap değerlerinde hesapladığımız gibi yaklaşık olarak  $-2$  limit değerinde hesaplanmıştır. Bu durumda sınırlandırıcı potansiyelin etkisi oldukça düşüktür. Coulomb potansiyeli ile elektron safsızlığa bağlı olarak hidrojen atomu durumunu oluşturmaktadır.

Kuantum nokta yapının  $R=2,5 a^*$  ve  $R=10 a^*$  yarıçap değerlerinde 1d durumunda hesaplanan virial katsayılarının sınırlandırıcı potansiyele göre değişimi eğrilerinin fit edilmesiyle bulunan eğriler rasyonel fonksiyon ait

$$y = \frac{(a + bx)}{(1 + cx + dx^2)},$$

denklemini ile değişmektedir. Burada a, b, c, d denklem katsayıları,

$R=2,5 a^*$  yarıçap değeri için,

$$a = -1,7888, \quad b = 1860,8550, \quad c = -569,2365, \quad d = 123640,1$$

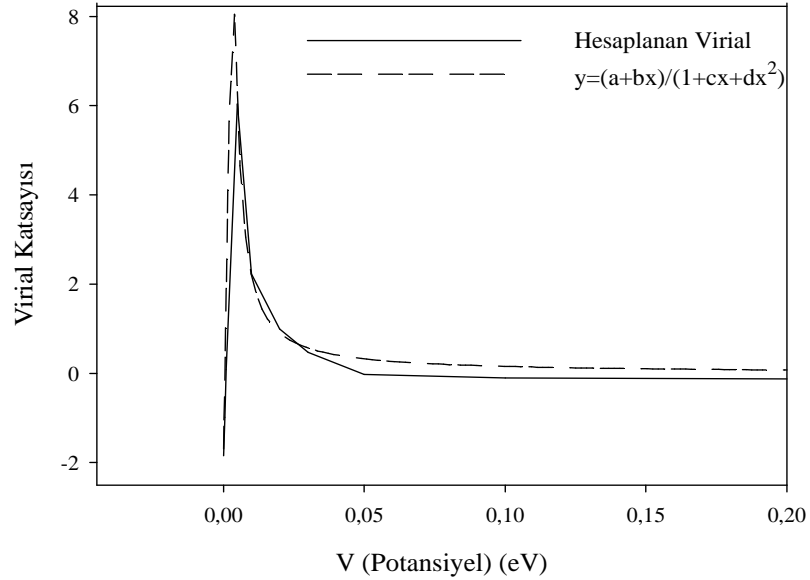
$R=10 a^*$  yarıçap değeri için,

$$a = -2,60, \quad b = -5900,46, \quad c = 5575,34, \quad d = 26,80$$

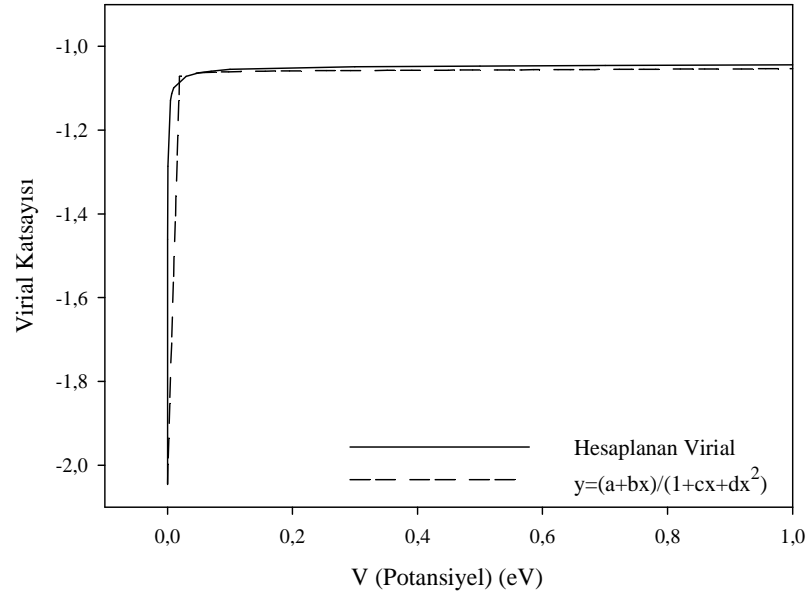
olarak bulundu.

**Tablo 6.8.** Sonlu küresel kuantum nokta yapının  $R=2,5 a^*$ ,  $R=10 a^*$ ,  $R=50 a^*$  yarıçapı değerlerinde 1d durumunda farklı potansiyel değerleri için hesaplanan virial katsayıları

$R=1,5 a^*$		$R=10 a^*$		$R=50 a^*$	
V(Pot.) (eV)	Virial	V(Pot.) (eV)	Virial	V(Pot.) (eV)	Virial
0,00001	-2,023374	0,0001	-2,045706	0,0001	-1,999996
0,00005	-1,988407	0,0005	-1,461063	0,001	-1,999936
0,0001	-1,841612	0,001	-1,285935	0,005	-1,999943
0,0005	-0,980285	0,005	-1,128627	0,01	-1,999939
0,001	0,085651	0,007	-1,112574	0,05	-1,999987
0,005	6,037549	0,01	-1,098899	0,1	-2,000231
0,01	2,230380	0,03	-1,071125	0,5	-2,000423
0,02	1,000000	0,05	-1,063089	1	-2,000052
0,03	0,472000	0,07	-1,059351	5	-2,000534
0,05	-0,020267	0,1	-1,055141	10	-2,000014
0,1	-0,101020	0,3	-1,048487	15	-1,999975
0,5	-0,185892	0,5	-1,046869	20	-1,999955
1	-0,220625	0,7	-1,045749	25	-1,999961
5	-0,231864	1	-1,044222	50	-1,999998
10	-0,234502	3	-1,040178	75	-2,000043
20	-0,245311	5	-1,040416	100	-2,000008



**Şekil 6.14.** Yarıçapı  $R=2,5 a^*$  olan sonlu küresel kuantum nokta yapıda 1d durumunda farklı potansiyel değerleri için hesaplanan virial.



**Şekil 6.15.** Yarıçapı  $R=10 a^*$  olan sonlu küresel kuantum nokta yapıda 1d durumunda farklı potansiyel değerleri için hesaplanan virial.

### 6.3. Sonuç ve Tartışma

Sonsuz potansiyel ile sınırlandırılmış içerisinde safsızlık bulunan tek elektronlu küresel kuantum nokta yapının taban (1s), birinci uyarılmış (1p) ve ikinci uyarılmış (1d) seviyelerinde virial katsayıları nokta yapı yarıçapının değişimine göre hesaplandı. Nokta yapının yarıçapı küçüldükçe virial katsayısı büyümekte, bunun tersine nokta yapı yarıçapı büyüdükçe virial katsayısı -2 limitine küçülmektedir. Bu beklenen bir durumdur. Çünkü kuantum nokta yapı yarıçapı arttıkça sistem hidrojen atomuna benzemektedir. Nokta yapı yarıçapı küçüldükçe elektronun kinetik enerjisi artmakta ve coulomb potansiyel enerjisi de artmaktadır. Bu da virial katsayısının artmasını sebep olur. Yani kuantum nokta yapı yarıçapı azaldıkça sınırlandırıcı potansiyelin sistem üzerinde daha çok etkisi olmaktadır. Bunun tersine nokta yapı yarıçapı arttıkça sınırlandırıcı potansiyelin sistem üzerine olan etkisi azalmaktadır. Hatta özellikle taban durumda çok büyük nokta yapı yarıçaplarında neredeyse sıfır katkı getirmektedir.

Uyarılmış seviyelerde taban duruma göre serbest hidrojen atomunun virial katsayısına karşılık gelen -2 virial limit değeri daha büyük yarıçaplarda hesaplanmaktadır. Üst seviyelerde sınırlandırıcı potansiyelin etkisi taban duruma göre daha büyük yarıçap değerlerine kadar çıkmaktadır. Üst enerji seviyelerinde sistemin toplam kinetik enerjisi alt enerji seviyelerine göre daha büyüktür.

Merkezinde hidrojen benzeri safsızlık bulunan tek elektronlu sonsuz küresel kuyu potansiyelinde kuantum nokta yapı yarıçapı arttıkça çekici kuvvet etkin olmakta ve elektron safsızlığa bağlanmaktadır. Yani daha çok serbest hidrojen atomuna benzemektedir. Bu durumda virial katsayısı -2 limitine gitmektedir. Kuantum nokta yapı yarıçapı azaldıkça itici kuvvet etkin olmakta ve elektronun safsızlığa bağlanması zorlaşmaktadır. Bu da virial katsayısının artmasına sebep olmaktadır.

İçerisinde hidrojen benzeri safsızlık bulunan sonlu potansiyel ile sınırlandırılmış tek elektronlu küresel kuantum nokta yapının virial katsayıları nokta yapının yarıçapına ve sınırlandırıcı potansiyelin derinliğine göre hesaplandı. Sabit  $V_0$  sınırlandırıcı potansiyeli altında nokta yapı yarıçapına göre hesaplanan virial katsayıları nokta yapı yarıçapı arttıkça -2 limitine küçülmekte, nokta yapı yarıçapı

azaldıkça virial katsayıları pozitif yönde büyümektedir. Hatta  $R=0,5 a^*$  ve  $R=1 a^*$  gibi küçük yarıçaplarda hesaplanan virial katsayıları pozitif çıkmaktadır. Üst uyarılmış enerji seviyelerine gidildikçe bu pozitiflik daha büyük yarıçap değerlerine de kaymaktadır. Sınırlandırıcı potansiyelin virial katsayısına etkisi küçük kuantum nokta yapı yarıçaplarında fazla iken, nokta yapı yarıçapı arttıkça azalmaktadır. Küçük nokta yapı yarıçaplarında virial katsayısının pozitif olması toplam potansiyel enerjinin pozitif olmasını gerektirir. Toplam potansiyel enerjiye sınırlandırıcı potansiyelin katkısı pozitif iken coulomb potansiyelinin katkısı negatiftir. Bu da sınırlandırıcı potansiyelin beklenen değerinin, coulomb potansiyelinin beklenen değerinin mutlak değerinden büyük çıkmasıyla mümkün olabilir. Ancak böyle bir durum fiziksel olarak anlamsızdır. Yani elektronun kuyu dışında olmasını gerektirir. Sınır koşullarından dolayı bu durum matematiksel olarak anlamlıdır.

Sonsuz ve sonlu küresel kuantum nokta yapılarında ele alınan enerji seviyelerinde yarıçap değeri değiştirilerek yapılan hesaplamalar sonucu bulunan virial katsayılarıyla oluşturulan grafiklerde eğrilerin üstel fonksiyon eğrilerine benzediği görülmektedir. Fit programı ile bu eğrilere uydurulan fonksiyon denklemlerine ait katsayıları birbirine çok yakındır. Her durum için yapılan fit işlemi %98-100 aralığında uygunlukta bulunmuştur.

Sonlu küresel kuantum nokta yapı için ikinci olarak üç enerji seviyesi için de farklı potansiyel değerlerinde nokta yapının yarıçapı değiştirilerek virial katsayıları hesaplanmıştır. Farklı sabit sınırlandırıcı potansiyellerde kuantum nokta yapı yarıçapının büyük değerlerinde hesaplanan virial katsayısı -2 limitinde hesaplanırken, sınırlandırıcı potansiyel ve nokta yapı yarıçapı azaldıkça bu limit pozitif yönde artmaktadır. Sınırlandırıcı potansiyelin artıp azalması bağlı durumların oluşmasını etkilemektedir. Yani potansiyel küçük iken daha büyük nokta yapı yarıçapı değerlerinde bağlı durumlar oluşurken, potansiyel büyüdükçe bağlı durumlar daha küçük nokta yapı yarıçapına kaymaktadır.

Son olarak sonlu küresel kuantum nokta yapının üç enerji seviyesi için de sabit yarıçaplarda farklı sınırlandırıcı potansiyel değerlerinde virial katsayıları hesaplanmıştır. Bulunan değerlerle çizilen grafikler ilgi çekicidir.  $R=0,5 a^*$  ile  $R=50 a^*$  arasında her yarıçap için yapılacak hesaplamalarla üç farklı karakterde grafik olduğu görüldü. Küçük yarıçaplarda bulunan virial katsayıları hidrojen atomu

için virial limit değeri olan -2 değerinde hesaplandı. Sınırlandırıcı potansiyelin çok küçük olması sebebiyle sisteme etkisi yok denecek kadar azdır ve elektron safsızlığa bağlanmaktadır. Büyük potansiyel değerlerinde ise virial katsayıları, aynı enerji seviyesinde aynı yarıçapta sonsuz küresel kuantum nokta yapı için hesapladığımız virial katsayısı değerlerinde hesaplanmıştır. Potansiyel arttıkça sisteme etkisi artmakta ve virial katsayıları pozitif yönde büyümektedir. Hatta küçük yarıçaplarda virial pozitif değerler almaktadır. Sınırlandırıcı potansiyelin daha büyük değerlerinde bağlı durumlar oluşmaktadır. Büyük yarıçap değerlerinde ise bu durum oluşmamaktadır. Bulunan eğrilerin fit edilmesiyle rasyonel fonksiyona ait eğriler oldukları görülmektedir. Fit metoduyla bulunan eğri denklemleri ve bu denklemlere ait katsayılar %98-100 aralığında uygunlukta bulunmuştur. Çok büyük yarıçap değerlerinde bütün potansiyel değerleri için virial katsayıları -2 limitinde bulunmuştur. Bu duruma ait grafikler  $y = -2$  doğrusunu verecektir.

Özet olarak küresel kuantum nokta yapı için virial katsayılarına nokta yapının yarıçapının ve potansiyel değerinin beraber etki ettiğini söyleyebiliriz. Sistemin herhangi bir durum içerisinde virial katsayısını önceden bilmemiz, yapacağımız hesaplamaların doğruluğunun kontrol edilmesinde bize yardımcı olacaktır.

## **KAYNAKLAR**

Abramowitz, M. and Stegun, I., 1970, Handbook Mathematical Functions, Dover Publications Inc., New York.

Arfken, G., 1985, Mathematical Methods for Physics, Third Edition. Academic Pres Inc., Orlando.

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

BenDaniel, D. J., Duke, C. B., 1966, Space charge effect on electron tunneling. Physical Review, 152: 683-692.

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

Bukowski, T. J., Simmons, J. H. 2002, Quantum dot research: Current state and future prospects. Critical Reviews in Solid State and Material Sciences 27: 119–142.

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

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

Chemla, D. S., 1993, Optics of nanostructures. Physics Today 56: 22-23.

Chisholm, J. S. R., Morris, R. M., 1966, Mathematical Methods in Physics, North Holland Publ. Co., Amsterdam.

Choi, B. H., Hwang, S. W., Kim, I. G., Shin, H. C., Kim, Y., Kim, E. K., 1998, Fabrication and room-temperature characterization of asilicon self-assembled quantum-dot transistor, *Applied Physics letters*, 73: 3129-3131.

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

Clausius, RJE 1870, "On a Mechanical Theorem Applicable to Heat". *Philosophical Magazine*, Ser. 4 40.

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

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

Corcoran, E., Zorpette, G. 1997, Diminishing dimensions. *Scientific American* (Special Issue Solid State) 8: 25–33.

Cowan, R. D., 1981, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Pres, Berkeley, Los Angeles.

Çakır, B., 2007, Çok Elektronlu Kuantum Nokta Yapılarının Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi, Doktora Tezi, S.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya.

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

Çakır, B., Özmen, A., Atav, Ü., Yüksel, H. and 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: 599-609.



Davies, J. H., 1999, *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors: An Introduction*, Cambridge University Pres, Cambridge.

Dereli, T. ve Verçin, A., 1988, *Kuantum Mekaniği I, Birinci Baskı*, Ankara.

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

Eliezer, S., 1987, *The Thomas-Fermi and Related Models, Strongly Coupled Plasma Physics. Dordrecht-Holland Volume B 154*, p, 26-27

Epstein, J. H., Epstein S. T., (1962) *Am. J. Phys.*, 30 266.

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

Gammon, D. 2000, *Semiconductor physics: Electron in artificial atoms. Nature* 405: 899–900.

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

Harrison, P., 1999, *Quantum wells, wires and dots: Theoretical and computational physics*, John Wiley&Sons, Inc., New York.

Hirschfelder, J., 1960, *Chem. Phys.*, 33, 1462

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

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

- Jaskolski, W., 1996, Confined many-electron systems, *Physics Reports*, 271:1-66
- Johnson, N. F., 1995, Quantum dots: few-body, low dimensional systems. *Journal of Physics: Condensed. Matters* 7: 965–989.
- Joy, H. W., Parr. R. G., 1957, A one-center wave function for the hydrogen molecule, *The Journal of Chemical Physics*, 28: 448-453.
- Karaođlu, B., 1994, *Kuantum Mekaniđine Giriř*, BilgiTek Yayıncılık, İstanbul.
- Kastner, M. A., 1993, Artificial atoms. *Physics Today* 56: 24-31.
- Kervan, N., 2004, *Kuantum Noktalarında Polaron etkilerinin řıkıřtırılmıř Durumlarla Kuramsal İncelenmesi*, Doktora Tezi, Ank. Ü. Fen Bil. Ens., Ankara.
- Ledoux, P., 1945, "On the Radial Pulsation of Gaseous Stars" *Ap.J.*102:143–153.
- Levine, I. N., 2000, *Quantum Chemistry*, Prentice-Hall, Inc. New Jersey.
- Liboff, R., 1998, *Introductory Quantum Mechanics*. Addison Wesley, New York.
- Lord Rayleigh 1905, *Scientific papers Vol. 5: 1902-1910* Cambridge: University Press, 1899-1920.
- Maksym, P.A., Chakraborty, T., 1990, Quantum dots in a magnetic field: role of electron-electron interactions, *American Physical Society*, 65: 108-111.
- Marin, J. L., Cruz, S. A., 1991, On the use of direct variational methods to study confined quantum systems, *American Journal of Physics*, 59: 931-935.
- McEuen, P. L., 1997, Artificial atoms: New boxes for electrons. *Science* 278: 1729–1730.

