

**KRAMERS-KRONIG DÖNÜŐÜMLERİNİN NÜMERİK İNTEGRASYONU  
VE DİELEKTRİK VERİLERİNE UYGULANMASI**

**Sıtkı EKER**

**Ç.Ü**

**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**FİZİK ANA BİLİM DALI**

**YÜKSEK LİSANS TEZİ**

**ADANA**

**OCAK 1997**

Çukurova Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Müdürlüğüne,

Bu çalışma jürimiz tarafından Fizik Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

Başkan: Prof. Dr. Süleyman BOZDEMİR



Üye: Prof. Dr. Amirullah MAMEDOV




Üye: Y. Doç. Dr. Metin ÖZDEMİR



Kod No: 1249

Yukarıda imzaların, adı geçen öğretim üyelerine ait olduğunu onaylarım.



Prof. Dr. Ural DİNÇ  
Enstitü Müdürü

**Bu tez UKUROVA NİVERSİTESİ Fen bilimleri Enstitüsü Arařtırma Fonu  
tarafından desteklenmiřtir**

## İÇİNDEKİLER

TABLO LİSTESİ.....	II
ŞEKİL LİSTESİ.....	III
ÖZ.....	IV
ABSTRACT.....	V
1.GİRİŞ.....	1
1.1 İletken ve Yalıtkanlar.....	1
1.2 Polarizasyon.....	1
1.3 Dielektrik Sabiti.....	2
1.4 İzotropik Dielektriklerin Değişken Alan İçindeki Makroskobik Özellikleri.....	3
1.5 Kompleks Dielektrik Sabiti ve Durulma Fonksiyonu Arasındaki İlişki.....	7
1.6 Debye Tek Durulma Zamanlı Üstel Bozunum Fonksiyonu.....	10
1.7 Dielektrik Relaksasyon Verilerinin Empirik İfadesi.....	12
2.ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR.....	13
3.MATERYAL VE METOD.....	14
3.1 Kramers-Kronig Dönüşümleri.....	14
3.2 Kramers-Kronig Dönüşümlerinin Maclaurin's Formülü Yardımıyla Nümerik İntegrasyonu.....	16
3.3 Referans Olarak Kullanılan Analitik Fonksiyon.....	17
3.4 Tek Durulma Zamanlı Kompleks Dielektrik Sabitinin Kramers Kronig Dönüşümü ve Nümerik Analizi.....	22
4.TARTIŞMA VE SONUÇLAR.....	32
ÖZET.....	36
SUMMARY.....	37
EKLER.....	38
KAYNAKLAR.....	41
TEŞEKKÜR.....	42
ÖZGEÇMİŞ.....	43

## TABLO LİSTESİ

Tablo 3.1 :Kompleks kırılma indisinin sanal ve reel kısımlarını veren denklemlerden elde edilen veriler.....	19
Tablo 3.2 :Denklemden hesaplanan $n(\nu)$ bileşenine ait verilerle programdan bulduğumuz veriler.....	20
Tablo 3.3 :Tek Durulma Zamanlı Kompleks Dielektrik Sabitinin Sanal ve reel Kısımlarını veren Denklemlerden elde edilen Veriler.....	26
Tablo 3.4 :Tek Durulma Zamanlı Durum İçin Nümerik Olarak Bulunan Verilerle Denklemden Hesaplananlar.....	27
Tablo 3.5 :.....	34
Tablo 3.6 :.....	35

## ŞEKİL LİSTESİ

Şekil 1.1: Yoğun fazdaki polar bileşikler için frekansa bağlı dielektrik sabitinin dağılımı ve kayıp pikleri.....	5
Şekil 3.1: Dielektrik fonksiyonunun kompleks frekans düzleminde oluşturduğu analitik C konturu.....	15
Şekil 3.2: Kompleks kırılma indisinin reel kısmı ile sanal kısmının frekansa göre değişimleri.....	21
Şekil 3.3: Nümerik integrasyon yöntemiyle elde edilen verilerden çizilen grafik.....	22
Şekil 3.4.....	23
Şekil 3.5.....	28
Şekil 3.6.....	29
Şekil 3.7.....	30

## ÖZ

Kompleks dielektrik sabitinin reel ve sanal kısımlarını bir birine bağlayan Kramers-Kronig dönüşümleri kompleks dielektrik sabitinin hem empirik fonksiyonlarında hem de deneysel verilerin analizinde kullanılmaktadır.

Kramers-Kronig dönüşümleri için nümerik integrasyon metodlarından biri üzerinde çalışılmış ve Kramers-Kronig dönüşümlerini analitik olarak sağlayan bir fonksiyon referans olarak seçilerek Maclaurin's formülü için Fortran dilinde bir bilgisayar programı yazılmıştır.

Elde edilen sonuçlardan, nümerik Kramers-Kronik dönüşümü ile analitik yoldan elde edilen verilerin birbiriyle çok iyi uyum içinde olduğu bulunmuştur. Ayrıca bu dönüşümün geçerli olduğu frekans aralıkları da ilk defa tarafımızdan belirlenmiş bulunmaktadır.



## ABSTRACT

The Kramers-Kronig transformation relating the real and imaginary components of the complex dielectric constant have been used both on empirical functions of dielectric permittivity and on experimental data.

One of the numerical integration methods for the Kramers-Kronig transformation is studied and a computer program is written in the Fortran language for the numerical integration method which is called Maclaurin's formula, using the analytical integration of the Lorentzian function as a reference.

The results show that there is a good agreement between the numerical Kramers-Kronig transformation and the analytical result.





## 1. GİRİŞ

### 1.1. İLETKEN VE YALITKANLAR

Genel olarak normal şartlarda maddeleri ikiye ayırabiliriz: iletkenler ve yalıtkanlar(dielektrikler). Metallerde olduğu gibi iletkenler çok sayıda içlerinde elektrik akımını meydana getirebilecek, serbest yük taşıyıcıları bulunduran malzemelerdir. Bu yük taşıyıcıları, ki bunlar çoğunlukla elektronlardır, iletken materyal içinde her yöne gitmede serbesttirler. En ufak bir elektriksel alan etkisinde hareket ederler ve bir engelle karşılaşınca kadar hareketlerine devam ederler.

Yalıtkanlar, elektrikte dielektriğin eşanlamlısıdır. Dielektrikler, içindeki yüklü parçacıkların onu oluşturan moleküllere sıkıca bağlı olduğu, bir elektrik akımını taşıyabilecek serbest elektronları olmayan ve bir elektrik alanıyla kutuplanma özelliği taşıyan maddelere denir. Dielektrik ortamı oluşturan moleküller, atomik çekirdekler ve elektronlardır. Bu yüklü parçacıklar herhangi bir dış elektriksel alan etkisinde kaldıklarında denge pozisyonlarından bir miktar ayrılırlar fakat bağlı olduğu molekülden tamamen ayrılıp hareket edemezler. Elektriksel alan her yüklü parçacığa etki ederek negatif kısmının pozitif kısmından birbirine ters yönde ayrılmasına neden olur. Yüklerdeki bu hafif ayrışma ya da kutuplanma, dielektrik içindeki elektrik alanını zayıflatır.

Gerçek fiziksel dünyada dielektrik maddeler azda olsa bir miktar iletkenlik gösterirler. Tipik bir dielektrikte iletkenlik iyi bir iletkenden  $10^{20}$  kez küçüktür.  $10^{20}$  burada çok büyük bir faktördür ve dielektriğin iletkenliğini ihmal edebiliriz (BÖTTCHER VE BORDEWIJK, 1978).

Yarı iletken ve elektrolit gibi bazı maddeler ise iletkenler ile yalıtkanlar arasında kalacak şekilde bir elektriksel özelliğe sahiptirler. Durgun elektriksel alan için konuşmak gerekirse bunlar daha çok iletkenlerin gösterdiği özelliğe sahiptir.

### 1.2. POLARİZASYON

Z atom numaralı izole edilmiş bir atomu ele alalım. Elektrik alanının bulunmadığı bir ortamda pozitif yük merkezi ile negatif yük merkezi bir birine çakışık ve dengede olacak şekilde olur. Bunu bir dış elektrik alan içine yerleştirelim. Dış alan, artı yüklü çekirdeği elektrik alanın doğrultusunda, eksi yüklü elektronları ise elektrik alanına ters yönde ve çok

az miktarda iter. Az miktardaki bu itme iç elektrostatik geri çağırıcı kuvvetle dış alanın oluşturduğu kuvvetin bir birini dengelemesiyle son bulur. Artık pozitif yük merkezi ile negatif yük merkezi aynı noktada değildir ve atom bir çift-kutup (dipol) gibi davranır. Etki ile oluşturulan bu elektrik çift-kutup moment dış alanla doğru orantılıdır ve dış alanın etkisi ile atomun kutuplandığını söyleyebiliriz. Birbirinden ayrılan yük merkezlerinin arasındaki mesafe  $\delta$  ise dipol moment  $m = Ze\delta$ . Yalıtkan bir malzeme elektrik alan içine konduğu zaman tüm atomları bu şekilde kutuplanarak ortamı polarize etmiş olacaktır.

Yalıtkan maddeler iki grupta toplanabilir. Bunlardan birincisi molekülleri bir elektrik alan içine konmadığı sürece çift kutuplara sahip olmayanlar. İkincisi ise molekülleri bir elektrik alan içinde olmadığı halde çift kutuplara sahip olanlardır. Bunlar kalıcı dipol özelliği taşırlar fakat ısısal uyarılmalardan dolayı tüm kalıcı çift kutup momentler rasgele yönelmişlerdir. Bunun sonucunda ortamdaki toplam kutuplanırlık sıfırdır. Buna ilaveten bir alanın uygulanması ile bu çift kutuplar dış alanın doğrultusunda olacak şekilde yönelirler. İlk guruba polar olmayan moleküller, ikinci guruba ise polar moleküller denir.

Makroskobik polarizasyon yoğunluğu birim hacimdeki elektrik dipol moment olarak tanımlanır ve birim hacimdeki mikroskobik çift-kutup momentlerin vektörel toplamından elde edilir. Eğer birim hacimde N tane molekül varsa ve her molekül, aralarında  $\delta$  kadar uzaklık bulunan  $\pm q$  yükü içeriyorsa zaman ortalamalı kutuplanma yoğunluğu  $\langle P \rangle = N \langle q\delta \rangle$  ile verilir. Birimi ise coul/m<sup>2</sup> dir. Burada çift-kutuplar arasında bir etkileşme olmadığı varsayılmıştır (MARION, 1965).

### 1.3. DIELEKTRİK SABİTİ

Dielektrik özellikler, başka elektrik olaylarını da etkiler. Dielektrik bir ortamda iki elektrik yükü arasındaki kuvvet, vakum bir ortamda oluşandan daha zayıftır; buna karşılık dielektrik bir ortamdaki bir elektrik alanında birim hacim başına toplanan enerji miktarı daha fazladır. Dielektrik malzemeyle doldurulmuş bir kondansatörün kapasitansı bir vakumda olduğundan daha fazladır.

Dielektriğin elektrik olayları üzerindeki etkileri dielektrik sabiti, duygunluk, kutuplanabilirlik ve elektriksel kutuplanma gibi kavramların yardımıyla ayrıntılı bir biçimde tanımlanır. Dielektrik sabiti, elektriksel açıdan yalıtkan malzemelerin yalıtkanlık derecesini

belirleyen bir parametredir. Belirli bir yalıtkanın dielektrik sabiti, bu malzemeye doldurulmuş bir kapasitörün elektrik kapasitansının aynı kapasitörün boş durumda ve vakum bir ortamdaki elektrik kapasitansına olan oranına eşittir.

Dielektrik bir ortamın kutuplanması ortamdaki elektriksel alanın bir sonucudur. Ortamın polarize olma derecesi sadece elektrik alanına bağlı değildir. Ayrıca, ortamı oluşturan moleküllerin özelliklerine de bağlıdır. Eğer ortamı oluşturan dielektrik madde izotropik ise kutuplanma, ona neden olan elektrik alanıyla orantılı ve aynı yönde olacak şekilde yönelir. Buna göre kutuplanma

$$P = \epsilon_0 \chi E$$

ile verilir. Burada  $\chi$  dielektrik duyunluktur. Elektrostatik bir ortam için göreceli dielektrik sabiti  $\epsilon_r$ , elektrik alan  $E$  ve polarizasyon  $P$  cinsinden

$$D = \epsilon_0 E + P = \epsilon_r \epsilon_0 E$$

şeklinde ifade edilir. Burada  $D$ 'ye yerdeğiştirme vektörü denir.  $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$  sabitine ortamın dielektrik geçirgenliği denir ve permitivite adı verilir. Lineer ve izotropik olmayan ortamlarda  $\epsilon = \epsilon(\vec{E}, \vec{r})$  olup uygulanan elektrik alanına ve kristal eksenlerinin yönüne bağlı olarak değişir ve bir tensörle ifade edilir (KITTEL, 1986).

#### 1.4. İZOTROPİK DIELEKTRİKLERİN DEĞİŞKEN ALAN İÇİNDEKİ MAKROSKOBİK ÖZELLİKLERİ

Statik durumda yani elektriksel alanın zamanla değişmediği durumda kutuplanma, ona neden olan alanla orantılı ve sabit bir değere sahiptir. Dinamik durumda, elektriksel alan şiddeti zamanla değiştiği için kutuplanma da değişir.

