

132400

T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**2 BOYUTLU DOĞRUSAL OLMAYAN FOTONİK KRİSTALLERİN
MODELLENMESİ VE BAND YAPILARININ ELDESİ**

Ahmet ÇİÇEK

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

2006

**2 BOYUTLU DOĐRUSAL OLMAYAN FOTONİK KRİSTALLERİN
MODELLENMESİ VE BAND YAPILARININ ELDESİ**

Ahmet ÇİÇEK

**YÜKSEK LİSANS TEZİ
FİZİK ANABİLİM DALI**

Akdeniz Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Yönetim Birimi tarafından
2005.02.0121.011 no'lu yüksek lisans tez projesi kapsamında desteklenmiştir.

2006

T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

2 BOYUTLU DOĞRUSAL OLMAYAN FOTONİK KRİSTALLERİN
MODELLENMESİ VE BAND YAPILARININ ELDESİ

Ahmet ÇİÇEK

YÜKSEK LİSANS TEZİ

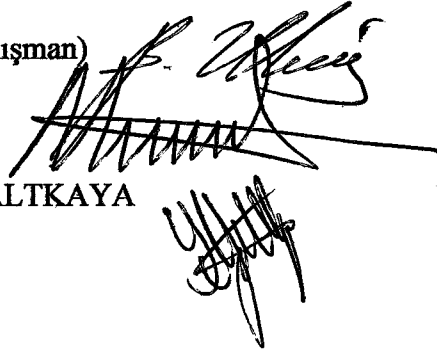
FİZİK ANABİLİM DALI

Bu tez 09/06/2006 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından *Doksan Bes...* (.95...) not takdir edilerek Oy birliği/~~Oy çokluğu~~ ile kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Bülent ULUĞ (Danışman)

Doç. Dr. Mustafa DEMİRCİ

Yard. Doç. Dr. Şerafettin YALTKAYA



ÖZET

2 BOYUTLU DOĞRUSAL OLMAYAN FOTONİK KRİSTALLERİN MODELLENMESİ VE BAND YAPILARININ ELDESİ

Ahmet ÇİÇEK

Yüksek Lisans Tezi, Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Bülent ULUĞ

Mayıs 2006, 106 Sayfa

Bu çalışmada doğrusallıktan Kerr tipi sapma gösteren dielektrik malzemeler içeren kare örgü yapısındaki 2 boyutlu fotonik kristallerin band yapıları elde edilerek, aynı yapıların doğrusal davrandıkları durumda sergiledikleri band yapıları ile karşılaştırılmıştır. Karşılaştırma için gözlenen band aralıklarının konumları ve genişlikleri göz önünde bulundurulmuştur. Doğrusal fotonik kristaller için band yapıları sırasıyla Düzlem Dalga Açılımı (DDA) ve Zamanda Sonlu Farklar (FDTD) yöntemleri ile elde edilmiştir. Doğrusal olmayan fotonik kristallerin band yapılarının eldesinde FDTD yönteminden yararlanılmıştır.

Elde edilen sonuçlar doğrusal fotonik kristaller için her iki yöntem ile elde edilen band yapılarının kendi içlerinde ve eşit sayıda bölümlendirme içeren kafesler için birbirlerine hızla yakınsadığını göstermiştir. Doğrusal olmayan fotonik kristallerin band yapılarının uygulanan elektromanyetik (EM) alanın taşıdığı güç ile değişiminin incelenmesi, band yapısının pozitif Kerr dielektrik duygunluğu için tümüyle daha düşük frekanslara (kırmızıya), buna karşın negatif Kerr duygunluğu için daha yüksek frekanslara (maviye) kaydığını göstermiştir. Bunun yanında, band aralıklarının artan EM alan gücü ile Kerr duygunluğunun işaretine bağlı olarak genişlediği (pozitif) ya da daraldığı (negatif) belirlenmiştir.

ANAHTAR KELİMELER: Fotonik kristal, band yapısı, doğrusallıktan sapma, Kerr tipi malzeme, kırmızıya kayma, maviye kayma, anahtarlama.

JÜRİ: Prof. Dr. Bülent ULUĞ (Danışman)

Doç. Dr. Mustafa DEMİRCİ

Yard. Doç. Dr. Şerafettin YALTKAYA

ABSTRACT

MODELING AND BAND STRUCTURE CALCULATIONS IN 2-DIMENSIONAL NONLINEAR PHOTONIC CRYSTALS

Ahmet ÇİÇEK

Master's Thesis in Physics

Advisor: Prof. Dr. Bülent ULUĞ

May 2006, 106 Pages

In this study, band structures of 2-dimensional square photonic crystals comprising Kerr-type nonlinear dielectric material are calculated and compared to those exhibited by the same structures in linear regime. Position and width of the observed band gaps are taken into account for comparison. Band structures for linear photonic crystals are obtained via the Plane Wave Expansion (PWE) and Finite-Difference Time-Domain (FDTD) methods, respectively. The FDTD method is utilized for band structure calculations of nonlinear photonic crystals.

The obtained results reveal that the band structures obtained through both methods converge rapidly not only within themselves but also to each other for grid configurations composed of the same number of mesh points. Investigations of the modification of the band structures exhibited by nonlinear photonic crystals with the power carried by the applied electromagnetic (EM) field show that the whole band structure shifts towards lower frequencies (redshift) for a positive Kerr dielectric susceptibility, while shifting towards higher frequencies (blueshift) for a negative susceptibility. Besides, depending on the sign of the Kerr susceptibility, broadening (positive) or contraction (negative) of band gaps are determined.

KEY WORDS: Photonic crystal, band structure, nonlinearity, Kerr-type material, redshift, blueshift, switching.

COMMITTEE: Prof. Dr. Bülent ULUĞ (Advisor)

Assoc. Prof. Dr. Mustafa DEMİRCİ

Asst. Prof. Dr. Şerafettin YALTKAYA

ÖNSÖZ

Doğrusal olmayan fotonik kristallerin band yapılarının eldesi ve band yapılarında doğrusal duruma göre gözlenen değişimlerin belirlenmesi, bu yapıların tamamen optik devrelerde kullanımı için öngörülebilir bulunabilmesi için önem taşımaktadır. Doğrusal olmayan 1 ve 2 boyutlu fotonik kristallere ışık şiddeti yeterince yüksek EM dalgalar gönderilerek bu yapıların optik anahtarlama için kullanılabileceği ortaya konmuştur. Benzer olarak, kutuplayıcı aygıtlar gibi uygulamalar da öngörülebilmektedir. Bu çalışmada Kerr tipi dielektrik malzeme içeren 2 boyutlu kare örgü yapısındaki fotonik kristallerin band yapılarının eldesi ve band yapılarında uygulanan elektromanyetik alanın şiddetinin artması ile gözlenen değişikliklerin incelenmesi amaçlanmaktadır.

Bu çalışma, Akdeniz Üniversitesi Bilimsel Araştırma Projeleri Yönetim Fonu tarafından 2005.02.0121.011 numaralı proje ile desteklenmiştir.

Çalışmanın ilerleyişi boyunca beni bilgi, tecrübe ve hoş görüşleri ile yönlendiren ve destekleyen danışmanım Prof. Dr. Bülent ULUĞ'a ve Prof. Dr. Asiye ULUĞ'a, fakültemiz öğretim üyelerinden sayın Doç. Dr. İsmail Tufan'a, ilgili tartışmalara katılarak farklı bakış açıları sunan ve yardımlarını esirgemeyen arkadaşlarım Arş. Grv. Mükremin YILMAZ, İsmail KABAÇELİK ve Arş. Grv. Ali Kılıçık'a teşekkürlerimi sunarım.

Akademik hayata adım attığım ilk yılların zorluklarını aşmam için desteğini hiç esirgemeyen aileme ve temel bilimlere ilgi duymamda en büyük pay sahibi olan, ileri görüşlülüğü ile yolumu aydınlatan Amcam'a şükranlarımı sunarım.

Lise ve üniversite yıllarının heyecanlı ve bazen zor günlerinin ardından akademik yaşamda da fikirlerini benimle paylaşan değerli dostum Aydın Karaman'a teşekkür ederim.

Son olarak, sayın Mevlüt Yılmaz şahsında RSoft Design Group Türkiye distribütörü Martı Ltd. Şti.'ne yardımlarından dolayı teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
ABSTRACT	ii
ÖNSÖZ	iii
İÇİNDEKİLER.....	iv
SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ	vi
ŞEKİLLER DİZİNİ	viii
ÇİZELGELER DİZİNİ.....	xii
1. GİRİŞ.....	1
2. KURAMSAL BİLGİ	3
2.1. Tanımlar	3
2.2. Maxwell Denklemleri.....	7
2.3. Ana Denklem ve Özellikleri	9
2.4. Katı Kristallerin Kuantum Mekaniksel İncelenmesiyle Karşılaştırma	11
2.5. Ölçeklenebilirlik	13
2.6. Simetri Özellikleri	14
2.7. Fotonik Band Yapısı	17
2.8. Doğrusal Olmayan Optik.....	21
2.8.1. İkinci derece doğrusal olmayan kutuplanmadan kaynaklanan etkiler	27
2.8.2. Üçüncü derece doğrusal olmayan kutuplanmadan kaynaklanan etkiler ...	29
2.8.3. İki durumluluk	31
2.9. Doğrusal Olmayan Fotonik Kristaller	32
2.10. Doğrusal Olmayan Fotonik Kristallerin Band Yapıları	35
3. MATERYAL ve YÖNTEM	38
3.1. Giriş	38
3.2. Düzlem Dalga Açılımı Yöntemi	39
3.2.1. Kuramsal bilgi	39
3.2.2. Yöntemin incelenen yapıya uygulanması	43
3.2.3. DDA yönteminin zayıflıkları	46

3.3. Zamanda Sonlu Farklar (FDTD) Yöntemi	47
3.3.1. Temel fikir	47
3.3.2. Diferansiyel denklemlerin sonlu farklarla sayısal çözümü	48
3.3.3. Maxwell denklemlerinin sonlu farklar yöntemiyle yazılması	51
3.3.4. Yee hücresi	53
3.3.5. Zamanda adımlama	54
3.3.6. Kararlılık koşulu	56
3.3.7. Sınır koşulları	58
3.3.9. Yöntemin incelenen yapıya uyarlanması	60
3.3.10. Yöntemin zayıf noktaları	67
4. BULGULAR ve TARTIŞMA	70
4.1. Doğrusal Fotonik Kristal	72
4.1.1. Dielektrik daireler	72
4.1.2. Dairesel hava boşlukları	78
4.2. Doğrusal Olmayan Fotonik Kristal	84
4.1.1. Dielektrik daireler	84
4.1.2. Dairesel hava boşlukları	91
5. SONUÇ	101
6. KAYNAKLAR	102
ÖZGEÇMİŞ	106

SİMGELER ve KISALTMALAR DİZİNİ

Simgeler

B	Manyetik akı yoğunluğu
β_G	Dielektrik fonksiyonunun tersinin Fourier katsayısı
ζ	Kare şeklindeki Yee hücresinin kenar uzunluğu
D	Yer değiştirme alanı
$\vec{\nabla}$	Nabla operatörü
$\vec{\nabla} \cdot$	Diverjans operatörü
$\vec{\nabla} \times$	Dolanım operatörü
Δt	Zamanda adımlama miktarı
$\Delta \omega$	Band aralığı genişliği
E	Elektrik alanı
ϵ_0	Boşluğun dielektrik geçirgenliği
ϵ_r	Malzemenin bağıl dielektrik sabiti
G	Ters örgüde öteleme vektörü
$G/M(\%)$	Band aralığı oranı
H	Manyetik alan
I	Işık şiddeti
$\chi^{(1)}$	Doğrusal dielektrik duygunluk
$\chi^{(2)}$	2. derece doğrusal olmayan dielektrik duygunluk
$\chi^{(3)}$	3. derece doğrusal olmayan dielektrik duygunluk (Kerr duygunluğu)
n_0	Doğrusal kırılma indisi
n_2	Kerr sabiti
n^{NL}	Doğrusal olmayan kırılma indisi
μ_0	Boşluğun manyetik geçirgenliği

$O(x)$	x ile orantılı deęişen terim
P	Elektromanyetik dalganın gücü
P	Elektriksel kutuplanma
R	Örgü öteleme vektörü
ω	Açısal frekans
$\omega_n(k)$	Açısal frekans öz deęeri
$\omega_{n,die}$	n . Band aralığının alt sınırındaki frekans deęeri
$\omega_{n,hava}$	n . Band aralığının üst sınırındaki frekans deęeri
$\omega_{n,orta}$	n . Band aralığının aralık orta frekansı

Kısaltmalar

DDA	Düzlem Dalga Açılımı
EM	Elektromanyetik
FDTD	Zamanda Sonlu Farklar (Finite-Difference Time-Domain)
FFT	Hızlı Fourier Dönüşümü (Fast Fourier Transformation)
PML	Kusursuz Uyuşan Katman (Perfectly-Matched Layer)
TE	Enine Elektriksel
TM	Enine Manyetik
YMK	Yüzey Merkezli Kübik

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. 3 boyutlu örgüde ilkel birim hücre.....	4
Şekil 2.2. (a) Yüzey Merkezli Kübik (YMK) yapı (b) Kristal örgüsünde geleneksel birim hücre ve ilkel birim vektörleri.....	4
Şekil 2.3. (a) Üçgen örgü yapısında dizilmiş dielektrik dairelerden oluşan 2 boyutlu fotonik kristal (b) Bravais örgüsü üzerinde ilkel birim vektörleri ve birim hücre (gri renkli bölge).....	5
Şekil 2.4. Üçgen örgüde Wigner-Seitz ilkel birim hücresi.....	5
Şekil 2.5. Üçgen örgü yapısı için 1. Brillouin bölgesi ve bu bölge içerisindeki indirgenemez Brillouin bölgesi (gri renkli bölge).....	7
Şekil 2.6. Kare örgü yapısının simetri eksenleri ve düzlemleri.....	16
Şekil 2.7. Kare örgütün 1. Brillouin bölgesi.....	17
Şekil 2.8. YMK yapıya sahip üç boyutlu fotonik kristal için 1. Brillouin bölgesi.....	18
Şekil 2.9. YMK yapı oluşturacak şekilde dizilmiş dielektrik kürelerden oluşan fotonik kristalin band yapısı.....	20
Şekil 2.10. Üçgen örgüde dizilmiş dielektrik silindirlere oluşan 2 boyutlu fotonik kristalin TE/TM band yapısı.....	21
Şekil 2.11. Yalıtkan malzemenin uygulanan elektrik alanı ile etkileşimini incelemek için kullanılan yay modeli.....	22
Şekil 2.12. (a) Doğrusal, (b) doğrusallıktan ikinci derece sapma gösteren ve (c) doğrusallıktan 3. derece sapma gösteren bir malzemede kutuplanmanın uygulanan elektrik alanı ile değişimi.....	25
Şekil 2.13. Kerr tipi ortamda kendi kendine odaklanma (Saleh ve Teich 1991).....	30
Şekil 2.14. (a) İki durumlu çalışan bir optik sistem (b) İki durumlu sistemde çıkıştaki ışık şiddetinin giriş şiddetiyle değişimi.....	31
Şekil 2.15. Fabry-Perot interferometresi: iki durumlu çalışma için uygun bir düzenek.....	32

Şekil 2.16. (a) Frekansı fotonik kristalin band aralığında kalan ışığın yansımaları (b) Fotonik kristalde bir sıranın uzaklaştırılmasıyla elde edilen dalga kılavuzunda ışığın ilerlemesi (c) L şeklindeki keskin bükümde ışığın yönünün değiştirilmesi.....	33
Şekil 2.17. L şeklindeki dalga kılavuzuna Kerr tipi birimlerin eklenmesiyle oluşturulan optik kapı.....	34
Şekil 2.18. L kıvrımına doğrusal olmayan birimlerin eklenmesiyle iki durumlu çalışma (Mingaleev ve Kivshar 2002'den alınmıştır).....	34
Şekil 2.19. (a) Boşlukta dizilmiş dielektrik silindirlere, (b) dielektrik malzemede oyulan hava boşluklarından oluşan 2 boyutlu kare örgü yapısındaki fotonik kristaller.....	35
Şekil 2.20. Doğrusal olmayan fotonik kristallerle tümten optik anahtarlama.....	36
Şekil 3.1. Çalışmada ele alınan fotonik kristalin Wigner-Seitz ilkel birim hücresi.....	44
Şekil 3.2. Birim hücrenin kafeslendirilmesinde karşılaşılan sayısal zorluk.....	47
Şekil 3.3. Değişken ekseninin merkezi sonlu farklar için bölümlendirilmesi.....	50
Şekil 3.4. Maxwell dolanım denklemlerinin merkezi sonlu farklarla yazılması için kullanılan kafes.....	52
Şekil 3.5. FDTD yönteminin yapıtaşısı olan Yee hücresi.....	54
Şekil 3.6. Sek sek algoritmasının 1 boyutlu sistemin EM alan çözümlerinin bulunmasında uygulanması.....	55
Şekil 3.7. PML sınır koşulunun 2 boyutlu bir problemde TM kipi için FDTD simülasyonunda kullanılması (Taflove ve Hagness 2000).....	59
Şekil 3.8. İncelenen yapının FDTD band yapısı hesabında periyodik sınır koşulunun TM alan kipi için uygulanması.....	60
Şekil 3.9. 2 boyutlu fotonik kristal için seçilen Yee hücreleri ve TM çözümler için bu hücreler üzerine yerleştirilen alan bileşenleri.....	61
Şekil 3.10. FDTD yöntemi ile 2 boyutlu fotonik kristalin band yapısının eldesinde kullanılan düzenek.....	64
Şekil 3.11. (a) 2 boyutlu fotonik kristalin FDTD band yapısı TM kipi için hesabında $ E_z ^2$ değerinin zamanla değişimi (b) Değişim verilerine FFT uygulanmasıyla elde edilen frekans öz değerleri.....	66

Şekil 3.12. İncelenen iki boyutlu fotonik kristal için FDTD band yapısı hesabının akış şeması.....	69
Şekil 4.1. (a) Dielektrik daireler ve (b) dairesel hava boşlukları için yapılan hesaplamalarda temel alınan geometri ve fiziksel parametreler.....	72
Şekil 4.2. Dielektrik daireler için DDA ve FDTD yöntemleri ile hesaplanan TM band yapısı ($\zeta = 2^{-7} \mu m$).....	72
Şekil 4.3. Dielektrik daireler için DDA ve FDTD yöntemleri ile hesaplanan TE band yapısı ($\zeta = 2^{-7} \mu m$).....	73
Şekil 4.4. Dielektrik daireler için DDA yöntemi ile hesaplanan TE ve TM band yapılarının birlikte gösterimi ($\zeta = 2^{-7} \mu m$).....	74
Şekil 4.5. Dielektrik daireler için TM band yapısının eldesinde kullanılan DDA ve FDTD hesaplamalarının yakınsama davranışı.....	75
Şekil 4.6. Dielektrik daireler için TE band yapısının eldesinde kullanılan DDA ve FDTD hesaplamalarının yakınsama davranışı.....	76
Şekil 4.7. Dairesel hava boşlukları için DDA ve FDTD yöntemleri ile hesaplanan TM band yapısı ($\zeta = 2^{-7} \mu m$).....	79
Şekil 4.8. Dairesel hava boşlukları için DDA ve FDTD yöntemleri ile hesaplanan TE band yapısı ($\zeta = 2^{-7} \mu m$).....	80
Şekil 4.9. Dairesel hava boşlukları için DDA yöntemi ile hesaplanan TE ve TM band yapılarının birlikte gösterimi ($\zeta = 2^{-7} \mu m$).....	80
Şekil 4.10. Dairesel hava boşlukları için TM band yapısının eldesinde kullanılan DDA ve FDTD hesaplamalarının yakınsama davranışı.....	81
Şekil 4.11. Hava boşlukları için TE band yapısının eldesinde kullanılan DDA ve FDTD hesaplamalarının yakınsama davranışı.....	82
Şekil 4.12. Dielektrik daireler için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarında aralık orta frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi.....	85
Şekil 4.13. Dielektrik daireler için belirlenen TM ve TE band aralıklarının örtüşme bölgesinde aralık orta frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi.....	86
Şekil 4.14. Dielektrik daireler için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarında band kenarı frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi.....	88

Şekil 4.15. Dielektrik daireler için belirlenen TM ve TE band aralıklarının örtüşme bölgesinde band kenarı frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi.....	89
Şekil 4.16. Dielektrik daireler için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarının genişliğinin EM dalga gücü ile değişimi.....	90
Şekil 4.17. Dielektrik daireler için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarında band aralığı oranlarının EM dalga gücü ile değişimi.....	91
Şekil 4.18. Dairesel hava boşlukları için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarında aralık orta frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi.....	92
Şekil 4.19. Dairesel hava boşlukları için belirlenen TM ve TE band aralıklarının örtüşme bölgesinde aralık ortası frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi.....	93
Şekil 4.20. Hava boşlukları için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarında band kenarı frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi.....	94
Şekil 4.21. Dairesel hava boşlukları için belirlenen TM ve TE band aralıklarının örtüşme bölgesinde band kenarı frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi.....	95
Şekil 4.22. Dairesel hava boşlukları için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarının genişliğinin EM dalga gücü ile değişimi.....	96
Şekil 4.23. Dairesel boşlukları için belirlenen TM ve TE band aralıklarının örtüşme bölgesinin genişliğinin EM dalga gücü ile değişimi.....	97
Şekil 4.24. Dairesel hava boşlukları için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarında band aralığı oranlarının EM dalga gücü ile değişimi.....	98
Şekil 4.25. Hava boşlukları için belirlenen TM ve TE band aralıklarının örtüşme bölgesinde band aralığı oranlarının EM dalga gücü ile değişimi.....	99
Şekil 4.26. Dairesel hava boşlukları için belirlenen aralık orta frekanslarının EM dalga gücü ile değişim verilerine uydurulan $f(P) = aP/(b + P)$ biçimindeki eğriler.....	100

ÇİZELGELER DİZİNİ

- Çizelge 2.1.** Kristallerin kuantum mekaniksel ve fotonik kristallerin EM incelenmeleri arasında karşılaştırmalar (Joannopoulos vd 1995)13
- Çizelge 4.1.** Dielektrik daireler için DDA ve FDTD yöntemleri ile elde edilen TE ve TM band yapılarında band aralıklarına ait sayısal değerlerin karşılaştırması77
- Çizelge 4.2.** Dielektrik daireler için DDA ve FDTD yöntemleri ile belirlenen band aralıklarında aralık orta frekanslarının yakınsama davranışı.....77
- Çizelge 4.3.** Dielektrik daireler için FDTD yöntemi ile belirlenen band aralıklarında aralık orta frekanslarının DDA ile elde edilen sonuçlara yakınsaması78
- Çizelge 4.4.** Hava boşlukları için DDA ve FDTD yöntemleri ile elde edilen TE ve TM band yapılarında band aralıklarına ait sayısal değerlerin karşılaştırılması83
- Çizelge 4.5.** Hava boşlukları için DDA ve FDTD yöntemleri ile belirlenen band aralıklarında aralık orta frekanslarının yakınsama davranışı83
- Çizelge 4.6.** Hava boşlukları için FDTD yöntemi ile belirlenen band aralıklarında aralık orta frekanslarının DDA ile elde edilen sonuçlara yakınsaması83

1. GİRİŞ

Kristal yapılı katılar içerisinde elektronun hareketini betimleyen Schrödinger denkleminin periyodik potansiyel için çözümüne yönelik Düzlem Dalga Açılımı (DDA) ve Sıkı Bağlanma gibi yöntemler katıların elektronik band yapısının eldesinde yaygın kullanılmaktadır (Ashcroft ve Mermin 1976). Bu yöntemler ile elektron dalga fonksiyonunun ilerleyen dalga çözümlerinin bulunmadığı band aralıkları belirlenebilmekte, elde edilen bilgi sayesinde farklı elektronik aygıtlar tasarlanabilmektedir.