- Merzbacher, E., 1998, Quantum Mechanics. John Wiley&Sons, Inc. New York.
- Mitin, V. V., Kochelap, V. A., Strosio, M. A., 1999, Quantum heterostructures: Microelectronics and optoelectronics. Cambridge University Pres, Cambridge.
- Montenegro-Porras, N. and Merchancano-Perez, T., 1992, Hyrdonic impurities in GaAs-(Ga,Al)As quantum dots. Physical Review B, Studies 46: 9780-9783.
- Nakanishi, H., Sugawara, M., 2000, Numerical solution of the Schrodinger equation by a microgenetic algorithm, Chemical Physics Letters, 327: 429-438.
- Nomoto, K., Ugajin, R., Suzuki, T., Taira, K., Hase, I., 1998, Quantum-dot based opto-electronic device, IEICE Transactions on Electronics E, 81C:8-15.
- Parker, E. N., 1954, "Tensor Virial Equations". Physical Review 96 (6): 1686–1689.
- Petroff, P. M., Gossard, A. C., Logan, R. A., Wiegmann, W., 1982, Toward quantum well wires: Fabrication and optical properties, Applied Physics Letters, 41, 635-638
- Poincaré, H., 1911, Lectures on Cosmological Theories. Paris: Hermann.
- Reed, M. A., Bate, R. T., Bradshaw, K., Duncan, W. M., Frensley, W. M., Lee, J. W., Smith, H. D., 1986, Spatial quantization in GaAs-AlGaAs multiple quantum dots, Journal of Vacuum Science&Technology, B4:358-360.
- Reed, M. A., 1993, Quantum dots. Scientific American 268:118-123.
- Reusch, B., Grabert, H., 2003, Unrestricted Hartree-Fock for Quantum dots. Physical Review B, 68: 045309.
- Ryzhii, V., 1996, The theory of quantum-dot infrared phototransistors, Semiconductor Science and Technology, 11: 759-765.

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

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

Slater, J. C., 1930, Atomic shielding constants, Physics Review B, 36: 57-64.

Slater, J. C., 1951, A simplification of the Hartree-Fock method, Physics Review B, 81: 385-390.

Slater, J. C., 1960, The quantum theory of atomic structure, McGraw-Hill, Vol.1, New York.

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

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

Şahin, M., 2005, Yarıiletken Kuantum Nokta Yapıların Elektronik Özelliklerinin İncelenmesi, Doktora Tezi, Selçuk Ü. Fen Bil. Ens., Konya.

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

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

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

Yakar, Y., Özmen, A., Atav, Ü., 2006, Evaluation of two-center one and two electron integral over Slater type orbitals, Chinese Journal of Chemistry, 24:603-608.

Yılmaz, S., 2004, Küresel Kuantum Noktalarında Safsızlık Problemi, Doktora Tezi, S.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsü, Konya.

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

Zhu, J-L., Xiong, J-J., Gu, B-L., 1990, Confined electron and hydrogenic donor states in a spherical quantum dot of  $GaAs - Al_xGa_{1-x}As$ , Physical Review B, 41: 6001-6007.

Zhu, J-L., Chen, X., 1994, Spectrum and binding of an oo-center donor in a spherical quantum dot, Physical Review B, 50: 4497-4502.

Zwicky, F. 1933. "Die Rotverschiebung von extragalaktischen Nebeln". Helvetica Physica Acta 6: 110-127.

## EK-1. Sonsuz Küresel Kuantum Nokta Yapımın Enerji Beklenen Değerlerini Hesaplayan Fortran Programı

```
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
PARAMETER (NPOP=100,NMAX=5)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
COMMON CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),OVERLB(NMAX,NMAX),
>EOZ(NPOP),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),
>LORB(NMAX),MORB(NMAX)
REAL*8 EFIT(NPOP),REFIT(NPOP)
C NAO ATOMİK ORBITAL SAYISIDIR
DATA NAO/1/
C NORB ATOMİK ORBITALLERİN BAS KUANTUM SAYISI
DATA NORB/1,4*0/
C ORB ATOMİK ORBITALLERİN YORUNGESEL MOMENTUM KUANTUM SAYISI
DATA LORB/0,4*0/
C MORB ATOMİK ORBITALLERİN MAGNETİK MOMENT KUANTUM SAYISI
DATA MORB/0,4*0/
C BAZ SETLERİNİN (STO) YORUNGESEL MOMENTUM KUANTUM SAYISI
DATA LANG/0,0,0,0,0/
C BAZ SETLERİNİN (STO) BAS KUANTUM SAYISI
DATA NBQ/1,1,1,1,1/
DATA MBQ/0,0,0,0,0/
! open(2,file='deneme.dat',status='unknown')
open(2,file='1s evrial.dat',status='unknown')
open(3,file='1s sonsuzvirialE.dat',status='unknown')
call clofnn (50,100000)
RDOT=0.0D0 !kuantum nokta yarıcapı
42 IF (RDOT.LT.10.0D0) THEN
RDOT=RDOT+0.5D0
ELSE
RDOT=RDOT+5.0D0
END IF
ERY=5.72D-3
HAR=2.0D0*ERY
HBAR=1.0d0
MAXIT=3000!max iterasyon sayısı
PC=0.95D0 !crossover olasılığı
PM=0.05D0 !mutasyon olasılığı
NCY=1
NKK=1
IELK=1*NKK
IKKB=0
AMETK=6.7D-2
CALL SRAND(27842)
CALL CZETA(NPOP,RDOT,NAO,NMAX,CI,ZETI)
DO IT=1,MAXIT
CALL CZE(RDOT)
CALL ENERJI(NCY,NAO,IKKB,IELK,NKK,RDOT,AMETK,HBAR,V0,TOPLAM)
CALL STATISTICS(NPOP,NAO,EOZ,EFIT,REFIT,TOFIT,IMIN,EMIN)
WRITE (*,*)IT,EMIN
```

```

15 FORMAT(5(2x,e15.8))
   if (it.ge.3000) then
   WRITE(2,*)RDOT
   DO JI=1, NMAX
   Write(2,*)CI(IMIN,JI)
   END DO
   DO JI=1, NMAX
   Write(2,*)ZETI(IMIN,JI)
   END DO
   end if
   CALL GENAL(NPOP,NAO,NMAX,CI,ZETI,REFIT,EFIT,PC,PM)
   END DO
   IF(RDOT.LT.49.8D0) GOTO 42
   END      (! ana programın sonu)
   SUBROUTINE
   ENERJI(NCY,NAO,IKKB,IELK,NKK,RDOT,AMETK,HBAR,V0,TOPLAM)
   IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
   PARAMETER (NPOP=100,NMAX=5)
   COMMON
   CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),OVERLB(NMAX,NMAX),EOZ(NPOP),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),
>MORB(NMAX)
   HIKI=2.0D0
   DO I=1,npop,NAO
   CALL OVER(I,RDOT)
   CALL ORTNRM(NAO,I)
CC kinetik ve potansiyel integrallerini hesaplıyor
   TOPTK=0.D0
   TOPC=0.D0
   DO 75 K=1,nk, L=I+K-1
   CALL CTKOV(L,RDOT,AMETK,HBAR,CNOV)
   pot=potan(NCY,RDOT,L)
   TOPTK=TOPTK+HIKI*(CNOV+POT)
75 CONTINUE
   TOPLAM=TOPTK
   EOZ(I)=toplam
   END DO
   RETURN
   END
   REAL*8 FUNCTION coul(LS1,LS2,LS3,LS4,RDOT)
   IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
   PARAMETER (NPOP=100,NMAX=5)
   COMMON
   CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),OVERLB(NMAX,NMAX),EOZ(NPOP),
> NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),
> MORB(NMAX)
   dpi=16.0d0*datan(1.0d0)
   TOP=0.0D0
   DO 12 I=1,NMAX
   L1=LANG(I)
   M1=MBQ(I)
   DO 12 J=1,NMAX
   L2=LANG(J)

```

```

M2=MBQ(J)
DO 12 K=1,NMAX
L3=LANG(K)
M3=MBQ(K)
DO 12 L=1,NMAX
L4=LANG(L)
M4=MBQ(L)
L1US=L1+L3
L2US=L2+L4
LFRK=ABS(L1US-L2US)
M1FK=M1-M3
M2FK=M4-M2
IF(2*(LFRK/2).NE.LFRK.OR.M1FK.NE.M2FK)GOTO 12
N1=NBQ(I)
N2=NBQ(J)
N3=NBQ(K)
N4=NBQ(L)
N=N1+N3
NUS=N2+N4
ZT1=ZETI(LS1,I)
ZT2=ZETI(LS2,J)
ZT3=ZETI(LS3,K)
ZT4=ZETI(LS4,L)
Z1=(ZT1+ZT3)
Z2=(ZT2+ZT4)
ZTOP=Z1+Z2
B1=(2*ZT1)**(N1+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*N1))
B2=(2*ZT2)**(N2+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*N2))
B3=(2*ZT3)**(N3+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*N3))
B4=(2*ZT4)**(N4+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*N4))
B21=FUNK(N1,ZT1,RDOT)
B22=FUNK(N2,ZT2,RDOT)
B23=FUNK(N3,ZT3,RDOT)
B24=FUNK(N4,ZT4,RDOT)
B31=B1*B2*B3*B4/(B21*B22*B23*B24)
JALT=MAX(ABS(L1-L3),ABS(L2-L4))
JUST=MIN(L1US,L2US)
TOPL=0.0D0
DO M=JALT,JUST,2
    gaunt1=gaunclb(M,L1,0,L3,0)
    gaunt2=gaunclb(M,L4,0,L2,0)
    gaunt=gaunt1*gaunt2*dpi/(2.0d0*M+1) !steinborn tan□m□nda
!!! BİRİNCİ TERİM
    c11=fakt(N+M)/(Z1**(N+M+1))
    c12=fakt(NUS-M-1)/(Z2**(NUS-M))
    TERM1=c11*c12
!!! İKİNCİ TERİM HESAPLANIYOR
    TOP2=0.0D0
    DO II=0,NUS-M-1
    C21=Z2**II*RDOT**II/FAKT(II)
    TOP2=TOP2+C21
    END DO
    TERM2=TERM1*DEXP(-Z2*RDOT)*TOP2

```



```

!!! ÜÇÜNCÜ TERİM
    TOP3=0.0D0
    DO II=0,N+M
    C31=FAKT(NUS+II-M-1)/ZTOP**(NUS+II-M)
    C32=Z1**II/FAKT(II)
    TOP3=TOP3+C31*C32
    END DO
    TERM3=C11*TOP3
!!! DÖRDÜNCÜ TERİM
    TOP4=0.0D0
    DO II=0,N+M
    C41=FAKT(NUS+II-M-1)/ZTOP**(NUS+II-M)
    C42=Z1**II/FAKT(II)
    TOP44=0.0D0
    DO IL=0,NUS+II-M-1
    C43=ZTOP**IL*RDOT**IL/FAKT(IL)
    TOP44=TOP44+C43
    END DO
    TOP4=TOP4+C41*C42*TOP44
    END DO
    TERM4=C11*DEXP(-ZTOP*RDOT)*TOP4
!!! BEŞİNCİ TERİM
    TOP5=0.0D0
    DO II=0,N-M-1
    C51=FAKT(N-M-1)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II)
    C52=FAKT(NUS+II+M)/ZTOP**(NUS+II+M+1)
    TOP5=TOP5+C51*C52
    END DO
    TERM5=TOP5
!!! ALTINCI DÖNGÜ
    TOP6=0.0D0
    DO II=0,N-M-1
    C61=FAKT(N-M-1)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II)
    C62=FAKT(NUS+II+M)/ZTOP**(NUS+II+M+1)
    C63=DEXP(-ZTOP*RDOT)
    TOP61=0.0D0
    DO ILL=0,NUS+M+II
    C64=ZTOP**ILL*RDOT**ILL/FAKT(ILL)
    TOP61=TOP61*C64
    END DO
    C65=C61*C62*C63*TOP61
    TOP6=TOP6+C65
    END DO
    TERM6=TOP6
!!! YEDİNCİ DÖNGÜ
    TOP7=0.0D0
    DO II=0,N-M-1
    C71=FAKT(N-M-1)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II)
    C72=FAKT(NUS+M)/ZTOP**(NUS+M+1)
    C73=RDOT**II*DEXP(-Z1*RDOT)
    C74=C71*C72*C73
    TOP7=TOP7+C74
    END DO

```

```

        TERM7=TOP7
!!! SEKİZİNCİ DÖNGÜ
        TOP8=0.0D0
        DO II=0,N-M-1
        C81=FAKT(N-M-1)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II)
        C82=FAKT(NUS+M)/ZTOP**(NUS+M+1)
        C83=RDOT**II*DEXP(-ZTOP*RDOT)
        TOP81=0.0D0
        DO IL=0,NUS+1
        C84=Z2**IL*RDOT**IL/FAKT(IL)
        TOP81=TOP81+C84
        END DO
        C85=C81*C82*C83*TOP81
TOP8=TOP8+C85
END DO
TERM8=TOP8
TOPL=TOPL+GAUNT*(TERM1-TERM2-TERM3+TERM4+TERM5-TERM6-
>TERM7+TERM8)
END DO
TOP=TOP+CI(LS1,I)*CI(LS2,J)*CI(LS3,K)*CI(LS4,L)*B31*TOPL
12 CONTINUE
COUL=TOP
RETURN
END
REAL *8 FUNCTION FUNK(IN,ZET,RDOT)
IMPLICIT REAL *8 (a-h,o-z)
NL=2*IN
TOPH=0.0D0
DO IJ=0,NL
CB=(2*ZET)**IJ*RDOT**IJ/FAKT(IJ)
TOPH=TOPH+CB
END DO
FUNK=DSQRT(1.0d0-DEXP(-2*ZET*RDOT)*TOPH)
RETURN
END
REAL *8 FUNCTION potan(NCY,RDOT,L)
IMPLICIT REAL *8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=100,NMAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),OVERLB(NMAX,NMAX),EOZ(NPOP),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),
>MORB(NMAX)
TOPP=0.0D0
DO I=1,NMAX
DO J=1,NMAX
        KO1=NBQ(J)
        KO2=NBQ(I)
        I1=LANG(J)
        I2=LANG(I)
        m1=MBQ(j)
        m2=MBQ(I)
        ZEJ=ZETI(L,J)
        ZEI=ZETI(L,I)

```

```

IF(L1.NE.L2.OR.M1.NE.M2)GOTO 15
C2=(ZEJ+ZEI)/(KO1+KO2)
TRM1=C2*OVERLB(I,J)
FH1=(2*ZEJ)**(KO1+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*KO1))
FH2=FH1/FUNK(KO1,ZEJ,RDOT)
FH3=(2*ZEI)**(KO2+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*KO2))
FH4=FH3/FUNK(KO2,ZEI,RDOT)
TRM2=FH2*FH4*DEXP(-(ZEJ+ZEI)*RDOT)*RDOT**(KO1+KO2)/(KO1+KO2)
TRM=CI(L,I)*CI(L,J)*(TRM1+TRM2)
TOPP=TOPP+TRM
15  END DO
END DO
POTAN=-NCY*TOPP
RETURN
END
SUBROUTINE CTKOV(L,RDOT,AMETK,HBAR,CNOV)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=100,NMAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),OVERLB(NMAX,NMAX),EOZ(NPOP),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),MORB(N
MAX)
sb=hbar**2/AMETK
HIKI=2.0D0
TOPK=0.D0
DO I=1,NMAX
CK=CI(L,I)
ZTU=ZETI(L,I)
NI=NBQ(I)
LI=lang(i)
MI=MBQ(I)
DO 5 J=1,NMAX
LJ=LANG(J)
MJ=MBQ(J)
if(LI.ne.LJ.OR.MI.NE.MJ) goto 5
CT=CI(L,J)
NJ=NBQ(J)
ZTE=ZETI(L,J)
C11=(ZTU+ZTE)**2*(LJ*(LJ+1)-NJ*(NJ-1))/HIKI/(NI+NJ)/(NI+NJ-1)
FG1=(2*ZTU)**(NI+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*NI))/(FUNK(NI,ZTU,RDOT))
FG2=(2*ZTE)**(NJ+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*NJ))/(FUNK(NJ,ZTE,RDOT))
CC1=FG1*FG2*(LJ*(LJ+1)-NJ*(NJ-1))/HIKI/(NI+NJ-1)*DEXP(-
RDOT*(ZTU+ZTE))*RDOT**(NI+NJ-1)
CC12=1.0d0+RDOT*(ZTU+ZTE)/(NI+NJ)
C1=C11*OVERLB(I,J)+CC1*CC12
C31=ZTE*NJ*(ZTU+ZTE)/(NI+NJ)*OVERLB(I,J)
C32=FG1*FG2*ZTE*NJ*DEXP(-(ZTU+ZTE)*RDOT)*RDOT**(NI+NJ)/(NI+NJ)
C3=C31+C32
C4=ZTE**2/HIKI*OVERLB(I,J)
TOPK=TOPK+CT*CK*(c1+c3-c4)
5 CONTINUE
END DO

```

```

CNOV=topk
RETURN
END
SUBROUTINE OVER(IBRY,RDOT)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=100,NMAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),OVERLB(NMAX,NMAX),EOZ(NPOP),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),MORB(N
MAX)
  do 1 i=1,nmax
  do 1 j=i,nmax
  overlb(i,j)=0.0d0
  overlb(j,i)=0.0d0
1 continue
  DO I=1,NMAX
  DO J=I,NMAX
  ZI=ZETI(IBRY,I)
  ZJ=ZETI(IBRY,J)
  NI=NBQ(I)
  NJ=NBQ(J)
  LI=LANG(I)
  LJ=LANG(J)
  Z=ZI+ZJ
  N=NI+NJ
  IF(LI.NE.LJ) THEN
  OVERLB(I,J)=0.0D0
  OVERLB(J,I)=0.0D0
  ELSE
  BD1=(2*ZI)**(NI+.5D0)*(2*ZJ)**(NJ+.5D0)
  BD0=FAKT(2*NI)*FAKT(2*NJ)
  BD2=DSQRT(BD0)
  BD21=FUNK(NI,ZI,RDOT)
  BD22=FUNK(NJ,ZJ,RDOT)
  BD31=BD1/(BD21*BD22*BD2)
  CNK=FAKT(N)
  CLE=CNK/Z**(N+1)
  TOPG=0.0D0
  DO LK=0, N
  CL=Z**LK*RDOT**LK/FAKT(LK)
  TOPG=TOPG+CL
  END DO
  CD=1.0D0-DEXP(-Z*RDOT)*TOPG
  CZE=BD31*CLE*CD
  OVERLB(I,J)=CZE
  OVERLB(J,I)=CZE
  END IF
  END DO
  END DO
  RETURN
  END
SUBROUTINE ORTNRM(NAO,IBRY) !!!!!!!