Mikroskobik parçacıkların hareketi (moleküller, iyonlar, atomlar, elektronlar) kutuplanmanın belli bir değere ulaşması için oda sıcaklığında genellikle  $10^{-6} - 10^{-12}$  s mertebesinde karakteristik zamanlara gereksinim duyarlar. Elektriksel alan, karakteristik zamanın mertebesinde bir periyotla değiştiği zaman, mikroskobik parçacıkların hareketleri denge kutuplanmayı oluşturabilmek için yeterince hızlı olamayacaklardır. Kutuplanmanın gerçek değeri, değişen elektrik alanının gerisinde kalacaktır.

Zamana bağılı elektriksel alanın değişmesi, parçacıkların hareketiyle karşılaştırıldığında yeterince yavaş kalıyorsa, her an alanla dengede olan zamana bağılı bir kutuplanma  $P(t)$ 'yi oluşturmak mümkündür. Bu duruma yarı-statik durum denir. Böylece lineer ve izotropik bir dielektrik için

$$P(t) = \epsilon_0 \chi E(t) \quad \text{ve} \quad D(t) = \epsilon \epsilon_0 E(t)$$

yazabiliriz. Böylece statik durum için geçerli olan bağıntılar yarı-statik durum için de geçerlidir.

Dinamik durum en kolay sinüsoidal olarak değişen bir alan yardımıyla çalışılır. Buna göre zamana bağılı elektriksel alan şiddeti

$$E(t) = E_0 \cos \omega t$$

ile verilir. Burada  $E_0$  ve  $\omega$  sırasıyla sinüsoidal değişimin genliği ve açısal frekansdır. Sinüsoidal elektriksel alanın frekansı, mikroskobik parçacıkların hareketi yeterince hızlı olan alandaki değişikliği izleyemeyecek kadar yüksek olduğu zaman kutuplanma ve dielektrik-yerdeğiştirme yarı-durgun durum için geçerli olan bağıntılarla verilemez.

Lineer ve izotropik sistemler için zamana bağılı dielektrik-yerdeğiştirme elektriksel alana göre  $\delta$  faz farkı ile,  $\omega$  frekanslı sinüsoidal bir ifadeyle tanımlanabilir. Buna göre,  $D_0$  sinüsoidal değişimin genliği olmak üzere

$$D(t) = D_0 \cos(\omega t - \delta)$$

şeklinde yazabiliriz. Sinüsoidal elektrik alanının frekansı değiştiği zaman  $\delta$  faz farkı da frekansa bağılı olarak değişecektir; eğer frekans yeterince düşük ise,  $\delta$  sıfır olacak ve yarı durgun şartlara ulaşacaktır.

Sinüsoidal dielektrik yerdeğiştirme sinüsoidal olarak değişen iki kısma ayrılabilir. Bunlardan biri elektriksel alanla aynı fazda diğeri ise  $\pi/2$  faz farkına sahiptir.

$$D(t) = D_0 \cos \delta \cos \omega t + D_0 \sin \delta \sin \omega t$$

Bu denklem yeni bir notasyon kullanılarak yazılırsa

$$\cos \delta(\omega) = \epsilon'(\omega) \frac{E_0}{D_0},$$

$$\sin \delta(\omega) = \epsilon''(\omega) \frac{E_0}{D_0},$$

$$D(t) = \epsilon'(\omega)E_0 \cos \omega t + \epsilon''(\omega)E_0 \sin \omega t$$

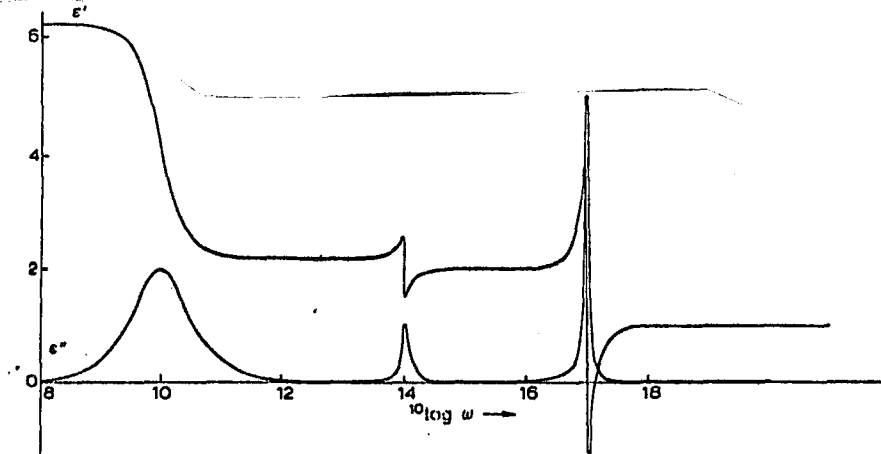
şeklini alır. Böylece  $D(t)$  ile  $E(t)$  arasındaki ilişki, genlik ve faz farkı yerine  $\epsilon'$  ve  $\epsilon''$  gibi iki yeni nicelik cinsinden ifade edilir.

Statik durumda frekans sıfırdır, dolayısıyla

$$D(t) = \epsilon'(\omega)E_0 \cos \omega t + \epsilon''(\omega)E_0 \sin \omega t$$

denklemi  $D(0) = \epsilon'(0)E_0$  denklemine dönüşür. Yarı-durgun durum için geçerli olan  $D(t) = \epsilon E(t)$  denklemini incelersek  $\epsilon'(0) = \epsilon_r \epsilon_0$  olduğunu yani statik durumdaki dielektrik sabiti olduğunu görürüz. Böylece  $\epsilon'(\omega)$  sinüsoidal değişen alanlar için dielektrik sabitinin genelleştirilmesi olarak tanımlanır ve frekansa bağlı dielektrik sabiti olarak isimlendirilir. Diğer nicelik  $\epsilon''(\omega)$ , dielektrik içindeki enerji kaybını belirler. Bundan dolayı  $\epsilon''(\omega)$  kayıp faktörü olarak isimlendirilir.

Frekansa bağlı dielektrik sabiti  $\epsilon'(\omega)$  ve kayıp faktörü  $\epsilon''(\omega)$  uygun deneysel metodlar yardımıyla, frekansın fonksiyonu olarak ölçülebilirler. Katı haldeki tüm polar bileşikler için  $\epsilon'$  ve  $\epsilon''$  nün frekansın fonksiyonu olarak çizilen grafiği şematik olarak aşağıda gösterilmiştir. Şekilde görüldüğü gibi düşük frekanslarda  $\epsilon'(\omega)$ , durgun dielektrik sabiti  $\epsilon'$ 'na eşittir ve  $\epsilon''(\omega)$  sıfırdır. Frekans sıfırdan itibaren belli bir aralıkta artarken  $\epsilon'(\omega)$ 'daki değişme oldukça az fakat rezonans frekansına doğru hızlı bir düşme gösterir ve sabit bir değere ulaşır. Frekansın yüksek değerlerinde ise keskin artışlar ve düşüşlerin olduğunu görüyoruz. Kayıp faktörü  $\epsilon''(\omega)$ ,  $\epsilon'(\omega)$ 'nın değiştiği keskin frekans değerleri civarında piklere sahiptir.



Şekil 1.1: Yoğun fazdaki polar bileşikler için frekansa bağlı dielektrik sabitinin dağılımı ve kayıp pikleri.

Toplam polarizasyona gelen katkıyı üç bölüme ayırabiliriz. Şekilde görüldüğü gibi bunlar yönelim (oriyantasyon), atomik ve elektronik polarizasyondur. Her bölüm sırasıyla farklı karakteristik zamanlara sahip şu üç mikroskobik parçacıkların hareketlerine karşılık gelir: Moleküller ve iyonlar, atomlar, elektronlar. Burada önce moleküllerin ve iyonların hareketleri değişen alanın gerisinde kalıyor (karakteristik zamanları  $10^{-12}$  s), daha sonra atomların hareketi (karakteristik zamanları  $10^{-14}$ ) ve bunu elektronların hareketi izliyor.

Frekansa bağlı dielektrik sabiti ve kayıp faktörü farklı frekans bölgelerinde farklı davranışlar göstermektedir. Elektromagnetik spektrumun optik bölgesinde bunların davranışı kırılma indisi ve absorpsiyon ölçümleri ile belirlenmiştir. Kırılma indisinin frekansa göre gösterdiği değişime dağılım (dispersiyon) ismi verilir ve kırılma indisinin frekansa göre çizilen grafiğine ise dağılım eğrisi denir.

Optik bölgede frekansla kırılma indisindeki artış, ki bu frekansa bağlı dielektrik sabitinin artmasına karşılık gelir, uzun zamandan beri bilinmekte olup normal dağılım olarak isimlendirilmektedir. Frekansın artan değerlerinde, bazı özel durumlarda, kırılma indisindeki azalma keşfedildiğinde buna anormal dağılım dendi. Daha sonra moleküler hareketlerin elektrik alanın gerisinde kaldığı frekanslarda tüm polar bileşiklerde anormal dağılım daima gözlemlendiği için bu durumun anormal değil normal bir dağılım olduğu anlaşıldı.

Yönelme kutuplanması için dağılım bölgesinde frekansa bağlı dielektrik sabitinin frekansa göre değişimini veren eğrinin şekli, atomik ve elektronik polarizasyon için olan dağılım bölgesindeki şeklinden farklıdır ve  $\epsilon''$  nün atomik ve elektronik kutuplanma için verdiği maksimumlar diğerinden daha keskindir. Bu, yönelim kutuplanma ve indüklenme kutuplanma veren moleküler proseslerin her dağılım bölgesinde farklı kaynaklı olmasından dolayıdır.

Atomik ve elektronik kutuplanmaya neden olan hareketlerin kesikli enerji seviyelerine sahip olması keskin pikler verirken yönelim kutuplanma daha geniş absorpsiyon pikleri verir. Doğal olarak, yönelim ve indüklenme ile oluşan kutuplanmanın dinamik davranışlarındaki farklılık sırasıyla relaksasyon olayı ve rezonans olayları ile karakterize edilebilir (BÖTTCHER VE BORDEWIJK, 1978).

## 1.5. KOMPLEKS DİELEKTRİK SABİTİ VE DURULMA FONKSİYONU ARASINDAKİ İLİŞKİ

Elektrostatik durum için her hangi bir dielektrik maddenin göreceli geçirgenliği olan  $\epsilon_r$ , yerdeğiştirme vektörü  $D$ , elektrik alan  $E$  ve polarizasyon  $P$  cinsinden

$$D = \epsilon_0 E + P = \epsilon_r \epsilon_0 E$$

şeklinde verilir. Burada  $P$  madde içindeki birim hacim başına düşen çift-kutuplanma sayısıdır ve

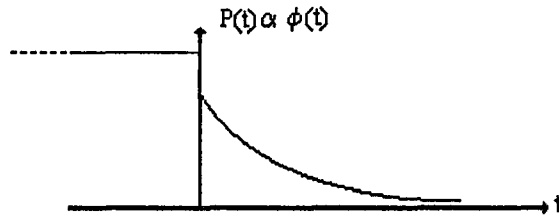
$$P = \epsilon_0 \chi E$$

olarak tarif edilir. Zayıf durgun bir alan etkisinde kalan izotropik dielektrik bir madde için bu bağıntılar skaler, lineer, yerel ve eşzamanlıdır. Kısacası uygunluk uygulanan elektrik alandan ve kristal eksenlerinin yönünden bağımsızdır.

Ancak zamanla değişen alan etkisinde yapılan bir uyarılma durumunda izotropik ortamlar için kutuplanma ile alan eş zamanlı olmayabilir. Dolayısıyla alan ile kutuplanma arasında bir gecikme olur. Causality; sebep-sonuç ilkesine göre  $t$  anındaki uyarılma  $t$  zamanından önceki  $E$ 'nin yapmış olduğu etki sonucunda ortaya çıkar. Buna göre  $E$  ve  $P$  arasındaki gerçek ilişkiyi zamana ve frekansa bağlı olarak şu şekilde elde edebiliriz: Burada fenomenolojik bir yol izleyeceğiz. Farz edelim ki sabit bir elektriksel alan  $-\infty$ 'dan sıfır zaman aralığında maddeye uygulanmış olsun.  $t = 0$  anında aniden alanı kaldırmış olalım. Buna gecikmeli tepki gösteren kalıcı çift-kutuplar, çift-kutup karakterli iyonik kusurlar, elektronik polaronik veya iyonik yapılar, yavaş hareketli elektronik yük taşıyıcıları gibi kısımların oluşturduğu kutuplanmayı

$$P(t) = P_0 \phi(t)$$

şeklinde yazabiliriz. Burada  $\phi(t)$  bozunum veya durulma fonksiyonu adını alır ve tanımı gereği  $t \rightarrow \infty$  da sifira gider.

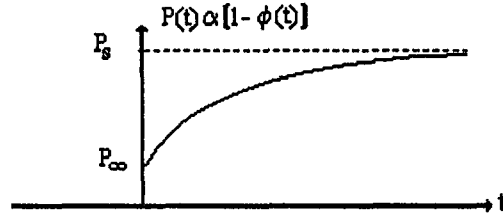




Benzer şekilde şayet elektrik alanı  $t = 0$  anına kadar sıfır ve  $t = 0$  anında birden bire sisteme uygulanırsa doğacak olan kutuplanma

$$P(t) = P_0(1 - \phi(t))$$

olur.



