

FİZİK ANABİLİM DALI
YÜKSEK LİSANS TEZİ

MOLEKÜLER NANOYAPILARA AİT ELEKTRODİNAMİK ÖZELLİKLERİN
ULTRAHIZLI-BÜKÜMLÜ LAZER IŞINLARI İLE KONTROLÜ

Hazırlayan
Mehmet ÖNCAN

Danışman
Doç. Dr. Koray KÖKSAL

Jüri Üyeleri
Prof. Dr. Ömer ŞAHİN
Doç. Dr. Koray KÖKSAL
Yrd. Doç. Dr. Fatih Ahmet ÇELİK

EYLÜL 2015

TEZ ONAYI

Mehmet ÖNCAN tarafından hazırlanan “**Moleküler Nanoyapılara Ait Elektrodinamik Özelliklerin Ultrahızlı-Bükümlü Lazer Işınları ile Kontrolü**” adlı tez çalışması 08/09/2015 tarihinde yapılan sınavla aşağıdaki jüri tarafından oy birliği/oy çokluğu ile Bitlis Eren Üniversitesi Fizik Anabilim Dalı’nda YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

Prof. Dr. Ömer ŞAHİN

(Başkan)

Doç. Dr. Koray KÖKSAL

(Danışman)

Yrd. Doç. Dr. Fatih Ahmet ÇELİK

(Üye)

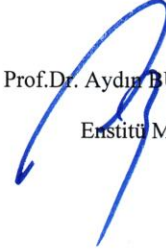
İmza



Bu tezin kabulü, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu’nun 27/10/15 gün ve 29/05 Sayılı kararı ile onaylanmıştır.

Prof.Dr. Aydın BÜYÜKSARAÇ

Enstitü Müdürü



ÖZET

MOLEKÜLER NANOYAPILARA AİT ELEKTRODİNAMİK ÖZELLİKLERİN ULTRAHIZLI-BÜKÜMLÜ LAZER IŞINLARI İLE KONTROLÜ

Mehmet ÖNCAN

Yüksek Lisans Tezi

Bitlis Eren Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Koray KÖKSAL

Eylül 2015, 59 sayfa

Nano ölçekteki (<100 nm) malzemeler üzerine yapılan çalışmaların en büyük amacı, bu malzemelerin üretilmesi, ortaya çıkan kuantum mekaniksel özelliklerin anlaşılması ve bu özelliklerin kontrol edilebilmesidir. Ayrıca nanomalzemelerin üretimi esnasında yapısal özelliklerini atomsal seviyede değiştirmek ve daha işlevsel hale getirmek de yeni teknolojilere kapı açacaktır. Üretimi kolay ve ucuz olan ve endüstriyel kullanımı olan nanomalzemelerin kuantum mekaniksel özelliklerinin incelenmesi nanoteknolojinin başlıca araştırma alanlarından biridir. Maliyeti ucuz, kimyasal olarak üretilen ve endüstriyel alanda bir çok kullanımı olan iki organik nanomalzeme $C_{20}H_{20}$ ve benzen (C_6H_6). Bu moleküller kimyasal olarak durağandır ve serbest elektronlara (valans elektronları) sahiptir. Nano ölçekteki malzemeler, içerisinde bulundukları serbest elektronlardan dolayı bir kuantum kuyusu gibi davranırlar. Serbest elektronlar belli enerji seviyelerinde yer alırlar ve bir dış kaynaktan uygun enerji aldıklarında bir üst seviyeye geçiş yaparlar. Manyetik alan veya elektrik alan, sistemde yer alan elektronların bir üst enerji seviyesine geçmesini sağlarken, elektromanyetik dalgalar da bunu sağlayabilirler. Bu çalışmada ise uygun frekansa sahip bir elektromanyetik dalganın moleküllerde yer alan serbest elektronlarla nasıl etkileştiği incelenecektir. Düzlemsel dalga özelliğine sahip, çizgisel ve dairesel kutuplanmış elektromanyetik dalgaların benzen ve fulleren üzerindeki etkileri başka çalışmalarda incelenmiştir. Bu çalışmada optiksel vorteks (bükümlü ışık) olarak adlandırılan, açısal momentuma ve yüksek hızda atımlara

sahip elektromanyetik dalgaların etkileri incelenecektir. Burada cevabını bulmak istediğimiz soru, bükümlü lazer ışınlarının uygun frekansta ve yüksek atımlarla molekül üzerine gönderildiğinde, molekül içerisindeki serbest elektrona açısal momentumun transfer edilip edilmediğidir. Böyle bir transfer elektronun, seçilmiş manyetik seviyelere yükseltgenmesini ve elektronun molekül etrafında net bir dönüşe sahip olmasını sağlayacaktır. Net dönüşe sahip olan elektron ise net bir manyetik alana sebebiyet verecektir. Işığın saniyedeki atım sayısının, frekansının, açısal momentum değerinin değişmesiyle, elde edilecek manyetik alan şiddeti ve yönelimi değiştirilebilecektir. Manyetik alan değişimi, molekülde uygun bir yere yerleştirilecek manyetik bir katkı atomunda yer alan elektronun spin yöneliminin de kontrol edilmesini sağlayacaktır.

Netice olarak hedefimiz, benzen ve fulleren nanomolekülleri üzerine gönderilen lazer ışını ile kontrol edilebilir bir manyetik alan üretmek ve bu manyetik alanla herhangi bir elektronun spin yönelimini kontrol etmek olacaktır. Bu hedef doğrultusunda ilk olarak moleküllerin elektronik yapılarının hesaplanması için Gaussian 09 programı ve model potansiyel hesabı kullanılmıştır. Daha sonra Gaussian 09 programı ile dalga fonksiyonları elde edilmiştir ve nasıl elde edildiği ayrıntılı bir şekilde gösterilmiştir.

Anahtar Kelimeler : Model Potansiyel, Moleküler Yapı, Açısal Momentum, Gaussian 09, Spin Kontrolü

ABSTRACT

MANIPULATION OF THE ELECTRODYNAMIC PROPERTIES OF THE MOLECULAR NANOSTRUCTURES BY ULTRAFAST TWISTED LASER BEAMS

Mehmet ÖNCAN

Master Thesis

Bitlis Eren University Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Koray KÖKSAL

September 2015, 59 pages

The ultimate aims of studies on materials at nanoscale (<100 nm) are manufacturing of these materials, understanding and manipulation of quantum mechanical properties. Moreover, changing the structural properties of nanomaterials at atomic level and making them more functional during the synthesis will also gain advantage for new technologies. Investigation of quantum mechanical properties of nanomaterials which are industrial, cheap and easily producible is one of the primary research fields of nanotechnology. $C_{20}H_{20}$ and benzene (C_6H_6) are two organic materials which are low-cost, can be produced by chemical methods and have several usage fields in industrial area. These molecules are chemically stable and have free electrons (valance electrons). Due to the free electrons, materials at nanoscale behave as a quantum well. Free electrons occupy only certain discrete energy levels, and they are promoted to higher energy levels when they obtain a convenient energy from an external source. Not only magnetic field or electric field but also electromagnetic waves can lead to excitation of electron into a higher energy level. In this study, it will be also investigated how an electromagnetic wave having a proper frequency interacts with free electrons located in molecules. Effects of electromagnetic waves, which are linearly or circularly polarized and have plane wave characteristics, on benzene and fullerene have been investigated in previous studies. In this study, effects of electromagnetic waves called as optical vortex (twisted light) which is carrying

orbital momentum and, sending by ultrafast pulses, will be investigated. Here, we want to know whether angular momentum transfer of laser beams can be transferred to the free electrons inside molecule. Such a transition, will provide jumping the electrons to selected magnetic levels and obtaining a net circulation of electrons around the molecule. Circulating electron will cause a net magnetic field. When frequency, orbital momentum and number of pulse per second of light are changed, magnetic field strength and orientation will also be able to change. Change in magnetic field will also provide us to manipulate spin orientation of electron belonged to a magnetic doped which is located in suitable coordinate in molecule.

In conclusion, our aim is to produce a magnetic field which can be manipulated by laser beam which is applied to nanomolecules such as benzene and fullerene and manipulating spin orientation of any electron with this magnetic field. In this regard, firstly, Gaussian 09 program and model potential method are used for calculation of molecular electronic structures. Finally, wave function of benzene is constructed using Gaussian 09 program and has been thoroughly demonstrated how it has been obtained.

Keywords: Model Potential, Molecular Structure, Angular Momentum, Gaussian 09, Spin Manipulation

TEŞEKKÜR

Bu çalışma Bitlis Eren Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsüne yüksek lisans tezi olarak sunulmuştur.

Bu çalışmayı gerçekleştirebilmem için bana imkan sağlayıp, çalışmamın her aşamasında yol gösteren, teşvik ve yardımlarını esirgemeyen, elindeki tüm imkanları sınırsız olarak sunan değerli danışman hocam Doç. Dr. Koray KÖKSAL'a teşekkürlerimi sunmayı zevkli bir görev sayarım.

Çalışmam boyunca yardımlarını esirgemeyen çalışma arkadaşlarım Fatih KOÇ ve İbrahim Halil BAYDİLEK'e teşekkürlerimi sunarım.

Ayrıca bu çalışma Türkiye Bilimsel ve Teknolojik Araştırma Kurumu (TÜBİTAK) tarafından 112T991 nolu proje kapsamında desteklenmiştir. TÜBİTAK'a katkılarından dolayı teşekkür ederim.

Ve Ailem... Hayatımın her aşamasında olduğu gibi bu aşamada da beni yalnız bırakmayan, maddi ve manevi desteklerini her zaman hissettiğim annem, babam ve kardeşlerime sonsuz teşekkürler...

İÇİNDEKİLER DİZİNİ

Sayfa

ÖZET	
i	
ABSTRACT	
iv	
TEŞEKKÜR	
vi	
İÇİNDEKİLER DİZİNİ	
vii	
ŞEKİLLER DİZİNİ	x
ÇİZELGELER DİZİNİ	
xiii	
SİMGELER DİZİNİ	
xiv	
1.GİRİŞ	
1	
1.1. Benzen Molekülü	
2	
1.2. Fullerenler ve C ₂₀ H ₂₀ Molekülü	
3	
1.3. Işığın Kutuplanması	
5	
1.3.1. Lineer kutuplanmış ışık	
6	
1.3.2. Dairesel kutuplanmış ışık	
6	
1.3.3. Elipsel kutuplanmış ışık	
7	

1.4. Bükümlü Işık	7
1.4.1. Laguerre-Gaussian Işımları ve Yörüngesel Açısıl Momentum	8
1.4.2. Optik Girdapın Yapısı	9
1.4.3. Bessel ve Mathieu Işımları	10
1.4.4. Hologram (Bükümlü Işığın Oluşturulması)	12
1.5. Işık Madde Etkileşimi	13
1.6. Model Potansiyel	14
1.7. Moleküler Dinamik	15
1.8. Femtosaniye (Ultrahız) Bilimi	16
1.9. Çalışmanın Amacı ve Önemi	17
1.10. Çalışmanın Planı	19
2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR	19
3. MATERYAL VE YÖNTEM	21
3.1. Model Potansiyel	22
3.2. Kuantum Mekaniksel Yöntemler	23

3.2.1. Hartree-Fock modelleri	23
3.2.1.1. Hartree-Fock yaklaşımı	23
3.2.1.2. Temel Kümeler “Basis Functions/Basis Sets”	24
3.2.2. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)	25
3.3. Bükümlü Işık	26
3.4. Işık-Madde Etkileşim Terimi	27
3.5. Ultrahızlı Yük ve Spin Dinamiği	27
4. BULGULAR	28
4.1. Küresel Simetrik Molekülde Bükümlü Işıkla Manyetik Moment İndüklenmesi	29
4.1.1. Model Potansiyel İle Elektronik Yapı Hesabı	29
4.1.2. Gaussian 09 ile elektronik yapı hesabı	33
4.1.3. İndüklenmiş Akım ve Manyetik Moment.....	35
4.2. Dairesel Simetrik Molekülde Bükümlü Işıkla Manyetik Moment İndüklenmesi.....	39
4.2.1. Sınırlandırılmış Gaussian Tipi Orbitaler (CGTO’S) ve Temel Kümeler	39
4.2.2. Benzen Molekülünde Elektronik Yapı ve Elektronik Geçişler	43

4.2.3. İndüklenmiş Akım ve Manyetik Moment	49
5. SONUÇ	54
KAYNAKLAR	55
ÖZGEÇMİŞ	60

ŞEKİLLER DİZİNİ

ŞEKİL

Sayfa

1.1. Koordinatları Gaussian 09 programına verilen benzen molekülünün GaussView 5.0 programı ile gösterimi	2
1.2. Fulleren (C60)	4
1.3. C20H20 molekülünün 3D konformasyon yapısındaki küresel şekli	5
1.4. Elektromanyetik dalgaın yayılma şekli	5
1.5. Lineer kutuplanma (üst), dairesel kutuplanma (orta) ve elipsel kutuplanma (alt) olmuş ışığın şematik gösterimi [2]	6
1.6. Düz bir zemin üzerine gönderilen bükümlü ışığın düzlemdeki yansıması [6]	8
1.7. Hermit-Gaussian (sol) ve Laguerre-Gaussian (sağ) modlarının faz yapılarına ve yoğunluklarına örnek. Işık sırtından (Beam waist) Rayleigh aralığına eşit bir uzaklıkta çizilmiştir [14]	11
1.8. $\exp(il\phi)$ faz yapısına ve Laguerre-Gaussian modlarının yoğunluk profiline karşılık gelen sarmal faz cephesi [15]	11
1.9. Gaussian demetindeki bir ışığın orbital açısal momentumunun üretiminin şematik gösterimi [16]	12
4.1. Denklem 4.6'da verilmiş olan potansiyel formülüne göre çizilmiş gaussian potansiyeli. Burada potansiyel derinliği $\gamma = 50.0$ Hartree ve potansiyel genişliği $\lambda = 2$ a. u. olarak	

verilmiştir. Yarıçap $r_0 = 5$ a. u. olarak verilmiştir. Bu parametreler C_{60} molekülünün gerçek değerleri ile uyumlu olacak şekilde belirlenmiştir	31
4.2. Denklem 4.6 (mavi) ve 4.7 (kırmızı)'de verilmiş olan potansiyel formüllerine göre çizilmiş radyal potansiyeller. Denklem 4.7'ye ait parametreler denklem 4.6 için elde edilecek potansiyel ile uyumlu olacak şekilde düzenlenmiştir	32
4.3. Gausview programında görüntülenmiş $C_{20}H_{20}$ molekülü. Yapı optimize edilmiş olup, toplamda 70 işgal edilmiş enerji seviyesine sahiptir	33
4.4. $C_{20}H_{20}$ molekülüne ait işgal edilmiş seviyelere ait enerjiler ve bu seviyelere ait Gaussian'da B3PW91/6-311G metodu ile hesaplanmış ve Gaussview ile çizilmiş bazı moleküler orbitaller	34
4.5. $C_{20}H_{20}$ molekülüne ait işgal edilmemiş seviyelere ait enerjiler ve bu seviyelere ait Gaussian'da B3PW91/6-311G metodu ile hesaplanmış ve Gaussview ile çizilmiş bazı moleküler orbitaller.	35
4.6. Benzen molekülüne ait lokalize seviyelere ait enerjiler ve bu seviyelere ait Gaussian'da B3LYP/3-21G metodu ile hesaplanmış ve Gaussview ile çizilmiş moleküler orbitaller soldaki şekillerde gösterilmiştir. Sağdaki şekiller ise "checkpoint" dosyasındaki dalga fonksiyonu bilgisinin Mathematica'da işlenmesi ve iki boyutta çizilmesi ile elde edilmiş moleküler orbital şekilleridir.	45
4.7. Benzen molekülüne ait σ ve π orbitalleri ve bunlara ait enerji değerleri. Benzen molekülü çizgisel polarize olmuş bir ışığa maruz kaldığında, elektron geçişleri π orbitalleri'nden gerçekleşir	46
4.8. Benzen molekülüne ait σ ve π orbitalleri ve bunlara ait enerji değerleri. Benzen molekülü çizgisel polarize olmuş bir ışığa maruz kaldığında, elektron geçişleri π orbitalleri'nden gerçekleşir.	47
4.9. Lineer kutuplanmış ışığa maruz bırakılmış benzen molekülünün enerji-soğurma değişiminin Gaussian 09 ile elde edilmiş şekli.	48
4.10. Benzen molekülüne ait enerji değerlerinin (DFT, B3LYP/3-21G ile elde edilmiştir) orbital kuantum sayısına göre dizilişleri. Bu değerler orbital şekillerine ve enerjilerin ortak değeri dikkate alınarak düzenlenmiştir. Siyah küre sembolleri radyal kuantum sayısı, $n=1$ değerine ait bandı göstermektedir. Siyah noktalar ile mavi üçgenler $n = 2$ ve $n = 2$ bandını göstermektedir. Enerji değerlerinin yörünge kuantum sayısının bağlı artış eğrisi yaklaşık parabolik bir eğri görünümündedir ki bu da beklenen bir sonuçtur. Ayrıca boş daire	

- sembolleri π orbitallerini göstermektedir. Enerjilere karşılık gelen moleküler orbital şekilleri de grafiğe eklenmiştir.....49
- 4.11. Dairesel polarize benzen üzerine gönderilmiş bir lazer ışının meydana getirdiği akım yoğunluğu ve akımın yönü görülmektedir. Gönderilen ışıklardan biri sol yönlü dairesel polarize ışık iken, diğeri sağ yönlüdür. “x” ve “y” yönlü lineer polarize ışıkların oluşturduğu akım yoğunluğu sıfırdır. Akım yoğunluğu için en yüksek değer $15.0 \mu A \cdot a.u.^2$ 'dir
-51
- 4.12. Dairesel polarize benzen üzerine gönderilmiş bir lazer ışının meydana getirdiği akım yoğunluğu ve akımın yönü üç boyutta görülmektedir. Akım değeri ise $0.6 \mu A$ seviyesindedir
-51
- 4.13. Bükümlü ışıkların $m_a = 0,1,2$ ve $p = 0,1,2$ değerleri için lazer ışınının uzaysal profili. Yatay eksen x, dikey eksen y yönünü göstermektedir. Değerlerin birimi atomik Bohr yarıçapıdır(a.u.). w_0 ile gösterilen maksimum iki ışık yoğunluğu arasındaki fark (beam waist) burada 5 a.u. kadardır
-52
- 4.14. Dairesel polarize bükümlü ışıkların $m_a = 0$ ve $p = 0,1,2$ değerleri için benzen üzerinde oluşturdukları akım yoğunluğunun gösterimi. Değerler a.u. cinsinden ifade edilmiştir.....52
- 4.15. Dairesel polarize bükümlü ışıkların $m_a = 1$ (sol); $m_a = 2$ (sağ) ve $p = 0$ değerleri için benzen üzerinde oluşturdukları akım yoğunluğunun gösterimi. Değerler a.u. cinsinden ifade edilmiştir.....53

ÇİZELGELER DİZİNİ

ÇİZELGE

Sayfa

4.1. Atomik orbitallere karşılık gelen fonksiyonlar.....	40
4.2. Benzen molekülüne x ve y yönünde polarize olmuş lineer ya da “x ± iy” yönünde polarize dairesel ışık gönderildiğinde, moleküler orbitaller arasındaki geçiş olasılıkları. HOMO; HOMO-1 ile LUMO; LUMO+1 orbitalleri arasındaki geçişler 0.256 Hartree (6.96 eV) enerjisinde gerçekleştiği için UV-VIS spektroskopisinde gözlemlenebilecek tek geçiş budur.....	50

SİMGELER DİZİNİ

s	Saniye
c	Işık hızı
r	Yarıçap
μ	Atomik orbitaller
\hbar	Plank sabiti
λ	Dalga boyu
ψ	Dalga fonksiyonu
ψ_0	Temel durumdaki moleküler dalga fonksiyonu
B	Potansiyel parametresi
H	Hamilton operatörü
E	Enerji
E_0	Molekülün temel durumdaki enerjisi
m	Elektron kütlesi
w	İçi boş kafesin genişliği
X_i	Fonksiyon kümesi
e	Exponansiyel terim
E_{corr}	Korelasyon enerjisi
m_a	Topolojik yük
$Y_{lm}(\theta, \phi)$	m ve l mertebesindeki küresel harmonik fonksiyonu

p	Radyal nod sayısı
ω_0	Işık sırtı
$L_p^l(x)$	Genelleştirilmiş Laguerre polinomu
$L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$	$n - l - 1$ derecesindeki genelleştirilmiş Laguerre polinomu
$R_{nl}(r)$	Radyal fonksiyonu
a_0	“Bohr” yarıçapı
θ ve ϕ	Sırasıyla polar ve azimut açısı
u_p^l	Işık demetinin x-y düzlemindeki uzaysal yapısı
J_0	Birinci dereceden Bessel fonksiyonu
n	Baş kuantum sayısı
l	Yörünge kuantum sayısını
m	Manyetik kuantum sayısını
M	Moleküler Orbital (MO) katsayısı

KISALTMALAR DİZİNİ

DFT	Yoğunluk fonksiyonel teorisi
LUMO	En düşük boş moleküler orbital
MD	Moleküler dinamik
KE	Kinetik enerji
HF	Hartree-Fock
HF-SCF	Hartree Fock- Kendi İçinde Tutarlı Alan
STF	Slater tipi fonksiyon
GTF	Gaussian tipi fonksiyon
LG	Laguerre gaussian
AOLK/LCAO	Atomik Orbital Lineer Kombinasyonu
AO	Atomik Orbital
MO	Moleküler Orbital
SGTO'S	Sınırlandırılmış Gaussian Tipi Orbitaler
KMY	Kuantum Mekaniksel Yöntemler

1. GİRİŞ

İnsanođlu var olduđu andan itibaren öğrenmeye, keşfetmeye ilgi duymaktadır. Makro buluş olarak nitelendirebileceğimiz tekerleğin icadından sonra, teleskop ve mikroskop gibi yapıların icadı ile keşifler mikro seviyelere inmeye başlamış, bugün ise mikro seviyelerin de altında nano düzeye ulaşmıştır. Bu bağlamda günümüzde ismi sıkça duyulan nanoteknoloji, çağımızın ve geleceğin teknolojisi olmaya adaydır. Gün geçtikçe nanoteknolojiye olan ilgi artmakta ve çalışma alanı yaygınlaşmaktadır. Bilgisayar, elektronik, tıp, malzeme bilimi ve boya sanayisi gibi birçok alanda kullanımı kaçınılmaz olan nanoteknoloji, fizik, kimya, biyoloji gibi temel bilimler için de ortak çalışma alanı durumundadır. Gelişmiş ülkelerin nanoteknolojiye yaptıkları yatırımların günden güne artması ve bu konudaki araştırmaların hızla ilerlemesi bu teknolojinin önemini daha açık bir şekilde göstermektedir.