```

```

IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=100,NMAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),OVERLB(NMAX,NMAX),EOZ(NPOP),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),
>MORB(NMAX)
TOP=0.0D0
DO J=1,NMAX
TOP=TOP+CI(IBRY,J)**2*OVERLB(J,J)
DO I=J+1,NMAX
TOP=TOP+2.0D0*CI(IBRY,J)*CI(IBRY,I)*OVERLB(J,I)
END DO
END DO
if (top.lt.0)then
cnorm=dsqrt(-top)
else
CNORM=dsqrt(TOP)
end if
DO J=1,NMAX
CI(IBRY,J)=CI(IBRY,J)/CNORM
END DO
IF(NAO.EQ.1)GOTO 22
!!! ATOMİK ORTOGONALLIK HESAPLANIYOR
DO K=2,NAO
DO M=1,K-1
TOP1=0.D0
DO J=1,NMAX
DO I=1,NMAX
TOP1=TOP1+CI(IBRY+K-1,J)*CI(IBRY+M-1,I)*OVERLB(I,J)
END DO
END DO
DO J=1,NMAX
NI=NBQ(IBRY+K-1)
NBI=NBQ(IBRY+M-1)
ZTI=ZETI(IBRY+K-1,J)
ZTII=ZETI(IBRY+M-1,I)
FB=(2*ZTI)**(NI+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*NI))
FB1=FB/FUNK(NI,ZTI,RDOT)
FB2=(2*ZTII)**(NBI+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*NBI))
FB3=FB2/FUNK(NBI,ZTII,RDOT)
CI(IBRY+K-1,J)=CI(IBRY+K-1,J)-TOP1*CI(IBRY+M-1,J)
END DO
END DO
TOP2=0.D0
DO J=1,NMAX
TOP2=TOP2+CI(IBRY+K-1,J)**2*OVERLB(J,J)
DO I=J+1,NMAX
TOP2=TOP2+2*CI(IBRY+K-1,J)*CI(IBRY+K-1,I)*OVERLB(I,J)
END DO
END DO
if (top2.lt.0)then
cnorm=dsqrt(-top2)
else

```

```

CNORM=dsqrt(TOP2)
end if
DO J=1,NMAX
CI(IBRY+K-1,J)=CI(IBRY+K-1,J)/CNORM
END DO
END DO
22 RETURN
END
subroutine clofnn(nmax, isize)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
jsay=0
do 10 n=2,nmax,2
nbas(n/2)=jsay
do 11 n1=0,n,2
do 15 m=2,(n+n1)/2
jsay=jsay + 1
if (jsay.gt.isize) then
write(*,*) ' genellestirilmis binom katsayilari dizisi doldu'
stop
end if
jn=n-2
jm=m-1
jm1=m-2
dizi(jsay)=dfnn(jn,n1,m)+2*dfnn(jn,n1,jm)+dfnn(jn,n1,jm1)
15 continue
11 continue
10 continue
return
end
real*8 function dfnn(in,in1,im)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
n=in
n1=in1
m=im
js2=1
if (m .gt. (n+n1)/2) then
m=n+n1-m
end if
if(m.lt.0) then
dfnn=0
return
end if
if (n.lt.n1) then
jc=n
n=n1
n1=jc
js2=-1
if (2*(m/2).eq.m) js2=1
end if
if (m.eq.0) then
dfnn=js2

```

```

return
end if
if (m .eq. 1) then
dfnn=js2*(n-n1)
return
end if
jek=(n1*(2*n+n1-6))/8
jsira=nbas(n/2)+m+jek-1
dfnn=js2*dizi(jsira)
return
end
real*8 function fmnn(n,n1,m)
implicit real*8 (a-h,o-z)
if (2*(n/2).ne.n) then
if (2*(n1/2).ne.n1) then
fmnn=dfnn(n-1,n1-1,m)-dfnn(n-1,n1-1,m-2)
else
fmnn=dfnn(n-1,n1,m)+dfnn(n-1,n1,m-1)
end if
else
if (2*(n1/2).ne.n1) then
fmnn=dfnn(n,n1-1,m)-dfnn(n,n1-1,m-1)
else
fmnn=dfnn(n,n1,m)
end if
end if
return
end
real*8 function gaunclb(ilb,il,im,il1,im1)
implicit real*8(a-h,o-z)
drtpi=16d0*atan(1d0)
lb=ilb
l=il
m=im
l1=il1
m1=im1
mb=m-m1
gauncrp=dsqrt(dfloat(2*l1+1)*dfloat(2*l+1)/dfloat(2*lb+1)/drtpi)
m2=-m1
is=1
if((2*(abs(m)/2)).ne.abs(m)) is=-is
gaunclb=is*gauncrp*clebgen(1,0,l1,0,lb,0)*clebgen(1,m,l1,m2,lb,mb)
return
end
real*8 function clebgen(ij1,im1,ij2,im2,ij,im)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
j1=ij1
j2=ij2
m1=im1
m2=im2
j=ij
m=im

```

```

    if (m .ne. m1+m2 .or. abs(m) .gt. j .or. j .gt. j1+j2.or.j.lt.abs(j1-
j2).or.abs(m2).gt.j2.or.abs(m1).gt.j1) then
      clebgen=0
      return
    end if
    nmin=max(0,j2+m2-j-m,j1-m1-j+m)
    nmax=min(j1+j2-j,j2+m2,j1-m1)
    sum=0
    is=1
    if(2*(nmin/2).ne.nmin) is=-is
    k3=j+m
    k5=j-m
    k1=j1+j2-j
    k4=j2+m2
    k6=j1-m1
    do 40 n=nmin,nmax
      t=is*fmnn(k1,0,n)*fmnn(k3,0,k4-n)*fmnn(k5,0,k6-n)
      sum=sum+t
      is=-is
40 continue
    a=(2*j+1)
    k1=j1+j2+j+1
    k2=j1+j2-j
    k3=2*j
    k4=j+m
    k6=j1-j2+j
    k8=j2-j1+j
    k9=2*j1
    k0=j1+m1
    ka=2*j2
    kb=j2+m2
    b=fmnn(k1,0,k2)/fmnn(k1,0,k6)
    c=dfloat(2*j1+1)*dfloat(2*j2+1)
    c=c*fmnn(k1,0,k8)*fmnn(k9,0,k0)/fmnn(k3,0,k4)
    c=c*fmnn(ka,0,kb)
    clebgen=a*sqrt(b/c)*sum
    return
  end
  Real*8 function Fakt(k)
  implicit real*8 (a-h,o-z)
  IF(K.LT.0)THEN
  WRITE(*,*)'NEGATİF SAYININ FAKTORİYELİ OLMAZ'
  ENDIF
  fakt=1.0D0
  do 10 j=1,k
  fakt=fakt*j
10 continue
  return
  end
  SUBROUTINE STATISTICS(NPOP,NAO,EOZ,EFIT,REFIT,TOPTFIT,IMIN,EMIN)
  IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
  REAL*8 EOZ(NPOP),EFIT(NPOP),REFIT(NPOP)
  B=0.05D0

```



```

EMIN=EOZ(1)
IMIN=1
EMAX=EOZ(1)
ETOP=EOZ(1)
DO I=2,NPOP,NAO
ETOP=ETOP+EOZ(I)
IF (EOZ(I).LT.EMIN) THEN
EMIN=EOZ(I)
IMIN=I
ENDIF
IF (EOZ(I).GT.EMAX)EMAX=EOZ(I)
END DO
EORT=ETOP/NPOP
TOPFIT=0.0D0
DO I=1,NPOP,NAO
EFIT(I)=DEXP(-B*(EOZ(I)-EORT))/(EMAX-EMIN))
TOPFIT=TOPFIT+EFIT(I)
END DO
ORFIT=TOPFIT/NPOP
TREFIT=0.0D0
DO I=1,NPOP,NAO
REFIT(I)=EFIT(I)/TOPFIT
TREFIT=TREFIT+REFIT(I)
END DO
RETURN
END
SUBROUTINE GENAL(NPOP,NAO,NMAX,CI,ZETI,REFIT,EFIT,PC,PM)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8 CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),REFIT(NPOP),EFIT(NPOP)
REAL*8 CY(NPOP,NMAX),ZETAY(NPOP,NMAX)
integer*4 index(npop)
do i=1,npop
index(i)=i
end do
do i=1,npop-1
do j=npop,i+1,-1
if (refit(index(j)).gt.refit(index(j-1))) then
icind=index(j-1)
index(j-1)=index(j)
index(j)=icind
end if
end do
end do
ntut=4
do itut=1,ntut
DO J=1,NMAX
CY(ITUT,J)=CI(index(itut),J)
ZETAY(ITUT,J)=ZETI(index(itut),J)
END DO
end do
DO I=ntut+1,NPOP,2
CALL SECIM(NPOP,NAO,REFIT,EFIT,ISEC1)
CALL SECIM(NPOP,NAO,REFIT,EFIT,ISEC2)

```

```

CALL CAPRAZLA(NPOP,NAO,NMAX,I,ISEC1,ISEC2,PC,CI,ZETI,CY,ZETAY)
END DO
CALL AKTAR(NPOP,NAO,NMAX,CI,ZETI,CY,ZETAY)
CALL MUTASYON(NPOP,NMAX,CI,ZETI,PM)
RETURN
END
SUBROUTINE MUTASYON(NPOP,NMAX,CI,ZETI,PM)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8 CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX)
ntut=4
DO I=ntut+1,NPOP
PCM=RAND()
IF (PCM.LE.PM) THEN
j=1+int(rand()*(nmax-1))
M=INT(RAND()+0.5)
PCM=2*RAND()
CI(I,J)=(1.0d0+(-1)**M*PCM)*0.2d0*CI(I,J)
M1=INT(RAND()+0.5)
ZETAM=0.2d0*RAND()
ZETI(I,J)=(1.0d0+(-1)**M1*ZETAM)*0.2d0*ZETI(I,J)
ENDIF
END DO
RETURN
END
SUBROUTINE AKTAR(NPOP,NAO,NMAX,CI,ZETI,CY,ZETAY)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8
CI(npop,NMAX),ZETI(npop,NMAX),CY(npop,NMAX),ZETAY(npop,NMAX)
DO I=1,NPOP
DO J=1,NMAX
DO k=1,nao
IF(NAO.EQ.1) THEN
CI(I,J)=CY(I,J)
ZETI(I,J)=ZETAY(I,J)
ELSE
INA=(I-1)*nao+k
CI(INA,J)=CY(INA,J)
ZETI(INA,J)=ZETAY(INA,J)
END IF
END DO
END DO
END DO
RETURN
END
SUBROUTINE
CAPRAZLA(NPOP,NAO,NMAX,I,ISEC1,ISEC2,PC,CI,ZETI,CY,ZETAY)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CY(NPOP,NMAX),ZETAY(NPOP,NMAX)
PCM=RAND()
iseca1=(isec1-1)*nao+1
iseca2=(isec2-1)*nao+1
IF(NAO.EQ.1)THEN

```

```

IF (PCM.LE.PC) THEN
DO J=1,NMAX
F=RAND()
CY(I,J)=CI(ISECa1,J)*F+CI(ISECa2,J)*(1.0D0-F)
CY(I+1,J)=CI(ISECa2,J)*F+CI(ISECa1,J)*(1.0D0-F)
ZETAY(I,J)=ZETI(ISECa1,J)*F+ZETI(ISECa2,J)*(1.0D0-F)
ZETAY(I+1,J)=ZETI(ISECa2,J)*F+ZETI(ISECa1,J)*(1.0D0-F)
END DO
ELSE
DO J=1,NMAX
CY(I,J)=CI(ISECa1,J)
CY(I+1,J)=CI(ISECa2,J)
ZETAY(I,J)=ZETI(ISECa1,J)
ZETAY(I+1,J)=ZETI(ISECa2,J)
END DO
END IF
ELSE
IF (PCM.LE.PC) THEN
DO J=1,NMAX
DO k=1,nao
F=RAND()
CY((I-1)*nao+k+1,J)=CI(ISECa1+k,J)*F+CI(ISECa2+k,J)*(1.0D0-F)
CY((I-1)*nao+k+2,J)=CI(ISECa2+k,J)*F+CI(ISECa1+k,J)*(1.0D0-F)
ZETAY((I-1)*nao+k+1,J)=ZETI(ISECa1+k,J)*F+ZETI(ISECa2+k,J)*(1.0D0-F)
ZETAY((I-1)*nao+k+2,J)=ZETI(ISECa2+k,J)*F+ZETI(ISECa1+k,J)*(1.0D0-F)
END DO
END DO
ELSE
DO J=1,NMAX
DO k=1,nao
CY((I-1)*nao+k+1,J)=CI(ISECa1+k,J)
CY((I-1)*nao+k+2,J)=CI(ISECa2+k,J)
ZETAY((I-1)*nao+k+1,J)=ZETI(ISECa1+k,J)
ZETAY((I-1)*nao+k+2,J)=ZETI(ISECa2+k,J)
END DO
END DO
END IF
END IF
RETURN
END
SUBROUTINE SECIM(NPOP,NAO,REFIT,EFIT,ISEC1)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8 REFIT(NPOP),EFIT(NPOP)
RULET=RAND()
SECBIR=0.0D0
I=0
DO I=I+1,NPOP
SECBIR=SECBIR+REFIT(I)
IF (SECBIR.GE.RULET.OR.I.EQ.NPOP) GOTO 1
END DO
1 ISEC1=I
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE CZETA(NPOP,RDOT,NAO,NMAX,CI,ZETI)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8 CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX)
DO I=1,NPOP,NAO
DO J=1,NMAX
M=Int(RAND())
AGC=10.0D0
IF(RDOT.GT.4.0D0) AGC=5
IF(RDOT.GT.15.0D0) AGC=3
ZETI(I,J)=(-1)**M*RAND()*AGC
DO K=1,NAO-1
NK=I+K
ZETI(NK,J)=ZETI(I,J)
END DO
END DO
END DO
DO L=1,NPOP
DO J=1,NMAX-1
M=NINT(RAND())
CI(L,J)=(-1)**M*RAND()*1.0D0
END DO
END DO
RETURN
END
SUBROUTINE CZE(RDOT)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
PARAMETER (NPOP=100,NMAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),OVERLB(NMAX,NMAX),EOZ(NPOP),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),
>MORB(NMAX)
DO L=1,NPOP
TOP=0.0D0
DO J=1,NMAX-1
NI=NBQ(J)
ZETL=ZETI(L,J)
BL1=(2*ZETL)**(NI+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*NI))
BL12=FUNK(NI,ZETL,RDOT)
BL13=BL1/BL12
TOP=TOP+BL13*RDOT**(NI-1)*DEXP(-RDOT*ZETL)*CI(L,J)
END DO
NBI=NBQ(NMAX)
ZETB=ZETI(L,NMAX)
BL2=(2*ZETB)**(NBI+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*NBI))
BL21=FUNK(NBI,ZETB,RDOT)
BL22=BL2/BL21
alttop=DEXP(-RDOT*ZETB)*(RDOT**(NBI-1))*BL22
CI(L,NMAX)=-TOP/alttop
END DO
RETURN
END