Burada  $P_0$  dielektriğin yavaş cevap veren kısmının denge halindeki kutuplanma değeridir. Böylece toplam kutuplanma  $P_s$ ,  $P_0$  ile hızlı cevap veren kısma ait polarizasyon  $P_\infty$ 'un toplamına eşit olacaktır. Bu tipdeki kutuplanma, uygulanan elektriksel alana çok hızlı cevap verir, böylece GHz mertebesindeki frekans bölgelerinde dielektrik sabitine katkısı sabit olup  $\epsilon_\infty$  ile gösterilmiştir.

Denge durumunda kutuplanmayı yazarsak

$$P_s = P_0 + P_\infty$$

$$P_0 = P_s - P_\infty.$$

$P_s$  ve  $P_\infty$  polarizasyonları dielektrik geçirgenlik cinsinden  $\epsilon E = \epsilon_0 E + P$ ,  $P = (\epsilon - \epsilon_0)E$ . Buna göre  $P_s$  ve  $P_\infty$  şu şekilde olur;

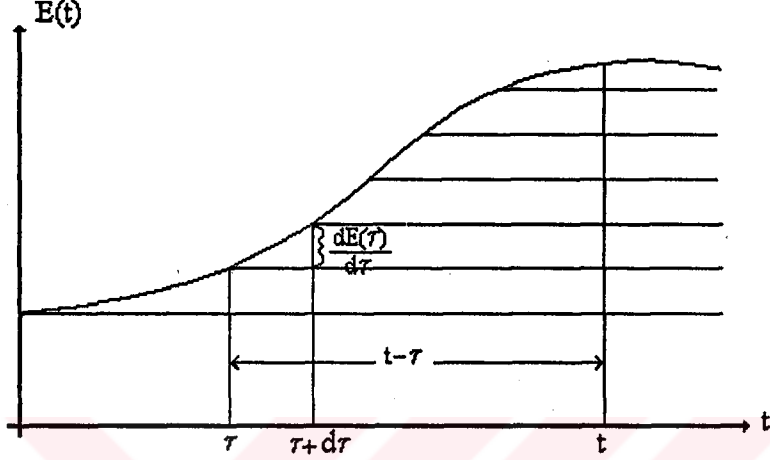
$$P_s = (\epsilon_s - \epsilon_0)E \text{ ve } P_\infty = (\epsilon_\infty - \epsilon_0)E.$$

Bunları  $P_0 = P_s - P_\infty$  de yerine yazarsak  $P_0 = (\epsilon_s - \epsilon_\infty)E$  denklemini elde ederiz. Burada  $\epsilon_s$  sıfır frekans değerinde ve denge durumunda toplam geçirgenlik,  $\epsilon_\infty$  ise sadece yüksek frekans değerlerinde sistemin hızlı kutuplanma değerinin geçirgenliğidir.  $P_0 = (\epsilon_s - \epsilon_\infty)E$  denklemini  $P(t) = P_0(1 - \phi(t))$  denkleminde yerine yazarsak

$$P(t) = (\epsilon_s - \epsilon_\infty)E(1 - \phi(t)).$$



Kutuplanmanın herhangi bir  $E(t)$  elektriksel alana karşı gösterdiği tepki ise şu şekilde bulunabilir. Burada dielektrik kutuplanmanın  $E(t)$  elektriksel alanla lineer olduğu kabul edilirse alanın ard arda uygulanan alanlara karşın ortamda doğan kutuplanmanın üst üste gelme ilkesi uyarınca toplanabildiğini varsayıyoruz.



Bu bize süperpozisyon integralini verecektir:

$$P(t) = (\epsilon_s - \epsilon_\infty) \int_{-\infty}^t \frac{dE(\tau)}{d\tau} (1 - \phi(t - \tau)) d\tau$$

$E(-\infty) = 0$  ve  $\phi(0) = 1$  olmak şartıyla kısmi integrasyon alırsak integral

$$P(t) = \int_{-\infty}^t f(t - \tau) E(\tau) d\tau \text{ olur.}$$

Burada  $f(t - \tau) = (\epsilon_s - \epsilon_\infty) \left( -\frac{d}{dt} \phi(t - \tau) \right)$  birim elektriksel alan başına kutuplanmadaki gecikmeyi verir. Sistemin dengeye ulaşmamış durumunda toplam kutuplanma;

$$P(t) = (\epsilon_\infty - \epsilon_0) E(t) + (\epsilon_s - \epsilon_\infty) \int_{-\infty}^t E(\tau) \left( -\frac{d}{d\tau} \phi(t - \tau) \right) d\tau$$

şeklinde olur. Herhangi bir elektrik alan Fourier açılımı ile farklı frekansların oluşturduğu dalgaların toplamı şeklinde yazılabilir.

$$E(t) = \int_{-\infty}^{\infty} E(\omega) \exp(i\omega t) d\omega$$

şeklindeki bir alan için kutuplanma

$$P_s(t) = \int_{-\infty}^{\infty} (\epsilon(\omega) - \epsilon_s) E(\omega) \exp(i\omega t) d\omega.$$

Her iki denklemi de

$$P(t) = (\epsilon_{\infty} - \epsilon_0) E(t) + (\epsilon_s - \epsilon_{\infty}) \int_{-\infty}^t E(\tau) \left( -\frac{d}{d\tau} \phi(t - \tau) \right) d\tau$$

denkleminde yerine yazarsak,

$$\frac{\epsilon(\omega) - \epsilon_{\infty}}{\epsilon_s - \epsilon_{\infty}} = \int_{-\infty}^t \exp(-i\omega(t - \tau)) d\tau \left( -\frac{d}{d\tau} \phi(t - \tau) \right)$$

şeklindeki kompleks dielektrik sabiti elde edilir. Buradan gereken ara işlemleri yaptıktan sonra bir ortamın kompleks geçirgenliği, süperpozisyon bağıntısı ile bozunum fonksiyonunun Fourier dönüşümü olarak aşağıdaki biçimde verilir;

$$\frac{\epsilon(\omega) - \epsilon_{\infty}}{\epsilon_s - \epsilon_{\infty}} = \int_0^{\infty} \exp(-i\omega t) \left( -\frac{d}{dt} \phi(t) \right) dt.$$

Veya  $f(t) = (\epsilon_s - \epsilon_{\infty}) \left( -\frac{d}{dt} \phi(t) \right)$  eşitliğini kullanarak kompleks dielektrik sabitini,

$$\epsilon(\omega) - \epsilon_{\infty} = \int_0^{\infty} f(t) \exp(-i\omega t) dt$$

şeklinde yazarız. Böylece periyodik bir alan için dielektrik sabiti yani  $D(t)$  ile  $E(t)$  arasındaki orantı sabiti ortamın özelliklerine bağlı olduğu gibi frekansa da bağlanabilir. Elde ettiğimiz bu denklem takımları dielektriğin temel denklemleridir.

## 1.6. DEBYE TEK DURULMA ZAMANLI ÜSSEL BOZUNUM FONKSİYONU

Reel geçirgenlik  $\epsilon'(\omega)$  ve  $\epsilon''(\omega)$  enerji-yitiği faktörünün frekansa göre polar ortamlar için yapılan deneysel ölçümlerden elde edilen verilerin, empirik olarak bulunmuş bir çok farklı dağılım bağıntılarına uyduğu gösterilmiştir.

Dielektrik kutuplanmanın makraskobik teorisine göre uygulanan elektrik alan kaldırıldığı zaman birim zamandaki kutuplanmanın değişmesi dielektrik maddenin geçmişteki durumuna bağlı değildir. Sadece o andaki kutuplanmanın değerine bağlıdır ve

onunla orantılıdır. Orantı sabitine  $\frac{1}{\tau}$  dersek elektriksel alanın kaldırıldığı andaki kutuplanma için

$$\frac{dP(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau}P(t)$$

şeklindeki birinci mertebe bir diferansiyel denklemi elde ederiz. Bunun çözümü  $P(t) = P(0)\exp(-t/\tau)$  olur. Burada  $\tau$ 'ya makroskobik durulma zamanı denir.

$$\phi(t) = \frac{P(t)}{P_0} = \exp(-t/\tau)$$

En basit varsayımlara dayanarak makroskobik teoriden elde edilen bu üstel durulma fonksiyonu, Debye tarafından dipollerin sürtünmeli bir ortamda difüzyon hareketini ele alarak geliştirdiği moleküler bir modelden de elde ettiği için adına Debye durulma fonksiyonu denir.

$$-\frac{d\phi(t)}{dt} = \frac{1}{\tau}\exp(-t/\tau)$$

Bu sonuç

$$\frac{\epsilon(\omega) - \epsilon_\infty}{\epsilon_s - \epsilon_\infty} = \int_0^\infty \exp(-i\omega t) \left( -\frac{d}{dt} \phi(t) \right) dt$$

denkleminde yerine yazılırsa kompleks dielektrik sabiti için

$$\frac{\epsilon(\omega) - \epsilon_\infty}{\epsilon_s - \epsilon_\infty} = \frac{1}{1 + i\omega\tau}$$

bulunur. Reel ve sanal kısımlarını ayırırsak;

$$\frac{\epsilon'(\omega) - \epsilon_\infty}{\epsilon_s - \epsilon_\infty} = \frac{1}{1 + \omega^2\tau^2},$$

$$\frac{\epsilon''(\omega)}{\epsilon_s - \epsilon_\infty} = \frac{\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2}$$

denklemleri elde edilir. Tek durulma zamanlı durum için  $\epsilon''(\omega)$ 'nin  $\epsilon'(\omega)$ 'ne göre grafiği çizilirse yarım daire şeklinde olacaktır. Bu grafiğe Cole-Cole eğrisi denir. Bir çok sayıdaki katı sistemlerde, yönelim kutuplanmanın davranışının tek durulma zamanlı bozunum fonksiyonlarına uymadığını deneysel veriler göstermiştir.

### 1.7. DIELEKTRİK RELAKSASYON VERİLERİNİN EMİRİK İFADESİ

Zamana bağı elektrik alan etkisinde kalan dielektrik maddelerin yönelim (orientational) kutuplanmasının davranışı dielektrik duyunluk veya göreceli dielektrik sabiti ya da durulma zamanının dağılımı ile karakterize edilebilir. Bundan dolayı, bu davranış, çoğunlukla dielektrik durulma olarak ifade edilir. Buna göre harmonik alan içindeki sistemi karakterize eden kompleks dielektrik sabiti  $\epsilon(\omega)$  ile  $\phi(t)$  durulma fonksiyonu arasındaki bağıntının

$$\frac{\epsilon(\omega) - \epsilon_{\infty}}{\epsilon_s - \epsilon_{\infty}} = \int_0^{\infty} \exp(-i\omega t) \left[ -\frac{d}{dt} \phi(t) \right] dt$$

ile verildiğini daha önce belirtmiştik

Bu eşitliklerden yararlanarak verilen bir sistemin durulma fonksiyonu deneysel olarak ölçüldüğünde veya analitik olarak verildiğinde onun normalize edilmiş dielektrik sabitinin reel ve sanal kısımları bulunabilir. Şimdiye kadar yapılan deneysel çalışmalar  $\phi(t)$  durulma fonksiyonu için değişik ifadeler ortaya koymuştur. Dielektriğin makroskobik teorisi durulma fonksiyonunun  $\phi(t) = \exp(-t/\tau)$  biçiminde olmasını öngörürken ayrıca Debye durulma teorisinin de mikroskobik boyutlarda yine durulma fonksiyonun üstel olması gerektiğini ortaya koyması, tüm maddelerin davranışlarını bu kuramlarla anlatmanın yeterli olabileceği gibi görülmüş gözlemlerin buna uymadığı ortaya çıktı. Bugün amorf-polar polimerler için türetilen durulma fonksiyonu William-Watt tarafından ortaya konulan

$$\phi(t) = \exp(-t/\tau)^{\beta}, \quad 0 < \beta < 1 \text{ bağıntısıdır.}$$

Diğer yaklaşımlar ise Cole-Cole tarafından önerilen

$$\frac{\epsilon(\omega) - \epsilon_{\infty}}{\epsilon_s - \epsilon_{\infty}} = \frac{1}{1 + (i\omega\tau_0)^{1-\alpha}}, \quad 0 < \alpha < 1 \text{ ve}$$

Cole-Davidson tarafından önerilen

$$\frac{\epsilon(\omega) - \epsilon_{\infty}}{\epsilon_s - \epsilon_{\infty}} = \frac{1}{(1 + i\omega\tau_0)^{\beta}}, \quad 0 < \beta < 1 \text{ bağıntıdır.}$$

Havriliak-Negami ise Cole-Cole ve Cole-Davidson dağılım fonksiyonlarını birleştirerek

$$\frac{\epsilon(\omega) - \epsilon_{\infty}}{\epsilon_s - \epsilon_{\infty}} = \frac{1}{\{1 + (i\omega\tau_0)^{1-\alpha}\}^{\beta}}, \quad 0 < \alpha < 1, \quad 0 < \beta < 1$$

şeklinde bir dağılım verdiler (BOTTCHER VE BORDEWIJK, 1978).