Fiziksel olarak metrenin milyarda biri şeklinde ifade edilen “nano” ölçekte yapılan bilimsel ve teknolojik çalışmaların anlamlı olması için, bu mertebede geçerli olan fizik kurallarının belirlenmesi çok önemlidir. Bu konuda yapılan teorik çalışmalar ve üzerinde çalışılan problemler nanoteknolojinin gelişmesine katkı sağlamaktadır. Bu çerçevede, ülkemizde son dönemde nanoteknolojiye olan ilgi artmış ve gelecek vadeden çalışmalar yapılmıştır. Örneğin, “TÜBİTAK Vizyon 2023” raporunda özel bir bölüm nanoteknolojiye ayrılmıştır. Bilkent Üniversitesi bünyesinde kurulan UNAM ve NANOTAM ve benzer şekilde DPT desteği ile kurulmuş olan diğer üniversitelerimizdeki nanoteknoloji laboratuvarları ülkemizde nanoteknolojiye verilen önemi göstermektedir.

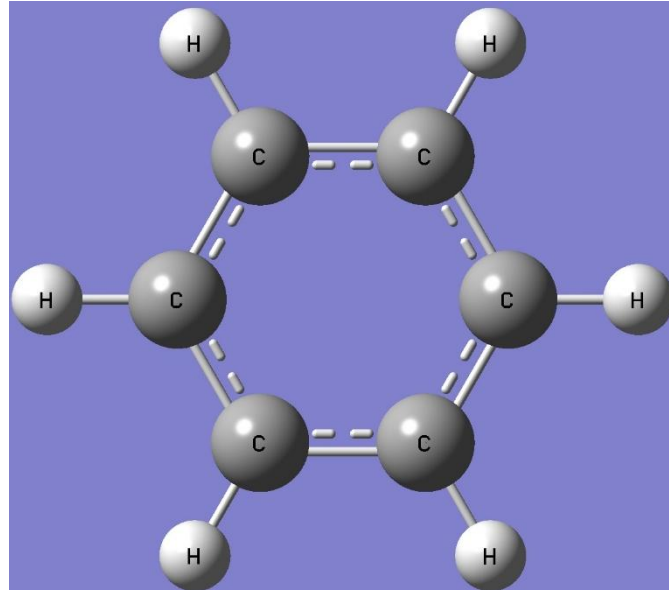
Nanobilimi üzerine ulusal ve uluslararası çalışmaların sayısı gün geçtikçe artmasına rağmen, nano ölçekte (<100 nm) maddelerin davranışlarını açıklamaya yönelik teorik çalışmalara ihtiyaç gün geçtikçe fazlaşmaktadır. Bundan dolayı üretimi kolay ve maliyeti ucuz ve endüstride kullanım alanı olan nanomalzemelere yönelmek gerekmektedir. Fulleren (C_{60}), $C_{20}H_{20}$ ve benzen (C_6H_6) bu malzemelere örnek moleküllerdendir. Bu çalışmada $C_{20}H_{20}$ ve benzen (C_6H_6) incelenecektir. Öncelikle çalışmada dairesel simetri özelliği olan benzen incelenmiştir. İncelenen bu molekülün serbest elektronlara sahip olması bu çalışma açısından oldukça önemlidir. Çünkü dışarıdan bir etki (elektrik alan, manyetik alan vs.) uygulandığında serbest elektronlar bir üst enerji seviyesine geçiş yapabilmektedir. Böylece hangi seviyeler arasında geçiş olabileceğini anlamak daha kolay olmaktadır. Herhangi bir dış etki (bu çalışmada bükümlü ışık) altındaki moleküler yapının elektronik yapısındaki değişimi hesaplayabilmek için dalga fonksiyonuna ve

bunların analizine ihtiyaç duyulmaktadır. Dalga fonksiyonunu elde etmek için moleküler orbital katsayılarının ve moleküler orbital fonksiyonlarının lineer kombinasyonları olan temel setlerin bulunması gerekmektedir. Bu değerler Gaussian 09 programı ile elde edilmiştir. Benzen için yapılan bu işlemler, C_{60} molekülünü inceleyebilmek için temel teşkil edecektir.

Bu bölümde ilk olarak benzen molekülü (1.1) ve küresel nanoyapılardan olan fulleren (1.2) hakkında bilgi verilecektir. Sonra ışığın kutuplanması (1.3) ve bükümlü ışık (1.4) hakkında bilgi verilecektir. Daha sonra ışık madde etkileşiminden bahsedilecektir (1.5). Takip eden alt bölümlerde sırasıyla model potansiyel (1.6) ve moleküler dinamik hesabı hakkında bilgi verilecektir (1.7). Ardından femtosaniye (ultrahız) bilimine kısa bir giriş yapılacaktır (1.8). Daha sonra bu çalışmanın amacından ve öneminden bahsedilecektir (1.9). Son olarak, bu tezin tanzim sırasının anlatıldığı kısım eklenecektir (1.10).

1.1. Benzen Molekülü

Moleküler formülü C_6H_6 olan benzen, dönele simetri özelliği taşımaktadır. Şekil 1.1’de düzlemsel şekli görülmektedir.



Şekil 1.1. Koordinatları Gaussian 09 programına verilen benzen molekülünün GaussView 5.0 programı ile gösterimi

Fiziksel olarak istikrarlı olmakla beraber 18 tanesi yerel konumlu (lokalize), 24 tanesi yayılmış (delokalize) 42 elektrona sahiptir. Elektronların birbiri ile eşleştiği (spin yukarı-spin aşağı durumları) düşünüldüğü zaman 21 işgal edilmiş seviye ortaya çıkmaktadır. Bu seviyelerden 12

tanenin valans elektronu olduđu söylenebilir. Şekil 1.1’de görüldüğü gibi halka yapıda olan moleküllere, açısız momentum taşıyan lazer ışını ile elektrik akımı veya manyetik moment indüklemek mümkündür. İndüklenme işleminin olabilmesi için temel enerji seviyesi ile elektronun geçiş yaptığı enerji seviyesi arasındaki farka uygun frekansa sahip bir lazer ışığı gönderilmesi gerekir. Lazer kaynağı kapatılsa dahi elektrik akımı halka üzerinde akmaya devam edecektir. Böylece molekül manyetik momente sahip olabilir. Femtosaniye(fs) mertebesinde lazer atımlarının (iki atım arasındaki süre yaklaşık 1 fs) moleküler halkanın etkileşimi ile elde edilecek dairesel elektrik akımı ve halkaya dik manyetik moment, halka ortasına yerleştirilmiş bir manyetik atomun spinini etkileyebilecektir. Yukarıda bahsedilen özelliklerden dolayı çalışmamızda benzen molekülü ve benzen yapısına benzeyen $C_{20}H_{20}$ molekülü incelenmiştir. Aynı zamanda benzen ve $C_{20}H_{20}$ için elde edilecek sonuçlar, çalışmamızda önemli olan bir diğerk molekül (C_{60}) için alt yapı niteliğinde olacaktır.

Bunlara ek olarak benzen, karbon atomlarının düzlemde düzgün altıgen şeklinde dizilmesinden meydana gelen bir yapıya sahip olmasının yanında farklı biçimlerde(konformasyon) bulunabilmektedir. Şekil 1.1’de düzlemsel olan yapısı gösterilmektedir. Karbon atomlarını içermesinden dolayı organik bileşikler sınıfının en basit üyesi olan bu molekül, karbon nanotüp ve grafenin temelini oluşturmaktadır. Bu özelliğı ile de incelenmesi önem arz etmektedir.

1.2. Fullerenler ve $C_{20}H_{20}$ Molekülü

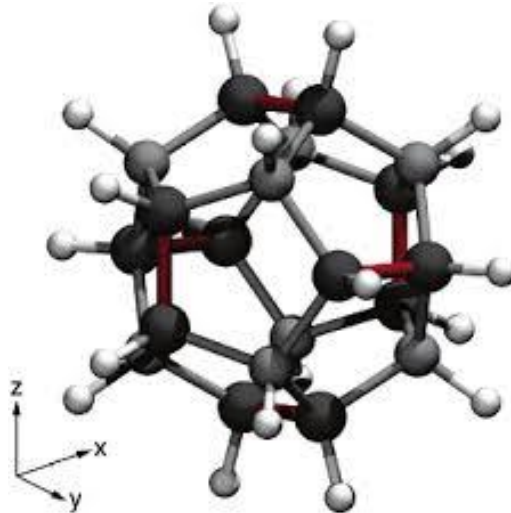
Fulleren, tamamen karbon atomlarından oluşan içi boş silindir, küre ve elipsoit (ellipsoidal fulleren C_{70} gibi) şekillerinde olabilen bir moleküldür [1]. Küresel olanlar “buckyball” olarak da adlandırılmakta olup bir futbol topunu andırmaktadır. Silindirik yapıda olanlara karbon nanotüp veya “buckytubes” denilmektedir [1]. Fullerenler aynı zamanda küre, silindir ve elipsoit grafitte benzer yapıdadırlar ve doğada kolayca bulunabilmektedirler. Grafenler altıgen halkalardan oluşmuştur. Fullerenler ise grafenlerden farklı olarak beşgen halkalara da sahiptir. Az miktarda, C_{60} , C_{70} , C_{76} , C_{82} ve C_{84} molekül formlarında doğada bulunur. En iyi bilinen fulleren yapısı C_{60} dır. 20 altıgen ve 12 beşgenden oluşan küresel bir yapıya sahiptir. Şekil 1.2.’de görüldüğü gibi her atom arasında oluşan bağlardan biri çifttir. Çift bağın uzunluğu tek bağı göre kısadır. Toplamda 30 tane çift, 60 tane kısa bağ vardır.



Şekil 1.2. Fulleren (C_{60})

Eğer atomda son yörüngede bulunan elektronlar çekirdeğin etrafında dengeli, simetrik bir şekilde yayılmış iseler böylesi atomlara küresel simetri özelliği gösteren tanecikler denir. Atomdaki elektron dağılımı s^1 veya s^2 , p^3 veya p^6 , d^5 veya d^{10} , f^7 veya f^{14} ile sonlanırsa atom küresel simetriktir. Bu durumdaki atom daha karardır. Fakat çalışmamızda önemli olan yapının küresel simetrik olmasıdır. $C_{20}H_{20}$ ve C_{60} molekülleri de küresel simetrik bir yapıdadırlar ve karardırlar. Küresel simetrik bir sistemde düzgün bir manyetik moment üretmek mümkündür. Sistemde meydana gelen manyetik momentin sapması, değişime uğraması istenilen bir durum değildir. Aynı zamanda küresel simetrik yapıda olan bir sistemin maruz kalacağı dış etkinin (büyük ışık) de küresel koordinatlarda tanımlanabilen bir yapıda olması, sistemi inceleyebilmek için gereklidir. Bunlarla birlikte sistemdeki bir elektronun, küre yarıçapı boyunca hapsedildiği varsayıp hesaplamalar daha basite indirgenerek yapılabilmektedir. Böylece radyal model potansiyeli önerilip dalga fonksiyonunu elde etmek daha kolay olacaktır. Model potansiyel ile ilgili ayrıntılı bilgi, model potansiyel olarak ayrılan bölümde verilmiştir.

$C_{20}H_{20}$ molekülü küresel simetriye benzer bir yapıdadır. C_{20} ise fulleren ailesinin en küçük üyesidir. $C_{20}H_{20}$, C_{60} molekülüne kıyasla daha az atoma ve elektrona sahiptir. Bundan dolayı Gaussian 09 programı yardımıyla elektronik yapı hesabı C_{60} 'a kıyasla daha kolay yapılabilmektedir. Şekil 1.3' te görüldüğü gibi bu molekülde 20 karbon ve 20 hidrojen atomu bulunmaktadır ki, bu haliyle benzen yapısına benzemektedir. Şekildeki siyah toplar karbon atomlarını beyaz toplar ise hidrojen atomlarını temsil etmektedir. Benzen'den farklı olarak küresel simetriye sahiptir.



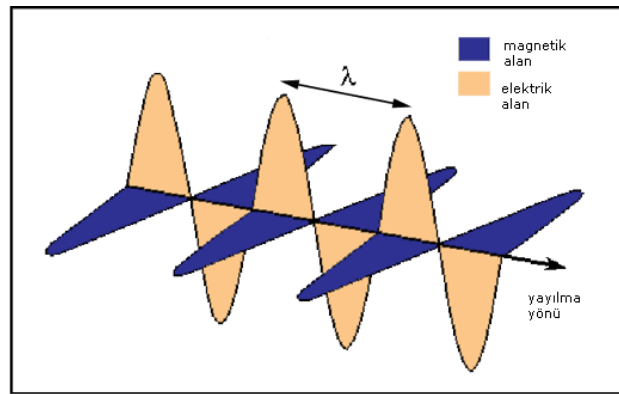
Şekil 1.3. $C_{20}H_{20}$ molekülünün 3D konformasyon yapısındaki küresel şekli

C_{60} molekülü de küresel simetrik yapıdadır fakat hesaplamalar çok uzun sürdüğünden ve sonuçlar güvenilir olmadığından ilk etapta $C_{20}H_{20}$ molekülü için hesaplamalar yapılmıştır.

1.3. Işığın Kutuplanması

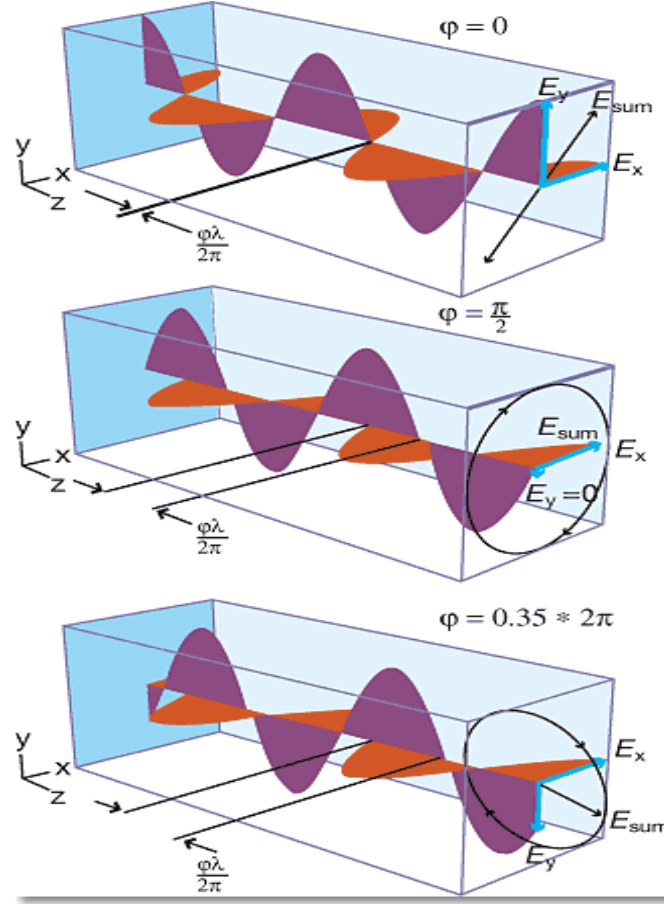
Işık, bir elektromanyetik dalgadır. Bu dalgalar boşlukta ışık hızı (c) ile ilerleyen, birbirine dik elektrik ve manyetik bileşene sahip enine dalgalardır. Yani bu bileşenler birbirlerine ve yayılma doğrultusuna dik olarak titreşirler ve aynı fazda salınım yaparlar.

Kutuplanma (polarizasyon) ışığın dalga karakteri ile açıklanabilir. Kutuplanma sadece enine dalgalarda gözlemlenir, boyuna dalgalarda gözlemlenmez. Bundan dolayı ışık dalgalarında kutuplanma gözlemlenir. Yayılma doğrultusuna paralel olarak titreşen (salınım yapan) dalgalara boyuna dalgalar denir. Ses dalgaları boyuna dalgalara örnek olarak verilebilir. Yukarıda belirtildiği gibi boyuna dalgalarda kutuplanma görülmez. Yayılma doğrultusuna dik olarak titreşen dalgalara ise enine dalgalar denir. Su dalgaları ve elektromanyetik dalgalar enine dalgalara örnektir. Şekil 1.4’de elektromanyetik dalganın yayılma şekli gösterilmiştir.



Şekil 1.4. Elektromanyetik dalganın yayılma şekli

Bu yönelimler ya tek yöndedir (lineer kutuplanma) ya da alanlar bir optik frekansta döner salınım (daireysel ya da eliptik kutuplanma) yaparlar. Bunlar, kutuplanmanın çeşitleridir.



Şekil 1.5. Lineer kutuplanma (üst), dairesel kutuplanma (orta) ve elipsel kutuplanma (alt) olmuş ışığın şematik gösterimi [2]

1.3.1. Lineer kutuplanmış ışık

Şekil 1.5.'de görüldüğü gibi, ışık dalgasının x ve y bileşenleri aynı fazda (faz farkı 0, $\varphi = 0$) ve birbirine dik 2 düzlem dalga şeklinde ilerlemektedir. Bu durumda güçlerinin oranı sabit olacağı için elektrik alan vektörünün yönü de sabit olacaktır. Vektörün ucu düzlemde bir doğru oluşturduğu için, bu özel duruma lineer kutuplanma denilmektedir.

1.3.2. Dairesel kutuplanmış ışık

Dairesel kutuplanma durumunda alan kuvvet vektörü, Şekil 1.5'de görüldüğü gibi Z yayılma yönüne dik olarak sağa veya sola dönerek ilerler yani elektrik alan vektörünün x ve y bileşenleri bir merkez etrafında dönmektedir.

1.3.3. Elipsel kutuplanmış ışık

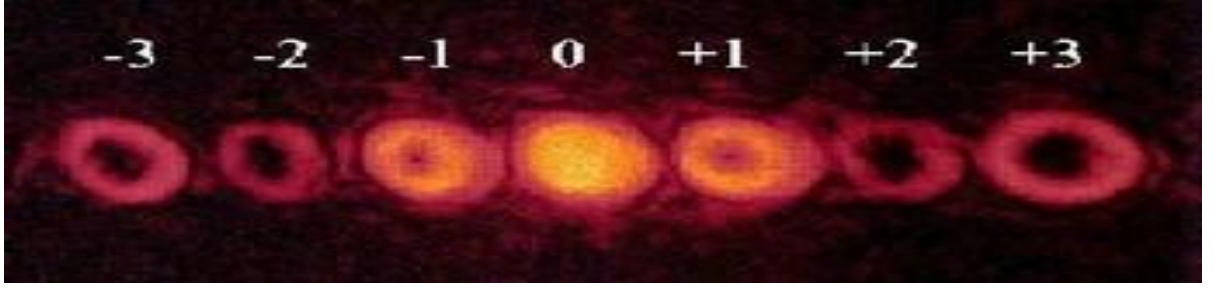
Şekil 1.5’de görüldüğü gibi, birbirine dik ve rastgele bir faz farkına sahip olan olan 2 düzlem dalga şeklinde ilerleyen ışıklardır. Elektrik alan vektörünün x ve y bileşenlerinin toplamı ve pozisyonu değişken olmakla birlikte elektrik alan vektörü düzlemde bir elips oluşturacaktır. Bu sebepten ötürü bu kutuplanmaya elipsel kutuplanma denmektedir.

1.4. Bükümlü Işık

Bütün dalga fenomenleri gibi ışık da mekaniksel özelliklere sahiptir. Johannes Kepler ışığın liner momentum taşımamasından dolayı kuyruklu yıldız kuyruklarının daima güneşten bir adım uzakta olduğunu iddia etti. 1905 te, John Poynting elektromanyetik radyasyon basınç ve momentum yoğunluğu teorisini geliştirdi ve 1921 yılında, Albert Einstein karacisim kuralını ve bir fotonun liner momentumunun $\hbar k$ olduğu zaman, bir ışımaya alanındaki moleküllerin hareketinin ancak açıklanabileceğini gösterdi ($k = 2\pi/\lambda$ dalga sayısı ve $\hbar = h/2\pi$, λ dalga boyudur. \hbar Plank sabitidir). Yeni çağda ise ışığın liner momentuma sahip olduğu bilinmekle birlikte moleküllerde ve atomlarda soğutma ve tuzaklama da kullanılmaktadır [3].

1909 yılında Poynting, kutuplanmış ışığın açısız ve spin açısız momentumunu dairesel kutuplanma ile ilişkilendirdi [4]. Işığın dairesel açısız momente sahip olduğu fikri ne varki çok daha sonra ortaya çıktı. 1992’de Hollanda’da bulunan Leiden üniversitesindeki bir gruptaki kişilerden olan Allen, $\exp(-im_a\varphi)$ azimutal faza bağlı ışık demetinin kutuplanma durumundan bağımsız olarak bir orbital açısız momentuma sahip olduğunun farkına vardı [5]. φ açısı ışık demetinin dik kesitinde azimutal kordinattadır ve m_a yalnızca tamsayı (pozitif veya negatif) değeri alabilir. Daha sonra orbital açısız momentumun her foton için $L = m_a\hbar$ değerinde olduğunu tahmin ettiler.

Işık, bir ortamda yayılırken yayıldığı ortamda girdap şekline benzer şekilde kıvrılabilir. Bu kıvrılmadan dolayı aynı çerçevedeki ışık dalgaları birbirini yok eder. Düz bir zemin üzerine bu tarz bir ışık gönderildiğinde Şekil 1.6.’da görüldüğü gibi ortası karanlık çevresi parlayan bir ışık halkasına dönüşür.



Şekil 1.6. Düz bir zemin üzerine gönderilen bükümlü ışığın düzlemdeki yansıması [6]

Şekil 1.6.'daki rakamlar bükümlü ışığın en önemli özelliklerinden birisi olan sahip olduğu topolojik yükü (m_a) temsil eder ve ışığın kaç kere kıvrıldığını (ışığın spini) gösterir. Verilen herhangi bir m_a değeri için, ışık demeti Şekil 1.6.'da gösterildiği gibi m_a tane birbirine dolaşmış sarmal faz cephelerine sahiptir. Bu kıvrılma ışık paketinde açısız momentum olarak kendini gösterir ve ışık yörüngesel açısız momentum taşıyor denir. Yörüngesel açısız momentum kavramı herşeye rağmen yeni değildir. Multipolar geçişlerin yörüngesel açısız momentum taşıyan ışınım ürettiği bilinmektedir. Fakat bunun gibi işlemler seyrek, bir kaçına örnek vermek gerekirse moleküler ve atomik yasak geçişleri olabilir. Heyecan verici yenilik ise, laboratuvar ortamında kuantize olmuş yörüngesel açısız momentuma sahip ışık demetlerinin oldukça kolay üretilebiliyor olmasıdır. Bu demetler kutuplanmış ışığın bütün analoglarını incelemek için kullanılabilir.

Boş uzayda ilerleyen küresel bir düzlem dalganın özelliği elektromanyetik ve optik çalışma alanlarında incelenmektedir. Fakat bu tür dalgaların faz ya da genlikleri hakkında detaylı incelemeler pek ele alınmamıştır. Lazerler ilk zamanlarında ışın, kutuplanma (polarizasyon) ve kuvvetin bileşenleri olarak tanımlanmıştır. Tamm ve Weiss ışının spiral yapısını keşfetmiştir. Daha sonraları lazer profili, Allen ve ark. (1992) tarafından dikdörtgen simetrik Hermite-Gaussian genlik modu cinsinden tanımlanmıştır.

