



T.C.

BİTLİS EREN ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**BÜKÜMLÜ IŞIKLARIN NANOBOYUTLU YARIİLETKEN VE
MOLEKÜLER YAPILARDAKİ KUANTUM ELEKTRON
DİNAMIĞI ÜZERİNDEKİ ETKİSİ**

Fatih KOÇ

**DOKTORA TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI
BİTLİS - 2016**

FİZİK ANABİLİM DALI
DOKTORA TEZİ

BÜKÜMLÜ IŞIKLARIN NANOBOYUTLU YARIİLETKEN VE MOLEKÜLER
YAPILARDAKİ KUANTUM ELEKTRON DİNAMİĞİ ÜZERİNDEKİ ETKİSİ

Hazırlayan

Fatih KOÇ

Danışman

Doç. Dr. Koray KÖKSAL

Jüri Üyeleri

Doç. Dr. Fikret YILDIZ

Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN

Doç. Dr. Koray KÖKSAL

Yrd. Doç. Dr. Fatih Ahmet ÇELİK

Yrd. Doç. Dr. Kamiran SARAÇ

ARALIK 2016

Tez Onay sayfası (Doktora)

Fatih KOÇ tarafından hazırlanan “Bükümlü Işıkların Nanoboyutlu Yarıiletken Ve Moleküler Yapılardaki Kuantum Elektron Dinamiği Üzerindeki Etkisi” adlı tez çalışması 02/12/2016 tarihinde yapılan sınavla aşağıdaki jüri tarafından oybirliği ile Bitlis Eren Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda DOKTORA TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

Doç. Dr. Fikret YILDIZ

(Başkan)

Doç. Dr. Koray KÖKSAL

(Danışman)

Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN

(Üye)

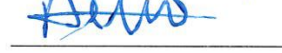
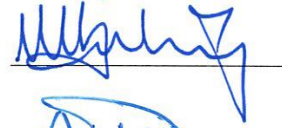
Yrd. Doç. Dr. Fatih Ahmet ÇELİK

(Üye)


Yrd. Doç. Dr. Kamiran SARAÇ

(Üye)

İmza



Bu tezin kabulü, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu’nun ~~28/12/2016~~ 28/12/2016 gün ve 42/05 Sayılı kararı ile onaylanmıştır.



Doç. Dr. Mehmet Cihan AYDIN

Enstitüsü Müdürü

YAYINLAR

1. Koç, F., & Köksal, K. (2015). Quantum size effect on the electronic transitions of GaAs/AlGaAs dots under twisted light. *Superlattices and Microstructures*, 85, 599-607.
2. Köksal, K., & Koç, F. (2016). Optical manipulation of photo-induced current in spherical semiconductor quantum dots by optical vortices. *Philosophical Magazine*, 96(25), 2686-2695.
3. Köksal, K., & Koç, F. (2016). The effect of twisted light on the ring-shaped molecules: The manipulation of the photoinduced current and the magnetic moment by transferring spin and orbital angular momentum of high frequency light. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1099: 203-208.
4. Koç, F., & Köksal, K. (2016). Electron motion control in mg-porphyrin via structured beam. *E-lse*, 11.

ÖZET

BÜKÜMLÜ IŞIKLARIN NANOBOYUTLU YARIİLETKEN VE MOLEKÜLER YAPILARDAKİ KUANTUM ELEKTRON DİNAMİĞİ ÜZERİNDEKİ ETKİSİ

Fatih KOÇ

Doktora Tezi

Bitlis Eren Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Koray KÖKSAL

Aralık 2016, 99 sayfa

Bu çalışmada, spin ve yörüngesel açısal momentuma sahip bükümlü lazer ışınlarının dairesel ya da küresel simetrik moleküler ve yarıiletken topaklardaki elektron dinamiği üzerindeki etkisi incelenmiştir. Moleküler topakların elektronik yapıları, Gaussian 09 programı ile elde edilmiştir. Yarıiletken topakların elektronik yapılarının hesabında sonlu farklar ve etkin kütle yöntemi kullanılmıştır. Bazı karşılaştırmalar için yarıiletkenlerin hacimsel yapı hesaplarında VASP yazılımından yararlanılmıştır. Bükümlü ışık ile nanoboyutlu topaklar arasındaki etkileşim, Mathematica 9.0, Fortran ve C++ dillerinde yazdığımız programlar ile hesaplanmıştır. Işığın, spin ve yörüngesel açısal momentumlarının, kuantum yapılara transfer edilmesi sonucunda oluşan foton indüklü dairesel akım ve manyetik alan sonuçları elde edilmiş ve karşılaştırmalı olarak sunulmuştur. Daha önce elde edilen deneysel ve teorik olarak elde edilen sonuçlara göre dairesel polarize bir lazer ışını aromatik moleküllerde nanoamper seviyesinde akım üretebilirken bükümlü ışık kullanılarak yaptığımız hesaplarda bu değer üzerine çıkılabileceği, akıma katkı sağlayan elektron sayısının artırılabilceği, indüklenen akım değerinin bükümlü ışık parametreleri ile ayarlanabileceği ve yarıiletken topakların dizayn edilerek tek foton frekansı ile seviyeler arası uyarılma miktarının artırılabilceği gösterilmiştir. Bunlarla birlikte indüklenmiş akımın sonucunda dairesel veya küresel yapıların merkezinde oluşan manyetik alanlar da hesaplanarak bükümlü ışık parametreleri ile bu alanın kontrol edilebileceği görülmüştür.

Anahtar kelimeler: Bükümlü ışık, moleküler topaklar, yarıiletken topaklar, açısal momentum transferi, foton indüklü akım ve manyetik alan, kuantum elektron dinamiği.



ABSTRACT

THE EFFECT OF TWISTED LIGHT ON QUANTUM ELECTRON DYNAMICS OF NANOSCALE SEMICONDUCTOR AND MOLECULAR STRUCTURES

Fatih KOÇ

PhD Thesis

Bitlis Eren University Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Koray KÖKSAL

December 2016, 99 pages

In this study, the effect of spin and orbital angular momentum carrying laser light on electron dynamics of circularly or spherically symmetric molecular and semiconductor clusters has been investigated. The electronic structure of molecular clusters has been calculated by Gaussian 09. Finite difference method and effective mass technique have been used for electronic structure calculation of semiconductor clusters. In order for some comparative studies, VASP has been performed to calculate the bulk electronic structure of semiconductors. The interaction between twisted light and nanoscale clusters has been investigated by using the codes which we have written in Mathematica 9.0, Fortran and C++. Photoinduced current and magnetic field, which are result of the transfer of light' spin and orbital angular momentum to the structures, have been obtained and introduced comparatively. Although the recent theoretical and experimental studies reported that circularly polarized light applied on aromatic molecules is able to induce a ring current in the range of nanoampere, we obtained important results as following. Twisted light is able to induce higher value of ring current. It is possible to increase the number of electrons which contributes to the induced ring current. It is also possible to manipulate the induced current by varying the parameters of twisted light. The number of electron excitations for single photon frequency can be increased by appropriate design of semiconductor clusters. Furthermore, the induced magnetic field in the center of the circularly and spherically symmetric

quantum structures has been calculated and it has been shown that the magnetic field can be manipulated by the parameters of twisted light.

Keywords: Twisted light, molecular clusters, semiconductor clusters, angular momentum transfer, photoinduced current and magnetic field, quantum electron dynamics.



ÖNSÖZ

Bitlis Eren Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü'ne Doktora Tezi olarak sunulan bu çalışmada, dairesel polarize ışık ve bükümlü ışıkların, yarıiletken kuantum nokta yapıları ve moleküler topaklar üzerindeki etkileri incelenmiştir. Bu çalışma ile, ultra hızlı atıma sahip ve bükümlü lazerlerin, yarıiletken nano ölçekli yapılar ve moleküler topaklarda kontrol edilebilir, yüksek derecede lokalize olmuş, yüksek anahtarlama hızına sahip, indüklenmiş bir manyetik alan elde edebilmek için gerekli şartların neler olduğu, kuantum mekaniksel hesaplarla gösterilmeye çalışılmıştır. Bu lazerler kuantum enformasyon teknolojisi, kuantum bilgisayarlar ve kübit uygulamaları alanında da büyük öneme sahiptir.

Bu çalışmam süresince, bilgi ve deneyimleriyle bana her istediğim anda ve her konuda yardımcı olan danışman hocam, sayın Doç. Dr. Koray KÖKSAL'a, bana bilgi ve tecrübeleriyle yardımcı olan Doç. Dr. Mehmet ŞAHİN'e, Yrd. Doç. Dr. Fatih Ahmet ÇELİK'e, çalışma arkadaşlarım Mehmet ÖNCAN ve İbrahim Halil BAYDİLEK'e, maddi ve manevi her yönden destek olan, moral veren aileme ve arkadaşlarıma şükranlarımı sunarım.

Bitlis, Aralık 2016

Fatih KOÇ

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

ÖZET	v
ABSTRACT	vii
ÖNSÖZ	ix
İÇİNDEKİLER DİZİNİ	x
ŞEKİLLER DİZİNİ	xii
ÇİZELGELER DİZİNİ	xiv
1. GİRİŞ	1
1.1. Lazerler	3
1.1.1. Fotonlar ve enerji	5
1.1.2. Kendiliğinden meydana gelen emisyon ve zorlanmış emisyon	6
1.1.3. Popülasyon Terslenmesi	8
1.2 Ultra Hızlı Lazerler	9
1.3. Açısal Momentum Taşıyan Işıklar	10
1.4. Açısal Momentum Taşıyan Işıkların Yarıiletken Yapılar Üzerindeki Etkisi	11
1.5. Açısal Momentum Taşıyan Işıkların Atom ve Moleküller Üzerindeki Etkisi	14
1.6. Tez Çalışmasının Kapsamı ve Amacı	16
2. TEORİ	18
2.1. Zamana Bağlı Schrödinger Denklemi	18
2.2. Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi	20
2.3. Zamana Bağlı Pertürbasyon Teorisi	22
2.4. Dairesel Polarize ve Bükümlü Işıkla Etkileşen Halka Tipli Bir Molekülde Oluşan Akımın Zamana Bağlı Pertürbasyon Teorisi Altında İncelenmesi	25
2.4.1. Akım Yoğunluğu	27
2.4.2. Manyetik Alan	30
2.5. Dairesel Polarize ve Bükümlü Işıkla Etkileşen Yarıiletken Kuantum Nokta Yapıda Oluşan Akımın Zamana Bağlı Pertürbasyon Teorisi Altında İncelenmesi	30
2.5.1. Etkin Kütle Yaklaşımı	31
2.5.2. Hartree Yaklaşımı	32
2.5.3. Yarıiletken Kuantum Nokta Yapıda Elektron-Deşik Çiftinin Enerji Seviyeleri ve Dalga Fonksiyonları Hesabı	33
3. SONUÇLAR	37
3.1. CdSe/CdS Kuantum Yapısında Bükümlü Işığın Elektron Geçişine Etkisi	37
3.1.1. Kullanılan Yapı Profili	37
3.1.2. Hesaplama Parametreleri	38
3.2. SiO ₂ /GaAs/AlGaAs Bükümlü Işık Tarafından İndüklenen Akım	45
3.3. Benzene Molekülü Sonuçları	52

3.3.1 Benzene molekülünün açısız bant yapısı	52
3.3.2 Dairesel polarize ışık altında benzene molekülünde akım yoğunluğu ve indüklenmiş manyetik alan	55
3.3.3 Dairesel polarize bükümlü ışık altında benzene molekülünde akım yoğunluğu ve indüklenmiş manyetik alan	57
3.4. Ga ₈ As ₈ Moleküler Halka Yapı Sonuçları	60
3.5. Dairesel Polarize Laguerre-Gaussian Tipi Bükümlü Işık Altında Mg-Porphyrin Molekülü Sonuçları	65
3.6. Dairesel Polarize Işık Altında Mg-Porphyrin Molekülü Sonuçları	67
4. TARTIŞMALAR	71
5. EK-1 IŞIĞIN POLARİZASYONU	73
5.1.1. Lineer polarize ışık	74
5.1.2. Dairesel polarize ışık	74
5.1.3. Eliptik polarize ışık	74
5.2. Optik Alanların Mekanik Özellikleri	74
5.2.1. Işığın spin ve yörüngesel açısız momentumu	75
5.3. Paraxial Işık Işınları	75
5.3.1. Laguerre-Gaussian ışınları	77
6. EK-2 GAUSSIAN 09	79
6.1. Gaussian 09 Hesaplama Başlatma	79
6.2. Atomik Yörüngelerin Lineer Kombinasyonu	81
6.3. Slater ve Gaussian Fonksiyonları	82
6.3.1. Gaussian Fonksiyonları	82
6.3.2. Kartezyen İlkel Gaussian Fonksiyonları	83
6.4. Gaussian 09 Sonuç Dosyasını Kullanarak Dalga Fonksiyonu Oluşturma	83
KAYNAKLAR	87

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1. Bohr Atom Modeli ve basit enerji seviyeleri diyagramı.....	4
Şekil 1.2. Soğurma, kendiliğinden meydana gelen emisyon ve zorlanmış emisyonun şematik gösterimi.....	6
Şekil 1.3. Zorlanmış emisyon ile amplifikasyon.....	7
Şekil 1.4. Dört seviyeli lazer uyarımı sistemi.....	9
Şekil 2.1. Ga ₈ As ₈ halka tipli molekül yapının şematik gösterimi.....	26
Şekil 3.1. CdSe/CdS yapısı ve potansiyel profilinin şematik gösterimi.....	38
Şekil 3.2. $p = 0$ ve $m_a = 0$ durumu için etkileşim teriminin CdSe/CdS kuantum nokta heteroyapısının çekirdek yarıçapına göre değişim grafiği.....	40
Şekil 3.3. $p = 0$ ve $m_a = 1$ durumu için etkileşim teriminin CdSe/CdS kuantum nokta heteroyapısının çekirdek yarıçapına göre değişim grafiği.....	41
Şekil 3.4. $p = 0$ ve $m_a = 2$ durumu için etkileşim teriminin CdSe/CdS kuantum nokta heteroyapısının çekirdek yarıçapına göre değişim grafiği.....	42
Şekil 3.5. $p = 1$ ve $m_a = 1$ durumu için etkileşim teriminin CdSe/CdS kuantum nokta heteroyapısının çekirdek yarıçapına göre değişim grafiği.....	43
Şekil 3.6. $p = 2$ ve $m_a = 2$ durumu için etkileşim teriminin CdSe/CdS kuantum nokta heteroyapısının çekirdek yarıçapına göre değişim grafiği.....	44
Şekil 3.7. SiO ₂ (mavi) üstüne GaAs/AlGaAs (kırmızı/turuncu) kuantum noktasının şematik gösterimi.....	46
Şekil 3.8. GaAs kuantum noktasının yörüngesel kuantum sayısına bağlı enerji değişimi (sol), iletim ve değerlik bandı potansiyel profilleri ve dalga fonksiyonları (sağ).....	47
Şekil 3.9. SiO ₂ /GaAs/AlGaAs kuantum noktasında indüklenmiş akımın frekans, radyal boğum ve topolojik yüke bağlı değişimi.....	49
Şekil 3.10. Farklı topolojik yük ve radyal boğum parametreleri için x - y düzlemindeki Laguerre Gaussian ışın profili (Parantez içindeki değerler sırasıyla topolojik yük m ve radyal boğum p temsil etmektedir).....	50
Şekil 3.11. Topolojik yük m ve radyal boğum p tarafından modüle edilmiş indüklenmiş akım.....	51
Şekil 3.12. Benzene molekülünün elektronik yapısı (Siyah noktalar radyal kuantum sayısı, $nr = 0$ durumunu temsil etmektedir. Nokta ve çarpı sırasıyla durumların x ve y bileşenlerini göstermektedir. Kırmızı ve yeşil noktalar sırasıyla, $nr = 1$ ve, $nr = 2$ durumlarına karşılık gelmektedir. Mavi yıldızlar σ orbitallerinden farklı şekillere sahip π orbitalleridir. Dairesel simetriden dolayı aynı durumun x ve y bileşenleri arasında ayrılma bulunmamaktadır).....	53
Şekil 3.13. Dairesel polarize lazer ışınının frekansına bağlı olarak Benzene molekülündeki akım yoğunluğu ve indüklenen manyetik alan değişim grafikleri (Birinci sütun boş durumlardaki uyarılmış elektronlar tarafından oluşturulmuş akım yoğunluğunu göstermektedir. İkinci sütun LUMO seviyesine geçen elektronun geçişinden sonra HOMO seviyesinde kalan diğer elektronun sebep olduğu akım yoğunluğunu temsil etmektedir. Üçüncü sütun HOMO ve LUMO seviyesinde bulunan elektronların akım yoğunluğuna olan toplam katkısını göstermektedir.).....	54
Şekil 3.14. $\omega = 0.93 Ha$ için boş (a), dolu (b) ve toplam (c) elektronik durumların akım yoğunluğu ve indüklenen manyetik alan değerleri.....	55
Şekil 3.15. Benzene molekülünün elektronik açıl bant yapısı (Olası geçişler bant yapısından analiz edilebilir).....	56
Şekil 3.16. İndüklenmiş manyetik alanın dairesel polarize bükümlü ışığın frekansına bağlı değişimi (Işığın yörüngesel açıl momentumu $ma = 1$).....	58
Şekil 3.17. Ga ₈ As ₈ halka tipli molekül yapının şematik gösterimi.....	60
Şekil 3.18. $\omega = 0.18$ Hartree (a) ve $\omega = 0.27$ Hartree (b) için dairesel polarize ışıkla indüklenen akım yoğunluğunun 3 Boyutlu grafiği (Bu frekanslar HOMO-LUMO seviyeleri arasındaki geçiş için gerekli olan frekanslardır).....	61

Şekil 3.19. Manyetik alanın x, y ve z bileşenlerinin sağa dairesel polarize lazer ışınının frekansına bağlı olarak değişimi.....	62
Şekil 3.20. $\omega = 0.22$ Hartree (a) ve $\omega = 0.4$ Hartree (b) için dairesel polarize bükümlü ışıkla indüklenen akım yoğunluğunun 3 Boyutlu grafiği (Bu frekanslar HOMO-LUMO seviyeleri arasındaki geçiş için gerekli olan frekanslardır).....	63
Şekil 3.21. Manyetik alanın z bileşeninin dairesel polarize lazer ışınının ve dairesel polarize bükümlü lazer ışınının frekansına bağlı olarak değişimleri	64
Şekil 3.22. Mg-Porphyrin molekülünün dairesel polarize bükümlü ışık altında akım yoğunluğunun frekansa bağlı değişimi.....	66
Şekil 3.23. Mg-Porphyrin molekülünün dairesel polarize ışık altında akım yoğunluğunun frekansa bağlı değişimi.....	68
Şekil 3.24. Mg-Porphyrin molekülünün merkezinde indüklenen manyetik alanın frekansa bağlı değişimi	69
Şekil 5.1. İki lineer dalganın toplamı şeklinde lineer polarize (üst), dairesel polarize (orta) ve eliptik polarize (alt) olmuş ışığın şematik gösterimi (Guimond ve Elmore, 2004).....	73
Şekil 5.2. Hermite-Gaussian (a), Laguerre-Gaussian (b) ışınları	76
Şekil 5.3. Hermite-Gaussian (a), Laguerre-Gaussian (b) ve Bessel (c) ışınlarının şiddet profilleri	77
Şekil 5.4. Gaussian ışını şematik gösterimi.....	78
Şekil 6.1. GaussView5 ile hazırlanmış Gaussian 09 girdi dosyası	80
Şekil 6.2. Gaussian 09 sonuç dosyası.....	84
Şekil 6.3. Gaussian 09 sonuç dosyasında atomik koordinatların yer aldığı bölüm.....	85
Şekil 6.4. Gaussian 09 sonuç dosyasında moleküler katsayıların yer aldığı bölüm.....	86

ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 3.1. Hesaplamalarda kullanılan malzeme parametreleri	39
Çizelge 3.2. İndüklenmiş manyetik alanın ışığın tipine ve frekansına bağlı değişimi	59



1. GİRİŞ

Makro, mikro ve nano ölçekte yapılan bilimsel çalışmalar incelendiğinde nihai gayenin, daha dayanıklısını, daha hızlısını, daha verimlisini, daha düşük maliyetle elde etmek olduğu görülür. Fiziksel ve kimyasal kanunların uygulamaya geçirilme aşamasındaki temel çalışmalardan biri de, herhangi bir malzemenin iç ve dış etkenlere nasıl tepki verdiğini gözlemlemektir. Bu gözlemler sonucunda, bir sistemin fiziksel ve kimyasal özelliklerinin iç ve dış etkenler yardımıyla nasıl kontrol edilebileceği anlaşılır. Genellikle ısı, basınç, elektrik alan, manyetik alan ve elektromanyetik alan gibi dış etkenlerle incelenecek sistemin geometrik yapısı, sistemi oluşturan malzeme ve sistemin boyutu gibi iç etkenler kontrol parametreleri olarak kullanılmaktadır. Bu etkenlerin makro ölçekteki malzemeler ile nano ölçekteki malzemeler üzerindeki etkisi birbirinden tamamen ayrıdır. Örneğin, nano ölçekte ısı ya da basınç gibi dış etkenlerin, incelenen yapı üzerindeki etkisi, kuantum mekaniği prensipleri içerisinde hesaplanarak sonuçların yorumlanması gerekmektedir. Aynı zamanda yapılan deneylerde çok hassas cihaz ve yüksek teknolojinin kullanılması da önem arz eder. Nanoboyutlu sistemlerin elektrik ve manyetik alanla kontrolünde ise lokalizasyon sorunu karşımıza çıkmaktadır. Sistemin geometrisinde, boyutunda ya da sistemi oluşturan malzemelerde değişiklik yapmak büyük avantajlar sağlamakla birlikte esneklik noktasında üretim aşamasında bir defaya mahsus yapılan işlemler olduğundan ve her defasında sistemi yeniden üretmek gerekeceğinden uygulama açısından sınırlamalar getirmektedir.

Son yıllarda hızla gelişen lazer teknolojisi, beraberinde elektromanyetik dalgaların herhangi bir sistemle etkileşimi açısından büyük avantajlar getirmiştir. Piko saniye ve altında atım sürelerine sahip ultra hızlı lazerlerin üretilebilmesiyle mikroskopi ve görüntüleme alanında ilerleme sağlanmış, atom ve moleküllerde ultra hızlı elektronik süreçler izlenebilir duruma gelmiş ve iletişimde yüksek bant genişliğine ulaşılabilmektedir. Son birkaç yılda üretimi mümkün hale gelen atto saniye lazerleriyle birlikte atom çekirdeğindeki süreçlerin izlenmesinin de mümkün hale geleceği öngörülmektedir.

Elektromanyetik dalgalar, her ne kadar nano ölçekli sistemlerin elektronik ve optik özelliklerinin kontrolünde kullanılsa da lineer polarize bir elektromanyetik dalgayla bu kontrol sınırlı bir şekilde sağlanabilmektedir. Foton ile nano yapıların etkileşimleri üzerine teoriz ve deneysel olarak yapılan çalışmalarda, fotonun enerjisi ile beraber taşıdığı açısal momentumun da yapıya transfer edilebileceği anlaşılmıştır. Poynting (1909) yaptığı çalışmalarla dairesel polarize olmuş

elektromanyetik dalgaların aynı zamanda açısai momentum da taşıyabileceğini göstermiştir. Allen (1992) ise çalışmasıyla Laguerre-Gaussian tipi yörüngesel açısai momentum (YAM) taşıyan elektromanyetik dalgaların uzaysal profilini tanımlayıp üretmeyi başararak açısai momentumun diğeri bileşeni olan spin açısai momentum (SAM) ile yörüngesel açısai momentumun ayırımını yapmış ve bu konuda yapılabilecek çalışmaların önünü açmıştır. Açısai momentum taşıyan elektromanyetik dalgalar, taşıdıkları açısai momentumu etkileştiğı sisteme transfer ederek sistemin açısai momentumunu değıştirebilmektedir. Bu özelliğın kuantum enformasyon, kuantum kriptoloji, kuantum optik iletiřim, depolama, veri aktarımı ve veri okuma yazma alanlarında büyük avantajlar sunması beklenmektedir. Açısai momentum taşıyan elektromanyetik dalgaların, nano ölçekli sistemlerde yüksek başarımıli elektronik, optik ve spin kontrol aracı olarak kullanılmasının, bu alanda çok büyük yeniliklerin önünü açacağı öngörülmektedir.

Nano ölçekli sistemlerde elektron spin kontrolü, kuantum enformasyon teknolojisi, kuantum bilgisayarlar ve kübit uygulamaları alanında büyük öneme sahip olmakla birlikte doğrudan uygulanan bir manyetik alan yardımıyla bu ölçekteki sistemlerde spin kontrolünü sağlamak mümkün olamamaktadır. İşte bu noktada yaptığımız çalışmayla, açısai momentum taşıyan elektromanyetik dalgalarla, atom, küresel ya da dairesel simetriye sahip molekül ve küresel simetriye sahip nano ölçekli bir sistemde bulunan iletim elektron dinamiğı kontrol edilebildiğı takdirde, uzun süreli dairesel bir akım oluşturarak, bu akımdan doğacak (indüklenecek) olan lokal ve yoğun manyetik alanla yapı içerisine enjekte edilmiş bir atomun ya da serbest bir elektronun spin kontrolünün teorik olarak mümkün olabileceğı görülmüştür. Yine bu çalışmada açısai momentum taşıyan ultra hızlı lazerlerle de bu sistemlerdeki manyetik alanın femtosaniye gibi yüksek anahtarlama hızlarıyla kontrolünün mümkün olacağı öngörülmektedir. Mevcut bilgisayar teknolojisinde, manyetik okuyucular mikrosaniye mertebesinde yazma-okuma işlemleri gerçekleştirirken femtosaniye mertebesinde SAM veya YAM taşıyan lazer atımları ile indüklenecek femtosaniye mertebesinde manyetik atımlar sayesinde yazma okuma işleminin de femtosaniye mertebesine çıkması mümkün görülmektedir.

Bu tez çalışmasında, SAM taşıyan dairesel polarize ışık, YAM taşıyan bükümlü ışık ve hem SAM hem de YAM (SAM+YAM) taşıyan dairesel polarize olmuş bükümlü ışıklarla moleküler halka yapılar ve küresel simetrik kuantum nokta yapılar arasındaki etkileşimler incelenmiştir. Bunun için öncelikle açısai momentum taşıyan bükümlü ışığın küresel simetrik bir CdSe/CdS yarıiletken kuantum nokta heteroyapıda sebep olduğu elektronik geçişler CdSe çekirdek

tabakasının kalınlığına bağı olarak incelenmiş, daha sonra model yapı olarak Benzene molekülü kullanılmış, bu molekül SAM dairesel polarize olmuş ışık ve SAM+YAM taşıyan dairesel polarize olmuş bükümlü ışıkla ayrı ayrı etkileşime sokulmuş, yapıda oluşan dairesel akım ve bu akımın neticesinde yapının merkezinde oluşan manyetik alan hesaplanmıştır ve elde edilen değerler iki farklı ışık için karşılaştırılmıştır. Bir sonraki adımda ise daha büyük bir molekül olan Mg-porphyrin molekülü ele alınarak ışığın açısız momentum değerine ve frekansına bağı olarak elektronların lokal dönüş hareketlerinin akım yoğunluğu grafikleri elde edilmiştir. Bu çalışma toplam akımla beraber, lokal akımların da önemini göstermektedir. Çünkü sistemde farklı yerlere yerleştirilecek manyetik bir empürite atomu (burada Magnezyum atomudur) toplam akımdan çok lokal akımlardan etkilenecektir. Böyle bir yol izlenmesinin sebebi, molekül boyutu büyüdükçe oluşacak akım ve manyetik alan değerlerinin nasıl değiştiğini gözlemlemek ve sistem boyutuyla halka akım ve manyetik alan büyüklük değerlerinin doğrudan bağlantısının olup olmadığı hakkında fikir sahibi olmaktır. Daha sonraki adımda ise elektronik sanayisinde büyük öneme sahip olduğu bilinen GaAs tabanlı yapıların yine SAM taşıyan dairesel polarize olmuş ışık ve SAM+YAM taşıyan dairesel polarize olmuş bükümlü ışıkla etkileşimi incelenmiştir. Bunun için Ga₈As₈ halka tipi molekül model yapı olarak seçilmiş ve bu yapıda oluşan halka akım ve akıma bağı olarak yapının merkezinde oluşan manyetik alan hesaplanmıştır.

1.1. Lazerler

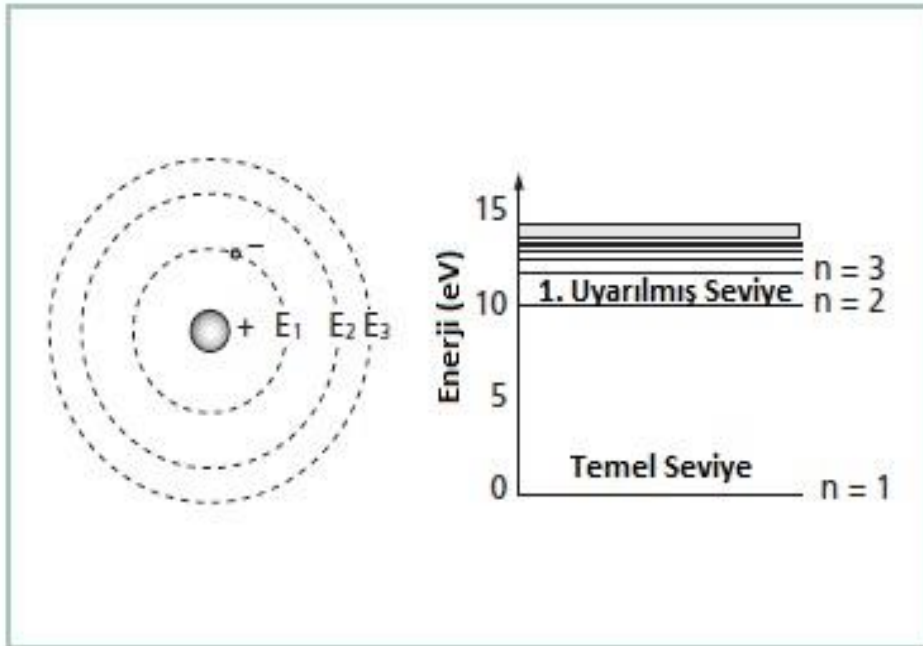
Lazerler tek renkli, eş fazlı ve yüksek paralellığe sahip ışın demetleridir. Lazer cihazlarının ürettiği ışık tek renklidir (monochromatic) ve ışın demetindeki fotonlar eş fazlıdır (coherence). Lazerlerin bir diğer önemli özelliği ışın demetinin çok az saçılmaya uğramasıdır. Yani lazer ışınındaki fotonların çok büyük bir bölümü, odaklandıkları noktaya doğru birbirlerine paralel şekilde ilerleyebilmektedir. Bu özelliği sayesinde lazerler birçok alanda kullanılmaktadır (Hans ve Jochen, 2008).

Lazer terimi İngilizce'de 'Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation' kelimelerinin baş harfleri kullanılarak türetilmiştir (LASER). Işık (light), genelde 1 nm ile 1000 µm dalga boyu arasındaki elektromanyetik spektruma verilen isimdir. Bu spektrumun 400 nm ile 700 nm arası dalga boyuna sahip kısmına görünen ışık, 700 nm ile 10 µm arası dalga boyuna sahip kısmına yakın kızıl ötesi, bundan daha büyük dalga boyuna sahip kısmına ise uzak kızıl ötesi ışınlar denk gelmektedir. 200 nm ile 400 nm dalga boyuna sahip kısmı ultraviyole ışık ve

elektromanyetik spektrumun daha küçük dalga boyuna sahip kısmı ise derin ultraviyole ışık olarak adlandırılır (Hans ve Jochen, 2008).

Lazerlerin çalışma prensibini anlama noktasında, Bohr Atom Modeli önem arz eder. 1915 yılında Niels Bohr tarafından önerilen bu model, atomu tam olarak modelleyemese de kuantum mekaniğinin temelini oluşturmuş olup, lazer çalışma prensibini açıklamak için de oldukça kullanışlıdır.

Bohr atom modeline göre, elektronlar bir atom çekirdeği etrafında döner ve sadece belli seviyelerdeki yörüngelerde bulunabilir (şekil 1.1). Elektronun geçiş yapabildiği izinli enerji seviyeleri kuantum seviyeleri olarak bilinir. Böylelikle, bir elektron doğru şekilde uyarıldığında, temel enerji seviyesinden bir üst enerji seviyesine çıkar fakat burada uzun süre duramaz (10^{-9} s mertebesinde) ve temel enerji seviyesine geri döner. Elektron yüksek enerji seviyesinden düşük enerji seviyesine geçerken fazla enerjisini ışıınımsız (fonon) ya da ışıınımlı (foton) geçiş yaparak atar. Bu bölümde ışıınımlı geçiş üzerinde durulacaktır (Kittel, 2004).



Şekil 1.1. Bohr Atom Modeli ve basit enerji seviyeleri diyagramı

1.1.1. Fotonlar ve enerji

1600 ve 1700'lü yıllar, ışığın doğası üzerine büyük tartışmaların yaşandığı yıllardır. Bu yıllarda bazı bilim insanları ışığın parçacıklardan, bazıları da dalgalardan oluştuğunu savunmaktaydı. Aslında her iki düşünce de ışığın tamamını değil bazı özelliklerini açıklayabiliyordu. Sonunda Einstein, ışığın foton denilen hem parçacık hem de dalga özelliği sergileyen parçacıklardan oluştuğunu keşfetti.

Her foton,

$$E = h\nu \quad (1.1)$$

denklemleri ile tanımlanan enerjiye sahiptir. Burada ν ışığın frekansı, h ise Planck sabitidir. Bir elektromanyetik dalga için, frekans ve dalga boyu, λ ,

$$\lambda\nu = c \quad (1.2)$$

denkleminin ifade ettiği şekilde birbirine bağlıdır. Burada c , ışık hızıdır. Bu bağıntı kullanılarak denklem 1.1 yeniden yazılacak olursa,

$$E = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.3)$$

elde edilir. Bu denklem, ışığın dalga boyu ile enerjisinin ters orantılı olduğunu ifade etmektedir.

Bohr atom modeline geri dönersek, bir atomun bir foton soğurması için (bu foton elektronun E_n düşük enerjili seviyeden E_m yüksek enerjili seviyeye çıkmasına sebep olacaktır) fotonun enerjisi iki enerji seviyesi arasındaki farka eşit olmalıdır. Daha yüksek ya da daha düşük enerjili foton atom tarafından soğrulmayacaktır. Bunun sonucu olarak gönderilen fotonun dalga boyu,

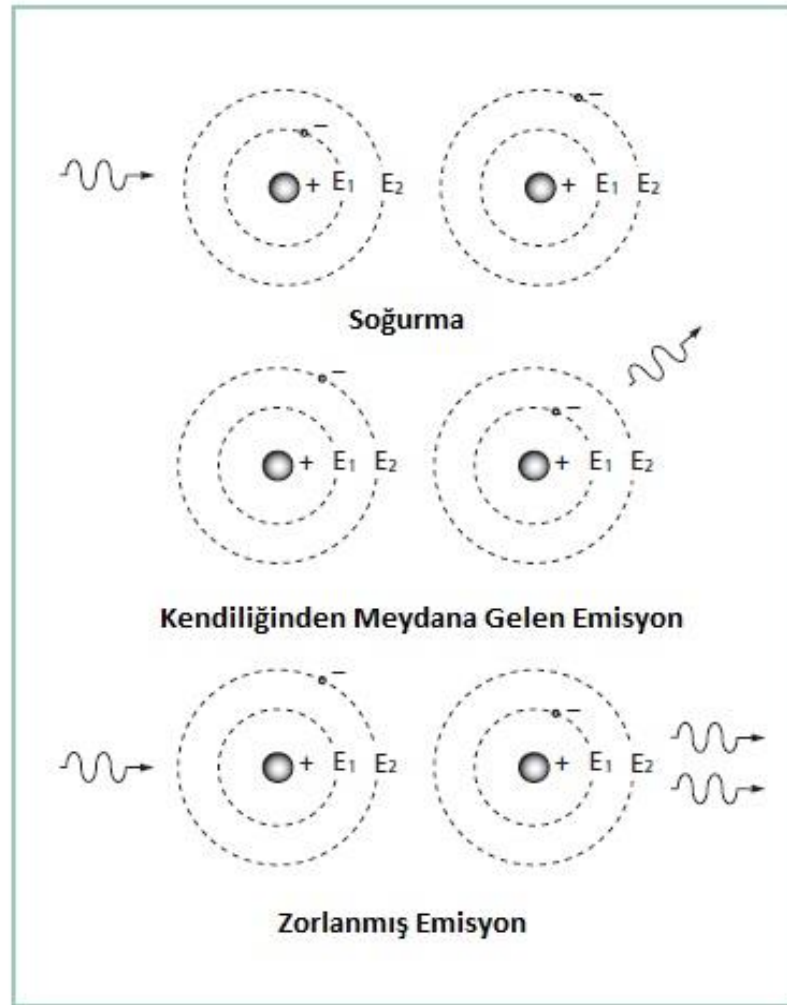
$$\lambda = \frac{hc}{E_m - E_n} \quad (1.4)$$

denklemleri ile ifade edilen şekilde olmalıdır.

Benzer şekilde bu elektron üst enerji seviyesinde fazla duramayacağı için alt enerji seviyesine geri dönerken iki seviye arasındaki fark kadar enerjiye sahip bir foton yayımlayacaktır.