## 2. ÖNCEKİ ÇALIŞMALAR

Kompleks dielektrik sabitinin reel ve sanal bileşenlerini birbirine bağlayan Kramers Kronig dönüşümlerinin, nümerik hesaplamalar için bir bilgisayar programı Basic dilinde, Lovell tarafından geliştirilmiştir. Bu program kapasitansın reel kısmının ( $C'$ ) direk ölçülen verilerini frekansa bağlı iletkenliğe  $G(\omega) = \omega C''(\omega)$  dönüştürüyordu.

$C'$  ve  $C''$ , dielektrik geçirgenliğin reel kısmı ile sanal kısmı olan  $\epsilon'$  ve  $\epsilon''$  ne aynı geometrik faktörle bağlanır. Sanal kısmın ölçülen değerleri ile reel kısımdan hesaplananlar arasında güzel bir uyum olduğu bulunmuştur (LOVELL, 1974).

Ayrıca K. Ohta ve H. Ishida daha önce Kramers Kronig dönüşümleri ile ilgili geliştirilen bir çok nümerik integrasyon metodlarını bir biriyle karşılaştırmış, en doğru ve hızlı metodu belirlemeye çalışmışlardır. Bir biriyle karşılaştırılan metodlar; Maclaurin's formülü, trapezium formülü, Simpson's formülü ve Ardaşık çift Fourier dönüşümüdür.

Her bir metod için rms farkı ve cpu zamanını bulup bir biriyle karşılaştırdıklarında Maclaurin's formülün en hızlı ve doğru sonucu verdiğini göstermişlerdir. rms farkı

$$rms = \sqrt{\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \{I_{i(numerical)} - I_{i(analytical)}\}^2}$$

formülü ile hesaplanmaktadır. (OHTA VE ISHIDA, 1988).

Biz bu çalışmamızda OHTA VE ISHIDA'nın sadece optik bölgede kırılma indisi için geliştirdiği Kramers-Kronig dönüşümleri için nümerik integrasyon yöntemi olan Maclaurin's formülünü dielektrik ortamlara uygulamak suretiyle daha da genelleştirmiş bulunuyoruz.

### 3. MATERYAL VE METOD

#### 3.1. KRAMERS-KRONİG DÖNÜŞÜMLERİ

Elektromagnetik dalganın optik ve x-ışını bölgelerinde dispersiyon ve absorpsiyon arasındaki ilişkiyi ilk defa bir birinden bağımsız olarak Kronig ve Kramers 1927 de çıkartmışlardır (LANDAU VE LİFSHİTZ, 1960; BOTTCHER VE BORDEWIJK, 1978).

Bir dalganın dağılımı, faz hızının frekansın fonksiyonu olarak değişimine denir. Hacimsel ortamda veya boş uzayda yayılan bir dalga için dispersiyona neden olan şey sadece ve sadece zayıflamadır (attenuation). Bundan dolayı zayıflama dispersiyon için yeterli ve gerekli bir koşuldur. Dispersiyonu ve zayıflamayı bir birine bağlayan ilişki Kramers-Kronig bağıntısıdır. Bu bağıntının geçerliliği, a) sistemin süperpozisyon prensibinin uygulanabilirliğini sağlayan linerliğe sahip olması ve b) sistemin causaliti prensibini sağlaması şartlarını gerektirmektedir (LANDAU VE LİFSHİTZ, 1960). Kramers-Kronig dönüşümleri zayıflamanın frekansa göre elde edilen bilgilerden hesaplanması veya zayıflamanın dispersiyon verilerinden hesaplanması durumunda önemli birer bağıntıdır.

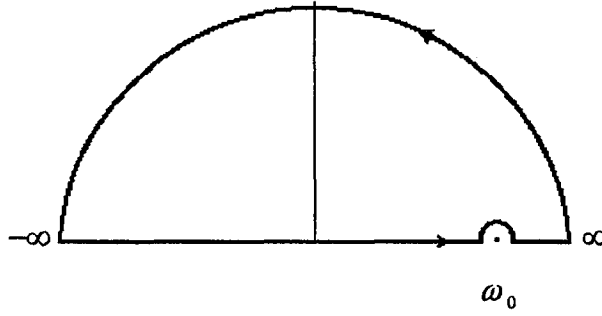
Kompleks fonksiyonlar teorisini kullanarak

$$\epsilon(\omega) - \epsilon_{\infty} = \int_0^{\infty} f(t) \exp(-i\omega t) dt$$

şeklindeki fonksiyonu içeren Kramers-Kronig dönüşümlerini çıkarabiliriz: Bunun için  $\omega$ 'yı kompleks bir değişken olarak alırız ( $\omega = \omega' + i\omega''$ ).

Komleks frekans düzleminde dielektrik fonksiyonunun analitik olduğu bir C konturu seçelim ve  $\omega$ 'nın  $\omega_0$  gibi bir reel değerini alıp  $\frac{\epsilon(\omega) - \epsilon_{\infty}}{\omega - \omega_0}$  'ın C konturu üzerinden integre edelim.

$$\int_C \frac{\epsilon(\omega) - \epsilon_{\infty}}{\omega - \omega_0} d\omega$$



Şekil 3.1

Bu integral C konturu üzerinden alındığında sıfıra eşittir. Sonsuz yarıçaplı yarım daire boyunca da integrale gelecek olan katkı sıfırdır.  $\rho$  yarı çaplı yarım daireden integrale gelecek olan katkı  $-i\pi[\epsilon(\omega_0) - \epsilon_\infty]$ ' dir.

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\infty}^{-\rho+\omega_0} \frac{\epsilon - \epsilon_\infty}{\omega - \omega_0} d\omega + \int_{\rho+\omega_0}^{\infty} \frac{\epsilon - \epsilon_\infty}{\omega - \omega_0} d\omega \right\} - i\pi[\epsilon(\omega_0) - \epsilon_\infty] = 0$$

$$p \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon - \epsilon_\infty}{\omega - \omega_0} d\omega - i\pi[\epsilon(\omega_0) - \epsilon_\infty] = 0$$

Buradaki integral değişkeni olan  $\omega$  sadece reel değerler alır.  $\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega)$  şeklinde reel ve sanal kısımları bir birinden ayırırsak;

$$\epsilon'(\omega) - \epsilon_\infty = \frac{1}{\pi} p \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon''(x)}{x - \omega} dx$$

$$\epsilon''(\omega) = -\frac{1}{\pi} p \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\epsilon'(x)}{x - \omega} dx$$

reel ve sanal kısımlar arasındaki Hilbert dönüşümlerini elde ederiz.  $\epsilon'(x)$  kısmının çift fonksiyon  $\epsilon''(x)$  kısmında tek fonksiyon özelliğini kullanarak

$$\epsilon'(\omega) - \epsilon_\infty = \frac{2}{\pi} p \int_0^{\infty} \frac{x \epsilon''(x)}{x^2 - \omega^2} dx$$

$$\epsilon''(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} p \int_0^{\infty} \frac{\epsilon'(x)}{x^2 - \omega^2} dx$$

kompleks dielektrik sabitinin reel ve sanal bileşenleri arasındaki Kramers Kronig denklemlerini elde ederiz (LANDAU VE LİFSHİTZ, 1960).

Kramers-Kronig dönüşümleri kompleks dielektrik sabitinden birinin ifadesi analitik olarak biliniyorsa diğerinin hesaplanmasında kullanılabilir. Yada deneysel olarak bileşenlerden biri frekansın fonksiyonu olarak ölçülmüş ise öbürünün değeri bu yolla belirlenebilir. Deneysel veriler durumunda Kramers-Kronig dönüşümlerinin nümerik integrasyon yöntemlerine kesin gereksinim vardır. Analitik fonksiyonlar durumunda da her zaman integrali hesaplamak mümkün olmayabilir. O takdirde de nümerik integrasyona gereksinim duyarız.

### 3.2. KRAMERS-KRONİG DÖNÜŞÜMLERİ'NİN MACLAURİN'S FORMÜLÜ YARDIMIYLA NÜMERİK İNTEGRASYONU

Maclaurin's Formülü en doğru metoddur ve hesaplama zamanı kısadır (OHTA VE ISHIDA, 1988).

Bu metodu, Bölüm 3.1. de elde ettiğimiz Kramers-Kronig dönüşümlerden birine uygulayarak anlatabiliriz. Örneğin sanal kısım  $\epsilon''(x)$ 'den reel kısım  $\epsilon'(\omega)$  ya olan dönüşümü ele alalım;

$$\epsilon'(\omega) - \epsilon_{\infty} = \frac{2}{\pi} p \int_0^{\infty} \frac{x \epsilon''(x)}{x^2 - \omega^2} dx.$$

Dönüşümü yapılacak olan  $\epsilon''(x)$  değerleri  $m$  tane frekansa karşılık gelen  $m$  tane  $\epsilon''_j$  değerleri ile verilsin;

$$x_1, x_2, x_3, \dots, x_j, \dots, x_{m-1}, x_m$$

$$\epsilon''_1, \epsilon''_2, \epsilon''_3, \dots, \epsilon''_j, \dots, \epsilon''_{m-1}, \epsilon''_m$$

Bu değerler empirik olarak çıkartılmış denklemlerden, frekansın belli değerlerine karşı hesaplanarak bulunabileceği gibi deneysel yollarla da elde edilmiş olabilir. Burada frekanslar arasındaki aralığa  $h$  dersek  $h = x_{j+1} - x_j$ , ( $j = 1, 2, 3, \dots, m-1$ ) şeklinde olur.  $x_1$  ve  $x_m$



arasındaki  $\epsilon''(x)$  değerlerinin dışındaki değerleri sıfır alalım. Yaklaşık olarak nümerik integrasyonumuz bu durumda

$$I(x_i) = \frac{2}{\pi} p \int_{x_1}^{x_m} \frac{x \epsilon''(x)}{x^2 - x_i^2} dx .$$

$I(x_i)$  integrali  $x = x_i$  'de bir kutuba sahiptir. Bu noktada integrale yaklaşıklık getirmeliyiz.

Bu yaklaşıklık Maclaurin's Formülüne göre,

$$I_i = \frac{2}{\pi} * 2h * \left\{ \sum_j f_j \right\}$$

$$f_j = \frac{x_j \epsilon_j''}{x_j^2 - x_i^2} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\epsilon_j''}{x_j - x_i} + \frac{\epsilon_j''}{x_j + x_i} \right\}$$

şeklinde olur. Burada  $i$  eğer tek sayı ise

$$j = 2, 4, 6, \dots, i-1, i+1, \dots$$

aksi durumda  $i$  eğer çift sayı ise

$$j = 1, 3, 5, \dots, i-1, i+1, \dots$$

olacaktır. Böylece  $I(x_i)$  integralini yaklaşık olarak almış olacağız (OHTA VE ISHIDA, 1988).

Bu algoritmanın fortran dilinde programı yapıldı ve doğruluğu referans olarak seçilen analitik bir fonksiyon ile test edildi. Programı çalıştırabilmek için  $x_1, x_2, x_3, \dots, x_j, \dots, x_n$  frekanslarına karşı gelen  $\epsilon_1'', \epsilon_2'', \epsilon_3'', \dots, \epsilon_j'', \dots, \epsilon_n''$  değerlerini veya  $\epsilon_1', \epsilon_2', \epsilon_3', \dots, \epsilon_j', \dots, \epsilon_n'$  değerlerini herhangi bir şekilde bilmemiz gerekir. Daha sonra bileşenlerden hangisi biliniyorsa, bilinen değerler

$$I_i = \frac{2}{\pi} * 2h * \left\{ \sum_j f_j \right\}$$

integralinde bilgisayar programı aracılığı ile hesaplatılarak, her bir frekansa karşılık gelen, bilinmeyen bileşen değerleri yaklaşık olarak bulunmuş olur.

### 3.3. REFERANS OLARAK KULLANILAN ANALİTİK FONKSİYON

Kompleks kırılma indisinin sanal ve reel kısmı ile ilgili analitik fonksiyonlar ;

$$k(\nu) = \frac{k_{\max}(\gamma/2)^2}{(\nu - \nu_0)^2 - (\gamma/2)^2} - \frac{k_{\max}(\gamma/2)^2}{(\nu + \nu_0)^2 + (\gamma/2)^2}$$

$$n(\nu) - n(\infty) = k_{\max} \left\{ -\frac{(\nu - \nu_0)(\gamma/2)}{(\nu - \nu_0)^2 + (\gamma/2)^2} + \frac{(\nu + \nu_0)(\gamma/2)}{(\nu + \nu_0)^2 + (\gamma/2)^2} \right\}$$

olarak verilmektedir (OHTA VE ISHIDA, 1988).

Bu denklemler, kompleks kırılma indisinin  $\hat{n}(\nu) = n(\nu) + ik(\nu)$  reel kısmı ile sanal kısmı arasındaki

$$n(\nu_i) - n(\infty) = \frac{2}{\pi} p \int_0^{\infty} \frac{\nu k(\nu)}{\nu^2 - \nu_i^2} d\nu$$

$$k(\nu_i) = -\frac{2\nu_i}{\pi} p \int_0^{\infty} \frac{n(\nu) - n(\infty)}{\nu^2 - \nu_i^2} d\nu$$

ile verilen Kramers Kronig dönüşümlerini analitik olarak sağlamaktadır (OHTA VE ISHIDA, 1988).