```

## EK-2. Sonsuz Küresel Kuantum Nokta Yapının Virial Katsayılarını Hesaplayan Fortran Programı

```
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
PARAMETER (npop=28,nmax=5)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
COMMON CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),OVERLB(NMAX,NMAX),
>EOZ(NPOP),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),
>LORB(NMAX),MORB(NMAX)
DATA NAO/1/
C NORB ATOMİK ORBITALLERİN BAS KUANTUM SAYISIDIR
DATA NORB/1,4*0/
C LORB ATOMİK ORBITALLERİN YORUNGESEL MOMENTUM KUA. SAYISIDIR
DATA LORB/0,4*0/
C MORB ATOMİK ORBITALLERİN MAGNETİK MOMENT KUANTUM SAYISIDIR
DATA MORB/0,4*0/
C BAZ SETLERİNİN (STO) YORUNGESEL MOMENTUM KUANTUM SAYISIDIR
DATA LANG/0,0,0,0,0/
C BAZ SETLERİN (STO) BAS KUANTUM SAYISIDIR
DATA NBQ/1,1,1,1,1/
C BAZ SETLERİN (STO) MAGNETİK KUANTUM SAYISIDIR
DATA MBQ/0,0,0,0,0/
!!!! DIŞDAKİ NRB ATOMİK ORBITALLERİN BAS KUANTUM SAYISIDIR
open(2,file='1s evrial.dat',status='unknown')
open(3,file='1s sonsuzvirialE.dat',status='unknown')
call clofmn (50,100000)
ERYI=5.72D-3      !ETKİN TYDBERG SABİTİ
V0=0.2278d0/2.0D0/ERYI !RYDBERG CİNSİNDEN SINIRLANDIRICI
POTANSİYEL
NCY=1
NKK=1
IELK=NKK
IKKB=1
EM11=6.7D-2      !İÇERİDEKİ ETKİN KÜTLE
EM22=9.1550D-2   !DISARIDAKİ ETKİN KÜTLE
em12=em22/em11   !DISARIDAKİ BAGIL ETKİN KÜTLE
DCON1=13.18D0    !İÇERİDEKİ DİELEKTRİK SABİTİ
DCON2=12.244D0   !DISARDAKİ DİELEKTRİK SABİTİ
dcons=dcon2/dcon1 !DISARDAKİ BAGIL DİELEKTRİK SABİTİ
do IK=1,28
read(2,*)RDOT
DO JI=1, NMAX
read(2,*)CI(IK,JI)
END DO
DO JI=1, NMAX
read(2,*)ZETI(IK,JI)
END DO
CALL ENERJI(ik,NCY,NAO,IKKB,IELK,NKK,RDOT,EM12,DCONS,V0)
end do
close(3)
close(2)
```

```

END
! ana programın sonu
SUBROUTINE ENERJI(ik,NCY,NAO,IKKB,IELK,NKK,RDOT,EM12,DCONS,V0)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
PARAMETER (npop=28,nmax=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),OVERLB(NMAX,NMAX),EOZ(NPOP),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),
>MORB(NMAX)
HIKI=2.0D0
CALL OVER(RDOT,ik)
CC kinetik ve potansiyel integrallerini hesaplıyor
TOPTK=0.D0
DO 75 K=1,nkk
L=Ik+K-1
C dotun içindeki kinetik enerjiyi hesaplıyor
CALL CTKOV(L,RDOT,AMETK,HBAR,CNOV)
C İçerideki nükleer çekim potansiyel enerjiyi hesaplıyor
POTI=potan(ncy,rdot,l)
C dışarıdaki nükleer çekim potansiyel enerjiyi hesaplıyor
TOPTK=TOPTK+HIKI*(CNOV+POTI)
75 CONTINUE
TOPLAM=TOPTK
tk=HIKI*cnov
tp=HIKI*poti
oran=tp/tk
EOZ(Ik)=toplam
write(3,123)rdot,oran
123 FORMAT(2(2X,F15.8))
RETURN
END
REAL*8 FUNCTION coul(LS1,LS2,LS3,LS4,RDOT)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (npop=28,nmax=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),OVERLB(NMAX,NMAX),EOZ(NPOP),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),
>MORB(NMAX)
dpi=16.0d0*datan(1.0d0)
TOP=0.0D0
DO 12 I=1,NMAX
L1=LANG(I)
M1=MBQ(I)
DO 12 J=1,NMAX
L2=LANG(J)
M2=MBQ(J)
DO 12 K=1,NMAX
L3=LANG(K)
M3=MBQ(K)
DO 12 L=1,NMAX
L4=LANG(L)
M4=MBQ(L)
L1US=L1+L3

```

```

L2US=L2+L4
LFRK=ABS(L1US-L2US)
M1FK=M1-M3
M2FK=M4-M2
IF(2*(LFRK/2).NE.LFRK.OR.M1FK.NE.M2FK)GOTO 12
N1=NBQ(I)
N2=NBQ(J)
N3=NBQ(K)
N4=NBQ(L)
N=N1+N3
NUS=N2+N4
ZT1=ZETI(LS1,I)
ZT2=ZETI(LS2,J)
ZT3=ZETI(LS3,K)
ZT4=ZETI(LS4,L)
Z1=(ZT1+ZT3)
Z2=(ZT2+ZT4)
ZTOP=Z1+Z2
B1=(2*ZT1)**(N1+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*N1,11))
B2=(2*ZT2)**(N2+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*N2,12))
B3=(2*ZT3)**(N3+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*N3,13))
B4=(2*ZT4)**(N4+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*N4,14))
B21=FUNK(N1,ZT1,RDOT)
B22=FUNK(N2,ZT2,RDOT)
B23=FUNK(N3,ZT3,RDOT)
B24=FUNK(N4,ZT4,RDOT)
B31=B1*B2*B3*B4/(B21*B22*B23*B24)
JALT=MAX(ABS(L1-L3),ABS(L2-L4))
JUST=MIN(L1US,L2US)
TOPL=0.0D0
DO M=JALT,JUST,2
  gaunt1=gaunclb(M,L1,0,L3,0)
  gaunt2=gaunclb(M,L4,0,L2,0)
  gaunt=gaunt1*gaunt2*dpi/(2.0d0*M+1) !steinborn tan□m□nda
!!! BİRİNCİ TERİM
  c11=fakt(N+M,21)/(Z1**(N+M+1))
  c12=fakt(NUS-M-1,22)/(Z2**(NUS-M))
  TERM1=c11*c12
!!! İKİNCİ TERİM HESAPLANIYOR
  TOP2=0.0D0
  DO II=0,NUS-M-1
    C21=Z2**II*RDOT**II/FAKT(II,31)
    TOP2=TOP2+C21
  END DO
  TERM2=TERM1*DEXP(-Z2*RDOT)*TOP2
!!! ÜÇÜNCÜ TERİM
  TOP3=0.0D0
  DO II=0,N+M
    C31=FAKT(NUS+II-M-1,41)/ZTOP**(NUS+II-M)
    C32=Z1**II/FAKT(II,42)
    TOP3=TOP3+C31*C32
  END DO
  TERM3=C11*TOP3

```

```

!!! DÖRDÜNCÜ TERİM
TOP4=0.0D0
DO II=0,N+M
C41=FAKT(NUS+II-M-1,51)/ZTOP**(NUS+II-M)
C42=Z1**II/FAKT(II,52)
TOP44=0.0D0
DO IL=0,NUS+II-M-1
C43=ZTOP**IL*RDOT**IL/FAKT(IL,53)
TOP44=TOP44+C43
END DO
TOP4=TOP4+C41*C42*TOP44
END DO
TERM4=C11*DEXP(-ZTOP*RDOT)*TOP4

!!! BEŞİNCİ TERİM
TOP5=0.0D0
DO II=0,N-M-1
C51=FAKT(N-M-1,61)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II,62)
C52=FAKT(NUS+II+M,63)/ZTOP**(NUS+II+M+1)
TOP5=TOP5+C51*C52
END DO
TERM5=TOP5

!!! ALTINCI DÖNGÜ
TOP6=0.0D0
DO II=0,N-M-1
C61=FAKT(N-M-1,71)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II,72)
C62=FAKT(NUS+II+M,73)/ZTOP**(NUS+II+M+1)
C63=DEXP(-ZTOP*RDOT)
TOP61=0.0D0
DO ILL=0,NUS+M+II
C64=ZTOP**ILL*RDOT**ILL/FAKT(ILL,74)
TOP61=TOP61*C64
END DO
C65=C61*C62*C63*TOP61
TOP6=TOP6+C65
END DO
TERM6=TOP6

!!! YEDİNCİ DÖNGÜ
TOP7=0.0D0
DO II=0,N-M-1
C71=FAKT(N-M-1,81)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II,82)
C72=FAKT(NUS+M,83)/ZTOP**(NUS+M+1)
C73=RDOT**II*DEXP(-Z1*RDOT)
C74=C71*C72*C73
TOP7=TOP7+C74
END DO
TERM7=TOP7

!!! SEKİZİNCİ DÖNGÜ
TOP8=0.0D0
DO II=0,N-M-1
C81=FAKT(N-M-1,91)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II,92)
C82=FAKT(NUS+M,93)/ZTOP**(NUS+M+1)
C83=RDOT**II*DEXP(-ZTOP*RDOT)
TOP81=0.0D0

```



```

        DO IL=0,NUS+1
        C84=Z2**IL*RDOT**IL/FAKT(IL,94)
        TOP81=TOP81+C84
        END DO
        C85=C81*C82*C83*TOP81
        TOP8=TOP8+C85
        END DO
        TERM8=TOP8
    TOPL=TOPL+GAUNT*(TERM1-TERM2-TERM3+TERM4+TERM5-TERM6-
    >TERM7+TERM8)
        END DO
        TOP=TOP+CI(LS1,I)*CI(LS2,J)*CI(LS3,K)*CI(LS4,L)*B31*TOPL
12 CONTINUE
    COUL=TOP
    RETURN
    END
    REAL*8 FUNCTION FUNK(IN,ZET,RDOT)
    IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
    NL=2*IN
        TOPH=0D0
        DO IJ=0,NL
            prc=(2*zet)**ij
            CB=prc*RDOT**IJ/FAKT(IJ,101)
            TOPH=TOPH+CB
        END DO
        CDB=DEXP(dfloat(-2)*ZET*RDOT)*TOPH
        FUNK=DSQRT(1.0d0-CDB)
        RETURN
    END
    REAL*8 FUNCTION potan(NCY,RDOT,L)
    IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
    PARAMETER (npop=28,nmax=5)
    COMMON
    CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),OVERLB(NMAX,NMAX),EOZ(NPOP),
    >NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),
    >MORB(NMAX)
    TOPP=0.0D0
    DO I=1,NMAX
        DO J=1,NMAX
            KO1=NBQ(J)
            KO2=NBQ(I)
            I1=LANG(J)
            I2=LANG(I)
            m1=MBQ(j)
            m2=MBQ(I)
            ZEJ=ZETI(L,J)
            ZEI=ZETI(L,I)
            IF(L1.NE.L2.OR.M1.NE.M2)GOTO 15
            C2=(ZEJ+ZEI)/(KO1+KO2)
            TRM1=C2*OVERLB(I,J)
            FH1=(2*ZEJ)**(KO1+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*KO1,111))
            FH2=FH1/FUNK(KO1,ZEJ,RDOT)
            FH3=(2*ZEI)**(KO2+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*KO2,112))

```

```

        FH4=FH3/FUNK(KO2,ZEI,RDOT)
        TRM2=FM2*FH4*DEXP(-(ZEJ+ZEI)*RDOT)*RDOT**(KO1+KO2)/(KO1+KO2)
        TRM=CI(L,I)*CI(L,J)*(TRM1+TRM2)
        TOPP=TOPP+TRM
15    END DO
    END DO
    POTAN=-NCY*TOPP
    RETURN
    END
    SUBROUTINE CTKOV(L,RDOT,AMETK,HBAR,CNOV)
    IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
    PARAMETER (npop=28,nmax=5)
    COMMON
    CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),OVERLB(NMAX,NMAX),EOZ(NPOP),
    >NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),
    >MORB(NMAX)
    sb=hbar**2/AMETK
    HIKI=2.0D0
    TOPK=0.D0
    DO I=1,NMAX
    CK=CI(L,I)
    ZTU=ZETI(L,I)
    NI=NBQ(I)
    LI=lang(i)
    MI=MBQ(I)
    DO 5 J=1,NMAX
    LJ=LANG(J)
    MJ=MBQ(J)
    CT=CI(L,J)
    NJ=NBQ(J)
    ZTE=ZETI(L,J)
    if(LI.ne.LJ.OR.MI.NE.MJ) goto 5
    C11=(ZTU+ZTE)**2*(LJ*(LJ+1)-NJ*(NJ-1))/HIKI/(NI+NJ)/(NI+NJ-1)
    FG1=(2*ZTU)**(NI+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*NI,121))/(FUNK(NI,ZTU,RDOT))
    FG2=(2*ZTE)**(NJ+.5D0)/DSQRT(FAKT(2*NJ,122))/(FUNK(NJ,ZTE,RDOT))
    CC1=FG1*FG2*(LJ*(LJ+1)-NJ*(NJ-1))/HIKI/(NI+NJ-1)*DEXP(-RDOT*
    > (ZTU+ZTE))*RDOT**(NI+NJ-1)
    CC12=1.0d0+RDOT*(ZTU+ZTE)/(NI+NJ)
    C1=C11*OVERLB(I,J)+CC1*CC12
    C31=ZTE*NJ*(ZTU+ZTE)/(NI+NJ)*OVERLB(I,J)
    C32=FG1*FG2*ZTE*NJ*DEXP(-(ZTU+ZTE)*RDOT)*RDOT**(NI+NJ)/(NI+NJ)
    C3=C31+C32
    C4=ZTE**2/HIKI*OVERLB(I,J)
    TOPK=TOPK+CT*CK*(c1+c3-c4)
5    CONTINUE
    END DO
    CNOV=topk
    RETURN
    END
    SUBROUTINE OVER(RDOT,IBRY)
    IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
    PARAMETER (npop=28,nmax=5)

```

```

COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),OVERLB(NMAX,NMAX),EOZ(NPOP),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),
>MORB(NMAX)
do 1 i=1,nmax
do 1 j=i,nmax
overlb(i,j)=0.0d0
overlb(j,i)=0.0d0
1 continue
DO I=1,NMAX
DO J=I,NMAX
    ZI=ZETI(IBRY,I)
    ZJ=ZETI(IBRY,J)
    NI=NBQ(I)
    NJ=NBQ(J)
    LI=LANG(I)
    LJ=LANG(J)
    Z=ZI+ZJ
    N=NI+NJ
    IF(LI.NE.LJ) THEN
    OVERLB(I,J)=0.0D0
    OVERLB(J,I)=0.0D0
    ELSE
    BD1=(2*ZI)**(NI+.5D0)*(2*ZJ)**(NJ+.5D0)
    BD0=FAKT(2*NI,131)*FAKT(2*NJ,132)
    BD2=DSQRT(BD0)
    BD21=FUNK(NI,ZI,RDOT)
    BD22=FUNK(NJ,ZJ,RDOT)
    BD31=BD1/(BD21*BD22*BD2)
    CNK=FAKT(N,133)
    CLE=CNK/Z**(N+1)
    TOPG=0.0D0
    DO LK=0, N
        CL=Z**LK*RDOT**LK/FAKT(LK,134)
        TOPG=TOPG+CL
    END DO
    CD=1.0D0-DEXP(-Z*RDOT)*TOPG
    CZE=BD31*CLE*CD
    OVERLB(I,J)=CZE
    OVERLB(J,I)=CZE
    END IF
    END DO
    END DO
    RETURN
    END

subroutine clofmn(nmax, isize)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
jsay=0
do 10 n=2,nmax,2
nbas(n/2)=jsay
do 11 n1=0,n,2
do 15 m=2,(n+n1)/2

```

```

jsay=jsay + 1
if (jsay.gt.isize) then
write(*,*) ' genelleştirilmiş binom katsayıları dizisi doldu'
stop
end if
jn=n-2
jm=m-1
jm1=m-2
dizi(jsay)=dfnn(jn,n1,m)+2*dfnn(jn,n1,jm)+dfnn(jn,n1,jm1)
15 continue
11 continue
10 continue
return
end
real*8 function dfnn(in,in1,im)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
n=in
n1=in1
m=im
js2=1
if (m .gt. (n+n1)/2) then
m=n+n1-m
end if
if(m.lt.0) then
dfnn=0
return
endif
if (n.lt.n1) then
jc=n
n=n1
n1=jc
js2=-1
if (2*(m/2).eq.m) js2=1
end if
if (m.eq.0) then
dfnn=js2
return
end if
if (m .eq. 1) then
dfnn=js2*(n-n1)
return
end if
jek=(n1*(2*n+n1-6))/8
jsira=nbas(n/2)+m+jek-1
dfnn=js2*dizi(jsira)
return
end
real*8 function fmn(n,n1,m)
implicit real*8 (a-h,o-z)
if (2*(n/2).ne.n) then
if (2*(n1/2).ne.n1) then
fmn=dfnn(n-1,n1-1,m)-dfnn(n-1,n1-1,m-2)

```

```

else
  fmnn=dfnn(n-1,n1,m)+dfnn(n-1,n1,m-1)
end if
else
  if (2*(n1/2).ne.n1) then
    fmnn=dfnn(n,n1-1,m)-dfnn(n,n1-1,m-1)
  else
    fmnn=dfnn(n,n1,m)
  end if
end if
return
end
real*8 function gaunclb(ilb,il,im,il1,im1)
implicit real*8(a-h,o-z)
drtpi=1.6d0*atan(1d0)
lb=ilb
l=il
m=im
l1=il1
m1=im1
mb=m-m1
gauncrp=dsqrt(dfloat(2*l1+1)*dfloat(2*l+1)/dfloat(2*lb+1)/drtpi)
m2=-m1
is=1
if((2*(abs(m)/2)).ne.abs(m)) is=-is
gaunclb=is*gauncrp*clebgen(l,0,l1,0,lb,0)*clebgen(l,m,l1,m2,lb,mb)
return
end
real*8 function clebgen(ij1,im1,ij2,im2,ij,im)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
j1=ij1
j2=ij2
m1=im1
m2=im2
j=ij
m=im
if (m.ne.m1+m2.or.abs(m).gt.j.or.j.gt.j1+j.or.j.lt.abs(j1-j2). or.abs(m2).gt.j2. or.
>abs(m1).gt.j1) then
  clebgen=0
  return
end if
nmin=max(0,j2+m2-j-m,j1-m1-j+m)
nmax=min(j1+j2-j,j2+m2,j1-m1)
sum=0
is=1
if(2*(nmin/2).ne.nmin) is=-is
k3=j+m
k5=j-m
k1=j1+j2-j
k4=j2+m2
k6=j1-m1
do 40 n=nmin,nmax