1.1.2. Kendiliğinden meydana gelen emisyon ve zorlanmış emisyon

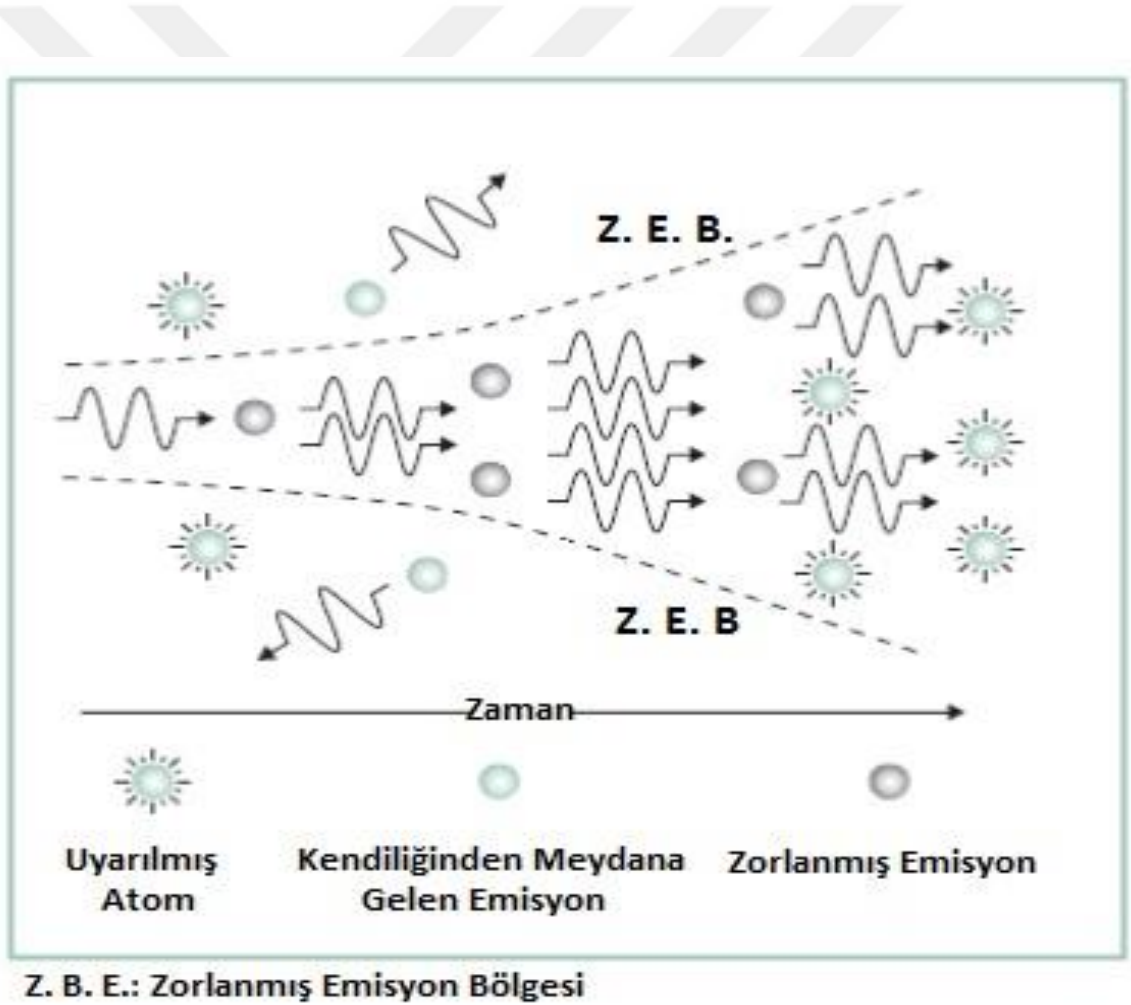
Genel olarak, uyarılmış bir seviyede bulunan elektron, nihayetinde bir foton açığa çıkararak alt enerji seviyesine geri döner. Bu olay “kendiliğinden meydana gelen emisyon” olarak adlandırılır ve ortaya çıkan foton, iki seviye arasındaki enerji farkı kadar enerjiye ve rastgele bir yöne sahiptir. Bunun yanında yayımlanan fotonun enerjisi, soğrulan fotonun enerjisinden biraz farklı olmaktadır. Bu nedenle yayımlanan foton, rastgele bir faza sahiptir.



Şekil 1.2. Soğurma, kendiliğinden meydana gelen emisyon ve zorlanmış emisyonun şematik gösterimi

Einstein, foton yayımlanma sürecine ek bir tanımlama yapmıştır. Doğru enerjiye sahip bir foton uyarılmış seviyedeki bir atom ya da molekül ile etkileştiği zaman, atom düşük enerji seviyesine geçişe zorlanır ve bu geçiş sırasında yayımladığı foton gelen fotonun ikizidir. Yani her iki foton tamamen aynı enerjiye, yöne ve faza sahiptir. Bu olay zorlanmış emisyon olarak adlandırılmaktadır. Soğurma, kendiliğinden meydana gelen emisyon ve zorlanmış emisyon süreçlerinin şematik gösterimi şekil 1.2’de verilmiştir.

Şekil 1.3’deki gibi aynı uyarılmış seviyelerde bulunan bir atom grubu ele alınırsa, gelen (zorlayıcı) foton ilk atomla etkileşir ve eş fazlı iki foton meydana getirir. İkinci adımda bu iki foton başka iki uyarılmış atomla etkileşerek dört eş fazlı foton oluşturur ve bu işlem bu şekilde devam eder ve eş fazlı bir ışın demeti oluşturulmuş olur.



Şekil 1.3. Zorlanmış emisyon ile amplifikasyon

Gerçek bir atom kümesinde, zorlanmış emisyon olasılığı oldukça düşüktür. Üstelik tüm atomlar genelde uyarılmış seviyede bulunmazlar. Boltzmann'ın termodinamiğin temel kanununda, ısı dengedeki atomların herhangi iki enerji seviyesindeki bağıl popülasyonu,

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right) \quad (1.5)$$

ile verilir. Burada N_2 ve N_1 sırasıyla yüksek ve düşük enerji seviyesi popülasyonudur. T denge sıcaklığı, k Boltzmann sabitidir. $E_2 - E_1$ yerine $h\nu$ yazılırsa

$$\Delta N \equiv N_1 - N_2 = \left(1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}\right) N_1 \quad (1.6)$$

elde edilir.

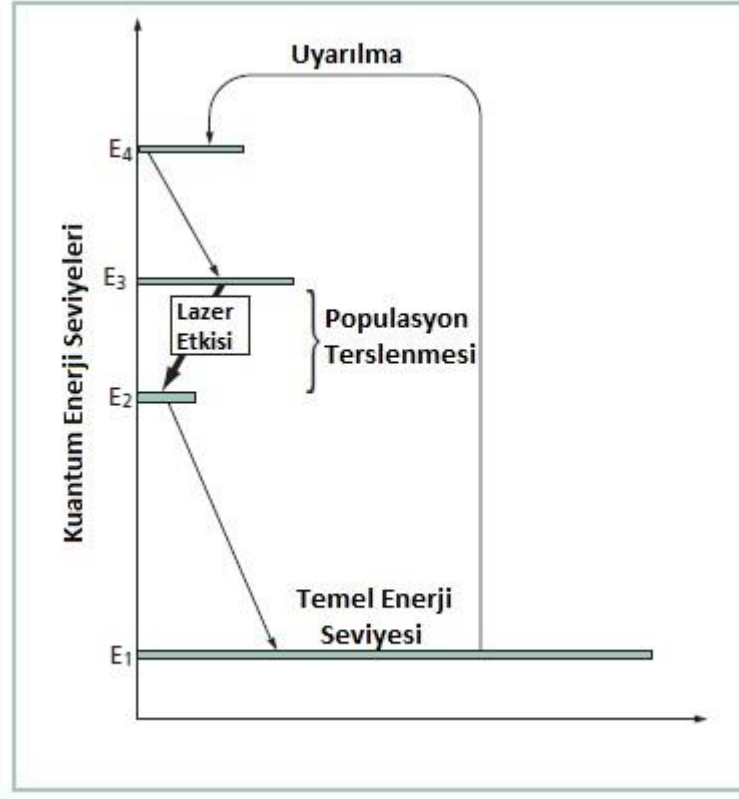
Atomların normal popülasyonunda, düşük enerji seviyesinde yüksek enerji seviyesinden daha fazla atom bulunur çünkü bir atomun bir foton soğurma olasılığı ve bir uyarılmış atomun zorlanmış emisyon ile foton yayımlama olasılığı aynıdır. Bu durumda amplifikasyon sağlanamayacaktır. Sonuç olarak lazer yapmak istiyorsak “popülasyon terslenmesi” yapmak zorundayız (Hans ve Jochen, 2008).

1.1.3. Popülasyon Terslenmesi

Atomik enerji seviyeleri yukarıda anlatılandan daha karmaşıktır. Atomlarda çok fazla enerji seviyesi vardır ve her bir enerji seviyesi kendi bozunma süresine sahiptir. Dört seviyeli enerji diyagramı şekil 1.4’de verilmiştir.

Popülasyon terslenmesi için elektronlar, bazı mekanizmalarla (optik pompalama gibi) E_4 seviyesine uyarılır. Buradaki elektron belli bir süre sonra E_3 , daha sonra da E_2 seviyesine geçiş yapar. Bu geçişler genellikle foton değil fonon yayımlayarak yani ışımasız olarak gerçekleşir. Atom son olarak E_2 seviyesinden E_1 temel enerji seviyesine ışımali geçiş yapacaktır. E_2 'den E_1 'e geçiş süresinin E_3 'den E_2 'ye geçiş süresinden daha uzun olduğu varsayılır. Dolayısıyla sürekli bir uyarım söz konusu olduğunda, zaman farkından dolayı E_3 ve E_2 seviyeleri arasında popülasyon terslenmesi sağlanmış olacak ve bu popülasyona giren bir foton zorlanmış emisyon

ile eş fazlı olarak amplifikasyona uğrayabilecektir. Sonuç olarak tek renkli, eş fazlı ve aynı yönde lazer ışını elde edilecektir (Hans ve Johen, 2008).



Şekil 1.4. Dört seviyeli lazer uyarımı sistemi

1.2 Ultra Hızlı Lazerler

Ultra hızlı terimi lazer terminolojisinde, pikosaniye ve altındaki sürelerde atımlar için kullanılan bir terimdir. Aşağıda zaman birimleri ve karşılıkları verilmiştir.

1 nanosaniye (ns)	= 10^{-9} s	= 0.000000001 s	30 cm
1 pikosaniye (ps)	= 10^{-12} s	= 0.000000000001 s	0.3 mm
1 femtosaniye (fs)	= 10^{-15} s	= 0.000000000000001 s	3 μ m
1 attosaniye (as)	= 10^{-18} s	= 0.000000000000000001 s	< μ m

1 saniyelik bir ışık atımının 300.000 km olduğu bilinmektedir. Bu değer, dünyanın çevresinin yaklaşık 7 katı mesafeye denk gelmektedir. 1 nanosaniyelik bir ışık atımından söz edilecek olursa bu mesafe 30 cm olacaktır. Yani ışık atımının uzaysal yayılımı 30 cm'dir. Nanosaniye,

zaman ölçeği yüksek hızlı elektronik çipler ve bilgisayarlar için kullanılan ölçektir. Pikosaniye ölçekli bir ışık atımı, 0.3 mm uzaysal yayılıma sahiptir. Bu zaman ölçeklerine sahip ışık atımları ışık kalemleri olarak adlandırılırken pikosaniye ve altındaki zaman ölçeklerine sahip atımlar ışık keki olarak isimlendirilir. Çünkü atımlar bu seviyeden sonra artık noktasal hale gelmeye başlar. Femtosaniye mertebesindeki atımlar ise artık uzaysal yayılım olarak μm mertebesinde ve bu lazerlerin üretimi yapılabilmektedir (Delfyett ve ark. 1992, Keller 2003).

Atım süresi birkaç femtosaniye mertebesinde ise görünür ışık atım genişliği limitine yaklaşmış olur. Yani atımın uzaysal yayılımı yaklaşık olarak görünür bölgede sadece bir dalga boyuna sahiptir. Attosaniye lazerler ise yüksek lineer olmayan frekans terslenmesi tekniği ile üretilir ve oldukça düşük dalga boyuna sahiptir. Bu atım frekansı elektromanyetik spektrumda uç ultraviyole ya da X-ışınları bölgesine karşılık gelmektedir. Bu lazerler son yıllarda teorik ve deneysel olarak elde edilebilmiştir (Carrera ve ark. 2006, M. Schultze ve ark. 2007, X. Feng 2009, E. J. Takahashi 2010).

Ultra hızlı atımlar, deneysel uygulamalar açısından kullanışlı özelliklere sahiptir. Katı hal, kimya ve biyolojide ultra hızlı fiziksel ölçümler ve uyarımlar için çok yüksek zaman çözünürlüğü sağlar (Liu ve ark. 1993, Cavalieri ve ark. 2007). Atımların sahip olduğu mikrometre mertebesindeki uzaysal yayılım sayesinde mikroskopi ve görüntüleme alanlarında kullanılabilir. Örnek olarak atom, iyon ve moleküllerdeki ultra hızlı elektronik süreçlerin görüntülenmesi (Chelkowski ve ark. 2006), iyonizasyon görüntüleme (Kienberger ve ark. 2002), elektron tünelleme görüntüleme (Uiberacker ve ark. 2007), elektron transferi görüntüleme (Remacle ve Levine 2006) ve katı hal sistemlerde yüzeydeki elektron hareketlerini görüntüleme gibi süreçlerde ultra hızlı lazerlere ihtiyaç duyulmaktadır. Belirsizlik ilkesi gereği atım süresi azaldıkça optik bant genişliği artar. Dolayısıyla ultra hızlı lazerler iletişimde büyük avantajlar sağlar (Chen ve ark. 2010). Bunun yanında ultra hızlı lazerler sahip oldukları ultra kısa atımlar nedeniyle ortalama enerji seviyelerinde yüksek pik şiddetine sahiptir. Bu sayede bu lazerlerle yüksek pik gücü elde edilebilir.

1.3. Açısal Momentum Taşıyan Işıklar

1884 yılında, Poynting tarafından yapılan bir çalışmayla süreklilik eşitlikleri türetilmiş ve ışığın, lineer momentum taşıdığı gösterilmiştir (Poynting 1884). Daha sonra bu eşitlikler, vektörel ifadeler verecek şekilde tekrar yazılmıştır (Heaviside 1894). İlerleyen süreçte ise dairesel

polarize olmuş bir ışığın, açısal momentum taşıdığını gösteren ifadeler türetilmiştir (Poynting 1909). Açısal momentum ile ilgili matematiksel ifadeler, Beth tarafından doğrulanmış ve klasik olarak dairesel polarize olmuş bir ışığın $\pm\hbar$ spin açısal momentumu, optik anlamda anizotropik özellikteki bir malzemeye transfer edilerek bu malzemeye kendi ekseninde bir dönme hareketi kazandırılmıştır (Beth 1936).

Işığın açısal momentumunun iki bileşeninden biri olan spin açısal momentum, polarizasyon vektörüyle alakalıdır. Dairesel ya da eliptik polarize olmuş ışıklar, spin açısal momentum taşıyabilmektedir. Açısal momentumun diğer bileşeni olan yörüngesel açısal momentum ise ışığın uzaysal yayılımıyla bağlantılıdır ve çok daha karmaşık şekilde ifade edilmektedir. Fakat toplam açısal momentum, radyal vektör ve lineer momentumun vektörel çarpımından elde edildiğinden, spin açısal ve yörüngesel açısal momentumu birbirinden ayırmak zor olmaktadır. 90'lı yıllarda yapılan çalışmalarla, Laguerre-Gaussian tipi ışık ışınları laboratuvar ortamında elde edilmiş, çalışmayı yapan bilim adamları spin açısal momentum ve yörüngesel açısal momentumu birbirinden ayırmayı başarmıştır (Allen ve ark. 1992, Beijersbergen ve ark. 1993). Yörüngesel açısal momentum (Bessel tipi ışınlar gibi), spin açısal momentumdan farklı olarak $\pm\hbar$ açısal momentum değerinden çok daha yüksek değerler alabilmektedir. Yörüngesel açısal momentum taşıyan ışıklar (bükümlü ışık), özel mercekler yardımıyla veya bazı holografik tekniklerle (Carpentier ve ark. 2008) üretilmektedir (Bakınız Ek-1). Bunun yanında 2003 yılında laboratuvar ortamında, dejenere soğuk sezyum atomlarından yörüngesel açısal momentum taşıyan ışık üretilebildiği gözlemlenmiştir (Barreiro ve Tabosa 2003). Açısal momentum taşıyan ışık, elektrik vektörünün ilerleme eksenine etrafında yaptığı hareketin dairesel bir bükülme hareketine benzemesinden dolayı bükümlü ışık olarak da adlandırılmaktadır. Fotonlara ek olarak elektronlara da açısal momentum taşıma özelliği kazandırıldığı bilinmektedir (Harris ve ark. 2015). Son yıllarda yapılan bir çalışmada ise lineer polarize ışık altında meta yüzeyde yörüngesel açısal momentum taşıyan yüzey plazmonu da elde edilmiştir (Chen ve ark. 2015).

1.4. Açısal Momentum Taşıyan Işıkların Yarıiletken Yapılar Üzerindeki Etkisi

Gelişen üretim teknolojileri, kuantum etkilerinin güçlü olarak gözlemlenebildiği yapıların istenilen geometride ve boyutta üretilmesini mümkün kılmıştır (Alivisatos 1996, Rogach ve ark. 1999, Li ve ark. 2003, Wang ve ark. 2003, Ivanov ve ark. 2007, Zeng ve ark. 2008, Nemchinov ve ark. 2008, Reiss ve ark. 2009). Kuantum noktalar, kuantum diskler ve kuantum halkalar gibi isimlerle bilinen bu yapılar, yüksek kuantum verimliliğinin yanında, yapıyı

oluşturan materyale, boyutuna ve geometrisine bağlı olarak değişen elektronik ve optik özellikleriyle dikkat çeken yapılardır. Bu yönleriyle biyolojik işaretleme, fotovoltaik, diyot, lazer ve dedektör uygulamalarında oldukça büyük avantajlar sağlayabilmektedir (Dubertret ve ark. 2002, Friedman 2010, Demir ve ark. 2011).

Kuantum noktalar elektronik ve optik özelliklerinin kontrolü, boyut, geometri ve yapıyı oluşturan malzemelerin değişimiyle sağlanabildiği gibi elektrik alan, manyetik alan, ısı ve basınç gibi dış etkenlerle de sağlanabilir (Kumar ve ark. 1990, Peeters 1995, Polimeni ve ark. 1999, Baskoutas ve ark. 2007, Moskalenko ve ark. 2007). Bu tür dış etkenlerle yapının elektronik ve optik özelliklerinin kontrolü, üretim aşamasında müdahale gerektiren geometri değişimi gibi etkenlerle kontrolüne nispeten daha kolay bir yol olarak görünmektedir. Bükümlü ışığın kristal içerisinde ilerleyen yüklü parçacıklarla etkileşebildiği göz önünde bulundurulduğunda, bükümlü ışıklar da bu noktada ümit verici dış etkenler olarak ele alınabilir.

Yarıiletken kuantum noktalar, teorik hesaplar ve deneysel uygulamalar için önemli bir yere sahiptir. Özellikle de yüksek yük polarizasyonu sebebiyle GaAs tabanlı kuantum noktalar, üzerinde yoğun olarak çalışılan yapılardır (Şahin 2008, Mlinar ve Zunger 2009, Kavruk ve ark. 2014, Aktürk ve ark. 2014, Nichole ve ark. 2015, You ve ark. 2015). Bununla birlikte çekirdek/kabuk (core/shell) yapılar olarak da bilinen yarıiletken kuantum nokta heteroyapılar da yüksek parçacık hapsedme etkisi sayesinde kuantum verimliliği noktasında daha avantajlı olmaktadır (Brovelli ve ark. 2011, Akgül ve ark. 2012). Heteroyapılar hem çekirdek hem kabuk kalınlığına bağlı olarak değişebilen elektronik ve optik özellikleriyle de dikkat çekmektedir. Tip-2 olarak adlandırılan elektron ve deşğin ayrı katmanlarda hapsediği yarıiletken kuantum nokta heteroyapılar ise uzun parçacık hayat süreleri ve düşük örtüşme integralleriyle öne çıkmaktadır (Piryatinski ve ark. 2007, Klimov ve ark. 2007, Ivanov ve Achermann 2010, Tyrell ve Smith 2011, Şahin ve Koç 2013, Koç ve Şahin 2014, Barman ve ark. 2015, Komolibus ve ark. 2015, Tayagaki ve Sugaya 2016).

Son yıllarda, açısız momentum taşıyan ışıkların yarıiletken yapılarla etkileşimini ele alan çalışmalar da göze çarpmaktadır. Yarıiletkenler özellikle elektronik sanayisinde yoğun olarak kullanıldığından, bu yapıların elektronik ve optik özelliklerinin ultra hızlı kontrolü büyük avantajları beraberinde getirmektedir. Yarıiletken hacimsel malzemeler üzerine yapılan çalışmalarda, bükümlü ışığın valans elektronlarını etkileyebileceği ve iletim bandına taşınan elektronlarla da net elektrik akımı elde edilebileceği teorik olarak gösterilmiştir (Quinteiro ve

Tamborenea 2009). Yine hacimsel bir GaN yarıiletkeninde bulunan ekzitonlara yörüngesel açısal momentum transfer edilmesiyle kütle merkezi etrafında dönme hareketi yaptıkları gözlemlenmiştir (Shigematsu ve ark. 2016). Hacimsel yapıların yanında, yarıiletken kuantum kuyularında ve kuantum halkalarda da bükümlü ışıkla elektronik durumların kuantumsal olarak kontrol edilebileceği gösterilmiştir (Quinteiro ve Berakdar 2009, Quinteiro ve Tamborenea 2009, Sviderski ve ark. 2013). Bu çalışmalar, özellikle bükümlü ışığın en önemli iki parametresi olan yörüngesel açısal momentum ve radyal boğumun farklı değerleri için açısal momentum transferinin gerçekleşebildiğini ve elektronik geçişlerin başarıldığını teorik olarak göstermesi açısından büyük önem arz etmektedir. Optik limitler nedeniyle bükümlü ışığı mikrometre mertebesi altında odaklamak, uygulama açısından şu anda mümkün değildir. Bükümlü ışığın odağı ve nano yapıların boyutu arasındaki bu uyumsuzluk nedeniyle yüksek verimli etkileşim sağlanamamaktadır. Bu sorunu aşmak için kullanılan yöntemlerden biri, ışığın eksenini kaydırmaktır. Bu yöntem kullanılarak yapılan bir çalışmada, bükümlü ışığın merkezi ile yarıiletken kuantum halkanın merkezi örtüşmeyecek şekilde belli bir mesafe konularak yapıdaki elektronik geçişler incelenmiştir (Quinteiro ve ark. 2010). Yörüngesel açısal momentum taşıyan bükümlü ışıkların kuantum halkalarda elektron dinamiği ve spin dinamiği üzerinde de etkili olabileceği teorik olarak öngörülmüştür (Quinteiro ve ark. 2011). Son yıllarda yapılmış olan önemli bir çalışmada da yarıiletken kuantum disklerde birden çok elektrona ait spinlerin, güçlü odaklanmış bükümlü ışık kullanılarak etkin biçimde kontrol edilebileceği gösterilmiştir (Quinteiro ve Kuhn 2015). Bunlara ek olarak yarıiletken kuantum halka bir yapıda dairesel polarize ışık kullanarak dairesel bir akım oluşturmak da mümkündür (Pershin ve Piermarocchi 2005). Yarıiletken nanoyapılarda uygulamalar açısından önemli bir yere sahip olan fotovoltaikler üzerinde bükümlü ışıkların etkileri de incelenmiştir (Wätzel ve ark. 2012, Wätzel ve Berakdar 2016).

Yarıiletken kuantum noktalar gibi nanoboyutlu metalik topakların özellikleri de şimdiye kadar bükümlü ışık altında incelenmemiştir. Elektronlar, metalik topaklarda dış etkilerle yüzey enerji seviyelerine sıçrayabilmektedir. Hatta metal topaklarda imaj enerji seviyeleri olarak adlandırılan ve yüzeyin bir kaç nanometre dışında lokalize olabilen elektronik seviyeler bulunabilmektedir. Yüzey ve imaj seviyelerinin ultra hızlı bükümlü ışıklar ile kontrol edilebilmesi durumunda manyetizma ve spintronik alanında büyük ilerleme katedileceği öngörülmektedir.

Bunlara ek olarak, açısal momentum taşıyan bükümlü ışıkların kuantum enformasyon (Mair ve ark. 2001, Muthukrishnan ve Stroud 2002, Molina-Terriza ve ark. 2007), kuantum şifreleme

(Bourennane ve ark. 2002, Mirhosseini ve ark. 2015), optik depolama (De Oliveira ve ark. 2015) gibi alanlarda da büyük avantajlar sağlaması beklenmektedir ve son yıllarda bu alanlarda uygulamaya yönelik çalışmaların giderek arttığı gözlemlenmektedir. Ayrıca açısız momentum taşıyan ışıkların yoğun ortamlarda hızında çok daha az düşüş olması ve açısız momentuma bağlı yüksek kodlama seviyesi sayesinde veri aktarım hızını olağanüstü seviyede arttıracığına dair bulgular da mevcuttur (Tyler ve Boyd 2009, Pors ve ark. 2011, Torres 2012, Ibrahim ve ark. 2013, Chaibi ve ark. 2013, Ren ve ark. 2013, Rodenburg ve ark. 2015, Bouchard ve ark. 2015, Brüning ve ark. 2016, Chu ve ark. 2016). Bunun yanında bükümlü ışıkların metal mikro iğne üretiminde kullanılabileceğine dair çalışmalar da bulunmaktadır (Omatsu ve ark. 2010). Farklı yörüngesel açısız momentum değerlerine sahip Laguerre-Gaussian ışınının lineer olmayan kristaller ve kiral materyallerdeki (Araoka ve ark. 2005) etkisi de üzerinde çalışılan diğer konulardandır. Son yıllarda üzerinde yoğun çalışmalar yapılan grafen ile bükümlü ışık arasındaki etkileşim de incelenmiştir (Farías ve ark. 2013).

1.5. Açısız Momentum Taşıyan Işıkların Atom ve Moleküller Üzerindeki Etkisi

Lazer buharlaşma tekniğiyle birlikte moleküller yığınlarının üretiminin mümkün hale gelmesi, bu yapılar üzerinde yapılan çalışmaları da beraberinde getirmiştir (Haddon ve ark. 1991, Arvanitidis ve ark. 2014, Pham ve ark. 2014). İlk olarak metal moleküller yığınlarının üretiminde kullanılan bu teknik daha sonra yarıiletken moleküller yığınlarının üretimi için de kullanılmaya başlanmıştır (Dietz ve ark. 1981, Powers ve ark. 1982, Liu ve ark. 1986, O'Brien ve ark. 1986). Bu yapılar içinde de GaAs moleküller yığınları, sahip olduğu avantajlar ve kullanım alanları sayesinde üzerinde yoğun olarak çalışılan yapılar olmuştur. Ga_nAs_m ($n + m = 80$ 'e kadar) yapıları deneysel olarak elde edilip optik özellikleri incelenmiştir (Lemire ve ark. 1990, Jin ve ark. 1990, Van Zee ve ark. 1993, Schlecht ve ark. 1995, Schafer ve ark. 1996).

Diğer taraftan moleküller yığınları üstünde yapılan teorik çalışmalar da mevcuttur. Sun ve ark. (2003) halka tipli moleküller Ga_8As_8 yapısını elde ederek optik özelliklerini incelemiştir. Sonrasında Sun ve ark. (2005) yine halka tipli moleküller Ga_8As_8 yapısının elektronik yapısını ve bağlanma mekanizmasını yoğunluk fonksiyoneli teorisi ile incelemiştir. Sonraki yıllarda, Ga_2As_2 ve Ga_nAs_n ($n = 25$) yapılarının hiper-polarizebilitesi teorik olarak (G. Maroulis ve ark. 2007, Karamanis ve ark. 2007) ve yine teorik olarak farklı GaAs yığın yapılarının geometrik yapıları, stabiliteleri, polarizebiliteyi, HOMO-LUMO aralığı, bağlanma enerjileri iyonizasyon ve potansiyelleri incelenmiştir (Feng ve ark. 2007, Gutsev ve ark. 2008, Lu ve ark. 2008,

Karamanis ve ark. 2008, Jian-Song ve Bao-Xing 2010, Mu ve ark. 2011, Lu ve ark. 2013, Ma ve ark. 2014). Bunlar dışında Wang ve ark. (2008) Mn ve Fe atomları katkılanmış Ga_nAs_n ($n = 7 - 12$) moleküler yığınlarının elektronik ve manyetik özelliklerini teorik olarak inceleyip deneylerle uyumlu sonuçlar elde etmişlerdir.

Yörüngesel açısal momentum taşıyan ışıkların üretimi ve ultra hızlı lazer teknolojisiyle birlikte gelen ve attosaniye mertebesine kadar inen lazer atımlarının da getirdiği avantajlarla, bu alanda yapılan çalışmalar büyük ivme kazanmıştır. Bu çalışmaların başında, mikro parçacıklar ile yörüngesel açısal momentum taşıyan ışık arasındaki etkileşimler gelmektedir. Yörüngesel açısal momentum taşıyan ışıklara ait elektrik vektörünün homojen olmayan uzaysal dağılımının da yardımıyla mikro parçacıkların manipüle edilebileceği ve dönme hareketi kazanabileceği; böylece mikro makine üretilebileceği öngörülmüştür (Friese ve ark. 1998). Yine bu ışıklara ait bir özellik olan lineer olmayan kuvvetin atomlar gibi tekli parçacıklar üzerindeki etkisi incelenmiş, yörüngesel açısal momentum taşıyan ışıklara maruz bırakılan atomların hareket ettirilebileceği öngörülmüştür (Al-Awfi ve Babiker 2000). Bükümlü ışıklar aynı anda spin ve yörüngesel açısal momentum taşıyabilmektedir. Bu iki farklı momentumun tuzaklanmış bir parçacığa ayrı ayrı transfer edilmesiyle birlikte parçacığın spin açısal momentum etkisiyle kendi eksenini ve yörüngesel açısal momentum etkisiyle de ışık ışınının eksenini etrafında dönme hareketi yaptığı gözlemlenmiştir (O'Neil ve ark. 2002, Picón ve ark. 2010). Yapılan bu çalışmalar, optik kontrol ve optik tuzaklama adıyla yeni bir çalışma alanını doğurmuştur (Curtis ve ark. 2002, Grier 2003). Ayrıca bükümlü ışığa ait açısal momentum halka tipi moleküllere transfer edildiğinde, molekülün kütle merkezi etrafında hareket kazanabileceği gösterilmiştir (Babiker ve ark. 2002). Bir başka çalışmada sodyum atomunun Bose-Einstein yoğunlaşması Laguerre-Gaussian ışınları altında incelenmiştir (Andersen ve ark. 2006). Literatürde bükümlü ışığın atomik geçişler üstüne etkisini inceleyen bir çalışma da mevcuttur (Schmiegelow ve ark. 2015).

Aromatik moleküllerde dairesel akım elde etmeye yönelik çalışmaların tarihi uzun yıllar öncesine dayanır (Pople 1958, McWenny 1958, Pasquarello ve ark. 1992, Gomes ve Mallion 2001, Soncini ve Fowler 2004, Tai ve ark. 2013). Böyle bir akımın elde edilebilmesi ve kontrol edilebilmesi uygulamalar açısından oldukça önemlidir. Spin açısal momentum taşıyan dairesel polarize bir ışığın, halka tipi moleküllerde mikroamper mertebesinde bir dairesel akımının oluşumuna sebep olduğu bilinmektedir (Carter ve ark. 2006). Bu tip akımların bilinen en iyi örneklerinden birisi de ortasında manyetik bir atom taşıyan ve biyolojik malzemelerde doğal olarak bulunan Mg-Porphyrin molekülünde dairesel polarize ışık altında elektronların dairesel

hareket gerçekleştirmesidir (Barth ve ark. 2006). Çeşitli çalışmalarda dairesel polarize ışık kullanılarak farklı atom ve moleküllerde de (Benzene, Mg-porphyrin, $C_{20}H_{20}$ ve C_{60} gibi) dairesel akım elde edilebileceği teorik olarak gösterilmiştir (Barth ve Manz 2007, Nobusada ve Yabana 2007, Barth 2009). Bu çalışmaların yanında, lineer moleküllerde dairesel polarize ışık tarafından indüklenmiş toroidsel akım elde edilebileceği de öngörülmüştür (Barth ve ark. 2008). Dairesel polarize ışık ve attosaniye lazer özelliklerinden faydalanılarak yapılmış oldukça dikkat çekici diğer bir çalışmada ise güçlü dairesel çekirdek akım elde edilebileceği teorik olarak gösterilmiştir (Barth ve ark. 2012).

Bu çalışmalara ek olarak atom ve moleküllerde, dairesel akım elde etmenin bir diğer yolu da yörüngesel açısal momentum taşıyan bükümlü ışıklar kullanmaktır. Bükümlü ışıkların arttırılabilen radyal boğum ve topolojik yük parametreleri sayesinde, atom ve moleküllerde indüklenen dairesel akım ve manyetik alanın kontrolü daha kolay yapılabilmektedir. Bunlara ultra hızlı lazer özelliği de eklendiğinde, dairesel akım ve manyetik alanın kontrolü femtosaniye ve hatta attosaniye mertebesinde sağlanabilmektedir. Bükümlü ışıkların küresel yapılarda sürekli dairesel akıma ve manyetik alana sebep olabileceği, ortaya çıkan akım ve manyetik alanın bükümlü ışık parametreleri ile oynanarak kontrol edilebileceğine dair oldukça temel bir çalışma Köksal ve Berakdar tarafından yapılmıştır (Köksal ve Berakdar 2012). Bu çalışmada hidrojen atomunun bükümlü ışık halkası içerisinde farklı yerlere yerleştirildiğinde elde edilen indüklenmiş akımın üç farklı parametre ile kontrol edilebildiği gösterilmiştir. Benzer çalışmalarda tek ve çok elektronlu atomlarda bükümlü ışığın etkisi detaylı olarak incelenmiştir (Picón ve ark. 2010, Scholz-Marggraf ve ark. 2014, Surzhykov ve ark. 2015). Bu çalışmalar halka tipli moleküllerde bükümlü ışık kullanılarak dairesel akım elde etmenin mümkün olduğunu göstermektedir.

1.6. Tez Çalışmasının Kapsamı ve Amacı

Bükümlü ışıklar, merkezinde foton yoğunluğunun sıfır olduğu bir ışık halkası görüntüsüne sahiptir. Işık yoğunluğu, halkanın çeperlerinde maksimum seviyeye ulaşmaktadır. Bu tür bir ışık halkasının çapı, optiksel kırınım limitinden dolayı mikrometre mertebesine yakın olmalıdır. Bununla birlikte yüksek odaklama teknikleri geliştikçe çap için daha düşük değerler elde edilebilecektir. Bundan önceki iki kısımda çalışmamızla ilgili literatüre değinilmiştir. Şimdiye kadar yapılmış olan çalışmalarda, açısal momentuma sahip ışıkların farklı malzemelerin fiziksel özellikleri ve elektronik geçişleri üzerindeki etkisi incelenmiştir. Açısal momentum taşıyan

ışıklarla ilgili ana konu, açısal momentumun ışığa maruz bırakılan sisteme transferidir. Bu tezde, kuantum mekaniksel özelliklere sahip yarıiletken veya moleküler bir yapıda hapsedilmiş olan bir elektronun lazer atımı ile yükseltgenmesi ve yükseltgenme sırasında fotonun sahip olduğu açısal momentumun elektrona aktarılması ihtimali hesaplanmıştır. Açısal momentum aktarımı ile elektronun istenen bir manyetik kuantum sayısına oturtulması hedeflenmektedir. Manyetik kuantum sayısına yerleşen bir elektron, sistemin geometrisi küresel ya da dairesel simetriye sahip olduğunda, sistemde oluşacak dairesel bir akıma sebep olacaktır. Bu akımı nötr yapacak ters ve aynı büyüklükte bir akım oluşmadığı durumda ise sistem net bir elektrik akım ve akım halkasının eksenine dik bir manyetik alan taşıyacaktır. Akımın büyüklüğü ve yönü sisteme transfer edilen açısal momentum değerine, bükümlü ışığın radyal boğum parametresine, elektrik alan vektörünün şiddetine, ışık halkasının (ışın sırtı) çapına ve ışığın frekansına bağlı olarak değişecektir. Diğer bir parametre ise sistemin elektronik yapısıdır.

Ultra hızlı lazerlerle birlikte gelen yüksek anahtarlama hızı kullanılarak yapıların merkezinde oluşan manyetik alanın kontrolünün sağlanması, kübit uygulamalarında önem arz etmektedir. Bu noktada bükümlü ışığın sahip olduğu topolojik yük ve radyal boğum parametrelerinin yapıların merkezinde indüklenecek manyetik alanın kontrolünde ne derece etkin olduğunu anlamak önemlidir. Diğer taraftan, her ne kadar teorik olarak bükümlü lazerlerin mikrometre mertebesinde odaklanabileceği (güçlü optik odaklama) öngörülse de uygulamada bükümlü lazerlerin optik odaklama limitinin mikrometre mertebesinde olması, bu ışıkların nanoboyutlu yapılarla etkileşimi açısından verimi düşürmektedir. Bu tez kapsamında, bu sorunu aşabilmek için mikrometre mertebesine yakın bir yalıtkan küresel malzemenin üzeri, 6 nm kalınlığında GaAs/AlGaAs yarıiletken malzeme ile kaplanmıştır. Böyle bir model yapı oluşturularak hem yapının boyutu bükümlü ışığın uygulamadaki odaklanabilme mertebesine yaklaştırılmış hem de yapıdaki parçacıklar 3 nm kalınlığındaki GaAs malzemesinde hapsedilerek kuantum verimliliği korunmuştur (Koç ve Köksal 2015). Tez kapsamında yapılan diğer çalışmalarda ise bükümlü ışığın teorik olarak mümkün olan mikrometre mertebesinde odaklanabildiği varsayılmıştır (Köksal ve Koç 2016a, 2016b, Koç ve Köksal 2016). Bu bilgiler ışığında bu tez çalışmasının amacı, yarıiletken kuantum noktalarda ve moleküler topaklarda dairesel polarize ışık ve bükümlü ışık kullanılarak indüklenecek dairesel akımı ve yapıların merkezinde bu dairesel akımdan doğacak manyetik alanı incelemektir.

2. TEORİ

Klasik Fizik makroskobik ölçekte başarıyla uygulanabilmesine karşın nanoboyutlu yapılar için aynı başarıyı gösterememiş ve yeni bir mekaniğe ihtiyaç duyulmuştur. İhtiyaç duyulan bu mekanik, *kuantum mekaniği* ismiyle ortaya çıkmıştır. Kuantum mekaniği, nano ölçekteki parçacık ve sistemlerin belli bir zamandaki durumları hakkında bilgi edinmeyi hedeflemektedir. Kuantum mekaniğini daha anlaşılabilir bir şekilde tartışabilmek için bu bölümde öncelikle tek parçacıklı ve tek boyutlu bir sistem üzerinden temel bir anlatım yapılacaktır. Sonrasında ise bu tezin konusu olan sistemlere uygulanması anlatılacaktır.

2.1. Zamana Bağlı Schrödinger Denklemi

Klasik mekanikte önemli bir yere sahip olan Newton'un 2. yasasının kuantum mekaniğindeki karşılığı, zamana bağlı Schrödinger Denklemi olarak bilinmektedir. Bu bölümde klasik mekanikteki Newton'un 2. yasası ele alınarak zamana bağlı Schrödinger Denklemi'nin türetimi yapılacaktır.

Newton'un 2. yasası bir parçacığın hareketi hakkında bilgi vermektedir. Bu yasanın matematiksel ifadesi,

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} = m \frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2} \quad (2.1)$$

şeklinindedir. Burada \mathbf{F} , cisme etkiyen kuvvet, m , cismin kütlesi, t , zaman, \mathbf{a} ise \mathbf{v} 'nin hızı temsil ettiği durumda $\mathbf{a} = d\mathbf{v}/dt = (d/dt)(d\mathbf{x}/dt) = d^2\mathbf{x}/dt^2$ şeklinde de ifade edilebilen ivmedir.

Newton'un 2. yasası, başlangıç koşulları bilinen bir cismin gelecekteki bir andaki durumu hakkında kesin bir şekilde bilgi sahibi olmamızı sağlamaktadır. Fakat kaotik olarak adlandırılan, başlangıç koşulları tam olarak bilinmeyen ya da cismin üzerine etkiyen koşulların yani denklem 2.1'deki cisme etkiyen \mathbf{F} kuvvetinin sürekli olarak değiştiği sistemlerde bu yasanın aynı şekilde başarılı olmasını beklemememiz gerektiği görülür.