Kompleks kırılma indisinin reel kısmı ve sanal kısmı  $\nu_1=1000 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\nu_m=3000 \text{ cm}^{-1}$ ,  $h=2 \text{ cm}^{-1}$ ,  $k_{\max}=0.5$ ,  $\nu_0=2000 \text{ cm}^{-1}$ ,  $\gamma=40 \text{ cm}^{-1}$  sabit parametreleri kullanılarak verilen frekans aralığında

$$k(\nu) = \frac{k_{\max}(\gamma/2)^2}{(\nu - \nu_0)^2 - (\gamma/2)^2} - \frac{k_{\max}(\gamma/2)^2}{(\nu + \nu_0)^2 + (\gamma/2)^2}$$

$$n(\nu) - n(\infty) = k_{\max} \left\{ -\frac{(\nu - \nu_0)(\gamma/2)}{(\nu - \nu_0)^2 + (\gamma/2)^2} + \frac{(\nu + \nu_0)(\gamma/2)}{(\nu + \nu_0)^2 + (\gamma/2)^2} \right\}$$

denklemlerinde yerine konularak  $h=2$  frekans adımlarında hesaplanırsa elde edilen veriler aşağıdaki gibi olur:

$\nu$	$k(\nu)$	$n(\nu)$
1000.000000	1.776988E-04	1.332919E-02
1002.000000	1.785302E-04	1.334698E-02
1004.000000	1.793663E-04	1.336486E-02
1006.000000	1.802072E-04	1.338282E-02
1008.000000	1.810530E-04	1.340087E-02
1010.000000	1.819037E-04	1.341900E-02
1016.000000	1.844856E-04	1.347391E-02
1018.000000	1.853562E-04	1.349238E-02
1020.000000	1.862320E-04	1.351095E-02
1022.000000	1.871129E-04	1.352960E-02
1024.000000	1.879989E-04	1.354834E-02
1026.000000	1.888902E-04	1.356716E-02
.	.	.
.	.	.
.	.	.
.	.	.
2980.000000	2.000956E-04	-8.191834E-03
2982.000000	1.992554E-04	-8.171883E-03
2984.000000	1.984203E-04	-8.152016E-03
2986.000000	1.975904E-04	-8.132233E-03
2988.000000	1.967655E-04	-8.112532E-03
2990.000000	1.959456E-04	-8.092914E-03
2992.000000	1.951307E-04	-8.073376E-03
2994.000000	1.943207E-04	-8.053920E-03
2996.000000	1.935157E-04	-8.034545E-03
2998.000000	1.927155E-04	-8.015250E-03
3000.000000	1.919202E-04	-7.996034E-03

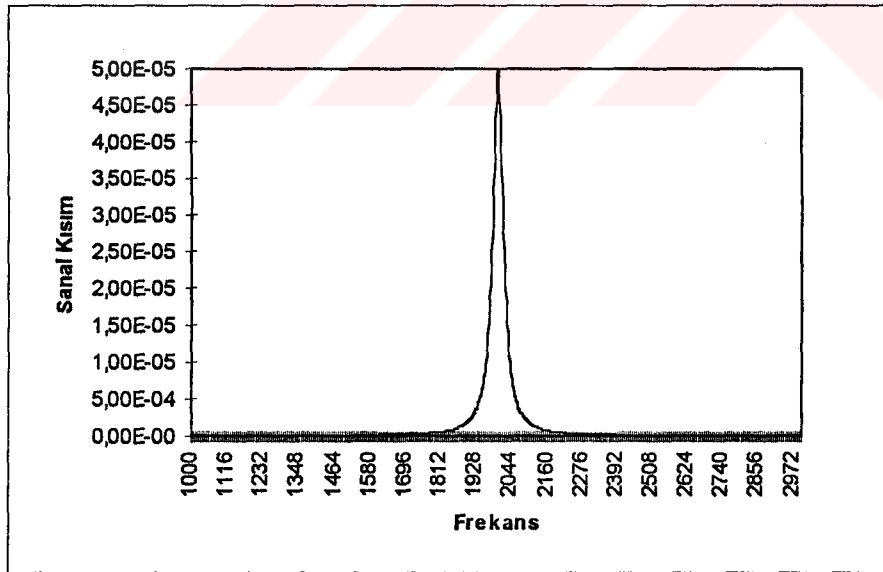
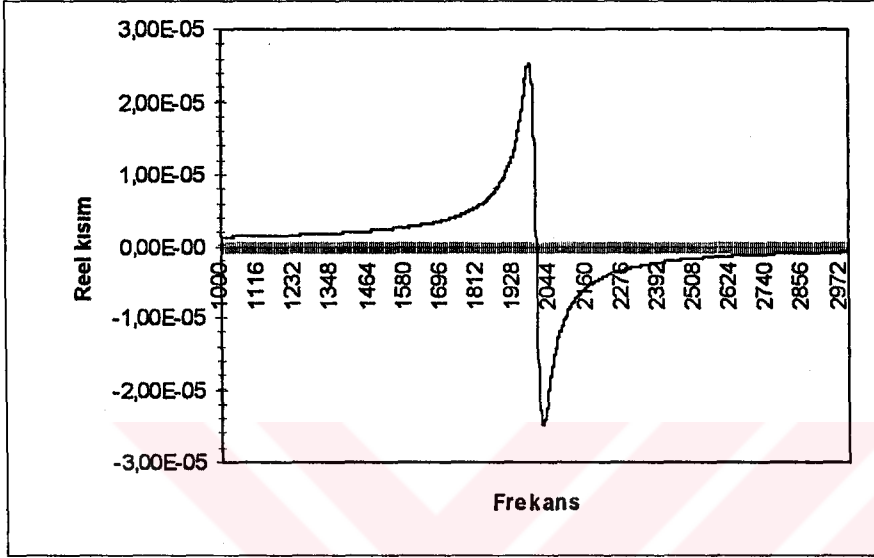
Tablo 3.1: Kompleks kırılma indisinin sanal ve reel kısımlarını veren denklemlerden elde edilen veriler.

Tablo 3.1.'de ki kompleks kırılma indisine ait verilerden sadece bir bileşeni frekansa göre bildiğimizi varsayalım. Örneğin bu verilerden  $k(\nu)$  bileşenini bildiğimizi varsayalım. Burada  $\nu_1 = 1000cm^{-1}$  ve  $\nu_m = 3000cm^{-1}$  arasındaki  $k(\nu)$  değerlerinin dışındaki değerleri sıfır alırız. Bu bileşene ait verileri, Bölüm 3.2.'de Maclaurin metoduna göre geliştirdiğimiz ve Fortran dilinde yazdığımız programda kullandığımız zaman  $n(\nu)$  bileşenini nümerik olarak buluruz. Denklemden hesaplanan  $n(\nu)$  bileşenine ait verilerle programdan bulduğumuz veriler Tablo 3.2 'de görülmektedir.

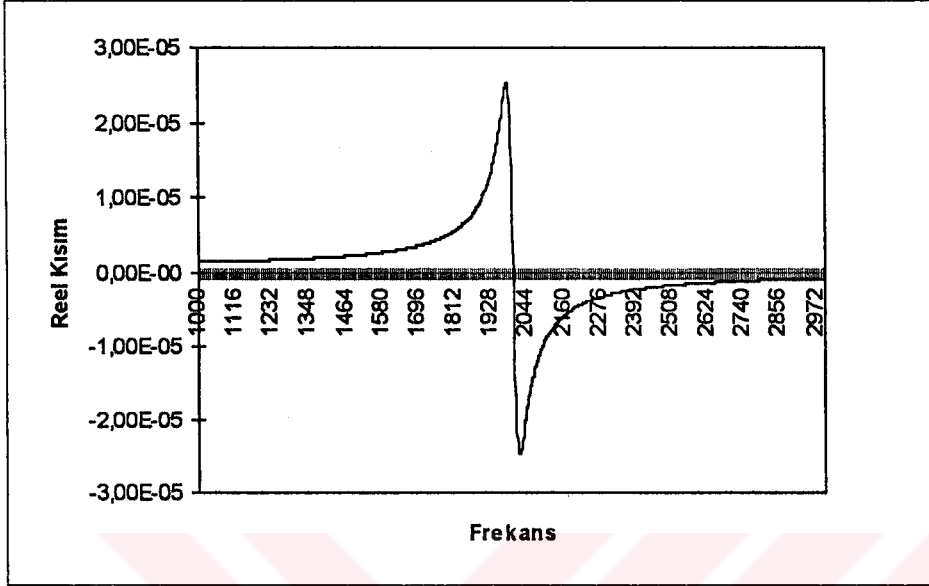
$\nu$	$n(\nu)$ program ile hesaplanan	$n(\nu)$ denklemden hesaplanan
1000.000000	1.363032E-02	1.332919E-02
1002.000000	1.353674E-02	1.334698E-02
1004.000000	1.355554E-02	1.336486E-02
1006.000000	1.353703E-02	1.338282E-02
1008.000000	1.355585E-02	1.340087E-02
1010.000000	1.355242E-02	1.341900E-02
1012.000000	1.357131E-02	1.343722E-02
1014.000000	1.357442E-02	1.345552E-02
1016.000000	1.359341E-02	1.347391E-02
.	.	.
1592.000000	2.721966E-02	2.723493E-02
1594.000000	2.733788E-02	2.735325E-02
1596.000000	2.745735E-02	2.747274E-02
1598.000000	2.757791E-02	2.759344E-02
1600.000000	2.769978E-02	2.771535E-02
1602.000000	2.782283E-02	2.783849E-02
1604.000000	2.794718E-02	2.796289E-02
1606.000000	2.807274E-02	2.808855E-02
.	.	.
2986.000000	-8.329784E-03	-8.132233E-03
2988.000000	-8.326766E-03	-8.112532E-03
2990.000000	-8.306391E-03	-8.092914E-03
2992.000000	-8.310423E-03	-8.073376E-03
2994.000000	-8.290121E-03	-8.053920E-03
2996.000000	-8.310448E-03	-8.034545E-03
2998.000000	-8.290150E-03	-8.015250E-03
3000.000000	-8.391600E-03	-7.996034E-03

Tablo 3.2: Denklemden hesaplanan  $n(\nu)$  bileşenine ait verilerle programdan bulduğumuz veriler.

Ayrıca Tablo 3.1. ve 3.2.'de ki elde edilen verilerin frekansa göre grafikleri çizilirse aşağıdaki şekilleri elde ederiz;



Şekil 3.2: Kompleks kırılma indisinin reel kısmı ile sanal kısmının frekansa göre değişimleri.



Şekil 3.3: Nümerik integrasyon yöntemiyle elde edilen verilerden çizilen grafik.

EKTE verilen bilgisayar programı yardımıyla bulunan veriler Tablo 3.2’de görüldüğü gibi analitik sonuçlarla tam bir uyum içindedir. Bilgisayar programı çalıştırılarak elde edilen verilerin frekansa göre değişimi de Şekil 3.3.’de olduğu gibi analitik hesaplamalarla elde edilen verilerden çizilen şekille aynıdır. Bu da bize Fortran dilinde Maclaurin formülüne göre geliştirdiğimiz bilgisayar programının doğru çalıştığını göstermektedir.

### 3.4. TEK DURULMA ZAMANLI KOMPLEKS DİELEKTRİK SABİTİNİN KRAMERS KRONİG DÖNÜŞÜMÜ VE NÜMERİK ANALİZİ

Bir çok sayıdaki katı sistemlerde yönelim kutuplanmanın davranışı tek durulma zamanlı durum için çıkartılan denklemlerle ifade edilir. Bölüm 1.6.’da bu ifadeler bulunmuştu;

$$\frac{\epsilon'(\omega) - \epsilon_{\infty}}{\epsilon_s - \epsilon_{\infty}} = \frac{1}{1 + \omega^2 \tau^2},$$

$$\frac{\epsilon''(\omega)}{\epsilon_s - \epsilon_\infty} = \frac{\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2}$$

Bu denklemler kompleks dielektrik sabitinin,  $\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) + i\epsilon''(\omega)$  reel ve sanal bileşenlerini ifade ediyorsa Kramers-Kronig dönüşümlerini sağlamak zorundadır. İlk önce reel kısımdan sanal kısma olan dönüşümü ele alalım. Bunun için tek durulma zamanlı durum için

$$\epsilon'(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{1 + \omega^2\tau^2}$$

denklemini

$$\epsilon''(\omega_0) = -\frac{2\omega_0}{\pi} p \int_0^\infty \frac{\epsilon'(\omega)}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega$$

kompleks dielektrik sabitinin sanal bileşenini veren dönüşümde yerine yazarsak;

$$\epsilon''(\omega_0) = -\frac{2\omega_0}{\pi} p \int_0^\infty \left( \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{1 + \omega^2} + \epsilon_\infty \right) \frac{d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2}$$

buradan da

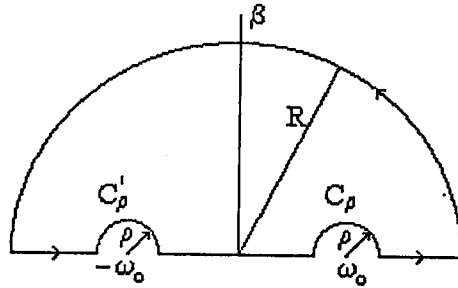
$$\epsilon''(\omega_0) = -\frac{\omega_0 \epsilon_\infty}{\pi} p \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2} - \frac{\omega_0(\epsilon_s - \epsilon_\infty)}{\pi} p \int_{-\infty}^\infty \frac{d\omega}{(1 + \omega^2\tau^2)(\omega^2 - \omega_0^2)}$$

integralini elde ederiz. Birinci integrali almak için

$$\oint_C \frac{dz}{z^2 - \omega_0^2}, \quad z = \omega + i\beta$$

şeklindeki kontur integralini seçelim. Bu

$$\oint_C \frac{dz}{z^2 - \omega_0^2} = 2\pi i (\text{C içindeki kutupların resüdülerinin toplamı}) = 0.$$