Kırılma indisi 1 boyutta periyodik değişen dielektrik yapılarda dielektrik sabitinin ve geometrik parametrelerin uygun seçimi ile dik gelen ışık demetinin belirli dalga boyları için yüksek yansıtıcılık sağlanabileceği çok önceden biliniyordu. Ancak, bu bilginin 3 boyutlu yapılara genellenmesi için 1987 yılına kadar beklemek gerekmiştir. E. Yablonovitch (1987) ve S. John (1987) aynı dönemde yaptıkları çalışmalar ile fotonik kristal araştırmalarının öncüsü olmuşlardır. E. Yablonovitch, dielektrik sabiti periyodik değişen ortamda, katı kristalde elektronun karşılaştığı duruma benzer olarak, fotonlar için band aralıkları bulunabileceği ve band aralığında kalan açısız frekansa sahip EM dalgalar için kendiliğinden ışımının azaltılabileceği, böylece çok düşük eşik değerine sahip lazer gibi uygulamalar ön görülebileceği, düşüncesinden hareket etmiştir. Fotonik kristal terimini ilk kullanan da Yablonovitch olmuştur (Yablonovitch 1987, Yablonovitch 1991). S. John ise, kusursuz periyodik dielektrik sabiti değişimine düzensizliklerin veya kusurların katılmasıyla band aralığı içerisinde yerleşmiş “kusur durumları” oluşacağını ön görmüştür (John 1987).

Fotonik kristallerin band yapılarının eldesi için yöntem geliştirilmesi çok uzun sürmemiş, elektromanyetik alan çözümlerinin ve yapının dielektrik sabitinin Fourier serisine açılmasını ön gören Düzlem Dalga Açılımı (DDA) yöntemi ortaya çıkmıştır (Ho vd 1990). Bu yöntem, elektromanyetik alanın vektörel doğasını da göz önüne almasıyla Maxwell denklemlerinden türetilen dalga denkleminin çözümü için en uygun aday olmuştur. Yöntem günümüzde, basit geometriye sahip, doğrusal, eş yönlü, dağıtmayan, kayıpsız yapılar için yaygın kullanılmaktadır (RSoft 2005a).

DDA yönteminin doğrusal olmayan, kayıplı, eş yönlü olmayan yapılara uygulanamaması bu tür yapılar için alternatif yöntem arayışına gidilmesine neden olmuş, bu sırada neredeyse 30 yıldır bilinen Zamanda Sonlu Farklar (Finite-Difference Time-Domain, FDTD) yönteminin (Yee 1966) kullanılabileceği düşünülmüştür (Chan vd 1995). Yöntem Maxwell denklemlerinin zamanda doğrudan çözümünü içerdiğinden fotonik band yapısı hesaplamalarına uyarlanması zor olmamıştır.

Doğrusal olmayan fotonik kristaller için FDTD'ye dayalı hesaplama yöntemleri geliştirilmiş ve fotonik kristalin band yapısında doğrusal duruma göre farklılıklar incelenmiştir (Tran 1995, Maksymov vd 2004). Band yapısının uygulanan EM alanın şiddeti ile dinamik olarak değiştirilebileceğinin belirlenmesi ile optik anahtarlama gibi çeşitli uygulamalar ön görülmüştür (Huttunen ve Törmä 2001). Ayrıca, tamamen optik devrelerin yapıtaşlarını oluşturması beklenen devre elemanları için doğrusal olmayan malzemeler içeren çeşitli tasarımlar yapılmıştır (Mingaleev ve Kivshar 2004).

Bu çalışmada, 2 boyutlu kare örgü yapısındaki Kerr tipi doğrusal olmayan fotonik kristallerin band yapıları elde edilerek doğrusal fotonik kristal için elde edilen sonuçlarla karşılaştırılacaktır. Karşılaştırma sonucunda band yapısının EM alanın şiddetinin, doğrusallıktan sapmanın, artmasıyla dinamik değişimi incelenecektir. Karşılaştırmada band aralıklarının konum ve genişlikleri göz önünde bulundurulacaktır.

2. KURAMSAL BİLGİ

2.1. Tanımlar

Elektronun kristal içerisindeki hareketi periyodik dizilerek katıyı oluşturan atomların/moleküllerin oluşturduğu potansiyel dağılımını içeren Schrödinger denkleminin çözümü ile incelenebilir. Benzer şekilde, dielektrik sabiti periyodik değişen bir ortam (fotonik kristal) üzerine düşen elektromanyetik (EM) dalganın ortam içerisindeki hareketi Maxwell denklemlerinin periyodik dielektrik fonksiyonu için çözümü ile incelenir.

Katı kristallerle fotonik kristaller arasındaki bu benzerlik, katı fizikinde yaygın kullanılan kavramların ve tanımların fotonik kristaller için de uygulanabileceğini akla getirmektedir. İlerleyen bölümlerde, benzerliğin yalnızca yapı tanımı ile kalmayıp katı ve fotonik kristalleri betimleyen diferansiyel denklemler ve bu denklemlerin çözümlerini de kapsadığı görülecektir.

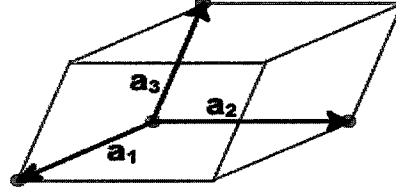
“Baz” terimi, kristalin yapı taşı olan kendini tekrarlayan birimlerini tanımlar. Örneğin, katı kristalin bazında atom veya atom grupları (molekül) bulunabilir. Bazı oluşturan birimlerin matematiksel soyutlamaya gidilerek uzayda bir nokta ile tanımlanmasıyla kristal “örgüsü” oluşturulur. Kristal örgüsü ile bazın bileşimi kristalin fiziksel yapısını oluşturur.

Bir kristali tanımlayan temel kavram “Bravais örgüsü”dür ve üzerindeki hangi noktadan bakılırsa bakılsın aynı düzende ve yönelimde görünen sonsuz sayıda noktadan oluşan küme olarak tanımlanır. Bravais örgüsü bir başka deyişle \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 ve \mathbf{a}_3 “ilkel birim vektörleri” ve n_1 , n_2 ve n_3 tamsayılar olmak üzere,

$$\mathbf{R} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3 \quad (2.1)$$

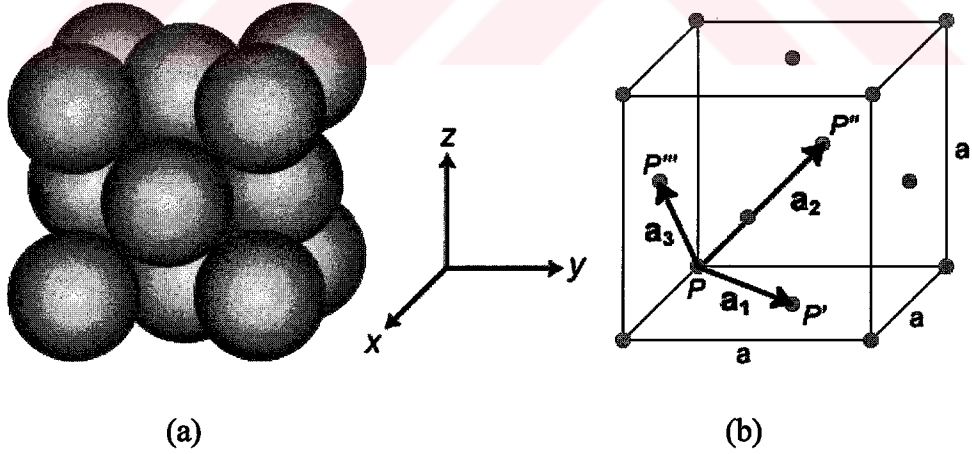
“öteleme vektörleri” ile tanımlı tüm noktaların oluşturduğu kümedir (Ashcroft ve Mermin 1976).

İlkel birim vektörleri ile tanımlanan 3 boyutlu bölge “ilkel birim hücre” olarak adlandırılır ve öteleme vektörleri ile tüm uzayı kapsar. İlkel birim hücre, en küçük hacimli “birim hücre”dir ve tam olarak bir “atom” içerir. Şekil 2.1’de görüldüğü gibi, ilkel birim vektörleri ile tanımlanan birim hücrenin hacmi $V = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$ ’tür.



Şekil 2.1. 3 boyutlu örgüde ilkel birim hücre

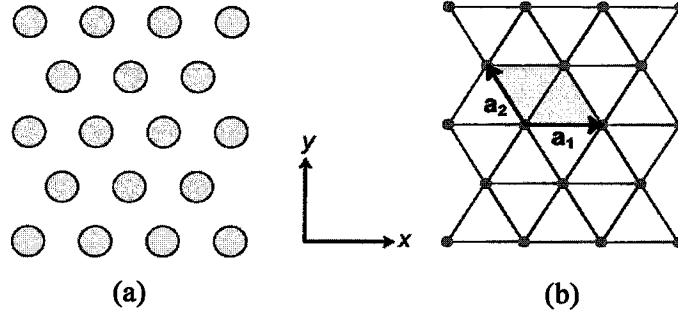
3 boyutlu Bravais örgülerinden biri olan *Yüzey Merkezli Kübik* (YMK) yapı Şekil 2.2’de görülmektedir. Şekil 2.2a’da küre ile temsil edilen yapı taşları katı kristalde atomlara ve fotonik kristalde yalıtkan kürelere karşılık gelebilirler. YMK yapının “geleneksel” birim hücresi ve ilkel birim vektörleri Şekil 2.2b’de gösterilmiştir.



Şekil 2.2. (a) Yüzey Merkezli Kübik (YMK) yapı (b) Kristal örgüsünde geleneksel birim hücre ve ilkel birim vektörleri

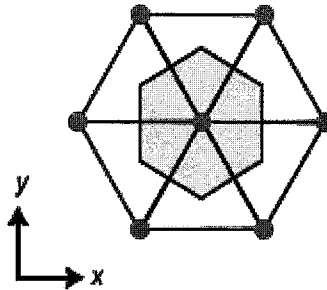
Yukarıda bahsedilen her üç boyutta periyodiklik gösteren yapıların yanı sıra, iki ya da bir boyutta periyodik dizilişe sahip, diğer bir ya da iki boyutta türdeş yapılar da

mevcuttur. Şekil 2.3'te xy düzlemindeki kesitleri üçgen örgüde dizilmiş dielektrik dairelerden oluşan 2 boyutlu fotonik kristal ve bu kristalin Bravais örgüsü üzerinde ilkel birim vektörlerince tanımlanan ilkel birim hücresi görülmektedir.



Şekil 2.3. (a) Üçgen örgü yapısında dizilmiş dielektrik dairelerden oluşan 2 boyutlu fotonik kristal (b) Bravais örgüsü üzerinde ilkel birim vektörleri ve birim hücre (gri renkli bölge)

İlkel birim hücrenin oluşturulması için bir başka yöntem, bir örgü noktasını en yakın komşularına birleştiren doğruların orta dikmelerinin tanımladığı kapalı hacmi/bölgeyi belirlemektir. Bu yöntemle belirlenen birim hücre “Wigner-Seitz” birim hücresidir ve (merkezinde) bir örgü noktası içerir. Şekil 2.4'te 2 boyutlu üçgen örgüde Wigner-Seitz hücresi (gri renkli altıgen) görülmektedir:



Şekil 2.4. Üçgen örgüde Wigner-Seitz ilkel birim hücresi

Katı kristallerde olduğu gibi fotonik kristallerin analitik incelenmesi ve fiziksel özelliklerinin belirlenmesi için Fourier kuramından yararlanılarak, yapıda EM alanın

normal kipleri $e^{k \cdot r}$ biçimindeki düzlem dalgaların doğrusal bileşimi olarak yazılabilir. Bunun için, Fourier uzayında Bravais örgüsüne karşılık gelen örgünün ve bu örgü üzerinde ilkel birim vektörler ile hücrelerin tanımlanması gerekir.

Fourier uzayında her Bravais örgüsüne karşılık gelen bir “ters örgü” tanımlanabilir ve bu ters örgünün kendisi de bir Bravais örgüsüdür. Ters örgüde ilkel birim vektörler \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 ve \mathbf{b}_3 ile gösterilirse bunlar ile kristal örgü vektörleri arasında;

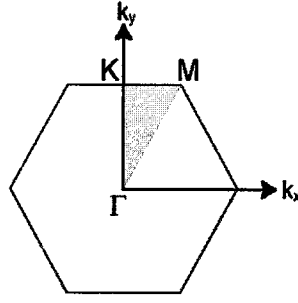
$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{i,j} ; \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (2.2)$$

ilişkisi vardır. Bunun yanında, ters örgüde ilkel birim vektörleri ile ötelemeleri temsil eden “ters örgü vektörleri”,

$$\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3 ; \quad h, k, l \in Z \quad (2.3)$$

olarak tanımlanır. \mathbf{R} bir öteleme vektörü olmak üzere, \mathbf{G} vektörleri ile bu vektörler arasında $e^{i\mathbf{G} \cdot \mathbf{R}} = 1$ ilişkisi vardır.

Ters örgüde Wigner-Seitz hücresine “1. Brillouin bölgesi” adı verilir ve kristal örgüsünde olduğu gibi Fourier uzayında en küçük hacimli birim hücredir. 1. Brillouin bölgesi dışındaki tüm noktalar, 1. Brillouin bölgesi içerisindeki bir nokta ile eşdeğerdir ve bu yüzden, bir fotonik kristalin fiziksel özelliklerinin belirlenmesi için yalnızca 1. Brillouin bölgesi içerisindeki noktalarda işlem yapılması yeterlidir. Şekil 2.5’te üçgen örgü için 1. Brillouin bölgesi görülmektedir. Şekilde gri renkle gösterilen üçgensel bölge “indirgenemez Brillouin bölgesi” olarak adlandırılır ve kristalin sahip olduğu simetri özellikleri kullanılarak 1. Brillouin bölgesinin tamamını tarar. İndirgenemez Brillouin bölgesinin köşelerindeki Γ , K ve M ile gösterilen noktalar da yüksek simetri noktalarıdır.



Şekil 2.5. Üçgen örgü yapısı için 1. Brillouin bölgesi ve bu bölge içerisindeki indirgenemez Brillouin bölgesi (gri renkli bölge)

2.2. Maxwell Denklemleri

EM alanın bir ortam içerisindeki hareketini ifade eden temel denklemler Maxwell denklemleridir ve fotonik kristallerde EM dalga çözümlerinin bulunabilmesi için bu denklemlerin çözülmesi gerekir. Serbest yük ve akım yoğunluğunun bulunmadığı ($\rho = 0$, $\mathbf{J} = 0$) doğrusal, eş yönlü, dağıtmayan (dispersiyonsuz), kayıpsız ve manyetik olmayan ($\mu(\mathbf{r}) = \mu_0$) bir ortamda makroskopik Maxwell denklemleri SI birim sisteminde;

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{D} = 0 \quad (2.4-a)$$

$$\vec{\nabla} \cdot \mathbf{B} = 0 \quad (2.4-b)$$

$$\vec{\nabla} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (2.4-c)$$

$$\vec{\nabla} \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (2.4-d)$$

şeklinde yazılırlar. İlk iki eşitlik, sırasıyla, yer değiştirme alanı ve manyetik alan için Gauss yasaları olarak adlandırılır. Son iki eşitlik de, sırasıyla, Faraday ve Ampere yasaları olarak bilinirler. Sözü edilen ortam için yer değiştirme alanı, \mathbf{D} , ile elektrik alan, \mathbf{E} , ve manyetik alan, \mathbf{H} , ile manyetik akı yoğunluğu, \mathbf{B} , arasındaki “kurucu ilişki”ler de;

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r})\varepsilon_0\mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (2.5-a)$$

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}) = 1/\mu_0\mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad (2.5-b)$$

eşitlikleri ile verilir. Eş. 2.5-a'da tanımlanan bağıl dielektrik sabiti, $\varepsilon(\mathbf{r})$, yapının elektriksel özelliklerini belirleyen temel bir nicelik olup, birimsizdir. Bu nicelik ilerleyen bölümlerde kısaca “dielektrik sabiti” olarak adlandırılacaktır.

Fotonik kristallerde dielektrik sabiti kristal örgüsünün periyodikliğine sahiptir. \mathbf{r} herhangi bir konum vektörü ve \mathbf{R} de Eş. 2.1'de tanımlanan öteleme vektörü olmak üzere,

$$\varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \varepsilon(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

özelliğine sahiptir. Bu nedenle, fotonik kristalde makroskopik Maxwell denklemleri kristalin dielektrik sabiti için çözümlenmelidir. Maxwell denklemleri Eş. 2.6'da verilen dielektrik sabiti için analitik veya sayısal yöntemlerle doğrudan çözülebileceği gibi, bu denklemlerden türetilen ikincil denklemler çözümlenerek de yapı için ilerleyen dalga çözümlerine ulaşılabilir.

Fotonik kristalde Maxwell denklemleri için zamanda harmonik çözümleri bulunmak istendiğinde, alan bileşenlerinin zamana $e^{-i\omega t}$ şeklinde bağlı çözümler aranmalıdır. Faraday (Eş 2.4-c) ve Ampere (Eş. 2.4-d) yasaları zamanda harmonik çözümler için,

$$\vec{\nabla} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) - i\omega\mu_0\mathbf{H}(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.7)$$

$$\vec{\nabla} \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) + i\omega\mathbf{D}(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.8)$$

şeklini alır. Ampere yasasında Eş. 2.5-a'da tanımlanan kurucu ilişkinin kullanılması ve eşitliğin sol tarafına dolanım ($\vec{\nabla} \times$) operatörünün soldan uygulanmasıyla Eş. 2.8'den,

$$\vec{\nabla} \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right] + i\omega\varepsilon_0 \vec{\nabla} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.9)$$

elde edilir. Eş. 2.7'nin de kullanılması ile,

$$\vec{\nabla} \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (2.10)$$

ifadesine ulaşılır. Bu ifade, “ana denklem” olarak da bilinmektedir. Ana denklem incelendiğinde bir “öz değer” denklemi olduğu görülür. Eşitliğin sol tarafındaki

$$\Theta = \vec{\nabla} \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \times \right] \text{ operatörünün } \mathbf{H}(\mathbf{r}) \text{ öz fonksiyonlarına etkimesinden } \omega^2 / c^2$$

öz değerleri elde edilmektedir. Tanımlanan Θ operatörü “hermisyen”dir ve bu nedenle öz değerleri gerçeldir. Operatörün hermisyen olduğu Bölüm 2.3'te gösterilecektir.

Yukarıda anlatılan yöntem Faraday yasasına uygulanırsa elektrik alan için,

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \times \left[\vec{\nabla} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}) \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{E}(\mathbf{r}) \quad (2.11)$$

elde edilir. Yukarıda tanımlanan Θ operatörünün aksine, Eş. 2.11'de tanımlanan

$$\Xi = \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \times \left[\vec{\nabla} \times \right] \text{ operatörü hermisyen değildir. Eş. 2.11 yerine Eş. 2.10'un ana}$$

denklem olarak adlandırılmasının nedeni budur.