Başlangıç koşulları tam olarak bilinen bir cismin ya da sistemin gelecek durumu hakkında bilgi sahibi olabileceğimizi yukarıda bahsettiğimiz gibi Newton'un 2. yasası gösterir. Fakat

Heisenberg Belirsizlik İlkesi mikroskobik bir cismin aynı anda hem konumunu hem de hızını belirleyemeyeceğimizi göstermiştir. Yani kuantum mekaniğinin konusu olan bu mikroskobik cisimlerin gelecekteki herhangi bir andaki durumunu tam doğrulukla belirlememiz, bu ilkeye göre mümkün değildir. Ancak bu cismin gelecekteki durumu hakkında olasılıklardan bahsetmek mümkündür.

1924 yılında, De Broglie hareket eden parçacığa bir dalganın eşlik ettiği hipotezini öne sürmüştür. Schrödinger de bu kuramı esas alıp, parçacıkların dalga gibi davrandığını varsayarak bu parçacıkların durumlarını izah etmeye çalışmıştır. Dalga mekaniğinden bilindiği üzere bir parçacığın salınımını Ψ dalga fonksiyonu olarak adlandırılan bir fonksiyon temsil etmektedir. Ψ dalga fonksiyonu genellikle zamana bağlı bir fonksiyon olmaktadır. Bu sebeple tek parçacıklı ve tek boyutta olduğu varsayılan bir sistemin dalga fonksiyonu $\Psi = \Psi(x, t)$ olarak ifade edilebilir. Dalga fonksiyonu bir sistemin olası tüm durumları hakkında bilgi içermektedir.

Tekrar Newton'un 2. yasasına dönecek olursak, m kütlesi sabit kabul edilerek denklem 2.1'in $F = dp/dt$ şeklinde de yazılabileceği görülmektedir. Buradan yola çıkılırsa bir parçacığın toplam enerjisi kinetik enerjisinin ve potansiyel enerjisinin toplamı olarak,

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V = \frac{m^2v^2}{2m} + V = \frac{p^2}{2m} + V \quad (2.2)$$

şeklinde yazılabilir. Burada V potansiyel enerji terimidir. Enerji ve potansiyel ifadelerinin bir operatör olarak tanımlanması ve p 'nin de bir momentum operatörü olması durumunda dalga fonksiyonunu bu denkleme dahil edecek olursak,

$$E\Psi(x, t) = \frac{p^2\Psi(x, t)}{2m} + V(x, t)\Psi(x, t) \quad (2.3)$$

denklemini elde ederiz. Burada enerji ve momentum terimleri yerlerine kuantum mekaniksel enerji ($E = i\hbar \partial/\partial t$) ve momentum ($p = -i\hbar \partial/\partial x$) operatörlerini yazarsak

$$i\hbar \frac{\partial\Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x, t)\Psi(x, t) \quad (2.4)$$

denklemini elde etmiş oluruz. Denklemden \hbar indirgenmiş Planck sabiti olup, $\hbar = h/2\pi$ şeklindedir. Avusturyalı fizikçi Erwin Schrödinger tarafından bulunan bu denklem **Zamana Bağlı Schrödinger Denklemi** olarak bilinmektedir.

Zamana Bağlı Schrödinger Denklemi, bize dalga fonksiyonunun herhangi bir andaki durumu hakkında bilgi verebilmektedir. Fakat yukarıda da belirtildiği gibi Heisenberg Belirsizlik İlkesi gereği klasik mekanikte olduğu gibi parçacığın konumu hakkında tam bir bilgi sağlaması mümkün olmamaktadır. Bu durumda parçacığın x konumu hakkında denklemin bize sağladığı bilgi tam olarak ne olabilir sorusuna Max Born bir postulatla cevap vermiştir. Born postulatı

$$|\Psi(x, t)|^2 dx \quad (2.5)$$

şeklindedir ve parçacığın bir t anında x ekseninde x ile $x + dx$ arasında bulunma olasılığını verir. Born'un bu postulatı olasılık yoğunluğu olarak bilinir. Yani kuantum mekaniğinde bir parçacığın konumundan kesin olarak bahsedilemeyeceği için belli bir zamanda belli bir konum aralığında bulunma olasılığından bahsedilebilir (Barde ve ark. 2015, Levine 2009, Liboff 1987).

2.2. Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi

Bazı kuantum mekaniği problemleri, Zamana Bağlı Schrödinger Denklemi yerine daha basit olan Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi ile çözülebilmektedir. Bu bölümde, denklem 2.2'den tek parçacıklı ve tek boyutta olduğu varsayılan bir sistemin Zamandan Bağımsız Schrödinger Denkleminin türetimi ele alınacaktır.

Zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin kullanılabilmesi için V parçacığın potansiyel enerjisinin zamandan bağımsız olması gerekmektedir. Bu durumda potansiyel enerji $V = V(x)$ şeklinde sadece konuma bağlı olacaktır. Potansiyel kullanılarak zamana bağlı Schrödinger denklemi,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t) \quad (2.6)$$

şeklinde yazılır. Bu denklemi çözebilmek için dalga fonksiyonunu, zamanın fonksiyonu ve konumun fonksiyonunun çarpımı olarak

$$\Psi(x, t) = f(t)\psi(x) \quad (2.7)$$

şeklinde yazılabilir. Denklem 2.5'in zamana ve konuma göre kısmi türevleri alınırsa

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \frac{df(t)}{dt} \psi(x), \quad \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = f(t) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} \quad (2.8)$$

eşitlikleri elde edilir. Bu eşitlikler Denk. 2.6'da yerlerine yazılıp eşitliğin her iki tarafı $f(t)\psi(x)$ 'ye bölünürse

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x) \quad (2.9)$$

eşitliği elde edilir. Zamana Bağlı Schrödinger Denklemi'nden Denk. 2.9'un sol tarafının E enerjisine eşit olduğunu biliyorduk. Denklemin sağ tarafını E'ye eşitlenirse

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) \quad (2.10)$$

denklemini elde ederiz. Bu denklem x düzleminde hareket eden, m kütleli bir parçacığın **Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi** olarak bilinmektedir. Denklemin sol tarafındaki enerji teriminin zamana bağlı bir $f(t)$ fonksiyonu içerdiğini Denk. 2.9'da görülmektedir. $f(t)$ fonksiyonu için, Denk. 2.9'un sol tarafı E'ye eşitlenirse

$$\frac{df(t)}{f(t)} = -\frac{iE}{\hbar} dt \quad (2.11)$$

elde edilir. Bu ifadenin her iki tarafının integrali alındığında

$$\ln f(t) = -\frac{iE}{\hbar} t + C \quad (2.12)$$

elde edilmiş olunur. Burada C integral sabitidir. Bu ifade yeniden düzenlenirse,

$$f(t) = e^C e^{-iEt/\hbar} \quad (2.13)$$

denklemini elde edilir. e^C sabit bir sayı olduğundan bu ifade denklem 2.7'deki $\psi(x)$ ifadesine dahil edilerek denklem 2.13'te ihmal edildiğinde, $f(t) = e^{-iEt/\hbar}$ ifadesi yazılabilir. Bu ifadelerden yola çıkılıp, sistemin toplam dalga fonksiyonu, denklem 2.7 kullanılarak,

$$\Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x) \quad (2.14)$$

şeklinde yazılır. Denk. 2.14'te görüldüğü üzere toplam dalga fonksiyonu kompleks ve zamana bağlıdır. Deneysel olarak gözlemlenebilir olan ve fiziksel anlam taşıyan ifade olasılık yoğunluğu olarak adlandırılır ve $|\Psi(x, t)|^2$ şeklinde ifade edilir. Kompleks bir ifadenin mutlak değerinin karesi, kendisinin kompleks eşleniği ile çarpımıyla bulunabilir.

$$\begin{aligned} |\Psi(x, t)|^2 &= [e^{-iEt/\hbar} \psi(x)]^* e^{-iEt/\hbar} \psi(x) \\ &= e^{iEt/\hbar} \psi^*(x) e^{-iEt/\hbar} \psi(x) \\ &= e^0 \psi^*(x) \psi(x) = \psi^*(x) \psi(x) \\ |\Psi(x, t)|^2 &= |\psi(x)|^2 \end{aligned} \quad (2.15)$$

ifadesi elde edilir. Denk. 2.15, E enerji ifadesinin reel bir ifade olduğu gerçeğine dayanılarak elde edilmiştir. Denk. 2.15'te görüldüğü üzere dalga fonksiyonunun kendisi zamana bağlı olmasına rağmen deneysel olarak ölçümü yapılabilen bir ifade olan olasılık yoğunluğu $|\psi(x)|^2$ ifadesi ile elde edilir ve zamandan bağımsızdır. Bu dalga fonksiyonuna sahip durumlar, durağan durumlar (sabit enerjili durum) olarak isimlendirilir ve durağan bir durumun tam dalga fonksiyonu, $\psi(x)$ ifadesinin $e^{-iEt/\hbar}$ ifadesi ile çarpımıyla elde edilir. Schrödinger Denklemi'nin E ve ψ olmak üzere iki bilinmeyen içerdiği görülmektedir. Bu nedenle denklemin çözümü sınır koşulları kullanılarak yapılır. Sınır koşulları, izinli enerji seviyelerinin belirlenmesini sağlayarak denklemin çözümünün yapılmasına yardımcı olur (Barde 2015, Levine 2009, Liboff 1987).

2.3. Zamana Bağlı Pertürbasyon Teorisi

Kuantum mekaniğinin alanına giren nano ölçekteki parçacık ve sistemlerin, ısı, basınç, elektromanyetik dalgalar gibi etkenler tarafından nasıl etkilendiğini anlamak, bu sistemlerin kullanıldığı uygulamalar açısından önem arz etmektedir. Bunun için teorik olarak nano ölçekli

sistemle etken arasında bir etkileşim terimi kullanılarak sistemin etkileşimden önceki ve sonraki durumları hesaplanabilmektedir. Bir atomun enerji seviyeleri ve bu seviyelere karşılık gelen dalga fonksiyonlarının, Schrödinger Denklemi'nin çözümüyle elde edilebileceği önceki bölümlerde gösterilmiştir. Fakat Schrödinger Denklemi'nin, tek elektronlu atomlarda analitik çözümü yapılabilmesine rağmen elektronlar arasındaki itme kuvveti teriminden dolayı çok elektronlu sistemlerde ve moleküllerde tam bir analitik çözümü yapılamamaktadır. Bu nedenle bir takım yaklaşım metotları kullanılmaktadır. Kuantum mekaniğinde kullanılan ve genel kabul gören iki yaklaşım metodundan söz edilebilir. Bu yaklaşım metotları; varyasyon metodu ve Pertürbasyon teoremi olarak bilinir.

Pertürbasyon teorisi, bir sisteme etkiyen kuvvetin, sistemin potansiyelinde etkileşimden önceki duruma göre çok küçük değişime sebep olduğu durumlarda kullanılabilir. Bu tez çalışması boyunca, halka yapılı moleküler sistemlerin ve küresel simetrik kuantum nokta yapıların, elektromanyetik dalgalarla (bükümlü lazerler) etkileşimi incelenmiştir. Elektromanyetik dalgalar, etkilediği sistemin potansiyelinde zamana bağlı bir değişime sebep olmaktadır. Bu nedenle hesaplamalarda Zamana Bağlı Pertürbasyon Teoreminin kullanımı tercih edilmiştir. Bu bölümde Zamana Bağlı Pertürbasyon Teorisinden genel anlamda bahsedildikten sonra, bu teoremin halka yapılı moleküler sistemlere ve küresel simetrik kuantum nokta yapılarına uygulanması anlatılacaktır.

Elektromanyetik dalgayla etkileşmeyen bir sistemin, hamiltonyeni \hat{H}^0 ve etkileşim durumundaki zamana bağlı hamiltonyeni ise \hat{H}' ile temsil edilebilir. Bu durumda pertürbe olmamış bir sistemin Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi,

$$\hat{H}^0 \psi_k^0 = E_k^0 \psi_k^0 \quad (2.16)$$

olarak yazılır. Burada E_k^0 ve ψ_k^0 durağan durum enerji seviyesi ve dalga fonksiyonudur. Elektromanyetik dalga ile etkileşim durumundaki sistemin potansiyelinde zamana bağlı bir değişim gözlemlenmesi gerektiğinden daha önce bahsedilmiştir. Bu durumda bu tür etkileşim içinde olan bir sistemin Zamana Bağlı Schrödinger Denklemi, elektromanyetik dalganın sebep olduğu \hat{H}' pertürbasyon teriminin potansiyelde sebep olacağı değişimden dolayı, denklem 2.4'ün sağ tarafına eklenerek,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}^0 + \hat{H}')\Psi \quad (2.17)$$

şeklinde yazılır. Öncelikle \hat{H}' teriminin olmadığı durumun Schrödinger Denklemi

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^0}{\partial t} = \hat{H}^0 \Psi^0 \quad (2.18)$$

şeklinde yazılır. Bu sistemin dalga fonksiyonu, $\Psi_k^0 = \exp(-iE_k^0 t/\hbar)\psi_k^0$ olarak verilir. ψ_k^0 fonksiyonu \hat{H}^0 hamiltonyeninin öz değeridir. Her ψ_k^0 denklem 2.18'in çözümü olmak üzere, dalga fonksiyonlarının lineer kombinasyonu,

$$\Psi^0 = \sum_k c_k \Psi_k^0 = \sum_k c_k \exp\left(-\frac{iE_k^0 t}{\hbar}\right) \psi_k^0 \quad (2.19)$$

olarak yazılabilir. Burada c_k keyfi zamandan bağımsız sabittir ve Zamana Bağlı Schrödinger Denklemi'nin çözümüdür. \hat{H}^0 terimi zamandan bağımsız olduğu için denklem 2.19 Zamana Bağlı Schrödinger Denklemi'nin genel çözümüdür.

Pertürbasyon terimi \hat{H}' işlemlere dahil edildiğinde denklem 2.19 Zamandan Bağımsız Schrödinger Denklemi'nin çözümü olmaktan çıkar. Çünkü pertürbasyon terimine ait dalga fonksiyonu zamana bağlıdır ve zamanla değişmektedir. Bu dalga fonksiyonunun lineer kombinasyonunu yazarak elde edilecek katsayıya b_k denilirse, bu katsayı zamana bağlı olacaktır. Bu durumda dalga fonksiyonunun lineer kombinasyonu,

$$\Psi = \sum_k b_k(t) \exp\left(-\frac{iE_k^0 t}{\hbar}\right) \psi_k^0 \quad (2.20)$$

şeklinde yazılabilir.

Denklem 2.20, denklem 2.16 da kullanılarak denklem 2.17'de yerine yazılırsa,

$$\begin{aligned}
i\hbar \sum_k \frac{db_k}{dt} \exp\left(-\frac{iE_k^0 t}{\hbar}\right) \psi_k^0 + \sum_k E_k^0 b_k \exp\left(-\frac{iE_k^0 t}{\hbar}\right) \psi_k^0 \\
= \sum_k b_k \exp\left(-\frac{iE_k^0 t}{\hbar}\right) E_k^0 \psi_k^0 + \sum_k b_k \exp\left(-\frac{iE_k^0 t}{\hbar}\right) \hat{H}' \psi_k^0 \\
+ i\hbar \sum_k \frac{db_k}{dt} \exp\left(-\frac{iE_k^0 t}{\hbar}\right) \psi_k^0 = \sum_k b_k \exp\left(-\frac{iE_k^0 t}{\hbar}\right) \hat{H}' \psi_k^0
\end{aligned} \tag{2.21}$$

elde edilir. t süre sonraki dalga fonksiyonuna ψ_m^0 denilip, ψ_m^{0*} ile çarpılarak uzaysal koordinatlarda integral alınır,

$$\frac{db_m}{dt} = i\hbar \sum_k b_k \exp[i(E_m^0 - E_k^0)t/\hbar] \langle \psi_m^0 | \hat{H}' | \psi_k^0 \rangle \tag{2.22}$$

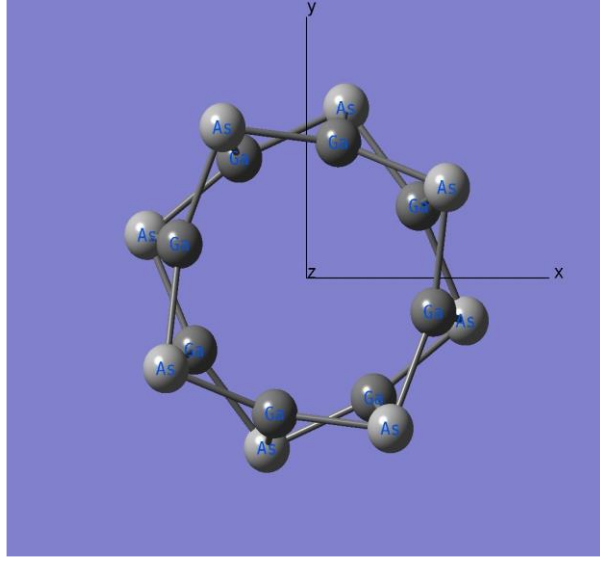
elde edilir. Pertürbasyon terimi \hat{H}' 'in $t = 0$ zamanından $t = t'$ zamanına kadar sisteme uygulandığını varsayarak, n durgun durumu için

$$b_m(t') = b_m(0) + i\hbar \int_0^{t'} \exp[i(E_m^0 - E_n^0)t/\hbar] \langle \psi_m^0 | \hat{H}' | \psi_n^0 \rangle dt \tag{2.23}$$

elde edilir (Levine 2009).

2.4. Dairesel Polarize ve Bükümlü Işıklı Etkileşen Halka Tipli Bir Molekülde Oluşan Akımın Zamana Bağlı Pertürbasyon Teorisi Altında İncelenmesi

Bu bölümde halka tipli bir molekülün, dairesel polarize olmuş bir lazer ışını ve bükümlü bir lazer ışınıyla etkileşimi sonucu oluşan akım Zamana Bağlı Pertürbasyon Teorisi altında incelenecektir. Örnek halka tipli bir molekül şekil 2.1'de verilmiştir.



Şekil 2.1. Ga₈As₈ halka tipli molekül yapının şematik gösterimi

Spin açısal momentum taşıyan dairesel polarize bir ışığın polarizasyon vektörü,

$$\vec{e} = \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.24)$$

şeklinde verilir. Radyal bağımlı yörüngesel açısal momentum taşıyan bükümlü bir ışığın vektör potansiyeli ise

$$\mathbf{A}(r, \phi, t) = \vec{e} F_{m_a}^p(r, \phi) e^{i(q_z z)} e^{-it\omega} + c. c \quad (2.25)$$

şeklinde dir. z elektromanyetik dalganın ilerleme yönü, q_z dalga vektörü, ω ise ışığın frekansıdır. Burada dikkat edilmesi gereken nokta, polarizasyon vektörünün ne seçileceğidir. Polarizasyon vektörüne göre sistemdeki geçiş kurallarının değişeceği göz önünde bulundurulmalıdır. Örnek olarak polarizasyon vektörünü sadece x yönünde polarize olarak seçilirse (Denklem 2.24'deki y bileşenini 0 alarak) bükümlü ışık sadece yörüngesel açısal momentum taşıyor olacaktır. Diğer taraftan denklem 2.24'deki gibi sağa ya da sola dairesel polarize olmuş polarizasyon vektörü seçilirse ışık hem spin açısal momentum hem de yörüngesel açısal momentum taşıyacaktır ve geçiş kuralları buna göre değişecektir. $F_{m_a}^p$ bükümlü ışığın homojen olmayan uzaysal dağılımıdır ve bu tez çalışmasında Laguerre Gaussian modu ile temsil edilmiştir.

$$F_{m_a}^p = \left[A_0 \left(\frac{\sqrt{2}r}{w_0} \right)^{|m_a|} e^{-\frac{r^2}{w_0^2}} L_p^{m_a} \left(\frac{2r^2}{w_0^2} \right) \right] e^{-im_a\phi} \quad (2.26)$$

Burada A_0 normalizasyon sabiti, w_0 ışığın ışın sırtı (beam waist), m_a ışığın yörüngesel açısal momentumu (topolojik yük), p radyal düğüm, $L_p^{|m_a|}$ ise Laguerre Polinomudur (Bakınız Ek-1).

2.4.1. Akım Yoğunluğu

Zamana Bağlı Pertürbasyon Teorisi kullanılarak, ışıkla etkileşen sistemin hamiltonyeni

$$\hat{H} = \frac{1}{2} [\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{A}(r, \phi, t)]^2 + V(r) \quad (2.27)$$

şeklinde yazılır. Bu denklemin zamana bağımlı ve zamandan bağımsız terimlerini ayırarak devam edilebilir.

$$\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}' \quad (2.28)$$

Zamandan bağımsız kısım

$$\hat{H}^0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2} + V(r) \quad (2.29)$$

ve zamana bağlı kısım ise

$$\hat{H}' = -[\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(r, \phi, t) + \mathbf{A}(r, \phi, t) \cdot \hat{\mathbf{p}}] \quad (2.30)$$

olarak yazılabilir. Burada $\hat{\mathbf{p}}$ elektronun momentum operatörü, $V(r)$ ise sisteme ait etkin potansiyeldir. Denklem 2.29'da da görüldüğü üzere yapının etkin potansiyeli zamandan bağımsızdır. Işığın yapıya olan etkisi ise vektör potansiyeli teriminin momentum operatörüyle vektörel etkileşimi şeklinde hesaplamalara dahil edilir. Kuantum mekaniksel akım yoğunluğu,

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{i}{2} \left(\Psi(\vec{r}, t_f) \vec{\nabla} \Psi^*(\vec{r}, t_f) - \Psi^*(\vec{r}, t_f) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t_f) \right) \quad (2.31)$$

şeklinde yazılır. Burada dalga fonksiyonu zamana bağımlıdır ve

$$\Psi(x, y, z, t) = \sum_k C_k(t) e^{-i\omega_k t} \psi_k(x, y, z) \quad (2.32)$$

şeklinde ifade edilir. $\psi_k(x, y, z)$ kartezyen koordinatlarda ifade edilen dalga fonksiyonunu temsil eder ve moleküler topaklar için Gaussian 09 programı kullanılarak DFT hesaplamasıyla, yarıiletken kuantum noktalar için sonlu farklar yöntemi ve etkin kütle yaklaşımı kullanılarak C++'da yazılan kodlarla Schrödinger Denklemi'nin çözümüyle elde edilmiştir (Hesaplama detayları için bakınız Ek-2). Birkaç yaklaşımla dalga fonksiyonu içerisindeki C_k katsayısı,

$$C_k = i \langle k | \hat{H}' | k_0 \rangle \left[-i \frac{e^{it_f(\omega_k - \omega_{k_0} - \omega t_i \delta)}}{\omega_k - \omega_{k_0} - \omega t_i \delta} + \frac{2\delta}{(\omega_k - \omega_{k_0} - \omega)^2 + \delta^2} \right] \quad (2.33)$$

olarak bulunur. $t_f = 1/\delta$ atomik geçiş süresini, $\omega_{k_0, k}$ temel ve uyarılmış durum enerji değerlerini, ω ise ışığın frekansını temsil etmektedir. \hat{H}' (denklem 2.30), lazer ışını ile sistem arasındaki pertürbasyon terimidir. C_k denklem 2.32'de yerine yazıldığında zamana bağımlı dalga fonksiyonu

$$\Psi(x, y, z, t) = \sum_k \langle k | \hat{H}' | k_0 \rangle \left[\frac{2\delta}{(\omega_k - \omega_{k_0} - \omega)^2 + \delta^2} \right] e^{-i\omega_k t} \psi_k(x, y, z) \quad (2.34)$$

şeklini almaktadır. Burada $t_f = \infty$ olduğu varsayılmıştır. Dalga fonksiyonunun kompleks eşleniği ise

$$\Psi^*(x, y, z, t) = \sum_k \langle k | \hat{H}' | k_0 \rangle^* \left[\frac{2\delta}{(\omega_k - \omega_{k_0} - \omega)^2 + \delta^2} \right] e^{i\omega_k t} \psi_k(x, y, z) \quad (2.35)$$

şeklinindedir. Ψ dalga fonksiyonunun türevi,

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}\Psi &= \partial_x\Psi\vec{a}_x + \partial_y\Psi\vec{a}_y + \partial_z\Psi\vec{a}_z \\
&= \sum_k \langle k|\hat{H}'|k_0\rangle \left[\frac{2\delta}{(\omega_k - \omega_{k_0} - \omega)^2 + \delta^2} \right] e^{-i\omega_k t} \times \\
&\quad [\partial_x\Psi_k(x, y, z)\vec{a}_x + \partial_y\Psi_k(x, y, z)\vec{a}_y + \partial_z\Psi_k(x, y, z)\vec{a}_z]
\end{aligned} \tag{2.36}$$

olarak elde edilir. Ψ^* dalga fonksiyonunun türevi ise

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla}^*\Psi &= \sum_k \langle k|\hat{H}'|k_0\rangle^* \left[\frac{2\delta}{(\omega_k - \omega_{k_0} - \omega)^2 + \delta^2} \right] e^{i\omega_k t} \times \\
&\quad [\partial_x\Psi_k(x, y, z)\vec{a}_x + \partial_y\Psi_k(x, y, z)\vec{a}_y + \partial_z\Psi_k(x, y, z)\vec{a}_z]
\end{aligned} \tag{2.37}$$

şeklinde ifade edilir. Bu adımlardan sonra akım yoğunluğu $\psi_{k,k'} = \psi_{k,k'}(x, y, z)$ alınarak daha açık bir formda,

$$\begin{aligned}
\vec{j}(x, y, z) &= \sum_k \sum_{k'} \langle k|\hat{H}'|k_0\rangle \langle k'|\hat{H}'|k_0\rangle^* \left[\frac{(2\delta)^2}{(\omega_k - \omega_{k_0} - \omega)^2 + \delta^2} \frac{1}{(\omega_{k'} - \omega_{k_0} - \omega)^2 + \delta^2} \right] \\
&\times \\
&\quad e^{-i(\omega_k - \omega_{k'})t} \{ \psi_k \partial_x \psi_{k'}, \psi_k \partial_y \psi_{k'}, \psi_k \partial_z \psi_{k'} \} \\
&- \sum_k \sum_{k'} \langle k'|\hat{H}'|k_0\rangle^* \langle k|\hat{H}'|k_0\rangle \left[\frac{(2\delta)^2}{(\omega_k - \omega_{k_0} - \omega)^2 + \delta^2} \frac{1}{(\omega_{k'} - \omega_{k_0} - \omega)^2 + \delta^2} \right] \\
&\times \\
&\quad e^{-i(\omega_k - \omega_{k'})t} \{ \psi_{k'} \partial_x \psi_k, \psi_{k'} \partial_y \psi_k, \psi_{k'} \partial_z \psi_k \}
\end{aligned} \tag{2.38}$$

olarak yazılabilir. Denklem yeniden düzenlenerek

$$\begin{aligned}
\vec{j}_{k_0}(x, y, z) &= \sum_k \sum_{k'} \langle k|\hat{H}'|k_0\rangle \langle k'|\hat{H}'|k_0\rangle^* \left[\frac{(2\delta)^2}{(\omega_k - \omega_{k_0} - \omega)^2 + \delta^2} \frac{1}{(\omega_{k'} - \omega_{k_0} - \omega)^2 + \delta^2} \right] \times \\
&\quad e^{-i(\omega_k - \omega_{k'})t} [\psi_k \partial_{x,y,z} \psi_{k'} - \psi_{k'} \partial_{x,y,z} \psi_k] \vec{a}_{x,y,z}
\end{aligned} \tag{2.39}$$

şeklinde yazılabilir. Buradaki akım yoğunluğu dolu seviyelerdeki sadece bir elektronun uyarılmış duruma geçişini temsil eder. Dolu seviyelerdeki tüm elektronlarının akım yoğunluğuna katkısını hesaplamak için

$$\vec{J}_T(x, y, z) = \sum_{k_0} \vec{J}_{k_0}(x, y, z) \quad (2.40)$$

formülü kullanılır. Formülde k_0 dolu seviyeleri temsil etmektedir (Köksal ve Berakdar 2012, Barth 2009).

2.4.2. Manyetik Alan

Toplam akım yoğunluğu kullanılarak sistemde indüklenen manyetik alan Biot-Savart Yasası yardımıyla hesaplanabilir.

$$\vec{B}(\vec{r}) = -\frac{\mu_0 e}{4\pi} \iiint \frac{\vec{J}_T(\vec{r}') \times (\vec{r} - \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|^3} dV' \quad (2.41)$$

Biot-Savart Yasası $r = 0$ noktası için kartezyen koordinatlarda yeniden yazılırsa

$$\vec{B}(x = y = z = 0) = -\frac{\mu_0 e}{4\pi} \iiint \frac{\vec{J}_T(x, y, z) \times (x\hat{a}_x + y\hat{a}_y + z\hat{a}_z)}{(x^2 + y^2 + z^2)^{3/2}} dx dy dz \quad (2.42)$$

şeklini alır. Bu formülden de anlaşılacağı üzere indüklenen manyetik alan ışığın frekansı ve \hat{H}' pertürbasyon terimine bağlıdır.

2.5. Dairesel Polarize ve Bükümlü Işıkla Etkileşen Yarıiletken Kuantum Nokta Yapıda Oluşan Akımın Zamana Bağlı Pertürbasyon Teorisi Altında İncelenmesi

Yarıiletken kuantum nokta yapılar yüksek kuantum verimliliği, boyutuna ve geometrisine bağlı olarak verdiği elektronik ve optik tepkiler nedeniyle üzerinde yoğun olarak çalışılan yapılardır. Bununla birlikte, yarıiletkenler elektromanyetik dalga, ısı ya da elektrik alan etkileşimlerinden sonra elektronun iletim bandına geçerken arkasında bıraktığı deşik gibi parçacıklardan dolayı, hesaplamalar açısından karmaşık adımlar izlenmesini gerektiren yapılar olarak bilinmektedir.

Diğer taraftan bu yapıların Gaussian 09 ya da VASP gibi paket programlar tarafından modellenmesi ve elektronik seviye hesapları çok yüksek işlemci ve bellek kapasitesi ve uzun hesaplama zamanı gerektirmektedir. Bu sebeplerden dolayı, bu tez çalışmasında yarıiletken kuantum nokta yapı modellemesi ve elektronik yapı hesapları nispeten daha basit adımlar izlenerek etkin kütle yaklaşımı altında, Hartree yöntemi kullanılarak incelenmiştir. Schrödinger Denklemi nümerik olarak, matris köşegenleştirme yöntemiyle çözülerek enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonları elde edilip, bükümlü ışıkla kuantum nokta yapının etkileşimi incelenmiştir.

2.5.1. Etkin Kütle Yaklaşımı

Bir malzeme içindeki elektron hareket ederken malzemeyi oluşturan atomların sebep olduğu bir potansiyele maruz kalır. Yarıiletken süper örgülerde bu potansiyel periyodiktir. Yani belli aralıklarla tekrar eden bir potansiyel profili sergiler. Elektron maruz kaldığı bu periyodik potansiyel sebebiyle örgü içinde normalden farklı hareket etmek durumundadır.

Etkin kütle yaklaşımında, elektronun maruz kaldığı bu potansiyel, elektronun kütlesine etki ediyormuş gibi düşünülür. Yani Newton'un ikinci yasası gereği, örgünün sahip olduğu periyodik potansiyelin, elektronun hızına olan etkisi, dolaylı yoldan hesaba katılmış olur. Etkin kütle eşitliği elde edilirken periyodik potansiyel, serbest elektrona etkiyen bir kuvvet olarak ele alınır. Serbest elektronun enerji ifadesi,

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} \quad (2.43)$$

olarak verilir. m serbest elektron kütlesi, \mathbf{k} ise dalga vektörüdür. Parçacık-dalga ikilemi gereği örgü içindeki elektron için $\mathbf{v}_g = \partial\omega/\partial\mathbf{k}$ grup hızı ifadesi kullanılabilir. Elektrona bir kuvvet etki ettiğinde, elektronun ivmesindeki değişim Newton'un 2. yasası kullanılarak,

$$\frac{\partial E}{\partial t} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_g \quad (2.44)$$

şeklinde yazılabilir. $E = \hbar\omega$ ve örgü içindeki elektronun kütlesi m^* olmak üzere grup hızı,

$$\mathbf{v}_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} \approx \frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*} \quad (2.45)$$

şeklinde yeniden yazılabilir. Bu denklemler kullanılarak örgü içindeki elektronun ivme ifadesi,

$$\mathbf{a} = \frac{\partial \mathbf{v}_g}{\partial t} = \frac{\hbar}{m^*} \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{1}{m^*} \frac{d(\hbar\mathbf{k})}{dt} = \frac{1}{m^*} \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \left(\frac{1}{m^*}\right) \mathbf{F} \quad (2.46)$$

şeklinde verilir. Son olarak denklem 2.45'in zamana göre türevi alınarak

$$\frac{\partial \mathbf{v}_g}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \frac{\partial E}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \mathbf{F} \cdot \mathbf{v}_g = \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}}\right) \mathbf{F} = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}^2}\right) \mathbf{F} \quad (2.47)$$

şeklinde kuvvete ve enerjiye bağlı bir ifade elde edilir. Denklem 2.46 ve denklem 2.47 birbirlerine eşitlenerek etkin kütle ifadesi elde edilebilir (Manasreh 2005, Kittel 2004).

$$m^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}^2}\right)^{-1} \quad (2.48)$$

2.5.2. Hartree Yaklaşımı

Hartree Yaklaşımı, yerel yoğunluk yaklaşımından elde edilen, çok parçacıklı sistemlerde kullanılan basit ama etkili bir yaklaşımdır. Hartree Yaklaşımı'nda tüm parçacıkların potansiyeli tek tek hesaba katılmak yerine, tüm parçacıklar için ortalama bir potansiyel ele alınarak Schrödinger Denklemi çözülür.

Hartree yaklaşımı altında tek parçacık için Schrödinger Denklemi,

$$\left\{ \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + V_H(\mathbf{r}) \right\} \psi_n(\mathbf{r}) = E\psi_n(\mathbf{r}) \quad (2.49)$$

şeklinde yazılır. $V_H(\mathbf{r})$ Hartree potansiyelidir ve Poisson eşitliğinden elde edilir.

$$\nabla^2 V_H = \frac{e^2 n(\mathbf{r})}{\kappa} \quad (2.50)$$

Burada e elektronun yükü, κ malzemenin dielektrik sabitidir. $n(\mathbf{r})$ ise yük yoğunluğudur ve

$$n(\mathbf{r}) = -e \sum_{n=1}^N |\psi_n(\mathbf{r})|^2 \quad (2.51)$$

denklemleri ile hesaplanır (Ihn 2010).

2.5.3. Yarıiletken Kuantum Nokta Yapıda Elektron-Deşik Çiftinin Enerji Seviyeleri ve Dalga Fonksiyonları Hesabı

Küresel simetrik bir kuantum nokta yapının elektronik yapısı ve dalga fonksiyonlarını elde etmek için Schrödinger Denklemi, elektron ve deşik çiftinin birlikte hesaba katıldığı bir formda yazılmalıdır. Her iki parçacığın etkisi hesaba katılacak olunursa Schrödinger Denklemi,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla}_e \left(\frac{1}{m_e^*(r)} \vec{\nabla}_e \right) - \frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla}_h \left(\frac{1}{m_h^*(r)} \vec{\nabla}_h \right) - \frac{e^2}{\kappa |\vec{r}_e - \vec{r}_h|} + V_e(r_e) + V_h(r_h) \right] \psi_{nlm}^{e-h}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \varepsilon_{nlm} \psi_{nlm}^{e-h}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \quad (2.52)$$

şeklinde yazılabilir (Şahin ve ark. 2012). Burada $m_{e,h}^*(r)$ elektron ve deşiğin konuma bağlı etkin kütlesi olmak üzere, denklemin birinci ve ikinci terimleri sırasıyla elektron ve deşiğin kinetik enerji terimlerini, üçüncü terim elektron ve deşik arasındaki Coulomb potansiyel terimini, V_e ve V_h sırasıyla elektron ve deşiğin yapı içinde maruz kaldığı sınırlandırma potansiyelini, ε_{nlm} elektron-deşik çiftinin enerjisini, $\psi_{nlm}^{e-h}(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$ ise elektron-deşik çiftinin toplam dalga fonksiyonunu temsil etmektedir.

Denklem 2.52'nin analitik ve nümerik çözümü mümkün olmadığı için Hartree Yaklaşımı altında elektron ve deşiğin maruz kaldığı ortalama bir potansiyel belirleyerek denklemi elektron ve deşik için iki ayrı denklem şeklinde çözmek daha makul görünmektedir. Bunun için

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla}_r \left(\frac{1}{m_e^*(r)} \vec{\nabla}_r \right) + V_e(r) - q_e \Phi_h \right] R_e(r) = \varepsilon_e R_e(r) \quad (2.53)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla}_r \left(\frac{1}{m_h^*(r)} \vec{\nabla}_r \right) + V_h(r) - q_h \Phi_e \right] R_h(r) = \varepsilon_h R_h(r) \quad (2.54)$$

şeklinde iki ayrı denklem elde edilir. Burada $q_{e,h}$ elektron ve deşiğin yükü, Φ_e ve Φ_h sırasıyla elektron ve deşiğin Coulomb potansiyeli, $R_e(r)$ ve $R_h(r)$ sırasıyla elektron ve deşiğin radyal daga fonksiyonu, $\epsilon_{e,h}$ ise elektron ve deşiğin enerji öz değerleridir. Dalga fonksiyonlarının açısai kısmı küresel simetriden dolayı küresel harmoniklerle yazılır.

Φ_e ve Φ_h potansiyelleri daha önce de bahsedildiği üzere Poisson eşitliğinin çözümüyle elde edilir.

$$\vec{\nabla}_k(r)\vec{\nabla}\Phi_e = -q_e\rho_e(r) \quad (2.55)$$

$$\vec{\nabla}_k(r)\vec{\nabla}\Phi_h = -q_h\rho_h(r) \quad (2.56)$$

Bu denklemler yüzey polarizasyonundan kaynaklanan dielektrik uyumsuzluğu da içerir. Burada ρ_e ve ρ_h ise sırasıyla elektron ve deşiğin yoğunluklarıdır ve

$$\rho_e(r) = \frac{1}{4\pi}|R_e(r)|^2 \quad (2.57)$$

$$\rho_h(r) = \frac{1}{4\pi}|R_h(r)|^2 \quad (2.58)$$

şeklinde ifade edilir. Bu adımlar izlenerek yarıiletken kuantum nokta yapının enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonları elde edilebilir. Bu tez çalışmasında, denklem çözümleri matris köşegenleştirme yöntemi yardımıyla, C++ programlama dilinde ALGLIB kütüphanesi kullanılarak gerekli yakınsama sağlanıncaya kadar öz-uyumlu şekilde yapıldı. Hesaplamalarda adım genişliği 0.001 olarak seçildi.

Yarıiletken kuantum nokta yapının enerji seviyeleri ve dalga fonksiyonlarıyla zamana bağlı pertürbasyon yöntemi kullanılarak bükümlü ışıkla olan etkileşimi incelenebilir. Bunun için dış bir elektromanyetik alan tarafından pertürbe edilmiş bir sistemin Hamiltonyen ifadesi

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left[\mathbf{p} + \frac{\mathbf{A}(r, \phi, t)}{c}\right]^2 + V(r) + \Phi(r, t) \quad (2.59)$$

şeklinde verilir. Burada $V(r)$ radyal potansiyel, $\Phi(r, t)$ skaler potansiyel, $\mathbf{A}(r, \phi, t)$ ise daha önce Denklem 2.25'te belirtilen vektör potansiyelidir. Vektör potansiyelindeki polarizasyon vektörü

$$\vec{e} = \begin{pmatrix} \cos\gamma \\ i\sin\gamma \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.60)$$

olarak seçilmiştir ve γ eliptiklik derecesini temsil etmektedir.