1.4.1. Laguerre-Gaussian Işınları ve Yörüngesel Açısız Momentum

Allen ve arkadaşları azimutal fazlı ışınların ve optik spirallerin yörüngesel açısız momentum taşıdığını 1992 yılında yaptıkları çalışmada göstermişlerdir. Günümüzde ise fotonların yörüngesel açısız momentum taşıyabildiği bilinmektedir fakat laboratuvar ortamında üretilen bir ışık demetinin yörüngesel açısız momentum taşıyabileceği bilinmiyordu. Şekil 1.7 ve 1.8'de gösterildiği gibi Hermite-Gaussian modu gibi Laguerre-Gaussian modunun da üretilebileceği anlaşılmıştır. Helisel aşamalı demetin en yaygın kullanımı Laguerre-Gaussian (LG) lazer modu olarak adlandı-

rılmaktadır. Eş merkezli halkalardan oluşan, Laguerre-Gaussian modunda spiral fazlı ışınlar Tamm ve Weiss tarafından oluşturulmuştur.

Laguerre-Gaussian lazer ışını profili

$$u_{nm}^{LG}(r, \varphi, z) = \left(\frac{2}{\pi n! m!}\right)^{\frac{1}{2}} \min(n, m)! \left(\frac{1}{\omega}\right) \exp\left[-\frac{ikr^2}{2R}\right] \exp\left[-\left(\frac{r^2}{\omega^2}\right)\right] \times \exp[-i(n + m + 1)\psi] \exp[-im_a\varphi] (-1)^{\min(n,m)} \left(\frac{r\sqrt{2}}{\omega}\right) L_{\min(n,m)}^{n-m}(2r^2/\omega^2) \quad (1.1)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $L_p^l(x)$, genelleştirilmiş Laguerre polinomudur. Bu genlik dağılımı ve Hermite-Gaussain modları dalga denkleminin paraksiyal formuna çözümdürler. Sonra gelen kısım ise skaler dalga denkleminden türetilmiştir.

1.4.2. Optik Girdapın Yapısı

Sarmal bir mod $\psi_l(\vec{r})$ ışık demet ekseninin çevresindeki polar açıyla orantılı bir faz faktör ile ayrılır.

$$\psi_l(\vec{r}) = u(r, z) e^{-ikz} e^{im_a\theta} \quad (1.2)$$

Burada $\vec{k} = k\hat{z}$ ışık demetinin dalga vektörüdür, $u(r, z)$ z pozisyonundaki radyal profil alanıdır ve m_a ise topolojik yük olarak bilinen bir tamsayıdır. Bütün fazlar $r = 0$ 'da demet eksenini boyunca görünür, ve sonuçta oluşan yıkıcı girişim aksiyal yoğunluğu iptal eder. Yarı klasik yaklaşım, sarmal bir modda ki her fotonun $m_a\hbar$ orbital momentum taşıdığını önerir [5], bundan dolayıdır ki optik girdapların özelliklerinin m_a ile nasıl farklılaştığı çalışmak için idealdir.

Optik girdapların gözlemlenen çoğu özellikleri, paraksiyal Helmholtz dekleminin Laguerre-Gaussian (LG) öz modlarının özellikleri açısından yorumlanmıştır. Bunlar bir radyal bağımlılığa sahiptir [7-8],

$$u_p^l(r, z) = (-1)^p \left(\frac{\sqrt{2}r}{w}\right)^l L_p^l\left(\frac{2r^2}{w^2}\right) \exp\left(-\frac{r^2}{w^2}\right) \quad (1.3)$$

u_p^l ışık demetinin x-y düzlemindeki uzaysal yapısıdır. $L_p^l(x)$ radyal index p ile genellenmiş bir Laguerre polinomudur ve w ise ışık demetinin yarıçapıdır [9]. p , radyal nodların sayısıdır. $p = 0$

daki bir LG modu $R_l = w\sqrt{l/2}$ olarak ifade edilen topolojik yüke bağlı olan ışık halkasının yarıçapına sahiptir.

1.4.3. Bessel ve Mathieu Işınları

Daha çok Laguerre-Gaussian ışınlarının üzerinde durulmasına rağmen, yörüngesel açısal momentum taşıyan faz yapısına sahip ışınlar sadece Laguerre-Gaussian tarafından temsil edilmezler. Sarmal faz yapısına ($\exp(im_a\phi)$) sahip herhangi bir ışın da foton başına $m_a\hbar$ yörüngesel açısal momentum taşıyabilir. Durnin'in Bessel ışınları tanımlaması, kaydedeğer çalışma alanlarına öncülük etmiştir [10]. Durnin'in Helmutz denklem çözümünden,

$$u(x, y, z) = \exp(ik_z z) \int_0^{2\pi} A(\varphi) \exp(ik_r(x \cos \varphi + y \sin \varphi)) d\varphi \quad (1.4)$$

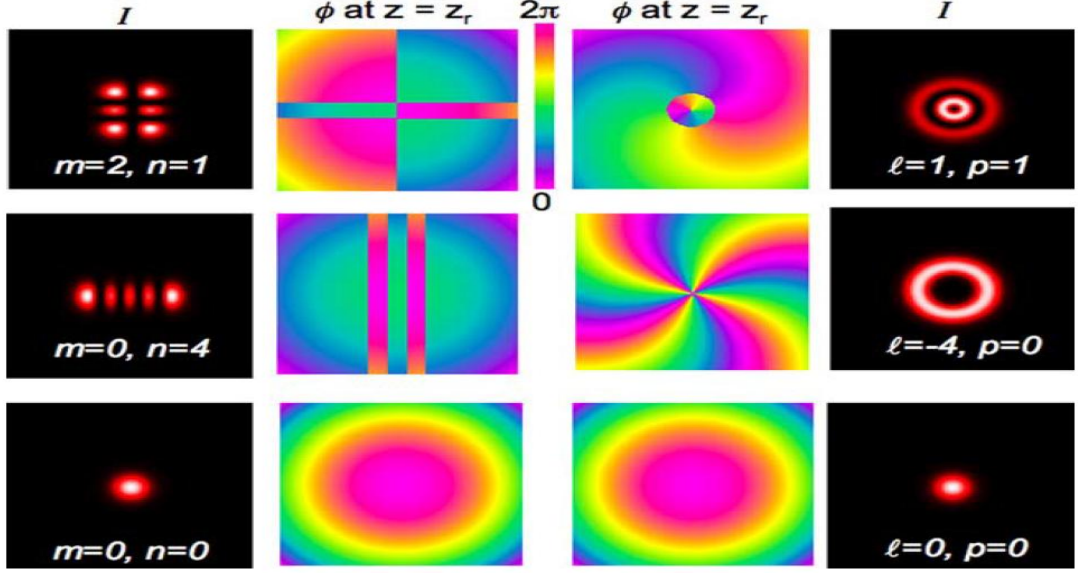
sonucuna ulaşılır. Burada $|u(x, y, z)|^2$, z 'den bağımsız yoğunluğu temsil etmektedir. $A(\varphi)$ 'nin sabit olduğu durumda,

$$u(r, z) \propto \exp(ik_z z) J_0(k_r r) \quad (1.5)$$

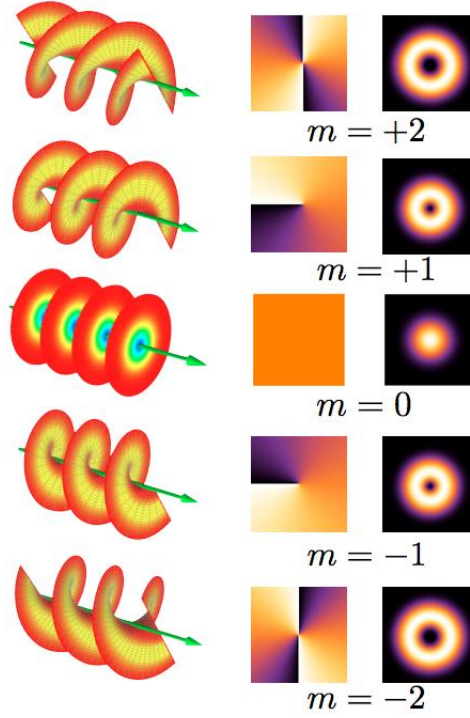
bulunur. Burada J_0 , birinci dereceden Bessel fonksiyonudur. Bu dağılımdan genlik ve faza sahip ışın sıfırıncı dereceden Bessel ışını olarak bilinir. $A(\varphi) \propto \exp(im_a\varphi)$ formunun faz fonksiyonları Denklem 1.6.' da ifade edilen genlikte daha yüksek dereceden Bessel ışınlarına sebep olur,

$$u(r, \varphi, z) \propto \exp(ik_z z) \exp(im_a\varphi) J_m(k_r r). \quad (1.6)$$

Yakın zamanda $u(x, y, z)$ ve $A(\varphi)$ in kapalı formları Mathieu ışınları olarak bilinen genel eliptik Bessel takımı için bulunmuştur. Bessel ışınları dairesel simetrik iken Mathieu ışınları eliptik parametre ile nitelendirilir. Her iki tip ışın da yörüngesel açısal momentum taşırlar [11-13].



Şekil 1.7. Hermit-Gaussian (sol) ve Laguerre-Gaussian (sağ) modlarının faz yapılarına ve yoğunluklarına örnek. Işık sırtından (Beam waist) Rayleigh aralığına eşit bir uzaklıkta çizilmiştir [14]

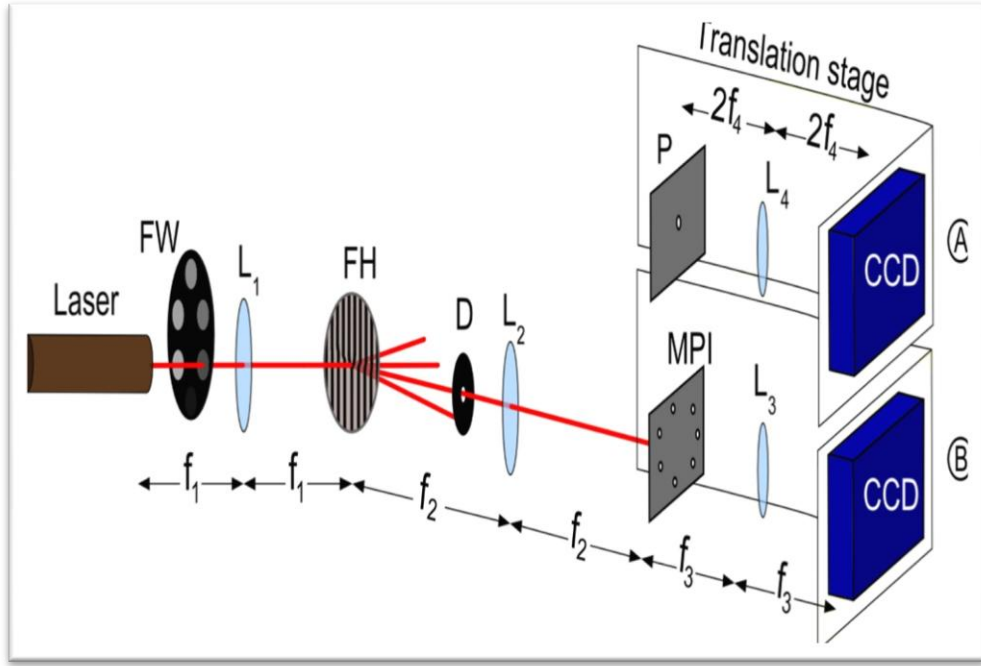


Şekil 1.8. $\exp(il\phi)$ faz yapısına ve Laguerre-Gaussian modlarının yoğunluk profiline karşılık gelen sarmal faz cephesi [15]

Yukarıdaki şekil, ışık demetinin kutuplanmasından bağımsız bir ışık demetinin ve farklı spin açısai momentumun orbital açısai momentumunu göstermektedir. Bu, sarmal faz cephesinden (sol sütun) kaynaklanmaktadır. Yeşil oklar Poynting vektörünü temsil etmektedir ve yeşil

okların demet eksenine paralel olmadığı görülmektedir. Satırlar l (yörüngesel açısal momentum kuantum sayısı) tarafından etiketlenmiştir. $L=l\hbar$ her foton için ışık demetinin orbital açısal momentumudur. Sol sütun her l değeri için, sistematik anlık çekilen bir görüntüdür.

1.4.4. Hologram (Bükümlü Işığın Oluşturulması)



Şekil

Gaussian demetindeki bir ışığın orbital açısal momentumunun üretiminin şematik gösterimi [16]

1.9.

Bir hologram $m_a\hbar$ her foton için ilgili orbital açısal momentum ve sarmal faz cephesiyle bir ışık demeti üretebilir. Uygun hologram hesaplanabilir, istenen demet formu bir düzlem dalga arasında girişim deseninden üretilebilir.

Bükümlü ışık oluşturabilmek için ise, Şekil 1.9.'da görüldüğü gibi Ricci ve arkadaşları bir düzenek kullanmıştır [16]. Helium-Neon lazer tarafından üretilen ışın öncelikle dönen bir filtre (FW) aracılığı ile zayıflatılır. Bu filtrenin görüş hattı bir lens (L_1)'e göre ayarlanmıştır, hizalanmıştır. Bu ışın, bu lens (L_1) aracılığıyla çatal hologram (FH) üzerine yansıtılır. Çatal holograma yansıtılan ışık burada yörüngesel açısal momentum kazanmaktadır. Bu ışığın istenilen konumda yörüngesel momentumunun ayarlanması gerekecektir. Bu sebepten dolayı yörüngesel açısal momentum kazandırılan bu lazer ışığı diyaframdan geçirilir ki yukarıdaki şekilde D harfiyle temsil edilmektedir. Kısacası bu diyafram (D), istenilen kırınım mertebesinin seçilmesini

sağlamasıyla birlikte vorteksin gerekli topolojik yükü ile ilişkilidir. Bundan sonra L_2 ile gösterilen bir lens yardımıyla algılama sistemlerine yani A (CCD) ve B (CCD) monitörlerine gönderilir. A monitörü ışık şiddeti profilinin bir lens (L_4) kullanılarak bir küçük delikte (P) doğrudan görüntülenmesini sağlar. B monitörü ise bir çoklu küçük delik (P) interferometresi (MPI) ve bir lens (L_3) kullanılarak girişim desenini görüntülemek için kullanılır [16].

Çift yarıktan geçirilen lineer bir ışığın kırınım deseni karanlık ve aydınlık çizgilerden oluşurken, çatal hologramdan geçirilen bir ışığın kırınım deseni aydınlık ve karanlık dairelerden oluşur. Çift yarıktan geçen ışığın ekran üzerinde oluşan desenine bakıldığında merkezinde şiddet en fazla olduğu görülürken, çatal hologramdan geçen ışığın merkezinde ışık şiddeti sıfırdır.

1.5. Işık Madde Etkileşimi

Madde dendiği zaman, ilk olarak maddeyi oluşturan atom, yani atom çekirdeği ve atomdaki elektronlar akla gelir. Bu yüzden ışığın madde ile etkileşmesi, foton-çekirdek veya foton-elektron etkileşmesi şeklinde olmaktadır.

Foton-çekirdek etkileşmesinde foton çekirdek tarafından soğurulabilir (absorblanma). Bu etkileşimde yüksek enerjili bir foton (gama ışını gibi) atom çekirdeği tarafından soğurulur ve fotonun enerjisi çekirdekten bir parçacığı koparıp serbest hale geçmesini sağlar. Bu parçacık bir proton, bir nötron veya bir alfa parçacığı olabilir. Işının soğurulması için uyarıcı fotonun enerjisinin, soğuran taneciklerin temel halleri ile herhangi bir uyarılmış hali arasındaki enerji farkına eşit olması gerekir. Aslında bu olay elektronun (taneciklerin) uyarılmasıdır. Uyarma, çeşitli yöntemlerle yapılabilir; elektronlar veya diğer elementlerin taneciklerle bombardıman edilmesi, yüksek potansiyelli değişken akım uygulanması, bir ark veya alev vasıtasıyla ısı verme, veya elektromanyetik ışın soğurulma yöntemlerinden bazılarıdır. Uyarılma atomun bir veya daha fazla elektronunun daha yüksek bir enerji seviyesine çıkarılmasıyla gerçekleşir. Soğurulmadan kasıt da budur. Mesela, Sodyum(Na) atomu için 3s seviyesini işgal eden bir elektronunun 3p seviyesine yükseltgenmesi(uyarılması)için dalga numarası $1.697 \times 10^{-4} \text{cm}^{-1} (\lambda = 589.3 \text{ nm})$ olan enerjiye ihtiyaç vardır. Ultraviyole ve görünür ışının enerjisi, sadece en dış yörüngedeki veya bağ yapan elektronların geçişini sağlayabilecek kadardır. X-ışınları ise, atom çekirdeklerine çok yakın olan elektronları bile etkileyecek büyüklükte enerjileri içeren frekanslardan oluşur. Bu nedenle en içteki elektronların geçişlerini gösteren soğurma tepe noktaları X- ışınları bölgesinde gözlenir. Uyarılan tanecikler en düşük enerji seviyesine veya temel enerji seviyesine geri dönme eğilimindedir. Bu tanecikler geri dönerken ışın yayımlarlar. Bu olay emisyon olarak adlandırılmaktadır.

Eğer gelen fotonun enerjisi çekirdekten bir parçacık koparmaya yetecek kadar değilse foton saçılarak yön değiştirir. Bu işlem foton-çekirdek çarpışması için de geçerlidir. 1923 yılında Compton tarafından öne sürülen “Compton olayı” da ışık madde etkileşimiyle alakalıdır.

Hidrojen atomunu ele alacak olursak,

$$E_n = -13.6/n^2 \text{ eV} \quad (1.7)$$

enerjisi elektron seviyeleri arasında genel olarak nasıl bir geçiş olması gerektiğini ortaya koyar (soğurma/ışık yayma). Burada n , baş kuantum sayısını ifade etmektedir ve $n = 1, 2, 3, 4 \dots$ gibi sayı değerlerini alabilir.

Bir parçacığın (elektron gibi) hareketi dalga fonksiyonu ile tanımlanır. Denklem 1.8.’de hidrojen atomuna (tek elektronlu sistem) ait küresel koordinatlardaki dalga fonksiyonu verilmiştir.

$$\begin{aligned} \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) &= R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \\ &= \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{2r}{na_0}} \times L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)} \sqrt{\left(\frac{2l+1}{4\pi}\right) \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{-im\phi} \end{aligned} \quad (1.8)$$

Burada, n baş kuantum sayısını, $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ yörünge kuantum sayısını, $m = -l, \dots, l$ manyetik kuantum sayısını temsil etmektedir. $L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right)$ ifadesi $n-l-1$ derecesindeki genelleştirilmiş Laguerre polinomu, $Y_{lm}(\theta, \phi)$ ifadesi m ve l mertebesindeki küresel harmonik fonksiyonu, $R_{nl}(r)$ ifadesi radyal fonksiyonu temsil etmektedir. a_0 “Bohr” yarıçapı, θ ve ϕ açıları sırasıyla polar ve azimut açığı temsil etmektedir.

Elektron hareketlerinin dalga fonksiyonları ile tanımlanabildiğinden yukarıda bahsedildi. Eğer sistem tek elektronlu bir atomdan çok elektronlu bir moleküle geçerse, sistemin elektronik yapısından bahsedilir. Bu yüzden elektronik yapı hesabına ihtiyaç duyulur. Elektronik yapı hesap modellerinden bir tanesi de model potansiyel hesaplamalarıdır.

1.6. Model Potansiyel

Moleküler toplarlara ait elektron dinamiđi basit yaklařımlar veyahut model potansiyeller ile incelenebilir. Bu sonular yardımıyla tam olarak gereki olmasa dahi ele alınan sistemin dinamikleri hakkında genel olarak fikir sahibi olunabilir. Bu elektronlar kuantum sayılarına bađlı olarak kesikli enerji seviyelerinde bulunurlar ve belirli dalga fonksiyonlarına sahip olurlar. Eđer incelenen sistem küresel bir yapıda ise, kürenin yarıapı boyunca elektronun hapsedildiđi varsayılır ve önerilecek bir radyal model potansiyel ile sınırlandırılmış dalga fonksiyonları elde edilebilir. Gaussian, Wood-saxon, sonlu ve sonsuz kare potansiyelleri radyal model potansiyellere örnek olarak verilebilir [17-18].

1.7. Moleküler Dinamik

Moleküllerin sentezlenmesi ve özelliklerinin incelenmesi hakkında deneysel olarak birçok alıřma yapılmaktadır. Aynı şekilde moleküllerin yapısal, kimyasal ve fiziksel özelliklerinin teorik olarak incelenmesi deneysel alıřmalara büyük bir katkı sađlamaktadır. Moleküler benzetim hesapları için profesyonel programlar gerekmektedir. Benzetim hesapları için en yaygın kullanımı olan programlardan biri de Gaussian programıdır [19]. alıřmalar gösteriyor ki moleküler bir yapının Gaussian ile elde edilen elektronik ve spektroskopik özellikleri deney sonuları ile uyum içerisinde [20].

ok elektronlu küresel simetriye sahip bir sistemin elektronik yapısını hesaplamak için yaklařım metodu kullanılır. Kuantum boyutlarında bir malzemenin elektronik yapısı temel olarak ($H\psi = E\psi$) eřitliđi ile hesaplanır. Bu denklemdeki Hamilton operatörü (H), moleküldeki paracıkların toplam enerjisini ve bütün paracıkların birbiri arasındaki etkileřimleri içermektedir. Bu denklem tek elektronlu element olan hidrojen atomu için tam olarak özöllebilmiş iken [4], ok elektronlu bir sistem için ancak yaklařım teknikleri ile yaklařık sonular elde edilmiştir. ok elektronlu sistemde Schrödinger denklemini daha basit hale getiren 3 önemli yaklařım bulunmaktadır. Bu yaklařımları içeren modele “Hartree-Fock” modeli denir [21]. Birinci yaklařım, ekirdek ve elektronun hareketini ayıran “Born-oppenheimer” yaklařımıdır [22]. İkinci yaklařım, elektronların hareketlerini ayırıtıran yaklařımdır. ok elektronlu dalga fonksiyonu tek elektronlu dalga fonksiyonunun arpımlarının toplamları şeklinde yazılır ve determinanta dönüřtürülür. Üüncü yaklařım ise, herbir moleküler orbitalin atomik orbitallerinin lineer kombinasyonu haline dönüřtürülmesi şeklinde yapılan yaklařımdır. Bu yaklařım “Lineer Kombinasyon Atomik Orbital (LCAO)” olarak adlandırılmaktadır. Bu yaklařımda moleküler orbitalin dalga fonksiyonu kendisini oluřturan atomların dalga fonksiyonlarının toplamı şeklinde yazılır.

$$\psi = c_1\phi_1 + c_2\phi_2 \quad (1.9)$$

Burada, ψ moleküler orbitalin dalga fonksiyonunu, ϕ_1 ve ϕ_2 atomik orbitallerin dalga fonksiyonunu, c_1 ve c_2 atomik orbitallerin moleküler orbitallere katkı derecelerini temsil etmektedir. Bu yaklaşım ile en iyi fonksiyonu bulmak yerine daha basite indirgeyerek orbitallerin lineer birleşimine ait katsayıları bulmak mümkün olmaktadır. Sistem s, p, d, f gibi atomik orbitaller şeklinde düşünülür. Bu atomik orbitaller Gaussian temel setler denilen fonksiyonların lineer bileşimidir. Gaussian 09 programı bu lineer katsayıları ve aynı zamanda atomik orbital şekillerini ve enerji özdeğerlerini vermektedir. Bu değerler yardımı ile sistemin gerçekçi dalga fonksiyonuna ulaşılır.