2.3. Ana Denklem ve Özellikleri

$\mathbf{A}(\mathbf{r})$ ve $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ herhangi iki vektörel alan olmak üzere bu iki alanın iç çarpımı,

$$(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \int d^3\mathbf{r} \mathbf{A}^*(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) \quad (2.12)$$

eşitliği ile tanımlanır. Ω ile gösterilen bir operatörün hermisyen olması,

$$(\mathbf{A}, \Omega \mathbf{B}) = (\Omega \mathbf{A}, \mathbf{B}) \quad (2.13)$$

koşuluna bağlıdır. Eş. 2.10'da tanımlanan Θ operatörü için yukarıdaki koşul denendiğinde,

$$\begin{aligned} (\mathbf{A}, \Theta \mathbf{B}) &= \int d^3 \mathbf{r} \mathbf{A}^*(\mathbf{r}) \cdot \vec{\nabla} \times \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) \right] \\ &= \int d^3 \mathbf{r} \left[\vec{\nabla} \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right]^* \cdot \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) \right] \\ &= \int d^3 \mathbf{r} \left(\vec{\nabla} \times \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right] \right)^* \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) = (\Theta \mathbf{A}, \mathbf{B}) \end{aligned} \quad (2.14)$$

olduğu görülür. Buna karşın, Eş. 2.13'te tanımlanan koşulun Eş. 2.11'deki Ξ operatörüne uygulanmasıyla bu operatörün hermisyen olmadığı görülebilir. Θ operatörünün öz değerlerinin gerçel olduğu aşağıdaki gibi gösterilebilir:

$$\begin{aligned} (\mathbf{H}, \Theta \mathbf{H}) &= (\Theta \mathbf{H}, \mathbf{H}) \\ \omega^2 (\mathbf{H}, \mathbf{H}) &= \omega^{2*} (\mathbf{H}, \mathbf{H}) \\ \Rightarrow \omega^2 &= \omega^{2*} \end{aligned} \quad (2.15)$$

Bu nedenle, hermisyen Θ operatörünü içeren ana denklem, Eş. 2.10, bir öz değer denklemi olup,

$$\Theta \mathbf{H}(\mathbf{r}) = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}(\mathbf{r}) \quad (2.16)$$

şeklinde ifade edilebilir. Fotonik kristal için bu öz değer denkleminin “öz kipleri” olan $\mathbf{H}(\mathbf{r})$ fonksiyonlarının ve ω^2 öz değerlerinin bulunmasıyla EM alanın yapı içerisindeki hareketi incelenebilir. Eş. 2.16 için düzlem dalga, $\sim e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$, çözüm önerisi ile başlanıp her bir \mathbf{k} dalga vektörüne karşılık gelen açısal frekans, $\omega_n(\mathbf{k})$, değerlerinin belirlenmesiyle fotonik kristalin “band yapısı” elde edilebilir. Bu yöntem, *Düzlem*

Dalga Açılımı (DDA) yöntemi olarak adlandırılır ve 3. Bölümde ayrıntılı olarak incelenecektir (Ho vd 1990).

2.4. Katı Kristallerin Kuantum Mekaniksel İncelenmesiyle Karşılaştırma

Uzayda periyodik bir dielektrik sabiti, $\epsilon(\mathbf{r})$, ile tanımlanan fotonik kristaller için EM alan çözümlerinin bulunması Eş. 2.10'da verilen ana denklemin çözümüne bağlıdır. Önceki bölümde, ana denklemin hermiyen Θ operatörünü içeren bir öz değer denklemi olduğu ortaya konmuştu. Bölüm 2.1'de ise, periyodik potansiyel altında, $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r})$, hareket eden elektronun incelenmesinde verilen potansiyel dağılımı için tek parçacıklı, zamandan bağımsız Schrödinger denkleminin çözülmesi gerektiği belirtilmişti:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$
$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r})$$

Eşitlikteki \hat{H} hamiltonyen operatörü hermiyendir ve bu yüzden öz değerleri, E , gerçeldir.

Görüldüğü gibi, farklı iki fiziksel niceliğin betimlenmesinde ortak özelliklere sahip iki farklı diferansiyel denklemin çözülmesi gerekmektedir. Bu yüzden, katı kristalde elektron ve fotonik kristalde EM dalga hareketinin incelenmesi ortak matematiksel temellere dayanmaktadır.

Her iki örgünün benzerliği ve Schrödinger denklemi ile ana denklem arasındaki benzerlik, bu iki denklemin öz fonksiyonlarının benzerliğini de getirmektedir. Her iki ortamın da periyodiklik özelliğine sahip olması nedeniyle katı ve fotonik kristal için çözümler "Bloch fonksiyonları" şeklinde olmalıdır.

Fotonik ve katı kristaller arasındaki pek çok benzerliğe rağmen, iki problemin en önemli farkı fotonik kristalde öz fonksiyonların vektörel olmasına karşın, katı kristalde

skaler olmasıdır. Bu nedenle, fotonik kristaller için ana denklem çözülürken EM alanın vektörel doğasının göz önünde bulundurulması gerekir. Ayrıca, fotonik kristalde çözümler incelenirken EM dalgaların eninelik koşulları (Eş. 2.4-a ve b) da göz önünde bulundurulmalı ve “boyuna” dalgalara karşılık gelen çözümler ayıklanmalıdır.

Katı kristalde periyodik $V(\mathbf{r})$ potansiyeli için yazılan Schrödinger denklemi, içerisinde temel bir uzunluk ölçeğini barındırmaktadır: atomların “Bohr yarıçapı”. Denklem bu nedenle ölçeklenebilir değildir. a_1 , a_2 ve a_3 örgü sabitlerine sahip bir yapı için yazılan denklemin çözümlerinden, bütün boyutlar sabit bir s uzunluğuyla ölçeklendiğinde oluşan yapının ($a_1' = sa_1$, $a_2' = sa_2$, $a_3' = sa_3$) çözümlerinin elde edilmesi mümkün değildir. Buna karşın, fotonik kristali betimleyen ana denklem herhangi bir temel uzunluk birimi içermediğinden ölçeklenebilirdir ve böyle olduğu Bölüm 2.5’te gösterilecektir. Ana denklemin ölçeklenebilir olması beraberinde, belirli örgü sabitleri için bulunan çözümlerden ve belirlenen öz değerlerden tüm örgü sabitlerinin aynı oranda değiştirilmesi ile elde edilen yeni örgü için çözümlerin ve öz değerlerin eldesini getirmektedir. Uygulamada EM spektrumun küçük dalga boylarındaki bileşenleri için fotonik kristal yapımı karmaşık ve pahalı teknikler gerektirmektedir. Buna rağmen, tasarlanan bir yapının optik özellikleri ölçeklenebilirlik sayesinde deneyleri mm, hatta cm, ölçeğinde özdeş örgü yapısına sahip fotonik kristaller ile yürüterek tahmin edilebilir.

Katı kristallerin kuantum mekaniksel incelenmesi ile fotonik kristallerin elektromanyetik incelenmesi arasındaki bazı önemli benzerlikler ve farklılıklar Çizelge 2.1’de sıralanmıştır:

Çizelge 2.1. Kristallerin kuantum mekaniksel ve fotonik kristallerin EM incelenmeleri arasında karşılaştırmalar (Joannopoulos vd 1995)

Özellik	Elektronik Yapının Kuantum Mekaniksel İncelenmesi	Fotonik Kristalin Elektromanyetik İncelenmesi
<i>Yapı hakkında tüm bilgiyi içeren fonksiyon</i>	$\Psi(\mathbf{r}, t)$, Skaler	$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$, Vektörel
<i>Sistemin normal kiplerini belirleyen esas denklem</i>	$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_E(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}) = E \Psi_E(\mathbf{r})$	$\vec{\nabla} \times \left[\frac{1}{\epsilon(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \times \mathbf{H}_\omega(\mathbf{r}) \right] = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}_\omega(\mathbf{r})$
<i>Operatör</i>	Hamiltonyen; doğrusal ve hermisyen	Θ ; doğrusal ve hermisyen
<i>Çözümler üzerindeki koşullar</i>	$\Psi(\mathbf{r}, t)$ dalga fonksiyonu normalize edilebilir olmalıdır.	$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t)$ normalize edilebilir ve enine ($\vec{\nabla} \cdot \mathbf{H} = 0$) olmalıdır.
<i>Periyodikliği yansıtan fiziksel nicelik</i>	Potansiyel $V(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V(\mathbf{r}), \quad \forall \mathbf{R}$	Dielektrik sabiti $\epsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = \epsilon(\mathbf{r}), \quad \forall \mathbf{R}$
<i>Çözümlerin biçimi</i>	Bloch fonksiyonu	Bloch fonksiyonu
<i>Normal kipler arasında etkileşim</i>	Var (elektron-elektron itici etkileşimi)	Yok (doğrusal yapı için)
<i>Temel uzunluk birimi</i>	Bohr yarıçapı	Yok
<i>Ölçeklenebilirlik</i>	Hayır	Evet
<i>Band yapısının fiziksel temeli</i>	Elektronun farklı potansiyel bölgelerinden uyumlu saçılmaları	EM dalganın farklı dielektrik bölgelerinin ara yüzünden uyumlu yansımaları

2.5. Ölçeklenebilirlik

a_1 , a_2 ve a_3 örgü sabitlerine sahip bir fotonik kristalde bütün boyutların sabit s uzunluğuyla ölçeklendirilerek yapının sıkıştırılması ($s < 1$) veya genişletilmesi ($s > 1$) durumunda elde edilecek normal kiplerin ve öz değerlerin yapının orijinal durumunda elde edilenlerle karşılaştırılması için Eş. 2.10'da verilen ana denklemde konumların, dielektrik sabitinin ve dolanım operatörünün yeni ölçekte yazılması gerekir:

$$\begin{aligned}
\mathbf{r}' &= s\mathbf{r} \\
\varepsilon'(\mathbf{r}) &= \varepsilon(\mathbf{r}'/s) \\
\vec{\nabla}' \times &= s\vec{\nabla} \times
\end{aligned} \tag{2.18}$$

Yukarıdaki eşitlikte yeni ölçekte tanımlanan fiziksel nicelikler ve dolanım operatörü ana denklemde yerine konursa,

$$\begin{aligned}
\vec{\nabla} \times \left[\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \times \mathbf{H}(\mathbf{r}) \right] &= \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}(\mathbf{r}) \\
\Rightarrow s\vec{\nabla}' \times \left[\frac{1}{\varepsilon'(\mathbf{r}'/s)} s\vec{\nabla}' \times \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s) \right] &= \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s) \\
\vec{\nabla}' \times \left[\frac{1}{\varepsilon'(\mathbf{r}'/s)} \vec{\nabla}' \times \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s) \right] &= \frac{\omega^2}{s^2 c^2} \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s)
\end{aligned} \tag{2.19}$$

elde edilir. Yeni ölçekte yazılan ana denklem, $\omega' = \omega/s$ frekansına sahip $\mathbf{H}'(\mathbf{r}') = \mathbf{H}(\mathbf{r}'/s)$ öz kipleri için öz değer denklemidir. Fotonik kristal s ile ölçeklendirildiğinde öz kiplerin ve bunların açılal frekanslarının eldesi için yapılması gereken, orijinal yapı için elde edilen çözümlerin ve bunların frekanslarının s 'e bölünmesidir. Bu nedenle, fotonik kristal için ana denklemin öz kiplerinin ve öz değerlerinin belirli bir uzunluk ölçeğinde eldesi, bütün uzunluk ölçeklerinde eldesi anlamına gelmektedir.

2.6. Simetri Özellikleri

Fotonik kristallerin dielektrik sabitinin $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ olarak tanımlanması, bu yapıların kesikli öteleme simetrisine sahip olduğunu göstermektedir. Bu, örgü tanımından da görülebilir. Kesikli öteleme simetrisinden dolayı, ana denklemin $\mathbf{H}_{k,n}(\mathbf{r})$ öz kipleri

$$\mathbf{H}_{k,n}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{k,n}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \tag{2.20}$$

“Bloch” formunda olmalıdır (Joannopoulos vd 1995). Burada $\mathbf{u}_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r})$, fotonik kristalin periyodikliğine sahip, $\mathbf{u}_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_{\mathbf{k},n}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$, bir fonksiyondur. Bloch kipleri incelendiğinde, dalga vektörünün $2\pi m_i \mathbf{b}_i$ ($m_i \in Z$) ötelenmesiyle özdeş sonuçların elde edildiği görülür. Bu nedenle, fotonik kristalin fiziksel özellikleri yalnızca 1. Brillouin bölgesi içinde çalışılarak belirlenebilir.

Fotonik kristaller öteleme simetrisinin yanında dönü, ayna ve tersleme simetrisi de sergileyebilirler. Yapının sahip olduğu tüm simetrilerin bilinmesi, o yapı için EM alan çözümleri hakkında genel sonuçlara varılmasını sağlayabilir. S , fotonik kristalin sahip olduğu herhangi bir simetriyi temsil eden operatör ise, Eş. 2.10’da tanımlanan Θ operatörü ile sıra değiştirir:

$$\begin{aligned}\Theta &= S^{-1}\Theta S \\ S\Theta &= \Theta S \\ [\Theta, S] &= 0\end{aligned}\tag{2.21}$$

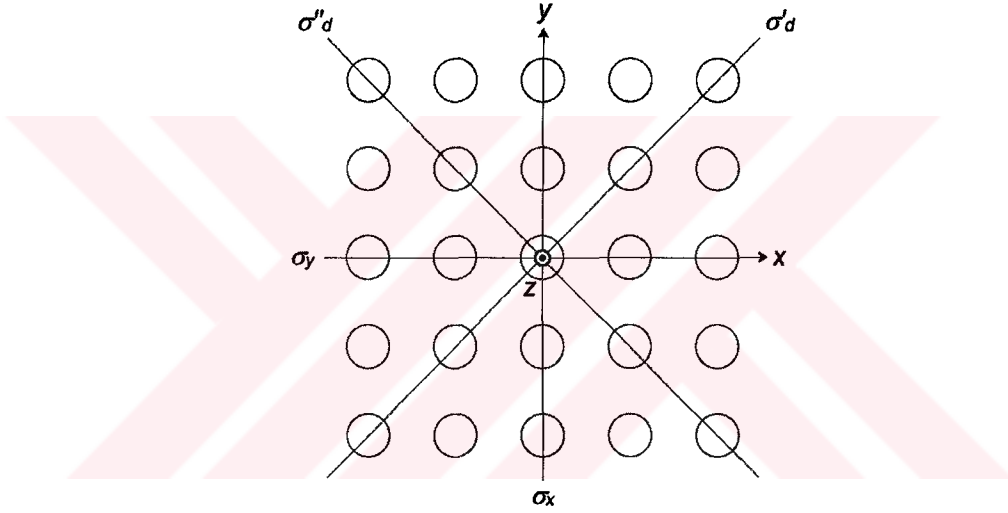
Sıra değiştirme, iki operatörün eş zamanlı öz kiplerinin bulunabileceği anlamını taşımaktadır (Joannopoulos vd 1995). Bu özellik sayesinde ana denklemin çözümünün bulunamadığı durumlarda, simetri operatörünün öz kiplerinden yararlanılabilir. Örneğin, fotonik kristalin tersleme simetrisine sahip olması durumunda I_r ile gösterilen tersleme operatörünün öz kiplerinden yararlanılabilir:

$$\begin{aligned}[\Theta, I_r]\mathbf{H} &= I_r(\Theta\mathbf{H}) - \Theta(I_r\mathbf{H}) \\ \Rightarrow \Theta(I_r\mathbf{H}) &= \frac{\omega^2}{c^2}\Theta(I_r\mathbf{H})\end{aligned}\tag{2.22}$$

Burada, \mathbf{H} bir öz kip ise $I_r\mathbf{H}$ ’nin de aynı öz değere karşılık gelen öz kip olduğu görülmektedir. Sistemde çakışıklık yok ise bu iki fonksiyonun birbirlerinden ancak bir katsayı ile ayrılması gerekir, $I_r\mathbf{H} = \alpha\mathbf{H}$. Bu da I_r için öz değer denklemidir ve öz değerlerinin ± 1 olduğu bilinmektedir (Joannopoulos vd 1995). Bu nedenle, tersleme

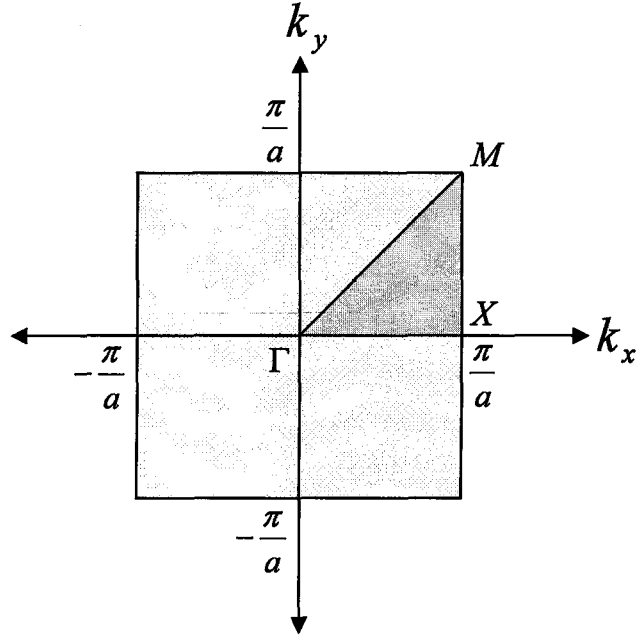
simetrisine sahip bir sistemde çözümler, belirli bir pariteye sahip olmalıdır: Öz fonksiyon tek ya da çift fonksiyon olmalıdır.

Tersleme simetrisinden yola çıkarak varılan yukarıdaki sonuç, ana denklemin öz kiplerinin sınıflandırılması için başlangıç olarak kabul edilebilir. Diğer simetri özelliklerine bakılarak sistemin davranışı hakkında daha çok bilgiye ulaşılabilir. Örneğin, çalışmada incelenen kare örgü yapısı Schoenflies gösteriminde C_{4v} simetri grubunun üyesidir (Tinkham 1964). Bu yapıda simetri eksenleri ve düzlemleri Şekil 2.6'da görülmektedir:



Şekil 2.6. Kare örgü yapısının simetri eksenleri ve düzlemleri

Yukarıda görülen yapı z eksenini etrafında π , $\pi/2$ ve $\pi/4$ kadar döndürüldüğünde yine kendisi elde edilir. Bunun yanında σ_x , σ_y , σ'_d ve σ''_d düzlemlerine göre ayna simetrisine sahiptir. Gerçek uzayda görülen dönü ve ayna simetrisi kare örgü için Fourier uzayında da geçerlidir. Kare örgünün 1. Brillouin bölgesi de kare olduğundan, dönü ve ayna simetrisilerinden yararlanılarak Brillouin bölgesinin tümü yerine küçük bir kısımda çalışılabilir (Şekil 2.7).



Şekil 2.7. Kare örgünün 1. Brillouin bölgesi

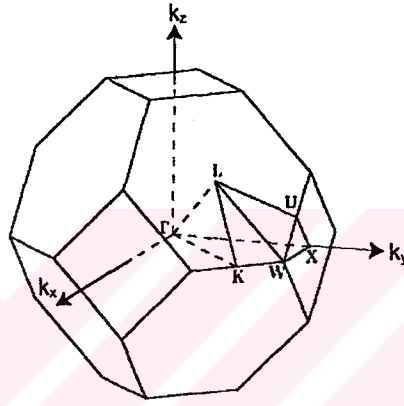
Şekilde 1. Brillouin bölgesi üzerinde Γ , X ve M ile gösterilen noktalar yüksek simetri noktalarıdır. Koyu renkle gösterilen üçgensel bölge ise indirgenemez Brillouin bölgesidir. Bu bölge fotonik kristalin sahip olduğu dönü ve ayna simetrilerinden yararlanılarak tüm Brillouin bölgesini kapsayacak şekilde ötelenebilir. Bu nedenle, yapı hakkında bilgi edinilmesi için indirgenemez Brillouin bölgesi içinde çalışmak yeterlidir.

2.7. Fotonik Band Yapısı

Fotonik kristallerin fiziksel özelliklerinin ve bu yapılara gelen EM dalgaların kristal içerisindeki hareketinin belirlenmesi için, ana denklemin, Eş. 2.10, çözülerek açılmal frekans öz değerlerinin bulunması gerekir. Ana denklem için EM alanın tek renkli düzlem dalgalar, $e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}$, cinsinden yazılabilen çözümleri aranırsa, düzlem EM dalganın her bir \mathbf{k} dalga vektörü için $\omega_n(\mathbf{k})$ ile gösterilen frekans öz değerlerinin bulunması gerekir. n , herhangi bir dalga vektörü için elde edilen frekansları sıralayan bir tam sayıdır. 1. Brillouin bölgesi içerisindeki tüm dalga vektörleri için açılmal frekans

öz değerlerinin bulunarak dalga vektörüne göre çizilmesiyle “fotonik band yapısı” elde edilir.

Fotonik band yapısı eldesinde 1. Brillouin bölgesinin tümü yerine indirgenemez Brillouin bölgesi üzerindeki dalga vektörleri taranır. Şekil 2.8’de YMK yapı için 1. Brillouin bölgesi görülmektedir. Böyle bir yapı için fotonik band yapısı hesaplanırken, şekilde Γ , X , L , K , W ve U ile gösterilen yüksek simetri noktalarını birleştiren doğru parçaları üzerinde hareket edilerek band yapısı çizilir.



Şekil 2.8. YMK yapıya sahip üç boyutlu fotonik kristal için 1. Brillouin bölgesi

YMK örgü yapısında dizilmiş dielektrik kürelerden oluşan üç boyutlu fotonik kristal için band yapısı Şekil 2.9’da verilmiştir. Band yapısı eldesinde sırasıyla $X \rightarrow U$, $U \rightarrow L$, $L \rightarrow \Gamma$, $\Gamma \rightarrow X$, $X \rightarrow W$ ve $W \rightarrow K$ doğrultularında ilerlenerek frekans öz değerleri bulunmuştur. Şekilde dikkat çeken bir nokta açısız frekans değerlerinin $2\pi c/a$ ile normalize edilip birimsiz nicelikler olarak yazılmasıdır. Bu seçim, ana denklemin ölçeklenebilirliğinden kaynaklanmaktadır. Band yapısında göze çarpan bir başka nokta da taralı olarak gösterilen bölgedir. “Band aralığı” olarak adlandırılan bu bölgede hiçbir k değeri için EM alanın ilerleyen dalga çözümleri mevcut değildir. Bu nedenle, band aralığı içerisinde kalan açısız frekansa sahip bir EM dalga, fotonik kristale geldiğinde kristal tarafından iletilmeyip yansıtılacaktır. Fotonik kristalin band

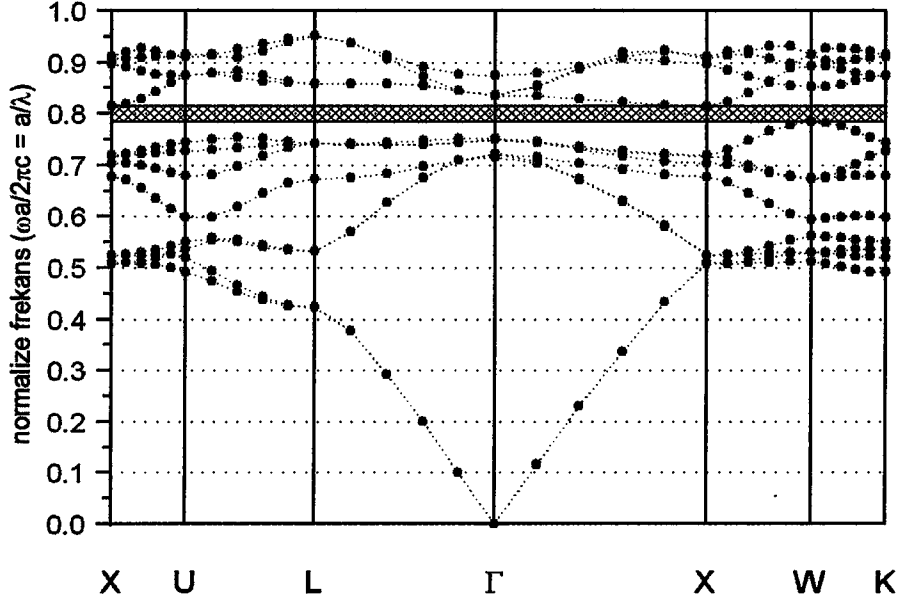
yapısı bu yönüyle katı kristalin band yapısına benzemektedir: Band aralığında elektron dalga fonksiyonunun ilerleyen dalga çözümleri bulunmamaktadır.