Hesaplamalarda $\Phi = 0$ seçildi ve \mathbf{A}^2 ifadesi ihmal edildi. Hesaplamalar, atomik birim sistemi kullanılarak yapıldığı için $\hbar = m_e = e = 1$ olarak alındı ve bu yüzden Hamiltonyen ifadesinde görülmemektedir. Tedirgenmemiş Hamiltonyan ifadesi

$$\hat{H}^0 = \mathbf{p}^2 + V(r) \quad (2.61)$$

şeklinde verilir ve yukarıda gösterilen tek parçacık Schrödinger Denklemi'nin çözümüne sahiptir. Elektromanyetik dalga ve sistem arasındaki etkileşim terimi,

$$\hat{H}' = \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \quad (2.62)$$

şeklinde ve $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}$ çoğu kez sıfır olur. Geçiş matris elemanı,

$$\mathbf{M} = |\langle \Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) | \hat{H}' | \Psi_{n'l'm'}(r, \theta, \phi) \rangle|^2 \quad (2.63)$$

olarak ifade edilir. $F_p^{m_a}(r) = F_{p,m_a}(r)e^{-im_a\phi}$ olarak yazıldığında, matris elemanı daha açık şekilde

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= \left[\int_0^\pi \sin\theta P_{m,\ell}(\theta) P_{m',\ell'}(\theta) d\theta \int_0^{2\pi} e^{-i(m-m'+m_a)\phi} d\phi \int_0^\infty r^2 F_{p,m_a}(r) R_{n,\ell}(r) R_{n',\ell'}(r) dr \right]^2 \\ & \quad (2.64) \end{aligned}$$

olarak yazılır. Bu ifadedeki açılar üzerinden alınan integraller delta fonksiyonlarını verir. Delta fonksiyonları kullanılarak denklem 2.64 daha basit haliyle

$$M = [\delta_{m-m'+m_a} \delta_{\ell-\ell'+1} \mathbf{I}(n, \ell, n', \ell', m_a, p, r)]^2 \quad (2.65)$$

şeklinde yazılır. Burada

$$\mathbf{I}(n, \ell, n', \ell', m_a, p, r) = \int_0^\infty r^2 F_{p, m_a}(r) R_{n\ell}(r) R_{n'\ell'}(r) dr \quad (2.66)$$

şeklinde verilir.

Matris elemanı bazı özel durumların geçiş olasılığını verir. Matris elemanı ifadesinden de açıkça görüldüğü gibi geçişler ilk ve son durumların kuantum sayıları arasındaki fark, Laguerre-Gaussian ışınının topolojik yüküne eşit ise gerçekleşir. Radyal integral, sadece farklı sistemlerdeki geçiş şiddetini verir.

3. SONUÇLAR

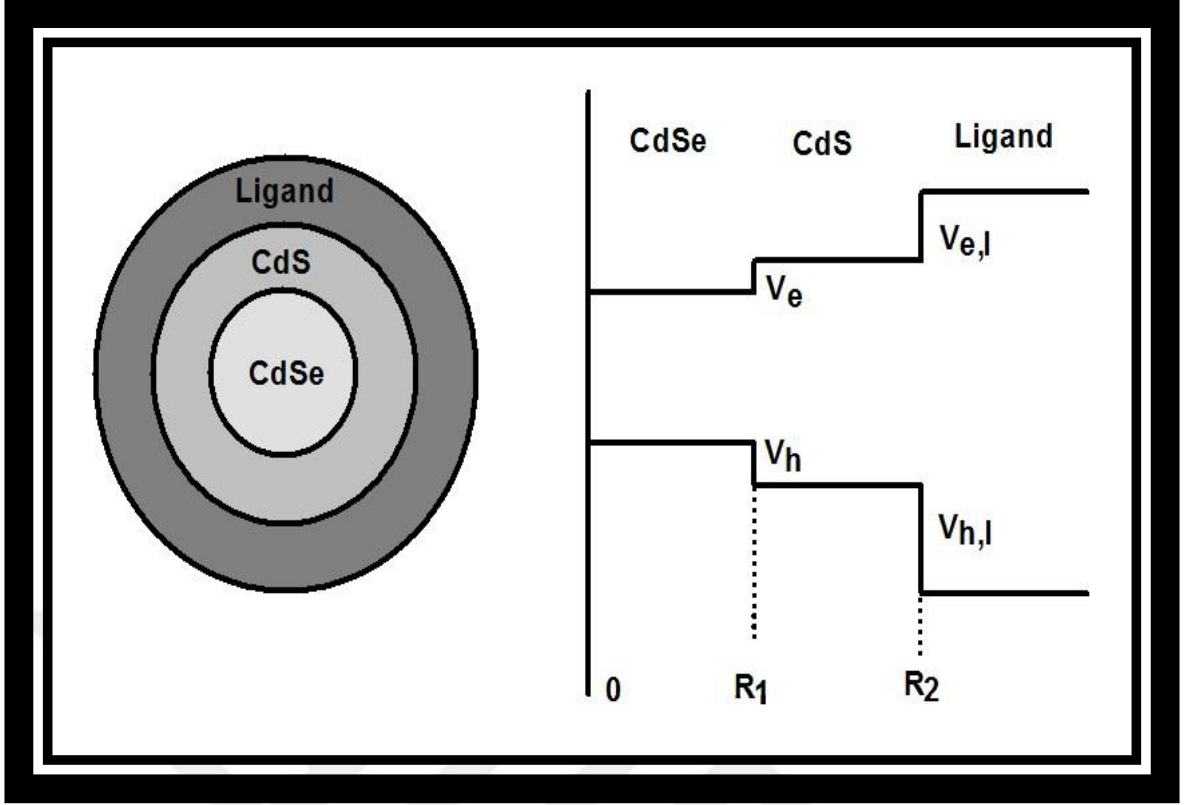
3.1. CdSe/CdS Kuantum Yapısında Bükümlü Işığın Elektron Geçişine Etkisi

Yarıiletken yapılar elektronik endüstrisinde önemli bir konuma sahiptir. Bununla birlikte yarıiletken kuantum nokta yapılar, nanometrik ölçekte boyutlarının getirmiş olduğu yüksek kuantum verimliliğiyle uygulamalar açısından büyük avantajlar sağlamaktadır. Bu yapıların optik ve elektronik özellikleri her ne kadar kullanılan malzemenin cinsi, büyüklüğü ve geometrisi değiştirilerek kontrol edilebilse de bu şekilde bir kontrol sadece üretim aşamasında ve bir defaya mahsus yapılabilmektedir. Elektrik ve manyetik alanla kontrol noktasında ise bu alanların mikrometre mertebesi altında lokalize olamaması sorunuyla karşılaşmaktadır. Fakat bükümlü ışıkların, teorik olarak mikrometre mertebesinde altında odaklanabilir olmaları ve değiştirilebilir yörüngesel açısal momentum ve radyal boğum parametrelerinden dolayı yarıiletken kuantum nokta yapılarda elektronik ve optik özelliklerin kontrolü noktasında uygulama açısından etkin ve pratik rol oynayabileceği düşünülmektedir.

CdSe/CdS yapısında CdSe çekirdek, daha büyük band aralığına sahip CdS kabukla çevrilerek yarıiletken kuantum nokta yapı elde edilmektedir. Bu çalışmamızda, Laguerre-Gaussian tipi uzaysal profile sahip ve ışın sırtı parametresi nanometre mertebesinde seçilmiş bükümlü bir ışığın, yine nanometre mertebesinde boyutlara sahip CdSe/CdS kuantum nokta heteroyapısında hapsedilmiş olan elektron geçişleri üzerindeki etkisi, CdSe çekirdek malzemesinin kalınlığının değişimine bağlı olarak incelenmiştir.

3.1.1. Kullanılan Yapı Profili

CdSe/CdS tip-1 (Şahin 2008) kuantum heteroyapısı ve yapıya ait potansiyel profili Şekil 3.1'de gösterilmiştir. Bu yapıda, elektron ve deşik CdSe çekirdek malzemesinde hapsolmakta ve ekzitonik bir davranış sergilemektedir. Bu yönüyle yapı, tip-1 kuantum nokta heteroyapı olarak bilinmektedir.



Şekil 3.1. CdSe/CdS yapısı ve potansiyel profilinin şematik gösterimi

Yapının sınırlandırma potansiyeli profili,

$$V_e = \begin{cases} 0, & 0 \leq r < R_1 \\ V_e, & R_1 \leq r < R_2 \\ V_{e,l} & r \geq R_2 \end{cases} \quad V_h = \begin{cases} 0, & 0 \leq r < R_1 \\ V_h, & R_1 \leq r < R_2 \\ V_{h,l} & r \geq R_2 \end{cases}$$

şeklinde verilir.

3.1.2. Hesaplama Parametreleri

Bu çalışmamızda kullanılan hesaplama parametreleri çizelge 3.1'de verilmiştir. Tüm hesaplamalarda atomik birimler ($m_0 = \hbar = e = 1$) kullanılmıştır. Hesaplamalarda ışın sırtı parametresi, $w_0 = 12.5 \text{ nm}$ olarak alınmıştır. Etkin Bohr yarıçapı, $a_0 = 48.75 \text{ \AA}$ ve etkin Raydberg enerjisi, $Ry = 15.9 \text{ meV}$ olarak hesaplanmıştır.

Çizelge 3.1. Hesaplamalarda kullanılan malzeme parametreleri

	CdSe	CdS	GaAs	AlGaAs
m* (elektron)^{1,2}	0.13 m ₀	0.21 m ₀	0.665	0.665+0.835*0.4
m* (deşik)^{1,2}	0.45 m ₀	0.68 m ₀	0.45	0.45+0.31*0.4
κ^{1,3}	9.29	8.73	13.18	13.18-3.12*0.4
E_{gap}^{1,4}	1.76 eV	2.5 eV	1.519	1.76
V_e^{5,4}	0.32 eV		0.87*0.4 eV	
V_h^{5,4}	0.42 eV		0.57*0.4 eV	
V_{e,f}⁵	2 eV		2 eV	
V_{h,f}⁵	2.5 eV		2.5 eV	

¹Wei ve ark. 2000

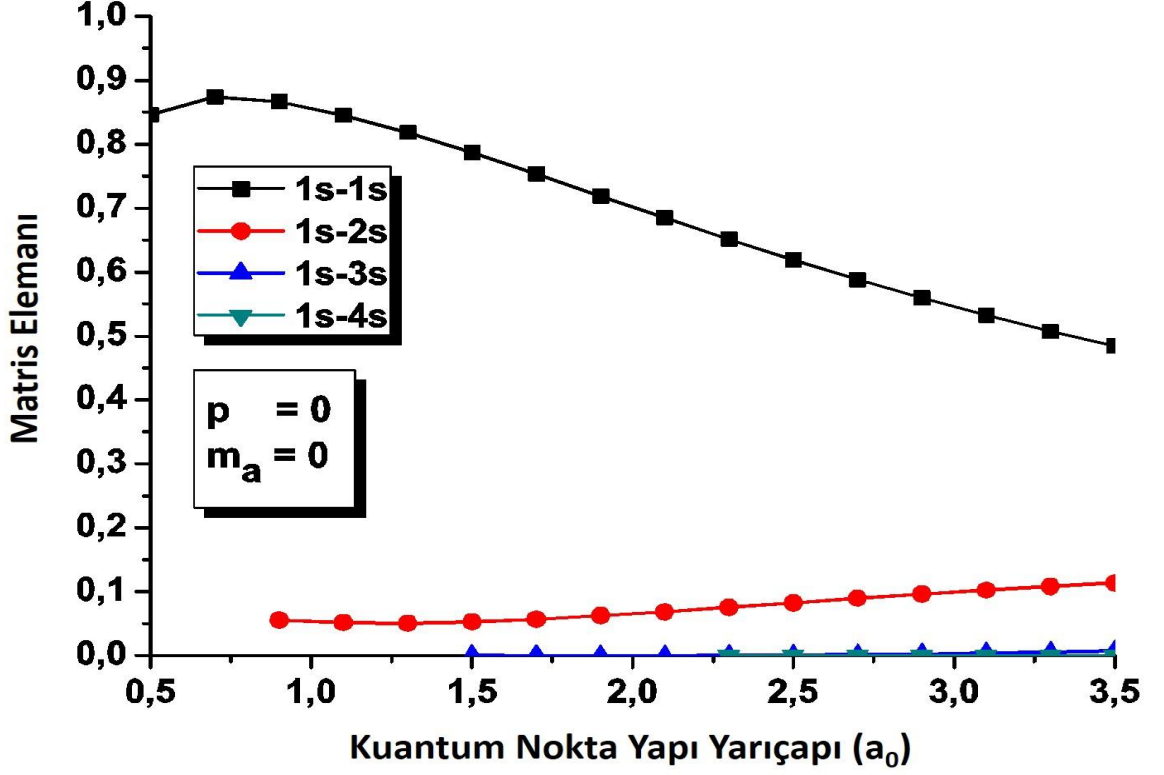
²Miller ve ark. 1984

³Kavruk ve ark. 2013

⁴Yi ve ark. 2009

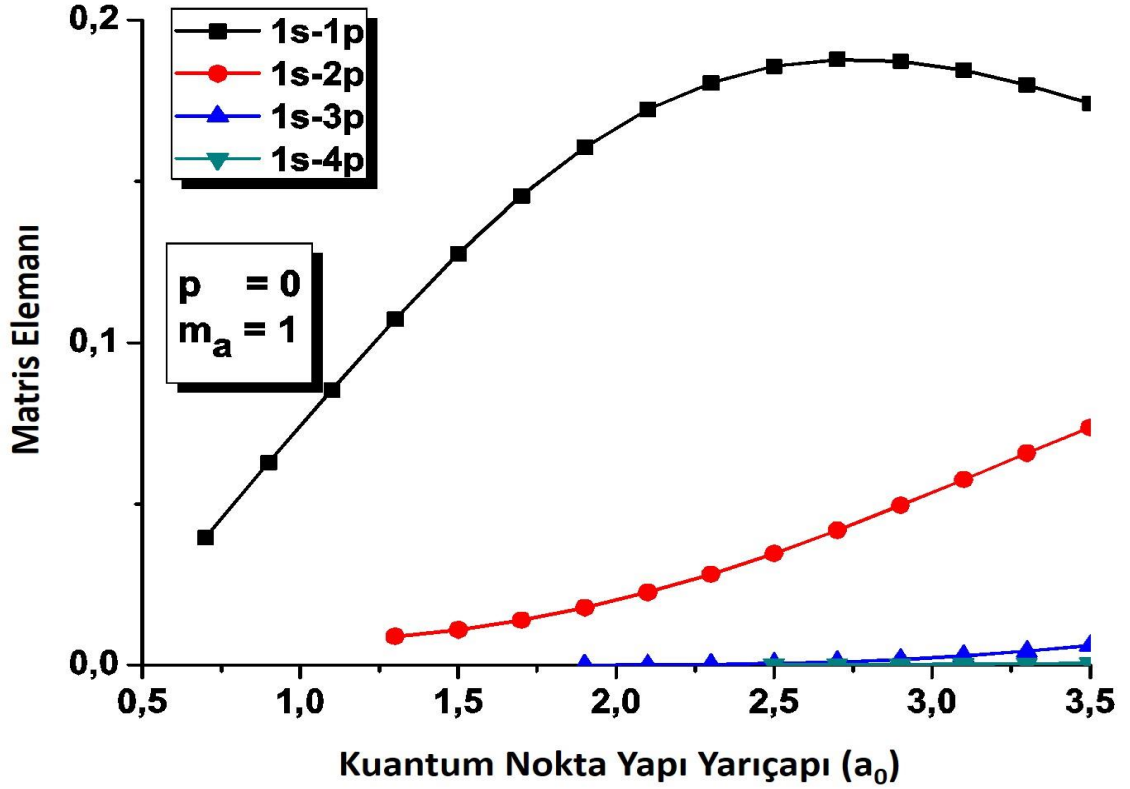
⁵Şahin ve Koç 2013

Kuantum nokta heteroyapıların lineer polarize ışık ile etkileşiminde, yapıda bulunan elektronlar $\Delta L = 0$ kuralına göre geçiş yapmaktadır. Bunun yanında, son zamanlarda üzerinde çalışılan açısall yörengesel momentum taşıyan bükümlü bir ışık gönderildiğinde elektronların, ışığın taşıdığı açısall yörengesel momentumdan dolayı farklı kurallarına göre geçiş yaptığı gözlemlenmiştir. Bükümlü ışık ile yarıiletken malzemeler etkileştiğinde, elektronlar artık $\Delta L = 0$ kuralına göre değil $\Delta m = m_a$ kuralına göre geçiş yapmaktadır. Örnek olarak, ışığın açısall yörengesel momentumu $m_a = 2$ ise elektronlar s seviyesinden d, f, ... seviyelerinden birine geçiş yapacaktır. s seviyesinde bir elektronun manyetik kuantum sayısı $m = 0$ olduğu için $\Delta m = 2$ kuralının sağlanabilmesi için elektron $m = 2$ manyetik kuantum sayısına sahip orbitallerden birine izinli geçiş yapabilecektir.



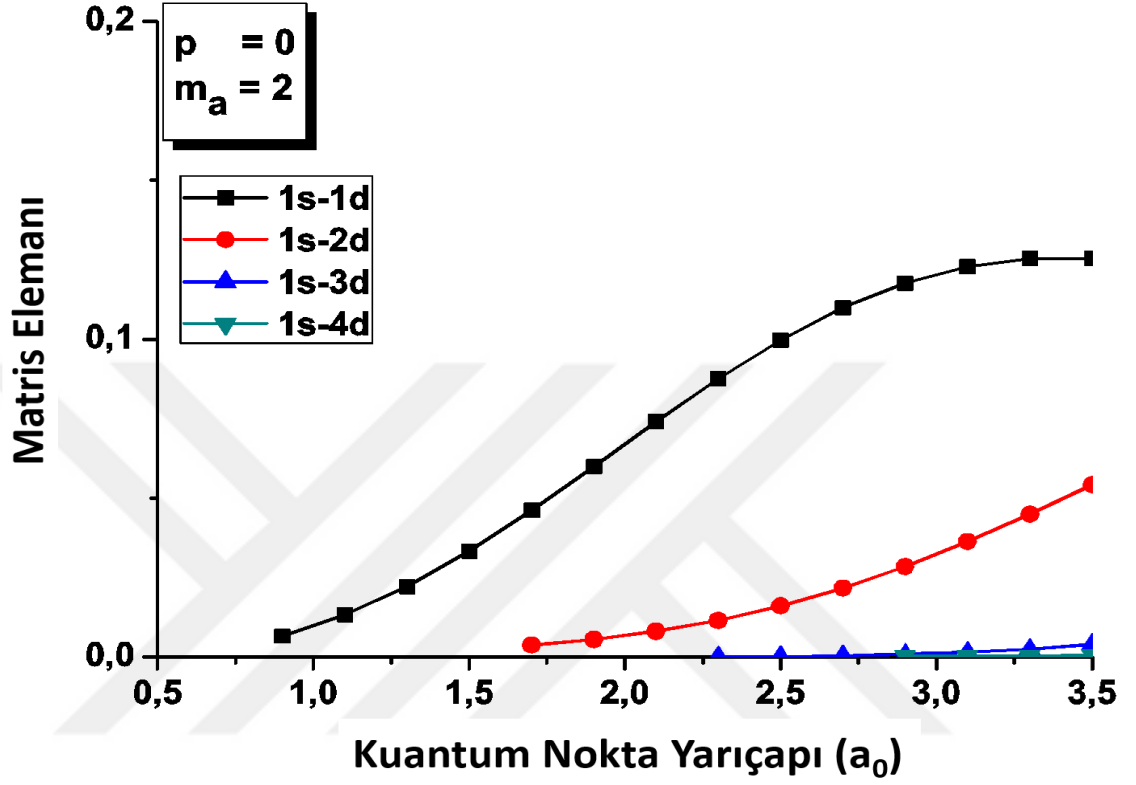
Şekil 3.2. $p = 0$ ve $m_a = 0$ durumu için etkileşim teriminin CdSe/CdS kuantum nokta heteroyapısının çekirdek yarıçapına göre değişim grafiği

Şekil 3.2’de Laguerre-Gaussian tipi bir bükümlü ışık CdSe/CdS yarıiletken kuantum nokta yapısı üzerine gönderilmiştir. Işığın topolojik yükü yani taşıdığı yörüngesel açısal momentumu, $m_a = 0$, olduğu için lineer polarize ışık etkileşimi ile aynı sonuçlar elde edilmiştir. $\Delta m = m_a$ kuralına göre elektron s seviyesinden yine s seviyesine geçiş yapabilecektir ve 1s-1s geçiş olasılığı diğer geçiş olasılıklarına göre daha yüksek olmaktadır. Bükümlü ışığın açısal momentum ve radyal boğum parametrelerinin sıfır olduğu durumda, ışık şiddetinin uzaysal dağılımı lineer polarize ışıktaki gibi merkezde en büyük değerini almaktadır. Geçiş ihtimali, CdSe/CdS yarıiletken kuantum nokta yapısının boyutu, ışın sırtı parametresinin büyüklüğü olan 12.5 nm (yaklaşık olarak $2.5 a_0$) değerine yaklaştıkça düşüş gösterecektir.



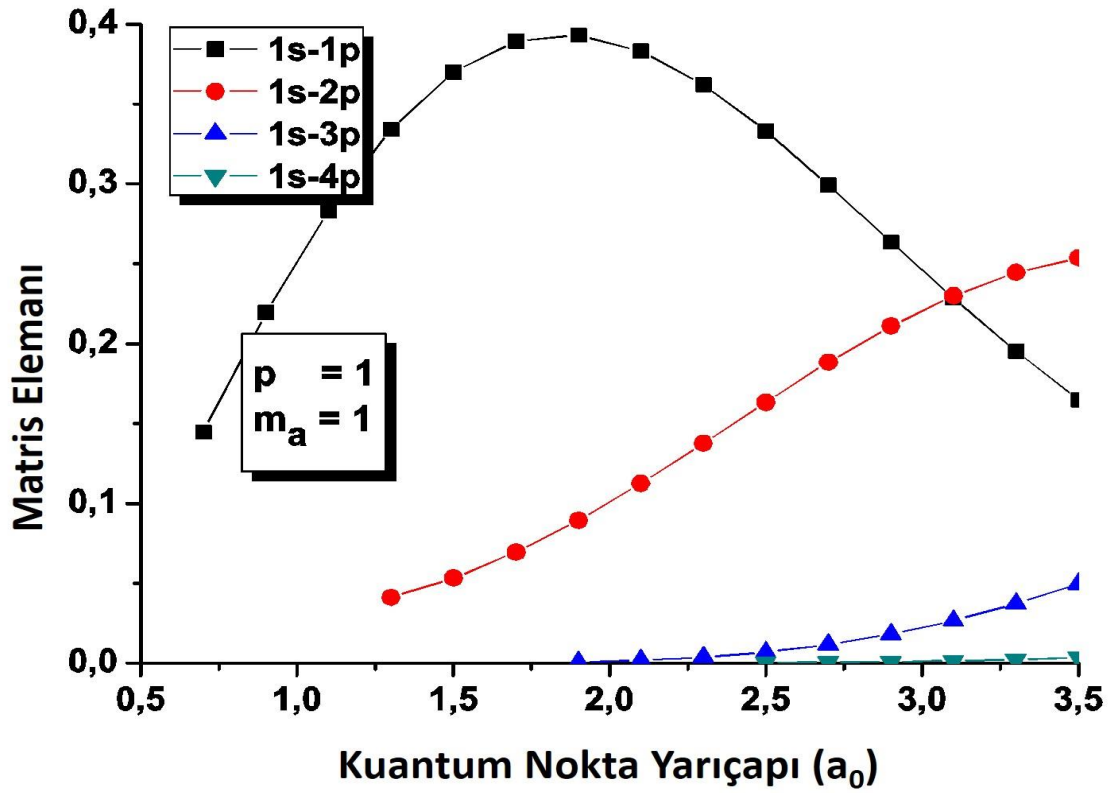
Şekil 3.3. $p = 0$ ve $m_a = 1$ durumu için etkileşim teriminin CdSe/CdS kuantum nokta heteroyapısının çekirdek yarıçapına göre değişim grafiği

Işığa $m_a = 1$ yörüngesel açısai momentumu kazandırıldığında, Şekil 3.3'de görüldüğü gibi geçiş kuralları değişmekte ve elektronlar artık $\Delta m = 1$ (s-p, s-d, ... geçişi) kuralına göre geçiş yapmaktadır. Işık, kendi yörüngesel açısai momentumunu yarıiletken kuantum nokta heteroyapıda bulunan elektrona transfer ederek elektrona açısai momentum kazandırmakta ve elektronun p seviyelerine uyarılmasına sebep olmaktadır. Bu çalışmada, elektronun daha yüksek orbitallere geçiş ihtimalleri hesaplanmamıştır. Şekilde dikkat çeken diğer bir nokta ise 1s-1p geçiş olasılığı çekirdek yarıçapı $2.75 a_0$ değerinden sonra azalmaya başlarken 1s-2p geçiş olasılığı artış göstermektedir. $m_a = 1$ değeri için ışığın uzaysal dağılım profili incelendiğinde, merkezde şiddetin sıfır ve ışın sırtı değerine daha yakın noktalarda ise yüksek bir şiddete sahip olduğu görülmektedir (Bakınız Ek-1). Işığın şiddeti $12.5 nm$ civarında daha yüksek olduğu için 1s-1p geçiş ihtimali $2.5 a_0$ değerine doğru yükselmekte ve sonra tekrar düşüşe geçmektedir. 1s-2p ihtimalinin artmaya devam etmesi ise 2p elektronlarının daha yüksek enerjiye sahip oldukları için CdSe/CdS yapısının dışına doğru lokalize olmasıyla açıklanabilir.



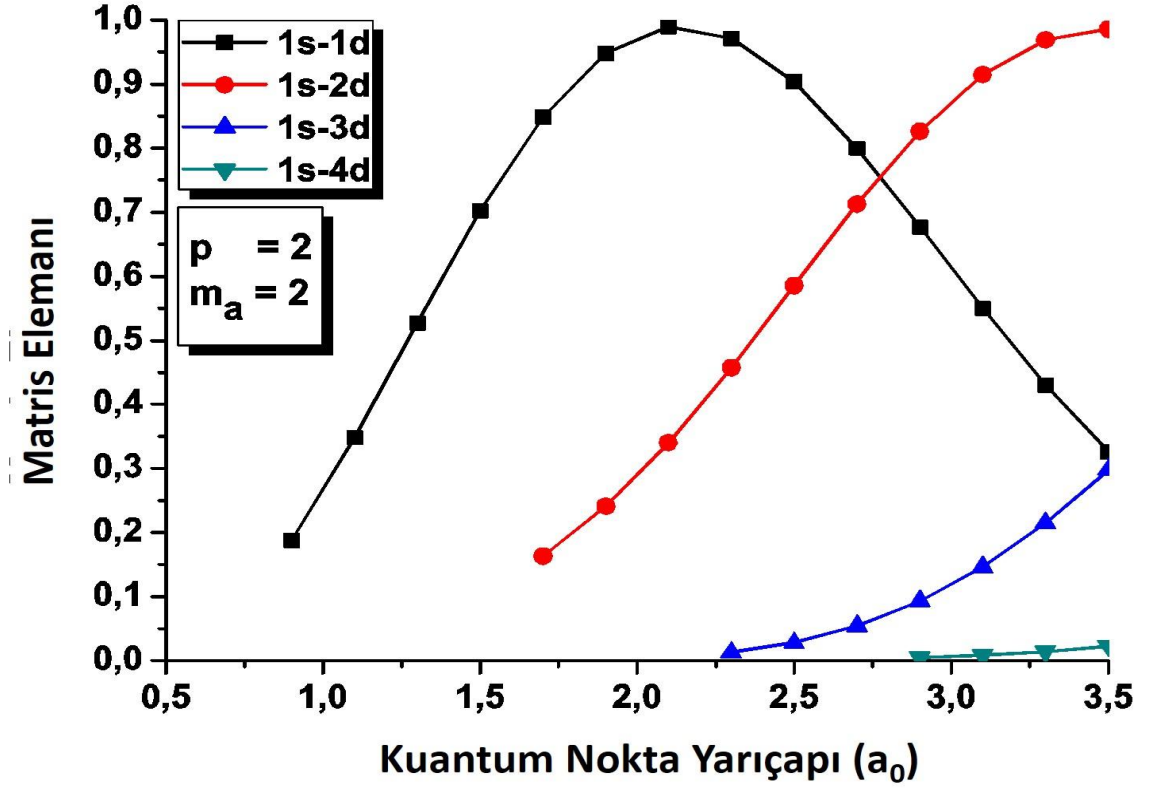
Şekil 3.4. $p = 0$ ve $m_a = 2$ durumu için etkileşim teriminin CdSe/CdS kuantum nokta heteroyapısının çekirdek yarıçapına göre değişim grafiği

Bükümlü ışığa $m_a = 2$ yörüngesel açısal momentumu kazandırıldığında ise önceki durumla benzer davranış gözlemlenmiştir. Şekil 3.4'te görüldüğü gibi, $\Delta m = 2$ kuralına göre geçiş yapmaktadır ve $m_a = 1$ durumuna göre geçiş olasılıkları daha büyük çekirdek yarıçaplarında daha yüksek olmaktadır. Bu durum da yine d orbitali elektronlarının yüksek enerjili olmasından dolayı CdSe/CdS yapısının dışına doğru lokalizasyona sahip olmasıyla açıklanabilir.



Şekil 3.5. $p = 1$ ve $m_a = 1$ durumu için etkileşim teriminin CdSe/CdS kuantum nokta heteroyapısının çekirdek yarıçapına göre değişim grafiği

Bükümlü ışığın bir diğer parametresi olan radyal boğum sayısı, p , arttırıldığında geçiş olasılıkları daha küçük çekirdek yarıçaplarında maksimum değerine ulaşmaktadır. Şekil 3.5'te görüldüğü gibi 1s-1p geçiş olasılığı çekirdek yarıçapı yaklaşık olarak 1.80 a_0 değerinde maksimuma ulaşmakta ve sonra artan çekirdek yarıçapı ile azalmaya başlamaktadır. Radyal boğum sayısı, $p = 1$ olduğu durumda ışığın uzaysal dağılımı 2 halka şeklinde olmaktadır. Bu sebeple elektron geçiş ihtimalleri daha farklı CdSe çekirdek yarıçaplarında en yüksek değerlerini almaktadır. Şekilde dikkat çeken diğer bir noktaysa 1s-1p ile 1s- 2p geçiş olasılıkları çekirdek yarıçapı yaklaşık olarak 3.1 a_0 değerinde iken neredeyse eşit büyüklüktedir. Sadece ışığın frekansında küçük oynamalar yapılarak ya da çok düşük oranda basınç, sıcaklık ve elektrik alan uygulanarak kuantum nokta yapıda herhangi bir değişiklik yapmadan elektronların 2 farklı seviyeye geçiş yapması olası görülmektedir. Bu sonuç, lineer polarize olmuş ışıklar kullanılarak yapılan etkileşimlerde karşılaşılan bir durum değildir.



Şekil 3.6. $p = 2$ ve $m_a = 2$ durumu için etkileşim teriminin CdSe/CdS kuantum nokta heteroyapısının çekirdek yarıçapına göre değişim grafiği

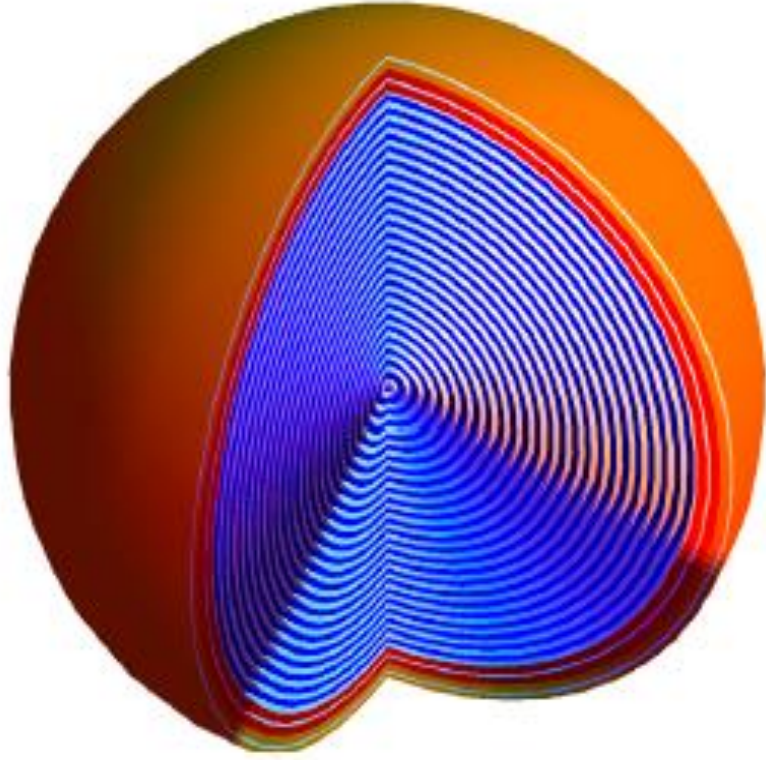
Bükümlü ışığın radyal boğum sayısı $p = 2$ yapıldığında ise şekil 3.6'da görüldüğü üzere, geçiş olasılıklarındaki kesişim noktaları kuantum nokta yapının çekirdek yarıçapı arttırıldıkça artmaktadır. Işığın uzaysal profili incelendiğinde, iç içe geçmiş üç halka şeklinde ışık şiddeti dağılımı görülmektedir. Şekilde de görüldüğü gibi çekirdek yarıçapı yaklaşık olarak $2.80 a_0$ değerinde iken 1s-1d geçiş olasılığı ile 1s-2d geçiş olasılığı ve çekirdek yarıçapı yaklaşık olarak $3.50 a_0$ iken ise 1s-1d geçiş olasılığı ile 1s-3d geçiş olasılığı aynı olmaktadır.

Sonuç olarak, yarıiletken CdSe/CdS kuantum nokta heteroyapısında ışığın açısız momentum ve radyal boğum sayısı parametrelerinin değiştirilmesiyle çekirdeğin yarıçapına bağlı olarak farklı elektron geçiş olasılıkları elde edilebilmektedir. Laguerre-Gaussian tipi bir bükümlü ışıkla bu yapının elektronik ve optik özelliklerinin kontrolü mümkün görülmektedir.

3.2. SiO₂/GaAs/AlGaAs Bükümlü Işık Tarafından İndüklenen Akım

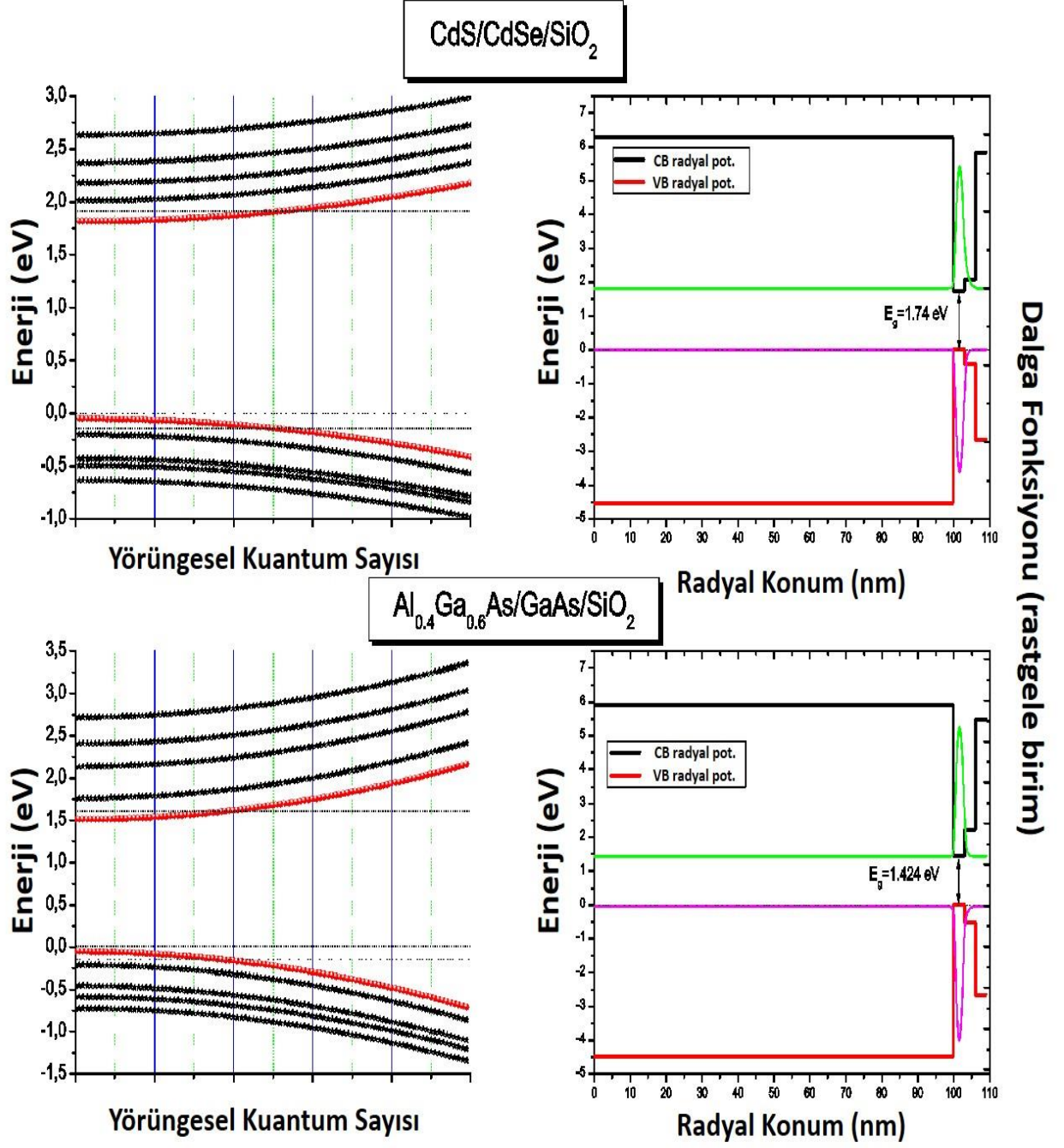
Bükümlü ışıkların şu anda deneysel olarak mikrometre mertebesinin altında odaklanamaması, nanoyapılarla etkileşimde istenilen neticenin elde edilememesine sebep olmaktadır. Literatürde bu sorunu aşmak için ışığın odak merkezini kaydırarak yapılan çalışmalar mevcuttur. Fakat bilindiği üzere bükümlü ışık odak çapından daha küçük parçacıklarla etkileştiğinde, etkileştiği parçacık bir eksen etrafında dönmeye başlamaktadır. Bu nedenle hesaplama parametreleri artmakta ve hesaplama zamanı oldukça yükselmektedir. Bu çalışmada, bükümlü ışığın etkileştiği kuantum nokta heteroyapı mikrometre mertebesinde tasarlanarak bükümlü ışığın merkeziyle kuantum nokta heteroyapının merkezi karşılaştırılarak bu sorunu aşma yoluna gidilmiştir. Bunu yaparken 100 nm yarıçapa sahip küresel ve yalıtkan SiO₂ 6 nm kalınlığa sahip yarıiletken GaAs/AlGaAs ile kaplanmıştır. Yapıda, elektron ve deşikler 3 nm kalınlığa sahip olan GaAs malzemesinde hapsolmaktadır. Bu tür bir kuantum nokta heteroyapı, hem mikrometre mertebesinde yarıçapıyla bükümlü ışıkla daha yüksek oranda etkileşime sahip olmakta hem de elektron ve deşiğin hapsoldüğü malzeme kalınlığı çok küçük olduğundan kuantum etkileri korunmaktadır. Hesaplamalar açısından da nanometre boyutundaki bir kuantum nokta heteroyapı hesabıyla neredeyse aynı parametrelere sahip olduğundan büyük kolaylık sağlamaktadır.