1.8. Femtosaniye (Ultrahız) Bilimi

Bir atomdaki veyahut moleküldeki elektronun dönme hareketini femtosaniye (fs) zaman aralığı ile tanımlayabiliriz. $10^{-15}s$ (1 fs) elektron hareketlerinin zaman aralığına karşılık gelmektedir [9]. Elektronun durgun kütlesi (rest mass) ($m_e = 9.109382 \times 10^{-31}$ kg), yükü ($q = -e = 1.602176 \cdot 10^{-19}$ C), ve spini ($s = \frac{1}{2}\hbar$) bu şekilde tanımlanır. Uzunluk ve enerjinin atomik birimi sırasıyla Bohr yarıçapı ($a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}$) ve Hartree enerjisi ($E_h = \frac{\hbar^2}{m_e a_0^2}$) = 27.21138 eV bu şekildedir. Bundan dolayı zamanın atomik birimi $\frac{\hbar}{E_h} = 24.18884$ attosaniye(as) skalasındadır. Bunlara ek olarak, elektron hareketi, femtosaniye ($1fs = 10^{-15}$) mertebesinde olan nükleer titreşimlerden ve pikosaniye ($1ps = 10^{-12}$) mertebesinde olan atomik dönüşlerden daha hızlıdır. Bundan dolayı, elektron hareketinin femtosaniye ve attosaniye arasında bir zaman aralığında bulunduğu düşünülebilir [23]. Moleküler dinamik simülasyonunun karakteristik zaman aralığı yaklaşık $1fs$ türündedir [24]. Görünür ışığın salınım periyodu, $\frac{\lambda}{c} = \frac{(600 \times 10^{-9} nm)}{(3 \times 10^8 m/s)} = 2.0 \times 10^{-15} fs$ dir. (yaklaşık 2 femtosaniye) [24].

Atomlarda, moleküllerde, elektron tünellemede ve elektron transferinde ultrahız elektronik süreci kontrol etmek için, femtosaniye altı (attosaniye gibi) lazer atımlarına gerek duyulmaktadır [25-27]. 1993 yılında D.You ve arkadaşları tarafından yapılan deneysel çalışmada ultrahızlı asimetric lazer atımları femtosaniye mertebesinde üretilebilmiştir [28]. 2001 yılında, görünür

dalgaboyunda (1.6 - 3 eV enerji aralığı) lazer atımları kullanılarak yüksek harmonik üretim (HHG) ile ultra hızlı lazer atımları deneysel olarak üretilmiştir [29-30].

Femtosaniye lazerleri, iki atım arasındaki süresi femtosaniye mertebesinde olan optik darbe üretiminde kullanılmaktadır [31]. Bu tür lazerlerin kullanım alanlarına biyomedikal görüntüleme, çok hızlı fotokimyasal olayların ölçümü, hassas malzeme işleme, faz uyumlu x-ışını üretimi ve metrolojik uygulamalar (örneğin hassas frekans ve zaman ölçümü) örnek verilebilir [31]. Birçok teknolojik ve bilimsel uygulamada, belli bir dalgaboyunda çalışan ve kısa süreli darbe üretebilen lazer sistemlerine gereksinim duyulmasından dolayı femtosaniye lazerlerinin geliştirilmesi önemlidir. Bu lazerler kullanılarak temel seviyede ışık madde etkileşimini incelemek mümkündür.

1.9. Çalışmanın Amacı ve Önemi

Nanoyapılar elektron taşınım özelliklerine göre yarı iletken, iletken ve yalıtkan olarak sınıflandırılabilir. Bu yapılardan özellikle yarı iletkenler, bilgisayar teknolojisinin altyapısını oluşturmaktadır [32]. Bu çerçevede, elektronik aygıtların performansını ve işlevselliğini artırıcı çalışmalar sürmektedir. Günümüz teknolojisinde bir bilgisayar üç temel birimden oluşmaktadır. Bunlar işlemci, bellek ve sabit diskler [33]. İşlemci ve bellek büyük ölçüde yarıiletken silisyum teknolojisine dayalı entegre devrelerdir. Bilgileri, elektronların oluşturduğu akımlarla hızlı bir şekilde işlerler. Fakat bilgisayar kapatıldığında işlemci ve bellekteki bilgiler silinir. Bilgilerin saklanması için kullanılan birim ise manyetik metal elementlerinin etkin olarak kullanıldığı “sabit disk” dir. Sabit diskte bilgiyi yazma ve okuma hızı, işlemci ve bellekteki elektronik işlemler kadar hızlı değildir fakat sabit diskin avantajı “kalıcılıktır” [34]. Bu sebepten dolayı, gelecekteki bilgisayarlarda elektronik (hız) ve manyetik (kalıcılık) birimlerin avantajlarını aynı birimde birleştirmek önem arz etmektedir. Bunu gerçekleştirebilmek için nanometre mertebesindeki yapıların elektronik ve manyetik özelliklerini daha iyi anlamaya gereksinim vardır. Bu kapsamda, genel olarak “spintronik” olarak adlandırabileceğimiz, elektronların yüklerinin yanında spin olarak adlandırılan bir başka özelliğinin de kullanıldığı bir çalışma alanı giderek önem kazanmaktadır. Bu çalışma alanında, en önemli konulardan biri metal ve yarıiletkenlerde spin taşınımı, spin kutuplu akımların oluşturulması ve ölçülmesidir. Bu çerçevede, magnetoelektronik olarak bilinen elektronun kuantum özelliklerini kullanarak elektronun dönüşünü ve yük durumunu kullanmayı hedef alan ve yeni bir teknoloji olan spintronikin temellerinin magnetorezistans etkisinin bulunması ile başladığını söyleyebiliriz. Bu buluş devasa manyetorezistans (GMR) olarak adlandırılmaktadır

[35]. Ferromanyetik ve manyetik olmayan metallerin katmanlı yapılarında elektriksel direncin, manyetik tabakaların manyetizasyon yönlerine bağlı olarak büyük değişim göstermesi ilkesine dayanan aygıtlar ise şu anda üretilmiş ve kullanılmaktadır [36]. Şu anda tüm bilgisayarlarda, manyetik veri depolama disklerinin okuma yazma kısımlarında GMR teknolojisi kullanılmakta olup endüstriyel alanda büyük bir öneme sahiptir. Yakın gelecekte, yine bu teknolojiyle üretilcek olan MRAM (magnetoresistive random access memory) kalıcı belleklerinin de çok büyük ticari önemi olacağı açıktır [37]. Bilgi-işlem teknolojisinde bilgi işlem hızının artırılmasına yönelik bu tür çalışmalar behsedildiği gibi manyetik okuyucular ile yapılmaktadır. Aynı zamanda manyetik okuyucularda manyetik momentin değişim aralığı mikrosaniye mertebesindedir. Bununla birlikte bu okuyucularda lokalize problemi bulunmaktadır. Nanoyarıletken yapılar ile üretilcek manyetik moment ise lokalize olabilir ve hızı mikrosaniye mertebesindedir. Daha iyi sonuç elde edebilmek için üretimi kolay ve stabil olan moleküler halkalar veya küreler seçilebilir. Bu yapılar femtosaniye zaman aralığında manyetik moment üretebilmektedir. Aynı zamanda bu yapılar hızlı aç-kapa özelliğine sahiptir ve lokalize olabilmektedir. Lazer güdümlü moleküler elektron kontrolü bu alanı genişletebilecek önemli bir potansiyele sahiptir. Bu sebepten ötürü bu çalışmada lazer güdümlü moleküler elektronik kontrolü gerçekleştirilmek istenmektedir. Uygun frekansa sahip bir elektromanyetik dalganın moleküllerde yer alan serbest elektronlarla nasıl etkileştiğini incelemek bu çalışmanın amaçlarından biridir. Elektromanyetik dalga olarak, optiksel vorteks (bükümlü ışık) olarak adlandırılan, açısal momentuma ve yüksek hızda atımlara sahip elektromanyetik dalgaların etkileri incelenecektir. Buradaki amaç, bükümlü lazer ışınlarının uygun frekansta ve yüksek hızda atımlarla molekül üzerine gönderildiğinde, molekül içerisindeki serbest elektrona açısal momentumun transfer edilip edilemediğinin anlaşılmasıdır. Böyle bir transfer, örneğin moleküler halka ortasına yerleştirilecek bir manyetik atoma ait elektronların spinlerinde değişiklik meydana getirebilir ve spin kontrol edilebilir. Bu çalışmada amacımız, benzen ve fulleren nanomoleküller üzerine gönderilen lazer ışını ile, kontrol edilebilir bir manyetik alan üretmek ve bu manyetik alanın yönelimini kontrol etmektir.

Moleküler elektronik kontrolünü sağlamak için, öncelikle molekülün elektronik yapısını anlamak gerekmektedir. Moleküllerin gerçekçi hesaplarının yapılabilmesi için Gaussian 09 programında öncelikle bu hesapların nasıl yapıldığının anlaşılması için basit olan benzen molekülü hesapları üzerinde durulmuştur. Ortaya çıkan özellikler kuantum mekaniksel olarak incelenmiştir. Gaussian 09 programından çekilen temel setler ve moleküler orbital katsayıları ile Mathematica programında benzen molekülüne ait bütün enerji seviyelerine ait dalga fonksiyonları elde edilmiştir. Mathematica'da elde edilen orbital şekilleri ile Gaussian'dan çekilen orbital

şekillerinin birbiriyle uyum içinde olduğu görülmüştür. Mathematica programında işlenen bu değerler ile sistemdeki herhangi bir enerji seviyesine ait dalga fonksiyonu x, y, z koordinatlarında elde edilmiştir. Daha önce de belirtildiği üzere açısız momentum taşıyan ışık ile halka tipi yapılara elektrik akımı ve manyetik moment indüklemek mümkündür. Dalga fonksiyonu ve enerji hesaplamalarının ardından, bükümlü ışığın sistem (benzen) üzerinde oluşturabileceği elektron akımı ve buna bağlı olarak indüklenen manyetik momentin ortada yer alan manyetik atom üzerindeki etkisi incelenebilecektir. Benzen molekülünün ortasına yerleştirilecek manyetik atomlu bir sisteme bükümlü ışık gönderilmesi üzerine yapılan bu hesaplamalar, fulleren gibi daha karmaşık sistemler üzerine yapılacak çalışmalara öncülük edecektir.

1.10. Çalışmanın Planı

Bu çalışma, takip eden sırayla tanzim edilmiştir. Bölüm 2’de literatür taraması yapılmıştır. Bölüm 3’de hesaplama yöntemlerine değinilmiştir. Bölüm 4’de, bulgular ayrıntılı bir şekilde gösterilmiştir. Çalışmanın daha sonraki bölümü sonuç bölümüyle devam etmektedir. En son bölümde kaynaklar ve özgeçmiş yer almaktadır.

2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

1600'de William Gilbert tarafından kaleme alınan "De magnete, magnetisque corporibus, et de magno magnete tellure" isimli eserin elektron spinleri ile manyetizma arasındaki ilişkiyi ortaya koyması açısından bu alanda yapılan ilk çalışma olduğu söylenebilir [35]. Bu alanda modern teknoloji uygulamaları, magnetoelektronik olarak da bilinen magnetorezistans (GMR) etkinin (1988) Albert Fert ve Peter Grünberg tarafından bulunmasıyla başlamıştır[38-39]. Elektronun kuantum özelliklerini kullanarak elektronun dönüşünü ve yük durumunu belirlemeyi hedef alan bu yeni teknoloji spintronik temellerini oluşturmuş, nanoteknolojinin gerçek bir uygulaması olan harddisk teknolojisini meydana getirmiştir. Bu iki bilim adamı birbirlerinden bağımsız olarak yaptıkları bu çalışmadan dolayı 2007 yılında Nobel fizik ödülüne layık görülmüşlerdir [40]. GMR etkisi, ferromanyetik olan bir malzeme çiftinin arasına konulan manyetik olmayan metal bir malzeme yardımıyla elde edilir, ayrıca bu etki spin vanası adı verilen yapılarda da gözlemlenmektedir. Ayrıca Fert ve Grünberg'in bulduğu bahsini ettiğimiz GMR buluşu iletişim ve enformasyon alanında da büyük bir etki bırakmıştır.

Daha sonraları ise (1996), iki ferromanyetik malzeme arasına yalıtkan malzeme konularak manyetik tünelleme yapıları bulunmuştur. 2001 yılında Butler ve ark., Mathon ve ark. tarafından bu çalışma geliştirilmiştir [41-42]. Sonraları ise (2003), spin Coulomb drag etkisi, spin fotogalvanik etki gibi spine bağlı önemli özellikler yarı iletkenlerde gözlemlenmiştir [43].

Yarıiletken malzemelerde dengede olmayan spin durumları, spin polarize ışınları elde etmek ve sistemin spin dinamiğini değiştirmek açısından önemlidir. Bunlar ise elektronik ve optiksel taşıma ile gerçekleştirilebilir. Elektriksel spin aşılama ise ilk defa 1963 yılında Clark ve Feher tarafından gerçekleştirilmiştir [44].

Son yıllarda ultrahızlı lazer teknolojisinin ve modern teorik yöntemlerin gelişmesiyle, çeşitli sistemlerle zamana bağlı elektromanyetik dalgaların etkileşimi, ve buna bağlı elektronik ve spintronik dengede olmayan durumları incelenmiştir [45]. Yakın zamanlardaki deneysel çalışmalarla da, ihtiyaç duyulan ultrahızlı asimetrik lazer atımları pikosaniye ve femtosaniye mertebesinde üretilebilmiştir [46-47]. Bu sayede kuantum halkalarda denge durumunda spin-orbit etkileşimleri araştırılmıştır. Zhu ve Berakdar, yarı çevrim ultrahızlı lazer atımlarının yarıiletken kuantum halkalarda spine bağlı elektrik akımlarını hesaplamışlardır [48]. Quinterio ve Berakdar, aynı olayı, aynı malzemede bükümlü ışık altında incelemiştir [49]. Hinshe ve ark. yarıiletken halkalardaki spin dinamiği değişimlerini sisteme safsızlık ekleyerek incelemiştir [50]. Daha sonra Zhu ve ark., kuantum tellerde optiksel olarak spin kontrolünün mümkün olup olmadığını çalış-

masında sorgulamış [51], bükümlü ışığın homojen olmayan karakteristiği ile açısal momentum taşımalarının malzemenin spin özellikleri üzerine nasıl bir etkisi olduğunu araştırmıştır.

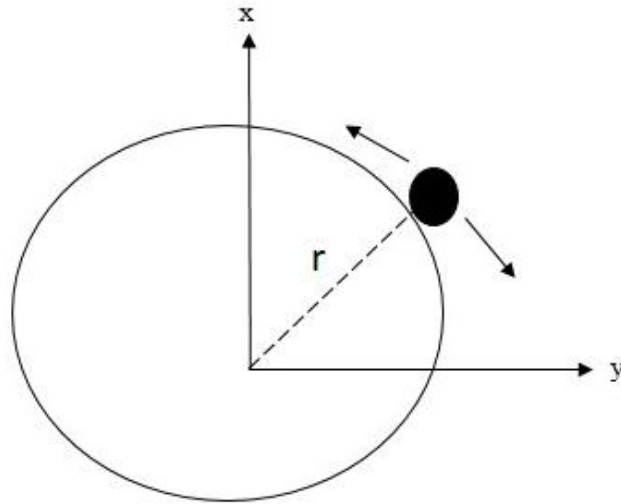
Son paragrafta bahsedilen çalışmalar aynı zamanda bu tezin temelini oluşturmaktadır. Bahsedilen çalışmalar spintronik alanında büyük öneme sahip olmakla beraber, hiçbir çalışma şimdiye kadar bükümlü ışık altında moleküler toplarlarda dengede olmayan ultrahızlı spin dinamiği ve spin kontrol mekanizmasını incelememiştir.

3. MATERYAL VE YÖNTEM

Amaç kapsamında belirtildiği gibi bu çalışmanın nihai amacı, ultrahızlı bükümlü ışığın moleküler toplaktaki spin dinamiği üzerine etkisini araştırmaktır. Spin dinamiğini anlamak için öncelikle sistemin elektronik özelliklerini, çevresel faktörlere ve yapısal değişikliklere duyarlılığını incelemek gerekmektedir. Bu doğrultuda en önemli kısım elektronik yapı hesaplarıdır. Bununla birlikte sisteme etkisi incelenecek olan elektromanyetik dalganın zamana ve uzaya bağlı değişimi incelenmeli, yayıldığı ortamda çevresiyle olan etkileşimi araştırılmalıdır. Daha sonra ise incelenen malzeme ile bükümlü ışık arasındaki etkileşimler zamana bağlı Schrödinger denklemi içerisinde analiz edilmelidir. Aşağıda, elektronik yapı için kullanılacak yöntemler, bükümlü ışığın yapısal analizi ve zamana bağlı spin dinamiği hesapları maddeler halinde anlatılacaktır.

3.1. Model Potansiyel

Küresel bir simetrik moleküler topağın elektronik özellikleri, bu yapının modellenmesi ile elde edilebilir. Şekil 3.1’de görüldüğü gibi küresel simetriye sahip bir sistemde, elektronların küre yüzeyine paralel ve açısal hareket ettikleri varsayılır.



Şekil 3.1. Sabit bir r yarı çapı boyunca hapsedilen bir parçacık

Elektronlar yörüngesel ve manyetik kuantum sayılarına bağlı kesikli enerji seviyelerinde bulunur, küresel harmonik fonksiyonları ile ifade edilen dalga fonksiyonlarına sahip olurlar. Kürenin yarıçapı boyunca da, elektronun hapsedildiği varsayılır, önerilecek bir radyal model potan-

siyeli ile elektronların sınırlandırılmış dalga fonksiyonları elde edilir. Model potansiyel hesabının teori kısmı 4. Bölüm’de ayrıntılı bir şekilde irdelendiğinden burada kısa kesilmiştir.

3.2. Kuantum Mekaniksel Yöntemler

Bu prensipleri kullanan hesaplama yöntemleri (KMY), MD (MolekülerDinamik) yöntemlerine nazaran çok daha karmaşık ve uzun hesaplamalar yaparlar. Genel olarak çok elektronlu sistemleri basitleştirmeye yönelik prensiplerdir.

Çok elektronlu Schrödinger denklemini daha basit ve pratik hale getiren 3 önemli yaklaşım vardır ki bunları kullanan yöntemlere ‘‘Hartree-Fock’’ modelleri denir.

3.2.1. Hartree-Fock modelleri

3.2.1.1. Hartree-Fock yaklaşımı

Hartree N elektronlu bir sistemin dalga fonksiyonunu tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı şeklinde ifade etmiştir. Elektronların hareketlerinin ayrıştırılması yöntemidir. Çok elektronlu dalga fonksiyonu, tek elektronlu dalga fonksiyonlarının çarpımlarının toplamları halinde yazılır ve bir determinanta dönüştürülür. Buna Slater determinanı denir [52].

Slater Determinatı:

$$\psi(1,2, \dots, n) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} X_1(1) & X_2(1) & X_3(1) & X_4(1) & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & X_n(1) \\ X_1(2) & X_2(2) & X_3(2) & X_4(2) & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & X_n(2) \\ X_1(3) & X_2(3) & X_3(3) & X_4(3) & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & X_n(3) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ X_1(n) & X_2(n) & X_3(n) & X_4(n) & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & X_n(n) \end{vmatrix}$$

$X_i = \phi(r)\alpha$ yada $X_i = \phi(r)\beta$ dir. Burada, $X_i = X_1, X_2, X_3$.(orbitaller) temsil etmektedir., $(n) = (1), (2), (3)$.(elektronlar) sayılarını almaktadır. ϕ Atomik orbitali, $\frac{1}{\sqrt{n!}}$ normalizasyon sabitini, α, β spin’i temsil eder.

Satırlar bir elektronun farklı orbitallerde bulunma olasılığını gösterir. Sütunlar bir orbitalde farklı elektronların bulunma olasılığını gösterir. Determinantta iki satırın yer değiştir-

mesi durumunda determinantın işareti değişir. Bu durum dalga fonksiyonunun anti simetrikliğine karşılık gelir. İki tane özdeş sütun varsa determinantın değeri sıfır olur. Bu durum Pauli dışlama ilkesine karşılık gelir. Çoğu uygulamada işlemi basitleştirmek için, Slater determinantının sol üst köşesinden sağ alt köşesine uzanan köşegen elemanları kullanılır. Bu, Slater determinantının kısaltılmış şeklidir. Hartree-Fock metodu kapalı kabuk sistem elektronlarını tek bir Slater determinantı ile göstermektedir. Molekül orbitalleri, bir elektronun, her bir elektronun ortalama potansiyel enerji alanında hareket etmesi esitliğinin çözümünden elde edilmektedir. Bu bağımsız tanecik modeli, elektronların hareketi arasındaki korelasyonu yok saymaktadır.

Her bir moleküler orbitalin atomik orbitallerin lineer kombinasyonu halinde değerlendirilmesi LCAO yaklaşımıdır.

$$\Psi_i = \sum C_{i\mu} \phi_\mu \quad (3.1)$$

Burada, Ψ_i dalga fonksiyonunu temsil eder. C_i = katsayılar, $\phi = \phi_i, \mu$ = Atomik orbitaller dir. Bu yaklaşım sayesinde problem en iyi fonksiyonu bulmak yerine basitleşerek en iyi lineer katsayıları bulmak haline dönüşür. ϕ_μ 'yi s, p, d, f vs. gibi atomik orbitaller olarak düşünebiliriz. Aslında bunlar ‘‘Gaussian Basis Functions’’ denilen fonksiyonların lineer kombinasyonlarıdır. ‘Gaussian basis functions’ denklem 3.2’ de gösterildiği gibi x, y, z cinsinden polinomların r^2 li bir eksponansiyel ile çarpımlarıdır.

$$x^l y^m z^n e^{-\alpha r^2} \quad (3.2)$$

Burada α sabit bir sayıdır ve fonksiyonun çapının büyüklüğünü gösterir. Polinomun derecesine göre bu fonksiyonlar s, p, d vs. diye isimlendirilir. Denlem 3.2’de üstlerdeki tamsayıların (l, m, n) toplamları sıfır ise : s , üstlerdeki tamsayıların toplamları 1 ise : p , üstlerdeki tamsayıların toplamları 2 ise: d fonksiyonu oluşur.

3.2.1.2. Temel Kümeler ‘‘Basis Functions/Basis Sets

Temel kümeler Slater tipi orbitaller ve Gaussian tipi orbitallere (GTF) sahiptir. GTF ile fonksiyonlar daha hızlı hesaplanabildiği için bu tip fonksiyonlar daha popüler olarak kullanılmaktadır [53]. Bu çalışmada da bu tip fonksiyonlar kullanılmıştır.