Şekil 3.4.

$$\oint \frac{dz}{z^2 - \omega_0^2} = \int_{-R}^{-\rho - \omega_0} \frac{d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2} + \int_{\rho - \omega_0}^{\omega_0 - \rho} \frac{d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2} + \int_{\omega_0 + \rho}^R \frac{d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2} \\ + \int_{C_\rho'} \frac{dz}{z^2 - \omega_0^2} + \int_{C_\rho} \frac{dz}{z^2 - \omega_0^2} + \int_{C_R} \frac{dz}{z^2 - \omega_0^2},$$

$$\left| \int_{C_R} \frac{dz}{z^2 - \omega_0^2} \right| = \left| \int_0^\pi \frac{i R e^{i\theta} d\theta}{(R^2 e^{i2\theta} - \omega_0^2)^2} \right| \leq \int_0^\pi \frac{R d\theta}{(R^2 - \omega_0^2)^2} = \frac{\pi R}{R^2 - \omega_0^2}.$$

$R \rightarrow \infty$  olduğunda integralin sonucu olan  $\frac{\pi R}{R^2 - \omega_0^2}$  ifadesi sifira gider. Ayrıca

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \int_{C_\rho} \frac{dz}{z^2 - \omega_0^2} = -i\pi(z = \omega_0 \text{ 'daki residue}) = -\frac{i\pi}{2\omega_0}$$

ve

$$\lim_{\rho \rightarrow 0} \int_{C_\rho'} \frac{dz}{z^2 - \omega_0^2} = \frac{i\pi}{2\omega_0}.$$

Böylece  $R \rightarrow \infty$  ve  $\rho \rightarrow 0$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{\omega^2 - \omega_0^2} = 0$$

olur.

İkinci integral ise

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{(1 + \omega^2 \tau^2)(\omega^2 - \omega_0^2)} = \frac{1}{\tau^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{(\omega + \omega_0)(\omega - \omega_0)(\omega + \frac{i}{\tau})(\omega - \frac{i}{\tau})}$$

şeklinde olur. Daha önceki integrale benzer şekilde residue yöntemi ile integrali alınırsa;

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{(1 - \omega^2 \tau^2)(\omega^2 - \omega_0^2)} = \frac{2\pi i}{\tau^2} \left[ \text{residue } z = \frac{i}{\tau} + 1/2 \text{ residue } z = -\omega_0 \right. \\ \left. + 1/2 \text{ residue } z = \omega_0 \right] = -\frac{\pi\tau}{1 + \omega_0^2 \tau^2}$$

Dolayısıyla analitik olarak sanal bileşen



$$\epsilon''(\omega_0) = \frac{(\epsilon_s - \epsilon_\infty)\omega_0\tau}{1 + \omega_0^2\tau^2}$$

şeklinde olur.

Reel bileşen için dönüşümü yapmak istersek, sanal bileşeni bulmak için izlediğimiz yolu tekrarlamamız gerekir. Bunun için

$$\epsilon''(\omega) = \frac{(\epsilon_s - \epsilon_\infty)\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2}$$

denklemini

$$\epsilon'(\omega_0) - \epsilon_\infty = \frac{2}{\pi} p \int_0^\infty \frac{\omega \epsilon''(\omega)}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega$$

şeklindeki dönüşümünde yerine yazalım, elde edilen sonuç

$$\epsilon'(\omega_0) = \epsilon_\infty + \frac{(\epsilon_s - \epsilon_\infty)\tau}{\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{\omega^2 d\omega}{(1 + \omega^2\tau^2)(\omega^2 - \omega_0^2)} \text{ olur. Bu ise}$$

$$\frac{1}{\tau^2} \int_{-\infty}^\infty \frac{\omega^2 d\omega}{(\omega + \frac{i}{\tau})(\omega - \frac{i}{\tau})(\omega + \omega_0)(\omega - \omega_0)} = \frac{2\pi i}{\tau^2} \left[ \text{residue } z = \frac{i}{\tau} + 1/2 \text{ residue } z = -\omega_0 \right. \\ \left. + 1/2 \text{ residue } z = \omega_0 \right] = \frac{\pi}{(1 + \omega_0^2\tau^2)\tau} \text{ eşit olur.}$$

Sonuç olarak

$$\epsilon'(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{1 + \omega^2\tau^2}$$

şeklindeki kompleks dielektrik sabitinin reel bileşeni  $\epsilon'(\omega)$  analitik olarak bulunmuş olur.

Burada görüldüğü gibi kompleks dielektrik sabitinin reel kısmını veren

$$\epsilon'(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{1 + \omega^2\tau^2}$$

ifadeyi bildiğimizi varsayarak

$$\epsilon''(\omega_0) = -\frac{2\omega_0}{\pi} p \int_0^\infty \frac{\epsilon'(\omega)}{\omega^2 - \omega_0^2} d\omega$$

şeklindeki Kramers-Kronig dönüşümünde yerine yazıp kompleks dielektrik sabitinin sanal kısmını analitik olarak bulduk. Daha sonra sanal kısmını veren ifadeyi bildiğimizi varsayıp

Kramers-Kronig dönüşümünden reel bileşeni veren denklemi analitik olarak bulduk. Dolayısıyla dönüşümleri kullanarak kompleks dielektrik sabitinden birinin ifadesi analitik olarak biliniyorsa diğerini bu yolla kolayca bulabiliriz.

Şimdi aynı işlemleri nümerik yolla yapmaya çalışalım: Bu bulduğumuz denklemlerden,  $\epsilon_\infty = 2$  ve  $\epsilon_s = 10$  sabit parametreleri kullanılarak  $\epsilon''(\omega)$  ve  $\epsilon'(\omega)$  değerleri  $\omega\tau = 0.05$  ve  $\omega\tau = 375$  frekans aralığında  $h = 0.05$  adımlarla

$$\epsilon''(\omega) = \frac{(\epsilon_s - \epsilon_\infty)\omega\tau}{1 + \omega^2\tau^2}$$

ve

$$\epsilon'(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_s - \epsilon_\infty}{1 + \omega^2\tau^2}$$

denklemleri kullanılarak hesaplanırsa elde edilen veriler aşağıdaki gibi olur:

$\omega\tau$	$\epsilon''(\omega)$	$\epsilon'(\omega)$
5.000000E-02	4.987531E-01	11.975060
1.500000E-01	1.466993	11.779950
2.500000E-01	2.352941	11.411770
3.500000E-01	3.118040	10.908690
4.500000E-01	3.742204	10.316010
-	-	-
1.750000	4.307693	4.461538
1.850000	4.183154	4.261165
1.950000	4.060385	4.082249
3.050000	2.960447	2.970638
3.150000	2.883955	2.915541
3.250000	2.810811	2.864865
-	-	-
156.050000	6.407939E-02	2.000411
156.150000	6.403836E-02	2.000410
156.250000	6.399738E-02	2.000410
-	-	-
365.450000	2.736332E-02	2.000075
365.550000	2.735583E-02	2.000075
365.650000	2.734835E-02	2.000075
365.750000	2.734088E-02	2.000075
365.850000	2.733340E-02	2.000075
365.950000	2.732593E-02	2.000075

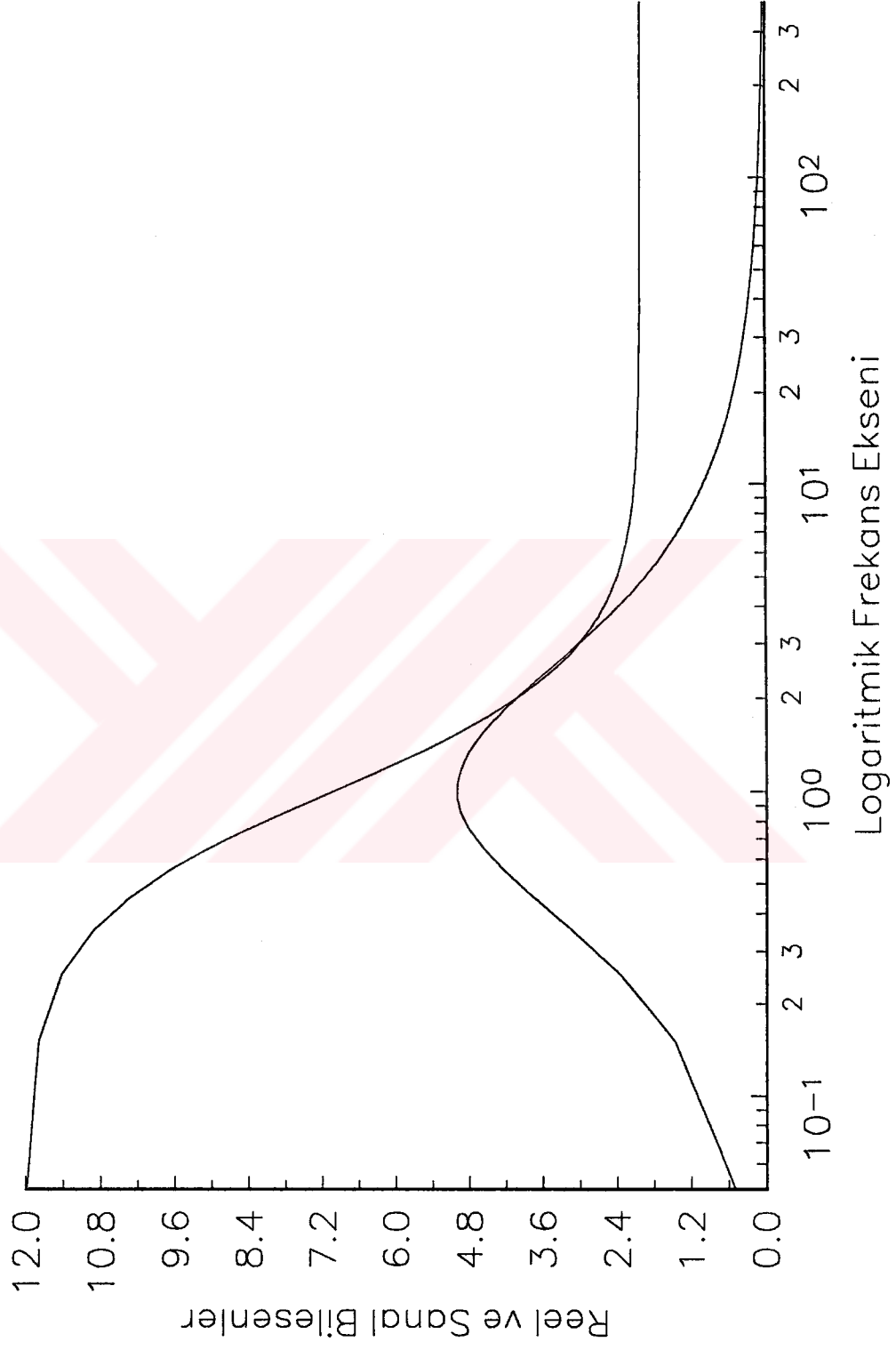
Tablo 3.3: Tek durulma zamanlı kompleks dielektrik sabitinin sanal ve reel kısımlarını veren denklemlerden elde edilen veriler.