Fotonik band aralığının alt sınırındaki band “dielektrik” bandı, üst sınırındaki band da “hava” bandı olarak adlandırılır. Bu isimlendirme, elektronik band yapısında “değerlik” ve “iletim” bandı terimlerinin kullanılmasını anımsatmaktadır. Fotonik kristalin band yapısında görülen band aralıkları, kristalin uygulamada nasıl kullanılabileceği yönünde önemli bilgiler içerirler. Band aralığının tanımlanması için bandın alt ve üst sınırlarındaki açısal frekans değerlerinin bilinmesi gerekir. YMK yapı için Şekil 2.9’da tek bir band aralığı görülmektedir. Bu band aralığının alt ve üst sınırları, sırasıyla, ω_{die} ve ω_{hava} ile gösterilirse, şekilde görülen band aralığı için $\omega_{die} = 0.78328$ ve $\omega_{hava} = 0.81428$ ’dir.

Şekildeki band aralığının “aralık orta frekansı”, ω_{orta} , 0.79878 ve band aralığı genişliği, $\Delta\omega = \omega_{hava} - \omega_{die}$, 0.031004’tür. Band aralığının bulunduğu frekans bölgesine göre genişliğini belirten “band aralığı oranı”, $G/M(\%)$, band aralığı genişliğinin aralık orta frekansına oranının yüzde değeri olarak tanımlanır:

$$G/M(\%) = \frac{\Delta\omega}{\omega_{orta}} \times 100 \quad (2.23)$$

Şekil 2.9’da görülen band aralığı için band aralığı oranı, $G/M(\%) = 3.8814$ ’tür.

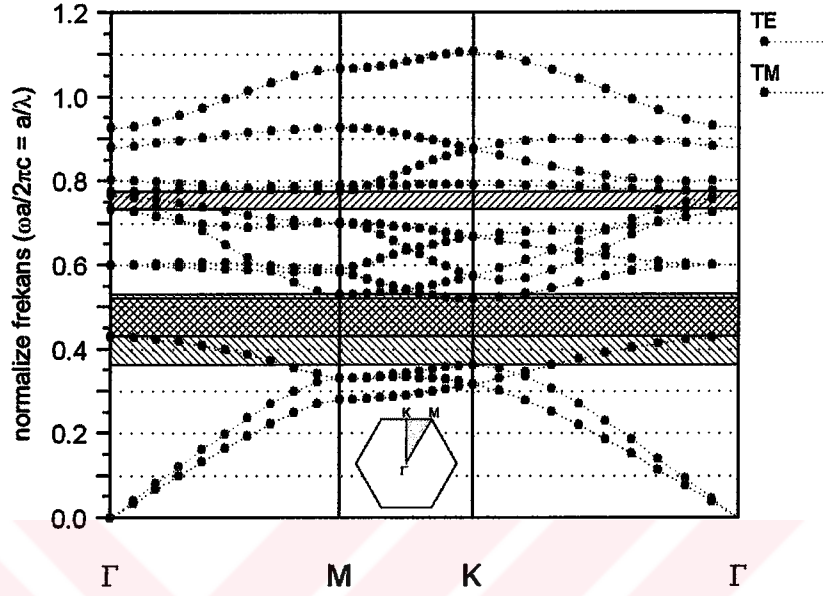


Şekil 2.9. YMK yapı oluşturacak şekilde dizilmiş dielektrik kürelerden oluşan fotonik kristalin band yapısı

Fotonik kristaller tasarlanırken temel amaçlardan biri, band aralıklarının EM spektrumum mümkün olduğunca geniş bir bölgesini kapsamasıdır. Fotonik band aralıklarının konum ve genişliklerini belirleyen temel nicelikler dielektrik sabiti, geometrik yapı ve “doldurma oranıdır”. İstenilen frekans bölgesinde ve istenilen genişlikte band aralıklarının eldesi için bu niceliklerin uygun seçilmesi gerekir. Ayrıca, EM alanın kutuplanma değerinden bağımsız “tam band aralıkları” eldesi için uygun yapıların tasarlanması gerekir. Bu da ancak 3 boyutlu fotonik kristallerle mümkündür.

3 boyutlu fotonik kristallerin üretimindeki teknolojik zorluklar nedeniyle 2 boyutlu yapılarla yapılan çalışmalar daha yaygındır. 2 Boyutlu fotonik kristaller uzayda 2 boyutta periyodiklik gösterirken 3. boyutta türdeşirler. Bu nedenle, bu yapılar için EM alanın kutuplanma doğrultusu önem kazanmaktadır. xy düzleminde tanımlanan 2 boyutlu bir fotonik kristal için EM alanın doğrusal bağımsız iki kipten bahsedilebilir: Elektrik alan vektörünün 3. boyuta paralel olduğu ($E//\hat{z}$) enine elektriksel (TE) ve manyetik alanın 3. boyuta paralel olduğu ($H//\hat{z}$) enine manyetik (TM) kipler. Şekil 2.10’da üçgen örgü yapısındaki fotonik kristal için elde edilen TE (kırmızı) ve TM

(mavi) band yapıları birlikte gösterilmiştir. Band yapısı elde edilen fotonik kristalin yapı taşları Şekil 2.3'te görülen dielektrik dairelerdir.



Şekil 2.10. Üçgen örgüde dizilmiş dielektrik silindirlere oluşan 2 boyutlu fotonik kristalin TE/TM band yapısı

Yukarıdaki band yapısında, incelenen aralıkta, TE band yapısı için 1 band aralığı (taralı kırmızı bölge) gözlenirken, TM band yapısı için 2 band aralığı (taralı mavi bölgeler) göze çarpmaktadır. Şekilde ayrıca, 1. TE band aralığı ile 1. TM band aralığının örtüştüğü de görülmektedir. xy düzleminde bu 2 boyutlu fotonik kristal üzerine gelen, örtüşme bölgesindeki açılal frekanslara sahip, EM dalganın yapıda ilerleyen dalga çözümleri mevcut değildir.

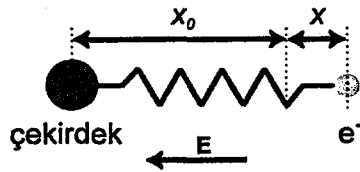
2.8. Doğrusal Olmayan Optik

1960'ların başında ilk çalışan lazerin yapımına kadar tüm optik malzemelerin doğrusal olduğu varsayıyordu. Bu temel varsayım beraberinde, malzemenin kırılma indisi (manyetik olmayan bir ortam için $n(\mathbf{r}) = \sqrt{\epsilon(\mathbf{r})}$) gibi optik özelliklerinin ışığın şiddetiyle değişmediği, klasik optikteki üst üste binme ilkesinin geçerli olduğu, ışığın

frekansının malzeme içerisinde deđiřtirilemeyeceđi ve iki ışık demetinin birbirleriyle etkileşmeyeceđi varsayımlarını getiriyordu (Saleh ve Teich 1991).

Yukarıdaki varsayımların Franken (1961) ve ekibinin güçlü lazer ışığı kullanarak “ikinci harmonik üretimi”ni göstermesi ile gözden geçirilmesi zorunlu olmuştur (Boyd 1992). Malzemelerin yeterince güçlü ışık demetleri ile uyarıldıklarında doğrusal olmayan özellikler sergilediklerinin belirlenmesi ile, kırılma indisinin (böylece malzeme içerisinde ışığın hızının) ışık şiddeti ile deđiřtirilebileceđi, üst üste binme ilkesinin çığnenebileceđi, ışığın frekansının malzeme içerisinde deđiřebileceđi ve bir ışın demetinin diđerini kontrol edebileceđi görülmüştür (Saleh ve Teich 1991).

Bir malzemenin doğrusal olmayan davranış göstermesi için gerekli şartların belirlenmesi, bu malzemenin doğrusal davrandığı durumda uygulanan EM alanla nasıl etkileştiđinin modellenmesi ile ortaya çıkarılabilir. İletken malzemelerde serbest elektronlar uygulanan sabit bir elektrik alanı, E , altında, $-e$ elektronun yükü ve E uygulanan elektrik alanının genliđi olma üzere, $F = -eE$ Lorentz kuvveti etkisinde malzeme boyunca ilerleyebilirler. Yalıtkanlarda ise elektronlar bađlı olduklarından uygulanan elektrik alanı, elektronların ve çekirdeğin zıt yönlerde hareket etmesine neden olacaktır. Bu da atomların elektrikselsel bir dipol momentine sahip olmasını getirecektir. Çekirdek elektrona göre çok ağır olduğundan, elektrik alanının yalnızca elektronlara etki ettiđi kabul edilebilir. Böylece malzemeyi oluşturan atomlar, Şekil 2.11’deki gibi elektronları çekirdeğe bađlayan “hayali” bir yay ile modellenebilir: Drude modeli (Butcher ve Cotter 1991).



Şekil 2.11. Yalıtkan malzemenin uygulanan elektrik alanı ile etkileşimini incelemek için kullanılan yay modeli

Yukarıdaki şekilde elektrik alanının etkisiyle elektron, x_0 denge konumundan x kadar uzaklaşmıştır. Bu durumda klasik hareket denklemi, m elektronun kütlesi olmak üzere,

$$m \left[\frac{d^2 x}{dt^2} + 2\Gamma \frac{dx}{dt} + \Omega^2 x \right] = -eE(t) \quad (2.24)$$

şeklinde yazılabilir (Butcher ve Cotter 1991). Eşitlikte Γ sönümleme sabiti ve Ω sistemin rezonans frekansıdır. Malzeme E_0 genlikli ve ω frekansında bir elektrik alanı ile uyarılıyorsa;

$$E(t) = E_0 \cos(\omega t) = \frac{1}{2} E_0 [\exp(-i\omega t) + \exp(i\omega t)] \quad (2.25)$$

Eş. 2.24'tin çözümü olarak,

$$x = \frac{-eE_0}{2m} \frac{\exp(-i\omega t)}{\Omega^2 - 2i\Gamma\omega - \omega^2} + k.e. \quad (2.26)$$

bulunur. Eş. 2.26'da $k.e.$, karmaşık eşleniğin kısaltılmışıdır. Elektronların yer değiştirmesi sonucunda malzeme içerisinde ortaya çıkan "kutuplanma", N birim hacimdeki elektrik dipol sayısı olmak üzere, $P = -Nex$ şeklinde yazılabilir. Kutuplanma ile elektrik alanı arasındaki ilişki bu modelde,

$$P = \frac{1}{2} \epsilon_0 \chi^{(1)} E_0 \exp(-i\omega t) + k.e. \quad (2.27)$$

$$\chi^{(1)} \equiv \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m} \frac{1}{\Omega^2 - 2i\Gamma\omega - \omega^2}$$

ifadesi ile gösterilebilir. Burada ϵ_0 boşluğun dielektrik sabitidir. Eşitlikte $\chi^{(1)}$ ile gösterilen birimsiz nicelik, ortamın "doğrusal dielektrik duygunluğu" olarak adlandırılır (Butcher ve Cotter 1991).

Küçük elektrik alanı genlikleri, E_0 , için yürütülen yukarıdaki tartışma, büyük genlikler için yetersiz kalmaktadır. Bu durumda, Eş. 2.24'te yazılan klasik hareket denkleminde harmonik olmayan terimlerin de eklenmesi gerekmektedir. "Büyük genlik" sözü ile ifade edilmek istenen nicel olarak, çekirdek ile elektron arasındaki mikroskopik elektrik alanı mertebesindeki değerlere karşılık gelmektedir. $a_0 = \hbar^2 / 2me$ hidrojen atomunun Bohr yarıçapı ise, çekirdek içindeki elektrik alanı $\sim (1/4\pi\epsilon_0) \times e/a_0^2$ mertebesinde ve sayısal olarak $E_a \sim 3 \times 10^{10} V/m$ düzeyindedir (Boyd 1992). Bu nedenle, doğrusal olmayan etkileri uyarmak için uygulanan ışık şiddetinin $\sim 10^{14} W/cm^2$ mertebesinde olması gerekmektedir. Ancak, "faz eşlenmesi" olarak adlandırılan özel durumda uyarılan dipoller birbirleri ile faz uyumlu salınım yaparlar ve dış elektrik alanına "yapıcı girişim" yaparak katkıda bulunurlar. Bu durumda doğrusallıktan sapmaları uyarmak için gerekli ışık şiddeti, $1 MW/cm^2$ mertebesinde ve günümüzde kullanılan atmalı lazerlerin pek çoğu ile elde edilebilir (Butcher ve Cotter 1991).

Eş. 2.24'te verilen elektrik alan genliğinin doğrusallıktan sapmayı uyarabilecek düzeyde olduğu durumda Eş. 2.27'de verilen kutuplanma ifadesini elektrik alanı üzerinden kuvvet serisine açarak yüksek mertebedeki terimlerin hesaba katılması mümkündür. Genel olarak 3 boyutlu bir malzemede elektrik alanının ve kutuplanmanın vektörel doğası göz önünde bulundurularak kutuplanma ve elektrik alanı arasındaki ilişki,

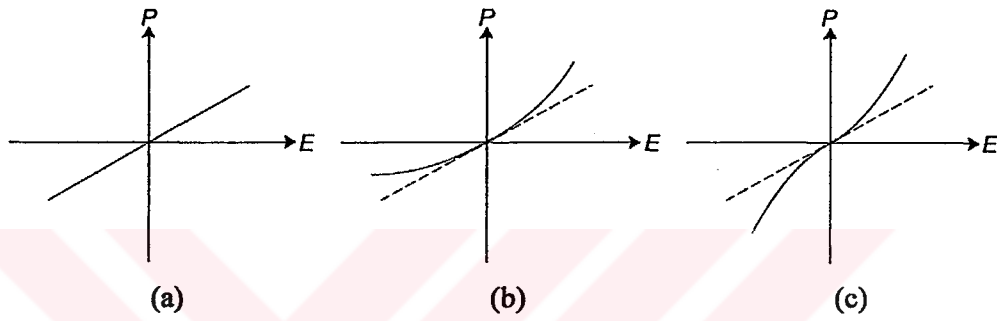
$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_0 \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) [\chi^{(1)} + \chi^{(2)} \mathbf{E} + \chi^{(3)} \mathbf{E} \cdot \mathbf{E} + \dots] \quad (2.28)$$

şeklinde yazılabilir. Eşitlikte $\chi^{(2)}$ ve $\chi^{(3)}$ ile gösterilen terimler sırasıyla, 2. ve 3. dereceden doğrusal olmayan dielektrik duygunluk olarak adlandırılır. Bu iki niceliğin birimleri sırasıyla m/V ve m^2/V^2 'dir. Eşitlikte $\chi^{(3)}$ 'ten yüksek dereceli terimler ihmal edilmiştir.

Malzeme içerisinde uyarılan dipollerin yöneliminin elektrik alanının doğrultusuna paralel olduğu durumlarda Eş. 2.28, skaler nicelikler için,

$$P(t) = \varepsilon_0 E(t) [\chi^{(1)} + \chi^{(2)} E + \chi^{(3)} E^2] \quad (2.29)$$

şeklinde yazılabilir. Kutuplanma ile elektrik alanı arasındaki ilişki grafiksel olarak Şekil 2.12'deki gibi gösterilebilir.



Şekil 2.12. (a) Doğrusal, (b) doğrusallıktan ikinci derece sapma gösteren ve (c) doğrusallıktan 3. derece sapma gösteren bir malzemede kutuplanmanın uygulanan elektrik alanı ile değişimi

Şekil 2.12a, doğrusal davranan bir malzeme için beklenen doğrusal ifadeye, $P = \varepsilon_0 \chi^{(1)} E$, karşılık gelmektedir. Buna karşın, Şekil 2.12b'de ve Şekil 2.12c'de, sırasıyla, ikinci ve üçüncü derece doğrusal olmayan kutuplanmanın baskın olduğu bir malzemede kesikli çizgilerle gösterilen doğrusal değişimden büyük alan genlikleri için sapmalar görülmektedir.

$\chi^{(2)}$ ve $\chi^{(3)}$ terimleri malzemelerde aynı oranda baskın değildir. Bazı malzemelerde doğrusallıktan ikinci derece sapmanın etkisi daha fazladır. Bu durumda doğrusallıktan "Pockels" tipi sapmadan söz edilir ve bu etkinin görüldüğü ortam elektro-optikte (DC elektrik alan uygulandığı durumda) "Pockels ortamı (hücresi)" olarak bilinir (Saleh ve Teich 1991). $\chi^{(2)}$ terimi, doğrusallıktan sapmayı uyararak için gerekli elektrik alanı

genliğini tahmin etmede kullanılan yukarıdaki tartışmadan yola çıkılarak, Pockels etkisi görülen birçok malzemede $\sim 10^{-11} - 10^{-12} m/V$ mertebesindedir (Boyd 1992). Pockels etkisi yalnızca tersleme simetrisi olmayan yapılarda görülür. 3 boyutlu kristal yapıların çoğunda (32 nokta grubundan 27'sinde) tersleme simetrisi görüldüğünden, Pockels etkisinin uygulama alanı kısıtlıdır (Pedrotti ve Pedrotti 1993).

Kutuplanmaya $\chi^{(3)}$ teriminin katkısının daha baskın olduğu ortamda, doğrusallıktan "Kerr" tipi sapmadan söz edilir. Böyle bir ortam elektro-optikte "Kerr ortamı (hücresi)" olarak bilinir (Saleh ve Teich 1991). $\chi^{(3)}$ terimi genellikle "Kerr duygunluğu" olarak adlandırılır ve genel olarak $\sim 10^{-22} - 10^{-23} m^2/V^2$ mertebesindedir (Boyd 1992). Yarıiletken malzemelerde ise $\sim 10^{-10} m^2/V^2$ gibi değerlere kadar çıkmaktadır. Bir malzemede Kerr etkisi görülmesi için o malzemenin tersleme simetrisi sergilemesi ön koşul değildir (Pedrotti ve Pedrotti 1993).

Kerr tipi malzemeyi tanımlamak için kullanılan alternatif bir yöntem doğrusal olmayan bir kırılma indisi belirtmektir. Doğrusal, eş yönlü, dağıtmayan, kayıpsız bir ortamda uygulanan elektrik alanı ($E(\mathbf{r}, t)$) ile yer değiştirme alanı arasındaki kurucu ilişki,

$$\mathbf{D}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon(\mathbf{r})\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \varepsilon_0\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) \quad (2.30)$$

ifadesi ile verilir (Sauter 1996). Kutuplanma ile elektrik alanı arasında Eş. 2.28 ile verilen ilişki göz önünde bulundurularak ortamın dielektrik sabiti

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = 1 + \chi^{(1)} \quad (2.31)$$

şeklinde yazılabilir. Bu durumda ortamın doğrusal kırılma indisi, dielektrik duygunluğun genel olarak karmaşık sayı olduğu göz önünde bulundurularak,

$$n_0(\mathbf{r}) = \text{Re}\{\sqrt{\varepsilon(\mathbf{r})}\} = \text{Re}\{\sqrt{1 + \chi^{(1)}}\} \quad (2.32)$$

şeklinde yazılır (Butcher ve Cotter 1991).

Kerr tipi ortamda dielektrik sabiti için, Eş. 2.28 ve Eş. 2.30'dan yararlanılarak,

$$\begin{aligned}\varepsilon^{NL}(\mathbf{r}) &= 1 + \chi^{(1)} + \chi^{(3)} E^2 \\ &= \varepsilon^L + \chi^{(3)} E^2\end{aligned}\quad (2.33)$$

bulunur. Eşitlikte ε^L ve ε^{NL} , sırasıyla, doğrusal ve doğrusal olmayan dielektrik sabitini göstermektedir. Bu ortamda kırılma indisi,

$$n^{NL} = n_0 + n_2 I \quad (2.34)$$

ifadesi ile verilir. Eşitlikte n^{NL} doğrusal olmayan kırılma indisini ve $I \propto E_0^2$ ışık şiddetini göstermektedir. Eşitlikte m^2/W^2 birimi ile verilen n_2 niceliği, kırılma indisinin doğrusal olmayan kısmıdır ve "Kerr sabiti" olarak da adlandırılır. Kerr sabitinin değeri m^2/W^2 biriminde cam malzemeler için $\sim 10^{-16} - 10^{-14}$, ve yarıiletkenler için $\sim 10^{-10} - 10^{-2}$ mertebesinde (Saleh ve Teich 1991). Kerr sabiti ile Kerr duygunluğu arasındaki ilişki de

$$n_2 = \frac{3\eta_0}{n_0^2 \varepsilon_0} \chi^{(3)} \quad (2.35)$$

olarak bulunur. Eşitlikte η_0 boşluğun empedansıdır ($\eta_0 = \sqrt{\mu_0 / \varepsilon_0} = 120\pi = 377 \Omega$).