```

```

t=is*fmnn(k1,0,n)*fmnn(k3,0,k4-n)*fmnn(k5,0,k6-n)
sum=sum+t
is=-is
40 continue
a=(2*j+1)
k1=j1+j2+j+1
k2=j1+j2-j
k3=2*j
k4=j+m
k6=j1-j2+j
k8=j2-j1+j
k9=2*j1
k0=j1+m1
ka=2*j2
kb=j2+m2
b=fmnn(k1,0,k2)/fmnn(k1,0,k6)
c=dfloat(2*j1+1)*dfloat(2*j2+1)
c=c*fmnn(k1,0,k8)*fmnn(k9,0,k0)/fmnn(k3,0,k4)
c=c*fmnn(ka,0,kb)
clebgen=a*sqrt(b/c)*sum
return
end
Real*8 function Fakt(k,NN)
implicit real*8 (a-h,o-z)
IF(K.LT.0)THEN
WRITE(*,*)'NEGATIF SAYININ FAKTORİYELİ OLMAZ',K
ENDIF
fakt=1.0D0
do 10 j=1,k
fakt=fakt*j
10 continue
Return
end

```

### EK-3. Sonlu Küresel Kuantum Nokta Yapının Enerji Beklenen Değerlerini Hesaplayan Fortran Programı

```
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
PARAMETER (NPOP=100,nmax=5,NAX=5)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
COMMON
>CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),tk(npop),tp(npop),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),
>MORB(NMAX),
>NQ(NAX),LNG(NAX),MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
REAL*8 EFIT(NPOP),REFIT(NPOP)
DATA NAO/1/
C NORB ATOMİK ORBITALLERİN BAS KUANTUM SAYISIDIR
DATA NORB /1,4*0/
C LORB ATOMİK ORBITALLERİN YORUNGESEL MOMENTUM KUANTUM
SAYISIDIR
DATA LORB/0,4*0/
C MORB ATOMİK ORBITALLERİN MAGNETİK MOMENT KUANTUM
SAYISIDIR
DATA MORB/0,4*0/
C BAZ SETLERİNİN (STO) YORUNGESEL MOMENTUM KUANTUM SAYISIDIR
DATA LANG/0,0,0,0,0/
C BAZ SETLERİN (STO) BAS KUANTUM SAYISIDIR
DATA NBQ/1,1,1,1,1/
C BAZ SETLERİN (STO) MAGNETİK KUANTUM SAYISIDIR
DATA MBQ/0,0,0,0,0/
!!!! DIŞDAKİ NRB ATOMİK ORBITALLERİN BAS KUANTUM SAYISIDIR
DATA NRB/1,4*0/
C DIŞDAKİ LRB ATOMİK ORBITALLERİN YORUNGESEL MOMENTUM KUANT
SAYISI
DATA LRB/0,4*0/
C DIŞDAKİ MORB ATOMİK ORBITALLERİN MAGNETİK MOMENT KUANT
SAYISIDIR
DATA MRB/0,4*0/
C DIŞDAKİ BAZ SETLERİNİN (STO) BA□ KUANTUM SAYISI
DATA NQ/1,1,1,1,1/
DATA LNG/0,0,0,0,0/
C DIŞDAKİ BAZ SETLERİN (STO) BAS KUANTUM SAYISIDIR
DATA MQ/0,0,0,0,0/
open(2,file='1sc sonluvirial.dat',status='unknown')
open(3,file='1sc 1ELSONLUN5x03en.dat',status='unknown')
call clofmn (50,100000)
MAXIT=3000 !max iterasyon sayısı
ERYI=5.72D-3 !ETKİN TYDBERG SABİTİ
V0=0.2278d0/2.0D0/ERYI !RYDBERG CİNSİNDEN SINIRLANDIRICI POT
PC=0.95D0 !crossover olasılığı
PM=0.05D0 !mutasyon olasılığı
CY=1
NKK=1
```

```

IELK=NKK
IKKB=1
EM11=6.7D-2      !İÇERİDEKİ ETKİN KÜTLE
EM22=9.1550D-2  !DISARIDAKİ ETKİN KÜTLE
em12=em22/em11  !DISARIDAKİ BAGIL ETKİN KÜTLE
DCON1=13.18D0   !İÇERİDEKİ DİELEKTRİK SABİTİ
DCON2=12.244D0  !DISARIDAKİ DİELEKTRİK SABİTİ
dcons=dcon2/dcon1 !DISARIDAKİ BAGIL DİELEKTRİK SABİTİ
RDOT=0.0D0
42 IF(RDOT.LT.10.0D0)THEN
RDOT=RDOT+0.5D0
ELSE
RDOT=RDOT+5.0D0
ENDIF
CALL SRAND(27842)
CALL CZETA(NPOP,RDOT,NAO,NMAX,NAX,CI,ZETI,CL,ZETL)
DO 321 IT=1,MAXIT
CALL SINIR(RDOT,EM11,EM22)
CALL
ENERJI(CY,NAO,IKKB,IELK,NKK,RDOT,EM12,em11,em22,dcon1,dcon2,
>DCONS,V0,TOPLAM)
CALL STATISTICS(NPOP,NAO,EOZ,EFIT,REFIT,TOPLIT,IMIN,EMIN)
WRITE(*,*)IT,EMIN
if (it.ge.3000) then
WRITE(3,*)RDOT,EMIN
WRITE(2,*)RDOT
DO JI=1, NMAX
Write(2,*)CI(IMIN,JI)
END DO
DO JI=1, NAX
Write(2,*)CL(IMIN,JI)
END DO
DO JI=1, NMAX
Write(2,*)ZETI(IMIN,JI)
END DO
DO JI=1, NAX
Write(2,*)ZETL(IMIN,JI)
END DO
end if
15 FORMAT(5(2x,F20.8))
CALL
GENAL(NPOP,NAO,NMAX,NAX,CI,ZETI,CL,ZETL,REFIT,EFIT,PC,PM)
321 continue
IF (RDOT.LT.49.8D0)GOTO 42
END      ! ana programın sonu
SUBROUTINE ENERJI(CY,NAO,IKKB,IELK,NKK,RDOT,EM12,em11,em22,dcon1,
> dcon2,DCONS,V0,TOPLAM)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
PARAMETER (NPOP=100,nmax=5,NAX=5)
COMMON
> CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),tk(npop),tp(npop),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),

```



```

>MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),
>MRB(NAX)
    HIKI=2.0D0
    DO I=1,NPOP,NAO
        CALL OVERI(RDOT,I)
        CALL OVERD(RDOT,I)
        CALL ORTNRM(NAO,I)
    CC  kinetik ve potansiyel integrallerini hesaplıyor
        TOPTK=0.D0
        DO 75 K=1,nkk
            L=I+K-1
    C  dotun içindeki kinetik enerjiyi hesaplıyor
        CALL CTKOVI(L,RDOT,CNOV)
    C  dotun dışındaki kinetik enerjiyi hesaplıyor
        CALL CTKOVD(L,RDOT,EM12,CNOVD)
    C  sınırlandırıcı potansiyelin değerini hesaplıyor
        CALL DISPOT(L,RDOT,V0,DV0)
    C  İçerideki nükleer çekim potansiyel enerjiyi hesaplıyor
        POTI=potan(CY,RDOT,L)
    C  dışarıdaki nükleer çekim potansiyel enerjiyi hesaplıyor
        POTD=potanD(CY,RDOT,L,DCONS)
        TOPTK=TOPTK+HIKI*(CNOV+CNOVD+POTI+POTD+DV0)
        BLHGF=CNOV+CNOVD
        IF(CNOVD.LT.0)THEN
            END IF
    75  CONTINUE
        TOPLAM=TOPTK
        tk(i)=cnov+cnovd
        tp(i)=poti+potd+DV0
        EOZ(I)=toplam
        END DO
        RETURN
        END
SUBROUTINE DISPOT(L,RDOT,V0,DV0)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=100,nmax=5,NAX=5)
COMMON CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),
>ZETL(NPOP,NAX),OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),
>EOZ(NPOP),tk(npop),tp(npop),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),
>NORB(NMAX),LORB(NMAX),MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),
>MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
    HIKI=2.0D0
    TOPV=0.D0
    DO I=1,NAX
        N1=NQ(I)
        L1=lng(I)
        M1=MQ(I)
        DO J=1,NAX
            N2=NQ(J)
            L2=LNG(J)
            M2=MQ(J)
            CC1=CL(L,I)
            CC2=CL(L,J)

```

```

Z1=ZETL(L,I)
Z2=ZETL(L,J)
TOPV=TOPV+CC1*CC2*OVERL(I,J)
END DO
END DO
DV0=V0*TOPV
RETURN
END
REAL*8 FUNCTION coull(LS1,LS2,LS3,LS4,RDOT)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=100,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),tk(npop),tp(npop),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),
>MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),
>MRB(NAX)
    dpi=16.0d0*datan(1.0d0)
    TOP=0.0D0
    DO 12 I=1,NMAX
    L1=LANG(I)
    M1=MBQ(I)
    DO 12 J=1,NMAX
    L2=LANG(J)
    M2=MBQ(J)
    DO 12 K=1,NMAX
    L3=LANG(K)
    M3=MBQ(K)
    DO 12 L=1,NMAX
    L4=LANG(L)
    M4=MBQ(L)
    L1US=L1+L3
    L2US=L2+L4
    LFRK=ABS(L1US-L2US)
    M1FK=M1-M3
    M2FK=M4-M2
    IF(2*(LFRK/2).NE.LFRK.OR.M1FK.NE.M2FK)GOTO 12
    N1=NBQ(I)
    N2=NBQ(J)
    N3=NBQ(K)
    N4=NBQ(L)
    N=N1+N3
    NUS=N2+N4
    ZT1=ZETI(LS1,I)
    ZT2=ZETI(LS2,J)
    ZT3=ZETI(LS3,K)
    ZT4=ZETI(LS4,L)
    Z1=(ZT1+ZT3)
    Z2=(ZT2+ZT4)
    ZTOP=Z1+Z2
    JALT=MAX(ABS(L1-L3),ABS(L2-L4))
    JUST=MIN(L1US,L2US)
    TOPL=0.0D0

```

```

DO M=JALT,JUST,2
gaunt1=gaunclb(M,L1,0,L3,0)
gaunt2=gaunclb(M,L4,0,L2,0)
gaunt=gaunt1*gaunt2*dpi/(2.0d0*M+1) !steinborn tanımında
!!! BİRİNCİ TERİM
c11=fakt(N+M)/Z1**(N+M+1)
c12=fakt(NUS-M-1)/Z2**(NUS-M)
TERM1=c11*c12
!!! İKİNCİ TERİM HESAPLANIYOR
TOP2=0.0D0
DO II=0,NUS-M-1
C21=Z2**II*RDOT**II/FAKT(II)
TOP2=TOP2+C21
END DO
TERM2=TERM1*DEXP(-Z2*RDOT)*TOP2
!!! ÜÇÜNCÜ TERİM
TOP3=0.0D0
DO II=0,N+M
C31=FAKT(NUS+II-M-1)/ZTOP**(NUS+II-M)
C32=Z1**II/FAKT(II)
TOP3=TOP3+C31*C32
END DO
TERM3=C11*TOP3
!!! DÖRDÜNCÜ TERİM
TOP4=0.0D0
DO II=0,N+M
C41=FAKT(NUS+II-M-1)/ZTOP**(NUS+II-M)
C42=Z1**II/FAKT(II)
TOP44=0.0D0
DO IL=0,NUS+II-M-1
C43=ZTOP**IL*RDOT**IL/FAKT(IL)
TOP44=TOP44+C43
END DO
TOP4=TOP4+C41*C42*TOP44
END DO
TERM4=C11*DEXP(-ZTOP*RDOT)*TOP4
!!! BEŞİNCİ TERİM
TOP5=0.0D0
DO II=0,N-M-1
C51=FAKT(N-M-1)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II)
C52=FAKT(NUS+II+M)/ZTOP**(NUS+II+M+1)
TOP5=TOP5+C51*C52
END DO
TERM5=TOP5
!!! ALTINCI DÖNGÜ
TOP6=0.0D0
DO II=0,N-M-1
C61=FAKT(N-M-1)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II)
C62=FAKT(NUS+II+M)/ZTOP**(NUS+II+M+1)
C63=DEXP(-ZTOP*RDOT)
TOP61=0.0D0
DO ILL=0,NUS+M+II
C64=ZTOP**ILL*RDOT**ILL/FAKT(ILL)

```

```

TOP61=TOP61*C64
END DO
C65=C61*C62*C63*TOP61
TOP6=TOP6+C65
END DO
TERM6=TOP6
!!! YEDİNCİ DÖNGÜ
TOP7=0.0D0
DO II=0,N-M-1
C71=FAKT(N-M-1)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II)
C72=FAKT(NUS+M)/ZTOP**(NUS+M+1)
C73=RDOT**II*DEXP(-Z1*RDOT)
C74=C71*C72*C73
TOP7=TOP7+C74
END DO
TERM7=TOP7
!!! SEKİZİNCİ DÖNGÜ
TOP8=0.0D0
DO II=0,N-M-1
C81=FAKT(N-M-1)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II)
C82=FAKT(NUS+M)/ZTOP**(NUS+M+1)
C83=RDOT**II*DEXP(-ZTOP*RDOT)
TOP81=0.0D0
DO IL=0,NUS+1
C84=Z2**IL*RDOT**IL/FAKT(IL)
TOP81=TOP81+C84
END DO
C85=C81*C82*C83*TOP81
TOP8=TOP8+C85
END DO
TERM8=TOP8
TOPL=TOPL+GAUNT*(TERM1-TERM2-TERM3+TERM4+TERM5-
>TERM6->TERM7+TERM8)
END DO
TOP=TOP+CI(LS1,I)*CI(LS2,J)*CI(LS3,K)*CI(LS4,L)*B31*TOPL
12 CONTINUE
COULI=TOP
RETURN
END
REAL*8 FUNCTION FUNK(IN,ZET,RDOT)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
NL=2*IN
TOPH=0D0
DO II=0,NL
prc=(2*zet)**ij
CB=prc*RDOT**II/FAKT(II)
TOPH=TOPH+CB
END DO
CDB=DEXP(dfloat(-2)*ZET*RDOT)*TOPH
FUNK=DSQRT(1.0d0-CDB)
RETURN
END

```

```

REAL*8 FUNCTION FUNKI(IN,ZET,RDOT)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
NL=2*IN
  TOPH=0D0
  DO IJ=0,NL
    prc=(2*zet)**ij
    CB=prc*RDOT**IJ/FAKT(IJ)
    TOPH=TOPH+CB
  END DO
  CDB=DEXP(dfloat(-2)*ZET*RDOT)*TOPH
  FUNKI=DSQRT(CDB)
  RETURN
END

REAL*8 FUNCTION POTAN(CY,RDOT,L)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=100,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),tk(npop),tp(npop),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),
>LORB(NMAX),MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),MQ(NAX),
>NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
  TOPP=0.D0
  HIKI=2.0D0
  DO I=1,NMAX
  DO J=1,NMAX
    OK1=NBQ(J)
    OK2=NBQ(I)
    I1=LANG(J)
    I2=LANG(I)
    m1=MBQ(j)
    m2=MBQ(I)
    IF(L1.NE.L2.OR.M1.NE.M2)GOTO 23
    C2=(ZETI(L,J)+ZETI(L,I))/(OK1+OK2)
    TRM1=C2*OVERLB(I,J)
    TRM2=DEXP(-(ZETI(L,J)+ZETI(L,I))*RDOT)*RDOT**
    >(OK1+OK2)/(OK1+OK2)
    TRM=CI(L,I)*CI(L,J)*(TRM1+TRM2)
    TOPP=TOPP+TRM
  23 CONTINUE
  END DO
  END DO
  POTAN=-CY*TOPP!/dcon1
  RETURN
END

REAL*8 FUNCTION POTAND(CY,RDOT,L,DCONS)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=100,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),
>tk(npop),tp(npop),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),

```

```

>LORB(NMAX),MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),MQ(NAX),
>NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
TOPP=0.D0
HIKI=2.0D0
DO I=1,NAX
DO J=1,NAX
OK1=NQ(J)
OK2=NQ(I)
L12=LRB(J)
L22=LRB(I)
I1=LNG(J)
I2=LNG(I)
m1=MQ(j)
m2=MQ(I)
IF(L1.NE.L2.OR.M1.NE.M2)GOTO 26
C2=((ZETL(L,J)+ZETL(L,I))/(OK1+OK2))
TRM1=C2*OVERL(I,J)
TRM2=DEXP(-(ZETL(L,J)+ZETL(L,I))*RDOT)*RDOT**
>(OK1+OK2)/(OK1+OK2)
TRM=CL(L,I)*CL(L,J)*(TRM1-TRM2)
TOPP=TOPP+TRM
26 CONTINUE
END DO
END DO
POTAND=-CY*TOPP/DCONS!dcon2!
RETURN
END
SUBROUTINE CTKOVI(L,RDOT,CNOV)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=100,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),
>tk(npop),tp(npop),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),
>NORB(NMAX),LORB(NMAX),MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),
>MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
HIKI=2.0D0
TOPK=0.D0
DO I=1,NMAX
NI=NBQ(I)
LI=lang(I)
MI=MBQ(I)
CK=CI(L,I)
ZTU=ZETI(L,I)
DO J=1,NMAX
NJ=NBQ(J)
LJ=LANG(J)
MJ=MBQ(J)
CT=CI(L,J)
ZTE=ZETI(L,J)
if(LI.ne.LJ.OR.MI.NE.MJ) GOTO 24
C11=(ZTU+ZTE)**2*(LJ*(LJ+1)-NJ*(NJ-1))/HIKI/(NI+NJ)/(NI+NJ-1)
CC1=(LJ*(LJ+1)-NJ*(NJ-1))/HIKI/(NI+NJ-1)*DEXP(-RDOT*(ZTU+ZTE))*