Gaussian tipi fonksiyon (GTF) $polinom * e^{-\alpha r^2}$ denkleminde eşittir. Burada $polinom, x, y, z$ cinsinden polinomu ifade eder. Denklem 3.3'deki gibi ifade edilir.

$$GTF = x^l y^m z^n \exp(-\alpha r^2) \quad (3.3)$$

3.2.2. Yoğunluk Fonksiyonel Teorisi (DFT)

HF metodunda elektron-elektron etkileşmelerinde korelasyon etkileri dikkate alınmadığı için elektronlar arasındaki etkileşim potansiyel enerjisi gerçek enerjiden bir miktar fazla olmakta, HF enerjisi gerçek toplam enerjiye bir üst limit oluşturmaktadır. Bir sistemin görelî olmayan tam enerjisi (ϵ_0) ile Hartree-Fock metoduyla elde edilen (E_0) arasındaki farka korelasyon enerjisi (E_{corr}) denir.

$$E_{corr} = \epsilon_0 - E_0 \quad (3.4)$$

DFT, elektron korelasyon problemine alternatif bir yaklaşım sunar. N elektronlu bir sistemde DFT, HF metodunda olduğu gibi bireysel olarak elektronların hareketleriyle ilgilenmez. DFT uzayın herhangi bir noktasında lokalize olmuş elektron yoğunluklarıyla ilgilenir. HF metodunda sisteme ait dalga fonksiyonlarının yerini, DFT de sistemin elektron yoğunluk fonksiyonları almaktadır.

DFT metotları ile elektronik enerji şu şekilde tanımlanır:

$$E = E^T + E^V + E^J + E^{XC} \quad (3.5)$$

Burada E^T elektronların hareketinden ortaya çıkan kinetik enerjiye ait terimi, E^V çekirdek-elektron çekimlerine ve çekirdek çiftlerinin itmesine ait potansiyel enerjiyi tanımlayan terimleri içerir. E^J elektron-elektron itmesine ait terimdir. E^{XC} geriye kalan diğer elektron-elektron etkileşimlerini kapsar. Kısaca değişim-korelasyon terimi olarak adlandırılır.

E^{XC} terimi denklem 3.6'da görüldüğü gibi genellikle “değişim” ve “korelasyon” olarak iki kısma ayrılır.

$$E^{XC}(p)=E^X(p) + E^C(p) \quad (3.6)$$

Bu denklemdeki her terim yine birer fonksiyoneldir. $E^X(p)$ deęişim fonksiyoneli, $E^C(p)$ ise korelasyon fonksiyonelidir. Bu alıřmada dairesel simetrik molekülleri (benzen) için Gaussian 09 programında DFT yöntemi kullanılmıřtır. Bu moleküller için Gaussian 09 programında HF modelleri de ilk etapta kullanılmıřtır fakat DFT metodu ile elde edilen sonuçlar HF ile elde edilen sonuçlara göre daha verimli olmuřtur.

3.3. Bükümlü Iřık

Bu alıřmada, optik girdap(vortex) ya da bükümlü iřık(twisted light) olarak adlandırılan homojen olmayan elektromanyetik alan tarafından tařınan, topolojik yük ile etkileřen moleküler topak, ok elektronlu sistem olarak ele alınmıřtır. Böyle bir etkileřimden maksat, iřıktan sisteme yö-rüngesel açısıl momentum aktarımının gerekleřtirilme olasılıęıdır. Silindirik koordinatlarda, monokromatik iřığın vektör potansiyeli

$$\mathbf{A}(r, \theta, t) = \hat{\mathbf{e}} A_0 F_{m_a}^p(r) e^{-i\omega t - |\delta|t} e^{iq_z z} + cc. \quad (3.7)$$

řeklinde verilir. Burada A_0 vektör potansiyelinin büyüklüęü, z iřığın yayılma yönü ve q_z iřığın z eksenindeki dalga vektörüdür. ω iřığın frekansı ve δ iřığın atım süresi olarak tanımlanır. Polarizasyon vektörü

$$\hat{\mathbf{e}} = x \mp iy \quad (3.8)$$

řeklindedir. Iřının $x - y$ düzlemindeki uzaysal profili

$$F_{m_a}^p(r) = L_p^{|m_a|} \left(\frac{2r^2}{\omega_0^2} \right) e^{-\frac{r^2}{\omega_0^2}} \left(\frac{\sqrt{2}r}{\omega_0} \right)^{|m_a|} e^{im_a\theta}. \quad (3.9)$$

olarak tanımlanabilir. $m_a \in \mathbb{Z}$ optik girdapın (optical vortex) topolojik yükü ve $L_p^{|m_a|}$ (associated) Laguerre polinomudur. Burada p radyal nod sayısıdır. ω_0 ise iřık sırtı (beam waist) olarak adlandırılır. Iřık yoğunluęunun maksimum olduęu iki tepe noktası arasındaki mesafedir.

3.4. Işık-Madde Etkileşim Terimi

Gaussian 09'dan elde edilen dalga fonksiyonu (ψ_{toplam}) ve denklem 3.9'da verilen bükümlü ışığın uzaysal profili kullanılarak bükümlü ışık ile moleküler topak arasındaki etkileşme terimi

$$N = \int_0^{\infty} \psi_{toplam} F_{m_a}^p(r) \psi_{toplam}^* r dr \quad (3.10)$$

şeklinde yazılır.

3.5. Ultrahızlı Yük ve Spin Dinamiği

Elektronik yapı hesaplarının ardından, ultrahızlı bükümlü lazer ışınlarının elektronik yapı üzerindeki etkisinin araştırılmasına geçilebilir. Elektronik yapı değişimine bağlı malzemede oluşan elektriksel akım ve manyetik alan gibi sonuçların analiz edilmesi ve sonuçta spin özellikleri ile ilgili değişimler incelenmelidir. Herhangibir elektronik dalganın malzeme üzerindeki etkisi Hamiltonian ile ifade edilebilir,

$$H_0 = \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}) - e\Phi + \frac{\alpha_R}{\hbar} \{\hat{\sigma} + (\mathbf{p} + e\mathbf{A})\} + \mu_B \mathbf{B} \cdot \hat{\sigma} \quad (3.11)$$

Burada e ve m^* sırasıyla elektron yükü ve etkin kütedir. \mathbf{A} , elektromanyetik dalgaya ait vektör potansiyelidir. $V(\mathbf{r})$, elektronların maruz kaldığı sisteme ait potansiyeldir. Φ skalar potansiyel, eşitlikteki 4.terim Rashba spin orbit birlikteliğidir (coupling). $\hat{\sigma}$ Pauli matrislerini içermektedir. Eşitlikteki son terim ise EM dalga ile elektronun manyetik moment arasındaki birlikteliği tanımlayan Zeeman ifadesidir. Çalışmada kullanılacak olan \mathbf{A} vektörü

$$\mathbf{A}(r, t) = e_{\sigma} \sqrt{\frac{2p!}{\pi (l_w+p)!}} \frac{w}{w(z)} L_p^{l_w} \left[\frac{2r^2}{w(z)^2} \right] \left(\frac{\sqrt{2}r}{w(z)} \right)^{l_w} e^{-\frac{r^2}{w(z)^2}} e^{-il_w\phi} e^{i(q_z z - wt)} \sin^2(w_e t) \quad (3.12)$$

şeklinde yazılır. Buradaki e_{σ} polarizasyon yönünü belirler. Sinüs fonksiyonu lazer atımlarını tanımlar. r 'ye bağlı eksponansiyel terim ışığın gaussian fonksiyonuna uygun dağıldığını, açısız ifade ışığın açısız momentum taşıdığını göstermektedir. Zamana bağlı Schrödinger denklemi

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = \hat{H} \Psi(r, t) \quad (3.13)$$

ile ifade edilirken, zamana bağı dalg fonksiyonu elektronik dalg fonksiyonlarının bileşimi

$$\Psi(r, t) = \sum_n C_n(t) e^{-iE_n t} \psi_n(r) \quad (3.14)$$

şeklinde yazılır. $\psi_n(r)$ ve E_n tek parçacığa ait dalg fonksiyonu ve enerjileri ifade eder ki, daha önce de bahsedildiği gibi bu değerler model potansiyeller veya ab-initio yöntemler ile hesaplanabilir. Denklem 3.14, denklem 3.13 'de yerine konulup her iki taraf $\psi_n^*(r)$ ile çarpılıp r üzerinden integre edilirse,

$$i C_n = -A_0^{-i\omega t} \sin^2 \omega_e t \sum_{n'} C_{n'} e^{i(E_n - E_{n'})t} \times \left(\frac{q \alpha_R}{\hbar} \langle n | F_{I_w}^p(r) e^{iI_w \phi} \mathbf{e}_\sigma \cdot \mathbf{r} | n' \rangle \right. \\ \left. + \frac{q}{m} \langle n | \hat{\boldsymbol{\sigma}} \times F_{I_w}^p(r) e^{iI_w \phi} \mathbf{e}_\sigma \cdot \mathbf{r} | n' \rangle \right) + c.c. \quad (3.15)$$

ifadesi bulunur. Bu ifade denklem 3.14'de yerine konulursa zamana bağı dalg fonksiyonu hesaplanır. Böylece sisteme ait spin dinamiği incelenebilir. Dalg fonksiyonu hesaplama yöntemleri ve ışık madde etkileşimi Bulgular kısmında daha detaylı bir şekilde anlatılacaktır.

4. BULGULAR

Küresel simetrik ve dairesel simetrik moleküllerin elektronik yapısı ab-initio hesap yöntemleri ile bulunabildiği gibi model potansiyel hesapları ile de yapılabilmektedir. Biz çalışmamızda küresel simetrik molekülleri model potansiyeller ile hesaplarken, dairesel simetrik moleküller için Gaussian 09 programında DFT yöntemi kullanıldı.

4.1. Küresel Simetrik Molekülde Bükümlü Işıklı Manyetik Moment İndüklenmesi

4.1.1. Model Potansiyel İle Elektronik Yapı Hesabı

Küresel simetrik moleküler bir topak içerisinde elektronların üç hareketi söz konusudur. Kürenin merkezi ile yüzey arasında elektronlar radyal potansiyelle maruzdur ve radyal hareket meydana gelir. Ayrıca radyal mesafede elektronların enerjileri “radyal kuantum sayısına (n_r)” bağlı olarak değişir. İki açısız hareketten yörüngesel (orbit) hareket potansiyelden bağımsızdır (sistemin küresel simetrik olduğu unutulmamalıdır). Yörüngesel hareketten dolayı elektron enerjisi “yörünge kuantum sayısına (ℓ)” bağlı olarak değişiklik gösterir. Son olarak manyetik (azimutal) açısız hareket yine potansiyelden bağımsız olarak elektron enerjisinin “manyetik kuantum sayısına (m_ℓ)” olan bağımlılığını gösterir. Bu üç hareketten kaynaklanan kuantum sayıları şu şekilde ifade edilebilir:

$$\begin{aligned} n_r &= 0, 1, 2, \dots \\ l &= 0, 1, 2, \dots \\ m_l &= 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l \end{aligned} \quad (4.1)$$

burada n_r ana kuantum sayısı ile karıştırılmamalıdır. Radyal dalga fonksiyonu, radyal potansiyelin “Schrödinger dalga denklemi”nde

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{n_r, l}(r)}{\partial r^2} + V(r) \psi_{n_r, l}(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} = E_{n_r, l} \psi_{n_r, l} \quad (4.2)$$

burada \hbar Plank sabitini ve m elektron kütesini göstermektedir. Enerji (E) ifadesi ise radyal ve yörüngesel kuantum sayılarına bağlı olarak bulunmaktadır. Radyal potansiyel ise deney sonuçları ile ab-initio yöntemlerin karşılaştırılması sonucunda elde edilir. Açısız dalga fonksiyonları ise küresel simetrik bir sistem için basitçe küresel harmonik fonksiyonu, $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ olur. Doğru radyal potansiyeli bulmak sistemi modellemek için yeterli olacaktır.

Katnaklar bölümünde yer alan referans 56 ve referans 57, fulleren molekülünü küresel simetrik kabul ederek, radyal potansiyelini aşağıdaki formülle tanımlamıştır:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & \text{if } r_0 < r < r_i + d, \\ 0, & \text{if } r < r_0, \end{cases} \quad (4.3)$$

Burada d potansiyel duvarının kalınlığı, r_0 ise kürenin iç yarıçapı olarak verilmiştir. Dolmatov ve ark. ise C_{60} içindeki bir elektronun radyal hareketini tanımlamak için Woods-Saxon potansiyelini önermiştir [56] ki;

$$V(r) = \begin{cases} \frac{2V_0}{1 + \exp\left(\frac{r_0 - r}{v}\right)}, & \text{if } r \leq r_0 + \Delta/2, \\ \frac{2V_0}{1 + \exp\left(\frac{r - r_0 - \Delta}{v}\right)}, & \text{if } r > r_0 + \Delta/2 \end{cases} \quad (4.4)$$

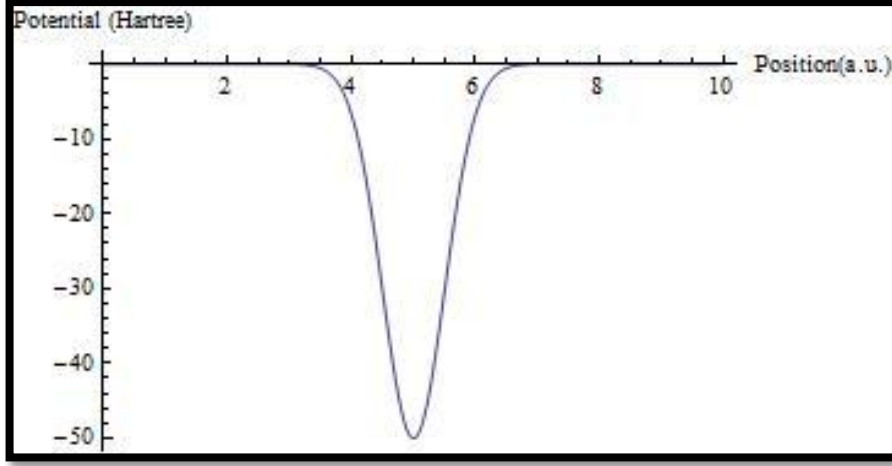
burada v eklenen atomla ilişkili parametredir. r_0 , V_0 ve Δ potansiyel parametreleridir. Lin ve ark. aşağıda gösterilen üstel kuvvet potansiyelini kullandılar [57];

$$V(\lambda; r) = -\gamma \exp[-\lambda(r - r_0)^p/w^p] \quad (4.5)$$

burada r_0 ve w sırasıyla içi boş kafesin genişliğini ve yarıçapını gösterir. Nascimento ve ark. fulleren tipi yapıları modellemek için gaussian tipi potansiyeli uyguladı [58];

$$V(\lambda; r) = -\gamma \exp[-\lambda(r - r_0)^2]. \quad (4.6)$$

Burada γ ve λ , potansiyel derinliğini ve genişliğini göstermektedir. Bu tarzdaki radyal potansiyelin tek boyutta şematik gösterimi Şekil 4.1'deki gibidir.

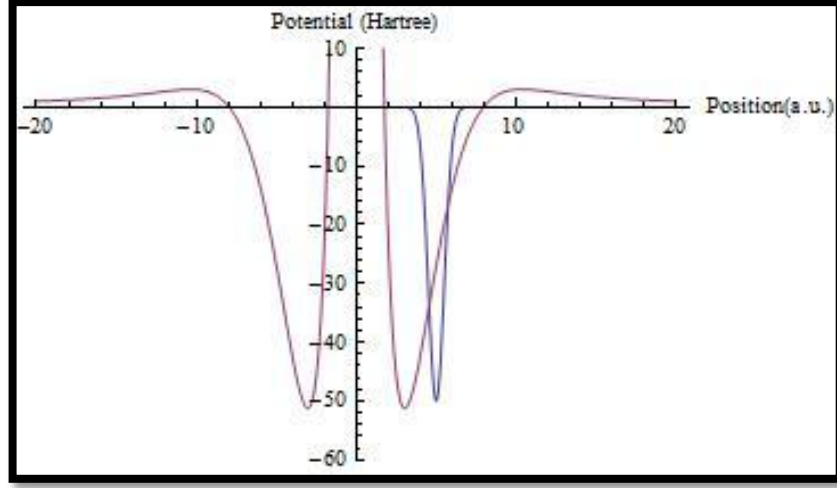


Şekil 4.1. Denklem 4.6’da verilmiş olan potansiyel formülüne göre çizilmiş gaussian potansiyeli. Burada potansiyel derinliği $\gamma = 50.0 \text{ Hartree}$ ve potansiyel genişliği $\lambda = 2 \text{ a.u.}$ olarak verilmiştir. Yarıçap $r_0 = 5 \text{ a.u.}$ olarak verilmiştir. Bu parametreler C_{60} molekülünün gerçek değerleri ile uyumlu olacak şekilde belirlenmiştir

Şekil 4.1’de görüldüğü gibi r_0 parametresi simetriyi bozduğundan potansiyeli süreksiz, kesikli hale getirir, potansiyelin çözümü ise yalnızca numerik yöntemlerle elde edilebilir. Bu potansiyelin analitik çözümü için $r_0 = 0$ olmalıdır. Çalışmamızda küresel simetrik kafes şeklindeki bir nanoyapıya ait radyal potansiyelin, çekici gaussian potansiyeli ile terskare teriminin toplamı şeklinde tanımlanabileceği bulunmuştur;

$$V(\lambda; r) = -\gamma e^{-\lambda r^2} + \frac{\beta}{r^2} \quad (4.7)$$

Buradaki ikinci terimde dahil olan β (pozitif olmalı) küresel simetriden kaynaklanan bariyer terimine $l(l + 1)/2$ çok benzemektedir [59]. $\beta = 0$ olduğu durumda denklem 4.3’de ki potansiyel bir metal topak gibi katı bir nano parçacığı tanımlayabilir, $\beta \neq 0$ olduğu durumda ise içi boş bir nano küre tanımlanabilir.



Şekil 4.2. Denklem 4.6 (mavi) ve 4.7 (kırmızı)'de verilmiş olan potansiyel formüllerine göre çizilmiş radyal potansiyeller. Denklem 4.7'ye ait parametreler denklem 4.6 için elde edilecek potansiyel ile uyumlu olacak şekilde düzenlenmiştir.

Şekil 4.2'de görüldüğü gibi, simetrik ve analitik çözüme uygun durumdadır. Aygun ve ark. tarafından yapılmış daha önceki çalışmalardaki gibi β/r^2 , bariyer teriminin $-l(l+1)/r^2$ içerisinde yerleştirilebilir [59]. Bu durumda, yeni bir parametre $l'(l'+1) = -l(l+1) + \beta$ tanımlanabilir ki böylece l' :

$$l' = \frac{1}{2} \left(-1 + \sqrt{1 + 4l + 4l^2 + 4\beta} \right) \quad (4.8)$$

Denklem 4.7'de ki çekici gaussian potansiyel terimi küçük λ değerleri için aşağıdaki şekilde genişletilebilir,

$$V(\lambda; r) = -\gamma + \gamma\lambda r^2 - \frac{\gamma\lambda^2}{2} r^4 + \dots \quad (4.9)$$

burada $\gamma\lambda^2$, $\gamma\lambda = mw^2/2$ daki iyi tanımlanmış harmonik salınıcı potansiyelini belirler. $-\gamma + \gamma\lambda r^2$ den başka terimlerin rolü potansiyelin harmonik potansiyelden ne kadar uzaklaştığını belirlemektir.

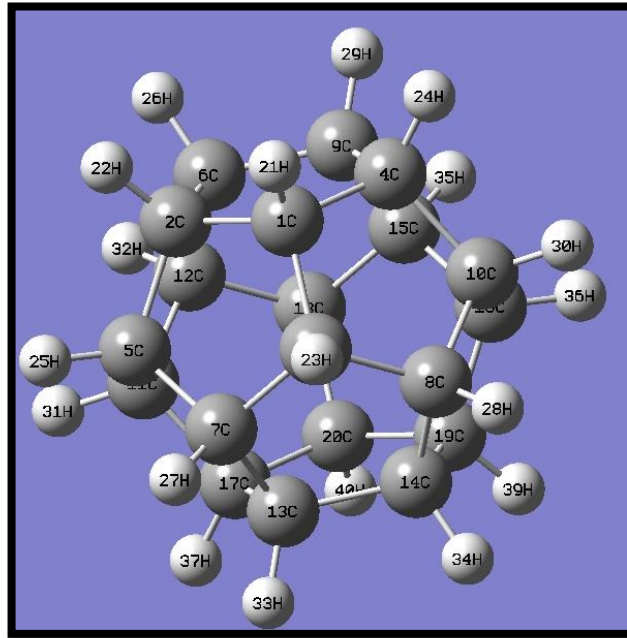
Detayları konu ile ilgili makalemize [60] bırakarak, toplam enerji özdeğerleri aşağıdaki gibi yazılabilir;

$$E_{n,l} = \left(2n + \frac{-1 + \sqrt{1 + 4l + 4l^2 + \beta}}{2} + \frac{3}{2} \right) \sqrt{\frac{\gamma \lambda \hbar^2}{2m}} - \gamma e^{-[2n + \frac{1}{2}(-1 + \sqrt{1 + 4l + 4l^2 + \beta}) + 3/2] \sqrt{\frac{\gamma \hbar^2}{2\gamma m}}} \quad (4.10)$$

burada elde edilmiş olan enerji değeri ve harmonik osilatör dalga fonksiyonu sistemi tanımlayabilecek niteliktedir. Bununla beraber, gerçek bir dalga fonksiyonu ile enerji özdeğerleri ancak Gaussian 09 gibi bir programla elde edilebilir.

























4.1.2. Gaussian 09 ile elektronik yapı hesabı

Küresel simetriye benzer yapılardan bir tanesi $C_{20}H_{20}$ molekülüdür. Bu molekül C_{60}



Şekil 4.3. Gausview programında görüntülenmiş $C_{20}H_{20}$ molekülü. Yapı optimize edilmiş olup, toplamda 70 işgal edilmiş enerji seviyesine sahiptir

molekülüne göre daha az atoma ve elektrona sahip olduğu için, Gaussian 09 programı yardımıyla kolaylıkla elektronik yapı hesabı yapılabilmektedir. Şekil 4.3' te görüldüğü gibi bu molekülde 20 karbon ve 20 hidrojen atomu bulunmaktadır ki, bu haliyle benzen yapısına benzemektedir. Benzen ile bu molekül arasındaki fark ise, benzenin dairesel, $C_{20}H_{20}$ molekülünün küresel simetriye sahip olmasıdır.

İsim	MO	Enerji (Hartree)	Gaussian Sonucu				
HOMO-50	1s	-0.9009					
HOMO-(49-47)	1p	-0.8364 -0.83634 -0.8363					
HOMO-(46-42)	1d	-0.73312 -0.73309 -0.73304 -0.73303 -0.73298					
HOMO-(41-38)	1f	-0.63715 -0.63714 -0.63711 -0.63706					
HOMO-(37-35)	1g	-0.54908 -0.54904 -0.54903					
HOMO-34	2s	-0.54061					
HOMO-(33-30)	1h	-0.50722 -0.5072 -0.50715 -0.50713					
HOMO-(29-27)	2p	-0.48627 -0.48623 -0.48621					

Şekil 4.4. $C_{20}H_{20}$ molekülüne ait işgal edilmiş seviyelere ait enerjiler ve bu seviyelere ait Gaussian'da B3PW91/6-311G metodu ile hesaplanmış ve Gaussview ile çizilmiş bazı moleküler orbitaller.