2.8.1. İkinci derece doğrusal olmayan kutuplanmadan kaynaklanan etkiler

İkinci derece dielektrik duygunluğun sıfırdan farklı olduğu ($\chi^{(2)} \neq 0$, $\chi^{(3)} = 0$) bir ortama zamanla değişimi Eş. 2.25'te verilen ışık demeti gönderilirse Eş. 2.29, yüksek dereceli terimler ihmal edilerek,

$$\begin{aligned}
P^{NL}(t) &= \epsilon_0 (\chi^{(1)} E(t) + \chi^{(2)} E(t)^2) \\
&= P^{(1)}(t) + P^{(2)}(t)
\end{aligned}
\tag{2.36}$$

halini alır. Eşitlikte elektrik alanının uygulanmasıyla ortaya çıkan kutuplanma P^{NL} , kutuplanmanın doğrusal kısmı $P^{(1)}$ ve doğrusal olmayan kısmı $P^{(2)}$ ile gösterilmiştir. Elektrik alanının zamanla değişimi yukarıdaki eşitlikte yerine konursa,

$$P^{(2)}(t) = 2\chi^{(2)} E_0 E_0 * + (\chi^{(2)} E_0^2 e^{-2i\omega t} + k.e)
\tag{2.37}$$

elde edilir. Malzeme içerisindeki dipoller uygulanan elektrik alanı ile salındığından, birer EM dalga kaynağı olarak düşünülebilirler. Bu durumda ortamda, uygulanan sinyalin frekansına (ω) sahip bir dalga bileşeninin yanında Eş. 2.37'de eşitliğin sağ tarafındaki ilk bileşenden kaynaklanan bir DC bileşen ve frekansı uygulanan alan frekansının iki katı (2ω) olan bir dalga bulunacaktır. Pockels ortamında, yukarıda anlatıldığı gibi, DC alan elde edilmesine “optik doğrultma” ve frekansı uygulanan alan frekansının 2 katı olan bir EM dalga elde edilmesine de “ikinci harmonik üretimi” denir (Boyd 1992). Ortamda elde edilen dalgada ikinci harmoniğin katkısı genelde çok düşüktür. Ancak, şartların ayarlanmasıyla, şiddeti uygulanan alanın %90'ına kadar varan ikinci harmonikler üretilebilir. Bir Pockels hücresinde ikinci harmonik üretim verimliliği ışığın ilerlediği hücrenin boyuna (L), gelen ışık demetinin taşıdığı güce (P) ve demetin kesit alanına (A) bağlıdır ($\propto L^2 P/A$). Bu nedenle, yeterince uzun bir hücrede güçlü bir demetin çok küçük bir alana odaklanmasıyla ikinci harmonik üretim verimliliği artırılabilir (Saleh ve Teich 1991). Bu mekanizma, lazerlerde ışımaya frekansının iki katına çıkarılması (dalga boyunun yarıya indirilmesi) için yaygın kullanılmaktadır (Boyd 1992).

Pockels ortamına tek bir ışık demeti yerine ω_1 ve ω_2 frekanslarında iki demet gönderilirse, Eş. 2.36'dan yararlanılarak; DC ($\omega = 0$), ilk sinyalin ikinci harmoniği ($2\omega_1$), ikinci sinyalin ikinci harmoniği ($2\omega_2$), frekansı sinyallerin frekansları toplamına ($\omega_1 + \omega_2$) ve farkına ($\omega_1 - \omega_2$) eşit olmak üzere farklı frekanslardaki beş bileşenin bulunacağı görülür. Ortama tek ışık demeti gönderilmesinden farklı olarak,

$\omega_3 = \omega_1 + \omega_2$ ve $\omega_3 = \omega_1 - \omega_2$ frekansında iki ek bileşen elde edilmiştir. Bu iki durum sırasıyla toplam ve fark frekansı üretimi olarak adlandırılırlar (Boyd 1992).

Toplam frekans üretimi göz önünde bulundurulursa, üretilen ω_3 frekanslı bileşen ile diğer iki bileşen arasında uzun mesafe ve sürede kalıcı etkileşimin sağlanabilmesi için “faz eşleme” olarak adlandırılan koşulun sağlanması gerekir. Ortama gönderilen iki ışık demeti $E_1(\omega_1) = E_{0,1} \exp[i(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r} - \omega_1 t)]$ ve $E_2(\omega_2) = E_{0,2} \exp[i(\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r} - \omega_2 t)]$ ifadeleri ile verilen düzlem dalgalar ise bu koşul frekans eşleme koşulu ile birlikte,

$$\omega_3 = \omega_1 + \omega_2 \quad (2.38-a)$$

$$\mathbf{k}_3 = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 \quad (2.38-b)$$

şeklinde yazılabilir. Yukarıdaki iki koşulun sağlanması, gelen dalgalar ile üretilen toplam frekanslı bileşen arasında dalga yüzlerinin faz eşlenmesinin sağlanmasını getirmektedir. Bu durumda üç dalga birbirleri ile karşılıklı olarak etkileşmektedir. Üretilen ω_3 frekanslı dalga ω_1 frekanslı dalga ile etkileşerek $\omega_2 = \omega_3 - \omega_1$ frekanslı dalgayı üretir. Burada yukarıdaki faz eşleme koşulunun sağlandığı açıkça görülmektedir. Sonuçta üretilen ω_2 frekanslı dalga ω_3 frekanslı dalga ile etkileşerek ω_1 frekanslı dalgayı üretir. Karşılıklı ikili etkileşim böylece sürer. Pockels ortamında üç dalganın karşılıklı olarak etkileştiği bu durum, “üç dalga karışımı” olarak adlandırılır (Saleh ve Teich 1991).

2.8.2. Üçüncü derece doğrusal olmayan kutuplanmadan kaynaklanan etkiler

Üçüncü derece dielektrik duygunluğun (Kerr duygunluğu) sıfırdan farklı olduğu ($\chi^{(2)} = 0, \chi^{(3)} \neq 0$) bir ortama, zamanla değişimi Eş. 2.25'te verilen ışık demeti gönderilirse Eş. 2.29, yüksek dereceli terimler ihmal edilerek,

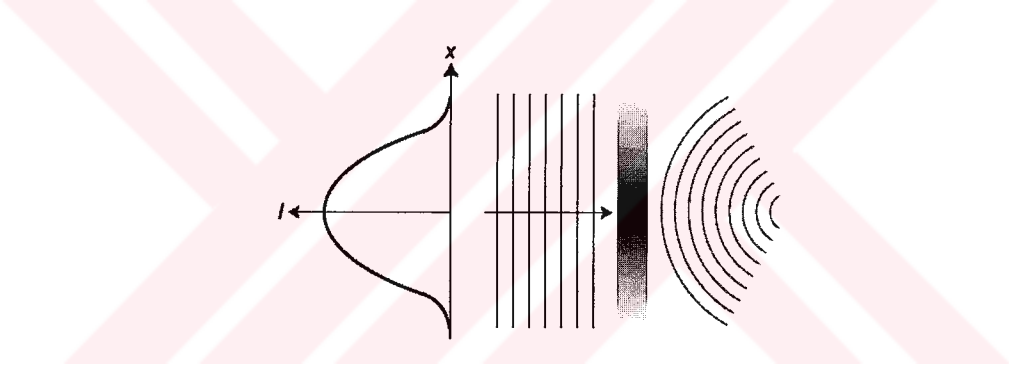
$$\begin{aligned} P^{NL}(t) &= \epsilon_0 (\chi^{(1)} E(t) + \chi^{(3)} E(t)^3) \\ &= P^{(1)}(t) + P^{(3)}(t) \end{aligned} \quad (2.39)$$

şeklinde yazılabilir. Bir önceki bölümdeki tartışmalardan yararlanılarak, ortama gelen ω frekanslı ışık demeti, $E = E_0 \cos(\omega t)$, için

$$P^{(3)}(t) = \frac{1}{4} \chi^{(3)} E_0^3 \cos(3\omega t) + \frac{3}{4} \chi^{(3)} E_0^3 \cos(\omega t) \quad (2.40)$$

elde edilir. Işığın Kerr tipi ortamlarla etkileşmesi sonucu 3ω frekanslı bileşenin elde edildiği bu durum, “üçüncü harmonik üretimi” olarak adlandırılır (Boyd 1992).

Kerr tipi ortamda Bölüm 2.8.1’de anlatılanlara benzer olarak “dört dalga karışımı” gözlenebilir (Saleh ve Teich 1991). Böyle bir ortamda gözlenebilecek bir başka etki de “kendi kendine odaklanma”dır. Bu etki Şekil 2.13’te gösterilmiştir:

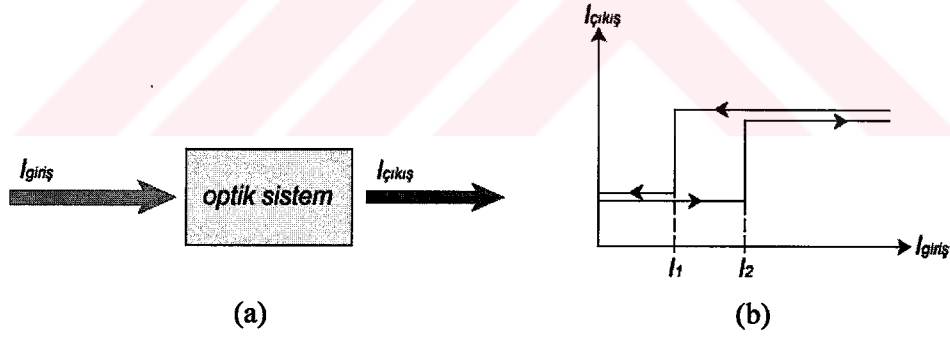


Şekil 2.13. Kerr tipi ortamda kendi kendine odaklanma (Saleh ve Teich 1991)

Eş. 2.34’te verilen ışık şiddetine bağlı kırılma indisi göz önünde bulundurulursa, konuma bağlı şiddet dağılımı şeklindeki gibi olan bir düzlem dalga demeti için malzemenin orta kısımlarında kırılma indisi değişimi, $\Delta n(x) = n_2 I(x)$, kenarlara göre daha fazla olacaktır. Bu nedenle malzeme, ışın demeti için bir merceğe gibi davranacaktır (Saleh ve Teich 1991).

2.8.3. İki durumluluk

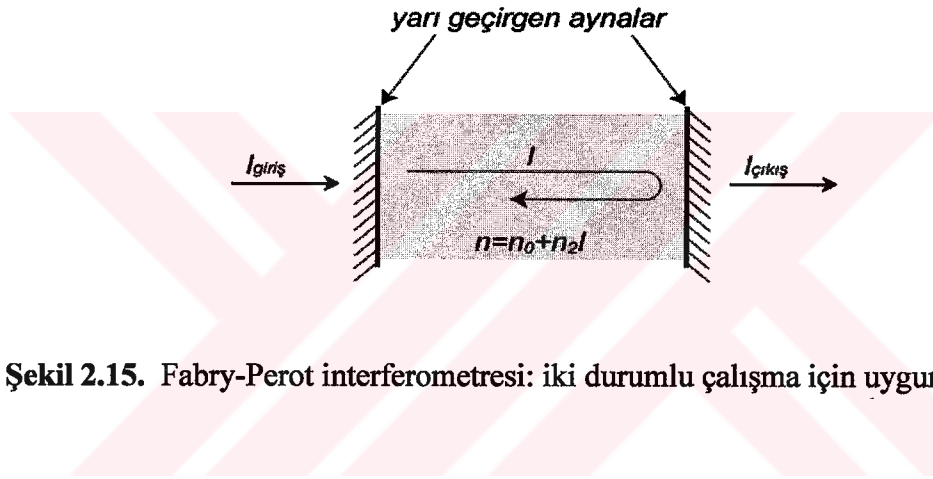
Bir sisteme uygulanan giriş sinyalinin tüm değerleri için çıkış sinyalinin yalnızca iki farklı değer alabildiği durum “iki durumlu çalışma” olarak adlandırılır. İki durumlu sistemler elektronik tümleşik devrelerde anahtar ve mantık kapıları gibi birimlerin uygulanmasında yaygın kullanılmaktadır. Bu durum optik sistemlerde de görülebilmektedir. Şekil 2.14a’da görülen sistem $I_{giriş}$ şiddetine sahip ışık demeti ile uyarılmakta, demetin sistemle etkileşimi sonucunda şiddeti $I_{çıkış}$ olan çıkış sinyali elde edilmektedir. Çıkış sinyalinin giriş sinyaline göre değişimi incelendiğinde, Şekil 2.14b, giriş şiddetinin sıfırdan başlayarak artan değerleri için çıkışın “düşük” durumda olduğu görülmektedir. Giriş şiddeti I_2 eşik değerini aştığında çıkış “yüksek” duruma sıçramaktadır. Girişin daha da artan değerleri için çıkış yüksek durumda kalmaktadır. Buna karşın, giriş alçaltılmaya başlandığında çıkış, giriş şiddetinin I_1 eşiğine kadar yüksek durumda kalırken, I_1 geçildiğinde düşük duruma dönmektedir (Saleh ve Teich 1991).



Şekil 2.14. (a) İki durumlu çalışan bir optik sistem (b) İki durumlu sistemde çıkıştaki ışık şiddetinin giriş şiddetiyle değişimi

İki durumlu sistemde giriş şiddetinin I_1 ve I_2 değerleri arasında çıkışın hangi değerde bulunacağı giriş sinyalinin “tarihçesi”ne bağlıdır. Bu aralıkta çıkış düşük durumda iken yüksek şiddetli pozitif atma uygulanması çıkışı yüksek duruma geçirir. Bunun ardından negatif bir atma uygulanması ise çıkışı tekrar düşük duruma getirir. Böylece sistem bir “flip flop” gibi davranır.

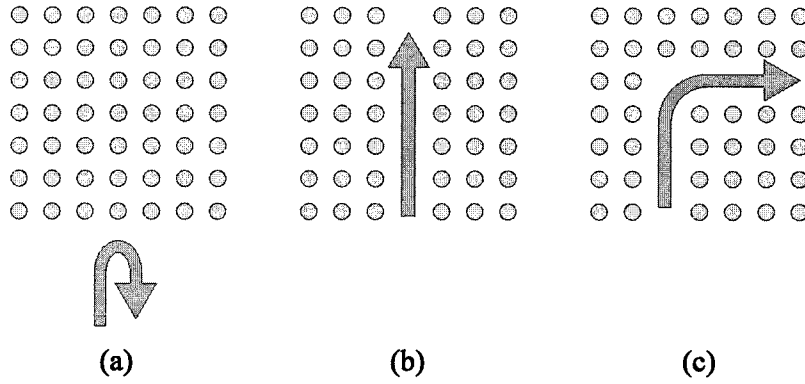
İki durumlu sistem oluşturulması için ön koşullar, sistemde *doğrusallıktan sapma* ve *geri besleme* bulunmasıdır. Bu koşullar optikte Şekil 2.15’te görülen Fabry-Perot kovuğu içerisine Kerr tipi malzeme yerleştirilmesiyle sağlanabilir (Butcher ve Cotter 1991). Kovuğu oluşturan yarı geçirgen aynalar geri besleme sağlamaktadır. Giriş sinyalinin düşük şiddet değerleri için kovukta rezonans koşulu sağlanıyorsa, çıkışta güçlü bir demet elde edilir. Buna karşın, giriş şiddetinin artırılması Kerr hücresinde kırılma indisinin değişmesine neden olacağından, rezonans koşulunun çiğnenmesine yol açar. Böylece çıkış düşük duruma geçer. Şiddet artırılarak devam edilirse, rezonans koşulu tekrar sağlanır ve çıkış yüksek duruma geri döner. Böylece sistemin iki durumlu çalışması sağlanır.



Şekil 2.15. Fabry-Perot interferometresi: iki durumlu çalışma için uygun bir düzenek

2.9. Doğrusal Olmayan Fotonik Kristaller

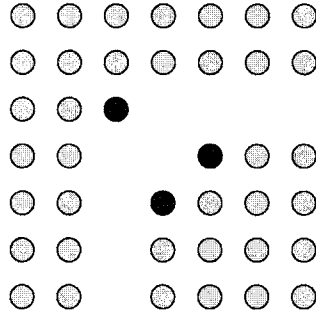
Doğrusal fotonik kristallerin optik özelliklerinin yeterince anlaşılmasıyla ilgi doğrusal olmayan fotonik kristallere kaymıştır. Gelecekte yapılması planlanan “tamamen optik” bilgisayarlarda anahtar ve mantık kapıları gibi temel bileşenlerin hayata geçirilmesi yalnızca doğrusal malzemelerin kullanımıyla mümkün değildir. Bu uygulamalar, iki durumlu çalışan birimler gerektirmektedir. Bu nedenle, Bölüm 2.8.3’te açıklandığı gibi, fotonik kristal içerisinde doğrusal olmayan birimlerin kullanılması kaçınılmazdır (Mingaleev ve Kivshar 2002).



Şekil 2.16. (a) Frekansı fotonik kristalin band aralığında kalan ışığın yansımaları (b) Fotonik kristalde bir sıranın uzaklaştırılmasıyla elde edilen dalga kılavuzunda ışığın ilerlemesi (c) L şeklindeki keskin bükümde ışığın yönünün değiştirilmesi

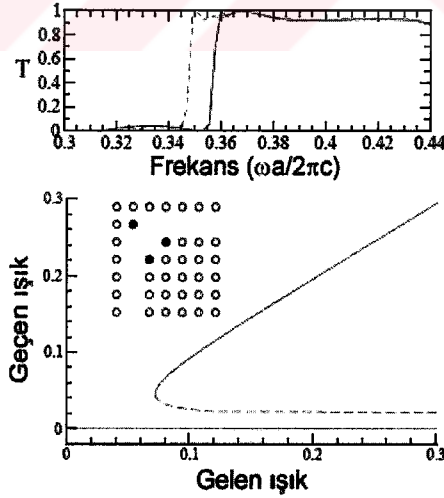
2 boyutlu doğrusal fotonik kristalin band aralıklarından biri içinde kalan frekansa sahip ($\omega_{n,die} < \omega < \omega_{n,hava}$) ışık demeti, yapıdan tümüyle yansıtılacaktır (Şekil 2.16a). Buna karşın, fotonik kristalde bir sıranın uzaklaştırılmasıyla oluşturulan “dalga kılavuzu” (Şekil 2.16b) ışığın bir uçtan diğerine iletimini sağlayacaktır (Joannopoulos vd 1995). Şekil 2.16c’de görülen L şeklindeki keskin kıvrımda ışık iletiminin %95’e varan verimlilik ile yapılabileceğinin gösterilmesi (Mekis vd 1996), fotonik kristal yapı taşları içerisinde ışık için “yollar” açılmasını olanaklı kılmaktadır.

Tümleşik elektronik devrelerde kullanılan elemanların benzeşiği olan fotonik devre elemanlarının uygulanması, yapıya doğrusal olmayan “kusur”ların eklenmesiyle gerçekleştirilebilir. Şekil 2.16c’deki L kıvrımına aşağıdaki gibi Kerr tipi birimlerin (koyu renkli daireler) eklenmesiyle bu kıvrım (Şekil 2.17), optik kapı olarak kullanılabilir (Mingaleev ve Kivshar 2002).



Şekil 2.17. L şeklindeki dalga kılavuzuna Kerr tipi birimlerin eklenmesiyle oluşturulan optik kapı

Şekil 2.17'deki yapıya gelen ışığın frekansına bağlı olarak çizilen iletim oranı (T) Şekil 2.18'de gösterilmiştir. Tam çizgi ile gösterilen eğri yapıda iletimin başlaması için gerekli frekans eşiğini göstermektedir Kesikli çizgi ile gösterilen eğri de doğrusallıktan sapmanın uyarılması ile frekans eşiğinin aşağıya çekildiğini göstermektedir. Gelen ışık şiddetine bağlı olarak geçen ışık şiddeti, alttaki grafikte verilmiştir. Bu grafikte tasarlanan yapının iki durumlu çalıştığı görülmektedir (Mingaleev ve Kivshar 2002).

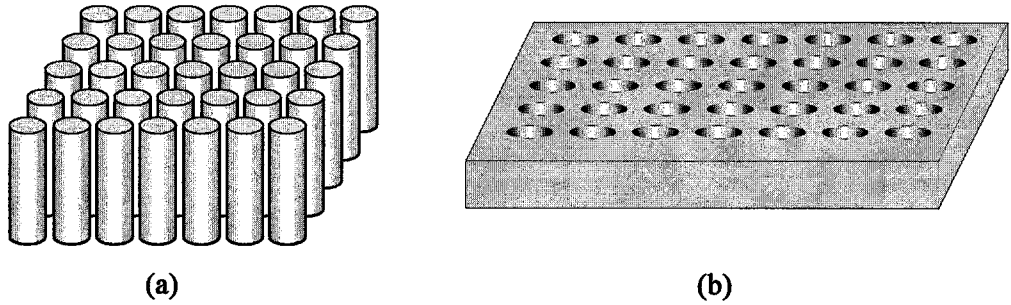


Şekil 2.18. L kıvrımına doğrusal olmayan birimlerin eklenmesiyle iki durumlu çalışma (Mingaleev ve Kivshar 2002'den alınmıştır)

Fotonik kristallerde doğrusal olmayan kusurların eklenmesiyle tasarlanan optik devre elemanları, tümünden optik bilgisayarların geliştirilmesinin ilk adımını oluşturmaktadır. Ancak, Fotonik kristali oluşturan birimlerin tamamının doğrusal olmayan malzemeler içerdiği durumlar da fotonik band yapısı göz önünde bulundurularak tartışılmalıdır.