```

```

>RDOT**(NI+NJ-1)
CC12=1.0d0+RDOT*(ZTU+ZTE)/(NI+NJ)
C1=C11*OVERLB(I,J)+CC1*CC12
C31=ZTE*NJ*(ZTU+ZTE)/(NI+NJ)*OVERLB(I,J)
C32=ZTE*NJ*DEXP(-(ZTU+ZTE)*RDOT)*RDOT**(NI+NJ)/(NI+NJ)
C3=C31+C32
C4=ZTE**2/HIKI*OVERLB(I,J)
TOPK=TOPK+CT*CK*(c1+c3-c4)
24 CONTINUE
END DO
END DO
CNOV=TOPK!/em11
RETURN
END
SUBROUTINE CTKOVD(L,RDOT,EM12,CNOVD)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=100,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),
>tk(npop),tp(npop),
    >NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),
>LORB(NMAX),MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),MQ(NAX),
>NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
HIKI=2.0D0
TOPK=0.D0
DO I=1,NAX
    CK=CL(L,I)
    Z1=ZETL(L,I)
    L1=LRB(I)
    NI=NQ(I)
    LI=lng(i)
    MI=MQ(I)
    M1=MRB(I)
DO J=1,NAX
    L2=LRB(J)
    LJ=LNG(J)
    MJ=MQ(J)
    M2=MRB(J)
    CT=CL(L,J)
    NJ=NQ(J)
    Z2=ZETL(L,J)
if(LI.ne.LJ.OR.MI.NE.MJ) GOTO 15
C11=(Z1+Z2)**2*(LJ*(LJ+1)-NJ*(NJ-1))/HIKI/(NI+NJ)/(NI+NJ-1)
CC1=(LJ*(LJ+1)-NJ*(NJ-1))*DEXP(-RDOT*(Z1+Z2))*RDOT**
>(NI+NJ-1)/HIKI/(NI+NJ-1)
CC12=1.0d0+RDOT*(Z1+Z2)/(NI+NJ)
CA1=C11*OVERL(J,I)-CC1*CC12
C31=Z2*NJ*(Z1+Z2)*OVERL(J,I)/(NI+NJ)
C32=Z2*NJ*DEXP(-(Z1+Z2)*RDOT)*RDOT**(NI+NJ)/(NI+NJ)
CA3=C31-C32
CA4=Z2**2/HIKI*OVERL(J,I)
TOPK=TOPK+CT*CK*(cA1+cA3-cA4)

```

```

15 CONTINUE
  END DO
  END DO
  CNOVD=topk/EM12!em22!
  RETURN
  END
  SUBROUTINE OVERI(RDOT,IBRY)
  IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
  PARAMETER (NPOP=100,nmax=5,NAX=5)
  COMMON
  CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
  >OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),
  >tk(npop),tp(npop),
  >NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),
  >LORB(NMAX),MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),MQ(NAX),
  >NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
  dpi=16.0d0*datan(1.0d0)
  do 1 i=1,nmax
  do 1 j=i,nmax
  overlb(i,j)=0.0d0
  overlb(j,i)=0.0d0
1  continue
  DO I=1,NMAX
  DO J=I,NMAX
  ZI=ZETI(IBRY,I)
  ZJ=ZETI(IBRY,J)
  NI=NBQ(I)
  NJ=NBQ(J)
  LI=LANG(I)
  LJ=LANG(J)
  Z=ZI+ZJ
  IF(LI.NE.LJ) THEN
  OVERLB(I,J)=0.0D0
  OVERLB(J,I)=0.0D0
  ELSE
  CNK=fakt(ni+nj)
  CLE=CNK/Z**(NI+NJ+1)
  CNL=DEXP(-Z*RDOT)
  JAL=0
  JUS=NI+NJ
  TPL=0.0D0
  DO IL=JAL,JUS
  CNI=Z**IL*RDOT**IL/FAKT(IL)
  TPL=TPL+CNI
  END DO
  CZE=CLE*(1.0d0-CNL*TPL)
  OVERLB(I,J)=CZE
  OVERLB(J,I)=CZE
  END IF
  END DO
  END DO
  RETURN
  END

```



```

SUBROUTINE OVERD(RDOT,IBRY)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=100,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),
>tk(npop),tp(npop),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),
>NORB(NMAX),LORB(NMAX),MORB(NMAX),>NQ(NAX),LNG(NAX),
>MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
dpi=16.0d0*datan(1.0d0)
do 111 I=1,nax
do 111 J=I,nax
overl(I,J)=0.0d0
overl(J,I)=0.0d0
111 continue
DO I=1,NAX
DO J=1,NAX
ZI=ZETL(IBRY,I)
ZJ=ZETL(IBRY,J)
NI=NQ(I)
NJ=NQ(J)
LI=LNG(I)
LJ=LNG(J)
Z=ZI+ZJ
IF(LI.NE.LJ) THEN
OVERL(I,J)=0.0D0
OVERL(J,I)=0.0D0
ELSE
CNK=fakt(ni+nj)
CLE=CNK/Z**(NI+NJ+1)
CNL=DEXP(-Z*RDOT)
JAL=0
JUS=NI+NJ
TPL=0.0D0
DO IL=JAL,JUS
CNI=Z**IL*RDOT**IL/FAKT(IL)
TPL=TPL+CNI
END DO
END IF
CZE=CLE*CNL*TPL
OVERL(I,J)=CZE
OVERL(J,I)=CZE
END DO
END DO
RETURN
END
SUBROUTINE ORTNRM(NAO,IBRY) !!!!!!!
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=100,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),
>tk(npop),tp(npop),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),

```

```

>NORB(NMAX),LORB(NMAX),MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),
>MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
  dpi=16.0d0*datan(1.0d0)
  TOP1=0.0D0
  DO J=1,NMAX
  TOP1=TOP1+CI(IBRY,J)**2*OVERLB(J,J)
  DO I=J+1,NMAX
  TOP1=TOP1+2.0D0*CI(IBRY,J)*CI(IBRY,I)*OVERLB(J,I)
  END DO
  END DO
  TOPK=0.0D0
  DO L=1,NAX
  TOPK=TOPK+CL(IBRY,L)**2*OVERL(L,L)
  DO K=L+1,NAX
  TOPK=TOPK+2.0D0*CL(IBRY,L)*CL(IBRY,K)*OVERL(L,K)
  END DO
  END DO
  TOP=(TOP1+TOPK)
  IF (TOP.LT.0)THEN
  CNORM=dsqrt(-TOP)
  ELSE
  CNORM=dsqrt(TOP)
  END IF
  DO J=1,NMAX
  CI(IBRY,J)=CI(IBRY,J)/CNORM
  END DO
  DO IL=1,NAX
  CL(IBRY,IL)=CL(IBRY,IL)/CNORM
  END DO
  IF(NAO.EQ.1)GOTO 61
!!!! ATOMİK ORTOGONALLIK HESAPLANIYOR
  DO K=2,NAO
  DO M=1,K-1
  TOP3=0.D0
  DO J=1,NMAX
  DO I=1,NMAX
  GFR=CI(IBRY+K-1,J)*CI(IBRY+M-1,I)*OVERLB(I,J)
  TOP3=TOP3+GFR
  END DO
  END DO
  TOP4=0.0D0
  DO J=1,NAX
  DO I=1,NAX
  TOP4=TOP4+CL(IBRY+K-1,J)*CL(IBRY+M-1,I)*OVERL(I,J)
  END DO
  END DO
  DO J=1,NMAX
  CI(IBRY+K-1,J)=CI(IBRY+K-1,J)-TOP1*CI(IBRY+M-1,J)
  END DO
  DO I=1,NAX
  CL(IBRY+K-1,I)=CL(IBRY+K-1,I)-TOP1*CL(IBRY+M-1,I)
  END DO
  END DO

```

```

TOP5=0.D0
DO J=1,NMAX
  BGR=CI(IBRY+K-1,J)**2*OVERLB(J,J)
TOP5=TOP5+BGR
DO I=J+1,NMAX
  SDRF=2*CI(IBRY+K-1,J)*CI(IBRY+K-1,I)*OVERLB(I,J)
TOP5=TOP5+SDRF
END DO
END DO
TOP6=0.0D0
DO J=1,NAX
  BDFR=CL(IBRY+K-1,J)**2*OVERL(J,J)
TOP6=TOP6+BDFR
END DO
DO I=J+1,NAX
  SDRK=2*CL(IBRY+K-1,J)*CL(IBRY+K-1,I)*OVERL(I,J)
TOP6=TOP6+SDRK
END DO
TOPM=TOP5+TOP6
IF(TOPM.LT.0)THEN
  CNORM=DSQRT(-TOPM)
ELSE
  CNORM=DSQRT(TOPM)
END IF
DO J=1,NMAX
  CI(IBRY+K-1,J)=CI(IBRY+K-1,J)/CNORM
END DO
DO J=1,NAX
  CL(IBRY+K-1,J)=CL(IBRY+K-1,J)/CNORM
END DO
END DO
61 RETURN
END
subroutine clofnn(nmax, isize)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
jsay=0
do 10 n=2,nmax,2
  nbas(n/2)=jsay
do 11 n1=0,n,2
do 15 m=2,(n+n1)/2
  jsay=jsay + 1
  if (jsay.gt.isize) then
    write(*,*) ' genellestirilmis binom katsayilari dizisi doldu'
    stop
  end if
  jn=n-2
  jm=m-1
  jm1=m-2
  dizi(jsay)=dfnn(jn,n1,m)+2*dfnn(jn,n1,jm)+dfnn(jn,n1,jm1)
15 continue
11 continue
10 continue

```

```

return
end
real*8 function dfnn(in,in1,im)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
n=in
n1=in1
m=im
js2=1
if (m .gt. (n+n1)/2) then
m=n+n1-m
end if
if(m.lt.0) then
dfnn=0
return
endif
if (n.lt.n1) then
jc=n
n=n1
n1=jc
js2=-1
if (2*(m/2).eq.m) js2=1
end if
if (m.eq.0) then
dfnn=js2
return
end if
if (m .eq. 1) then
dfnn=js2*(n-n1)
return
end if
jek=(n1*(2*n+n1-6))/8
jsira=nbas(n/2)+m+jek-1
dfnn=js2*dizi(jsira)
return
end
real*8 function fmnn(n,n1,m)
implicit real*8 (a-h,o-z)
if (2*(n/2).ne.n) then
if (2*(n1/2).ne.n1) then
fmnn=dfnn(n-1,n1-1,m)-dfnn(n-1,n1-1,m-2)
else
fmnn=dfnn(n-1,n1,m)+dfnn(n-1,n1,m-1)
end if
else
if (2*(n1/2).ne.n1) then
fmnn=dfnn(n,n1-1,m)-dfnn(n,n1-1,m-1)
else
fmnn=dfnn(n,n1,m)
end if
end if
return
end

```

```

real*8 function gaunclb(ilb,il,im,il1,im1)
implicit real*8(a-h,o-z)
drtpi=16d0*atan(1d0)
lb=ilb
l=il
m=im
l1=il1
m1=im1
mb=m-m1
gauncrp=dsqrt(dfloat(2*l1+1)*dfloat(2*l+1)/dfloat(2*lb+1)/drtpi)
m2=-m1
is=1
if((2*(abs(m)/2)).ne.abs(m)) is=-is
gaunclb=is*gauncrp*clebgen(1,0,l1,0,lb,0)*clebgen(1,m,l1,m2,lb,mb)
return
end
real*8 function clebgen(ij1,im1,ij2,im2,ij,im)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
j1=ij1
j2=ij2
m1=im1
m2=im2
j=ij
m=im
if (m.ne.m1+m2.or.abs(m).gt.j.or. j .gt. j1+j2.or.j.lt.abs(j1-
>j2).or.abs(m2).gt.j2.or.abs(m1).gt.j1) then
clebgen=0
return
end if
nmin=max(0,j2+m2-j-m,j1-m1-j+m)
nmax=min(j1+j2-j,j2+m2,j1-m1)
sum=0
is=1
if(2*(nmin/2).ne.nmin) is=-is
k3=j+m
k5=j-m
k1=j1+j2-j
k4=j2+m2
k6=j1-m1
do 40 n=nmin,nmax
t=is*fmnn(k1,0,n)*fmnn(k3,0,k4-n)*fmnn(k5,0,k6-n)
sum=sum+t
is=-is
40 continue
a=(2*j+1)
k1=j1+j2+j+1
k2=j1+j2-j
k3=2*j
k4=j+m
k6=j1-j2+j
k8=j2-j1+j
k9=2*j1

```

```

        k0=j1+m1
        ka=2*j2
        kb=j2+m2
        b=fmnn(k1,0,k2)/fmnn(k1,0,k6)
        c=dfloat(2*j1+1)*dfloat(2*j2+1)
        c=c*fmnn(k1,0,k8)*fmnn(k9,0,k0)/fmnn(k3,0,k4)
        c=c*fmnn(ka,0,kb)
        clebgen=a*sqrt(b/c)*sum
        return
    end
    Real*8 function Fakt(k)
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    IF(K.LT.0)THEN
    WRITE(*,*)'NEGATİF SAYININ FAKTORİYELİ OLMAZ',K
    ENDIF
    fakt=1.0D0
    do 10 j=1,k
        fakt=fakt*j
10    continue
    return
    end
    SUBROUTINE STATISTICS(NPOP,NAO,EOZ,EFIT,REFIT, TOPFIT,IMIN,
    >EMIN)
    IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
    REAL*8 EOZ(NPOP),EFIT(NPOP),REFIT(NPOP)
    B=10.0D0
    EMIN=EOZ(1)
    IMIN=1
    EMAX=EOZ(1)
    ETOP=EOZ(1)
    DO I=2,NPOP,NAO
    ETOP=ETOP+EOZ(I)
    IF (EOZ(I).LT.EMIN) THEN
    EMIN=EOZ(I)
    IMIN=I
    ENDIF
    IF (EOZ(I).GT.EMAX)EMAX=EOZ(I)
    END DO
    EORT=ETOP/NPOP
    TOPFIT=0.0D0
    DO I=1,NPOP,NAO
    EFIT(I)=DEXP(-B*(EOZ(I)-EORT))/(EMAX-EMIN))
    TOPFIT=TOPFIT+EFIT(I)
    END DO
    ORFIT=TOPFIT/NPOP
    TREFIT=0.0D0
    DO I=1,NPOP,NAO
    REFIT(I)=EFIT(I)/TOPFIT
    TREFIT=TREFIT+REFIT(I)
    END DO
    RETURN
    END
    SUBROUTINE

```

```

GENAL(NPOP,NAO,NMAX,NAX,CI,ZETI,CL,ZETL,REFIT,EFIT,PC,PM)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8 CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),REFIT(NPOP),EFIT(NPOP)
REAL*8 CY(NPOP,NMAX),ZETAY(NPOP,NMAX)
REAL*8 CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),REFIT(NPOP),EFIT(NPOP)
REAL*8 CLY(NPOP,NAX),ZETLY(NPOP,NAX)
    integer*4 index(npop)
    do i=1,npop
        index(i)=i
    end do
    do i=1,npop-1
        do j=npop,i+1,-1
            if (refit(index(j)).gt.refit(index(j-1))) then
                icind=index(j-1)
                index(j-1)=index(j)
                index(j)=icind
            end if
        end do
    end do
    ntut=2
    do itut=1,ntut
        DO J=1,NMAX
            CY(ITUT,J)=CI(index(itut),J)
            ZETAY(ITUT,J)=ZETI(index(itut),J)
        END DO
        DO L=1,NAX
            CLY(ITUT,L)=CL(index(itut),L)
            ZETLY(ITUT,L)=ZETL(index(itut),L)
        END DO
    end do
    DO I=ntut+1,NPOP,2
        CALL SECIM(NPOP,NAO,REFIT,EFIT,ISEC1)
        CALL SECIM(NPOP,NAO,REFIT,EFIT,ISEC2)
        CALL CAPRAZLA(NPOP,NAO,NMAX,NAX,I,ISEC1,ISEC2,PC,CI,ZETI,
        >CY,ZETAY,CL,ZETL,CLY,ZETLY)
    END DO
    CALL
    >(NPOP,NAO,NMAX,NAX,CI,ZETI,CY,ZETAY,CL,ZETL,CLY,ZETLY)
    CALL MUTASYON(NPOP,NMAX,NAX,CI,ZETI,CL,ZETL,PM)
    RETURN
    END
SUBROUTINE MUTASYON(NPOP,NMAX,nax,CI,ZETI,CL,ZETL,PM)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8 CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX)
REAL*8 CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX)
ntut=2
DO I=ntut+1,NPOP
    PCM=RAND()
    IF (PCM.LE.PM) THEN
        j=1+int(rand()*(nmax-1))
        M=INT(RAND()+0.5)
        PCM=RAND()
        CI(I,J)=(1.0d0+(-1)**M*PCM)*CI(I,J)
    end if
end do