$\epsilon''(\omega)$  ve  $\epsilon'(\omega)$ 'nün analitik denklemlerinden hesaplanan verilerden,  $\epsilon''(\omega)$  bileşenini alıp programda kullandığımız zaman nümerik olarak  $\epsilon'(\omega)$ 'ne ait verileri buluruz. Programdan bulduğumuz verilerle denklemden hesaplananlar Tablo 3.4'de gösterilmiştir:

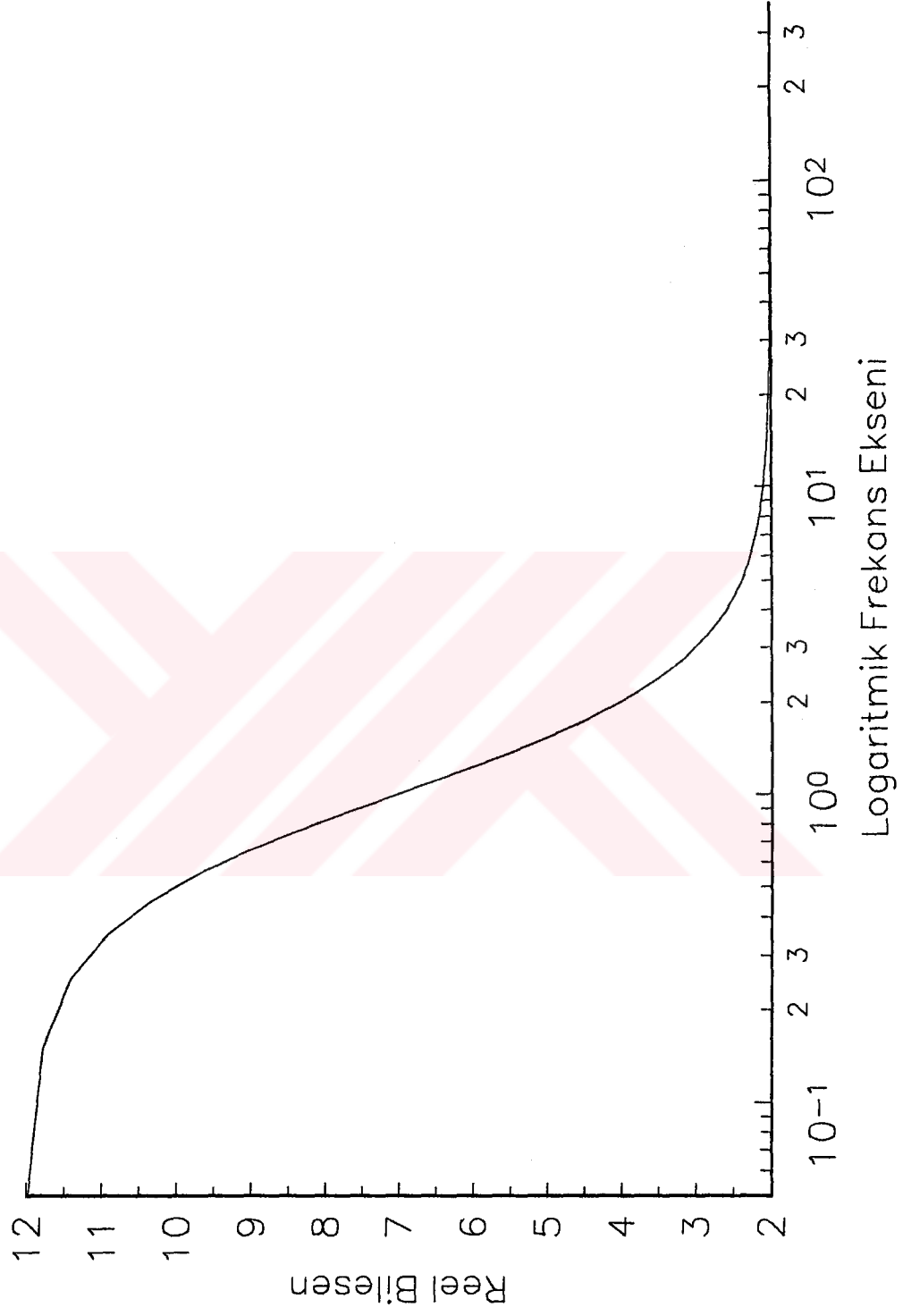
$\omega\tau$	$\epsilon'(\omega)$ program ile hesaplanan	$\epsilon'(\omega)$ denklemden hesaplanan
5.000000E-02	11.958110	11.975060
1.500000E-01	11.762990	11.779950
2.500000E-01	11.394800	11.411770
3.500000E-01	10.891730	10.908690
6.500000E-01	9.012911	9.029877
1.050000	6.739275	6.756242
1.150000	6.288723	6.305705
-	-	-
22.850000	2.002121	2.019116
22.950000	2.001966	2.018950
23.050000	2.001803	2.018786
23.150000	2.001616	2.018625
23.250000	2.001459	2.018465
23.350000	2.001311	2.018307
-	-	-
-	-	-
204.050000	1.981212	2.000240
204.150000	1.981220	2.000240
204.250000	1.981205	2.000240
204.350000	1.981205	2.000239
204.450000	1.981189	2.000239
204.550000	1.981198	2.000239
204.650000	1.981207	2.000239
-	-	-
-	-	-
374.150000	1.942856	2.000072
374.250000	1.941871	2.000071
374.350000	1.940762	2.000071
374.450000	1.939480	2.000071
374.550000	1.937951	2.000071
374.650000	1.936054	2.000071

Tablo 3.4. Tek durulma zamanlı durum için programdan bulduğumuz verilerle denklemden hesaplananlar.

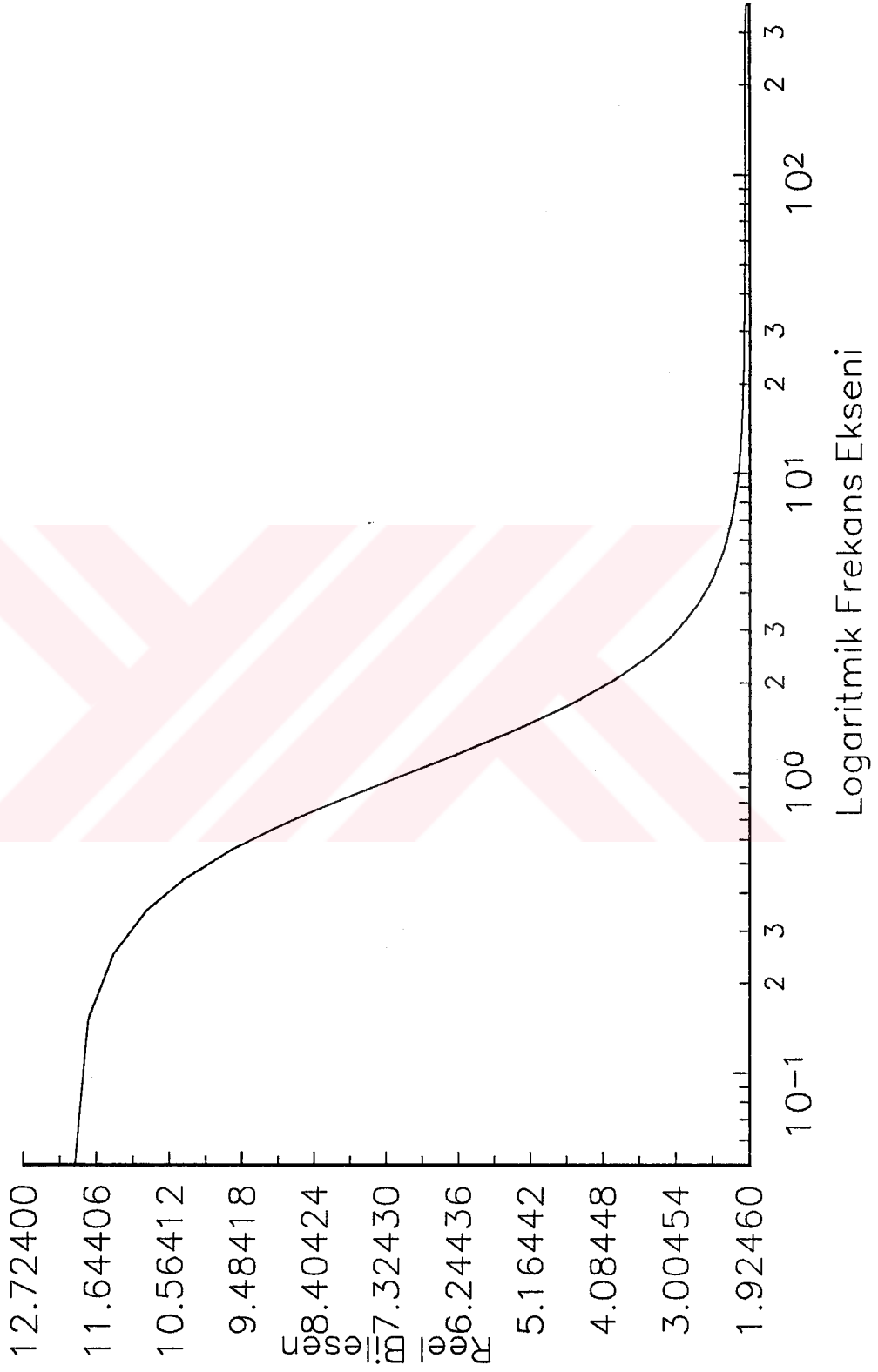
Sekil 3.5.



Sekil 3.6. Denklemden Hesaplanan Verilerin Grafiki



Sekil 3.7 Program ile Hesaplanan verilerin Grafigi



Maclaurin's Formülüne göre geliştirilen algoritmanın Fortran programı, referans olarak seçilen kompleks kırılma indisinde kullanıldı ve denklemden hesaplanan reel bileşenle programdan bulunan bileşen bir biriyle uyum içinde olduğu gözlemlendi.

Tek durulma zamanlı kompleks dielektrik sabitinin analitik olarak bulunan reel bileşeninden hesaplanan verilerle programdan bulunan veriler Tablo 3.4.'de gösterilmiştir. Tablo 3.4.'deki veriler ve bunlarla ilgili grafiklerden de görüldüğü gibi sonuçlar burada da bir biriyle uyum içindedir. Böylece Kramers-Kronig dönüşümü ile ilgili nümerik analizi yapan bu programın doğru çalıştığı sonucuna varabiliriz.



#### 4. TARTIŞMA VE SONUÇLAR

Kramers-Kronig bağıntıları katıların dielektrik davranışlarının yorumunda temel bir öneme sahiptir. Lineer pasif bir sistemde yanıt fonksiyonunun sanal kısmı tüm frekanslarda biliniyorsa reel kısmını (veya tersini) bulma olanağı verir.

Bu çalışma Kramers-Kronig bağıntılarının dielektriklerdeki pratik kullanımının nasıl yapılacağını göstermektedir. Nümerik dönüşümler tam olarak dönüştürülemeyen empirik fonksiyonlar için de kullanılabilir. Kramers-Kronig dönüşümleri için yapılan bilgisayar programı, bu dönüşümleri analitik olarak sağlayan bir fonksiyonla test edilmiş ve analitik denklemden elde edilen sonuçlarla program yardımıyla bulunan sonuçlar bir biriyle çok uyumludur.

Doğruluğu ve geçerliliği bu şekilde kanıtlanan bu bilgisayar programı yardımı ile dielektrik verilerinin analizi rahatlıkla yapılabilir.

Bu çalışmada sadece optik bölgede kırılma indisi için geliştirilen Kramers-Kronig dönüşümlerinin nümerik integrasyonunu, dielektrik ortamlara uygulamak suretiyle daha da genelleştirme amacında idik. Bunu, Bölüm 3.4.'de tek durulma zamanlı kompleks dielektrik sabitinin nümerik analizinde gerçekleştirmiş bulunuyoruz.

Tek durulma zamanlı kompleks dielektrik sabitinin nümerik analizinde  $\omega\tau = 0.05$  ve  $\omega\tau = 375$  frekans aralığında  $h = 0.05$  adımlarla  $\epsilon''(\omega)$  bileşenini analitik denklemlerden hesaplamış ve daha sonra bilgisayar programında kullanılarak nümerik olarak  $\epsilon'(\omega)$  değerleri bulunmuştur. Aynı işlemleri frekans aralığını daraltarak yaptığımızda nümerik olarak bulduğumuz  $\epsilon'(\omega)$  bileşenine ait veriler olması gereken gerçek değerlerden uzaklaşmaktadır. Tablo 3.4., 3.5. ve 3.6.'da görüldüğü gibi frekans aralığı küçüldüğü zaman nümerik olarak programdan bulunan  $\epsilon'(\omega)$  değerleri gerçek değerinden daha küçük çıkmaktadır.

Buradan da şu sonuca varabiliriz; frekansın alt limiti çok küçük, üst limiti de çok büyük seçilirse nümerik olarak programdan bulduğumuz değerler gerçek değerlerine en yakın olacaktır.



$\omega\tau$	$\epsilon'(\omega)$ program ile hesaplanan	$\epsilon'(\omega)$ denklemden hesaplanan
5.000000E-02	11.958110	11.975060
1.500000E-01	11.762990	11.779950
2.500000E-01	11.394800	11.411770
3.500000E-01	10.891730	10.908690
4.500000E-01	10.299060	10.316010
5.500000E-01	9.660581	9.677543
6.500000E-01	9.012911	9.029877
1.050000	6.739275	6.756242
1.150000	6.288723	6.305705
204.050000	1.981212	2.000240
204.150000	1.981220	2.000240
204.250000	1.981205	2.000240
204.350000	1.981205	2.000239
204.450000	1.981189	2.000239
204.550000	1.981198	2.000239
204.650000	1.981207	2.000239
374.150000	1.942856	2.000072
374.250000	1.941871	2.000071
374.350000	1.940762	2.000071
374.450000	1.939480	2.000071
374.550000	1.937951	2.000071
374.650000	1.936054	2.000071

Tablo 3.4: Frekans alt ve üst limitleri;  $\omega\tau = 0.05 - \omega\tau = 375$

$\omega\tau$	$\epsilon'(\omega)$ program ile hesaplanan	$\epsilon'(\omega)$ denklemden hesaplanan
5.000000E-02	11.943260	11.975060
1.500000E-01	11.748140	11.779950
2.500000E-01	11.379950	11.411770
3.500000E-01	10.876870	10.908690
4.500000E-01	10.284200	10.316010
5.500000E-01	9.645731	9.677543
6.500000E-01	8.998061	9.029877
7.500000E-01	8.368186	8.400000
8.500000E-01	7.773701	7.805515
9.500000E-01	7.224417	7.256242
1.050000	6.724425	6.756242
1.150000	6.273874	6.305705
1.250000	5.870615	5.902439
--	--	--
105.350000	1.965512	2.000901
105.450000	1.965524	2.000899
105.550000	1.965513	2.000897
105.650000	1.965493	2.000896
105.750000	1.965474	2.000894
105.850000	1.965462	2.000892
--	--	--
199.150000	1.902857	2.000252
199.250000	1.901010	2.000252
199.350000	1.898929	2.000252
199.450000	1.896508	2.000251
199.550000	1.893666	2.000251
199.650000	1.890184	2.000251

Tablo 3.5: Frekans alt ve üst limitleri;  $\omega\tau = 0.05 - \omega\tau = 200$

$\omega\tau$	$\epsilon'(\omega)$ program ile hesaplanan	$\epsilon'(\omega)$ denklemden hesaplanan
5.000000E-02	11.890260	11.975060
1.500000E-01	11.695140	11.779950
2.500000E-01	11.326950	11.411770
3.500000E-01	10.823870	10.908690
4.500000E-01	10.231200	10.316010
5.500000E-01	9.592731	9.677543
6.500000E-01	8.945060	9.029877
7.500000E-01	8.315184	8.400000
8.500000E-01	7.720698	7.805515
9.500000E-01	7.171413	7.256242
1.050000	6.671422	6.756242
1.150000	6.220869	6.305705
1.250000	5.817606	5.902439
1.350000	5.458130	5.542958
1.450000	5.138383	5.223207
-	-	-
43.550000	1.908362	2.005270
43.650000	1.908281	2.005246
43.750000	1.908182	2.005222
43.850000	1.908101	2.005198
43.950000	1.907992	2.005174
44.050000	1.907882	2.005151
-	-	-
74.350000	1.772240	2.001809
74.450000	1.765969	2.001804
74.550000	1.758488	2.001799
74.650000	1.749293	2.001794
74.750000	1.737420	2.001789
74.850000	1.720731	2.001785
74.950000	1.692793	2.001780

Tablo 3.6: Frekans alt ve üst limitleri;  $\omega\tau = 0.05$  -  $\omega\tau = 75$

## ÖZET

Lineer Elektriksel Polarizasyon teorisine göre elektrostatik bir ortamda sabit bir alan aracılığı ile oluşturulan polarizasyon, ona neden olan elektrik alan ile orantılı olup, alan durduğu sürece sistem dengededir.