Şekil 4.4 ve Şekil 4.5 $C_{20}H_{20}$ molekülüne ait işgal edilmiş ve işgal edilmemiş enerji seviyeleri ve ilgili dalga fonksiyonlarını göstermektedir. Özellikle LUMO seviyeleri açık bir şekilde hibritleşmemiş MO seviyelerini göstermektedir.

İsim	MO	Enerji (Hartree)	Gaussian Sonucu				
LUMO	3s	0.01318					
LUMO-(1-3)	3p	0.0546 0.05462 0.05465					
LUMO-(4-6)	π	0.08244 0.08248 0.08254					
LUMO-(7-11)	3d	0.10042 0.10043 0.10044 0.10045 0.10047					
LUMO-(12-15)	3f	0.13579 0.13579 0.13580 0.13581					

Şekil 4.5. $C_{20}H_{20}$ molekülüne ait işgal edilmemiş seviyelere ait enerjiler ve bu seviyelere ait Gaussian'da B3PW91/6-311G metodu ile hesaplanmış ve Gaussview ile çizilmiş bazı moleküler orbitaller.

Elde edilen sonuçlara göre $C_{20}H_{20}$ molekülündeki moleküler orbitaller arasındaki geçiş olasılıkları belirlenebilir. Bu molekül üzerine dairesel polarize ışık gönderildiğinde elde edilecek olası akım yoğunlukları ve yönleri görülebilir. Bu değerler doğrultusunda akımı elde edilip edilmediği gözlemlenir.

4.1.3. İndüklenmiş Akım ve Manyetik Moment

Düşük boyutlarda çok elektronlu bir sistem, topolojik yüke sahip optik vorteks veya bükümlü ışık olarak adlandırılan bir ışık ile etkileşebilir. Bu etkileşim ışıktan sisteme açısal momentum transverine neden olur. Kartezyen kordinatlarda, monokromatik ışığın vektör potansiyeli,

$$\vec{A}(x, y, z, t) = \hat{e} A_0 F_{m_a}^p(\vec{r}) e^{-i\omega t - |\delta|t} e^{-iq_z z} + cc. \quad (4.11)$$

eklinde ifade edilir. Burada A_0 vektör potansiyelinin büyüklüğünü temsil etmektedir. Işık z yönünde yayılır ve q_z ise ışığın z eksenindeki dalga vektörüdür. ω ışığın frekansı, δ ışığın atım süresi olarak tanımlanır. $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ vektörel olarak $\vec{r} = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k}$ şeklinde ifade edilir. Kutuplanma (polarizasyon) vektörü ise,

$$\hat{e} = \begin{pmatrix} 1 \\ \mp i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

şeklinde tanımlanır. Işığın $x - y$ düzlemindeki uzaysal profili,

$$F_{m_a}^p(x, y, z) = L_p^{|m_a|} \left(\frac{2(x^2 + y^2 + z^2)}{\omega_0^2} \right) e^{-\frac{(x^2 + y^2 + z^2)}{\omega_0^2}} \left(\frac{\sqrt{2}(x^2 + y^2 + z^2)}{\omega_0^2} \right)^{|m_a|} e^{-im_a\phi} \quad (4.13)$$

şeklinde tanımlanır. Burada $m_a \in \mathbb{Z}$ optik vorteksin topolojik yükü ve $L_p^{|m_a|}$ (associated) Laguerre polinomudur. Dolayısı ile m_a açısai yapıyla ilişkilidir ve p radyal nod sayısıdır. ω_0 ise ışık sırtını ifade etmektedir. ϕ kartezyen koordinatlarda $\phi = \text{Arctan}\left(\frac{y}{x}\right)$ şeklinde ifade edilebilir.

Herhangibir ışığın (elektromanyetik dalga) sistem üzerindeki etkisi Hamiltonian ile ifade edilebilir;

$$\hat{H} = \frac{1}{2} [\hat{p} - A(r, \phi, t)]^2 + V(r) + \Phi(r, t) \quad (4.14)$$

A , q_z tarzında hem dikey hem de yatay bileşenlere sahiptir ve bu bileşenler frekanslar için ihmal edilebilir. Ayar parametresi (gauge) $\Phi = 0$ ve $\nabla_r = 0$ olarak ayarlanmıştır. $\hat{H} = \hat{H}_0 + H_{1t}$ olarak ifade edilir. Burada,

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2} + V(r)$$

ve

$$\hat{H}_{1t} = -[\hat{p}.A(r, \phi, t) + A(r, \phi, t).\hat{p}] / 2$$

olarak yazılır. A^2 terimi, ihmal edilmiştir.

Zamana bağlı dalga fonksiyonu serbest alan elektronik dalga fonksiyonlarının birleşimi şeklinde

$$\Psi(r,t) = \sum_k C_k(t) e^{-i\omega_k t} \psi_k(r) \quad (4.15)$$

yazılır. $\psi_k(r)$ tek parçacığa ait dalga fonksiyonunu ifade eder ki bu değer, bu çalışmada olduğu gibi model potansiyeller ya da ab-initio yöntemlerle hesaplanabilir. Burada k genel kuantum sayılarını (n, l, m) ifade eder ve $C_k(t)$ genişleme katsayısıdır. Yukarıdaki ifade Schrödinger denkleminde yerine konulup gerekli işlemler yapıldığında,

$$i\dot{C}_k = - \sum_{k'} C_{k'} e^{i(\omega_k - \omega_{k'})t} e^{-i\omega t} \langle k | H_1 | k' \rangle + cc \quad (4.16)$$

ifadesi bulunur. Burada $H_{1t} = e^{-i\omega t - \delta t}$, ye eşittir.

$$C_k \approx i \langle k | H_1 | k_0 \rangle \int_{-\infty}^{t_f} e^{-i(\omega_k - \omega_{k_0} - \omega + i\delta)t} dt + cc \quad (4.17)$$

Burada k_0 , kuantum sayıları (n_0, l_0, m_0) olarak ifade edilir.

Bunlardan başka,

$$C_k^{(1)} = i G_{k,k_0} \langle k | H_1 | k_0 \rangle \quad (4.18)$$

ile

$$G_{k,k_0} = -i \frac{e^{-i t_f (\omega_k - \omega_{k_0} - \omega + i\delta)}}{\omega_k - \omega_{k_0} - \omega + i\delta} + \frac{2\delta}{(\omega_k - \omega_{k_0} - \omega)^2} \quad (4.19)$$

şeklinde yazılırlar. Bu çalışmada özel olarak ilgilenilen indüklenen akım yoğunluğundan anlaşılacağı gibi ışık ile akım indüklenmektedir ;

$$\mathbf{j}(r) = \frac{i}{2} [\Psi(r, t_f) \nabla \Psi^*(r, t_f) - \Psi^*(r, t_f) \nabla \Psi(r, t_f)] \quad (4.20)$$

ifadesi,

$$j(x,y,z) = \frac{i}{2} \sum_k \sum_{k'} G_{k,k_0} G_{k',k_0}^* \langle \mathbf{k}/H_1/k_0 \rangle \langle \mathbf{k}'/H_1/k_0 \rangle^* \times e^{i(\omega_k - \omega_{k'})t} (j_x \hat{\mathbf{i}} + j_y \hat{\mathbf{j}} + j_z \hat{\mathbf{k}}) \quad (4.21)$$

şeklinde tekrar düzenlenebilir. Burada j_x, j_y ve j_z radyal olarak akım yoğunluklarını kontrol eder ve tekrar

$$\begin{aligned} j_x &= \Psi_k(r) \nabla_x \Psi_{k'}(r) - \Psi_{k'}(r) \nabla_x \Psi_k(r) \\ j_y &= \Psi_k(r) \nabla_y \Psi_{k'}(r) - \Psi_{k'}(r) \nabla_y \Psi_k(r) \\ j_z &= \Psi_k(r) \nabla_z \Psi_{k'}(r) - \Psi_{k'}(r) \nabla_z \Psi_k(r) \end{aligned} \quad (4.22)$$

şeklinde düzenlenebilir.

İndüklenen akım

$$I = \int_z \int_y \int_x (j_x \hat{\mathbf{i}} + j_y \hat{\mathbf{j}} + j_z \hat{\mathbf{k}}) dx dy dz \quad (4.23)$$

şeklinde bulunur. Burada geçiş matrisi;

$$M_{k,k_0} = \langle \mathbf{k} | (\nabla \cdot \mathbf{A}) + \mathbf{A} \cdot \nabla + \mathbf{A} \cdot \nabla | \mathbf{k}_0 \rangle / 2 \quad (4.24)$$

şeklinde ifade edilir. Burada Coulomb ölçüm parametresi (gauge)'nden dolayı $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ 'a eşittir. $p = -i[r, H_0]$ eşitliği kullanılarak denklem 4.24.,

$$\begin{aligned} M_{nlm, n_0 l_0 m_0} &= \langle nlm | H_0 \mathbf{A} \cdot \mathbf{r} | n_0 l_0 m_0 \rangle - \langle nlm | \mathbf{A} \cdot \mathbf{r} H_0 | n_0 l_0 m_0 \rangle \\ &= \langle nlm | H_0 | nlm \rangle \langle nlm | \mathbf{A} \cdot \mathbf{r} | n_0 l_0 m_0 \rangle - \langle nlm | \mathbf{A} \cdot \mathbf{r} | n_0 l_0 m_0 \rangle \langle n_0 l_0 m_0 | H_0 | n_0 l_0 m_0 \rangle \\ &= -i(E_{nlm} - E_{n_0 l_0 m_0}) \langle nlm | \mathbf{A} \cdot \mathbf{r} | n_0 l_0 m_0 \rangle \\ &= -i(E_{nlm} - E_{n_0 l_0 m_0}) A_0 \langle nlm | F_{m_a}^p(r) e^{im_a \theta} \hat{\mathbf{z}} \cdot \mathbf{r} | n_0 l_0 m_0 \rangle \\ &= -i(E_{nlm} - E_{n_0 l_0 m_0}) A_0 \left\langle nlm \left| F_{m_a}^p(r) e^{im_a \theta} (x + iy) \left(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} \right) \right| n_0 l_0 m_0 \right\rangle \end{aligned} \quad (4.25)$$

şeklinde tekrar düzenlenir.

Kürenin merkezinde manyetik alan elde etmek için,

$$B(\vec{r}) = \frac{\mu_0 e}{4\pi} \int_z \int_y \int_x \frac{(j_x \hat{i} + j_y \hat{j} + j_z \hat{k}) \times r}{|r|^\beta} dx dy dz$$

ifadesi kullanılır.

4.2. Dairesel Simetrik Molekülde Bükümlü Işıkla Manyetik Moment İndüklenmesi

4.2.1. Sınırlandırılmış Gaussian Tipi Orbitaler (CGTO'S) ve Temel Kümeler

Bu kısımda Gaussian 09 programının bir moleküle ait dalga fonksiyonları ve enerji özdeğerlerinin nasıl bulunduğuna dair bazı bilgiler verilecektir. Özellikle burada dalga fonksiyonları hakkında verilen bilgi, dışarıdan uygulanan elektromanyetik dalga ile sistemin nasıl etkileşeceği hakkında bilgi sahibi olmak açısından oldukça önemlidir. Elde edilen dalga fonksiyonlarının x,y,z 'ye bağlı değişimleri elde edilerek Mathematica programına aktarılmaktadır. Mathematica'da ise dış elektromanyetik alanın etkisi incelenmektedir.

Atomik orbitaler, bilinen bazı fonksiyon kümelerinin lineer kombinasyonları şeklinde yazılabilir. Örneğin Li için Hartree Fock (HF) 1s ve 2s orbitaleri şöyle yazılabilir;

$$f = \sum_i a_i x_i \quad g = \sum_i b_i x_i$$

a_i ve b_i katsayıları ve x_i fonksiyon kümeleridir. Bu fonksiyon kümelerine temel fonksiyonlar (basis functions) veya temel kümeler (basis sets) denir. İki fonksiyon çeşidi vardır.

1-Slater tipi

2-Gaussian tipi

Molekül orbital(MO) hesaplarında bu AO temel kümeleri optimize edilmektedir. MO'ler bu AO'lerin yani temel fonksiyonların lineer kombinasyonlarından elde edilir. Atomik orbitalerin lineer kombinasyonu haline dönüştürülmesi ile yapılan yaklaşım, atomik orbitalerin lineer kombinasyonu (AOLK/LCAO) yaklaşımıdır. Bu yaklaşım sayesinde problem en iyi fonksiyonu bulmak yerine basitleşerek en iyi lineer katsayıyı bulmak haline dönüşür. Sınırlandırılmış Gaussian Tipi Orbitaler (SGTO) ile bir atomun veya moleküler sistemin dalga fonksiyonunu şu şekilde ifade edebiliriz;

$$\phi_{abc}^{CGTO} = M \sum_{i=1}^n c_i x^a y^b z^c e^{-c_i r^2} \quad (4.26)$$

burada “ c_i ” sınırlandırılmış katsayıyı, “ ζ_i ” orbital üs katsayısını, “ M ” MO katsayısını, “ a, b, c ” açısal momentum kontrol katsayılarını ($L = a + b + c$), “ $x y z$ ” ise bir polinomu ifade etmektedir. Polinomun derecesine göre bu fonksiyonlar “ s, p, d, \dots ” diye isimlendirilir. Üslerdeki tamsayıların

(a, b, c) toplamları 0 ise “ s ”, 1 ise “ p ”, 2 ise “ d ” fonksiyonları oluşur. Bu durumlar Çizelge 4.1’de

ayrıntılı olarak gösterilmiştir.

s orbitali	$\exp(-\zeta_i r^2)$
P_0 orbitali	$z \exp(-\zeta_i r^2)$
P_x orbitali	$x \exp(-\alpha r^2)$
P_y orbitali	$y \exp(-\zeta_i r^2)$
P_z orbitali	$z \exp(-\zeta_i r^2)$

Çizelge 4.1. Atomik orbitallere karşılık gelen fonksiyonlar

d_{x^2} orbitali	$x^2 \exp(-\zeta_i r^2)$
d_{y^2} orbitali	$y^2 \exp(-\zeta_i r^2)$
d_{z^2} orbitali	$z^2 \exp(-\zeta_i r^2)$
d_{xy} orbitali	$(x y) \exp(-\zeta_i r^2)$
d_{xz} orbitali	$(x z) \exp(-\zeta_i r^2)$
d_{yz} orbitali	$(y z) \exp(-\zeta_i r^2)$
d_0 orbitali	$z^2 \exp(-\zeta_i r^2)$
d_{+1} orbitali	$(x z) \exp(-\zeta_i r^2)$
d_{-1} orbitali	$(y z) \exp(-\zeta_i r^2)$
d_{+2} orbitali	$(x^2 - y^2) \exp(-\zeta_i r^2)$
d_{-2} orbitali	$(x y) \exp(-\zeta_i r^2)$

Denklem 4.26.'da M katsayısı kullanılmıştır. M katsayısının kullanılmaması durumunda normalizasyon katsayılarının kullanımı söz konusudur. Normalizasyon katsayısı orbital şekillerine göre aşağıda gösterildiği gibi değişiklik göstermektedir.

$$g_s = \left(\frac{2 \zeta_i}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} \quad s \text{ orbitaline ait normalizasyon katsayısı}$$

$$g_x = \left(\frac{128 \zeta_i^5}{\pi^3}\right)^{\frac{3}{4}} x \quad p_x \text{ orbitaline ait normalizasyon katsayısı}$$

$$g_z = \left(\frac{128 \zeta_i^5}{\pi^3}\right)^{\frac{3}{4}} z \quad p_z \text{ orbitaline ait normalizasyon katsayısı}$$

$$g_y = \left(\frac{128 \zeta_i^5}{\pi^3}\right)^{\frac{3}{4}} y \quad p_y \text{ orbitaline ait normalizasyon katsayısı}$$

Çalışmamızda hesaplarını yaptığımız benzen molekülüne ait dalga fonksiyonları ayrıntılı bir şekilde verilecektir.

Benzen molekülünün herhangi bir enerji seviyesine ait temel fonksiyonlarının lineer kombinasyonundan oluşmuş toplam dalga fonksiyonuna ait denklem aşağıdaki şekilde yazılabilir;

$$\psi_{\text{toplam}} = \sum_{j=1}^{\tau} M_j \sum_{i=1}^n c_i x^a y^b z^c e^{-\zeta_i r^2} \quad (4.27)$$

Benzen molekülünün 1. karbonuna, 1s orbitaline ait dalga fonksiyonu;

$$\phi_{1S}^{CI} = M_{1S}^{CI} (c_1^{1S} e^{-\zeta_1 r^2} + c_2^{1S} e^{-\zeta_2 r^2} + c_3^{1S} e^{-\zeta_3 r^2}) \quad (4.28)$$

2S orbitaline ait dalga fonksiyonu;

$$\phi_{2S}^{CI} = M_{2S}^{CI} (c_1^{2S} e^{-\zeta_1 r^2} + c_2^{2S} e^{-\zeta_2 r^2}) \quad (4.29)$$

2P_x orbitaline ait dalga fonksiyonu;

$$\phi_{2P_x}^{CI} = M_{2P_x}^{CI} (c_1^{2P_x} e^{-\zeta_1 r^2} + c_2^{2P_x} e^{-\zeta_2 r^2}) \quad (4.30)$$

2P_y orbitaline ait dalga fonksiyonu;

$$\phi_{2P_y}^{CI} = M_{2P_y}^{CI} (c_1^{2P_y} e^{-\zeta_1 r^2} + c_2^{2P_y} e^{-\zeta_2 r^2}) \quad (4.31)$$

2P_z orbitaline ait dalga fonksiyonu;

$$\phi_{2P_z}^{CI} = M_{2P_z}^{CI} (c_1^{2P_z} e^{-\zeta_1 r^2} + c_2^{2P_z} e^{-\zeta_2 r^2}) \quad (4.32)$$

3S orbitaline ait dalga fonksiyonu;

$$\phi_{3S}^{CI} = M_{3S}^{CI} (c_1^{3S} e^{-\zeta_1 r^2}) \quad (4.33)$$

3P_x orbitaline ait dalga fonksiyonu;

$$\phi_{3P_x}^{CI} = M_{3P_x}^{CI} (c_1^{3P_x} e^{-\zeta_1 r^2}) \quad (4.34)$$

3P_y orbitaline ait dalga fonksiyonu;

$$\phi_{3P_y}^{C1} = M_{3P_y}(c_l^{3P_y} e^{-\zeta_l r^2}) \quad (4.35)$$

$3P_z$ orbitaline ait dalga fonksiyonu;

$$\phi_{3P_z}^{C1} = M_{3P_z}(c_l^{3P_z} e^{-\zeta_l r^2}) \quad (4.36)$$

Benzen molekülünün 1. karbon atomuna ait toplam dalga fonksiyonu (ilgili enerji seviyesi için);

$$\phi_{C1}^{E1} = \phi_{1S}^{C1} + \phi_{2S}^{C1} + \phi_{2P_x}^{C1} + \phi_{2P_y}^{C1} + \phi_{2P_z}^{C1} + \phi_{3S}^{C1} + \phi_{3P_x}^{C1} + \phi_{3P_y}^{C1} + \phi_{3P_z}^{C1} \quad (4.37)$$

Molekülün 1.hidrojen atomu, 1S orbitaline ait dalga fonksiyonu;

$$\phi_{1S}^{H1} = M_{1S}^{H1}(c_1^{1S} e^{-\zeta_1 r^2} + c_2^{2S} e^{-\zeta_1 r^2}) \quad (4.38)$$

Molekülün 1.hidrojen atomu, 2S orbitaline ait dalga fonksiyonu;

$$\phi_{2S}^{H1} = M_{2S}^{H1}(c_1^{2S} e^{-\zeta_1 r^2}) \quad (4.39)$$

Molekülün 1.hidrojen atomuna ait toplam dalga fonksiyonu (ilgili enerji seviyesi için);

$$\phi_{H1}^{E1} = \phi_{1S}^{H1} + \phi_{2S}^{H1} \quad (4.40)$$

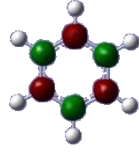
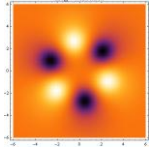
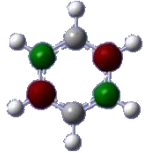
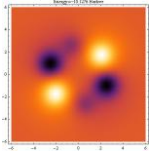
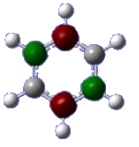
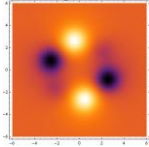
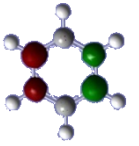
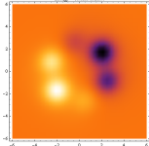
İlgili enerji seviyesine ait toplam dalga fonksiyonu ise

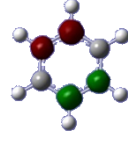
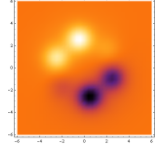
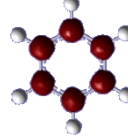
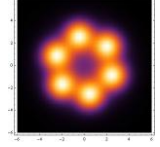
$$\psi_{E1}^{Ci,Hi} = \sum_{i=1}^6 \phi_{Ci}^{E1} + \sum_{i=1}^6 \phi_{Hi}^{E1} \quad (4.41)$$

Böylece tek bir enerji seviyesine ait dalga fonksiyonu elde edilmiş olacaktır. Bu dalga fonksiyonları ile ilgili çizimler bir sonraki bölümde gösterilmiştir.

4.2.2. Benzen Molekülünde Elektronik Yapı ve Elektronik Geçişler


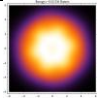



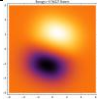
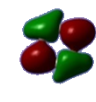
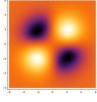

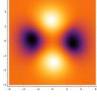
Benzen molekülünde atomların $x - y$ düzleminde dizildiklerini ve yaklaşık olarak dairesel simetriye sahip olduğunu biliyoruz. Bu çalışmada yapılan hesaplarda benzen molekülünde 21 tane işgal edilmiş, 45 tane boş elektron enerji seviyesi ortaya çıkmaktadır.

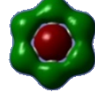
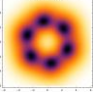
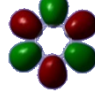
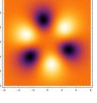
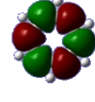
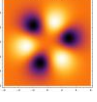

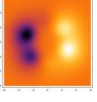
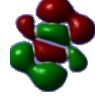
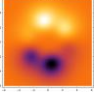

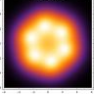
İsim	Durum	Enerji (Hartree)	Gaussian Sonucu	Mathematica Sonucu
HOMO-21	Lokalize	-10.1276		
HOMO-20	Lokalize	-10.1276		
HOMO-19	Lokalize	-10.1276		
HOMO-18	Lokalize	-10.1265		

HOMO-17	Lokalize	-10.1265		
HOMO-16	Lokalize	-10.1254		

Şekil 4.6. Benzen molekülüne ait lokalize seviyelere ait enerjiler ve bu seviyelere ait Gaussian'da B3LYP/3-21G metodu ile hesaplanmış ve Gaussview ile çizilmiş moleküler orbitaller soldaki şekillerde gösterilmiştir. Sağdaki şekiller ise "checkpoint" dosyasındaki dalga fonksiyonu bilgisinin Mathematica'da işlenmesi ve iki boyutta çizilmesi ile elde edilmiş moleküler orbital şekilleridir.