Çalışmada, kuantum noktasının elektronik yapısını elde etmek için Sonlu Farklar Yöntemi, Etkin Kütle Yaklaşımı ve Hartree Yaklaşımı kullanılarak Schrödinger Denklemi çözülmüştür. Dielektrik sabiti, etkin kütle ve enerji bant aralığı gibi parametreler deneysel ve ab initio hesaplamaları sonuçlarından alınmıştır. Yalıtkan SiO₂ üzerine GaAs/AlGaAs yarıiletken malzeme kaplanarak elde edilen yapının şematik diyagramı şekil 3.7'de verilmiştir. Çalışma boyunca iletim ve değerlik bandı için sadece yörüngesel kuantum sayısı, $\ell \leq 40$ ve radyal kuantum sayısı, $n_r = 1$ durumları göz önünde bulundurulmuştur.



Şekil 3.7. SiO₂ (mavi) üstüne GaAs/AlGaAs (kırmızı/turuncu) kuantum noktasının şematik gösterimi

Hesaplama sonuçlarında, şekil 3.8’de de görüldüğü gibi $\ell \leq 40$ ve $n_r = 1$ (kırmızı bant) durumları için elektron ve deşiğin enerji seviyelerinde yörüngesel kuantum sayısına bağılı değişim gözlemlenirken radyal dalga fonksiyonlarının, yörüngesel kuantum sayısından bağımsız olarak deşimmediği gözlenmiştir. Bunun altında yatan sebep, elektron ve deşiğin kuantum noktasının merkezinden çok uzakta küçük bir alanda hapsolması ve açısali bariyer teriminin konumsal deşiminden etkilenmemesi gösterilebilir. Açısali bariyer terimi sadece radyal potansiyel duvarını eđmekte ve duvarı yukarı doğru itmektir.

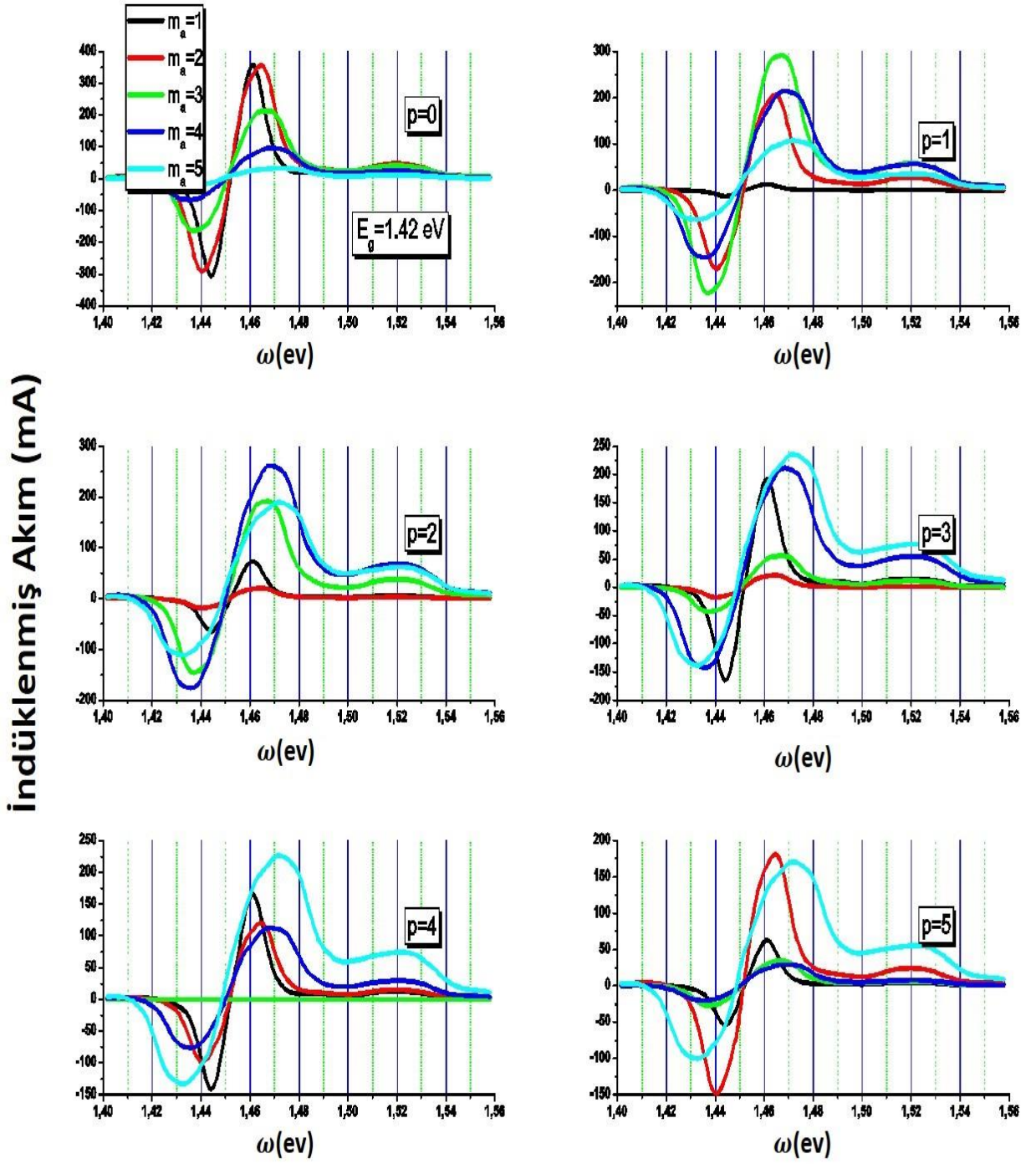


Şekil 3.8. GaAs kuantum noktasının yörüngesel kuantum sayısına bağlı enerji değişimi (sol), iletim ve değerlik bandı potansiyel profilleri ve dalga fonksiyonları (sağ)

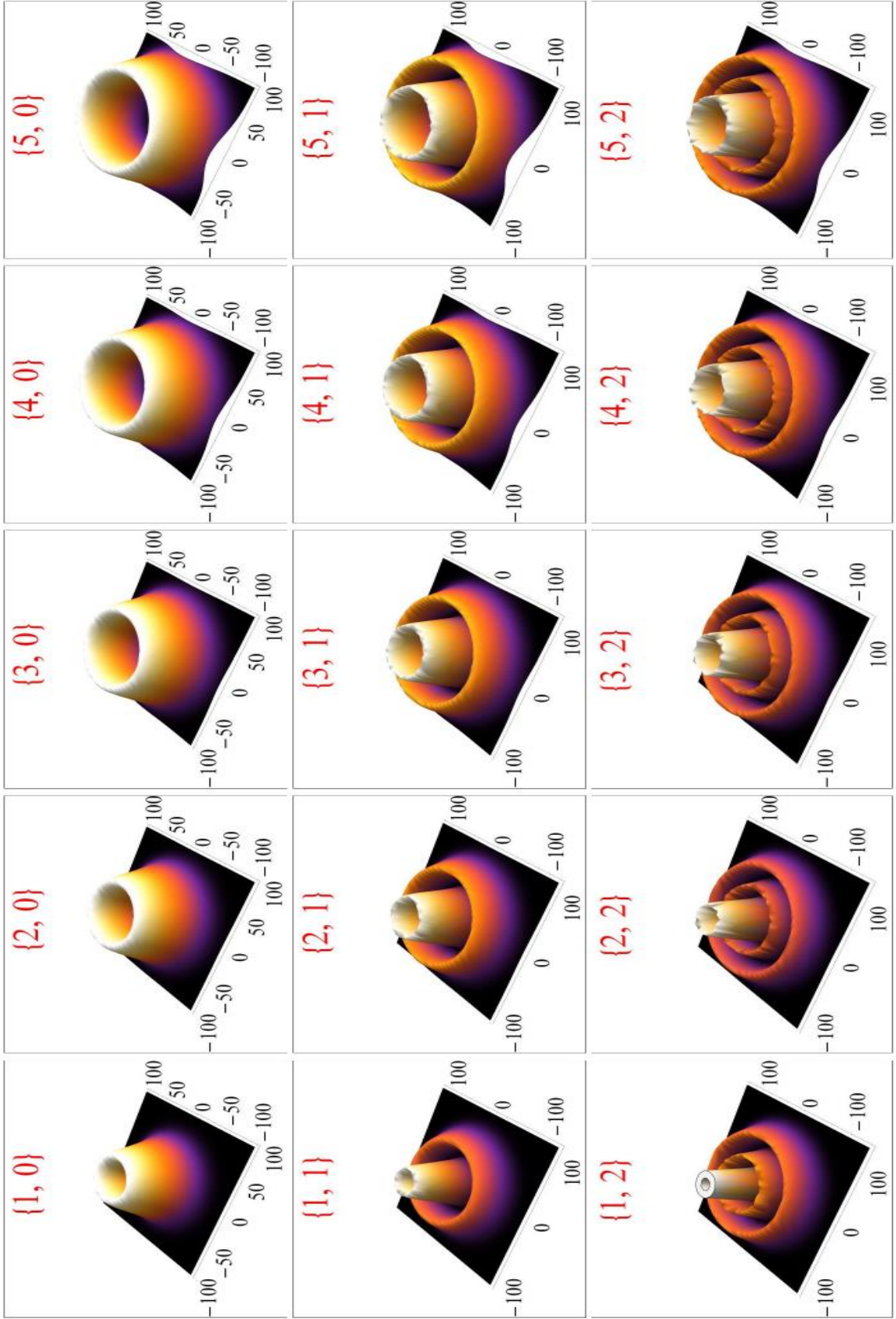
Nanoyapılara ışığın SAM transferi üzerinde çalışılmış olmasına rağmen yarıiletkenle kaplanmış yalıtkan kuantum noktasına SAM ya da YAM transferinin sebep olduğu iletim elektronlarının toplam akıma katkısı ne deneysel ne de teorik olarak incelenmemiştir. Işığın yörüngesel açısal momentumunun aktarımındaki en büyük problem, ışığın ışın sırtı ile nanoyapının büyüklüğü arasındaki farktır. Bu sebeple bükümlü ışık nanoyapıyı istenilen şekilde etkileyememektedir. Bu çalışmada kullanılan kuantum noktasında ise ışık ve madde arasındaki bu uyumsuzluğu aşmak için elektron ve deşikler yapının merkezinden 100 nm uzakta ince bir yarıiletken tabakada hapsedilmiştir. Bu yüzden 200 nm ışın sırtına sahip YAM taşıyan bir foton bu küresel yapıyla güçlü şekilde etkileşebilecektir. Bu çalışmada dikkat edilmesi gereken nokta, kullanılan ışığın YAM dışında aynı zamanda SAM taşıyor olduğudur. Eğer yapının ölçeği ışığın ışın sırtıyla karşılaştırılabilecek seviyede değilse sisteme sadece SAM aktarılacaktır.

Düzlemsel olarak homojen olmayan bükümlü ışığın vektör potansiyeli, bu çalışmada $8.7 a.b. = E_h^*/ea_0^* = 6.56 \times 10^6 V/m$ olarak alınmıştır. Burada $a.b.$ atomik birimdir. Elektron ve deşğin etkin kütleleri hapsedildikleri yarıiletken olan GaAs için sırasıyla $m_e^* = 0.063 m_0$ ve $m_h^* = 0.51 m_0$ şeklindedir. Akımın atomik birimi ise $eE_h^*/\hbar = 1.3 \mu A$ 'dir.

Şekil 3.9, foto-indüklenmiş akımın ışığın frekans ve diğer parametrelerine bağlı değişimini göstermektedir. Radyal boğum $p = 0$ durumunda, akım ışığın topolojik yükü $m_a = 1$ iken maksimum değerini almakta ve topolojik yükün yükseltilmesiyle akım azalmaktadır. Frekans değeri $\omega < 1.45 eV$ iken indüklenmiş akım negatif olmaktadır. Yani akım saat yönündedir. Frekans değeri $\omega > 1.45 eV$ iken akım saat yönünün tersinedir. Bu durum, radyal boğum ve topolojik yükün değişiminden etkilenmemektedir. İndüklenmiş akımın frekansa bağlı sinüsel davranışı şöyle açıklanabilir; uyarılmış elektronlar $\omega < 1.45 eV$ durumunda yoğun olarak negatif manyetik kuantum sayısına sahip alt enerji seviyelerini doldurmaktadır. Bu frekans değerinin altında, elektron geçişleri düşük açısal kuantum sayıları arasında gerçekleşmektedir. $\omega = 1.45 eV$ durumunda, pozitif ve negatif manyetik kuantum sayılarını dolduran elektronlar eşit sayıdadır ve sistemin net akımı sıfır olmaktadır. $\omega > 1.45 eV$ durumunda ise elektronlar iletim bandında yoğun olarak pozitif manyetik kuantum durumlarını doldurmaktadır ve akım yönü pozitif olmaktadır. Yüksek frekans değerlerinde, geçişler net bir akım indüklemek için yeterli olmamaktadır.



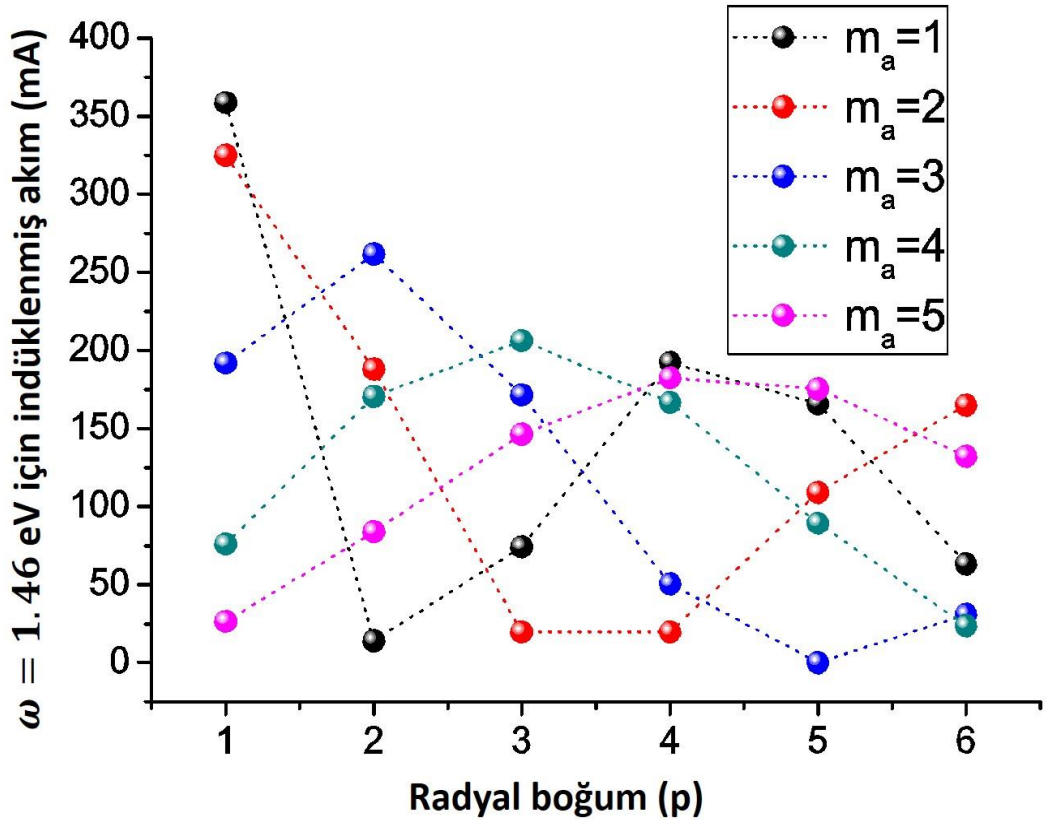
Şekil 3.9. SiO₂/GaAs/AlGaAs kuantum noktasında indüklenmiş akımın frekans, radyal boğum ve topolojik yüke bağlı değişimi



Şekil 3.10. Farklı topolojik yük ve radyal boğum parametreleri için x - y düzlemindeki Laguerre Gaussian ışın profili (Parantez içindeki değerler sırasıyla topolojik yük m_a ve radyal boğumu p temsil etmektedir)

Maksimum foto-indüklenmiş akım değeri şekil 3.9’da görüldüğü üzere, ışık parametreleri olan radyal boğum, $p = 1$ ve topolojik yük, $m_a = 3$ durumunda elde edilmiştir. Şekil 3.10’da görüldüğü gibi $p = 1$ durumunda iki şiddet piki elde edilmektedir ve bu pik noktasının konumu topolojik yük arttıkça kaymaktadır. Işığın maksimum şiddet noktası radyal boğum, $p = 0$ durumunda topolojik yük, $m_a = 1$ iken kabukla çakışırken radyal boğum, $p = 1$ durumunda ise kabukla çakışma topolojik yük, $m_a = 3$ olarak seçildiğinde gerçekleşmektedir. Işığın ışın sırtı parametresini değiştirerek bu durum değiştirilebilir.

Topolojik yükün artırılmasıyla daha yüksek frekans değerlerinde de indüklenmiş akım gözlemlenmek mümkündür. Bu durum, çoklu şiddet piklerinin farklı konumlarda olmasının sonucudur. Ayrıca aynı frekans değerinde, indüklenmiş akımın büyüklüğünün topolojik yük ve radyal boğum parametreleriyle kontrol edilebileceği şekil 3.9’da gösterilmiştir. Bir önceki bölümde, CdSe kuantum noktası için ışık parametrelerinin geçiş olasılıklarının kontrol edilmesinde kullanılabileceğini göstermiştik. Şekil 3.11, ışık parametrelerinin değiştirilmesiyle modüle edilebilecek ultra hızlı foto-indüklenmiş manyetik alan sağlayan bir cihaz geliştirmenin mümkün olduğunu göstermektedir.



Şekil 3.11. Topolojik yük m_a ve radyal boğum p tarafından modüle edilmiş indüklenmiş akım

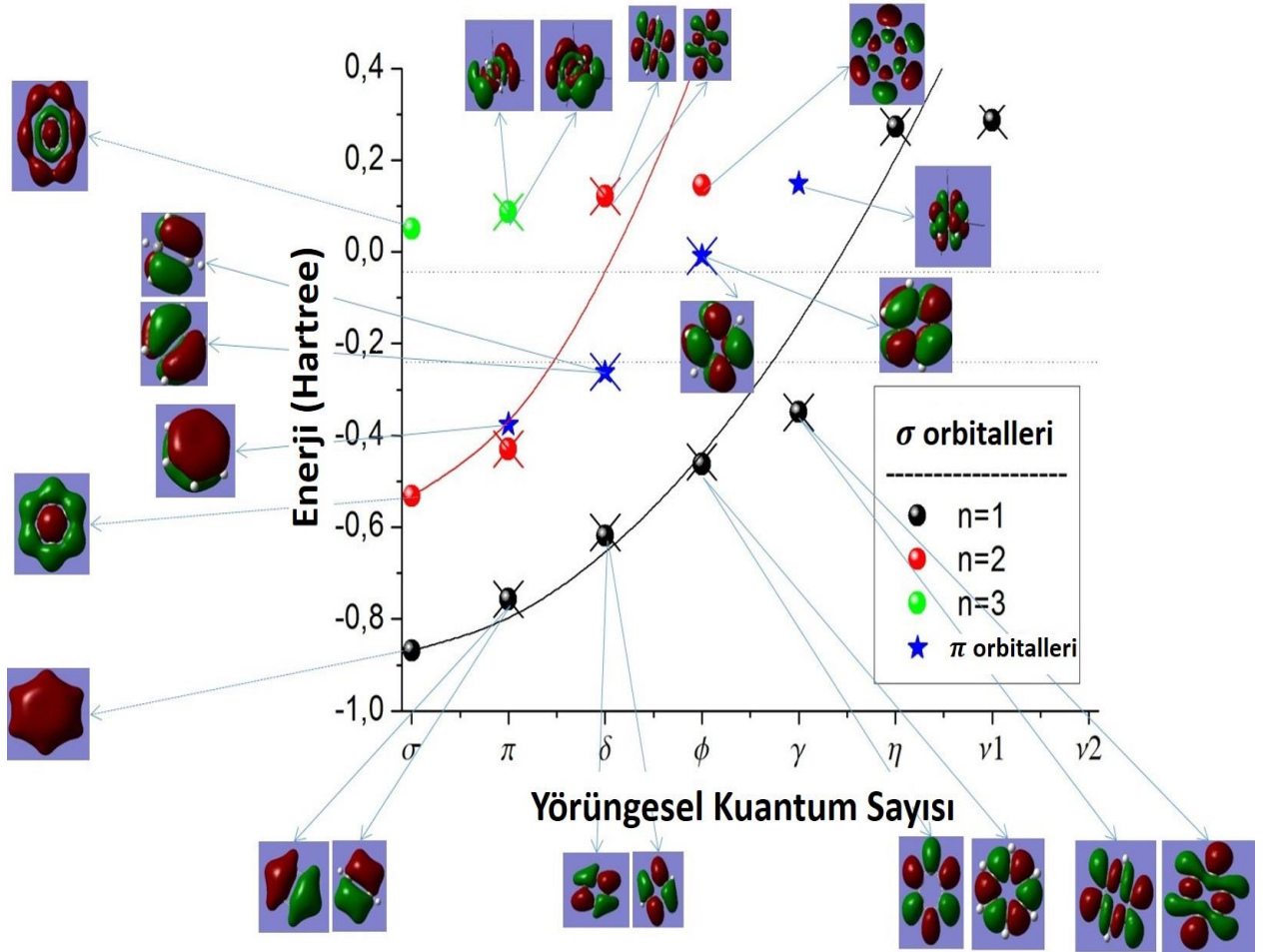
3.3. Benzene Molekülü Sonuçları

3.3.1 Benzene molekülünün açısal bant yapısı

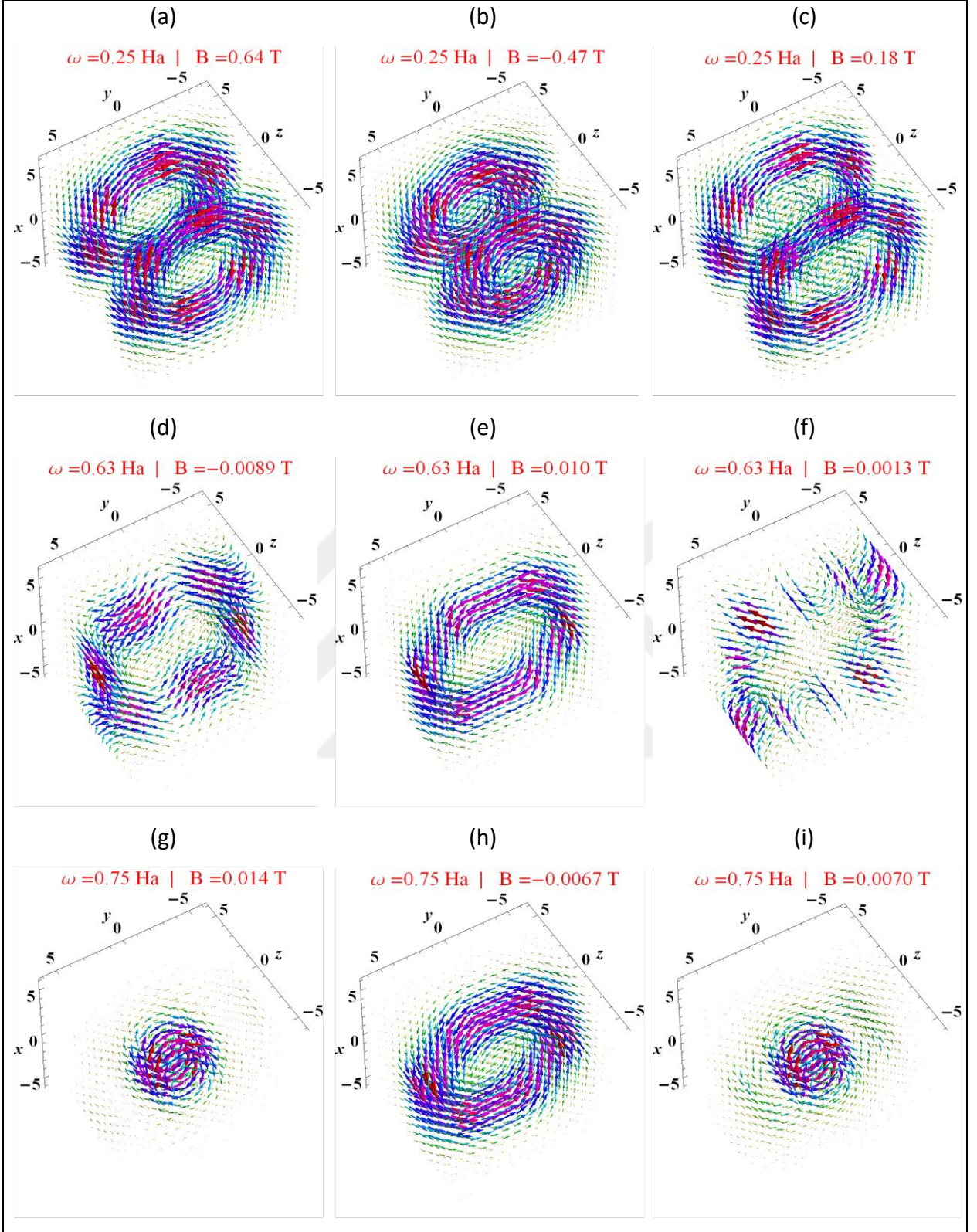
Dairesel simetriye sahip benzene molekülünde altı lokalize ve on beş delokalize elektronik seviye bulunmaktadır. HOMO-LUMO aralığı $0.25 Ha$ ve halka yapının yarıçapı $2.4 a_0$ (atomik Bohr yarıçapı) olarak verilmektedir. Benzene molekülünün yörüngesel kuantum sayısının artışıyla elektronik enerji seviyeleri parabolik (açısal bant yapısı) olarak artmaktadır ki bu durum Pavlyukh ve ark. (2009) tarafından yapılan çalışma ile de uyum göstermektedir.

Bu çalışmada benzene molekülünün elektronik yapısı, Gaussian 09 programı ile elde edilmiştir. Molekülün optimize etmek ve elektronik yapısını elde etmek için 6 – 311G temel setleri baz alınarak yoğunluk fonksiyoneli teorisi altında hibrid B3PW91 fonksiyoneli kullanılmıştır.

Şekil 3.12’de benzene molekülüne ait açısal bant yapısı verilmiştir. Şekil açısal kuantum sayılarının enerjiyle olan değişimini ve karşılık gelen moleküler orbitalleri göstermektedir. Burada $\ell = s, p, d, f, g, \dots$ açısal kuantum sayıları, $\lambda = \sigma, \pi, \delta, \phi, \gamma, \dots$ şeklinde Yunan harfleriyle temsil edilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi moleküler orbitaller çoğunlukla $x - y$ düzleminde dağılıma sahiptir. Dairesel simetriden dolayı yapıda moleküler orbital çiftleri (x, y bileşenleri aynı seviyede) oluşmuştur. Küresel simetrisinin olmamasından dolayı enerjinin z bileşeninin değeri, x ve y bileşenlerinin değerlerinden oldukça farklıdır. Örneğin, π_x ve π_y durumlarının enerji değerleri yaklaşık olarak $-0.75 Ha$ iken π_z durumunun enerji değeri yaklaşık olarak $-0.37 Ha$ ’dir. Bu açısal bant yapısı enerji seviyeleri arasındaki geçiş olasılıklarının kolaylıkla görülebilmesini sağlamaktadır.



Şekil 3.12. Benzene molekülünün elektronik yapısı (Siyah noktalar radyal kuantum sayısı, $n_r = 0$ durumunu temsil etmektedir. Nokta ve çarpı sırasıyla durumların x ve y bileşenlerini göstermektedir. Kırmızı ve yeşil noktalar sırasıyla, $n_r = 1$ ve, $n_r = 2$ durumlarına karşılık gelmektedir. Mavi yıldızlar σ orbitallerinden farklı şekillere sahip π orbitalleridir. Dairesel simetriden dolayı aynı durumun x ve y bileşenleri arasında ayrılma bulunmamaktadır)

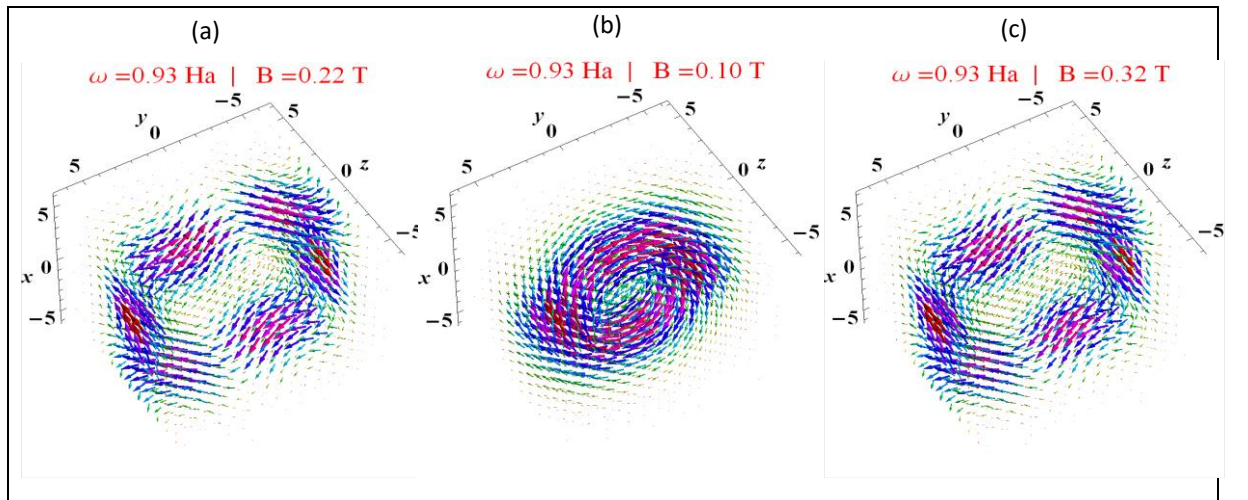


Şekil 3.13. Dairesel polarize lazer ışınının frekansına bağlı olarak Benzene molekülündeki akım yoğunluğu ve indüklenen manyetik alan değişim grafikleri (Birinci sütun boş durumlardaki uyarılmış elektronlar tarafından oluşturulmuş akım yoğunluğunu göstermektedir. İkinci sütun LUMO seviyesine geçen elektronun geçişinden sonra HOMO seviyesinde kalan diğer elektronun sebep olduğu akım yoğunluğunu temsil etmektedir. Üçüncü sütun HOMO ve LUMO seviyesinde bulunan elektronların akım yoğunluğuna olan toplam katkısını göstermektedir.)

3.3.2 Dairesel polarize ışık altında benzene molekülünde akım yoğunluğu ve indüklenmiş manyetik alan

Dairesel bir yapıdaki indüklenen akımı göstermenin geleneksel yolu, daire düzlemine dik manyetik momenti göstermektir. Manyetik momentin büyüklüğü ve yönünden dairesel akımın yönü ve büyüklüğü hakkında bilgi sahibi olmak mümkündür. Bunun yanında sistemin akım yoğunluğu, sistemdeki lokal akımların, toplam akıma katkılarının analiz edilmesine imkan sağlamaktadır. Hesaplamalarımızda, farklı frekanstaki dairesel polarize ışık ve bükümlü ışıkla etkileşen Benzene molekülündeki akım yoğunluğu elde edilmiştir. Dairesel polarize ışık için elektrik alan kuvveti $A_0 = 7.4 \times 10^{-4} a.u = 3.8 \times 10^7 V/m$ olarak kullanılmıştır. Geçiş süresi parametresi ise $\delta = 0.001 a.u$ yani $1/\delta = 24.2 fs$ olarak alınmıştır.

Şekil 3.13, dairesel polarize ışıkla etkileşen benzene molekülündeki akım yoğunluğu ve elektron dönüşünü göstermektedir. Şekil 3.13 (a)'da $\omega = 0.25 Ha$ frekansında dolu olmayan durum manyetik alanının $640.0 mT$ olarak hesaplandığı görülmektedir ve elektron dönüş yönü saat yönündedir. Şekil 3.13 (b)'de ise dolu durumun sebep olduğu indüklenmiş akım $-470.0 mT$ olarak hesaplanmıştır ve elektronlar saat yönünün tersi yönde dönüş yapmaktadır. Şekil 3.13 (c)'de görüldüğü üzere boş ve durumların toplamından kaynaklanan $\omega = 0.25 Ha$ için z yönünde $180.0 mT$ olarak hesaplanmıştır. Şekil 3.13 (d),(e),(f)'de ise $\omega = 0.63 Ha$ frekansta sırasıyla boş, dolu ve toplam elektronik durumların akım yoğunluğu verilmiştir. Bu frekanstaki manyetik alan değerlerinin $\omega = 0.25 Ha$ frekansındaki manyetik alan değerlerinden oldukça küçük olduğu görülmektedir. Şekil 3.13 (g),(h),(i)'de görüldüğü üzere aynı durum $\omega = 0.75 Ha$ frekans değeri için de söz konusudur.

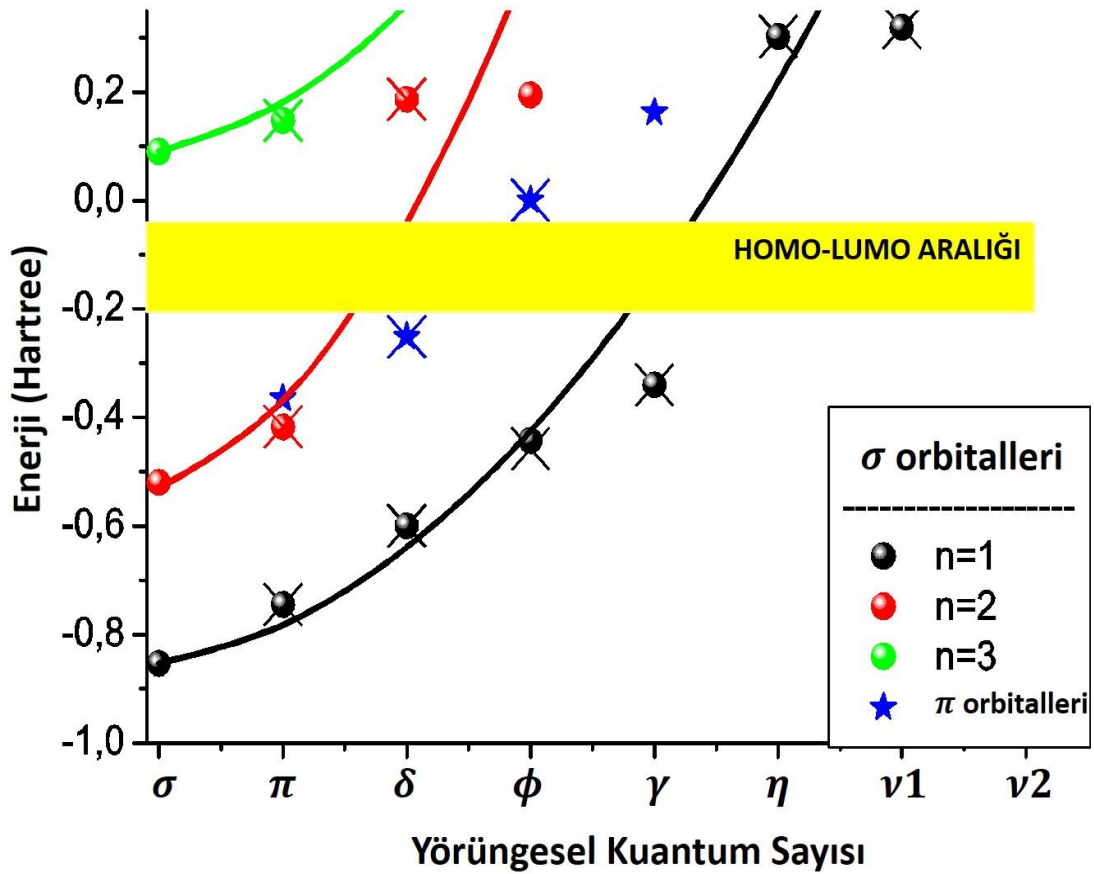


Şekil 3.14. $\omega = 0.93 Ha$ için boş (a), dolu (b) ve toplam (c) elektronik durumların akım yoğunluğu ve indüklenen manyetik alan değerleri

Şekil 3.14 (a),(b),(c) ise sırasıyla boş, dolu ve toplam elektronik durumların $\omega = 0.93 Ha$ frekans değeri için akım yoğunluklarını göstermektedir. Şekilde de görüldüğü üzere manyetik alan değerleri bu frekansta oldukça yüksektir.

Şekil 3.15’de mavi yıldızlar $\omega = 0.25 Ha$ frekans değeri için π bandının δ ve ϕ orbitali arasında geçiş olduğunu göstermektedir. $\omega = 0.63 Ha$ frekans değerinde, geçiş $n = 1$ bandının ϕ orbitali ile $n = 2$ bandının δ orbitali arasında gerçekleşmektedir. $\omega = 0.75 Ha$ frekans değeri için $n = 1$ bandının δ orbitali ile $n = 3$ bandının π orbitali ve $\omega = 0.93 Ha$ frekans değerinde ise $n = 1$ bandının π orbitali ile $n = 2$ bandının δ orbitali arasında geçiş olduğu görülmektedir.

Akım yoğunluğu grafiklerinden de görüldüğü üzere akımın büyüklüğü ve yönü dairesel polarize ışığın frekans değişiminden etkilenmektedir.