2.10. Doğrusal Olmayan Fotonik Kristallerin Band Yapıları

Fotonik kristallerin band yapısının eldesi için dielektrik fonksiyonunun bilinmesinin gerektiği Eş. 2.10'da verilen ana denklemde görülmektedir. Doğrusal fotonik kristaller için band yapısı eldesinde kullanılan yöntemler (Ho vd 1990, Chan vd 1995) literatürde yaygın yer edinmiştir. Doğrusal olmayan malzemelerde band yapısının eldesi, Eş. 2.10'da yazılan ana denklemin doğrusal olmayan denkleme dönüşmesi nedeni ile zorlaşmaktadır. Şekil 2.19'da görülen kare örgü düzenindeki 2 boyutlu fotonik kristaller göz önünde bulundurulduğunda bu yapının, özdeş silindirik dielektrik malzemeleri boşlukta kare örgü düzeninde dizerek (Şekil 2.19a) ya da dielektrik malzeme içerisine dairesel hava boşlukları açarak (Şekil 2.19b) oluşturulabileceği görülmektedir. Dielektrik malzemeye doğrusallıktan sapmayı uyarmaya yetecek şiddette EM dalga gönderilmesi durumunda band yapısının nasıl değişeceğinin belirlenmesi bu yapıların doğrusal olmayan davranışlarının belirlenmesi için gereklidir.

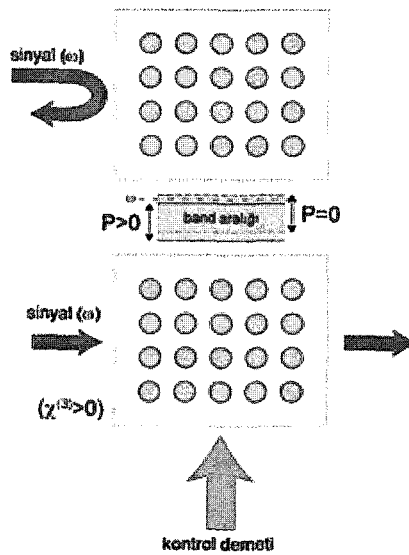


Şekil 2.19. (a) Boşlukta dizilmiş dielektrik silindirlere, (b) dielektrik malzemede oyulan hava boşluklarından oluşan 2 boyutlu kare örgü yapısındaki fotonik kristaller

Doğrusal olmayan fotonik kristallerin band yapılarının incelenmesi için yapılan ilk çalışma 1995 yılında P. Tran tarafından gerçekleştirilmiştir (Tran 1995). Çalışmada Şekil 2.19b'deki kare örgünün band yapısı doğrusallıktan Kerr tipi sapma için elde edilmiştir. Çalışma Maxwell denklemlerinin Fourier (k) uzayında yazılarak doğrudan çözümlenmesine dayanmaktadır. Bulunan sonuçlardan, pozitif Kerr duygunluğu için band yapısında tüm öz değerlerin daha düşük frekanslara (kırmızıya) kaydığı gözlenmiştir.

Aynı yöntemin kullanıldığı bir başka çalışma, fotonik kristal birim hücresi "noktasal" elektrik ve manyetik dipoller tarafından uyarılarak doğrusal olmayan fotonik kristalin band yapısındaki benzerlikler 1 boyutlu yapı için belirlenmiştir (Maksymov vd 2004). Bu çalışmada da 1 boyutlu band yapısında pozitif Kerr duygunluğu için kırmızıya kayma gözlenmiştir. Kullanılan yöntem Tran'ın ele aldığı 2 boyutlu kare örgü için tekrarlanmış ve aynı sonuçlara ulaşıldığı bildirilmiştir (Maksymov vd 2005).

Pozitif Kerr duygunluğu için band yapısının tümünde kırmızıya kaymanın belirlenmesi, band aralıklarının da kırmızıya kaymasını getirmektedir. Bu ise, doğrusal olmayan fotonik kristallerin "tamamen optik anahtarlama" için kullanılabileceği sonucunu doğurmaktadır. A. Huttunen ve P. Törmä 1 boyutlu fotonik kristal ile yaptıkları çalışmada aynı sonuca (kırmızıya kayma) ulaşmış ve tamamen optik anahtarlama için gerekli parametreleri tartışmışlardır (Huttunen ve Törmä 2002).



Şekil 2.20. Doğrusal olmayan fotonik kristallerle tümenden optik anahtarlama

Şekil 2.20’de, doğrusal durumda frekansı fotonik kristalin band aralığı içinde kalan sinyal yansıtılırken, yapıya güçlü bir kontrol demetinin gönderilmesiyle Kerr tipi malzeme uyarılmış ve band aralığı kırmızıya kaydırılmıştır. Bu durumda sinyal frekansının, band aralığı dışında kalmasıyla sinyalin fotonik kristal içerisinde iletimi mümkün olmaktadır. Sinyal demetinin fotonik kristal içerisindeki iletiminin kontrol demetinin açılıp kapanmasıyla düzenlendiği bu olay, anahtarlama bir örnektir.

Anahtarlama işlevi negatif Kerr duygunluğuna sahip malzeme kullanılarak ters çevrilebilir. Bu durumda sinyal demetinin frekansı hava bandında, band aralığının hemen üzerinde, olacak şekilde seçilirse kontrol demeti kapalı iken sinyal iletilektir. Buna karşın, kontrol demetinin açılması band aralığında “maviye” kaymaya neden olacağından, sinyal demeti iletilmeyecektir.

Doğrusal olmayan fotonik kristallerin band yapıları ile ilgili bir başka çalışmada, 3 boyutlu odun yığını yapısı üzerinde durulmuştur. Bu çalışmada da, band yapısında pozitif/negatif Kerr duygunluğu için kırmızıya/maviye kayma gözlemlendiği belirtilmiştir. Fotonik band yapısındaki kaymalar, Eş. 2.10’da görülen dielektrik sabitinin tersinin, $\epsilon^{-1}(\mathbf{r})$, pozitif Kerr duygunluğu için daha küçük ve negatif Kerr duygunluğu için daha büyük olmasıyla açıklanmıştır. Ayrıca, band aralığının genişlediği de belirtilmiştir (Lousse ve Vigneron 2001).

3. MATERYAL ve YÖNTEM

3.1. Giriş

Fotonik kristal çalışmalarının ilk yıllarında, verilen bir yapının fotonik band aralığı sergileyip sergilemeyeceği, daha çok atomik/moleküler kristallerle ilgili bilgilere dayanarak tahmin edilmeye çalışılıyordu. Örneğin, E. Yablonovitch çalışmalarına 1. Brillouin bölgesi küreye en yakın olan YMK yapıya odaklanarak başlamıştır (Yablonovitch 1987). Bunun yanında, fotonik band yapısı hesabı için geliştirilen ya da uyarlanan sayısal hesaplama yöntemleri de kısa zamanda yaygınlık kazandı.

Fotonik band yapısı eldesine yönelik ilk çalışmalar, atomik/moleküler kristallerin elektronik band yapılarını elde etmek için kullanılan yöntemlerin Maxwell denklemleri için uyarlanmasına ilişkin çalışmalardır. Ancak, periyodik dielektrik ortamda Maxwell denklemleri için çözüm aranırken dikkat edilmesi gereken ilk nokta, EM alanın vektörel doğasıdır. Bu göz önünde bulundurularak geliştirilen bir yöntem olan *Düzlem Dalga Açılımı (Plane Wave Expansion)* yöntemi (Ho vd 1990), elektrik ve manyetik alan çözümlerinin düzlem dalgalardan oluşan bir ortonormal baz kümesi türünden Fourier serisine açılabileceğini öngörür. Yöntem, Bölüm 3.2’de ayrıntılı olarak ele alınacaktır.

Zamanda Sonlu Farklar (Finite-Difference Time-Domain) yöntemi (Yee 1966), başlangıçta band yapısı hesabında kullanılmamasına rağmen, fotonik kristallerin band yapısı hesaplamasına uyarlanabilmektedir (Tran 1995). Bölüm 3.3’te ele alınan FDTD yöntemi, türevsel Maxwell denklemlerinin doğrudan çözümünü içerdiğinden kayıplı, eş yönsüz ve dağıtan malzemelerin yanısıra çalışma konusu olan doğrusal olmayan yapıların incelenmesi için de uygun bir yöntem olarak dikkati çekmektedir (Taflove ve Hagness 2000).

3.2. Düzlem Dalga Açılımı Yöntemi

3.2.1. Kuramsal bilgi

Bir fotonik kristalin band yapısının hesaplanması ve tam band aralığı sergileyip sergilemeyeğinin tahmini için akla ilk gelen yöntemlerden biri, katı kristallerin elektronik band yapılarının eldesinde de kullanılan Düzlem Dalga Açılımı (DDA) yöntemidir.

Bu bölümde, Eş. 2.10 ve Eş. 2.11'in çözümü için dielektrik fonksiyonunun ve EM alan çözümlerinin düzlem dalgalar üzerinden Fourier serisine açılacağı varsayımına dayanan DDA yönteminin kuramsal temeli tartışılacaktır.

Ters örgüde öteleme vektörleri (Ashcroft ve Mermin 1976),

$$\begin{aligned} \mathbf{G} &= h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3; & h, k, l &\in \mathbb{Z} \\ \mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j &= 2\pi\delta_{i,j} \end{aligned} \quad (3.1)$$

kullanılarak oluşturulan $e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}$ biçimindeki fonksiyonlar ortonormal tam küme oluşturdukları

$$\frac{1}{V} \int_V e^{-i\mathbf{G}'\cdot\mathbf{r}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} = \delta_{\mathbf{G}',\mathbf{G}} \quad (3.2)$$

için (Sakoda 2001), Eş. 2.10 ve Eş. 2.11'in çözümü olarak bu fonksiyonlar üzerinden Fourier serisine açılabilen

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_k(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{e}_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \\ \mathbf{H}_k(\mathbf{r}) &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{h}_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (3.3)$$

önerilebilir (Ho vd 1990). Eşitliklerdeki $\mathbf{e}_{\mathbf{G}}$ ve $\mathbf{h}_{\mathbf{G}}$ terimleri, sırasıyla, elektrik ve manyetik alanların Fourier bileşenleri olup, sabit vektörlerdir. $\mathbf{E}_k(\mathbf{r})$ ve $\mathbf{H}_k(\mathbf{r})$ Bloch

biçimindeki vektör alanlar, \mathbf{k} ise, 1. Brillouin bölgesi içerisinde kalan indirgenemez dalga vektörüdür.

Eş. 2.10'da verilen hermiyen operatörün, $\Theta = \vec{\nabla} \times \left\{ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \times \right\}$, gerçel özdeğerlerinin \mathbf{k} dalga vektörünün fonksiyonu olarak bulunması, operatörün temsil ettiği fiziksel sistemin band yapısının, $\omega_{\mathbf{k},n} = \omega_n(\mathbf{k})$, belirlenmesini sağlar. Bunun için, $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ çözüm önerisi Eş. 2.10'da yerine konularak;

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \times \left\{ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \times (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{h}_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}) \right\} &= \frac{\omega^2}{c^2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{h}_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \\ \sum_{\mathbf{G}} \vec{\nabla} \times \left\{ \frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} \vec{\nabla} \times (\mathbf{h}_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}) \right\} &= \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{h}_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (3.4)$$

elde edilir. Bu eşitlik f skaler bir fonksiyon olmak üzere;

$$\vec{\nabla} \times (f \mathbf{V}) = f(\vec{\nabla} \times \mathbf{V}) + (\vec{\nabla} f) \times \mathbf{V} \quad (3.5)$$

vektör özdeşliği yardımıyla,

$$\sum_{\mathbf{G}} \vec{\nabla} \times \left\{ \frac{ie^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}}{\varepsilon(\mathbf{r})} (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \mathbf{h}_{\mathbf{G}} \right\} = \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{h}_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} \quad (3.6)$$

şeklinde düzenlenerek, $\vec{\nabla} \times (f \mathbf{V})$ türevsel ifadesi cebirsel bir ifadeye dönüştürülebilir. $\varepsilon^{-1}(\mathbf{r})$ fonksiyonunun da, $\varepsilon(\mathbf{r})$ dielektrik sabitinin periyodik olduğu hatırlanarak, Fourier serisine açılmasıyla diğer dolanım ifadesi de benzer şekilde cebirsel bir ifadeye dönüştürülebilir:

$$\varepsilon^{-1}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}'} \beta_{\mathbf{G}'} e^{i\mathbf{G}'\cdot\mathbf{r}} \quad (3.7)$$

Burada $\beta_{\mathbf{G}'}$, sabit Fourier katsayılarıdır. Bu ifade Eş. 3.6'da yerine konursa;

$$-\sum_{\mathbf{G}'} \sum_{\mathbf{G}} \beta_{\mathbf{G}'} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}+\mathbf{G}')\cdot\mathbf{r}} (\mathbf{k} + \mathbf{G} + \mathbf{G}') \times \{(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \mathbf{h}_{\mathbf{G}}\} = \frac{\omega^2}{c^2} \sum_{\mathbf{G}} \mathbf{h}_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} \quad (3.8)$$

yazılabilir. Verilen vektör özdeşlik (Eş. 3.5) ve $\mathbf{G}' \rightarrow \mathbf{G}' - \mathbf{G}$ dönüşümü yardımıyla,

$$\sum_{\mathbf{G}} \sum_{\mathbf{G}'} \beta_{\mathbf{G}'-\mathbf{G}} (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \{(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \mathbf{h}_{\mathbf{G}'}\} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}')\cdot\mathbf{r}} = -\sum_{\mathbf{G}} \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{h}_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} \quad (3.9)$$

şeklinde sadeleştirilmiş cebirsel ifade elde edilir. Yukarıdaki eşitliğin tüm düzlem dalga önerileri için sağlanabilmesi, eşitliğin her iki tarafındaki \mathbf{G} üzerinden toplamların içerisindeki ifadelerin birbirine eşit olmasını gerektirir:

$$-\sum_{\mathbf{G}'} \beta_{\mathbf{G}'-\mathbf{G}} (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \times \{(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \mathbf{h}_{\mathbf{G}'}\} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{h}_{\mathbf{G}} \quad (3.10)$$

Manyetik alanın enine olma koşulu (manyetik alan için Gauss yasası) Eş. 3.3'te verilen çözüm önerisi için (Sakoda 2001);

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{H}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= 0 \\ \sum_{\mathbf{G}'} \nabla \cdot (\mathbf{h}_{\mathbf{G}'} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}')\cdot\mathbf{r}}) &= 0 \\ \Rightarrow (\mathbf{k} + \mathbf{G}') \cdot \mathbf{h}_{\mathbf{G}'} &= 0; \quad \forall \mathbf{G} \end{aligned} \quad (3.11)$$

şeklinde yazılır. Eninelik koşulu Eş. 3.11'de $\mathbf{A} \times \mathbf{B} \times \mathbf{C} = \mathbf{B}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})$ vektör özdeşliği ile birlikte kullanılarak düzlem dalga çözüm önerileri için,

$$\sum_{\mathbf{G}'} \beta_{\mathbf{G}'-\mathbf{G}} \{(\mathbf{k} + \mathbf{G}') \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{G})\} \mathbf{h}_{\mathbf{G}'} = \frac{\omega^2}{c^2} \mathbf{h}_{\mathbf{G}} \quad (3.12)$$

elde edilir.

Yukarıdaki işlemler sonunda, diferansiyel operatörler içeren ana denklem (Eş. 2.10) cebirsel bir denkleme dönüştürülmüştür. Böylece, verilen bir \mathbf{k} dalga vektörü için açısız

frekans deęerleri, $\omega_n(\mathbf{k})$, bu cebirsel ifadenin özölmesiyle belirlenebilir. İşlemler, indirgenemez Brillouin bölgesi (Bkz. Şekil 2.5 ve Şekil 2.7) içerisindeki tüm dalga vektörleri için uygulanarak sistemin band yapısı elde edilir (Ho vd 1990).

DDA yönteminin özellięi, Eş. 3.12'de açıkça görüldüęü gibi, hesaplarda EM alanın vektörel yapısının göz önünde bulundurulmasıdır.

$\boldsymbol{\kappa} = \mathbf{k} + \mathbf{G}$ dalga vektörüne dik iki birim vektör ařaęıdaki gibi seçilebilir (Pendry 1996):

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{n}}_s &= \frac{[(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \hat{\boldsymbol{\eta}}]}{\sqrt{[(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \hat{\boldsymbol{\eta}}] \cdot [(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \hat{\boldsymbol{\eta}}]}} \\ \hat{\mathbf{n}}_p &= \frac{[(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \hat{\boldsymbol{\eta}}]}{\sqrt{[(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \hat{\boldsymbol{\eta}}] \cdot [(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times (\mathbf{k} + \mathbf{G}) \times \hat{\boldsymbol{\eta}}]}}\end{aligned}\quad (3.13)$$

Burada $\hat{\boldsymbol{\eta}}$, keyfi olarak da seçilebilen fakat genellikle incelenen yapının yüzeyine dik birim vektördür. $\hat{\mathbf{n}}_s$, $\hat{\mathbf{n}}_p$ ve $\mathbf{k} + \mathbf{G}$ vektörleri birbirlerine diktir ve saę el sistemi oluřtururlar (Sakoda 2001):

$$\{\hat{\mathbf{n}}_s, \hat{\mathbf{n}}_p, \frac{\mathbf{k} + \mathbf{G}}{|\mathbf{k} + \mathbf{G}|}\} \quad (3.14)$$

Eş. 3.12 göz önünde bulundurulduęunda manyetik alanın Fourier bileřenleri tanımlanan birim vektörler cinsinden,

$$\mathbf{h}_G = h_G^s \hat{\mathbf{n}}_s + h_G^p \hat{\mathbf{n}}_p \quad (3.15)$$

şeklinde yazılabilir (Sakoda 2001). Eş. 3.12'deki ifade, verilen vektörel bileřenler de katılarak, matris şeklinde ařaęıdaki gibi yazılır:

$$\sum_{\lambda'=s}^p \sum_{\mathbf{G}'} M_k^{\lambda',\lambda}(\mathbf{G}',\mathbf{G}) h_{\mathbf{G}',n}^{\lambda'} = \frac{\omega_{\mathbf{k},n}^2}{c^2} h_{\mathbf{G},n}^{\lambda} \quad (3.16)$$

$$M_k^{\lambda',\lambda}(\mathbf{G}',\mathbf{G}) = \beta_{\mathbf{G}'-\mathbf{G}} |\mathbf{k} + \mathbf{G}'| |\mathbf{k} + \mathbf{G}| \times \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{n}}_p \cdot \hat{\mathbf{n}}'_p & -\hat{\mathbf{n}}_p \cdot \hat{\mathbf{n}}'_s \\ -\hat{\mathbf{n}}_s \cdot \hat{\mathbf{n}}'_p & \hat{\mathbf{n}}_s \cdot \hat{\mathbf{n}}'_s \end{bmatrix}$$

Elemanları $M_k^{\lambda',\lambda}(\mathbf{G}',\mathbf{G})$ olan $2N \times 2N$ elemanlı matris hermiyendir ve özdeğerleri diagonalizasyon işlemi ile elde edilir. Buna karşılık, 2 boyutlu problemlerde EM alan, Bölüm 2.7'de TE ($\mathbf{H} // \hat{\mathbf{n}}$) ve TM ($\mathbf{E} // \hat{\mathbf{n}}$) olarak adlandırılan doğrusal bağımsız kiplere ayrılabilir. Eş. 3.16'daki matris TE kipi için N boyutlu iken, TM kipi için $2N$ boyutludur. $N \times N$ elemanlı bir matrisin diagonalize edilmesinin N^3 ile orantılı işlem zamanı gerektirdiği düşünüldüğünde, 2 boyutlu problemde TE kipi için band yapısının daha hızlı elde edilebildiği görülür (Sakoda 2001).

DDA yöntemi ile band yapısı hesabında, herhangi bir \mathbf{k} vektörüne karşılık gelen $\omega_{\mathbf{k},n}$ ($n=1,2,3\dots$) öz frekanslarını bulmak için sonsuz sayıda \mathbf{G}' vektörü kullanılması gerekir. Sınırlı hesaplama olanaklarıyla bunu sağlamak mümkün değilse de uygulamada, istenilen hassaslıkta sonuçlar elde etmeye yetecek miktarda \mathbf{G}' vektörü kullanılır.

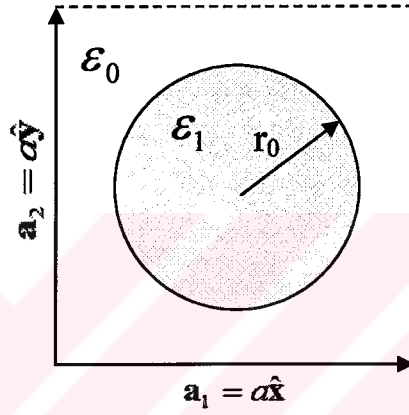
3.2.2. Yöntemin incelenen yapıya uygulanması

Bu kısımda Bölüm 3.2.1'de geliştirilen yöntem, boşlukta (ϵ_0) duran doğrusal, eşyönlü, türdeş ve dağıtmayan (dispersiyonsuz) r_0 yarıçaplı dielektrik silindirlere oluşan yapıya uygulanacaktır. Silindirler, örgü sabiti a olacak şekilde kare örgü düzeninde dizilmişlerdir (Bkz. Şekil 2.19a).

Şekil 3.1'de ele alınan yapı için seçilen ilkel birim hücre (Wigner-Seitz hücresi) (Ashcroft ve Mermin 1976) görülmektedir. Dielektrik sabiti, hücre içerisinde silindirik simetriye sahiptir ve

$$\varepsilon(\mathbf{r}) = \begin{cases} \varepsilon_1 & r \leq r_0 \\ 1 & r > r_0 \end{cases} \quad (3.17)$$

şeklinde yazılabilir. Fonksiyonun sahip olduğu simetri ve basit bir ifadeyle verilmesi $\varepsilon^{-1}(\mathbf{G}' - \mathbf{G})$ Fourier bileşenlerinin bulunmasını kolaylaştırmaktadır. Tartışmanın ilerleyen bölümlerinde bu bileşenlerin incelenen yapı için analitik olarak hesaplanabileceği gösterilecektir.