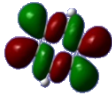
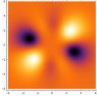
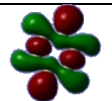
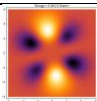

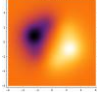
Şekil 4.6'da benzendeki lokalize orbitaller görülmektedir. Lokalize olmuş moleküler orbital, elektronların uzaysal olarak sınırlı bir bölgede kümelenmiş olduğunu göstermektedir. Bundan dolayı elektronun bulunma olasılığı o bölgede en fazladır. Lokalize bir moleküler orbitalden boş olan seviyelere bir elektron geçişi söz konusu değildir.

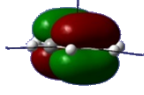
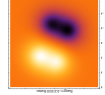
İsim	Durum	MO	Enerji (Hartree)	Gaussian Sonucu	Mathematica Sonucu
HOMO-14 $n = 1, \ell = 0, m = 0$	σ orbitali	1s	-0.855536		
HOMO-13 $n = 2, \ell = 1$ $e^{i\phi} - e^{-i\phi}$	σ orbitali	1p	-0.746253		
HOMO-12 $n = 2, \ell = 1$ $e^{i\phi} + e^{-i\phi}$	σ orbitali	1p	-0.746227		
HOMO-11 $n = 3, \ell = 2$ $e^{2i\phi} - e^{-2i\phi}$	σ orbitali	1d	-0.604854		
HOMO-10 $n = 3, \ell = 2$ $e^{2i\phi} + e^{-2i\phi}$	σ orbitali	1d	-0.604829		

HOMO-9 $n = 2, \ell = 0, m = 0$	σ orbitali	2s	-0.528443		
HOMO-8 $n = 4, \ell = 3$ $e^{3i\phi} - e^{-3i\phi}$	σ orbitali	1f	-0.460728		
HOMO-7 $n = 4, \ell = 3$ $e^{3i\phi} + e^{-3i\phi}$	σ orbitali	1f	-0.452722		
HOMO-6 $n = 3, \ell = 1$ $e^{i\phi} - e^{-i\phi}$	σ orbitali	2p	-0.426202		
HOMO-5 $n = 3, \ell = 1$ $e^{i\phi} + e^{-i\phi}$	σ orbitali	2p	-0.426159		
HOMO-4 $n = 2, \ell = 1, m = 0$	π orbitali	s^*	-0.366214		

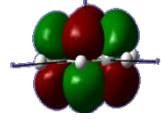
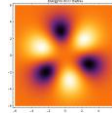
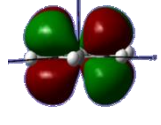
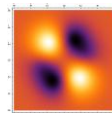

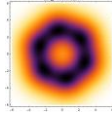
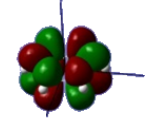
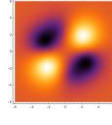
Şekil 4.7. Benzen molekülüne ait σ ve π orbitalleri ve bunlara ait enerji değerleri. Benzen molekülü çizgisel polarize olmuş bir ışığa maruz kaldığında, elektron geçişleri π orbitalleri'nden gerçekleşir.

Şekil 4.7. (devam)

HOMO-3 $n = 5, \ell = 4$ $e^{4i\phi} + e^{-4i\phi}$ $n = 5, \ell = 2$ $e^{2i\phi}$ $- e^{-2i\phi}$ absorption	σ orbitali	1g+3d	-0.346197		
HOMO-2 $n = 5, \ell = 4$ $e^{4i\phi} - e^{-4i\phi}$ $n = 5, \ell = 2$ $e^{2i\phi} - e^{-2i\phi}$	σ orbitali	1g+3d	-0.346152		
HOMO-1 $n = 3, \ell = 2, m = \mp 1$	π orbitali	p^*	-0.251078		

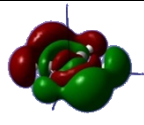
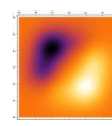
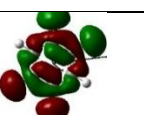
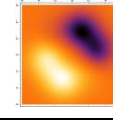
HOMO $n = 3, \ell = 2, m = \mp 1$	π orbitali	p^*	-0.251058		
---	----------------------------------	-------	-----------	---	---

Şekil 4.7’de lokalize olmamış serbest elektronlara ait enerji ve ilgili dalga fonksiyonları gösterilmektedir. 7. enerji seviyesinden 21. Enerji seviyesine kadar delokalize olmuş orbital seviyeleri mevcuttur ki; bu seviyelerde bulunan elektronlar az bir enerjiyle kolaylıkla serbest hale geçebilirler. Bu seviyedeki moleküler orbitaller HOMO (en yüksek işgal edilmiş moleküler orbital) orbitalleri olarak adlandırılmaktadır.

İsim	Durum	Enerji (Hartree)	Gaussian Sonucu	Mathematica Sonucu
LUMO $n = 4, \ell = 3$ $e^{2i\phi} + e^{-2i\phi}$	π orbitali	0.0053		
LUMO-1 $n = 4, \ell = 3$ $e^{2i\phi} - e^{-2i\phi}$	π orbitali	0.0053		
LUMO-2 $n = 3, \ell = 0, m = 0$	σ orbitali	0.106		
LUMO-3 $n = 5, \ell = 4$ $e^{3i\phi} - e^{-3i\phi} + e^{2i\phi} - e^{-2i\phi}$	π orbitali	0.164434		

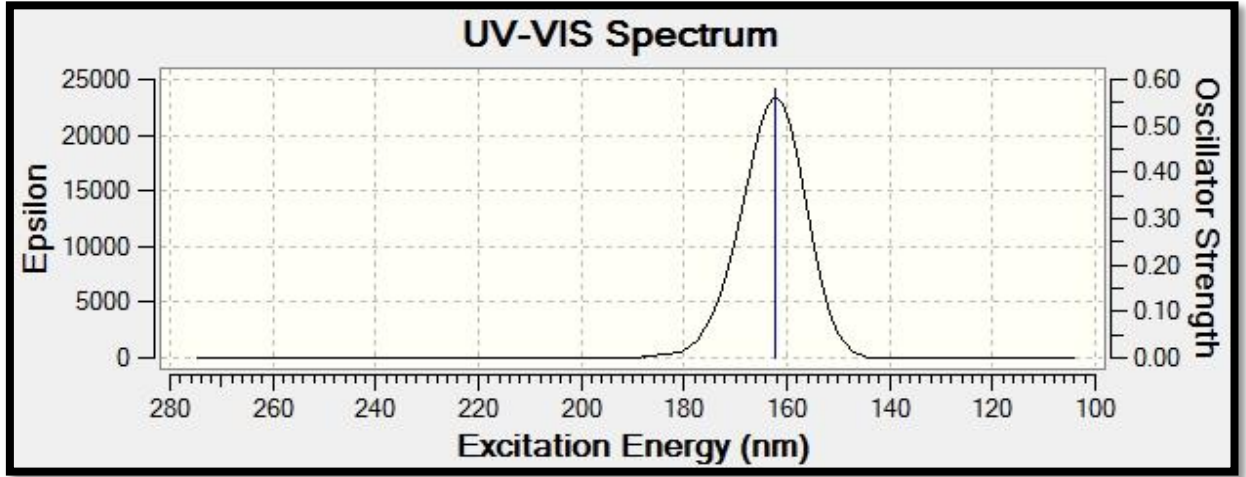
Şekil 4.8. Benzen molekülüne ait σ ve π orbitalleri ve bunlara ait enerji değerleri. Benzen molekülü çizgisel polarize olmuş bir ışığa maruz kaldığında, elektron geçişleri π orbitalleri’nden gerçekleşir.

Şekil 4.8. (devam)

LUMO-4 $n = 4, \ell = 1$ $e^{i\phi} - e^{-i\phi}$	σ orbitali	0.164446		
LUMO-5 $n = 4, \ell = 1$ $e^{i\phi} + e^{-i\phi}$	σ orbitali	0.16557		

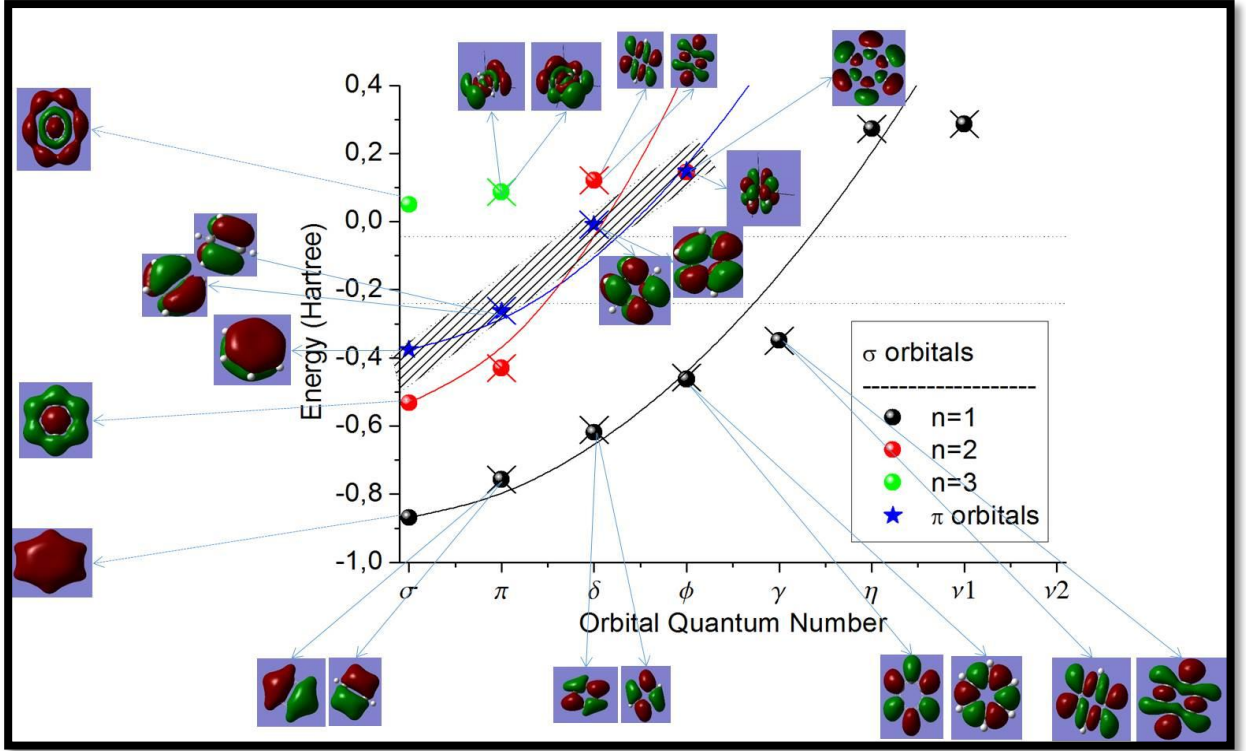
Şekil 4.8’de LUMO (en düşük boş moleküler orbital) orbitalleri ve ilgili enerjiler gösterilmiştir ki; optik geçişlerde elektronların yükselebileceği boş enerji seviyelerini ifade etmektedir. Muhtemel iki seviye arasındaki bir geçişin gerçekleşmesi, gönderilen lazer atımının frekansına (ω) ve geçiş seviyelerine ait dalga fonksiyonlarının çarpımının uzaysal integral sonucuna bağlıdır.

Benzen molekülünde deneysel ve teorik çalışmalarda, dairesel ve çizgisel kutuplanmış ışık altında geçişlerin π orbitalleri arasında olduğu tespit edilmiştir. Ayrıca deneysel olarak geçişin HOMO-LUMO seviyeleri arasındaki enerji farkı olan 6.89 eV ($\lambda=159$ nm) değerinde gerçekleştiği tespit edilmiştir. Bu sonuç Gaussian ile yapılan TD-DFT hesabı sonucunda da görülmektedir (Şek. 4.9).



Şekil 4.9. Lineer kutuplanmış ışığa maruz bırakılmış benzen molekülünün enerji-soğurma değişiminin Gaussian 09 ile elde edilmiş şekli.

Şekil 4.10'de görüldüğü gibi, tek bir geçiş enerjisi söz konusudur. Bunun sebebi geçişin ilk iki HOMO seviyesi ile ilk iki LUMO seviyesi arasında gerçekleşmesidir. Bu seviyelerin enerjileri arasındaki fark ise 6.89 eV civarındadır. Bu bilgiler ışığında kimya çalışmalarında çok yaygın olmayan, fakat fizikçiler için önem arzeden benzen'e ait elektronik yapı gösterilecektir



Şekil 4.10. Benzen molekülüne ait enerji değerlerinin (DFT, B3LYP/3-21G ile elde edilmiştir) orbital kuantum sayısına göre dizilişleri. Bu değerler orbital şekillerine ve enerjilerin ortak değeri dikkate alınarak düzenlenmiştir. Siyah küre sembolleri radyal kuantum sayısı, $n=1$ değerine ait bandı göstermektedir. Siyah noktalar ile mavi üçgenler $n = 2$ ve $n = 2$ bandını göstermektedir. Enerji değerlerinin yörünge kuantum sayısına bağlı artış eğrisi yaklaşık parabolik bir eğri görünümündedir ki bu da beklenen bir sonuçtur. Ayrıca boş daire sembolleri π orbitallerini göstermektedir. Enerjilere karşılık gelen moleküler orbital şekilleri de grafiğe eklenmiştir.

4.2.3. İndüklenmiş Akım ve Manyetik Moment

Lineer kutuplanmış ışık altındaki moleküler bir yapıya ait absorblama spektrumunu elde etmek için uygulanacak formül kısaca:

$$f(\omega) = \sum_{i=22}^{66} \sum_{j=1}^{21} \frac{2 \delta}{(\omega_i - \omega_j - \omega)^2 - \delta^2} |\langle \psi_j | y | \psi_i \rangle|^2 \quad (4.42)$$

$$f(\omega) = \sum_{i=22}^{66} \sum_{j=1}^{21} \frac{2 \delta}{(\omega_i - \omega_j - \omega)^2 - \delta^2} |\langle \psi_j | x | \psi_i \rangle|^2 \quad (4.43)$$

Bu iki eşitliğe ait sonuçlar birbirine oldukça yakın çıkacaktır. Dairesel polarize ışık altında incelenecek benzene ait soğurma spektrum eşitliği ise

$$f(\omega) = \sum_{i=22}^{66} \sum_{j=1}^{21} \frac{2\delta}{(\omega_i - \omega_j - \omega)^2 - \delta^2} |\langle \psi_j | x \pm iy | \psi_i \rangle|^2 \quad (4.44)$$

şeklinde olacaktır. Spektrumda dikkat edileceği gibi birinci ifade “fermi golden” kuralına, ikinci terim ise “seçim kuralı”na işaret etmektedir. Buna göre “x” ve “y” yönünde gelen lineer polarize bir ışık ile “x ± iy” polarizasyona sahip dairesel bir ışık için geçerli olan kurallar Çizelge 4.2’de tablo içerisinde kırmızı renkle belirtilmiştir.

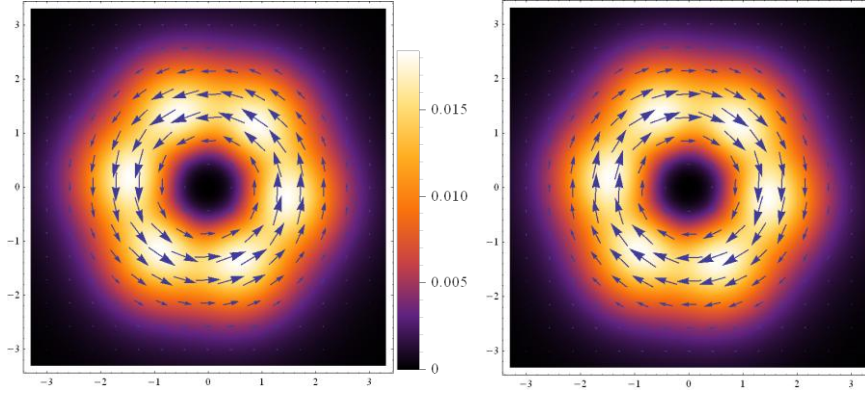
Çizelge 4.2. Benzen molekülüne x ve y yönünde polarize olmuş lineer ya da “x ± iy” yönünde polarize dairesel ışık gönderildiğinde, moleküler orbitaller arasındaki geçiş olasılıkları. HOMO; HOMO-1 ile LUMO; LUMO+1 orbitalleri arasındaki geçişler 0.256 Hartree (6.96 eV) enerjisinde gerçekleştiği için UV-VIS spektroskopisinde gözlemlenebilecek tek geçiş budur.

	LUMO			LUMO+1			LUMO+2			LUMO+3			LUMO+4			LUMO+5		
	4	3	±2	4	3	±2	3	0	0	5	4	±2	4	1	±1	4	1	±1
HOMO-14	$\Delta\ell = 3$			$\Delta\ell = 3$			$\Delta\ell = 0$			$\Delta\ell = 4$			$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 1$		
1	0	0	$\Delta m = \mp 2$			$\Delta m = \mp 2$			$\Delta m = 0$			$\Delta m = \mp 2$			$\Delta m = \mp 1$			
HOMO-13	$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 3$			$\Delta\ell = 0$			$\Delta\ell = 0$		
2	1	±1	$\Delta m = \mp 1, \mp 3$			$\Delta m = \mp 1, \mp 3$			$\Delta m = \mp 1$			$\Delta m = \pm 1, \pm 3$			$\Delta m = 0, \pm 2$			
HOMO-12	$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 3$			$\Delta\ell = 0$			$\Delta\ell = 0$		
2	1	±1	$\Delta m = \mp 1, \mp 3$			$\Delta m = \mp 1, \mp 3$			$\Delta m = \mp 1$			$\Delta m = \pm 1, \pm 3$			$\Delta m = 0, \pm 2$			
HOMO-11	$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 1$		
3	2	±2	$\Delta m = 0, \mp 4$			$\Delta m = 0, \mp 4$			$\Delta m = \mp 2$			$\Delta m = 0, \mp 4$			$\Delta m = \mp 1, \mp 3$			
HOMO-10	$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 1$		
3	2	±2	$\Delta m = 0, \mp 4$			$\Delta m = 0, \mp 4$			$\Delta m = \mp 2$			$\Delta m = 0, \mp 4$			$\Delta m = \mp 1, \mp 3$			
HOMO-9	$\Delta\ell = 3$			$\Delta\ell = 3$			$\Delta\ell = 0$			$\Delta\ell = 4$			$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 1$		
2	0	0	$\Delta m = \mp 2$			$\Delta m = \mp 2$			$\Delta m = 0$			$\Delta m = \pm 2$			$\Delta m = \pm 1$			
HOMO-8	$\Delta\ell = 0$			$\Delta\ell = 0$			$\Delta\ell = 3$			$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 2$		
4	3	±3	$\Delta m = \mp 1, \mp 5$			$\Delta m = \mp 1, \mp 5$			$\Delta m = \mp 3$			$\Delta m = \mp 1, \pm 5$			$\Delta m = \mp 2, \mp 4$			
HOMO-7	$\Delta\ell = 0$			$\Delta\ell = 0$			$\Delta\ell = 3$			$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 2$		
4	3	±3	$\Delta m = \mp 1, \mp 5$			$\Delta m = \mp 1, \mp 5$			$\Delta m = \mp 3$			$\Delta m = \mp 1, \pm 5$			$\Delta m = \mp 2, \mp 4$			
HOMO-6	$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 3$			$\Delta\ell = 0$			$\Delta\ell = 0$		
3	1	±1	$\Delta m = \mp 1, \mp 3$			$\Delta m = \mp 1, \mp 3$			$\Delta m = \mp 1$			$\Delta m = \pm 1, \pm 3$			$\Delta m = 0, \pm 2$			
HOMO-5	$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 3$			$\Delta\ell = 0$			$\Delta\ell = 0$		
3	1	±1	$\Delta m = \mp 1, \mp 3$			$\Delta m = \mp 1, \mp 3$			$\Delta m = \mp 1$			$\Delta m = \pm 1, \pm 3$			$\Delta m = 0, \pm 2$			
HOMO-4	$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 2$			$\Delta\ell = 1$			$\Delta\ell = 3$			$\Delta\ell = 0$			$\Delta\ell = 0$		
2	1	0	$\Delta m = \mp 2$			$\Delta m = \mp 2$			$\Delta m = 0$			$\Delta m = \pm 2$			$\Delta m = \pm 1$			
3	2	±1	$\Delta m = \mp 2$			$\Delta m = \mp 2$			$\Delta m = 0$			$\Delta m = \pm 2$			$\Delta m = \pm 1$			

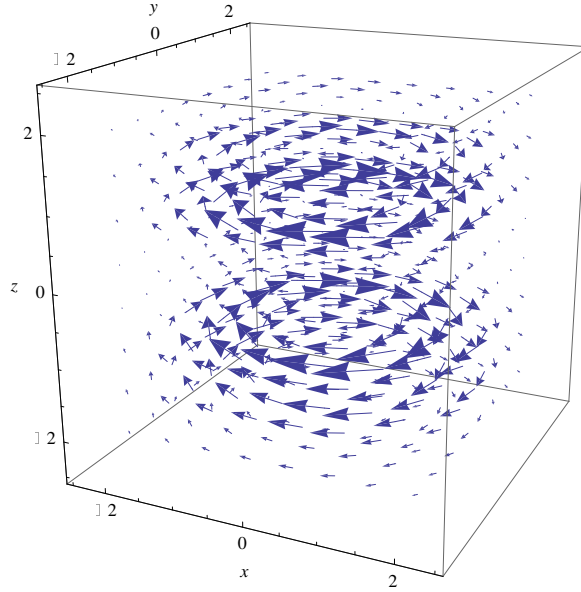
Çizelge 4.2. (devam)

HOMO-3	$\Delta\ell = 1$ $\Delta m = \mp 2, \mp 6$	$\Delta\ell = 1$ $\Delta m = \mp 2, \mp 6$	$\Delta\ell = 4$ $\Delta m = \mp 4$	$\Delta\ell = 0$ $\Delta m = \pm 2, \pm 6$	$\Delta\ell = 3, \mathbf{1}$ $\Delta m = \pm 1, \pm 3, \pm 5$	$\Delta\ell = 3, \mathbf{1}$ $\Delta m = \pm 1, \pm 3, \pm 5$
5	4	± 4				
5	2	± 2				
HOMO-2	$\Delta\ell = 1$ $\Delta m = \mp 2, \mp 6$	$\Delta\ell = 1$ $\Delta m = \mp 2, \mp 6$	$\Delta\ell = 4$ $\Delta m = \mp 4$	$\Delta\ell = 0$ $\Delta m = \pm 2, \pm 6$	$\Delta\ell = 3, \mathbf{1}$ $\Delta m = \pm 1, \pm 3, \pm 5$	$\Delta\ell = 3, \mathbf{1}$ $\Delta m = \pm 1, \pm 3, \pm 5$
5	4	± 4				
5	2	± 2				
HOMO-1	$\Delta\ell = \mathbf{1}$ $\Delta m = \mp 1, \mp 3$	$\Delta\ell = \mathbf{1}$ $\Delta m = \mp 1, \mp 3$	$\Delta\ell = 2$ $\Delta m = \mp 1$	$\Delta\ell = 2$ $\Delta m = \pm 1, \pm 3$	$\Delta\ell = 1$ $\Delta m = 0, \pm 2$	$\Delta\ell = 1$ $\Delta m = 0, \pm 2$
3	2	± 1				
HOMO	$\Delta\ell = \mathbf{1}$ $\Delta m = \mp 1, \mp 3$	$\Delta\ell = \mathbf{1}$ $\Delta m = \mp 1, \mp 3$	$\Delta\ell = 2$ $\Delta m = \mp 1$	$\Delta\ell = 2$ $\Delta m = \pm 1, \pm 3$	$\Delta\ell = 1$ $\Delta m = 0, \pm 2$	$\Delta\ell = 1$ $\Delta m = 0, \pm 2$

Bu deęerler doęrultusunda akımı elde etmek mümkündür. Şekil 4.11’de benzen molekülü üzerine dairesel polarize ışık gönderildiğinde elde edilen akım yoğunlukları ve yönleri görülmektedir.