Şekil 3.15. Benzene molekülünün elektronik açılal bant yapısı (Olası geçişler bant yapısından analiz edilebilir)

3.3.3 Dairesel polarize bükümlü ışık altında benzene molekülünde akım yoğunluğu ve indüklenmiş manyetik alan

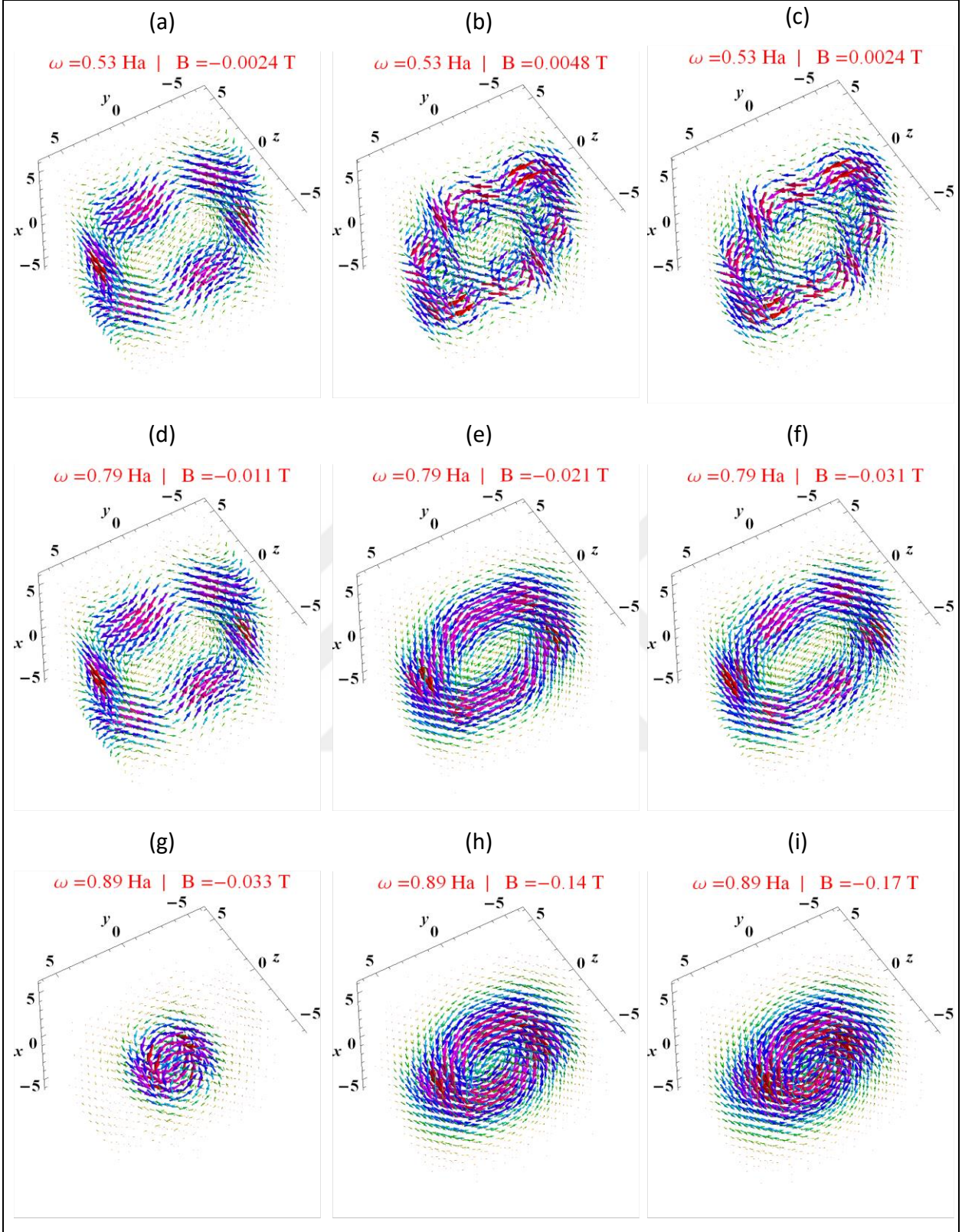
Bu bölümde bükümlü ışığın polarizasyon vektörü dairesel olarak ele alınmıştır. Yani bükümlü ışık hem SAM hem de YAM taşımaktadır. Hesaplamalarda topolojik yük $m_a = 1$ ve radyal boğum $p = 0$ olarak kullanılmıştır. Işığın ışın sırtı parametresi $\omega_0 = 10^2 a.u. = 5.3 nm$ ve elektrik alan şiddeti $A_0 = 2.5 \times 10^{-2} a.u.$ olarak belirlenmiştir. Kayda değer indüklenmiş akım elde edebilmek için bükümlü ışık ışınının yüksek şiddete sahip ve yüksek oranda odaklanmış olduğu varsayılmıştır. Geçiş zamanı parametresi $\delta = 0.001 a.u.$ olarak kullanılmıştır.

Şekil 3.16 (a),(b),(c), $\omega = 0.53 Ha$ frekans değeri için dairesel polarize bükümlü ışıkla etkileşen benzene molekülündeki akım yoğunluğu ve elektron dönüşünü göstermektedir. Bu frekansta dolu olmayan durumların sebep olduğu indüklenmiş manyetik alan değeri $-2.4 mT$ olarak hesaplanmıştır ve elektronlar saat yönünün tersi yönde dönmektedir. Dolu durumlardan kaynaklanan indüklenmiş manyetik alan değeri ise $4.8 mT$ olarak hesaplanmıştır. Şekil 3.15’de görüldüğü gibi, $n = 1$ bandının γ orbitali ile $n = 2$ bandının δ orbitali arasında geçiş gerçekleşmiştir.

Şekil 3.16 (d),(e),(f)’de $\omega = 0.79 Ha$ frekans değeri için akım yoğunluğu ve indüklenmiş manyetik alan değerleri görülmektedir. Şekil 3.15’e bakılacak olursa bu frekans için $n = 1$ bandının δ orbitali ile $n = 2$ bandının δ orbitali arasında geçiş gerçekleşmiştir.

Şekil 3.16 (d),(e),(f)’de ise $\omega = 0.89 Ha$ frekans değeri için akım yoğunluğu ve indüklenmiş manyetik alan değerleri verilmiştir. Bu frekansta önceki frekanslara göre daha yüksek manyetik alan değerleri elde edilmiştir. Şekil 3.15’de de görüldüğü üzere bu frekans için $n = 1$ bandının π orbitali ile $n = 2$ bandının δ orbitali arasında geçiş gerçekleşmiştir.

Çizelge 3.2’de görüldüğü gibi indüklenmiş manyetik alanın büyüklüğü ve yönü ışığın frekansına güçlü şekilde bağlıdır. $\omega = 0.94 Ha$ frekans değeri için $3.6 T$ gibi yüksek sayılabilecek manyetik alan büyüklük değeri elde edilmiştir. Bu sonuçlara göre bükümlü ışığın taşıdığı YAM değeri artırılarak daha yüksek manyetik alan büyüklük değerlerine ulaşmak mümkün görünmektedir.



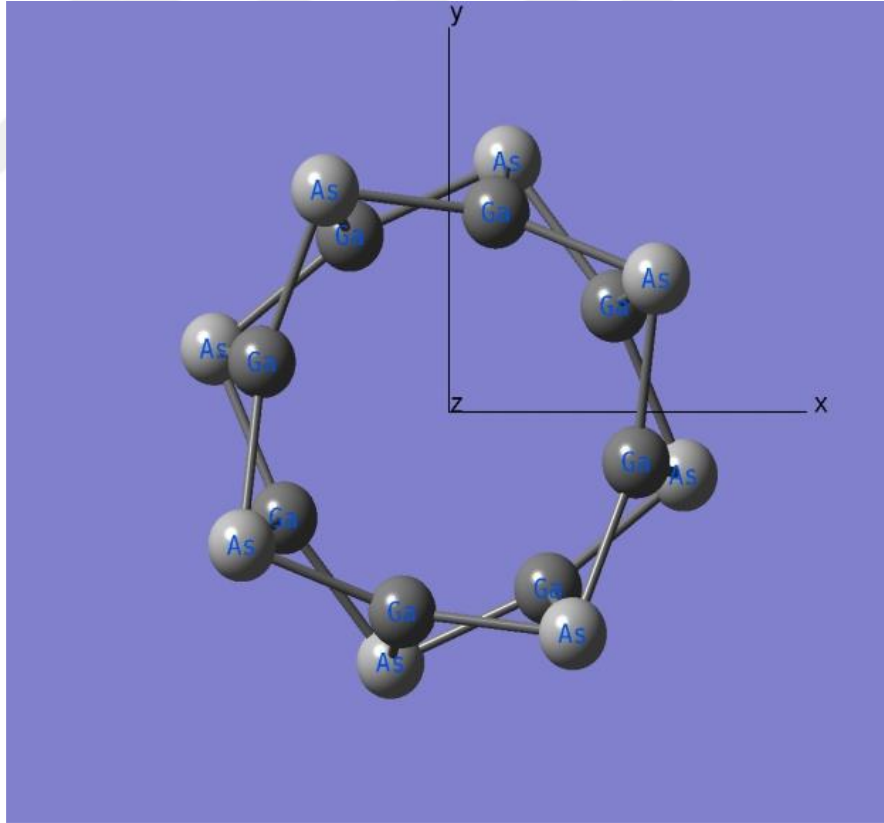
Şekil 3.16. İndüklenmiş manyetik alanın dairesel polarize bükümlü ışığın frekansına bağlı değişimi (Işığın yörüngesel açısai momentumu $m_a = 1$)

Çizelge 3.2. İndüklenmiş manyetik alanın ışığın tipine ve frekansına bağlı değişimi

Frekans (Ha)	Dairesel Polarize Işık Tarafından İndüklenmiş Manyetik Alan	Dairesel Polarize Bükümlü Işık Tarafından İndüklenmiş Manyetik Alan
0.25	180 mT	0
0.41	0	20 mT
0.51	-22 mT	0
0.53	0	2.4 mT
0.59	0	-350 mT
0.61	0	340 mT
0.63	1.33 mT	0
0.67	-22 mT	0
0.69	0	-2.8 mT
0.71	0	7.4 mT
0.75	16 mT	0
0.79	0	-31 mT
0.89	0	-170 mT
0.93	320 mT	4.5 mT
0.94	0	3.6 T
1.00	-79 mT	0

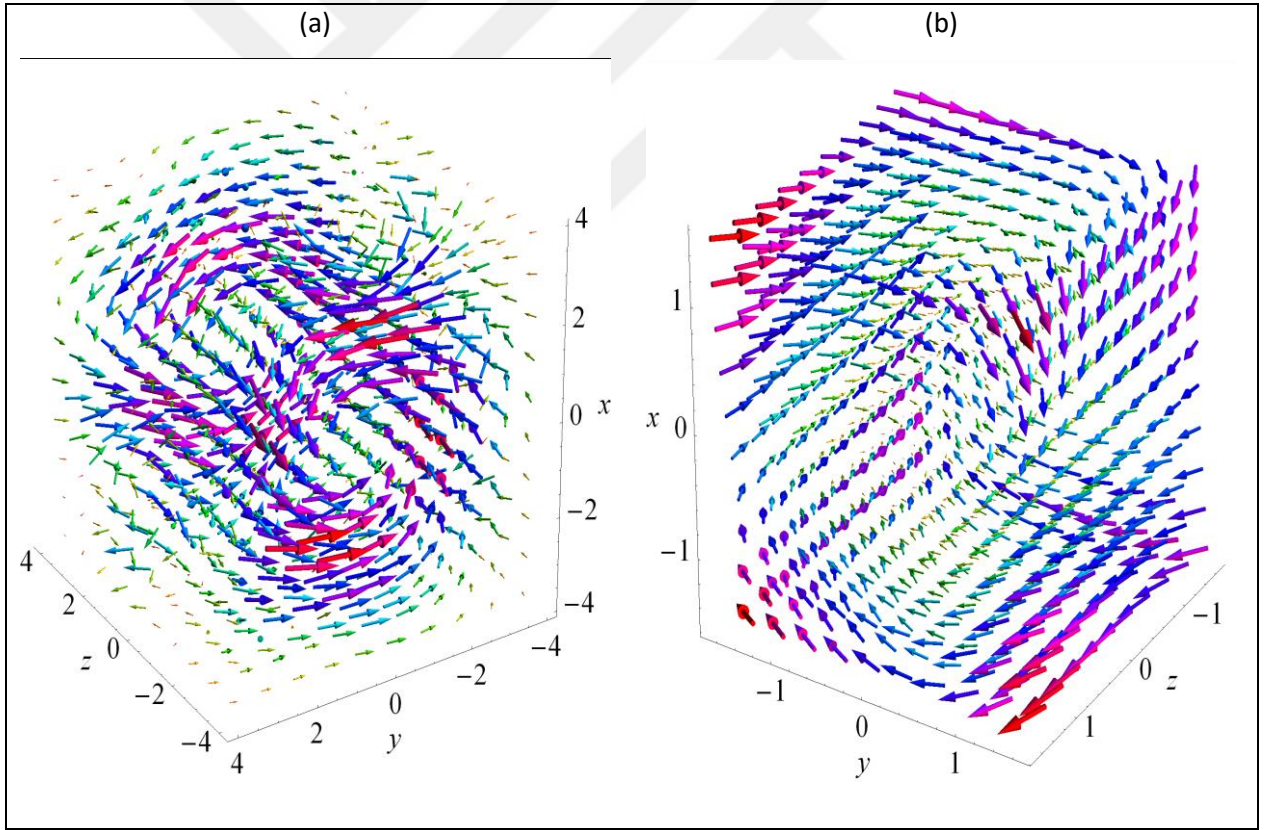
3.4. Ga₈As₈ Moleküler Halka Yapı Sonuçları

GaAs ve GaAs tabanlı manyetik malzemeler, mikro elektronik, manyeto-optik ve manyeto-elektriksel cihaz uygulamalarında iyi bilinen yarıiletkenlerdir. Teknolojik cihazların üretimi için hacimsel, mikro ve nano ölçekli GaAs yarıiletkenler üzerine çok sayıda deneysel ve teorik çalışmalar yapılmıştır. Moleküler topaklar moleküller ve makro yapılar arasında köprü olarak tanımlanabilir. Ga₈As₈ gibi moleküler yapılar üstünde detaylı teorik çalışmalar izole molekül ve hacimsel yapılar arasındaki bağlantıyı anlamak açısından önemli olabilmektedir. Mezoskopik yapılardaki indüklenen dairesel akımlar gibi olguların doğasını anlamak için en iyi yol bu olguları nano ve makro ölçekte ve gözlemek ve karşılaştırmaktır. GaAs ve GaAs/AlGaAs dairesel yarıiletken yapılarda kalıcı akım üstüne deneysel gözlemler yapılmış olsa da izole GaAs molekülü için yapılmış herhangi bir çalışma bulunmamaktadır. Bu bölümde, dairesel polarize lazer ve dairesel polarize bükümlü lazer varlığında Ga₈As₈ dairesel moleküler yapıda kalıcı akım oluşturulabileceği gösterilmektedir. Yapıya ait şematik gösterim şekil 3.17’de verilmiştir.



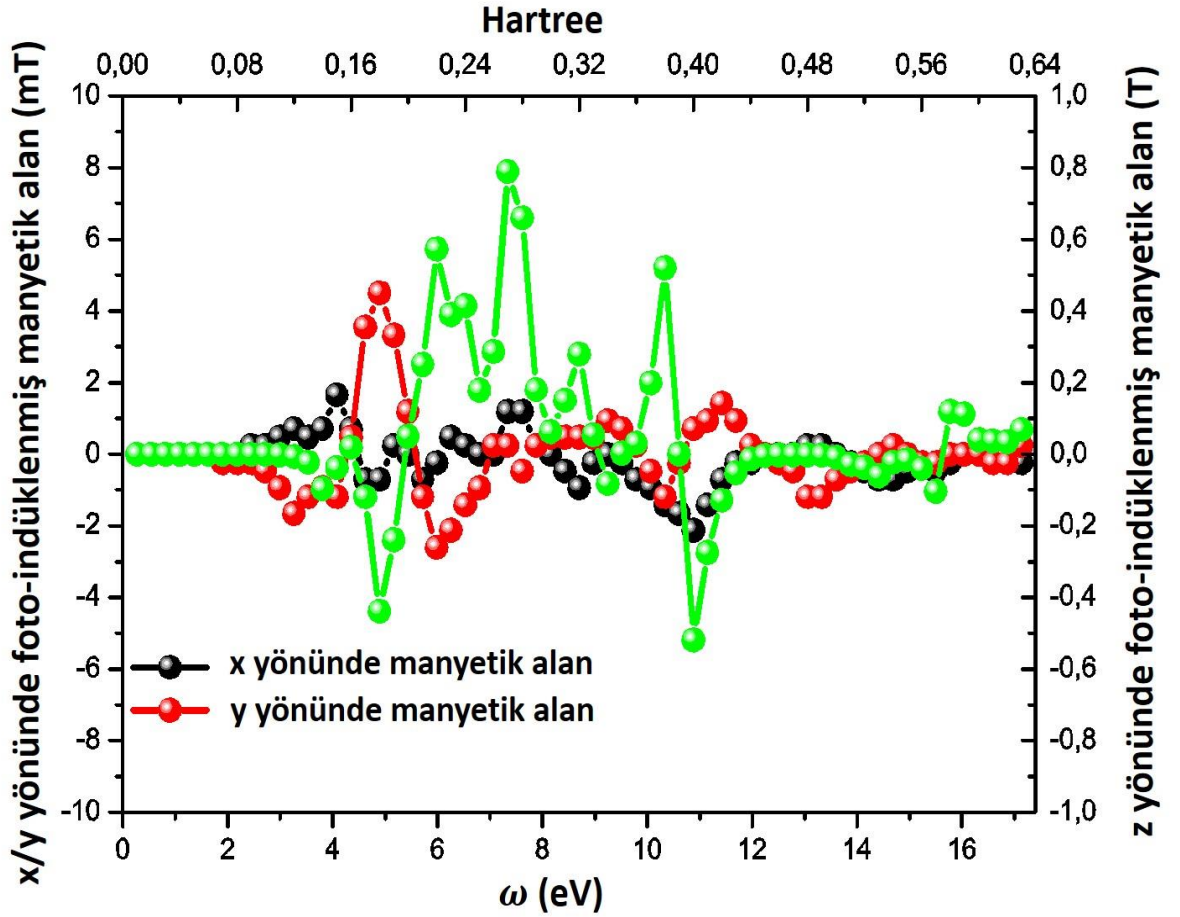
Şekil 3.17. Ga₈As₈ halka tipli moleküler yapının şematik gösterimi

İndüklenmiş akım yoğunluğu ve indüklenmiş manyetik alan yapıyla etkileşen ışığın tipine ve frekansına doğrudan bağlıdır. SAM taşıyan lazer ışığı için elektrik alan şiddetinin, $A_0 = 6.56 \times 10^{-4} a. b.$ ve geçiş zamanı parametresinin, $\delta = 0.001 a. b.$ olduğu varsayılmıştır. Şekil 3.18 (a)'da görüldüğü gibi, $\omega = 0.18 Ha$ frekans değeri için elektronlar z düzlemine doğru çok az sapma yapmakla birlikte yoğun şekilde $x - y$ düzleminde hareket etmektedirler. Yapının merkezinde indüklenen manyetik alan $\vec{B} = -0.7 \hat{a}_x + 4.5 \hat{a}_y - 437.7 \hat{a}_z mT$ olarak hesaplanmıştır ve bu değer elektronların saat yönünün tersi yönde hareket ettiklerini göstermektedir. Şekil 3.18 (b)'de ise $\omega = 0.27 Ha$ frekans değeri için indüklenmiş akım yoğunluğu gösterilmektedir. Bu frekans değerinde elektronların saat yönünde hareket ettikleri görülmektedir ve yapının merkezinde hesaplanan manyetik alan $\vec{B} = -1.18 \hat{a}_x - 0.23 \hat{a}_y + 789 \hat{a}_z mT$ 'dir. Şekil 3.18'de de görüldüğü üzere akım yoğunlukları birbirlerinden tamamen farklıdır. Bunun altında yatan ana sebep, uyarılmış elektronların moleküler orbital şekilleridir.



Şekil 3.18. $\omega = 0.18$ Hartree (a) ve $\omega = 0.27$ Hartree (b) için dairesel polarize ışıkla indüklenen akım yoğunluğunun 3 Boyutlu grafiği (Bu frekanslar HOMO-LUMO seviyeleri arasındaki geçiş için gerekli olan frekanslardır)

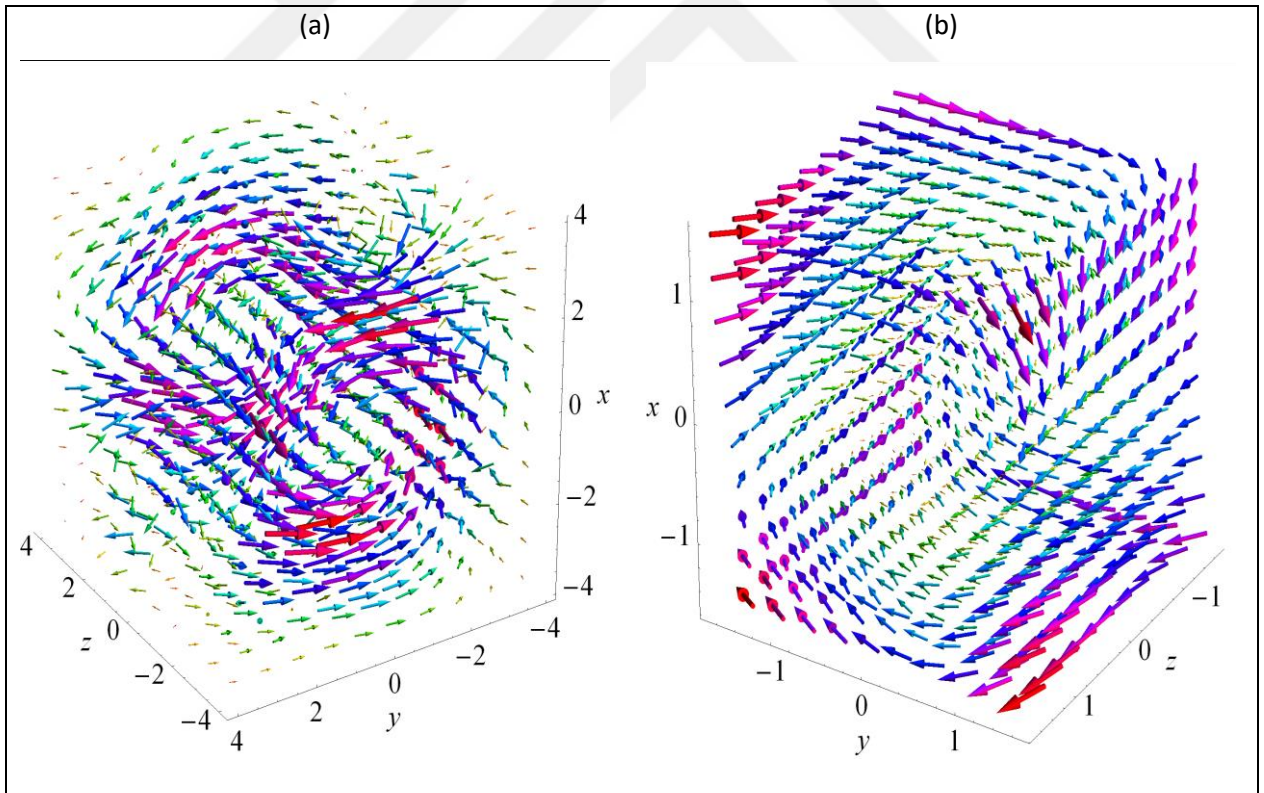
Şekil 3.19’da indüklenmiş manyetik alanın dairesel polarize ışığın frekansına bağlı değişimi verilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi ışığın frekansının değişimiyle indüklenmiş manyetik alanda bir salınım söz konusudur. Burada dikkat çeken bir nokta x/y yönündeki indüklenmiş manyetik alanın z yönündeki indüklenmiş manyetik alan kadar büyük olmasa da sıfır olmadığıdır. Bunun altında yatan sebep indüklenmiş akım yoğunluğundaki z yönüne doğru olan sapmalarla açıklanabilir. İndüklenmiş manyetik alanın yönündeki ışığın frekansına bağlı değişimin sebebi Ga_8As_8 halka yapının küresel simetrik olmamasından kaynaklı manyetik kuantum sayısındaki dengesizlik olarak gösterilebilir. Bu sonuç, Ga_8As_8 halka yapının merkezine konulacak bir manyetik atomun spininin, dairesel polarize ışığın frekansındaki küçük değişimlerle kontrol edilebileceği fikrini uyandırmaktadır.



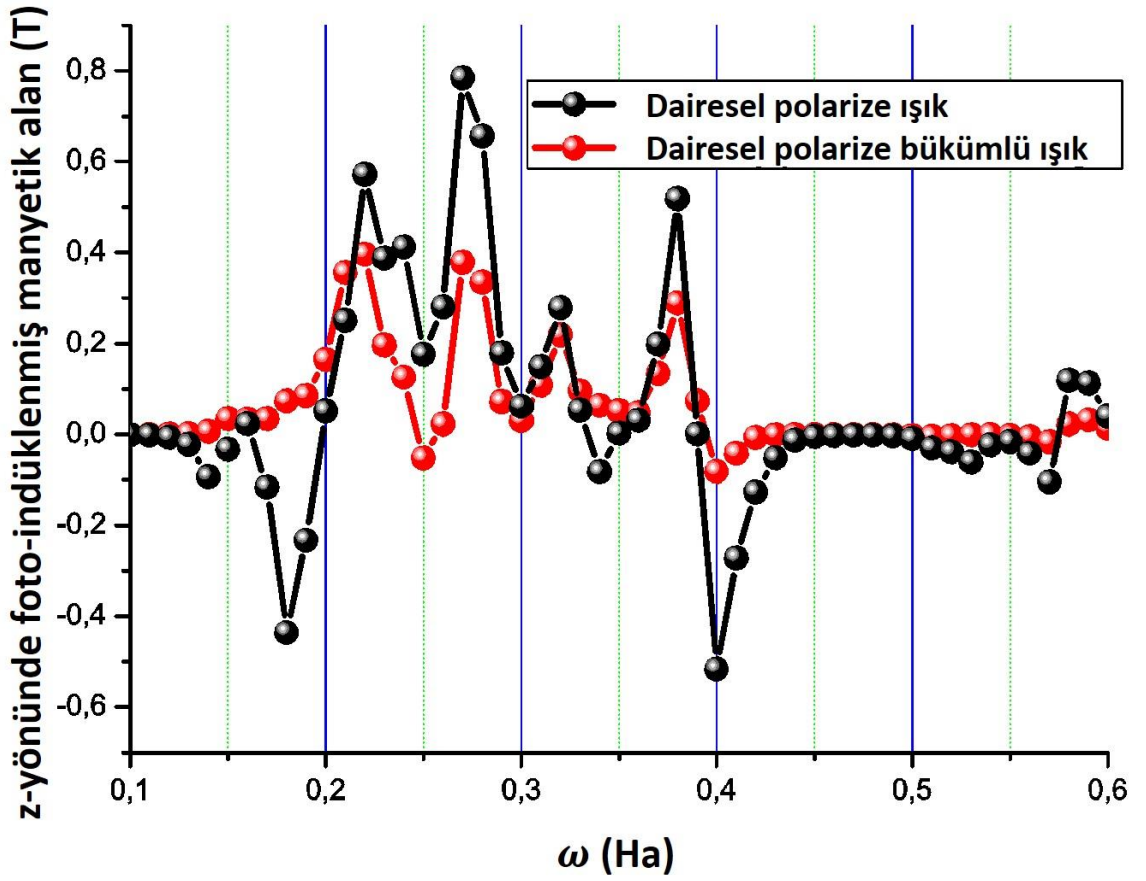
Şekil 3.19. Manyetik alanın x, y ve z bileşenlerinin sağa dairesel polarize lazer ışınının frekansına bağlı olarak değişimi

Bükümlü ışıkla yapılan hesaplamalar boyunca, ışığın topolojik yükü $m_a = 1$, radyal boğum parametresi $p = 0$ olarak kabul edilmiştir. Işığın, ışın sırtı parametresi $w_0 = 10^3 a.b.$ ve vektör potansiyeli $A_0 = 6.56 \times 10^{-2} a.b.$ olarak alınmıştır. Vektör potansiyelinin değerinin dairesel polarize ışığın vektör potansiyeline göre 100 kat büyük alınmasının sebebi ışın sırtı etkisinden kaynaklanan düşüşü karşılamaktır. Geçiş zamanı parametresi $\delta = 0.001 a.b.$ olarak kullanılmıştır.

Şekil 3.19’da, $\omega = 0.22 Ha$ ve $\omega = 0.4 Ha$ frekans değerlerinde net bir akım yoğunluğu gözlemlenmektedir. $\omega = 0.22 Ha$ değeri için elektron dönüşü saat yönünde ve indüklenmiş manyetik alan $396 \vec{a}_z mT$ olarak hesaplanmıştır. $\omega = 0.4 Ha$ değerinde ise elektron dönüşü saat yönünün tersinde olup indüklenmiş manyetik alan $-81 \vec{a}_z mT$ ’dır. Bu yapıda x ve y yönünde de kayda değer büyüklükte manyetik alan elde edildiği görülmektedir. Bu yönüyle Ga_8As_8 moleküler topak Benzene ve Mg-Porphyrin gibi moleküler topaklardan ayrılmaktadır. Özellikle düşük frekanslarda manyetik alanın x ve y yönünde ciddi değişimler göze çarpmaktadır.



Şekil 3.20. $\omega = 0.22$ Hartree (a) ve $\omega = 0.4$ Hartree (b) için dairesel polarize bükümlü ışıkla indüklenen akım yoğunluğunun 3 Boyutlu grafiği (Bu frekanslar HOMO-LUMO seviyeleri arasındaki geçiş için gerekli olan frekanslardır)



Şekil 3.21. Manyetik alanın z bileşeninin dairesel polarize lazer ışınının ve dairesel polarize bükümlü lazer ışınının frekansına bağlı olarak değişimleri

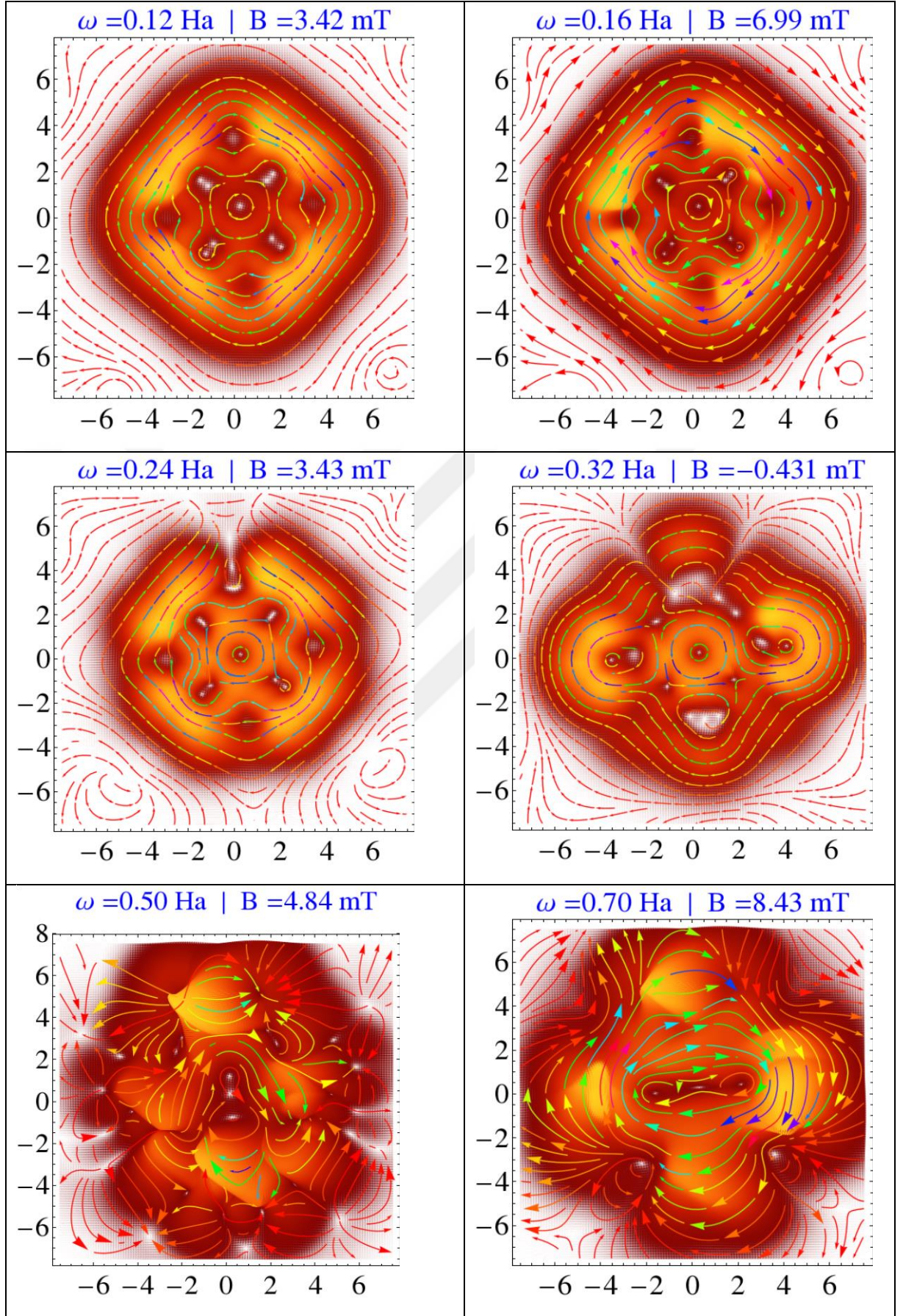
Şekil 3.21’de, indüklenmiş manyetik alanın z bileşeninin dairesel polarize bükümlü ışığın ve dairesel polarize ışığın frekansına bağlı olarak değişimi karşılaştırmalı olarak verilmiştir.

3.5. Dairesel Polarize Laguerre-Gaussian Tipi Bükümlü Işık Altında Mg-Porphyrin Molekülü Sonuçları

Mg-Porphyrin moleküler topaklar, dairesel simetriye sahip olduklarından ve merkezlerinde manyetik bir atom barındırdıklarından opto-manyetizma uygulamaları için kullanışlı yapılardan olmaya aday görülmektedir. Dairesel simetriye sahip olması sebebiyle dairesel polarize ışık ya da dairesel polarize bükümlü ışıkla etkileşimi neticesinde dairesel bir akım indüklenebilmektedir. Merkezinde bulunan manyetik atomun spini, dairesel halkanın meydana getirdiği manyetik alan büyüklüğü yeterli miktarda olduğu takdirde bu manyetik alandan etkilenmektedir. Bükümlü ışık sahip olduğu topolojik yük ve radyal boğum parametreleriyle bu yapının merkezinde bulunan manyetik atomun spin yöneliminde kontrol aracı olarak kullanılabilir.

Bu bölümde, spin açısal momentum taşıyan dairesel polarize bükümlü bir ışığın bir ışığın Mg-Porphyrin moleküler yapı üzerindeki etkisi incelenmiştir. Bunun için kullandığımız polarizasyon vektörü, $\vec{e} = \{1, i, 0\}$ şeklindedir. Dairesel polarize ışığın topolojik yükü $m_a = 1$ ve Radyal boğum sayısı ise $p = 0$ olarak seçilmiştir. Işın sırtı parametresi $\omega_0 = 10^3$ a.b. ve vektör potansiyeli büyüklüğü $A_0 = 6.05 \times 10^{-3}$ a.b. ve geçiş süresi parametresi $\delta = 0.013$ a.b. olarak seçilmiştir.

Şekil 3.22, dairesel polarize bir bükümlü ışığın Mg-Porphyrin molekülünde oluşturduğu akım yoğunluğunun ışığın frekansına bağlı olarak değişimini göstermektedir. Işığın frekansı $\omega = 0.12$ Hartree iken oluşan akımın saat yönünde olduğu görülmektedir (oklarla gösterilen). Akım yoğunluğunun ise bu frekansta karbon atomları üstünde yüksek olduğu görülmektedir (açık renk akım yoğunluğunun yüksek olduğu bölgeler). Molekülün merkezinde oluşan manyetik alan değeri $B = 3.42$ mT'dır. Bu frekans aynı zamanda Mg-Porphyrin molekülünün HOMO-LUMO aralığına denk gelmektedir. Frekans $\omega = 0.16$ Hartree değerinde de $\omega = 0.12$ Hartree frekansına benzer şekilde akım ve akım yoğunluğu gözlemlenmektedir. Fakat molekül merkezinde oluşan manyetik alan değerinin yaklaşık olarak iki kat artmış olduğu görülmektedir.



Şekil 3.22. Mg-Porphyrin molekülünün dairesel polarize bükümlü ışık altında akım yoğunluğunun frekansa bağlı değişimi

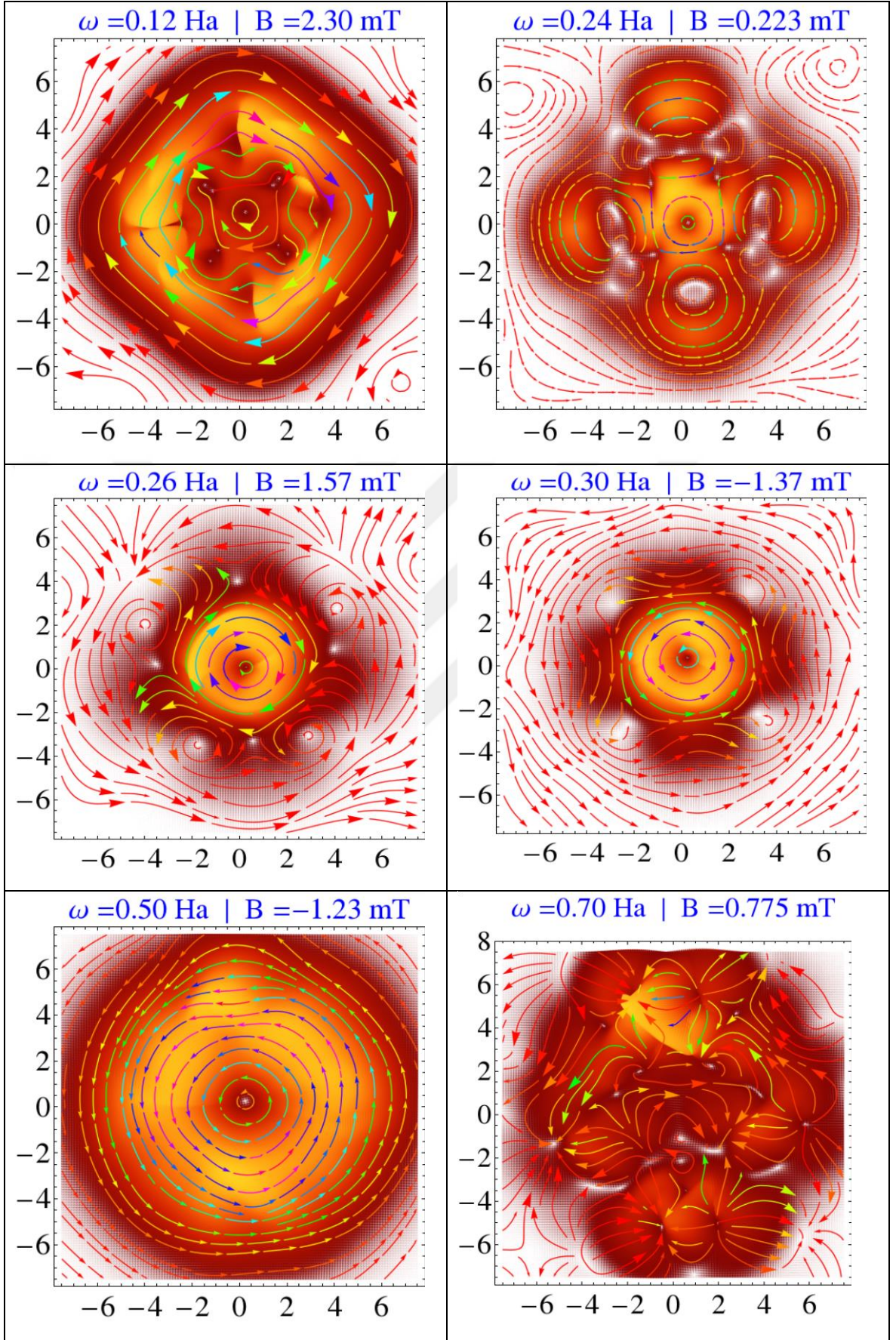
Frekans $\omega = 0.24$ Hartree iken akım yönü yine saat yönünde olmakla birlikte akım yoğunluğunda önceki frekanslara göre değişim gözlemlenmektedir. Bu durum, uyarılan elektronların farklı bir seviyeye geçtiğini gösterir. Manyetik alan değeri bu frekansta $B = 3.43$ mT olarak hesaplanmıştır. Frekans $\omega = 0.32$ Hartree değerinde ise manyetik alan değeri $B = -0.431$ mT olarak hesaplanmıştır ve manyetik alan yönünden akım yönünün saat yönünün tersine olduğu ve bu frekansta yapıda lokal akımların oluştuğu görülmektedir. Şekil 3.22’de görüldüğü üzere, bu frekansta karbon atomları üzerindeki akım saat yönünde iken Mg ve Ni atomları üstündeki akım saat yönünün tersi yöndedir. Manyetik alan değerinden de merkezdeki toplam akımın saat yönünün tersi yönde olduğu anlaşılmaktadır. $\omega = 0.5$ ve $\omega = 0.7$ Hartree değerlerinde ise manyetik alan değerinin oldukça yüksek olduğu gözlemlenmiştir.