Elektriksel alan karakteristik zamanın mertebesinde bir periyotla değiştiği zaman, mikroskobik parçacıkların hareketleri denge polarizasyonu oluşturabilmek için yeterince hızlı olamayacaklardır. Dolayısıyla polarizasyonun gerçek değeri, değişen elektrik alanın gerisinde kalacaktır. Bu durumda  $D(t)$  ile  $E(t)$  arasındaki ilişki  $\epsilon'$  ve  $\epsilon''$  gibi iki niceliğin yardımı ile tanımlanır. Burada  $\epsilon'(\omega)$  sinüsoidal olarak değişen bir alan için dielektrik sabitinin genelleştirilmiş şekli olarak farzedilebilir ve frekansa bağlı dielektrik sabiti olarak isimlendirilir.  $D(t)$ 'yi belirleyen diğer nicelik  $\epsilon''(\omega)$  ise  $E(t)$ 'ye göre  $\pi/2$  lik faz farkı olan  $D(t)$  bileşenin genliğinin bir ölçüsüdür ve dielektrik içindeki enerji kaybını belirlediği için enerji yitiği faktörü olarak adlandırılır.

Kompleks dielektrik sabiti  $\epsilon(\omega)$  ile  $\phi(t)$  durulma fonksiyonu arasındaki ilişki

$$\frac{\epsilon(\omega) - \epsilon_\infty}{\epsilon_s - \epsilon_\infty} = \int_0^\infty \exp(-i\omega t) \left[ -\frac{d}{dt} \phi(t) \right] dt$$

denklemini ile verilir. Bu bağıntı yardımıyla, durulma fonksiyonu belirlenen bir polar ortamın  $\epsilon'(\omega)$  ve  $\epsilon''(\omega)$  fonksiyonları doğrudan bulunabilir. Ayrıca  $\epsilon'(\omega)$  veya  $\epsilon''(\omega)$ 'nin birinden biri herhangi bir yolla belirlenebilirse Kramers-Kronik dönüşümleri yardımıyla diğeri bulunabilir. Örneğin lineer pasif bir sistem için eğer tüm frekans değerlerinde sanal bileşen değerlerini biliyorsak reel bileşenleri bulabiliriz veya tüm frekans değerlerinde reel bileşen değerleri biliniyorsa sanal kısmı bulmamızı sağlar. Kramers-Kronik dönüşümleri için nümerik integrasyon metodlarından en etkin olan Maclaurin's formülü üzerinde çalışılmıştır. Kramers-Kronik dönüşümleri için referans olarak seçilen bir fonksiyon kullanılarak fortran dilinde yukardaki nümerik integrasyon formülüne göre bir bilgisayar programı yapılmıştır. Elde edilen sonuçlar nümerik Kramers-Kronik dönüşümü ile analitik yoldan elde edilen verilerin birbiriyle çok iyi uyum içinde olduğunu göstermiştir.

## SUMMARY

The theory of electrical polarization in static fields states that, the polarization caused by the field is proportional to the field and as long as the field is held constant the system is in equilibrium. When the electric field strength varies appreciably within a period of the same order as the characteristic time of relaxation, the motion of the microscopic particles will not be sufficiently rapid to build up the equilibrium polarization, and the actual value of the polarization will, as it were, lag behind the changing electric field. In this case the relationship between  $D(t)$  and  $E(t)$  is described with the help of the two quantities  $\epsilon'$  and  $\epsilon''$ .

Therefore  $\epsilon'(\omega)$  can be considered as the generalization of the dielectric constant for sinusoidally varying fields, it is called the frequency dependent dielectric constant. The other quantity determining  $D(t)$ ,  $\epsilon''(\omega)$ , is a measure of the amplitude of the component of  $D(t)$  with a phase difference of  $\pi/2$  with respect to  $E(t)$ , this component determines the loss of energy in the dielectric. For this reason  $\epsilon''(\omega)$  is called the loss factor.

The relation between the pulse-response function and the complex dielectric constant is given by

$$\frac{\epsilon(\omega) - \epsilon_\infty}{\epsilon_s - \epsilon_\infty} = \int_0^\infty \exp(-i\omega t) \left[ -\frac{d}{dt} \phi(t) \right] dt$$

This can be used to derive relations between  $\epsilon'(\omega)$  and  $\epsilon''(\omega)$ , the so-called Kramers-Kronik relations. The Kramers-Kronik relations enable us to find the real part of the response of a linear passive system if we know the imaginary part of the response at all frequencies, and vice versa.

One of the numerical integration methods, so called Maclaurin's formula which is the most effective method for the Kramers-Kronik transformation is studied. A computer program has been developed in the Fortran language for the Maclaurin's numerical integration formula of the Kramers-Kronik transformation, using the analytical integration of the Lorentzian function as a reference.

The results show that there is a good agreement with the numerical Kramers-Kronig transformation and the analytical result.

## EKLER

EK 1: Kompleks kırılma indisinin Kramers-Kronig dönüşümünü yapan Fortran programı.

```

INTEGER N,I,J,L,K
REAL ADAT,DAT,H
REAL NU,NDAT
DIMENSION ADAT(1001), NU(1001),DAT(1001),NDAT(1001)
NU(1)=1000.
H=2.
DO 8 N=2,1001
    NU(N)=NU(N-1)+2.
8 CONTINUE
DO 10 I=1,1001
    ADAT(I)=(200./((NU(I)-2000)**2.+400.))
    ADAT(I)=ADAT(I)-((200.)/(400.+(2000.+NU(I))**2.))
WRITE(*,*) I,ADAT(I)
10 CONTINUE
C numerical integration using Maclaurin's Formula
DO 12 I=1,1001
    K=MOD(I,2)
    DAT(I)=0.
    IF (K.EQ.0) THEN
        DO 16 J=1,1001,2
            DAT(I)=DAT(I)+ADAT(J)/(NU(J)-NU(I))+ADAT(J)/(NU(J)+NU(I))
16 CONTINUE
        DAT(I)=(2*H/3.14159)*DAT(I)
    ELSE
        DO 14 J=2,1001,2
            DAT(I)=DAT(I)+ADAT(J)/(NU(J)-NU(I))+ADAT(J)/(NU(J)+NU(I))
14 CONTINUE

```

```
DAT(I)=(2*H/3.14159)*DAT(I)
```

```
ENDIF
```

```
12 CONTINUE
```

```
DO 18 L=1,1001
```

```
NDAT(L)=((NU(L)+2000.)*10.)/((NU(L)+2000.）**2.+400.)
```

```
NDAT(L)=NDAT(L)-(((NU(L)-2000.)*10.)/((NU(L)-2000.）**2.+400.))
```

```
WRITE(*,*) L,NU(L),DAT(L),NDAT(L)
```

```
18 CONTINUE
```

```
C
```

```
OPEN(7,FILE='VERI2',ACCESS='SEQUENTIAL',STATUS='NEW')
```

```
DO 20 I=1,1001
```

```
WRITE(7,*) NU(I),DAT(I)
```

```
20 CONTINUE
```

```
END
```

EK 2: Tek zamanlı durulma fonksiyonunun Kramers-Kronig dönüşümünü yapan Fortran programı.

```
INTEGER N,I,J,L,K
```

```
REAL ADAT,DAT,H
```

```
REAL NU,NDAT,LOMEGA
```

```
DIMENSION ADAT(7500), NU(7500),DAT(7500),NDAT(7500),LOMEGA(7500)
```

```
H=0.05
```

```
DO 8 N=1,7500
```

```
NU(N)=0.05*N
```

```
8 CONTINUE
```

```
DO 10 I=1,7500
```

```
ADAT(I)=10.*NU(I)/(1+NU(I)**2)
```

```
WRITE(*,*) I,NU(I),ADAT(I)
```

```

10 CONTINUE
C numerical integration using Maclaurin's Formula
DO 12 I=1,7500
  K=MOD(I,2)
  DAT(I)=0.
  IF (K.EQ.0) THEN
    DO 16 J=1,7500,2
      DAT(I)=DAT(I)+ADAT(J)/(NU(J)-NU(I))+ADAT(J)/(NU(J)+NU(I))
16 CONTINUE
    DAT(I)=2.+(2*H/3.14159)*DAT(I)
  ELSE
    DO 14 J=2,7500,2
      DAT(I)=DAT(I)+ADAT(J)/(NU(J)-NU(I))+ADAT(J)/(NU(J)+NU(I))
14 CONTINUE
    DAT(I)=2.+(2*H/3.14159)*DAT(I)
  ENDIF
12 CONTINUE
DO 18 L=1,7500
  NDAT(L)=2.+(10./(1+NU(L)**2))
  WRITE(*,*) L,NU(L),DAT(L),NDAT(L)
18 CONTINUE
C
DO 22 I=1,7500
  LOMEGA(I)=LOG(NU(I))
22 CONTINUE
OPEN(7,FILE='D2GRAF',ACCESS='SEQUENTIAL',STATUS='NEW')
DO 20 I=1,7500,2
  WRITE(7,*) LOMEGA(I),DAT(I),NDAT(I)
20 CONTINUE
END

```



## KAYNAKLAR

- BERTIE, J.E., ZHANG, S.L. (1992): The Kramers-Kronig Transform and its approximation by the finite Hilbert transform, *Can.J.chem.*, 70. 520-531
- BÖTTCHER, C.J.F., BORDEVIJK, P. (1978): *Theory of Electric Polarization*, Volume 2, Elsevier Publishing, Amsterdam. 1-65.
- JONSCHER, A.K. (1983): *Dielectric Relaxation in Solids*, Chelsea Dielectric Press, London. 13-47.
- KITTEL, C. (1986): *Introduction to Solid State Physics*, Sixth edition, Wiley, New York. 289-317.
- LANDAU, L.D., LIFSHITZ, E.M. (1960): *Electrodynamics of Continuous Media*, Volume 8, Pergamon Press, Oxford. 239-263.
- LOVELL, R. (1974): Application of Kramers-Kronig Relations to the interpretation of dielectric data, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, Vol. 7, 4378-4384.
- MARION, J.B. (1965): *Classical Electromagnetic Radiation*, Academic Press, New York. 7-11.
- OHTA, K., ISHIDA, H. (1988): Comparison Among Several Numerical Integration Methods for Kramers-Kronig Transformation, *Applied Spectroscopy*, Volume 42, 6. 952-957.
- REITZ, J.R., MILFORD, F.J. (1967): *Foundations of Electromagnetic Theory*, Addison-Wesley, London. 68-122.

## TEŐEKKÜR

Çalıőmalarımnda bana yol gösterip bilgisi ve tecrübesiyle yardım eden danışman hocam Prof. Dr. Süleyman BOZDEMİR'e teşekkür ederim.

Ayrıca bilgisayar programlarını yazmada ve grafik çiziminde bana yardımcı olan Y. Doc. Dr. Metin ÖZDEMİR hocama teşekkür ederim.



## ÖZGEÇMİŞ

1966 Adana doğumluyum. İlk, orta ve lise öğrenimimi Adana'da tamamladım. Liseden sonra iki yıl sanayide çalıştıktan sonra 1987 yılında Hacettepe Üniversitesi Fizik Mühendisliği Bölümüne girdim. 1993-94 öğretim yılında Ç.Ü. Fen Bilimleri Enstitüsüne kaydolarak Yüksek Lisans'a, Fizik Bölümünde de Araştırma Görevlisi olarak çalışmaya başladım. Halen bu göreve devam etmekteyim.