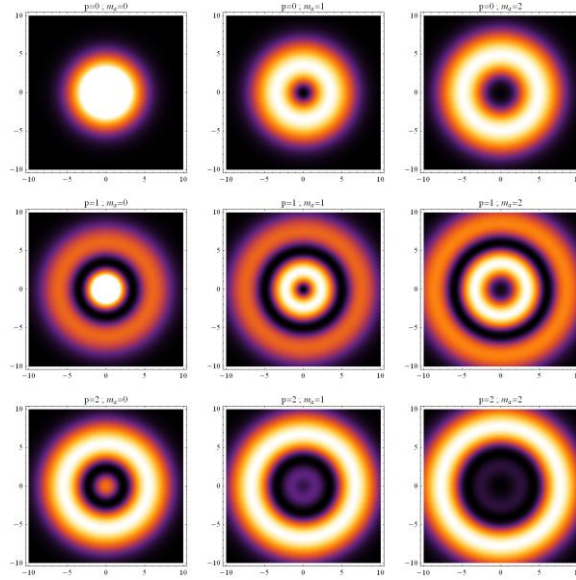


Şekil 4.11. Dairesel polarize benzen üzerine gönderilmiş bir lazer ışının meydana getirdiğı akım yoğunluğu ve akımın yönü görülmektedir. Gönderilen ışıklardan biri sol yönlü dairesel polarize ışık iken, dięeri sağ yönlüdür. “x” ve “y” yönlü lineer polarize ışıkların oluşturduğu akım yoğunluğu sıfırdır. Akım yoğunluğu için en yüksek deęer $15.0 \frac{\mu A}{a.u.^2}$ ‘dir



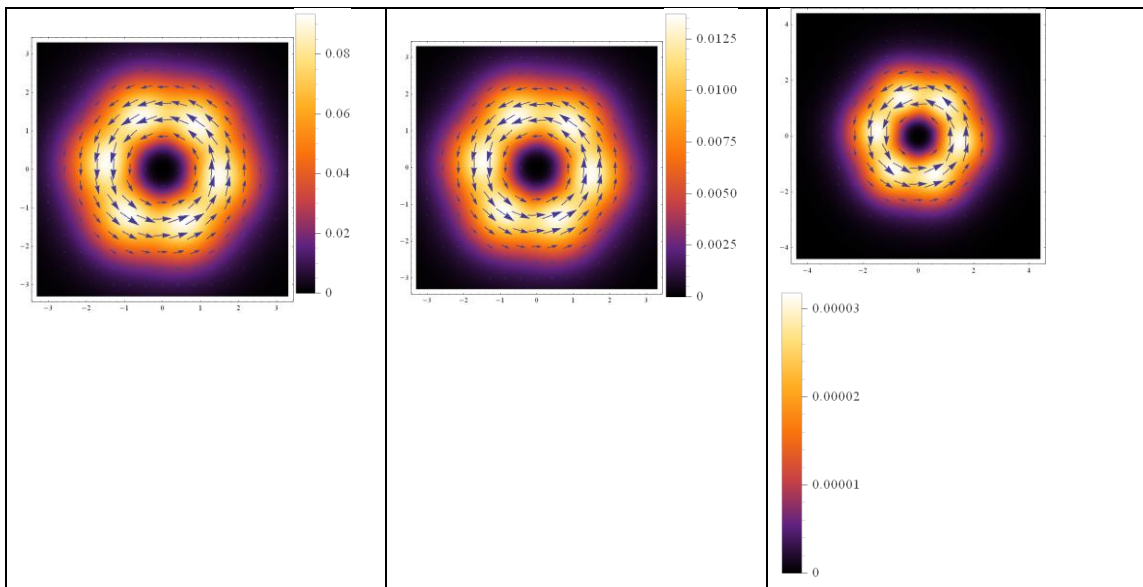
Şekil 4.12. Dairesel polarize benzen üzerine gönderilmiş bir lazer ışının meydana getirdiğı akım yoğunluğu ve akımın yönü üç boyutta görülmektedir. Akım deęeri ise $0.6 \mu A$ seviyesindedir

Şekil 4.11 ve 4.12 dairesel polarize ışık altında benzen molekülünden elde edilen akım değerlerini göstermektedir. Bükümlü ışıklar ya da çalışmada kullanılan şekliyle Laguerre-Gaussian(LG) lazer ışınlarının farklı radyal düğüm ve topolojik yük değerlerine göre uzaydaki gösterimi Şekil 4.13’de verilmiştir.



Şekil 4.13. Bükümlü ışıkların $m_a = 0,1,2$ ve $p = 0,1,2$ değerleri için lazer ışınının uzaysal profili. Yatay eksen x, dikey eksen y yönünü göstermektedir. Değerlerin birimi atomik Bohr yarıçapıdır(a.u.). w_0 ile gösterilen maksimum iki ışık yoğunluğu arasındaki fark (beam waist) burada 5 a.u. kadardır

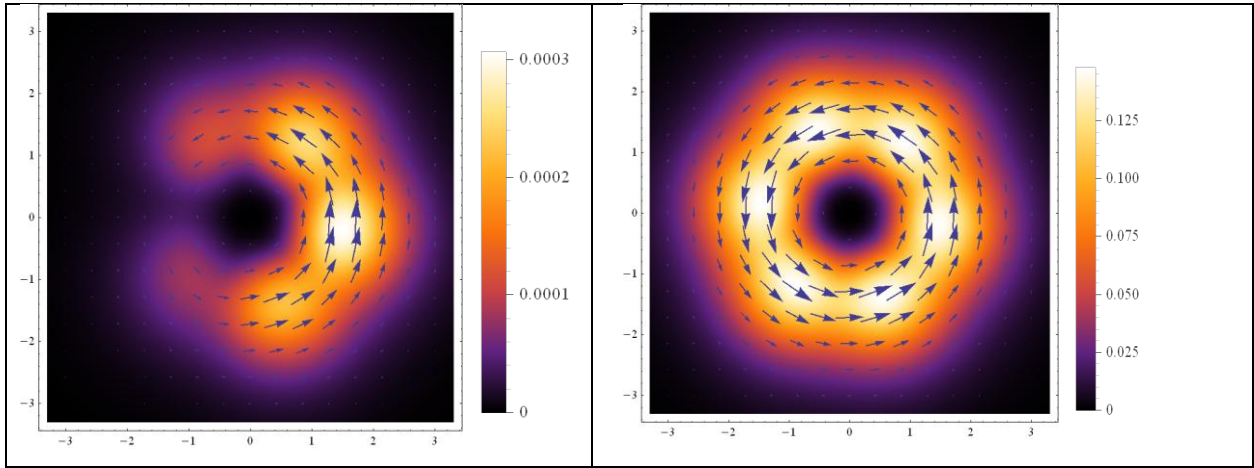
LG lazer ışını kullanıldığında $m_a = 0,1,2$; $p = 0,1,2$ durumu için akım yoğunluğu Şekil 4.14’de gösterilmiştir.



Şekil 4.14. Dairesel polarize bükümlü ışıkların $m_a = 0$ ve $p = 0,1,2$ değerleri için benzen üzerinde

oluşturdukları akım yoğunluğunun gösterimi. Değerler a.u. cinsinden ifade edilmiştir.

Açısal momentum transferi, $m_a > 0$ durumunda başlamaktadır. Şekil 4.15’de görüldüğü gibi, $m_a = 1$ değeri için $x - y$ düzleminde net bir akım akmakla beraber akım yoğunluğu simetrik değildir. Bunun sebebi 26 ve 27. Enerji seviyelerine elektron geçişi olmasından kaynaklanmaktadır. Yine Şekil 4.15’de, $m_a = 1$ değerinde Çizelge 4.2’den de görüleceği gibi seçim kuralı sağlandığı için simetrik bir akım yoğunluğu görülmektedir. Hesaplamalarımızda HOMO-1 ve HOMO seviyelerindeki elektronların bir üst seviyeye geçebileceği farzedildi. Gelen ışığın frekansını ise $\omega = 0.256 \text{ Hartree}$ olarak ayarlandı. İki maksimum nokta arasındaki uzaklığı ise $w_0 = 5$ a.u. (gerçekçi bir ifade olmamakla beraber bunu kullandık) olarak belirlendi.



Şekil 4.15. Dairesel polarize bükümlü ışıkların $m_a = 1$ (sol); $m_a = 2$ (sağ) ve $p = 0$ değerleri için benzer üzerinde oluşturdukları akım yoğunluğunun gösterimi. Değerler a.u. cinsinden ifade edilmiştir.

Bu sonuçlarla ilgili akım ve manyetik alan değerleri de hesaplanmış olmakla beraber, test edilmesi için bir sonraki çalışmaya bırakılmıştır.

5. SONUÇ

Benzen molekölü daha önceki yıllarda yapısal ve elektronik olarak iyi araştırılmış olmasına rağmen, dairesel polarize ışık ve bükümlü lazer atımları altındaki tepkisi araştırılmamıştır. Benzen tam bir dairesel simetri özelliği göstermekle beraber, kimyasal olarak üretimi yapılabilen ayrıca düşük maliyetli bir malzemedir. Sunduğumuz çalışmada literatürden farklı olarak benzen molekölüne ait bir band diyagramı elde edildi. Yörünge kuantum sayısına göre elde edilen enerji değerleri, parabolik band formülü ile uyum göstermektedir. Böylece aralarında geçiş olasılıkları bulunan enerji seviyelerini belirlemek mümkün olmuştur. Ayrıca $C_{20}H_{20}$ molekölüne ait enerji değerleri ve moleküler orbitaller de elde edilmiştir. Bu malzeme ile ilgili detaylı bir analiz yapılmamış, sadece elde edilen sonuçların benzen molekölünden elde edilecek sonuçlarla karşılaştırılabileceği gösterilmiştir.

Bükümlü ışık benzen molekölü üzerine bir akım oluşumuna izin vermektedir. Dairesel polarize ve topolojik yükü 0 değerinden 2 değerine kadar değiştirilen bir lazer ışını sayesinde elektronlar değişik kuantum seviyelerine yükselebilmekte ve akıma katkı sağlayan elektron sayısı artabilmektedir. Akım değeri değişmekle beraber, manyetik alan vektöründe değişme sapma gerçekleşmektedir. Bu tezin başında yer alan amaçlarımızdan bir tanesi de, lazer ışınının ayarlanabilir bir manyetik momente sahip olabilmesiydi. Benzen molekölünün bükümlü ışık altında daha detaylı bir uygulaması ileriki çalışmamızın başlığı olacaktır. Özellikle zamana bağlı olarak moleküler orbitallere ait elektron popülasyonunun değişimi ve gönderilen ışığın frekansa bağlı akım yoğunluk değişimleri ile, daha gerçekçi bükümlü lazer ışıkları için akım yoğunluklarını incelemek mümkündür.

KAYNAKLAR

- [1] Kroto HW, Heath JR , O'Brien SC, Curl RF, Smalley RE, 1985. C60: buckminsterfullerene. Nature, 318 (6042): 162-163.
- [2] Guimond S, Elmore D, 2004. Polarizing views. OE Mag, 4 (5): 26-29.
- [3] Katori H, Takamoto M, Pal'Chikov VG, Ovsiannikov VD, 2003. Ultrastable optical clock with neutral atoms in an engineered light shift trap. Physical Review Letters, 91 (17): 173005.
- [4] Poynting JH, 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, 82 (557): 560-567.
- [5] Allen L, Beijersbergen MW, Spreeuw R, Woerdman J, 1992. Orbital angular momentum of light and the transformation of Laguerre-Gaussian laser modes. Phys. Rev. A., 45 (11): 81-85.
- [6] Hansen A, 2004. Optical vortex. Stony Brook University. <https://en.wikipedia.org/wiki/> (Eriřim tarihi: 16.08.2015)
- [7] Friese ME, Enger J, Rubinsztein-Dunlop JH, Heckenberg NR, 1996. Optical angular-momentum transfer to trapped absorbing particles. Physical Review A, 54(2): 1593.
- [8] O'neil AT, MacVicar I, Allen L, Padgett MJ, 2002. Intrinsic and extrinsic nature of the orbital angular momentum of a light beam. Physical review letters, 88(5): 053601.
- [9] Allen L, Beijersbergen MW, Spreeuw R, Woerdman J, 1992. Orbital angular momentum of light and the transformation of Laguerre-Gaussian laser modes. Phys. Rev. A., 45 (11): 81-85.
- [10] Durnin J, 1987. Exact solutions for nondiffracting beams. I. The scalar theory. J. Opt. Soc. Am. A., 4: 651-654.
- [11] Vega G, Julio C, Iturbe-Castillo M, Chavez-Cerda S, 2000. Alternative formulation for invariant optical fields: Mathieu beams. Optics letters, 25 (20): 1493-1495.

- [12] Sepulveda V, Garcés-Chávez V, Chávez-Cerda S, Arlt J, Dholakia K, 2002. Orbital angular momentum of a high-order Bessel light beam. *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, 4 (2): S82.
- [13] López-Mariscal C, Bandres M, Gutiérrez-Vega J, Chávez-Cerda S, 2005. Observation of parabolic nondiffracting optical fields. *Optics express*. 13 (7): 2364-2369.
- [14] Andrews L, David L, 2008. Mechanistic principles and applications of resonance energy transfer. *Canadian Journal of Chemistry*, 86 (9): 855-870.
- [15] Karimi E, 2011. Different columns show the beam helical structures, phase fronts, and corresponding intensity distributions. Own work. <https://en.wikipedia.org/> (Erişim tarihi: 16.08.2015)
- [16] Ricci F, Löffler W, Van M, Exter P, 2012. Instability of higher-order optical vortices analyzed with a multi-pinhole interferometer. *Optics Express*., 20 (20): 22961-22975.
- [17] Roger WD, David, 1954. Diffuse surface optical model for nucleon-nuclei scattering. *Physical Review*., 95 (2): 577.
- [18] Schrödinger E, 1926. An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules. *Physical Review*, 28 (6): 1049
- [19] Frisch MJ, Trucks EA, Schlegel HB, Scuseria GE, Robb MA, Cheeseman JR, Cross JB, 2009. 1st ed. Gaussian Inc. Wallingford.
- [20] Lombardo GM, Portalone G, Colapietro M, Rescifina A, Punzo F, 2011. From the X-rays to a reliable “low cost” computational structure of caffeic acid: DFT, MP2, HF and integrated molecular dynamics–X-ray diffraction approach to condensed phases. *Journal of Molecular Structure*, 994 (1): 87-96.
- [21] Fischer F, Charlotte F, 1987. General Hartree-Fock program. *Computer Physics C Munication*, 43 (3): 355–365.
- [22] Born M, Oppenheimer R, 1927. Zur quantentheorie der molekeln. *Annalen der Physik*, 389 (20): 457-484.
- [23] 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.
- [24] Weiner A, 2011. Ultrafast optics. 2nd ed. Purdue University. Florida.
- [25] Chelkowski S, Yudin GL, Bandrauk AD, 2006. Observing electron motion in molecus. *Journal Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 39 (13): S409.

- [26] Uiberacker M, Uphues TH, Schultze M, Verhoef AJ, Yakovlev V, Kling MF, Rauschenberger J, Kabachnik NM, Schröder H, Lezius M, Kompa KL, Muller H, Muller G, Vrakking MJJ, Hendel S, Kleineberg U, Heinzmann U, Drescher M, Krausz F, 2007. Attosecond real-time observation of electron tunnelling in atoms. *Nature*, 446 (7136): 627-632.
- [27] Remacle F, Levine RD, 2006. An electronic time scale in chemistry. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 103 (18): 6793-6798.
- [28] You D, Dykaar DR, Jones RR, Bucksbaum PH, 1992. Generation of high-power single-cycle 500-fs electromagnetic pulses. *Opt. Lett.*, 18: 290-292.
- [29] Drescher M, Hentschel M, Kienberger R, Tempea G, Spielmann CH, Reider GA, Corkum PB, Krausz P, 2001. X-ray pulses approaching the attosecond frontier. *Science*, 291 (5510): 1923-1927.
- [30] Hentschel M, Kienberger R, Spielmann C, Reider GA, Milosevic N, Brabec T, Corkum PB, Heinzmann U, Drescher M, Krausz F, 2001. Attosecond metrology. *Nature*, 414 (6863): 509-513.
- [31] Sennaroglu A, 2007. Fotonik ve Katihal Lazerleri. *Tübitak Bilim Teknik Dergisi*, s: 48-53.
- [32] Uzun T, 2005. Mikroişlemci Sistemleri. 25-52, içinde: *Mikroişlemci Temelli Sistem Yapısı Ve Çalışması* (eds: Sennaroğlu A). İstanbul.
- [33] Amirouche F, 2004. *Principles of Computer-Aided Design and Manufacturing*. 2nd ed. Pearson/Prentice Hall, Columbia.
- [34] Senger T, 2007. Spin Elektronığı, *Tübitak Bilim ve Teknik Dergisi*, s:70.
- [35] William G, 1958. *De magnete*. 1st ed. Courier Corporation. New York.
- [36] Phan MH, Peng HX, 2008. Giant magnetoimpedance materials: Fundamentals and applications. *Progress in Materials Science*, 53(2): 323-420.
- [37] Tehrani S, Slaughter J, Chen M, Durlam E, Shi MJ, DeHerren M, 1999. Progress and outlook for MRAM technology. *Magnetics, IEEE Transactions on*, 35 (5): 2814-2819.
- [38] Baibi MN, Broto JM, Fert A, Van Dau FN, Petroff F, Etienne P, Chazelas, J, 1988. Giant magnetoresistance of (001) Fe/(001) Cr magnetic superlattices. *Physical review letters*, 61 (21): 2472.
- [39] Binasch G, Grünberg P, Saurenbach F, Zinn W, 1989. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Physical review B*, 39 (7): 48-28.

- [40]. Anonim, The Nobel Prize in Physics 2007, 2007. <http://www.nobelprize.org/> (Erişim Tarihi: 20.08.2015).
- [41] Mathon J, Umerski A, 2001. Theory of tunneling magnetoresistance of an epitaxial Fe/MgO/Fe (001) junction. *Physical Review B*, 63 (22): 220-403.
- [42] Butler WH, Zhang XG, Schulthess TC, MacLaren JM, 2001. Spin-dependent tunneling conductance of Fe|MgO|Fe sandwiches. *Physical Review B*, 63 (5): 054-416.
- [43] Hankiewicz EM, Vignale G, 2009. Spin-Hall effect and spin-Coulomb drag in doped semiconductors. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21 (25): 253202.
- [44] Clark WG, Feher G, 1963. Nuclear polarization in InSb by a dc current. *Physical Review Letters*, 10 (4): 134.
- [45] Žutić I, Fabian J, Sarma SD, 2004. Spintronics: Fundamentals and applications. *Reviews of modern physics*, 76 (2): 323.
- [46] Hu SX, Collins LA, 2006. Attosecond pump probe: exploring ultrafast electron motion in side an atom. *Physical review letters*, 96 (7): 073004.
- [47] Gallmann L, Keller U, 2011. Femtosecond and attosecond light sources and techniques for spectroscopy. *Handbook of High-resolution Spectroscopy*, 978 (0470): 749-593.
- [48] Zhen-Gang Z, Berakdar J. Electromagnetic pulse-driven spin-dependent currents in semiconductor quantum rings. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21 (14): 145-801.
- [49] Quinteiro GF, Tamborenea PI, Berakdar J, 2011. Orbital and spin dynamics of intraband electrons in quantum rings driven by twisted light. *Optics express*, 19 (27): 26733-26741.
- [50] Hinsche NF, Moskalenko AS, Berakdar J, 2009. High-order harmonic generation by a driven mesoscopic ring with a localized impurity. *Physical Review A*, 79 (2): 023822.
- [51] Zhu ZG, Jia CL, Berakdar J, 2010. Proposal for fast optical control of spin dynamics in a quantum wire. *Physical Review B*, 82 (23): 235-304.
- [52] Slater JC, 1929. The theory of complex spectra. *Physical Review*, 34 (10): 1293.
- [53] Hehre WJ, Ditchfield R, Pople, JA, 2003. Self-consistent molecular orbital methods. XII. Further extensions of Gaussian—type basis sets for use in molecular orbital studies of organic molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 56 (5): 2257-2261.
- [54] George J, Varma HR, Deshmukh PC, Manson ST, 2012. Photoionization of atomic krypton confined in the fullerene C60. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 45 (18): 185-001.
- [55] Grum-Grzhimailo AN, Gryzlova EV, Strakhova SI, 2011. Effects of fullerene confining potential on the ionization of the hydrogen atom by a strong femtosecond VUV pulse. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 44 (23): 235-005.

- [56] Dolmatov VK, King JL, Oglesby JC, 2012. Diffuse versus square-well confining potentials in modelling A@ C60 atoms. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 45 (10): 105-102.
- [57] Lin CY, Ho YK, 2012. Photoionization of atoms encapsulated by cages using the power-exponential potential. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 45 (14): 145-001.
- [58] Nascimento EM, Prudente FV, Guimarães MN, Maniero AM, 2011. A study of the electron structure of endohedrally confined atoms using a model potential. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 44 (1): 015-003.
- [59] Aygun M, Bayrak O, Boztosun I, 2007. Solution of the radial Schrödinger equation for the potential family $V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r} + Cr^K$ using the asymptotic iteration method. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 40 (3): 537.
- [60] Köksal K, Öncan M, Gönül B, 2014. A simple model potential for hollow nanospheres. *Condensed Matter Physics*, 17(1): 13002

ÖZGEÇMİŞ

1987 yılında Hatay’da doğdum. İlköğretimi Şevket Çalışkan İlköğretim Okulu’nda, ortaokulu Şevket Çalışkan İlköğretim Okulu’nda ve liseyi İskenderun Ticaret ve Sanayi Odası Yabancı Dil Ağırlıklı Lisesi’nde tamamladım. 2006 yılında kazandığım Gaziantep Üniversitesi Mühendislik Fakültesi Fizik Mühendisliği Bölümü’nden 2011 yılında (İngilizce hazırlık sınıfı dahil) 73/100 derece ile mezun oldum. Eylül 2013’de Bitlis Eren Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı’nda yüksek lisansa başladım. Eylül 2015’te yüksek lisansımı tamamladım. Yabancı dilim İngilizce’dir.

Mehmet ÖNCAN