Şekil 3.1. Çalışmada ele alınan fotonik kristalin Wigner-Seitz ilkel birim hücresi

İncelenen fotonik kristal için band yapısı, indirgenemez Brillouin bölgesinin sınırlarını oluşturan yüksek simetri doğrultularında hareket edilerek hesaplanacaktır (Bkz. Şekil 2.7).

Silindirik “atom” içeren birim hücrede $\varepsilon^{-1}(\mathbf{r})$ fonksiyonu için

$$\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{r})} = 1 + \left(\frac{1}{\varepsilon_1} - 1\right)S(\mathbf{r}) \quad (3.18)$$

$$S(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1; & r \leq r_0 \\ 0; & r > r_0 \end{cases}$$

yazılabilir ve Eş. 3.7’de verilen Fourier serisinin katsayıları,

$$\beta_G = \frac{1}{V} \int e^{-iG \cdot r} \varepsilon^{-1}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} \quad (3.19)$$

ifadesinden elde edilir. Burada V , 3 boyutlu yapıda birim hücre hacmini, 2 Boyutlu problemde ise, birim hücre alanını ifade etmektedir. Dielektrik sabiti yalnızca \mathbf{r} 'ye bağlı olup açısız bağımlılık içermediğinden, $\varepsilon^{-1}(\mathbf{r})$ fonksiyonunun Fourier bileşenleri bulunurken kutupsal koordinatlarda çalışmak yararlıdır. Bu bileşenler Eş. 3.18 ve Eş. 3.19'dan kutupsal koordinatlarda

$$\begin{aligned} \beta_G &= \frac{1}{V^{(2B)}} \int_{(2B)} e^{-iG \cdot r} \varepsilon^{-1}(\mathbf{r}) d^2 \mathbf{r} \\ &= \delta_{G,0} + \frac{1}{a^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_1} - 1 \right) \int_0^{r_0} r dr \int_0^{2\pi} e^{-iGr \cos \varphi} d\varphi \end{aligned} \quad (3.20)$$

olarak belirlenir.

Eşitliğin son satırındaki ifade integral içerisindeki terimin tam sayı mertebeli Bessel fonksiyonları için üretici fonksiyona olan benzerliği kullanılarak (Arfken 1976),

$$\begin{aligned} \beta_G &= \delta_{G,0} + \frac{1}{a^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_1} - 1 \right) \int_0^{r_0} r dr \int_0^{2\pi} d\varphi \sum_n J_n(Gr) e^{in(\varphi - \pi/2)} \\ &= \delta_{G,0} + \frac{2\pi}{a^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_1} - 1 \right) \int_0^{r_0} r J_0(Gr) dr \end{aligned} \quad (3.21)$$

yazılabilir. Son olarak, Bessel fonksiyonları arasındaki türevsel ilişkiden yararlanılarak,

$$\beta_G = \delta_{G,0} + \frac{2\pi r_0^2}{a^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_1} - 1 \right) \frac{J_1(Gr_0)}{Gr_0} \quad (3.22)$$

elde edilir (Sakoda 2001). Eş. 3.22'de verilen ifade, β_G katsayılarının ve dolayısıyla, band yapısının verilen bir kristal için analitik olarak hesaplanabileceğini göstermektedir.

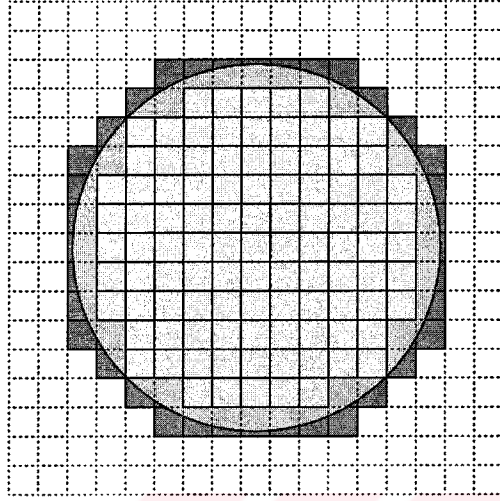
Yapılması gereken, yalnızca yeterli sayıda \mathbf{G} vektörü seçerek Eş. 3.16'daki matrisi oluşturup diagonalize etmektir.

3.2.3. DDA yönteminin zayıflıkları

DDA yöntemi, periyodik dielektrik yapıların band yapılarının eldesi için güçlü ve hızlı bir yöntem olmasına karşın, dielektrik sabitinde çok sayıda süreksizlik gözlenen durumlarda duyarlı sonuçlar eldesi çok sayıda, $O(10^3)$, \mathbf{G} vektörü seçilmesine bağlıdır (Sakoda 2001). Böyle yapılar için ayrıca, dielektrik sabitinin Fourier bileşenleri Hızlı Fourier Dönüşümü (FFT) ile belirlenmek isteniyorsa, yeterince çok bölmeli kafes seçimi istenilen duyarlılıkta sonuçlar elde etmek için zorunludur. Bunun yanında, birim hücre içerisinde dielektrik dağılımının belirli bir simetri sergilemediği durumlarda, Fourier bileşenlerinin analitik belirlenmesi oldukça güçleşmekte ve FFT gibi sayısal yöntemlere başvurulması gerekmektedir. Bu da, beraberinde sayısal hataları getirmektedir. Örneğin, incelenen yapının birim hücresi ve bu birim hücreyi bölümlendiren kafes, Şekil 3.2'de gösterilmiştir. Şekilde gri renkle gösterilen dielektrik malzeme tamamı malzemenin içinde kalan daha açık renkli karelerle temsil edilirse, malzemenin tümünün hesaba katılamaması sorunu ortaya çıkmaktadır. Buna karşın, malzemeyi dıştan temsil eden koyu bölgenin seçimi ise, malzemenin tümünü hesaba katmasına karşın, sınırlarda dielektrik sabitinin yanlış hesaplanmasına yol açmaktadır. Bu sayısal hatayı en aza indirmek için, kafes seçimi problemin geometrik yapısı göz önünde bulundurularak yapılmalıdır.

DDA yönteminin uygulama alanlarını kısıtlayan ikinci bir sorun, yöntemin yalnızca kayıpsız, doğrusal, eşyönlü ve dağıtmayan yapılar için güvenilir sonuçlar vermesidir. Örneğin, Eş. 2.10'da $\Theta = \nabla \times \{\varepsilon^{-1}(\mathbf{r})\nabla \times\}$ operatörünün özdeğerlerinin gerçel olması, yapının kayıpsız bir yapı olmasına bağlıdır (RSoft, 2005a). Ayrıca, doğrusal olmayan durumlarda dielektrik sabiti elektrik alanın fonksiyonu olduğundan, Eş. 2.10 böyle yapılar için doğrusal olmayan bir türevsel denkleme dönüşür ve bu durumda dielektrik sabitinin Fourier bileşenlerinin belirlenmesi elektrik alan dağılımı bilinmediğinden olanaksızlaşır. Denklemin çözümü olan EM alan kiplerinin belirlenmesi ise, dielektrik sabitinin Fourier bileşenlerinin bilinmesine bağlıdır. Bütün bunlar, DDA yönteminin

doğrusal olmayan fotonik kristallerin band yapılarının eldesi için uygun yöntem olmadığını göstermektedir.



Şekil 3.2. Birim hücrenin kafeslendirilmesinde karşılaşılan sayısal zorluk

Yukarıda anlatılan zorluklar, doğrusal olmayan fotonik kristaller için DDA yönteminin kullanılmasını imkansız kılmaktadır. Bu yüzden yöntem, çalışmada yalnızca doğrusal durumlar için band yapısı eldesinde kullanılacaktır. DDA ile elde edilen sonuçlar, doğrusal ve doğrusal olmayan durumlarda FDTD'ye dayalı band yapısı hesaplarının sınanması için referans olarak kullanılacaktır.

3.3. Zamanda Sonlu Farklar (FDTD) Yöntemi

3.3.1. Temel fikir

Zamanda Sonlu Farklar (FDTD) yöntemi, Maxwell dolanım denklemlerinin elektrik ve manyetik alan için zamanda çözümlerine dayanır. Yöntem, dolanım denklemlerindeki zaman ve konuma göre türevlere sonlu farklarla yaklaşım yapılmasını sağlar. FDTD yöntemi ile verilen bir ortam için elektrik ve manyetik alanların her ikisinin de zamanla değişimi izlenebilmektedir. Bu özelliği ile FDTD, son

bir kaç on yılda elektrodinamik problemlerinin sayısal çözümleri için başvurulan en yaygın yöntemlerden biri olmuştur.

Sonlu farklar yaklaşımı ile türevsel denklemlerin cebirsel denklemlere dönüştürülebilmesi, FDTD yöntemini kayıplı, doğrusal ve eşyönlü olmayan ortamlar ile EM alanın etkileşiminin simülasyonu için uygun bir aday yapmaktadır. FDTD ayrıca, sayısal güvenilirliği ile de dikkat çeken bir yöntemdir. Yöntemin uygulanmasında karşılaşılan sayısal hata, çalışılan ortamın kafeslendirilmesinde kullanılan hücrelerin boyutlarına bağlıdır ve hücrelerin doğru seçimiyle kesinliği yüksek sonuçlar elde edilmektedir.

FDTD yöntemi ile elektromanyetik alan bileşenlerinin malzeme içerisinde zamanla değişiminin belirlenmesi, yöntemin fotonik band yapısı eldesi için uygun olmadığı izlenimini uyandırır da, yöntemin basit uyarlamalarla fotonik kristallerin band yapısı hesabında kullanılabilceği gösterilmiştir (Chan vd 1995). FDTD böylece, doğrusal olmayan fotonik kristallerin band yapılarının eldesi için son yıllarda yaygın olarak kullanılır olmuştur (Tran 1995, Huttunen ve Törma 2001, Maksymov vd 2004).

3.3.2. Diferansiyel denklemlerin sonlu farklarla sayısal çözümü

Sonlu farklar yöntemi, türevsel denklemlerin sayısal çözümünde yaygın kullanılan bir yöntemdir. Bu kısımda yöntemin matematiksel temelleri oluşturularak, sayısal hesaplamalar için uygunluğu tartışılacaktır.

Tek değişkenli ve verilen aralıkta sürekli olan $f(x)$ fonksiyonunun $x + \Delta x$ noktasındaki Taylor açılımı

$$f(x + \Delta x) = f(x) + \Delta x \frac{df}{dx} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} + \dots = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\Delta x)^m}{m!} \frac{d^m f}{dx^m} \quad (3.23)$$

şeklinde yazılır. Bu eşitlik düzenlenerek, fonksiyonun x noktasındaki türevi için

$$\frac{df}{dx} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} + O(\Delta x) \quad (3.24)$$

yazılabilir. Eşitlikte $O(\Delta x)$, yüksek dereceli terimler toplamının Δx ile orantılı değiştiğini ifade etmektedir. $f(x)$ fonksiyonunun birinci türevi eşitliğin sağındaki birinci terimle yaklaştırılmak istenirse işlem sonucunda yapılacak hata, Δx ile orantılı olacaktır (Bootton 1992). Aynı fonksiyonun $x - \Delta x$ noktasındaki Taylor açılımı Eş. 3.23'ten çıkarılırsa,

$$f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x) = 2\Delta x \frac{df}{dx} + 2 \frac{(\Delta x)^3}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} + \dots \quad (3.25)$$

elde edilir. Eşitliğin incelenmesiyle birinci türev için

$$\frac{df}{dx} = \frac{1}{2} \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{\Delta x} + O((\Delta x)^2) \quad (3.26)$$

şeklinde yeni bir yaklaşım geliştirilebilir. Bu durumda yapılan hata $(\Delta x)^2$ ile orantılıdır. $\Delta x \rightarrow 0$ iken hata, $O((\Delta x)^2)$, sifira daha hızlı yaklaşacaktır. Eş. 3.23 ve Eş. 3.25'te Taylor açılımları sırasıyla $x + 1/2\Delta x$ ve $x - 1/2\Delta x$ noktalarında da yapılabilir ve birinci türev için

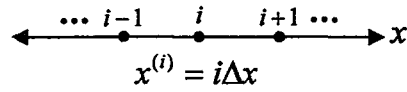
$$\frac{df}{dx} \cong \frac{f(x + \frac{1}{2}\Delta x) - f(x - \frac{1}{2}\Delta x)}{\Delta x} \quad (3.27)$$

elde edilir.

Skaler bir fonksiyonun birinci türevine yukarıda anlatılan yöntemle yaklaşım yapılmasına, *merkezi sonlu farklarla yaklaşım* denir ve FDTD yöntemi böyle bir yaklaşım içerir (Taflove ve Hagness 2000). Aynı yöntem izlenerek fonksiyonun ikinci türevi için de merkezi farklar yaklaşımı yapılabilir:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} = \frac{f(x + \frac{1}{2}\Delta x) - 2f(x) + f(x - \frac{1}{2}\Delta x)}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2) \quad (3.28)$$

Tek deęişkenli $f(x)$ fonksiyonunun türevlerine sonlu farklarla yaklařtırım yapılırken, x deęişkeni kesikli ve x eksenini de Δx aralıklarla sıralanmış noktalardan oluşuyor kabul edilir (Şekil 3.3). Fonksiyon deęerleri bu ayrıkt noktalarda hesaplanarak türevsel ifadede yerine konur (Booton 1992).



Şekil 3.3. Deęişken ekseninin merkezi sonlu farklar için bölümlendirilmesi

Merkezi sonlu farklarla yaklařım, skaler fonksiyonlar içeren türevsel ifadelere uygulanabileceęi gibi, vektörel fonksiyonlar içeren ifadelere de uygulanabilir. $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = (A_x, A_y, A_z)$ verilen aralıkta sürekli, konuma baęlı bir fonksiyon olsun. Fonksiyonun diverjansı,

$$\begin{aligned} \bar{\nabla} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}) &= \frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z} \\ &\cong \frac{A_x(x + \frac{1}{2}\Delta x) - A_x(x - \frac{1}{2}\Delta x)}{\Delta x} \\ &\quad + \frac{A_y(y + \frac{1}{2}\Delta y) - A_y(y - \frac{1}{2}\Delta y)}{\Delta y} \\ &\quad + \frac{A_z(z + \frac{1}{2}\Delta z) - A_z(z - \frac{1}{2}\Delta z)}{\Delta z} \end{aligned} \quad (3.29)$$

şeklinde yazılabilir.

Bu kısımda anlatılan bilgiler, Bölüm 3.3.3'te türevsel Maxwell denklemlerinin merkezi sonlu farklarla yaklaşımını için kullanılacaktır.

3.3.3. Maxwell denklemlerinin sonlu farklar yöntemiyle yazılması

Bölüm 3.3.2'de geliştirilen yöntem, Maxwell denklemlerinin merkezi sonlu farklarla yazılması için kullanılabilir. Faraday ve Ampere yasaları eş yönlü, kayıpsız ($\sigma = 0$), dağıtmayan, serbest yük ve akım yoğunluklarının bulunmadığı manyetik olmayan ($\rho = 0, \mathbf{J} = 0, \mu = \mu_0$) bir ortam için SI birim sisteminde sırasıyla,

$$\vec{\nabla} \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (2.4-c)$$

$$\vec{\nabla} \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{\partial \mathbf{D}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (2.4-d)$$

şeklinde yazılmıştı. Bu denklemlerin çözümü olan alanların kartezyen koordinat sisteminde x bileşeni,

$$\mu_0 \frac{\partial H_x(x, y, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial E_z(x, y, z, t)}{\partial y} - \frac{\partial E_y(x, y, z, t)}{\partial z} \quad (3.30)$$

$$\frac{\partial D_x(x, y, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial H_y(x, y, z, t)}{\partial z} - \frac{\partial H_z(x, y, z, t)}{\partial y} \quad (3.31)$$

olarak elde edilir. Aynı koordinat sisteminde yer değiştirme ve elektrik alanı arasındaki kurucu ilişki (Eş. 2.5-a),

$$D_l(x, y, z, t) = \epsilon_0 \epsilon(x, y, z) E_l(x, y, z, t); \quad l = x, y, z \quad (3.32)$$

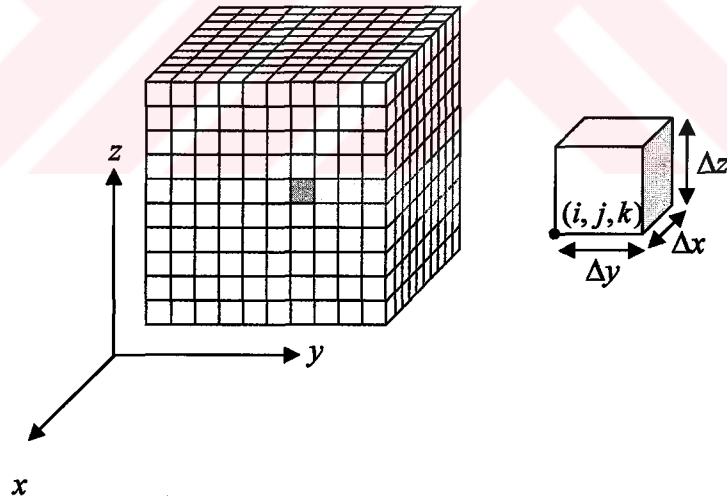
ifadesiyle verilir.

Eş. 3.30 ve Eş. 3.31'deki zaman ve konuma bağlı türevsel ifadelerle merkezi sonlu farklarla aşağıdaki gibi yaklaşım yapılır:

$$H_x|_{i,j,k}^{n+1/2} - H_x|_{i,j,k}^{n-1/2} = \frac{1}{\mu_0} \Delta t \left[\frac{E_z|_{i,j+1/2,k}^n - E_z|_{i,j-1/2,k}^n}{\Delta y} - \frac{E_y|_{i,j,k+1/2}^n - E_y|_{i,j,k-1/2}^n}{\Delta z} \right] \quad (3.33)$$

$$D_x|_{i,j,k}^{n+1/2} - D_x|_{i,j,k}^{n-1/2} = \Delta t \left[\frac{H_y|_{i,j,k+1/2}^n - H_y|_{i,j,k-1/2}^n}{\Delta z} - \frac{H_z|_{i,j+1/2,k}^n - H_z|_{i,j-1/2,k}^n}{\Delta y} \right] \quad (3.34)$$

Burada, uzayın $x^{(i)} = i\Delta x$, $y^{(j)} = j\Delta y$ ve $z^{(k)} = k\Delta z$ olmak üzere i , j ve k tam sayıları ile indislenen dikdörtgenler prizması şeklindeki birim hücrelere bölüldüğü kabul edilmiştir (Şekil 3.4). Ayrıca zamanda da, n bir tamsayı olmak üzere, $t^{(n)} = n\Delta t$ olmak üzere Δt adımlarla ilerlendiği varsayılmıştır.



Şekil 3.4. Maxwell dolaşım denklemlerinin merkezi sonlu farklarla yazılması için kullanılan kafes

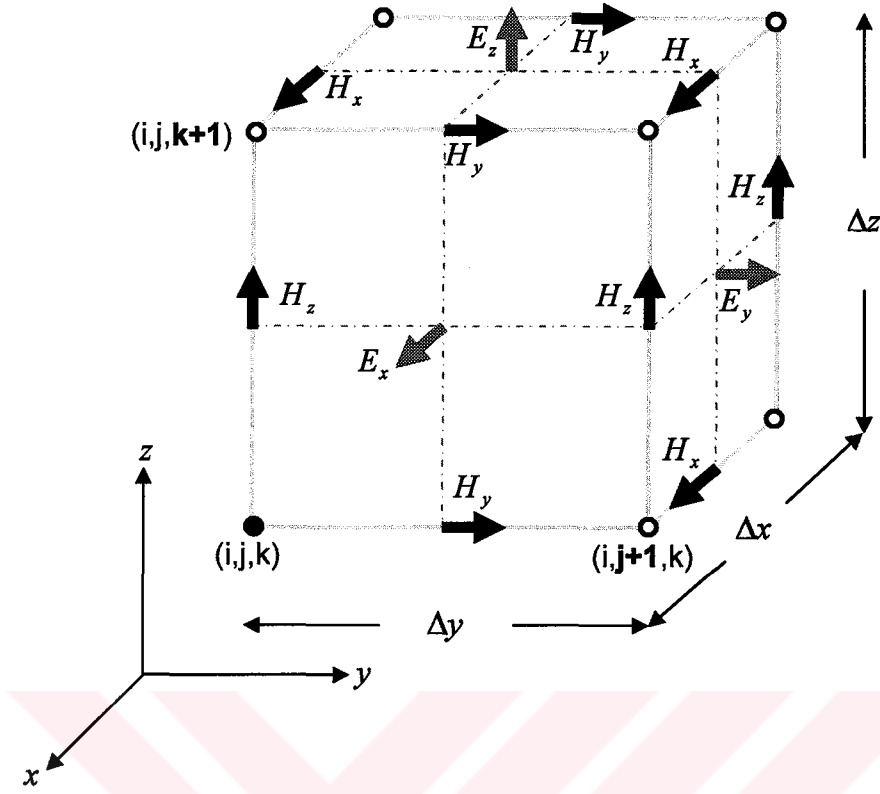
Verilen bir ortam için EM alan çözümlerinin FDTD yöntemi ile sayısal olarak belirlenmesi Eş. 3.33 ve Eş. 3.34'te görülen sonlu fark ifadelerinin uygun bir kafes

üzerinde hesaplanmasına bağlıdır. Burada bütün alan bileşenlerinin aynı noktada ve zaman diliminde hesaplanması dikkat çekmektedir. Dolanım noktasal operatör olduğundan, bu seçim doğal görünmektedir. Ancak bu seçim, EM alan bileşenlerinin tüm hesaplama uzayında zamanla değişimini bilgisayar hesaplamaları ile belirlemek için uygun değildir.