```

```

M1=INT(RAND()+0.5)
ZETAM=RAND()
ZETI(I,J)=(1.0d0+(-1)**M1*ZETAM)*ZETI(I,J)
L=NAX
CL(I,L)=(1.0d0+(-1)**M1*PCM)*CL(I,L)
ZETL(I,L)=(1.0d0+(-1)**M1*ZETAM)*ZETL(I,L)
END IF
END DO
RETURN
END
SUBROUTINE
>(NPOP,NAO,NMAX,NAX,CI,ZETI,CY,ZETAY,CL,ZETL,CLY,ZETLY)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8 CI(npop,NMAX),ZETI(npop,NMAX),CY(npop,NMAX),
>ZETAY(npop,NMAX)
REAL*8 CL(npop,NAX),ZETL(npop,NAX),CLY(npop,NAX),
>ZETLY(npop,NAX)
DO I=1,NPOP
  IF(NAO.EQ.1) THEN
    DO J=1,NMAX
      CI(I,J)=CY(I,J)
      ZETI(I,J)=ZETAY(I,J)
    END DO
    DO L=1,NAX
      CL(I,L)=CLY(I,L)
      ZETL(I,L)=ZETLY(I,L)
    END DO
  ELSE
    DO k=1,nao
      INA=(I-1)*nao+k+1
      DO J=1,NMAX
        CI(INA,J)=CY(INA,J)
        ZETI(INA,J)=ZETAY(INA,J)
      END DO
      DO L=1,NAX
        CL(INA,L)=CLY(INA,L)
        ZETL(INA,L)=ZETLY(INA,L)
      END DO
    END DO
  END IF
END DO
RETURN
END
SUBROUTINE
CAPRAZLA(NPOP,NAO,NMAX,NAX,I,ISEC1,ISEC2,PC,CI,ZETI,
>CY,ZETAY,CL,ZETL,CLY,ZETLY)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8 CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CY(NPOP,NMAX),
>ZETAY(NPOP,NMAX),CL(npop,NAX),ZETL(npop,NAX),
>CLY(npop,NAX),ZETLY(npop,NAX)
PCM=RAND()
iseca1=(isec1-1)*nao+1
iseca2=(isec2-1)*nao+1

```



```

IF(NAO.EQ.1)THEN
IF (PCM.LE.PC) THEN
DO J=1,NMAX
F=RAND()
CY(I,J)=CI(ISECa1,J)*F+CI(ISECa2,J)*(1.0D0-F)
CY(I+1,J)=CI(ISECa2,J)*F+CI(ISECa1,J)*(1.0D0-F)
END DO
DO J=1,NMAX
F=RAND()
CY(I,J)=CI(ISECa1,J)*F+CI(ISECa2,J)*(1.0D0-F)
CY(I+1,J)=CI(ISECa2,J)*F+CI(ISECa1,J)*(1.0D0-F)
ZETAY(I,J)=ZETI(ISECa1,J)*F+ZETI(ISECa2,J)*(1.0D0-F)
ZETAY(I+1,J)=ZETI(ISECa2,J)*F+ZETI(ISECa1,J)*(1.0D0-F)
END DO
DO L=1,NAX
F=RAND()
CLY(I,L)=CL(ISECa1,L)*F+CL(ISECa2,L)*(1.0D0-F)
CLY(I+1,L)=CL(ISECa2,L)*F+CL(ISECa1,L)*(1.0D0-F)
ZETLY(I,L)=ZETL(ISECa1,L)*F+ZETL(ISECa2,L)*(1.0D0-F)
ZETLY(I+1,L)=ZETL(ISECa2,L)*F+ZETL(ISECa1,L)*(1.0D0-F)
END DO
ELSE
DO J=1,NMAX
CY(I,J)=CI(ISECa1,J)
CY(I+1,J)=CI(ISECa2,J)
ZETAY(I,J)=ZETI(ISECa1,J)
ZETAY(I+1,J)=ZETI(ISECa2,J)
END DO
DO L=1,NAX
CLY(I,L)=CL(ISECa1,L)
CLY(I+1,L)=CL(ISECa2,L)
ZETLY(I,L)=ZETL(ISECa1,L)
ZETLY(I+1,L)=ZETL(ISECa2,L)
END DO
END IF
ELSE
IF (PCM.LE.PC) THEN
DO k=1,nao
DO J=1,NMAX
F=RAND()
CY((I-1)*nao+k+1,J)=CI(ISECa1+k,J)*F+CI(ISECa2+k,J)*(1.0D0-F)
CY((I-1)*nao+k+2,J)=CI(ISECa2+k,J)*F+CI(ISECa1+k,J)*(1.0D0-F)
ZETAY((I-1)*nao+k+1,J)=ZETI(ISECa1+k,J)*F+ZETI(ISECa2+k,J)*(1.0D0-F)
ZETAY((I-1)*nao+k+2,J)=ZETI(ISECa2+k,J)*F+ZETI(ISECa1+k,J)*(1.0D0-F)
END DO
DO L=1,NAX
CLY((I-1)*nao+k+1,L)=CL(ISECa1+k,L)*F+CL(ISECa2+k,L)*(1.0D0-F)
CLY((I-1)*nao+k+2,L)=CL(ISECa2+k,L)*F+CL(ISECa1+k,L)*
(1.0D0-F)ZETLY((I-1)*nao+k+1,L)=ZETL(ISECa1+k,L)*
>F+ZETL(ISECa2+k,L)*(1.0D0-F)ZETLY((I-1)*nao+k+2,L)
>=ZETL(ISECa2+k,L)*F+ZETL(ISECa1+k,L)*(1.0D0-F)
END DO
END DO

```

```

ELSE
DO k=1,nao
DO J=1,NMAX
CY((I-1)*nao+k+1,J)=CI(ISECa1+k,J)
CY((I-1)*nao+k+2,J)=CI(ISECa2+k,J)
ZETAY((I-1)*nao+k+1,J)=ZETI(ISECa1+k,J)
ZETAY((I-1)*nao+k+2,J)=ZETI(ISECa2+k,J)
END DO
DO L=1,NAX
CLY((I-1)*nao+k+1,L)=CL(ISECa1+k,L)
CLY((I-1)*nao+k+2,L)=CL(ISECa2+k,L)
ZETLY((I-1)*nao+k+1,L)=ZETL(ISECa1+k,L)
ZETLY((I-1)*nao+k+2,L)=ZETL(ISECa2+k,L)
END DO
END DO
END IF
END IF
RETURN
END
SUBROUTINE SECIM(NPOP,NAO,REFIT,EFIT,ISEC1)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8 REFIT(NPOP),EFIT(NPOP)
RULET=RAND()
SECBIR=0.0D0
I=0
DO I=I+1,NPOP
SECBIR=SECBIR+REFIT(I)
IF (SECBIR.GE.RULET.OR.I.EQ.NPOP) GOTO 1
END DO
1 ISEC1=I
RETURN
END
SUBROUTINE CZETA(NPOP,RDOT,NAO,NMAX,NAX,CI,ZETI,CL,ZETL)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
REAL*8 CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX)
REAL*8 CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX)
DO I=1,NPOP,NAO
DO J=1,NMAX
M2=Int(RAND())
ZETI(I,J)=(-1)**M2*RAND()*5.0D0
DO K=1,NAO-1
NK=I+K
ZETI(NK,J)=ZETI(I,J)
END DO
END DO
DO IL=1,NAX
M=Int(RAND())
ZETL(I,IL)=(-1)**M*RAND()*5.0D0
DO K=1,NAO-1
NK=I+K
ZETL(NK,IL)=ZETL(I,IL)
END DO
END DO

```

```

END DO
DO L=1,NPOP
DO J=1,NMAX-1
M1=NINT(RAND())
CI(L,J)=(-1)**M1*RAND()*10.0D0
END DO
END DO
DO L=1,NPOP
DO J=1,NAX-1
M11=NINT(RAND())
CL(L,J)=(-1)**M11*RAND()*10.0D0
END DO
END DO
RETURN
END
SUBROUTINE SINIR(RDOT,EM11,EM22)!,NMAX,CI,ZETI,CL,ZETL)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
PARAMETER (NPOP=100,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),
>tk(npop),tp(npop),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),L
>ORB(NMAX),MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),MQ(NAX),NRB(NAX),
>LRB(NAX),MRB(NAX)
N1S=NBQ(NMAX)
N2S=NQ(NAX)
DO 165 L=1,NPOP
Z1S=ZETI(L,NMAX)
Z2S=ZETL(L,NAX)
CC7=(N1S-1)/RDOT-Z1S
CC71=(N2S-1)/RDOT-Z2S
CC8=RDOT**(N1S-1)*DEXP(-Z1S*RDOT)
CC81=RDOT**(N2S-1)*DEXP(-Z2S*RDOT)
TOP11=0.0D0
DO 158 I=1,NAX-1
Z2=ZETL(L,I)
C2=CL(L,I)
N2=NQ(I)
CC2=(N2-1)/RDOT-Z2
CC23=C2*RDOT**(N2-1)*DEXP(-Z2*RDOT)
TOP11=TOP11+CC23*(CC2-CC71)/EM22
158 CONTINUE
TOP1=0.0D0
DO J=1,NMAX-1
N1=NBQ(J)
Z1=ZETI(L,J)
C1=CI(L,J)
CC1=(N1-1)/RDOT-Z1
CC4=C1*RDOT**(N1-1)*DEXP(-Z1*RDOT)
TOP1=TOP1+CC4*(CC71/EM22-CC1/EM11)
END DO
PAYD=CC8*(CC7/EM11-CC71/EM22)
CC10=(TOP1+TOP11)/PAYD

```

```
CI(L,NMAX)=CC10
TOP3=0.D0
DO I=1,NAX-1
C21=CL(L,I)
N21=NQ(I)
Z21=ZETL(L,I)
TOP3=TOP3+C21*RDOT**(N21-1)*DEXP(-Z21*RDOT)
END DO
TOP2=0.0D0
DO J=1,NMAX
C12=CI(L,J)
N13=NBQ(J)
Z13=ZETI(L,J)
TOP2=TOP2+C12*RDOT**(N13-1)*DEXP(-Z13*RDOT)
END DO
CL(L,NAX)=(TOP2-TOP3)/CC81
165 CONTINUE
RETURN
```

#### EK-4. Sonlu Küresel Kuantum Nokta Yapının Virial Katsayılarını Hesaplayan Fortran Programı

```
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
PARAMETER (NPOP=28,nmax=5,NAX=5)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
COMMONCI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),
ZETL(NPOP,NAX),OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),
>EOZ(NPOP),tk(npop),tp(npop),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),
>NORB(NMAX),LORB(NMAX),MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),
>MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
REAL*8 EFIT(NPOP),REFIT(NPOP)
DATA NAO/1/
C NORB ATOMİK ORBITALLERİN BAS KUANTUM SAYISIDIR
DATA NORB /1,4*0/
C LORB ATOMİK ORBITALLERİN YORUNGESEL MOMENT. KUAN. SAYISIDIR
DATA LORB/0,4*0/
C MORB ATOMİK ORBITALLERİN MAGNETİK MOMENT KUAN. SAYISIDIR
DATA MORB/0,4*0/
C BAZ SETLERİNİN (STO) YORUNGESEL MOMENTUM KUANTUM SAYISIDIR
DATA LANG/0,0,0,0,0/
C BAZ SETLERİN (STO) BAS KUANTUM SAYISIDIR
DATA NBQ/1,1,1,1,1/
C BAZ SETLERİN (STO) MAGNETİK KUANTUM SAYISIDIR
DATA MBQ/0,0,0,0,0/
DATA NRB/1,4*0/
C DIŞTAKİ LRB ATOMİK ORBITALLERİ YORUNGESEL MOMENT. KU. SAYISI
DATA LRB/0,4*0/
C DIŞTAKİ MORB ATOMİK ORBITALLERİN MAGNE. MOMENT KU SAYISIDIR
DATA MRB/0,4*0/
C DIŞTAKİ BAZ SETLERİNİN (STO) BAŞ KUANTUM SAYISI
DATA NQ/1,1,1,1,1/
C DIŞ DAKİ BAZ SETLERİNİN (STO) YORUNGESEL MOMENT. KU. SAYISIDIR
DATA LNG/0,0,0,0,0/
C DIŞTAKİ BAZ SETLERİN (STO) BAS KUANTUM SAYISIDIR
DATA MQ/0,0,0,0,0/
open(2,file='1s sonlUVirial.dat',status='unknown')
open(3,file='1s 1ELSONLUN5x03en.dat',status='unknown')
call clofmn (50,100000)
ERYI=5.72D-3 !ETKİN TYDBERG SABİTİ
V0=0.2278d0/2.0D0/ERYI !RYDBERG CİNSİNDEN SIN. POT.
PC=0.95D0 !crossover olasılığı
PM=0.05D0 !mutasyon olas
CY=1
NKK=1
IELK=NKK
IKKB=1
EM11=6.7D-2 !İÇERİDEKİ ETKİN KÜTLE
EM22=9.1550D-2 !DISARIDAKİ ETKİN KÜTLE
em12=em22/em11 !DISARIDAKİ BAĞIL ETKİN KÜTLE
DCON1=13.18D0 !İÇERİDEKİ DİELEKTRİK SABİTİ
```

```

DCON2=12.244D0    !DISARDAKİ DİELEKTRİK SABİTİ
dcons=dcon2/dcon1 !DISARDAKİ BAGIL DİELEKTRİK SABİTİ
DO 321 IL=1,28
    read(2,*)RDOT
    DO JI=1, NMAX
    read(2,*) CI(IL,JI)
    END DO
    DO JI=1, NAX
    read(2,*)CL(IL,JI)
    END DO
    DO JI=1, NMAX
    read(2,*)ZETI(IL,JI)
    END DO
    DO JI=1, NAX
    read(2,*)ZETL(IL,JI)
    END DO
    CALL ENERJI(IL,CY,NAO,IKKB,IELK,NKK,RDOT,EM12,DCONS,V0)
321 continue
    close(2)
    close(3)
15 FORMAT(5(2x,e20.8))
END
! ana programın sonu
SUBROUTINE
ENERJI(IL,CY,NAO,IKKB,IELK,NKK,RDOT,EM12,DCONS,V0)
    IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
    PARAMETER (NPOP=28,nmax=5,NAX=5)
    COMMON
    CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
    >OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),
    >tk(npop),tp(npop),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),
    >NORB(NMAX),LORB(NMAX),MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),
    >MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
    HIKI=2.0D0
    CALL OVERI(RDOT,IL)
    CALL OVERD(RDOT,IL)
CC kinetik ve potansiyel integrallerini hesaplıyor
    TOPTK=0.D0
    TOPP=0.D0
    TOPT=0.0D0
    DO 75 K=1,nkk
    L=IL+K-1
C dotun içindeki kinetik enerjiyi hesaplıyor
    CALL CTKOVI(L,RDOT,CNOV)
C dotun dışındaki kinetik enerjiyi hesaplıyor
    CALL CTKOVD(L,RDOT,EM12,CNOVD)
C sınırlandırıcı potansiyelin değerini hesaplıyor
    CALL DISPOT(L,RDOT,V0,DV0)
C İçerideki nükleer çekim potansiyel enerjiyi hesaplıyor
    POTI=potan(CY,RDOT,L)
C dışarıdaki nükleer çekim potansiyel enerjiyi hesaplıyor
    POTD=potanD(CY,RDOT,L,DCONS)
    TOPTK=TOPTK+HIKI*(CNOV+CNOVD+POTI+POTD+DV0)

```

```

      TOPT=TOPT+HIKI*(CNOV+CNOVD)
      TOPP=TOPP+HIKI*(POTI+POTD+DV0)
      BLHGF=CNOV+CNOVD
      IF(CNOVD.LT.0)THEN
      END IF
      IF(BLHGF.LT.0)THEN
      Write(3,*)'kinetik',BLHGF
      END IF
75  CONTINUE
      VIR=TOPP/TOPT
      WRITE(3,*)RDOT,VIR
      TOPLAM=TOPTK
      tk(IL)=cnov+cnovd
      tp(IL)=poti+potd+DV0
      EOZ(IL)=toplam
      RETURN
      END

SUBROUTINE DISPOT(L,RDOT,V0,DV0)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=28,nmax=5,NAX=5)
COMMON
>CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),tk(npop),tp(npop),
>NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),NORB(NMAX),LORB(NMAX),
  >MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),
  >MRB(NAX)
      HIKI=2.0D0
      TOPV=0.0D0
      DO I=1,NAX
      N1=NQ(I)
      N2=NQ(I)
      L1=lng(I)
      M1=MQ(I)
      DO J=1,NAX
      N2=NQ(J)
      L2=LNG(J)
      M2=MQ(J)
      C1=CL(L,I)
      C2=CL(L,J)
      Z1=ZETL(L,I)
      Z2=ZETL(L,J)
      TOPV=TOPV+C1*C2*OVERL(I,J)
      END DO
      END DO
      DV0=HIKI*V0*TOPV
      RETURN
      END
REAL*8 FUNCTION coull(LS1,LS2,LS3,LS4,RDOT)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=28,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),

```

```

>tk(npop),tp(npop),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),
>NORB(NMAX),LORB(NMAX),
>MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),
>MRB(NAX)
dpi=16.0d0*datan(1.0d0)
TOP=0.0D0
DO 12 I=1,NMAX
L1=LANG(I)
M1=MBQ(I)
DO 12 J=1,NMAX
L2=LANG(J)
M2=MBQ(J)
DO 12 K=1,NMAX
L3=LANG(K)
M3=MBQ(K)
DO 12 L=1,NMAX
L4=LANG(L)
M4=MBQ(L)
L1US=L1+L3
L2US=L2+L4
LFRK=ABS(L1US-L2US)
M1FK=M1-M3
M2FK=M4-M2
IF(2*(LFRK/2).NE.LFRK.OR.M1FK.NE.M2FK)GOTO 12
N1=NBQ(I)
N2=NBQ(J)
N3=NBQ(K)
N4=NBQ(L)
N=N1+N3
NUS=N2+N4
ZT1=ZETI(LS1,I)
ZT2=ZETI(LS2,J)
ZT3=ZETI(LS3,K)
ZT4=ZETI(LS4,L)
Z1=(ZT1+ZT3)
Z2=(ZT2+ZT4)
ZTOP=Z1+Z2
JALT=MAX(ABS(L1-L3),ABS(L2-L4))
JUST=MIN(L1US,L2US)
TOPL=0.0D0
DO M=JALT,JUST,2
gaunt1=gaunclb(M,L1,0,L3,0)
gaunt2=gaunclb(M,L4,0,L2,0)
gaunt=gaunt1*gaunt2*dpi/(2.0d0*M+1) !steinborn tan□m□nda
!!! BİRİNCİ TERİM
c11=fakt(N+M)/Z1**(N+M+1)
c12=fakt(NUS-M-1)/Z2**(NUS-M)
TERM1=c11*c12
!!! İKİNCİ TERİM HESAPLANIYOR
TOP2=0.0D0
DO II=0,NUS-M-1
C21=Z2**II*RDOT**II/FAKT(II)
TOP2=TOP2+C21