3.6. Dairesel Polarize Işık Altında Mg-Porphyrin Molekülü Sonuçları

Çalışmanın bu bölümünde, yörüngesel açısal momentum taşıyan ışığın yapıya olan etkisini daha net anlayabilmek için sadece spin açısal momentum taşıyan dairesel polarize ışığın Mg-Porphyrin molekülü üstündeki etkisi incelenmiştir. Gerçek anlamda bir karşılaştırma için ışık parametreleri önceki ışıkta kullanılan parametrelerle aynı tutulmuştur. Bükümlü ışık kullanılmadığı için bükümlü ışığa ait parametreler burada geçersizdir.

Şekil 3.22’de, sadece spin açısal momentum taşıyan dairesel polarize ışığın Mg-Porphyrin molekülünde oluşturduğu akım ve akım yoğunluğunun ışığın frekansına bağlı değişimi görülmektedir. Şekilde görüldüğü üzere frekans değeri $\omega = 0.12$ Hartree iken molekülün merkezinde oluşan manyetik alan $B = 2.30$ mT’dir ve akım yönü ve yoğunluğu dairesel polarize bükümlü ışık sonucuyla çok benzerdir. Frekans değeri $\omega = 0.24$ Hartree iken akım yoğunluğunun çok düşük olduğu görülmektedir. Bu frekans değerinde yine lokal akım yoğunlukları göze çarpmaktadır. Frekans değerleri $\omega = 0.26$ Hartree ve $\omega = 0.30$ Hartree iken akım yoğunluğu merkezdeki Mg atomu çevresinde yoğunlaşmaktadır ve akım birbirlerine göre ters yönlerde akmaktadır. Bu frekans değerlerinde manyetik alan değerleri de şekilde görüldüğü üzere birbirlerine çok yakın olmaktadır.

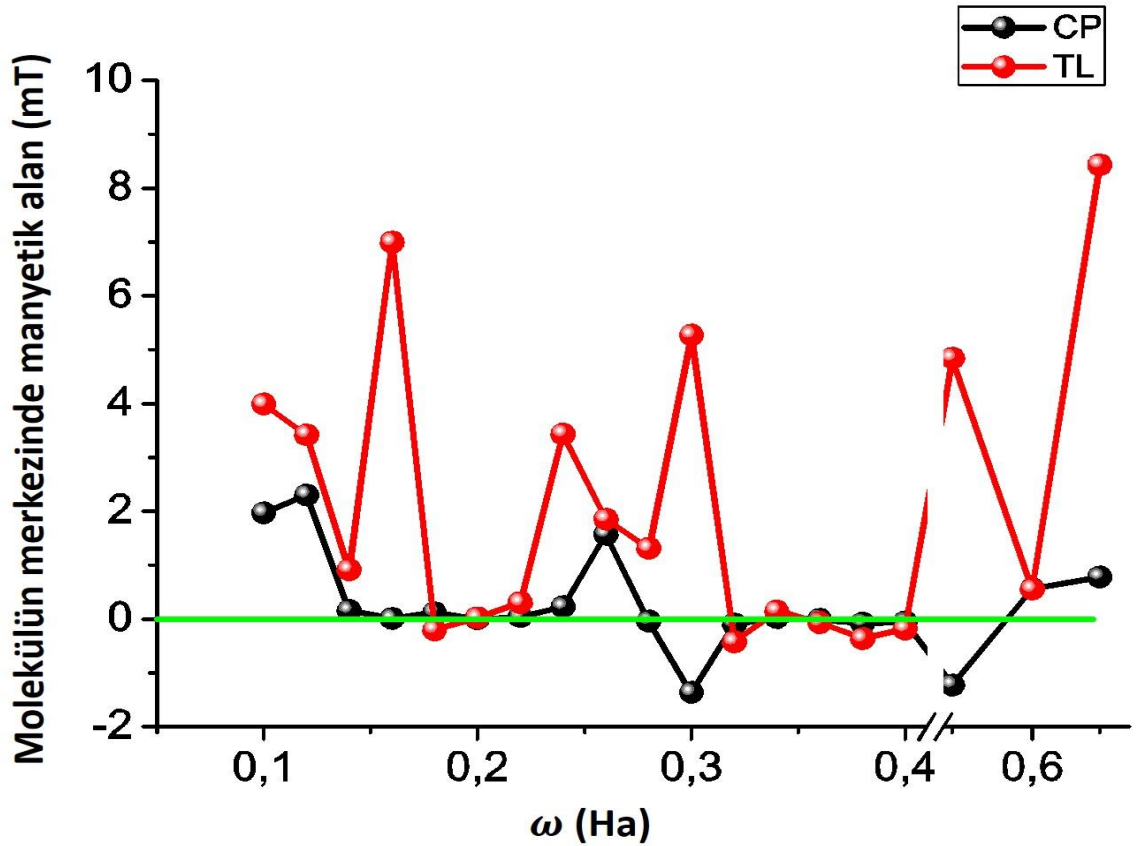
Frekans değerleri $\omega = 0.5$ Hartree ve $\omega = 0.7$ Hartree iken ise akım yoğunluğunun dairesel polarize bükümlü ışık durumuna göre oldukça farklı olduğu görülmektedir. Özellikle $\omega = 0.7$ Hartree değerinde akım yönünün çok karmaşık olduğu görülmektedir. Bu frekansta lokalize akımların oluştuğu anlaşılmaktadır.



Şekil 3.23. Mg-Porphyrin molekülünün dairesel polarize ışık altında akım yoğunluğunun frekansa bağlı değişimi

Önceki çalışmada da olduğu gibi sadece spin açısai momentum taşıyan dairesel polarize ışıkla hem spin açısai momentum hem de yörüngesel açısai momentum taşıyan dairesel polarize bükümlü ışığın Mg-Porphyrin molekülünde sebep olduğu akım ve akım yoğunlukları farklı olmaktadır. Bunun altında yatan sebep, geçiş kurallarının iki ışıkta farklı olmasıdır. Dairesel polarize ışıkta geçiş kuralı $m_a = \pm 1$ iken dairesel polarize bükümlü ışıkta bu kural $m_a = \pm 2$ şeklindedir. Bu geçiş kuralı 2 ışıkta farklı seviyelere geçiş yapıldığını göstermektedir ve akım yoğunlukları da buna bağlı olarak iki ışık için farklı olmaktadır.

Dikkat çekici bir diğer nokta ise $\omega = 0.5$ frekans değerinde oluşan akım yoğunluğunun yaklaşık olarak homojen bir dağılım sergilemesidir. Bu durumun manyetik atomun konumu değiştirilerek üstüne etkileyen manyetik alanın konuma bağlı incelemesinin yapılmasında yardımcı olabileceği düşünülmektedir. Böylelikle manyetik atomun konumunun değiştirilmesi durumunda yapıda oluşan manyetik alandan hangi konumda ne kadar etkilendiğinin karşılaştırması yapılabilir.



Şekil 3.24. Mg-Porphyrin molekülünün merkezinde indüklenen manyetik alanın frekansa bağlı değişimi

Şekil 3.24, Mg-Porphyrin molekülünün merkezindeki manyetik alanın, farklı ışıklar altında frekansa bağlı değişimini göstermektedir. Frekans değişimiyle her iki ışıkta da manyetik alanın büyüklüğü ve yönünde ciddi değişimler gözlemlenmektedir. Önemli diğer bir nokta ise belli frekanslarda ışığın yapısının, manyetik alanın yönü ve büyüklüğünde ciddi etkiye sahip olmasıdır. Yani dairesel polarize olmuş bükümlü ışığın yörüngesel açısal momentum özelliğini kapatıp açarak manyetik alanın yönü ve büyüklüğü kontrol edilebilmektedir.

Sonuç olarak bu bölümde Mg-Porphyrin yapısında dairesel polarize ışık ve dairesel polarize bükümlü ışıkla indüklenmiş akım yoğunluğu ve yapının merkezindeki manyetik alan başarılı şekilde incelenmiştir. Elde edilen manyetik alan değerlerinin ışığın frekansı ve yapısına doğrudan bağlı olduğu görülmektedir. Vektör potansiyelinin genliği artırılarak Tesla mertebesinde manyetik alan değerlerine ulaşılabileceği öngörülmektedir. Bükümlü ışığın topolojik yük parametresiyle oynanarak spin yöneliminin optik kontrolünün sağlanabileceği görülmektedir.

4. TARTIŞMALAR

Bu tez çalışmasında, ilk olarak CdSe/CdS ve GaAs/AlGaAs kuantum noktalarında, geçiş olasılıklarının yapıların boyutlarıyla kontrol edilebileceği gibi bükümlü ışık parametreleriyle de kontrol edilebileceği gösterilmiştir. Bükümlü ışık kullanımı manyetik alan kullanımıyla benzerlik göstermektedir. Literatürde, bir kuantum sistemine manyetik alan uygulayarak geçişler gözlemlenmenin mümkün olduğu belirtilmektedir. Fakat bunun yanında yine literatürde iyi bilindiği gibi ultra hızlı atım şeklinde ve nano ölçekte lokal manyetik alan üretmek mümkün değildir. Bu çalışmayla, kuantum noktalarında geçişlerin nano ölçekte ve ultra hızlı şekilde bükümlü lazerle yapılabileceği ve yine bu çalışmayla kuantum noktasının boyutunu sabit tutup sadece ışık parametreleriyle oynayarak aynı frekansta geçişler yaptırılabilceği gösterildi.

Bu tez sürecinde yapılan bir diğer çalışma olan, yalıtkan SiO₂ üstüne GaAs/AlGaAs kaplanarak modellenen kuantum nokta yapı çalışmasında, kuantum nokta yapısının boyutunu 100 nm çapa sahip yalıtkan SiO₂ sayesinde ışığın ışın sırtı parametresiyle uyumlu hale getirerek bükümlü ışık ve kuantum noktası arasındaki etkileşim şiddetini artırma hedeflendi. Hesaplamalarda, elektron ve deşğin hapsoldüğü GaAs yarıiletken malzemenin boyutu düşük tutulduğı için 3 nm, kuantum etkileri gözlemlenmeye devam etmekle beraber, karşılaştırılabilir ışın sırtı ve kuantum nokta yapı boyutu, yüksek açısız kuantum sayısı ve yüksek manyetik kuantum sayısına sahip çok sayıda iletim elektronlarının akıma katkıda bulunması sağlanmış oldu. Çalışmada bükümlü ışık parametrelerinin deęiştirilmesiyle ultra hızlı lazer alanı kullanılarak kuantum nokta yapıda manyetik alan ve akım oluşturulması hedeflendi. Hesaplama sonuçları, yalıtkan SiO₂ ortasına konulacak bir manyetik atomun spin polarizasyon kontrolünün bükümlü ışıkla sağlanabileceğini gösterdi. Bu teorik sonuçların kuantum noktalarında foto-indüklenmiş spin kontrolü için yapılacak deneylerde rehber olarak kullanılabilceği öngörüldü.

Tez çalışmasında, yarıiletken kuantum noktalarıyla dairesel polarize ışık ve dairesel polarize bükümlü ışığın etkileşimi dışında, bu ışıkların bazı moleküler topaklarla etkileşimi de incelenmiştir. Bu amaçla ilk olarak, yüksek frekans bağımlı elektronik geçişler ve ışıkla indüklenmiş dairesel akım arasındaki ilişkiyi anlamak için halka tipli benzene molekülünün açısız elektronik bant yapısı elde edilmiştir. Önceki çalışmalardan farklı olarak bu çalışmada HOMO-LUMO geçişleri dışındaki geçişler ele alınmıştır. Küçük moleküllerde YAM taşıyan ışığın dairesel akım üstündeki etkileri ilk olarak bu çalışmada incelenmiştir. SAM ya da YAM taşıyan ışıkla, indüklenen manyetik alan ve indüklenen akımın kontrol olasılığına bakılmıştır.

Hesaplama sonuçlarının özellikle ultra hızlı lazerlerle spinin optik kontrolü alanında faydalı olacağı düşünülmektedir.

Tez sürecinde, benzene molekülünün yanında GaAs_8 halka tipli moleküler topağa dairesel polarize ışık ve dairesel polarize bükümlü ışığın etkileri de incelenmiştir. SAM ve YAM taşıyan ışıkların frekansıyla oynanarak yarıiletken kuantum halkadaki elektron dönüşünde ne gibi değişimler olabileceği gösterilmiştir. Hesaplama sonuçlarında bu yapının merkezinde oluşan manyetik alanın Tesla mertebesinde olup, çoğunlukla yapının yayılma düzlemine dik olduğu görülmüştür. Bu sonuçlardan yola çıkılarak yüksek YAM taşıyan ışıkla yapının merkezine konulacak bir manyetik atomun ciddi şekilde etkilenebileceği görülmektedir. Böyle bir yapının, bükümlü ışığın frekansına, radyal boğum ve topolojik yük parametrelerine karşı hassas spintronik bir cihaza çevrilebilmesi mümkün görünmektedir.

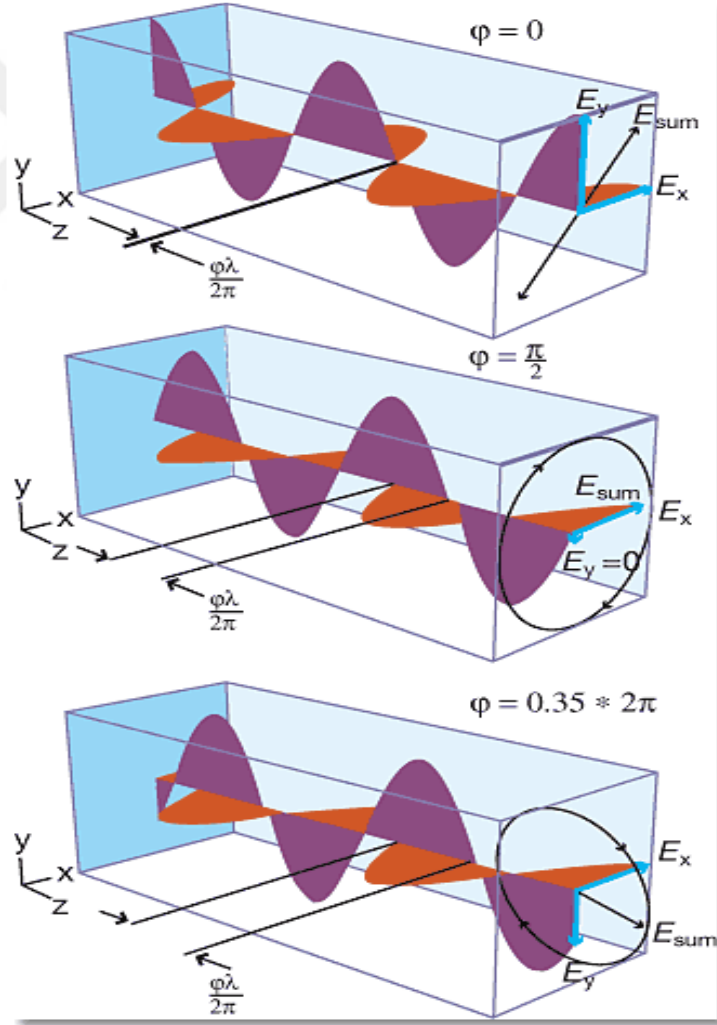
Tez sürecinde ele alınan son çalışma ise yine dairesel polarize ve dairesel polarize bükümlü ışıkla Mg-Porphyrin halka tipli moleküler yığının etkileşimi olmuştur. Hesaplamalar sonucunda moleküler yığının merkezinde indüklenen manyetik alanın büyüklük ve yönünü her iki tip ışıkta da frekansa bağlı olarak değiştiği gözlemlenmiştir. Bu sonuç, spin yöneliminin optik kontrolü açısından gayet önemlidir. Bunun yanında ışığın sadece topolojik yük parametresinin değiştirilmesiyle de manyetik alanın büyüklük ve yönünün aynı frekanstaki ışıkla da değiştirilebilmesi mümkün görünmektedir. Hesaplamalar da ayrıca dairesel polarize ışıkla, dairesel polarize bükümlü ışığın indüklenmiş manyetik alan noktasında etkilerinin oldukça farklı olduğu gözlemlenmiştir. Sonuç olarak, yapının merkezindeki manyetik atomun spininin foto-indüklenmiş akımla ışığın frekansına, topolojik yüküne ve radyal boğum parametresine bağlı olarak kontrol edilebileceği gösterilmiştir.

Sonuç olarak, yarıiletken nanoboyutlu yapılar ve moleküler topaklarda dairesel polarize ışık ve bükümlü ışık kullanarak yapının merkezinde indüklenen manyetik alanın bükümlü ışığın topolojik yük ve radyal boğum parametreleriyle kontrol edilebileceği ve bükümlü ışık kullanılarak nanoboyutlu yapıların merkezine konulacak bir manyetik atomun spin kontrolünün ultra hızlı şekilde yapılabileceği görülmüştür.

5. EK-1 IŞIĞIN POLARİZASYONU

Elektromanyetik dalgalarda, elektrik ve manyetik alan vektörlerinin her ikisi de salınım yapar fakat bu salınımları farklı yönlerde. Polarizasyon genellikle elektrik alanın polarizasyonu şeklinde ifade edilir. Işık boş uzayda yaklaşık olarak bir düzlem dalga gibi hareket eder ve elektrik ve manyetik alan vektörleri her ikisi de dalganın ilerleme yönüne diktir. Bu alanların salınımı ya tek yöndedir (lineer polarizasyon) ya da alanlar bir optik frekansta dönerek salınım (daireysel ya da eliptik polarizasyon) yapar.

Polarizasyon optik, sismoloji, radyo ve mikrodalga alanlarında gayet önemlidir. Özellikle lazerlerin, kablosuz iletimin ve optik fiberlerin telekomünikasyon ve radar uygulamalarında çok daha önemli yeri vardır.



Şekil 5.1. İki lineer dalganın toplamı şeklinde lineer polarize (üst), daireysel polarize (orta) ve eliptik polarize (alt) olmuş ışığın şematik gösterimi (Guimond ve Elmore, 2004)

5.1.1. Lineer polarize ışık

Şekil 5.1’de görüldüğü gibi birbirine dik ve faz farkı 0 olan ($\varphi = 0$) 2 düzlem dalga şeklinde ilerleyen ışıklardır. Elektrik alan vektörünün x ve y bileşenlerinin toplamı 45° ’de bir çizgi üstünde salınım yapar.

5.1.2. Dairesel polarize ışık

Birbirine dik ve faz farkı, $\varphi = \pi/2$ olan iki düzlem dalga şeklinde ilerleyen ışıklardır. Elektrik alan vektörünün x ve y bileşenlerinin toplamı sabit bir değer alır fakat ilerleme eksenin merkez etrafında dönmektedir. Şematik gösterimi şekil 5.1’te (ortada) verilmiştir.

5.1.3. Eliptik polarize ışık

Birbirine dik ve rastgele bir faz farkına sahip olan 2 düzlem dalga şeklinde ilerleyen ışıklardır. Elektrik alan vektörünün x ve y bileşenlerinin toplamı ve pozisyonu bu ışıklarda değişkendir (Guimond ve Elmore, 2004). Şekil 5.1’de (altta) eliptik polarize ışık gösterilmektedir.

5.2. Optik Alanların Mekanik Özellikleri

Elektromanyetik dalgaların mekanik özelliklerini Maxwell denklem setleriyle tanımlamak mümkündür. Bunun yanında enerji, lineer momentum ve açısal momentum gibi mekanik özelliklerin korunumu süreklilik eşitlikleriyle ifade edilebilmektedir. Bu eşitlikler niceliklerin süreç içindeki değişimini tanımlar ve bu yüzden yoğunluk terimi olarak ifade edilir. Lokal olarak korunumlu bir niceliğin ρ yoğunluğu için değişim oranı \mathbf{j} akı yoğunluğu ve q kaynak yoğunluğunun ıraksaması olarak ifade edilir.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = q \quad (5.1)$$

Optik açısal momentum için uygun süreklilik eşitliği toplam açısal momentumun lokal korunumunu verir. Fakat elektromanyetik alanların mekanik nicelikleri için süreklilik denklemleri oldukça girift şekilde birbirleriyle bağlantılıdır. Örneğin enerji akı yoğunluğu ve açısal momentum yoğunluğu doğrudan lineer momentum yoğunluğu ile bağlantılıdır.

5.2.1. Işığın spin ve yörüngesel açısai momentumu

Spin açısai momentum ve yörüngesel açısai momentumun birbirinden ayrılabilmesinin zor olduđu bilinmektedir. Spin açısai momentum ışığın optik polarizasyonu ile alakalıyken yörüngesel açısai momentum ışık ışınının faz yapısıyla bağlantılıdır. Bu terimler, toplam açısai momentumda birbirinden ayrılabilmesi için

$$\mathbf{J} = \int dV \epsilon_0 \mathbf{r} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (5.2)$$

şeklinde yazılabilir. Burada \mathbf{E} elektrik alan \mathbf{B} ise manyetik alan, \mathbf{L} toplam momentumun yörüngesel kısmı, \mathbf{S} ise spin kısmıdır. Spin açısai momentum ve yörüngesel açısai momentum ayrımını daha net şekilde yapabilmek için, Gauss teorisi kullanılarak, manyetik alan \mathbf{B} , vektör potansiyeli \mathbf{A} 'nın terimi olarak yazılıp düzenlenebilir.

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \epsilon_0 \int dV [E_i (\mathbf{r} \times \nabla) A_i + \mathbf{E} \times \mathbf{A} - \nabla_i (E_i \mathbf{r} \times \mathbf{A})] \\ &= \epsilon_0 \int dV [E_i (\mathbf{r} \times \nabla) A_i + \mathbf{E} \times \mathbf{A}] - \epsilon_0 \int (\mathbf{r} \times \mathbf{A}) \mathbf{E} \cdot d\mathbf{S} \end{aligned} \quad (5.3)$$

Burada i karşılık gelen vektörün kartezyen bileşenidir. Eğer alanlar yeterince hızlı düşerlerse yüzey integrali sıfır olacaktır ve spin ve yörüngesel kısımlar

$$\mathbf{L} = \epsilon_0 \int dV E_i (\mathbf{r} \times \nabla) A_i \quad (5.4)$$

$$\mathbf{S} = \epsilon_0 \int dV \mathbf{E} \times \mathbf{A} \quad (5.5)$$

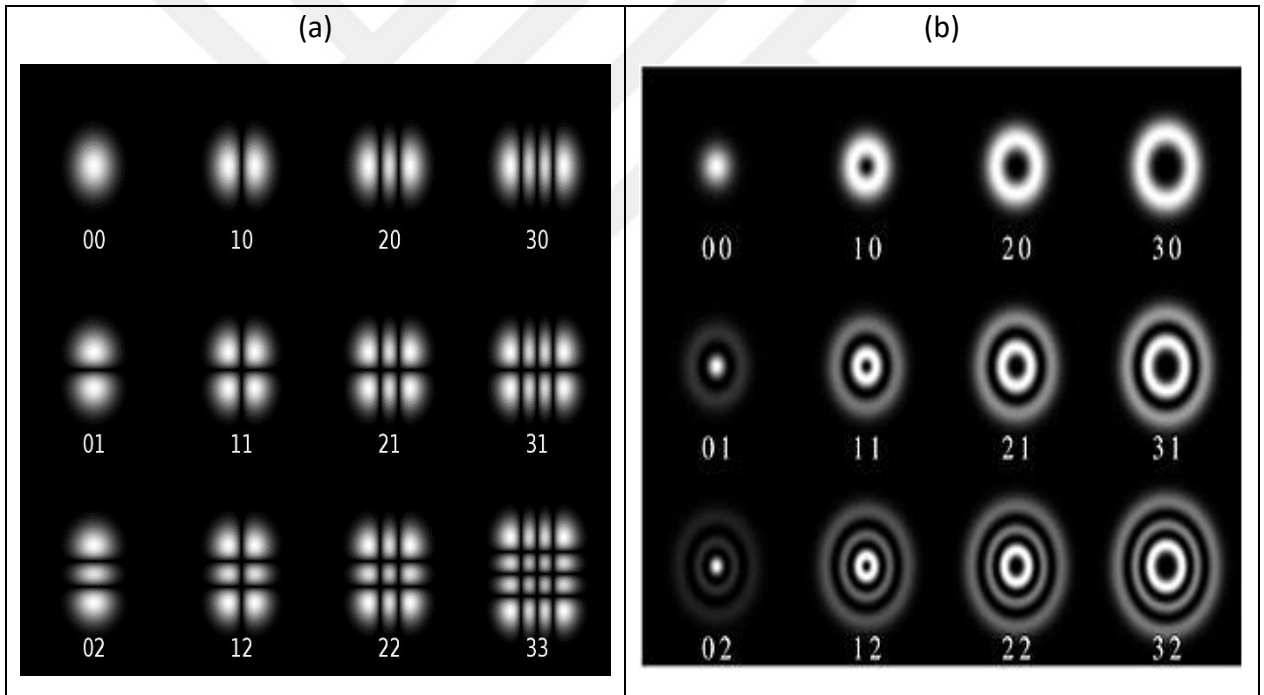
denklemleriyle ifade edilebileceklerdir (Andrews 2011).

5.3. Paraxial Işık Işımları

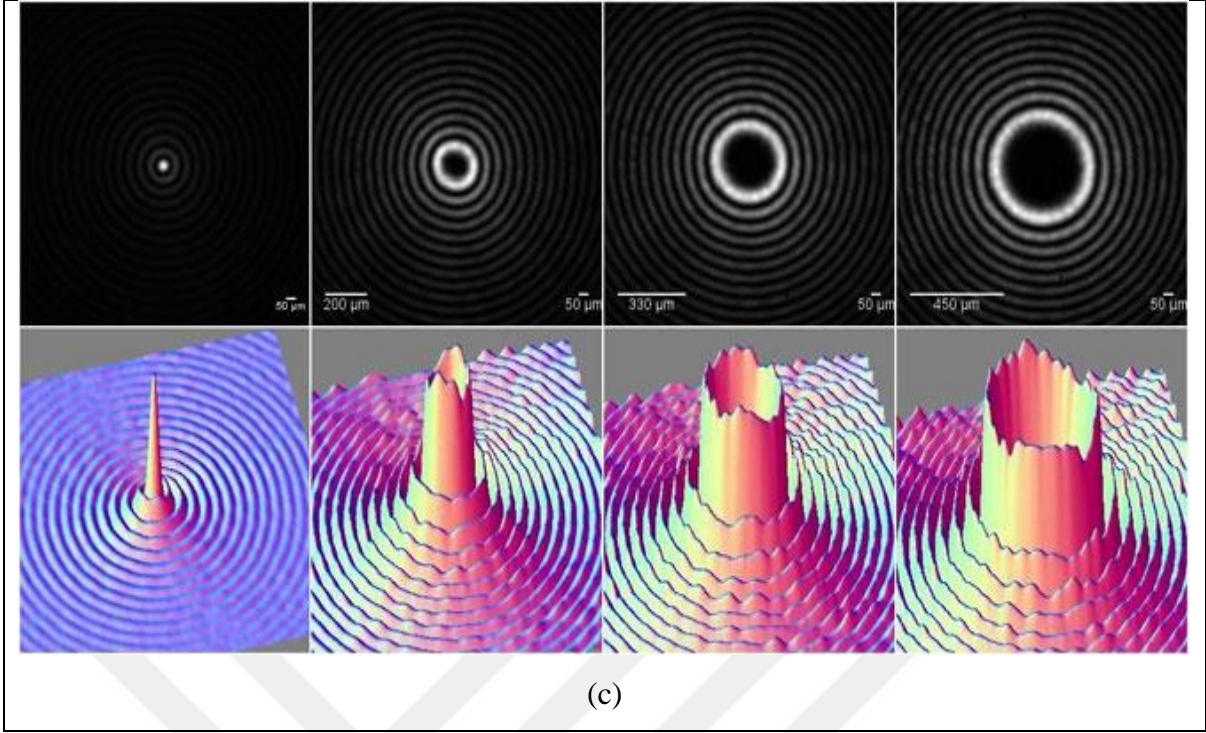
Geometrik optikte bir ışının optik eksenine göre eğimi çok çok küçükse (genellikle eğim açısı 1 radyandan küçük olan açılar olarak kabul edilir), bu ışınlar paraxial ışın olarak adlandırılır. Dalga

optiğinde ise paraxial bir ışık ışını ağırlıklı olarak ilerleme yönüne çok çok küçük açıyla ilerleyen düzlem dalgalarından oluşur.

Paraxial dalga eşitliklerinin çözümü lazer optiğinde iyi bilinmektedir. Özellikle dikdörtgen simetriye sahip Hermite-Gaussian ışınları fiziksel sistemlere yaygın olarak uygulanmaktadır. Fakat Hermite-Gaussian ışınları yörüngesel açısal momentum taşımamaktadırlar. Başka bir paraxial ışın olan Laguerre-Gaussian ışınları ise silindirik simetriye sahiptir ve yörüngesel açısal momentum taşıyabilmektedir. Yine yörüngesel açısal momentum taşıyan ışın olarak bilinen Bessel ışınları, hem paraxial hem de non-paraxial rejimdeki ışınlar için çözüm seti sunabilmektedir. Şekil 5.3'te Hermite-Gaussian (a), Laguerre-Gaussian (b) ve Bessel (c) ışınlarının şiddet dağılımı verilmiştir. Bu tez çalışmasında Laguerre-Gaussian tipi ışın kullanıldığından Hermite-Gaussian ve Bessel ışınları incelenmemiştir.



Şekil 5.2. Hermite-Gaussian (a), Laguerre-Gaussian (b) ışınları



Şekil 5.3. Hermite-Gaussian (a), Laguerre-Gaussian (b) ve Bessel (c) ışınlarının şiddet profilleri

5.3.1. Laguerre-Gaussian ışınları

Laguerre-Gaussian ışınları silindirik simetriye sahip ışınlardır ve yörüngesel açısal momentum taşırlar. Paraxial yaklaşım altında normalize olmuş bir Laguerre-Gaussian ışınının genel formu,

$$\begin{aligned}
 u_{mp}^{LG}(r, \phi, z) = & \frac{C_{mp}^{LG}}{\sqrt{\omega_0(z)}} \left(\frac{r\sqrt{2}}{\omega_0(z)} \right)^{|m_a|} \exp\left(-\frac{r^2}{\omega_0^2(z)}\right) L_p^{|m_a|} \left(\frac{2r^2}{\omega_0^2(z)} \right) \\
 & \times \exp\left[-ik \frac{r^2 z}{2(z_R^2 + z^2)}\right] \exp(im\phi) \exp[-i(2p + |m_a| + 1)\chi(z)] \quad (5.6)
 \end{aligned}$$

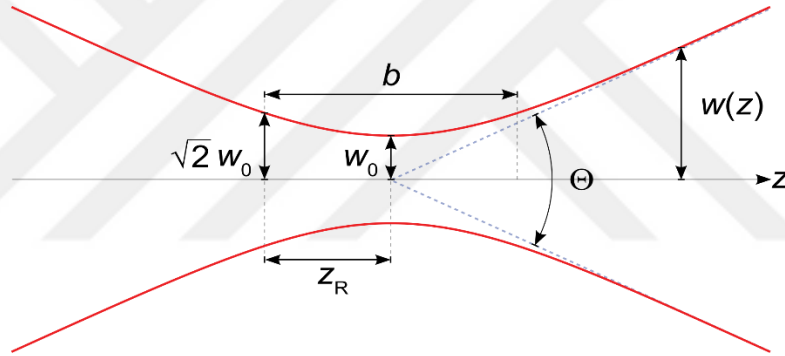
olarak verilir. Burada C_{mp}^{LG} normalizasyon sabitidir ve $C_{mp}^{LG} = \sqrt{2^{|m_a|+1} p! / [\pi(p + |m_a|)!]}$ şeklinde ifade edilir. m_a topolojik yük olarak ve ışının taşıdığı yörüngesel açısal momentumu $L = m_a \hbar$ şeklinde ifade eder. p radyal boğum olarak isimlendirilir ve Laguerre-Gaussian tipi ışınlarda radyal bağımlı ışık şiddetinin oluşturduğu halkaların sayısını verir. $L_p^{|m_a|}$ genelleştirilmiş Laguerre polinomu, k ise dalga vektörüdür. Işın geometrisi parametrelerinden olan $\chi(z)$ ise Gouy fazı olarak adlandırılır ve

$$\tan \chi = \frac{z}{z_R}$$

şeklindedir. ω_0 ışın sırtı olarak bilinir ve ışının odaklandığı noktadaki yarıçapıdır, ω ise alan genliğinin $1/e$ değerine düştüğü eksen değerinde ışının yarıçapıdır. Son olarak

$$z_R = \frac{\pi \omega_0^2}{\lambda}$$

şeklinde ifade edilir. λ dalga boyudur. Bu terim Rayleigh menzili olarak bilinir ve ışının yarıçapı ışın sırtı parametresinin $\sqrt{2}$ katı olduğu noktanın odaklama uzaklığına olan mesafesini verir. Bu noktada şiddet pik şiddetinin yarısıdır. Şekilde ışın geometrisi parametreleri gösterilmiştir. Şekildeki b değeri odaklama derinliği, Θ ise toplam açısal sapmayı ifade eder.



Şekil 5.4. Gaussian ışını şematik gösterimi

6. EK-2 GAUSSIAN 09

Gaussian 09 genellikle Kimya, Kimya Mühendisliği, Biyokimya, Fizik ve diğer bazı bilim alanlarında kullanılan elektronik yapı programıdır. Gaussian 09 kuantum mekaniğinin temel yasalarını kullanarak moleküllerin ve reaksiyonların enerji seviyelerini, moleküler yapısını, titreşim frekanslarını ve moleküler özelliklerini birçok kimyasal ortam değişkenine bağlı olarak tahmin edebilmektedir. Gaussian 09 modelleri, teorik olarak gözlemlenmesi zor ya da imkânsız olan kararlı yapılara ve bileşiklere uygulanabilmektedir.

Gaussian 09 programının belirgin özellikleri:

- Köşeleri kesmeden kesin, güvenilir ve tam bir model üretebilmektedir.
- Çok çeşitli metotlar barındırması sayesinde, periyodik tablonun tamamı için tüm kimyasal koşullara ve tüm problem boyutlarına uygulanabilmektedir.
- Tek işlemci, çoklu işlemci/çoklu çekirdek barındıran sistemlerde yüksek performans sağlayabilmektedir.
- Hesaplamaları yapılandırmak için izlenmesi gereken adımlar basit ve açıktır ve karmaşık teknikleri otomatik olarak yapılandırmaktadır. Bu özelliği kullanıcıya gereken hesaplama detayları hakkında tam kontrol sağlamaktadır.
- Gaussian 09 programının ürettiği sonuçlar, GaussView 5 yardımcı programı sayesinde görsel şekilde sunulabilmektedir.

6.1. Gaussian 09 Hesaplama Başlatma

Gaussian 09 programı, istenilen bir hesaplama başlatılmak için hesaplama yöntemini bildiren anahtar kelimeleri ve moleküler yapının geometrisini tarif eden koordinat bilgilerini içeren bir girdi dosyasına (bu dosya genellikle .gjf uzantılı olmaktadır.) ihtiyaç duymaktadır. Bu girdi dosyası Windows tabanlı bir sistemde GaussView 5 yardımcı programı kullanılarak basitçe hazırlanabilmektedir. Şekil 6.1'de GaussView 5 programı kullanılarak hazırlanan girdi dosyası örneğinin ekran görüntüsü verilmiştir. Girdi dosyası, GaussView 5 vasıtasıyla Gaussian 09 programına gönderilerek çalıştırılabileceği gibi bilgisayarda kurulu olan G09 programı simgesine çift tıklanıp girdi dosyası açılarak doğrudan da çalıştırılabilir.

```
Benzene - Not Defteri
Dosya Düzen Biçim Görünüm Yardım
%nprocshared=4
%chk=C:\Users\Fatih\Desktop\Benzene.chk
# b3pw91/6-31g guess=save geom=connectivity ginput pop=full

Title Card Required

0 1
C          -1.34703188    0.70776255    0.00000000
C           0.04812812    0.70776255    0.00000000
C           0.74566612    1.91551355    0.00000000
C           0.04801212    3.12402255   -0.00119900
C          -1.34681288    3.12394455   -0.00167800
C          -2.04441388    1.91573855   -0.00068200
H          -1.89679088   -0.24455445    0.00045000
H           0.59763612   -0.24475045    0.00131500
H           1.84534612    1.91559355    0.00063400
H           0.59821212    4.07616555   -0.00125800
H          -1.89693488    4.07622555   -0.00263100
H          -3.14401788    1.91592155   -0.00086200

1 2 1.5 6 1.5 7 1.0
2 3 1.5 8 1.0
3 4 1.5 9 1.0
4 5 1.5 10 1.0
5 6 1.5 11 1.0
6 12 1.0
7
8
9
10
11
12
```

Şekil 6.1. GaussView5 ile hazırlanmış Gaussian 09 girdi dosyası

Gaussian 09 programı, Linux tabanlı sistemlerde de çalışabilmektedir. Bu sistemlere uygun Gaussian 09 programı da mevcuttur. Linux tabanlı bir sistemde hesaplama başlatılmak için terminal uygulamasının kullanılması gerekmektedir. Hazırlanan girdi dosyası Linux tabanlı sisteme aktarıldıktan sonra terminalden girdi dosyasının olduğu dizine geçilerek aşağıdaki komut yardımıyla hesaplama başlatılabilir.

```
g09 < girdi_dosyası_ismi.gjf > sonuç_dosyası_ismi.out
```

Gaussian 09 programı, hesaplamaları bitirdikten sonra sonuçların yazıldığı bir sonuç dosyası (bu dosya genellikle .out ya da .log uzantılı olmaktadır.) ve isteğe bağlı olarak başka hesaplamalarda kullanılabilmesi için bilgisayarın anlayacağı dilde hesaplama adımlarını içeren bir kontrol

dosyası (.chk uzantılı) oluşturmaktadır. Bu dosyalar, GaussView 5 programında açılarak hesaplama sonuçları görsel şekilde incelenebilmektedir. Kontrol dosyası aynı yapıya ait farklı bir hesaplama yapılmak istenildiğinde, aynı hesapların tekrar yapılmasını engelleyerek hesaplamanın daha hızlı sonuçlanmasını sağlamaktadır. Bu yüzden bu dosyaların yedeklenmesi faydalı olabilmektedir.

6.2. Atomik Yörüngelerin Lineer Kombinasyonu

Atomlara ait en doğru dalga fonksiyonunu elde etmek için kullanılan en yaygın yöntem Hartree-Fock denklemleri olmasına rağmen bu denklemler moleküler hesaplar için kullanışlı olmamaktadır. Bunun altında yatan sebep bu denklemlerin moleküler yörünge dalga fonksiyonlarının ilk durum tahminlerini, matematiksel olarak geçerli bir yöntemle basit şekilde elde edememeleridir. Hartree-Fock denklemleriyle moleküllerin dalga fonksiyonlarını hesaplayabilmek için tekrarlayan karmaşık hesaplara ihtiyaç duyulmakla birlikte elde edilen dalga fonksiyonları elektron dağılımı hakkında nitelikli katkı sağlamamaktadır. Atomlar üzerinde yapılan dalga fonksiyonu hesapları temel olarak Schrödinger Denklemi'nin hidrojen atomu için çözümüne dayanmaktadır ve artan atom numarası dikkate alınarak iç elektronların dıştaki elektrona olan tarama etkisi hesaba katılır. Moleküllerde hidrojen atomunun diğer atomlar içindeki durumuna benzeyen bir hiyerarşi olmadığından, bu yaklaşım molekülü oluşturan atomların doğasından kaynaklanan moleküler özellikler için yeterli yorum yapamamaktadır. Bu sebeple de bu yöntem moleküller için uygun olmamaktadır.

1951 yılında Roothaan ve Hall bu problemlerin, moleküler yörüngelerin temel fonksiyonların lineer kombinasyonu olarak temsil edilebileceğini gösterdiler. Bu yöntemle dalga fonksiyonları,

$$\begin{aligned}
 \psi_1 &= c_{11}\phi_1 + c_{21}\phi_2 + c_{31}\phi_3 + \dots + c_{m1}\phi_m \\
 \psi_2 &= c_{12}\phi_1 + c_{22}\phi_2 + c_{32}\phi_3 + \dots + c_{m2}\phi_m \\
 \psi_3 &= c_{13}\phi_1 + c_{23}\phi_2 + c_{33}\phi_3 + \dots + c_{m3}\phi_m \\
 &\vdots \\
 \psi_m &= c_{1m}\phi_1 + c_{2m}\phi_2 + c_{3m}\phi_3 + \dots + c_{mm}\phi_m
 \end{aligned} \tag{6.1}$$

şeklinde yazılabilirler. Bu ifadeler daha kompakt şekilde yazılmak istenirse,

$$\psi_i = \sum_{k=1}^m c_{ki} \phi_k \quad i = 1, 2, 3, \dots, n \quad (n \text{ moleküler yörünge sayısı}) \quad (6.2)$$

şeklinde ifade edilebilir. Burada ϕ_s k . temel fonksiyonu, c_{si} , i . moleküler yörünge'nin s . temel fonksiyonunun daralma katsayısını, m ise her bir moleküler yörüngeye ait temel fonksiyon sayısını ifade etmektedir.

Fiziksel olarak temel kümeler, atom çevresindeki elektron dağılımını tanımlamaktadır. Atomik temel fonksiyonların kombinasyonları da moleküldeki elektron dağılımını bütün olarak vermektedir. Temel kümelerin slater fonksiyonları ve gaussian fonksiyonları gibi çeşitleri vardır.

6.3. Slater ve Gaussian Fonksiyonları

Moleküler yörüngeleri elde etmek için slater fonksiyonları ya da gaussian fonksiyonları kullanılmaktadır. Fakat daha hızlı olması ve hesaplama verimliliği açısından daha iyi olması nedeniyle Gaussian 09 gibi programlar genellikle gaussian tipi fonksiyonları kullanmaktadır.

6.3.1. Gaussian Fonksiyonları

Kuantum kimyasında tek gaussian fonksiyonu, ilkel gaussian fonksiyonu ya da ilkel GTY (Gaussian tipi yörünge) olarak adlandırılmaktadır. Bazı programlar kartezyen ilkel GTY kullanırken bazıları ise küresel ilkel GTY kullanmaktadır.

Denklem 6.2'de bulunan ϕ terimi Kartezyen ilkel GTY kullanılarak,

$$\phi_k(\mathbf{r}) = Nx^k y^l z^m e^{-\alpha r^2} = Nx^k y^l z^m e^{-\alpha((x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0)^2)} \quad (6.3)$$

şeklinde ifade edilmektedir. Burada N yörüngesel katsayı, α yörüngesel üssel katsayı, x, y ve z kartezyen koordinatlar, x_0, y_0 ve z_0 yapıdaki her bir atomun kartezyen koordinatı, k, l, m ise tam sayılardır ve ℓ açısal momentumunu, kontrol ederler. Küresel ilkel GTY ise,

$$\phi_k(\mathbf{r}) = NY_{\ell,m}(\theta, \phi) r^\ell e^{-\alpha r^2} = NY_{\ell,m}(\theta, \phi) r^\ell e^{-\alpha((x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0)^2)} \quad (6.4)$$

olarak ifade edilmektedir. Burada $Y_{\ell,m}$ küresel harmonikler, m ise açıl momentumun bileşenidir. $m = -\ell, \dots, \ell$ şeklindedir.

6.3.2. Kartezyen İkel Gaussian Fonksiyonları

Kartezyen ikel Gaussian fonksiyonları k, l, m sayılarına bağlı olarak açıl momentum kuantum sayısını kontrol etmektedirler. Bu sayılara bağlı olarak s, p ve d tipi fonksiyonlar olarak adlandırılırlar.

s tipi fonksiyonlar:

$$\ell = k + l + m = 0 \quad \{Ne^{-\alpha((x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0)^2)}\}$$

p tipi fonksiyonlar:

$$\ell = k + l + m = 1 \quad \begin{cases} (x - x_0)Ne^{-\alpha((x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0)^2)} \\ (y - y_0)Ne^{-\alpha((x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0)^2)} \\ (z - z_0)Ne^{-\alpha((x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0)^2)} \end{cases}$$

d tipi fonksiyonlar:

$$\ell = k + l + m = 2 \quad \begin{cases} (x - x_0)^2Ne^{-\alpha((x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0)^2)} \\ (y - y_0)^2Ne^{-\alpha((x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0)^2)} \\ (z - z_0)^2Ne^{-\alpha((x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0)^2)} \\ (x - x_0)(y - y_0)Ne^{-\alpha((x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0)^2)} \\ (x - x_0)(z - z_0)Ne^{-\alpha((x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0)^2)} \\ (y - y_0)(z - z_0)Ne^{-\alpha((x-x_0)^2+(y-y_0)^2+(z-z_0)^2)} \end{cases}$$

şeklinde ifade edilirler.

6.4. Gaussian 09 Sonuç Dosyasını Kullanarak Dalga Fonksiyonu Oluşturma

Gaussian 09 programı moleküler bir yapının elektronik yapısını açık şekilde vermekle birlikte, bir enerji seviyesine ait toplam dalga fonksiyonunu elde edebilmek için, hesaplama ait sonuç

dosyasından (.log ya da .out uzantılı dosya) elde edilen verilerle birkaç işlem yapılması gerekmektedir. Bu tez çalışmamızda, SAM ve/veya YAM taşıyan yapılandırılmış lazer ışınlarıyla moleküler yapı arasındaki etkileşim incelendiğinden, moleküler yapının her bir enerji seviyesine ait toplam dalga fonksiyonlarını elde etmek, hesaplamalar açısından önem arz etmektedir. Bu bölümde, Gaussian 09 programıyla yapılmış bir hesaplamının sonuç dosyası kullanılarak, dalga fonksiyonlarının nasıl elde edilebileceği adım adım anlatılacaktır.

Moleküler yapının herhangi bir enerji seviyesine ait toplam dalga fonksiyonunu elde edebilmek için, temel kümelere, yapının geometrisini veren koordinatlara ve moleküler yörüngesel katsayılarına ihtiyaç duyulmaktadır. Tüm bu ihtiyaç duyulan veriler hesaplamının girdi dosyasına *gfinput* ve *pop=full* anahtar kelimeleri eklenerek, hesaplamının sonuç dosyasına Gaussian 09 tarafından yazdırılabilmektedir.

Gaussian sonuç dosyasını kullanarak dalga fonksiyonlarını oluşturmak için denklem 6.2 ve denklem 6.3 kullanılacaktır. Denklem 6.3'te görülen N ve α katsayıları Gaussian sonuç dosyasının Basis Sets bölümünden elde edilebilmektedir. Şekil 6.2'de bir Gaussian 09 sonuç dosyasında yer alan her bir atoma ait temel kümeler (basis sets) gösterilmiştir. Şekilde görülen hesaplamada Benzene molekülü (6 karbon, 6 hidrojen) için 6-31G temel kümeleri kullanılmıştır.

```
BENZENE - Not Defteri
Dosya Düzen Biçim Görünüm Yardım
Standard basis: 6-31G (6D, 7F)
AO basis set in the form of general basis input (Overlap normalization):
  1 0
S 6 1.00      0.000000000000
   0.3047524880D+04  0.1834737132D-02
   0.4573695180D+03  0.1403732281D-01
   0.1039486850D+03  0.6884262226D-01
   0.2921015530D+02  0.2321844432D+00
   0.9286662960D+01  0.4679413484D+00
   0.3163926960D+01  0.3623119853D+00
SP 3 1.00      0.000000000000
   0.7868272350D+01 -0.1193324198D+00  0.6899906659D-01
   0.1881288540D+01 -0.1608541517D+00  0.3164239610D+00
   0.5442492580D+00  0.1143456438D+01  0.7443082909D+00
SP 1 1.00      0.000000000000
   0.1687144782D+00  0.1000000000D+01  0.1000000000D+01
****
```

Şekil 6.2. Gaussian 09 sonuç dosyası

Şekil 6.2’de, 1. atoma ait yörüngesel katsayılar görülmektedir. Bu örnekte 1. atom için 1S, 2S, 3S, 2P, 3P seviyeleri için katsayılar görülmektedir. Burada 1. sütun, 1. atom için 1S seviyesinde 6 yörüngesel üssel ve 6 yörüngesel katsayı olduğunu göstermektedir. Aynı şekilde 2S, 2P ve 3S, 3P seviyelerinde ise atomun sırasıyla 3’er ve 1’er katsayıya sahip olduğu görülmektedir.

Denklem 6.3’de geçen her bir atomun x_0, y_0, z_0 koordinatları, sonuç dosyasında “Standart orientation” diye ifade edilen bölümden elde edilebilmektedir. Şekil 6.3’de atomik koordinatların sonuç dosyasında yer aldığı bölümü gösteren ekran görüntüsü verilmiştir.

Son olarak ise denklem 2’de yer alan c daralma katsayıları da şekil 6.4’de gösterildiği gibi sonuç dosyasının “Molecular Orbital Coefficients:” olarak başlayan bölümünden elde edilebilmektedir. Bu katsayılar dikkatli incelendiğinde, temel kümelerdeki yörüngesel katsayılarla uyumlu oldukları görülmektedir. Tüm bu katsayılar ve atomik koordinatlar denklem 6.2 ve denklem 6.3’de yerlerine konularak her bir atomun, her bir moleküler yörüngesi için dalga fonksiyonu elde edilmektedir. Moleküler yapının tamamına ait her bir enerji seviyesi için toplam dalga fonksiyonu, denklem 6.2,

$$\Psi_{En} = \sum_{i=1}^{Na} \sum_{j=1}^{Ny} \sum_{k=1}^m c_{ki} \phi_k \quad En = 1, 2, \dots, Ne (Ne \text{ enerji seviyeleri}) \quad (6.5)$$

şeklinde genişletilerek elde edilebilir. Burada Na toplam atom sayısı, Ny ise her bir atoma ait toplam yörünge sayısıdır.

Standard orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms)		
			X	Y	Z
1	6	0	-0.176717	-1.383752	0.000005
2	6	0	1.110106	-0.844719	-0.000364
3	6	0	1.286853	0.538749	0.000194
4	6	0	0.176454	1.383870	-0.000075
5	6	0	-1.110031	0.844894	-0.000185
6	6	0	-1.286660	-0.539018	0.000252
7	1	0	-0.315850	-2.474525	0.000015
8	1	0	1.984957	-1.510960	0.000218
9	1	0	2.301110	0.963694	0.000537
10	1	0	0.316060	2.474652	0.000306
11	1	0	-1.985358	1.510684	-0.000405
12	1	0	-2.300948	-0.963691	0.000364

Şekil 6.3. Gaussian 09 sonuç dosyasında atomik koordinatların yer aldığı bölüm

Alpha virt. eigenvalues --							1.19441	1.22767	1.46139	1.46147	1.90729
Molecular Orbital Coefficients:							1	2	3	4	5
Eigenvalues --							0	0	0	0	0
1	1	C	1S	0.37054	0.58431	-0.11027	0.54375	-0.09455			
2			2S	0.01140	0.01976	-0.00374	0.02045	-0.00357			
3			2PX	-0.00005	0.00021	0.00101	-0.00004	-0.00064			
4			2PY	-0.00041	0.00006	-0.00015	0.00063	-0.00003			
5			2PZ	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000			
6			3S	-0.00442	-0.01158	0.00226	-0.02157	0.00386			
7			3PX	0.00012	-0.00077	-0.00326	-0.00002	0.00366			
8			3PY	0.00090	-0.00094	0.00066	-0.00513	0.00048			
9			3PZ	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000			
10	2	C	1S	0.38285	0.21927	-0.53333	-0.16135	0.54910			
11			2S	0.01177	0.00737	-0.01806	-0.00601	0.02072			
12			2PX	0.00029	0.00058	0.00030	0.00050	-0.00038			
13			2PY	-0.00030	0.00080	0.00022	0.00036	0.00054			
14			2PZ	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000			
15			3S	-0.00438	-0.00413	0.01033	0.00549	-0.02299			
16			3PX	-0.00069	-0.00176	-0.00139	-0.00281	0.00392			
17			3PY	0.00077	-0.00272	-0.00045	-0.00207	-0.00445			
18			3PZ	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000			

Şekil 6.4. Gaussian 09 sonuç dosyasında moleküler katsayıların yer aldığı bölüm

Tüm bu adımlar takip edilerek moleküler bir yapının her bir enerji seviyesi için dalga fonksiyonları elde edilebilmektedir. Şekil U'da bu yöntemlerle elde edilmiş Benzene molekülünün bir enerji seviyesine ait dalga fonksiyonunun, Mathematica Programı kullanılarak görselleştirilmiş hali ve aynı seviyeye ait dalga fonksiyonunun GaussView 5 Programıyla elde edilmiş görseli verilmiştir.

KAYNAKLAR

- Akgül S, Şahin M, Köksal K, 2012. A detailed investigation of the electronic properties of a multi-layer spherical quantum dot with a parabolic confinement. *Journal of Luminescence*, 132 (7): 1705-1713.
- Aktürk A, Sahin M, Koc F, Erdinc A, 2014. A detailed investigation of electronic and optical properties of the exciton, the biexciton and charged excitons in a multi-shell quantum dot nanocrystal. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47 (28): 285301.
- Al-Awfi, S. and Babiker, M, 2000. Atomic motion in hollow submicron circular cylinders. *Phys. Rev. A*, 61 (2): 033401-033413.
- Alivisatos A. P, 1996. Semiconductor clusters, nanocrystals, and quantum dots. *Science*, 271: 933-937.
- Allen L, Beijersbergen M W, Spreeuw R J C, & Woerdman J P, 1992. Orbital angular momentum of light and the transformation of Laguerre-Gaussian laser modes. *Physical Review A*, 45(11): 8185.
- Andersen M. F, Ryu C, Cladé P, Natarajan V, Vaziri A, Helmerson K, Phillips W. D, 2006. Quantized rotation of atoms from photons with orbital angular momentum. *Physical Review Letters*, 97 (17): 170406-170409.
- Andrews D. L, 2011. *Structured light and its applications: An introduction to phase-structured beams and nanoscale optical forces*. Academic Press, USA.
- Araoka F, Verbiest T, Clays K, Persoons A, 2005. Interactions of twisted light with chiral molecules: An experimental investigation. *Phys. Rev. A*, 71 (5): 055401-055403.
- Arvanitidis A. G, Tai T. B, Nguyen M. T, & Ceulemans A, 2014. Quantum rules for planar boron nanoclusters. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 16 (34): 18311-18318.

- Barde N P, Patil S D, Pravin M K, Pranav P B, 2015. Deriving time dependent Schrödinger equation from Wave-Mechanics, Schrödinger time independent equation, Classical and Hamilton-Jacobi equations. *Leonardo Electronic Journal of Practices and Technologies*, (26): 31-48.
- Barreiro S, Tabosa J. W. R, 2003. Generation of Light Carrying Orbital Angular Momentum via Induced Coherence Grating in Cold Atoms. *Phys. Rev. Lett.*, 90 (13): 133001-133005.
- Barth I, & Manz J, 2007. Electric ring currents in atomic orbitals and magnetic fields induced by short intense circularly polarized π laser pulses. *Physical Review A*, 75 (1): 012510.
- Barth I, 2009. Quantum control of electron and nuclear circulations, ring currents, and induced magnetic fields in atoms, ions, and molecules by circularly polarized laser pulses. Doctoral dissertation, Freie Universität, Berlin.
- Barth I, Bressler C, Koseki S, & Manz J, 2012. Strong nuclear ring currents and magnetic fields in pseudorotating OsH_4 molecules induced by circularly polarized laser pulses. *Chemistry—An Asian Journal*, 7 (6): 1261-1295.
- Barth I, Manz J, & Serrano-Andrés L, 2008. Quantum simulations of toroidal electric ring currents and magnetic fields in linear molecules induced by circularly polarized laser pulses. *Chemical Physics*, 347 (1): 263-271.
- Barth I, Manz J, Shigeta Y, & Yagi K, 2006. Unidirectional electronic ring current driven by a few cycle circularly polarized laser pulse: quantum model simulations for Mg-porphyrin. *Journal of the American Chemical Society*, 128 (21): 7043-7049.
- Baskoutas S, Paspalakis E, Terzis A. F, 2007. Electronic structure and nonlinear optical rectification in a quantum dot: effects of impurities and external electric field. *J. Phys.: Condens. Matter*, 19: 395024.
- Beijersbergen M W, Allen L, Van der Veen H E L O, & Woerdman J P, 1993. Astigmatic laser mode converters and transfer of orbital angular momentum. *Optics Communications*, 96(1-3): 123-132.

- Beth R A, 1936. Mechanical detection and measurement of the angular momentum of light. *Physical Review*, 50(2): 115.
- Bouchard F, Harris J, Mand H, Karimi E and Boyd R W, 2015. Experimental observation of subluminal light carrying orbital angular momentum in vacuum. In *Photonics North*, 2015 (pp. 1-1). IEEE.
- Bourennane M, Karlsson A, Björk G, Gisin N and Cerf N J, 2002. Quantum key distribution using multilevel encoding: security analysis. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 35(47): 10065.
- Brovelli S, Schaller R D, Crooker S A, García-Santamaría F, Chen Y, Viswanatha R, Hollingsworth J A, Klimov V I, 2011. Nano-engineered electron-hole exchange interaction controls exciton dynamics in core-shell semiconductor nanocrystals. *Nature communications*, 2: 280.
- Brüning R, Ndagano B, McLaren M, Schröter S, Kobelke J, Duparré M and Forbes A, 2016. Data transmission with twisted light through a free-space to fiber optical communication link. *Journal of Optics*, 18(3): 03LT01.
- Carpentier A V, Michinel H, Salgueiro J R, & Olivieri D, 2008. Making optical vortices with computer-generated holograms. *American Journal of Physics*, 76 (10): 916-921.
- Carrera J J, Tong X M, Chu Shih-I, 2006. Creation and control of a single coherent attosecond xuv pulse by few-cycle intense laser pulses. *Phys. Rev. A*, 74 (2): 023404-023411.
- Carter A R, Babiker M, Al-Amri M and Andrews D L, 2006. Generation of microscale current loops, atom rings, and cubic clusters using twisted optical molasses. *Physical Review A*, 73(2): 021401.
- Cavaliere A L, Müller N, Uphues T, Yakovlev V S, Baltuška A, Horvath B, Schmidt B, Blümel L, Holzwarth R, Hendel S. and Drescher M, 2007. Attosecond spectroscopy in condensed matter. *Nature*, 449(7165): 1029-1032.

- Chaibi A, Mafusire C and Forbes A, 2013. Propagation of orbital angular momentum carrying beams through a perturbing medium. *Journal of Optics*, 15(10): 105706.
- Chelkowski S, Yudin G L and Bandrauk A D, 2006. Observing electron motion in molecules. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 39(13): S409.
- Chen C. F, Ku C. T, Tai Y. H, Wei P. K, Lin H. N, Huang, C. B, 2015. Creating optical near-field orbital angular momentum in a gold metasurface. *Nano letters*, 15 (4): 2746-2750.
- Chen G, Martini R, Park S W, Bethea C G, Chen I C A, Grant P D, Dudek R and Liu H C, 2010. Optically induced fast wavelength modulation in a quantum cascade laser. *Applied Physics Letters*, 97(1): 011102.
- Chu J, Li X, Smithwick Q and Chu D, 2016. Coding/decoding two-dimensional images with orbital angular momentum of light. *Optics Letters*, 41(7): 1490-1493.
- Curtis J E, Koss B A, & Grier D G, 2002. Dynamic holographic optical tweezers. *Optics Communications*, 207 (1): 169-175.
- de Oliveira R A, Borba G C, Martins W S, Barreiro S, Felinto D and Tabosa J W R, 2015. Nonlinear optical memory for manipulation of orbital angular momentum of light. *Optics letters*, 40(21): 4939-4942.
- Delfyett P J, Florez L T, Stoffel N, Gmitter T, Andreadakis N C, Silberberg Y, Heritage J P, Alphonse G A, 1992. High-Power Ultrafast Laser Diodes. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 28 (10): 2203-2219.
- Demir H V, Nizamoglu S, Erdem T, Mutlugun E, Gaponik N, Eychmüller A, 2011. Quantum dot integrated LEDs using photonic and excitonic color conversion. *Nano Today*, 6 (6): 632-647.
- Dubertret B, Skourides P, Norris D J, Noireaux V, Brivanlou A H, Libchaber A, 2002. In vivo imaging of quantum dots encapsulated in phospholipid micelles. *Science*, 298 (5599): 1759-1762.

- Fariás M B, Quinteiro G F, & Tamborenea P I, 2013. Photoexcitation of graphene with twisted light. *The European Physical Journal B*, 86 (10): 1-9.
- Friedman D J, 2010. Progress and challenges for next-generation high-efficiency multijunction solar cells. *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, 14 (6): 131-138.
- Friese M E J, Nieminen T. A, Heckenberg N. R, Rubinsztein-Dunlop H, 1998. Optical alignment and spinning of laser-trapped microscopic particles. *Nature*, 394 (6691): 348-350.
- Gomes J A N F & Mallion R B, 2001. Aromaticity and ring currents. *Chemical reviews*, 101 (5): 1349-1384.
- Grier D G, 2003. A revolution in optical manipulation. *Nature*, 424 (6950): 810-816.
- Haddon R C, Schneemeyer L F, Waszczak J V, Glarum S H, Tycko R, Dabbagh G, Kortan A R, Muller A J, Mujsce A M, Rosseinsky M J, Zahurak S M, Makhija A V, Thiel F A, Raghavachari K, Cockayne E, Elser V, 1991. Experimental and theoretical determination of the magnetic susceptibility of C60 and C70. *Nature*, 350: 46.
- Harris, J, Grillo V, Mafakheri E, Gazzadi G C, Frabboni S, Boyd R W, Karimi E, 2015. Structured quantum waves. *Nature Physics*, 11 (8): 629-634.
- Heaviside O, 1894. *Electromagnetic theory*. Macmillan Co, London and New York.
- Ibrahim A H, Roux F S, McLaren M, Konrad T and Forbes A, 2013. Orbital-angular-momentum entanglement in turbulence. *Physical Review A*, 88(1): 012312.
- Ihn T, 2010. *Semiconductor Nanostructures, Quantum States and Electronic Transport*, Oxford University Press, USA.
- Ivanov S A, Piryatinski A, Nanda J, Tretiak S, Zavadil K R, Wallace W O, Werder D, Klimov V I, 2007. Type-II core/shell CdS/ZnSe nanocrystals: Synthesis, electronic structures, and spectroscopic properties. *J. Am. Chem. Soc.*, 129: 11708-11719.

- Kavruk A E, Sahin M, Atav Ü, 2014. A detailed investigation of electronic and intersubband optical properties of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}/\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ multi-shell quantum dots. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47 (29): 295302.
- Kavruk A E, Sahin M, Koc F, 2013. Linear and nonlinear optical properties of $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ multi-shell spherical quantum dot. *Journal of Applied Physics*, 114 (18): 183704.
- Keller U, 2003. Recent developments in compact ultrafast lasers. *Nature*, 424 (6950): 831-838.
- Kienberger R, Hentschel M, Uiberacker M, Spielmann C, Kitzler M, Scrinzi A, Wieland M, Westerwalbesloh T, Kleineberg U, Heinzmann U and Drescher M, 2002. Steering attosecond electron wave packets with light. *Science*, 297(5584): 1144-1148.
- Kittel C, 2004. *Introduction to solid state physics*. Wiley, USA.
- Koc F, Sahin M, 2014. Electronic and optical properties of single excitons and biexcitons in type-II quantum dot nanocrystals. *Journal of Applied Physics*, 115 (19): 193701.
- Koç F, Köksal K, 2015. Quantum size effect on the electronic transitions of GaAs/AlGaAs dots under twisted light. *Superlattices and Microstructures*, 85: 599-607.
- Koç F, & Köksal K, 2016. Electron motion control in mg-porphyrin via structured beam. *E-lse*, 11.
- Köksal K, & Koç F, 2016. Optical manipulation of photo-induced current in spherical semiconductor quantum dots by optical vortices. *Philosophical Magazine*, 96(25): 2686-2695.
- Köksal K, & Koç F, 2016. The effect of twisted light on the ring-shaped molecules: The manipulation of the photoinduced current and the magnetic moment by transferring spin and orbital angular momentum of high frequency light. *Computational and Theoretical Chemistry*, 1099: 203-208.

- Köksal K, Berakdar J, 2012. Charge-current generation in atomic systems induced by optical vortices. *Physical Review A*, 86 (6): 063812.
- Köksal K, Pavlyukh Y, & Berakdar J, 2011. Metal spherical nanostructures and dielectric response quantum-size effects in silver nanoclusters. *Bitlis Eren University Journal of Science and Technology*, 1 (1).
- Köksal K, Şahin M, 2012. The effect of dilute nitrogen on nonlinear optical properties of the InGaAsN/GaAs single quantum wells. *The European Physical Journal B*, 85 (10): 1-8.
- Kuhn T, Reiter D E, Quinteiro G F, 2015. Optical control of exciton and spin states in a quantum dot by excitation with twisted light. In *Journal of Physics: Conference Series*, 647 (1): 012012.
- Kumar A, Laux S. E, Stern F, 1990. Electron states in a GaAs quantum dot in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, 42 (6): 5166-5175.
- Levine I N, 2009. *Quantum chemistry (Vol. 6)*. Upper Saddle River, NJ: Pearson Prentice Hall.
- Li J J, Wang Y A, Guo W Z, Keay J C, Mishima T. D, Johnson M. B, Peng X. G, 2003. Large-scale synthesis of nearly monodisperse CdSe/CdS core/shell nanocrystals using air-stable reagents via successive ion layer adsorption and reaction. *J. Am. Chem. Soc.*, 125: 12567-12575.
- Liboff R L, 1987. *Introductory quantum mechanics*. Addison-Wesley, USA.
- Liu F, Yoo K M and Alfano R R, 1993. Ultrafast laser-pulse transmission and imaging through biological tissues. *Applied Optics*, 32(4): 554-558.
- Mair A, Vaziri A, Weihs G, & Zeilinger A, 2001. Entanglement of the orbital angular momentum states of photons. *Nature*, 412(6844): 313-316.
- Manasreh O, 2005, *Semiconductor Heterojunctions and Nanostructures*, The McGraw-Hill.

- Matos-Abiague A, Moskalkenko A S, & Berakdar J, 2005, September. Ultrafast charge current generation and control in low-dimensional electronic systems. In Congress on Optics and Optoelectronics. International Society for Optics and Photonics, s: 59581N-59581N.
- McWeeny R, 1958. Ring currents and proton magnetic resonance in aromatic molecules. *Molecular Physics*, 1 (4): 311-321.
- Mirhosseini M, Magaña-Loaiza O S, O'Sullivan M N, Rodenburg B, Malik M, Lavery M P, Padgett M J, Gauthier D J and Boyd R W, 2015. High-dimensional quantum cryptography with twisted light. *New Journal of Physics*, 17(3): 033033.
- Mlinar V, Zunger A, 2009. Internal electronic structure and fine structure of multiexcitons in semiconductor quantum dots. *Physical Review B*, 80 (20): 205311-205325.
- Molina-Terriza G, Torres J P and Torner L, 2007. Twisted photons. *Nature Physics*, 3(5): 305-310.
- Mondal P K, Deb B, & Majumder S, 2014. Angular momentum transfer in interaction of Laguerre-Gaussian beams with atoms and molecules. *Physical Review A*, 89 (6): 063418.
- Moskalkenko A S, Matos-Abiague A, & Berakdar J, 2007. Nonequilibrium charge dynamics of light-driven rings threaded by a magnetic flux. *EPL (Europhysics Letters)*, 78 (5): 57001.
- Muthukrishnan A, ve Stroud Jr C R, 2002. Entanglement of internal and external angular momenta of a single atom. *Journal of Optics B, Quantum and Semiclassical Optics*, 4(2): S73.
- Nemchinov A, Kirsanova M, Hewa-Kasakarage N N, Zamkov M, 2008. Synthesis and characterization of type II ZnSe/CdS core/shell nanocrystals. *J. Phys. Chem. C*, 112: 9301-9307.
- Nobusada K, & Yabana K, 2007. Photoinduced electric currents in ring-shaped molecules by circularly polarized laser pulses. *Physical Review A*, 75 (3): 032518.

- Omatsu T, Chujo K, Miyamoto K, Okida M, Nakamura K, Aoki N and Morita R, 2010. Metal microneedle fabrication using twisted light with spin. *Optics express*, 18(17): 17967-17973.
- O'neil A T, MacVicar I, Allen L, & Padgett M J, 2002. Intrinsic and extrinsic nature of the orbital angular momentum of a light beam. *Physical review letters*, 88 (5): 053601.
- Pasquarello A, Schlüter M, & Haddon R C, 1992. Ring currents in icosahedral C₆₀. *Science*, 257 (5077): 1660-1661.
- Pavlyukh Y, & Berakdar J, 2009. Angular electronic 'band structure' of molecules. *Chemical Physics Letters*, 468 (4): 313-318.
- Peeters F, 1995. Microscopic magnetic manipulation of electron motion. *Physics World*, 8 (10): 24.
- Pershin Y. V, & Piermarocchi C, 2005. Persistent and radiation-induced currents in distorted quantum rings. *Physical Review B*, 72 (12): 125348.
- Picón A, Benseny A, Mompert J, de Aldana J V, Plaja L, Calvo G. F, Roso L, 2010. Transferring orbital and spin angular momenta of light to atoms. *New Journal of Physics*, 12 (8): 083053.
- Picón A, Mompert J, de Aldana J V, Plaja L, Calvo G F, Roso L, 2010. Photoionization with orbital angular momentum beams. *Optics express*, 18 (4): 3660-3671.
- Polimeni A, Patané A, Henini M, Eaves L, Main P C, 1999. Temperature dependence of the optical properties of InAs/AlyGa1-yAs self-organized quantum dots. *Physical Review B*, 59 (7): 5064-5068.
- Pople J A, 1958. Molecular orbital theory of aromatic ring currents. *Molecular Physics*, 1 (2): 175-180.

- Pors B J, Monken C H, Eliel E R and Woerdman J P, 2011. Transport of orbital-angular-momentum entanglement through a turbulent atmosphere. *Optics express*, 19(7): 6671-6683.
- Poynting J H, 1884. On the transfer of energy in the electromagnetic field. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 175: 343-361.
- Poynting J H, 1909. The wave motion of a revolving shaft, and a suggestion as to the angular momentum in a beam of circularly polarised light. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 82(557): 560-567.
- Quinteiro G F and Kuhn, T., 2015, May. Spin Control in Charged Quantum Dots by Twisted Light. In *CLEO: QELS_Fundamental Science* (pp. FW1E-8). Optical Society of America.
- Quinteiro G F, & Kuhn T, 2014. Light-hole transitions in quantum dots: Realizing full control by highly focused optical-vortex beams. *Physical Review B*, 90 (11): 115401.
- Quinteiro G F, Berakdar, J, 2009. Electric currents induced by twisted light in quantum rings. *Optics Express*, 17 (22): 20465-20475.
- Quinteiro G F, Kuhn T, 2015. Spin Control in Charged Quantum Dots by Twisted Light. In *CLEO: QELS_Fundamental Science*. Optical Society of America, FW1E-8.
- Quinteiro G F, Lucero A O, Tamborenea P I, 2010. Electronic transitions in quantum dots and rings induced by inhomogeneous off-centered light beams. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 22 (50): 505802.
- Quinteiro G F, Reiter D E, Kuhn T, 2015. Formulation of the twisted-light–matter interaction at the phase singularity: The twisted-light gauge. *Physical Review A*, 91 (3): 033808.
- Quinteiro G F, Tamborenea P I and Berakdar J, 2011. Orbital and spin dynamics of intraband electrons in quantum rings driven by twisted light. *Optics express*, 19(27): 26733-26741.

- Quinteiro G F, Tamborenea P I, 2009. Electronic transitions in disk-shaped quantum dots induced by twisted light. *Phys. Rev. B*, 79 (15): 155450-155456.
- Quinteiro G F, Tamborenea P I, 2009. Theory of the optical absorption of light carrying orbital angular momentum by semiconductors. *EPL (Europhysics Letters)*, 85(4): 47001.
- Reiss P, Protière M, Li L, 2009. Core/shell semiconductor nanocrystals. *Small*, 5 (2): 154-168.
- Remacle F and Levine R D, 2006. An electronic time scale in chemistry. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 103(18): 6793-6798.
- Ren Y, Huang H, Xie G, Ahmed N, Yan Y, Erkmen B I, Chandrasekaran N, Lavery M P, Steinhoff N K, Tur M and Dolinar S, 2013. Atmospheric turbulence effects on the performance of a free space optical link employing orbital angular momentum multiplexing. *Optics letters*, 38(20): 4062-4065.
- Rodenburg B, Magaña-Loaiza O S, Mirhosseini M, Taherirostami P, Chen C and Boyd R W, 2015. Multiplexing Free-Space Channels using Twisted Light. arXiv preprint arXiv:1512.08547.
- Rogach A L, Kornowski A, Gao M, Eychmüller A, Weller H, 1999. Synthesis and characterization of a size series of extremely small thiol-stabilized CdSe nanocrystals. *Journal of Physical Chemistry B*, 103 (16): 3065-3069.
- Sbierski B, Quinteiro G F, & Tamborenea P I, 2013. Twisted-light-induced intersubband transitions in quantum wells at normal incidence. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 25 (38): 385301.
- Schmiegelow C T, Schulz J, Kaufmann H, Ruster T, Poschinger U G, & Schmidt-Kaler F, 2015. Excitation of an Atomic Transition with a Vortex Laser Beam. arXiv preprint arXiv:1511.07206.
- Scholz-Marggraf H M, Fritzsche S, Serbo V G, Afanasev A and Surzhykov A, 2014. Absorption of twisted light by hydrogenlike atoms. *Physical Review A*, 90(1): 013425.

- Shigematsu K, Yamane K, Morita R, Toda Y, 2016. Coherent dynamics of exciton orbital angular momentum transferred by optical vortex pulses. *Physical Review B*, 93 (4): 045205.
- Soncini A, & Fowler P W, 2004. Non-linear ring currents: effect of strong magnetic fields on π -electron circulation. *Chemical physics letters*, 400 (1): 213-220.
- Surzhykov A, Seipt D, Serbo V G and Fritzsche S, 2015. Interaction of twisted light with many-electron atoms and ions. *Physical Review A*, 91(1): 013403.
- Şahin M, Köksal K, 2012. The linear optical properties of a multi-shell spherical quantum dot of a parabolic confinement for cases with and without a hydrogenic impurity. *Semiconductor Science and Technology*, 27 (12): 125011.
- Tai T B, Havenith R W, Teunissen J L, Dok A R, Hallaert S D, Nguyen M T, & Ceulemans A, 2013. Particle on a Boron Disk: Ring Currents and Disk Aromaticity in B₂₀₂-. *Inorganic chemistry*, 52 (18): 10595-10600.
- Torres J P, 2012. Optical communications: Multiplexing twisted light. *Nature Photonics*, 6(7): 420-422.
- Tyler G A and Boyd R W, 2009. Influence of atmospheric turbulence on the propagation of quantum states of light carrying orbital angular momentum. *Optics letters*, 34(2): 142-144.
- Uiberacker M, Uphues T, Schultze M, Verhoef A J, Yakovlev V, Kling M F, Rauschenberger J, Kabachnik N M, Schröder H, Lezius M and Kompa K L, 2007. Attosecond real-time observation of electron tunnelling in atoms. *Nature*, 446(7136): 627-632.
- Wätzel J, Berakdar J, 2016. Centrifugal photovoltaic and photogalvanic effects driven by structured light. *Scientific reports*, 6.
- Wätzel J, Moskalenko A S, Berakdar J, 2012. Photovoltaic effect of light carrying orbital angular momentum on a semiconducting stripe. *Optics express*, 20 (25): 27792-27799.

Wei S H, Zhang S B, Zunger A, 2000. First-principles calculation of band offsets, optical bowings, and defects in CdS, CdSe, CdTe, and their alloys. *Journal of applied Physics*, 87 (3): 1304-1311.

Zeng Q, Kong X, Sun Y, Zhang Y, Tu L, Zhao J, Zhang H, 2008. Synthesis and optical properties of type II CdTe/CdS core/shell quantum dots in aqueous solution via successive ion layer adsorption and reaction. *J. Phys. Chem. C*, 112: 8587-8593.



ÖZGEÇMİŞ

1985 yılında Bitlis/Tatvan'da doğdum. İlköğretimi Tatvan Tuğ İlköğretim Okulu'nda, ortaokulu Tatvan Anadolu Lisesi'nde ve liseyi Nizip Hasan Çapan Anadolu Lisesi'nde tamamladım. 2005 yılında kazandığım Gaziantep Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Fizik Mühendisliği Bölümü'nden 2010 yılında mezun oldum. Ekim 2010'da Selçuk Üniversitesi'nde Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda yüksek lisansa başladım. Ocak 2013'te yüksek lisansımı tamamladım. Şubat 2013'te Selçuk Üniversitesi'nde Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda doktora başladım. Eylül 2013'de Bitlis Eren Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'na yatay geçiş yaparak Aralık 2016'da doktoramı tamamladım. Yabancı dilim İngilizce'dir

Fatih KOÇ