```



```

END DO
TERM2=TERM1*DEXP(-Z2*RDOT)*TOP2
!!! ÜÇÜNCÜ TERİM
TOP3=0.0D0
DO II=0,N+M
C31=FAKT(NUS+II-M-1)/ZTOP**(NUS+II-M)
C32=Z1**II/FAKT(II)
TOP3=TOP3+C31*C32
END DO
TERM3=C11*TOP3
!!! DÖRDÜNCÜ TERİM
TOP4=0.0D0
DO II=0,N+M
C41=FAKT(NUS+II-M-1)/ZTOP**(NUS+II-M)
C42=Z1**II/FAKT(II)
TOP44=0.0D0
DO IL=0,NUS+II-M-1
C43=ZTOP**IL*RDOT**IL/FAKT(IL)
TOP44=TOP44+C43
END DO
TOP4=TOP4+C41*C42*TOP44
END DO
TERM4=C11*DEXP(-ZTOP*RDOT)*TOP4
!!! BEŞİNCİ TERİM
TOP5=0.0D0
DO II=0,N-M-1
C51=FAKT(N-M-1)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II)
C52=FAKT(NUS+II+M)/ZTOP**(NUS+II+M+1)
TOP5=TOP5+C51*C52
END DO
TERM5=TOP5
!!! ALTINCI DÖNGÜ
TOP6=0.0D0
DO II=0,N-M-1
C61=FAKT(N-M-1)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II)
C62=FAKT(NUS+II+M)/ZTOP**(NUS+II+M+1)
C63=DEXP(-ZTOP*RDOT)
TOP61=0.0D0
DO ILL=0,NUS+M+II
C64=ZTOP**ILL*RDOT**ILL/FAKT(ILL)
TOP61=TOP61*C64
END DO
C65=C61*C62*C63*TOP61
TOP6=TOP6+C65
END DO
TERM6=TOP6
!!! YEDİNCİ DÖNGÜ
TOP7=0.0D0
DO II=0,N-M-1
C71=FAKT(N-M-1)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II)
C72=FAKT(NUS+M)/ZTOP**(NUS+M+1)
C73=RDOT**II*DEXP(-Z1*RDOT)
C74=C71*C72*C73

```

```

TOP7=TOP7+C74
END DO
TERM7=TOP7
!!! SEKİZİNCİ DÖNGÜ
TOP8=0.0D0
DO II=0,N-M-1
C81=FAKT(N-M-1)/Z1**(N-M-II)/FAKT(II)
C82=FAKT(NUS+M)/ZTOP**(NUS+M+1)
C83=RDOT**II*DEXP(-ZTOP*RDOT)
TOP81=0.0D0
DO IL=0,NUS+1
C84=Z2**IL*RDOT**IL/FAKT(IL)
TOP81=TOP81+C84
END DO
C85=C81*C82*C83*TOP81
TOP8=TOP8+C85
END DO
TERM8=TOP8
TOPL=TOPL+GAUNT*(TERM1-TERM2-TERM3+TERM4+TERM5-
>TERM6-TERM7+TERM8)
END DO
TOP=TOP+CI(LS1,I)*CI(LS2,J)*CI(LS3,K)*CI(LS4,L)*B31*TOPL
12 CONTINUE
COULI=TOP
RETURN
END
REAL*8 FUNCTION FUNK(IN,ZET,RDOT)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
NL=2*IN
TOPH=0D0
DO IJ=0,NL
prc=(2*zet)**ij
CB=prc*RDOT**IJ/FAKT(IJ)
TOPH=TOPH+CB
END DO
CDB=DEXP(dfloat(-2)*ZET*RDOT)*TOPH
FUNK=DSQRT(1.0d0-CDB)
RETURN
END
REAL*8 FUNCTION FUNKI(IN,ZET,RDOT)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
NL=2*IN
TOPH=0D0
DO IJ=0,NL
prc=(2*zet)**ij
CB=prc*RDOT**IJ/FAKT(IJ)
TOPH=TOPH+CB
END DO
CDB=DEXP(dfloat(-2)*ZET*RDOT)*TOPH
FUNKI=DSQRT(CDB)
RETURN
END

```

```

REAL*8 FUNCTION POTAN(CY,RDOT,L)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=28,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),
>tk(npop),tp(npop),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),
>NORB(NMAX),LORB(NMAX),MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),
>MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
TOPP=0.D0
HIKI=2.0D0
DO I=1,NMAX
DO J=1,NMAX
OK1=NBQ(J)
OK2=NBQ(I)
I1=LANG(J)
I2=LANG(I)
m1=MBQ(j)
m2=MBQ(I)
IF(L1.NE.L2.OR.M1.NE.M2)GOTO 23
C2=(ZETI(L,J)+ZETI(L,I))/(OK1+OK2)
TRM1=C2*OVERLB(I,J)
TRM2=DEXP(-(ZETI(L,J)+ZETI(L,I))*RDOT)*RDOT**
>(OK1+OK2)/(OK1+OK2)
TRM=CI(L,I)*CI(L,J)*(TRM1+TRM2)
TOPP=TOPP+TRM
23 CONTINUE
END DO
END DO
POTAN=-CY*TOPP!/dcon1
RETURN
END
REAL*8 FUNCTION POTAND(CY,RDOT,L,DCONS)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=28,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),
>tk(npop),tp(npop),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),
>NORB(NMAX),LORB(NMAX),MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),
>MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
TOPP=0.D0
HIKI=2.0D0
DO I=1,NAX
DO J=1,NAX
OK1=NQ(J)
OK2=NQ(I)
L12=LRB(J)
L22=LRB(I)
I1=LNG(J)
I2=LNG(I)
m1=MQ(j)
m2=MQ(I)

```

```

IF(L1.NE.L2.OR.M1.NE.M2)GOTO 26
C2=((ZETL(L,J)+ZETL(L,I))/(OK1+OK2))
TRM1=C2*OVERL(I,J)
TRM2=DEXP(-(ZETL(L,J)+ZETL(L,I))*RDOT)*RDOT**
>(OK1+OK2)/(OK1+OK2)
TRM=CL(L,I)*CL(L,J)*(TRM1-TRM2)
TOPP=TOPP+TRM
26 CONTINUE
END DO
END DO
POTAND=-CY*TOPP/DCONS!dcon2!
RETURN
END
SUBROUTINE CTKOVI(L,RDOT,CNOV)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=28,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),
> tk(npop),tp(npop),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),
>NORB(NMAX),LORB(NMAX),MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),
>MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
HIKI=2.0D0
TOPK=0.D0
DO I=1,NMAX
NI=NBQ(I)
LI=lang(I)
MI=MBQ(I)
CK=CI(L,I)
ZTU=ZETI(L,I)
DO J=1,NMAX
NJ=NBQ(J)
LJ=LANG(J)
MJ=MBQ(J)
CT=CI(L,J)
ZTE=ZETI(L,J)
if(LI.ne.LJ.OR.MI.NE.MJ) GOTO 24
C11=(ZTU+ZTE)**2*(LJ*(LJ+1)-NJ*(NJ-1))/HIKI/(NI+NJ)/(NI+NJ-1)
CC1=(LJ*(LJ+1)-NJ*(NJ-1))/HIKI/(NI+NJ-1)*DEXP(-RDOT*(ZTU+ZTE))*
>RDOT**(NI+NJ-1)
CC12=1.0d0+RDOT*(ZTU+ZTE)/(NI+NJ)
C1=C11*OVERLB(I,J)+CC1*CC12
C31=ZTE*NJ*(ZTU+ZTE)/(NI+NJ)*OVERLB(I,J)
C32=ZTE*NJ*DEXP(-(ZTU+ZTE)*RDOT)*RDOT**(NI+NJ)/(NI+NJ)
C3=C31+C32
C4=ZTE**2/HIKI*OVERLB(I,J)
TOPK=TOPK+CT*CK*(c1+c3-c4)
24 CONTINUE
END DO
END DO
CNOV=TOPK!/em11
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE CTKOVD(L,RDOT,EM12,CNOVD)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=28,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),
>tk(npop),tp(npop),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),
>NORB(NMAX),LORB(NMAX),MORB(NMAX),NQ(NAX),LNG(NAX),
>MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
HIKI=2.0D0
TOPK=0.D0
DO I=1,NAX
CK=CL(L,I)
Z1=ZETL(L,I)
L1=LRB(I)
NI=NQ(I)
LI=lng(i)
MI=MQ(I)
M1=MRB(I)
DO J=1,NAX
L2=LRB(J)
LJ=LNG(J)
MJ=MQ(J)
M2=MRB(J)
CT=CL(L,J)
NJ=NQ(J)
Z2=ZETL(L,J)
if(LI.ne.LJ.OR.MI.NE.MJ) GOTO 15
C11=(Z1+Z2)**2*(LJ*(LJ+1)-NJ*(NJ-1))/HIKI/(NI+NJ)/(NI+NJ-1)
CC1=(LJ*(LJ+1)-NJ*(NJ-1))*DEXP(-RDOT*(Z1+Z2))
>*RDOT**(NI+NJ-1)/HIKI/(NI+NJ-1)
CC12=1.0d0+RDOT*(Z1+Z2)/(NI+NJ)
CA1=C11*OVERL(J,I)-CC1*CC12
C31=Z2*NJ*(Z1+Z2)*OVERL(J,I)/(NI+NJ)
C32=Z2*NJ*DEXP(-(Z1+Z2)*RDOT)*RDOT**(NI+NJ)/(NI+NJ)
CA3=C31-C32
CA4=Z2**2/HIKI*OVERL(J,I)
TOPK=TOPK+CT*CK*(cA1+cA3-cA4)
15 CONTINUE
END DO
END DO
CNOVD=topk/EM12!em22!
RETURN
END
SUBROUTINE OVERI(RDOT,IBRY)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=28,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),
>tk(npop),tp(npop),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),
>NORB(NMAX),LORB(NMAX),MORB(NMAX),
>NQ(NAX),LNG(NAX),MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)

```

```

    dpi=16.0d0*datan(1.0d0)
    do 1 i=1,nmax
    do 1 j=i,nmax
    overlb(i,j)=0.0d0
    overlb(j,i)=0.0d0
1  continue
    DO I=1,NMAX
    DO J=I,NMAX
    ZI=ZETI(IBRY,I)
    ZJ=ZETI(IBRY,J)
    NI=NBQ(I)
    NJ=NBQ(J)
    LI=LANG(I)
    LJ=LANG(J)
    Z=ZI+ZJ
    IF(LI.NE.LJ) THEN
    OVERLB(I,J)=0.0D0
    OVERLB(J,I)=0.0D0
    ELSE
    CNK=fakt(ni+nj)
    CLE=CNK/Z**(NI+NJ+1)
    CNL=DEXP(-Z*RDOT)
    JAL=0
    JUS=NI+NJ
    TPL=0.0D0
    DO IL=JAL,JUS
    CNI=Z**IL*RDOT**IL/FAKT(IL)
    TPL=TPL+CNI
    END DO
    CZE=CLE*(1.0d0-CNL*TPL)
    OVERLB(I,J)=CZE
    OVERLB(J,I)=CZE
    END IF
    END DO
    END DO
    RETURN
    END
SUBROUTINE OVERD(RDOT,IBRY)
IMPLICIT REAL*8 (a-h,o-z)
PARAMETER (NPOP=28,nmax=5,NAX=5)
COMMON
CI(NPOP,NMAX),ZETI(NPOP,NMAX),CL(NPOP,NAX),ZETL(NPOP,NAX),
>OVERLB(NMAX,NMAX),OVERL(NAX,NAX),EOZ(NPOP),
>tk(npop),tp(npop),NBQ(NMAX),LANG(NMAX),MBQ(NMAX),
>NORB(NMAX),LORB(NMAX),MORB(NMAX),
>NQ(NAX),LNG(NAX),MQ(NAX),NRB(NAX),LRB(NAX),MRB(NAX)
    dpi=16.0d0*datan(1.0d0)
    do 111 I=1,nax
    do 111 J=I,nax
    overl(I,J)=0.0d0
    overl(J,I)=0.0d0
111 continue
    DO I=1,NAX

```

```

DO J=1,NAX
ZI=ZETL(IBRY,I)
ZJ=ZETL(IBRY,J)
NI=NQ(I)
NJ=NQ(J)
LI=LNG(I)
LJ=LNG(J)
Z=ZI+ZJ
IF(LI.NE.LJ) THEN
OVERL(I,J)=0.0D0
OVERL(J,I)=0.0D0
ELSE
CNK=fakt(ni+nj)
CLE=CNK/Z**(NI+NJ+1)
CNL=DEXP(-Z*RDOT)
JAL=0
JUS=NI+NJ
TPL=0.0D0
DO IL=JAL,JUS
CNI=Z**IL*RDOT**IL/FAKT(IL)
TPL=TPL+CNI
END DO
END IF
CZE=CLE*CNL*TPL
OVERL(I,J)=CZE
OVERL(J,I)=CZE
END DO
END DO
RETURN
END
subroutine clofmn(nmax, isize)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
jsay=0
do 10 n=2,nmax,2
nbas(n/2)=jsay
do 11 n1=0,n,2
do 15 m=2,(n+n1)/2
jsay=jsay + 1
if (jsay.gt.isize) then
write(*,*) ' genellestirilmis binom katsayilari dizisi doldu'
stop
end if
jn=n-2
jm=m-1
jm1=m-2
dizi(jsay)=dfnn(jn,n1,m)+2*dfnn(jn,n1,jm)+dfnn(jn,n1,jm1)
15 continue
11 continue
10 continue
return
end

```

```

real*8 function dfnn(in,in1,im)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
n=in
n1=in1
m=im
js2=1
if (m .gt. (n+n1)/2) then
m=n+n1-m
end if
if(m.lt.0) then
dfnn=0
return
endif
if (n.lt.n1) then
jc=n
n=n1
n1=jc
js2=-1
if (2*(m/2).eq.m) js2=1
end if
if (m.eq.0) then
dfnn=js2
return
end if
if (m .eq. 1) then
dfnn=js2*(n-n1)
return
end if
jek=(n1*(2*n+n1-6))/8
jsira=nbas(n/2)+m+jek-1
dfnn=js2*dizi(jsira)
return
end
real*8 function fmnn(n,n1,m)
implicit real*8 (a-h,o-z)
if (2*(n/2).ne.n) then
if (2*(n1/2).ne.n1) then
fmnn=dfnn(n-1,n1-1,m)-dfnn(n-1,n1-1,m-2)
else
fmnn=dfnn(n-1,n1,m)+dfnn(n-1,n1,m-1)
end if
else
if (2*(n1/2).ne.n1) then
fmnn=dfnn(n,n1-1,m)-dfnn(n,n1-1,m-1)
else
fmnn=dfnn(n,n1,m)
end if
end if
return
end
real*8 function gaunclb(ilb,il,im,il1,im1)
implicit real*8(a-h,o-z)

```



```

drtpi=16d0*atan(1d0)
lb=ilb
l=il
m=im
l1=il1
m1=im1
mb=m-m1
gauncrp=dsqrt(dfloat(2*l1+1)*dfloat(2*l+1)/dfloat(2*lb+1)/drtpi)
m2=-m1
is=1
if((2*(abs(m)/2)).ne.abs(m)) is=-is
gaunclb=is*gauncrp*clebgen(1,0,l1,0,lb,0)*clebgen(1,m,l1,m2,lb,mb)
return
end
real*8 function clebgen(ij1,im1,ij2,im2,ij,im)
implicit real*8 (a-h,o-z)
common/FIN/ nbas(300),dizi(500000)
j1=ij1
j2=ij2
m1=im1
m2=im2
j=ij
m=im
if (m .ne. m1+m2 .or. abs(m) .gt. j .or. j .gt. j1+j2
>.or.j.lt.abs(j1-j2).or.abs(m2).gt.j2.or.abs(m1).gt.j1) then
clebgen=0
return
end if
nmin=max(0,j2+m2-j-m,j1-m1-j+m)
nmax=min(j1+j2-j,j2+m2,j1-m1)
sum=0
is=1
if(2*(nmin/2).ne.nmin) is=-is
k3=j+m
k5=j-m
k1=j1+j2-j
k4=j2+m2
k6=j1-m1
do 40 n=nmin,nmax
t=is*fmnn(k1,0,n)*fmnn(k3,0,k4-n)*fmnn(k5,0,k6-n)
sum=sum+t
is=-is
40 continue
a=(2*j+1)
k1=j1+j2+j+1
k2=j1+j2-j
k3=2*j
k4=j+m
k6=j1-j2+j
k8=j2-j1+j
k9=2*j1
k0=j1+m1
ka=2*j2

```

```

kb=j2+m2
b=fmnn(k1,0,k2)/fmnn(k1,0,k6)
c=dfloat(2*j1+1)*dfloat(2*j2+1)
c=c*fmnn(k1,0,k8)*fmnn(k9,0,k0)/fmnn(k3,0,k4)
c=c*fmnn(ka,0,kb)
clebgen=a*sqrt(b/c)*sum
return
end
Real*8 function Fakt(k)
implicit real*8 (a-h,o-z)
IF(K.LT.0)THEN
WRITE(*,*)'NEGATİF SAYININ FAKTORİYELİ OLMAZ',K
ENDIF
fakt=1.0D0
do 10 j=1,k
fakt=fakt*j
10 continue
return
end

```