3.3.4. Yee hücresi

FDTD yöntemi ile elektrodinamik problemlerin çözümlerine, hesaplama uzayının Şekil 3.5'te görülen hücrelerle kapsanmasıyla başlanır. Şekilde, alan bileşenleri aynı noktada tanımlanmamaktadır: Manyetik alan bileşenleri kenarlarda ve elektrik alan bileşenleri ise yüzlerde tanımlıdır. Bileşenler, birbirlerine göre $\Delta x/2$, $\Delta y/2$ ve $\Delta z/2$ kadar kaymıştır. Böylece, her elektrik alan bileşeni çevresinde dolanan dört manyetik alan bileşeniyle ve her manyetik alan bileşeni de dört elektrik alanı bileşeniyle çevrelenir. Bu seçim, dolanım ifadelerinin merkezi sonlu farklarla yaklaştırımı için uygundur. Hesaplama uzayını kaplayan bu hücrelere *Yee hücresi* adı verilir (Taflove ve Hagness 2000).

Yee hücresince kapsanan hacim içerisinde alan bileşenlerinin sabit kaldığı, ya da en azından doğrusal değiştiği, varsayılır. Bu, ortam için seçilen kafeste dielektrik sabitinin herhangi bir hücre içerisinde sabit kaldığı durumlar için oldukça iyi bir varsayımdır. Yee, yöntemi geliştirirken küp şeklinde özdeş hücreler kullanmıştır (Yee 1966). Ancak, karmaşık geometriye sahip ve dielektrik sabitinde keskin değişimlerin gözlendiği yapılarda *uyarlanabilir kafes* uygulamaları geliştirilmiştir. Örneğin, incelenen fotonik kristal yapı için (Bkz. Şekil 3.2) silindir kenarına yakın bölgelerde daha küçük, dielektrik sabitinin değişmediği iç ve dış bölgelerde ise daha büyük Yee hücrelerinden oluşan uyarlanabilir kafes kullanılabilir.



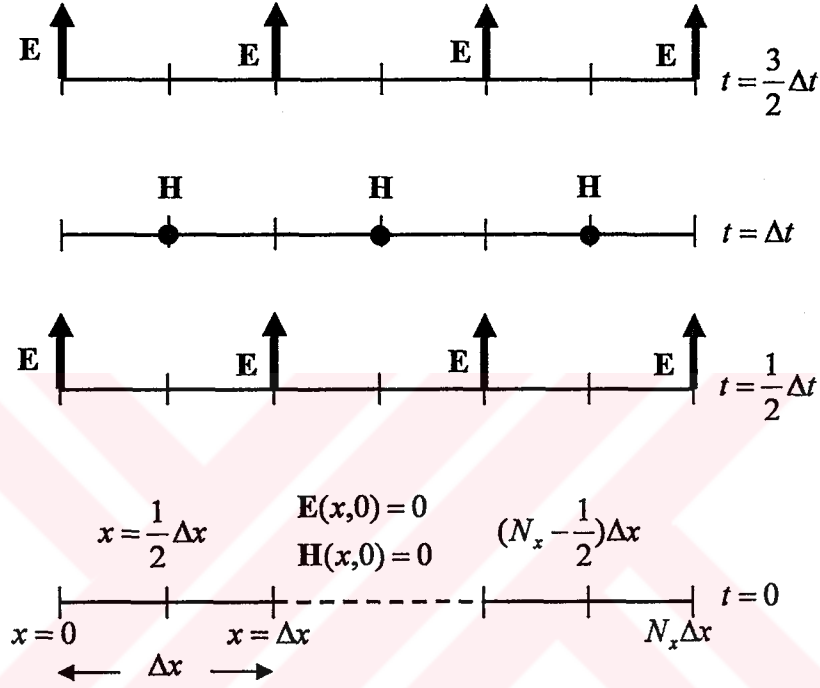
Şekil 3.5. FDTD yönteminin yapıtaşı olan Yee hücresi

Yee hücresi tasarımı, ayrıca, serbest yüklerin bulunmadığı ortamda elektrik ve manyetik alan için enine olma koşullarını ($\vec{\nabla} \cdot \mathbf{D} = 0, \vec{\nabla} \cdot \mathbf{H} = 0$) da içinde barındırmaktadır. Şekil 3.5'te $\Delta x, \Delta y, \Delta z \rightarrow 0$ limit durumunda elektrik ve manyetik akıların ayrı ayrı sıfıra eşit olduğu açıkça görülmektedir. Bunun yanında, iki farklı malzemenin arayüzünü oluşturan komşu Yee hücrelerinin, manyetik alanın teğet bileşeninin ve elektrik alanının dik bileşeninin süreklilik koşullarını sağladığı da görülmektedir (Taflove ve Hagness 2000).

3.3.5. Zamanda adımlama

FDTD yönteminde, Maxwell dolanım denklemlerindeki zamana göre türevlerin merkezi sonlu farklarla yaklaşımı için, elektrik ve manyetik alan bileşenlerinin zaman içerisinde de birbirlerine göre ötelendikleri kabul edilir. Zaman Δt adımlarla ilerliyorsa,

manyetik alan bileşenleri zaman adımının tam katlarında, elektrik alan bileşenleri de zaman adımının yarım katlarında hesaplanır. Bu yöntem, *sek sek algoritması* olarak adlandırılır (Taflove ve Hagness 2000, Sullivan 2000). Sek sek algoritmasının işleyişi 1 boyutlu bir sistemde ilerleyen elektromanyetik dalga problemi için Şekil 3.6'da gösterilmiştir:



Şekil 3.6. Sek sek algoritmasının 1 boyutlu sistemin EM alan çözümlerinin bulunmasında uygulanması

Yee hücrelerinin $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \xi$ kenar uzunluklarına sahip özdeş küpler ve zaman adımının Δt olarak seçilmesiyle, Eş. 2.4-c ve Eş. 2.4-d'de yazılan Faraday ve Ampere yasalarındaki manyetik alanın ve yer değiştirme alanının x bileşenleri sırasıyla,

$$H_x \Big|_{i-1/2,j,k}^{n+1} = H_x \Big|_{i-1/2,j,k}^n + \frac{\Delta t}{\mu_0 \xi} \left[\begin{aligned} & \left(E_z \Big|_{i-1/2,j+1/2,k}^{n+1/2} - E_z \Big|_{i-1/2,j-1/2,k}^{n+1/2} \right) \\ & - \left(E_y \Big|_{i-1/2,j,k+1/2}^{n+1/2} - E_y \Big|_{i-1/2,j,k-1/2}^{n+1/2} \right) \end{aligned} \right] \quad (3.35)$$

$$D_x \Big|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} = D_x \Big|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\xi} \left[\begin{array}{l} \left(H_y \Big|_{i,j+1/2,k+1}^n - H_y \Big|_{i,j+1/2,k}^n \right) \\ - \left(H_z \Big|_{i,j,k+1/2}^n - H_z \Big|_{i,j+1,k+1/2}^n \right) \end{array} \right] \quad (3.36)$$

olarak bulunur. Yer deęiřtirme ve elektrik alanı arasındaki kurucu iliřki de,

$$E_x \Big|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{D_x \Big|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2}}{\epsilon \Big|_{i,j+1/2,k+1/2}^{n+1/2}} \quad (3.37)$$

ile verilir.

FDTD yöntemi ile yapılan hesaplamalarda bařlangıç kořulu olarak genellikle $t = 0$ anında ve öncesinde bütün alan bileřenleri sıfıra eřitlenerek ortama uyarı gönderilir. Daha sonra, Eř. 3.36'dan yer deęiřtirme alanı $\Delta t / 2$ anında hesaplanarak Eř. 3.37'de elektrik alanının bulunmasında kullanılır. Hesaplanan elektrik alanı bellekte saklanarak, manyetik alanın Δt anındaki deęerini bulmada kullanılır. Hesaplanarak kaydedilen manyetik alan deęeri de yerdeęiřtirme ve elektrik alanlarının $3/2\Delta t$ anındaki deęerlerinin hesaplanmasında kullanılır. İřlem, daha sonraki zaman dilimleri için aynı sırayla devam eder. Böylece, alıřılan sistemin elektromanyetik alana zamansal tepkisinin izlenmesi saęlanır.

3.3.6. Kararlılık kořulu

FDTD yöntemi üzerine Bölüm 3.3.5'te verilen bilgiler, incelenen yapı için kafesin $(\Delta x, \Delta y, \Delta z)$ ve zaman adımının (Δt) istenilen sayısal duyarlılıęı saęlamak üzere herhangi bir sınırlama olmadan seilebileceęi izlenimini uyandırmaktadır. Ancak, kararlı sonuçların eldesi bařlangıta kabul edilen varsayımın doęruluęuna baęlıdır. Őekil 3.6'da görölen 1 boyutlu yapı için elektrik ve manyetik alan bileřenleri x ekseninde $\Delta x / 2$ ve zamanda $\Delta t / 2$ aralıklarla tanımlanmıřtır. Bellekte saklanan elektrik/manyetik alan deęerleri aracılıęı ile bir sonraki zaman adımında bir noktadaki manyetik/elektrik alan bileřeninin doęru olarak bulunması, komřu noktadaki elektrik/manyetik deęerlerinde geen $\Delta t / 2$ sürede deęiřme olmamasına baęlıdır.

Elektrik/manyetik alandaki deęişimlerin bilgisi komşu noktalara ortamda ışığın boşluktaki hızından daha hızlı ulaşamaz. Bu yüzden kararlı çözümlerin eldesi, c EM dalganın boşluktaki hızı olmak üzere 1 boyutta,

$$\begin{aligned} c \frac{\Delta t}{2} &\leq \frac{\Delta x}{2} \\ \Rightarrow \Delta t &\leq \frac{\Delta x}{c} \end{aligned} \quad (3.38)$$

koşuluna baęlıdır (Sullivan 2000). 3 boyutta ise bu koşul,

$$\Delta t \leq \frac{1}{c \sqrt{\left(\frac{1}{\Delta x}\right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta y}\right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta z}\right)^2}} \quad (3.39)$$

ifadesi ile verilir. FDTD hesaplamalarında kararlı çözümler elde etmek için seçilebilecek zaman adımının üst sınırını belirlemek için ortaya konulan bu koşula *Courant kararlılık koşulu* adı verilir (Sullivan 2000). $\Delta x = \Delta y = \Delta z = \xi$ alınırsa Courant koşulu,

$$\Delta t \leq \frac{\xi}{c\sqrt{3}} \quad (3.40)$$

şeklinde yazılabilir.

Courant koşulu, FDTD yöntemiyle incelenen yapı için seçilen Yee hücrelerinin boyutlarının küçülmesi durumunda, zaman adımının da küçülmesi gerektiğini vurgular. Uygulamada, öncelikle yapıyı en iyi temsil eden kafes oluşturulup Yee hücrelerinin boyutları belirlenir. Bunun ardından, Courant koşulunu sağlayan en uygun zaman adımı seçilerek hesaplar yürütülür.

3.3.7. Sınır koşulları

Sonlu bilgisayar kaynakları, EM alanın malzeme ile etkileşiminin FDTD simülasyonunda hesaplama bölgesinin sınırlı tutulmasını gerektirir. Uzayın sınırlı bir bölgesinde tanımlı, malzemeyi tamamen kapsayan hesaplama bölgesinin sınırlarında elektrik ve manyetik alan değerlerinin hesaplanması, sınırın hemen dışındaki noktalarda alan değerlerinin bilinmesini gerektirir (Sullivan 2000). Bu güçlüğü ortadan kaldırmak için ortaya atılan sınır koşulları iki sınıfta incelenir: *türevsel* ve *malzeme sınır koşulları*. Türevsel sınır koşulları, dalga denkleminin hesaplama bölgesi sınırlarında yalnızca dışarıya doğru hareket eden çözümlere izin verecek şekilde düzenlenmesiyle oluşturulur. Malzeme sınır koşulları, hesaplama uzayı sınırının EM dalgayı soğuran *kurgusal* bir malzemeyle kaplanmasına dayanır (Shlager ve Schneider 1995). Tanımlanan kurgusal malzeme üzerine gelen EM dalgaları soğurduğundan, bu tür sınır koşullarına *Soğuran Sınır Koşulları* adı verilir (Taflove ve Hagness 2000).

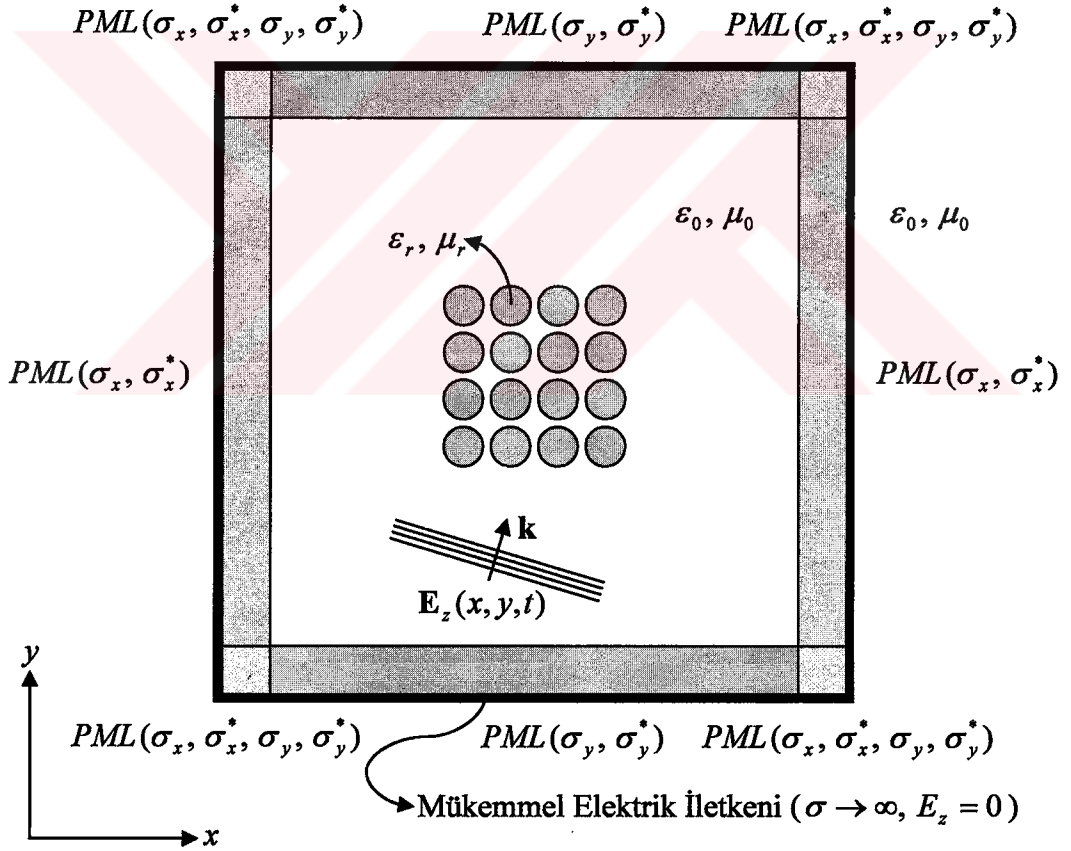
FDTD hesaplamalarında yaygın kullanılan soğuran sınır koşullarından biri, J. P. Berenger tarafından geliştirilen *Kusursuz Uyuşan Katman (Perfectly Matched Layer - PML)* sınır koşuludur (Berenger 1994). PML, hesaplama bölgesini çevreleyen sonlu, eşyönsüz elektrik (σ) ve manyetik (σ^*) iletkenliğe sahip kurgusal malzeme tanımlanmasını içerir. Tanımlanan kurgusal malzeme ile, Maxwell denklemlerine sönümlendirici terimler katılır. PML sınır koşulunun uygulanmasında amaç, sınıra ulaşan dalganın tüm frekans ve geliş açısı değerleri ve kutuplanma durumları için PML sınırından yansımanın yok edilmesidir (Sullivan 2000). PML içinde ise gelen dalga hızlı bir şekilde sönümlenir. Şekil 3.7'de PML'in 2 boyutlu bir probleme TM elektromanyetik alan kipi için uygulanması görülmektedir. Şekilde PML sınırının, *Mükemmel Elektriksel İletken* malzemeyle çevrildiği görülmektedir. Mükemmel elektriksel iletken içerisinde elektrik alanın teğet bileşeni (E_z) sıfır olmaktadır.

PML sınır koşulunun yaygın kullanılmasına karşın, bu çalışmada incelenen yapının periyodik oluşu Bloch koşulunu göz önünde bulundurmaya gerektirmektedir. Kenar uzunluğu a olan kare örgüdeki fotonik kristalde TM kipindeki alanın E_z bileşeni için Bloch koşulu

$$E_z(x+a, y) = e^{ik_x a} E_z(x, y) \quad (3.41)$$

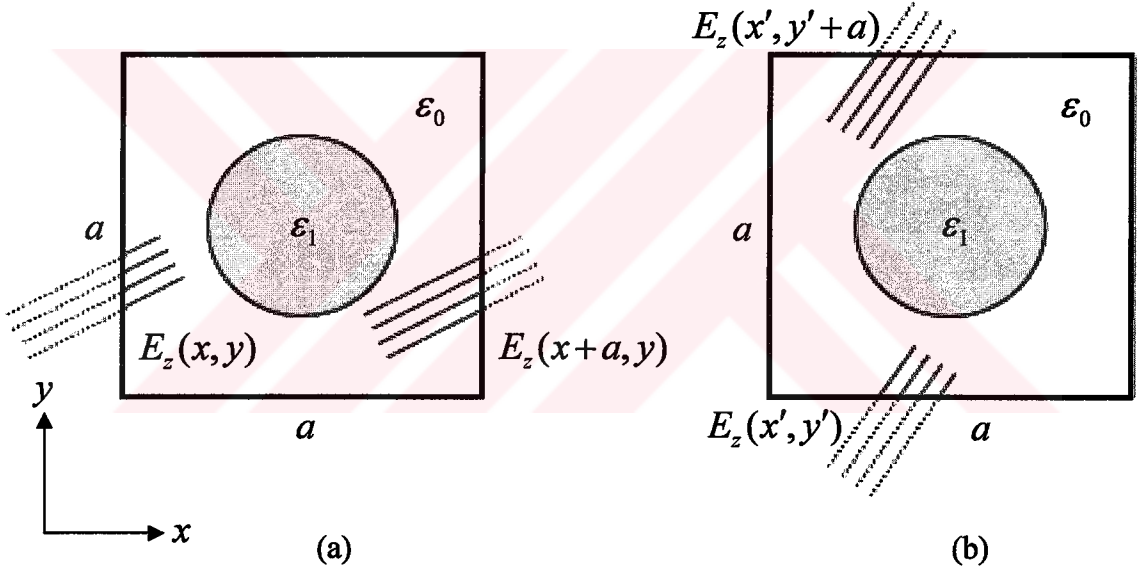
$$E_z(x, y+a) = e^{ik_y a} E_z(x, y) \quad (3.42)$$

şeklinde yazılabilir. Alan bileşenleri kristalin periyodikliğini taşıdığından, x veya y koordinatları birbirinden a kadar uzakta olan iki noktadaki alan değerleri, birbirlerinden yalnızca faz terimiyle ayrılmaktadır. Bu iki noktada asıl fiziksel önem taşıyan alan genlikleri eşit olmaktadır. Bu yüzden, periyodik bir yapıda FDTD hesabı yapılırken *Periyodik (Bloch) Sınır Koşulunun* kullanılması daha uygun bir seçimdir. Periyodik sınır koşulu sayesinde, yapının yalnızca bir birim hücresi ile çalışılabilmektedir.



Şekil 3.7. PML sınır koşulunun 2 boyutlu bir problemde TM kipi için FDTD simülasyonunda kullanılması (Taflove ve Hagness 2000)

Şekil 3.8’de periyodik sınır koşulunun incelenen yapıya uygulanması görülmektedir. Şekilde, TM kipinde uyarı varsayılmıştır. Eş. 3.41 incelendiğinde, Şekil 3.8a’daki durum anlaşılabilir: Periyodik sınır koşulunun uygulanmasıyla, birim hücreyi $(x + a, y)$ noktasından terkeden dalga, hücreye (x, y) noktasından geri dönmektedir. Benzer olarak, Eş. 3.42 yardımıyla Şekil 3.8b’de birim hücreyi $(x', y' + a)$ noktasından terkeden dalganın (x', y') noktasından hücreye tekrar girişi görülmektedir. İncelenen yapının FDTD band yapısı hesabında periyodik sınır koşulu kullanmanın bir başka yararı, uyarının taşıdığı gücün tamamının birim hücre içerisinde kalmasıdır. Böylece, doğrusal olmayan yapıda EM alan gücündeki değişimlerin band yapısına etkisi daha kolay incelenebilmektedir.



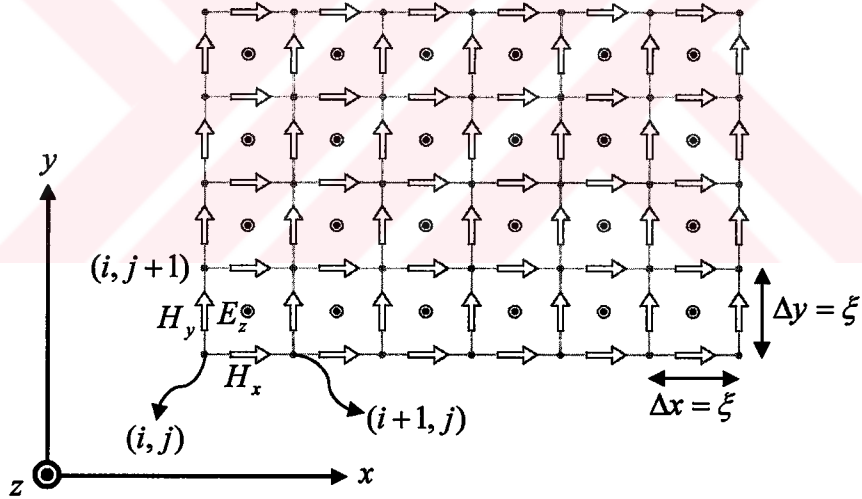
Şekil 3.8. İncelenen yapının FDTD band yapısı hesabında periyodik sınır koşulunun TM alan kipi için uygulanması

3.3.8. Yöntemin incelenen yapıya uyarlanması

FDTD yöntemi, Maxwell denklemlerinin çözümlerinin zamanla değişimlerinin doğrudan hesaplanmasını içerdiğinden, verilen bir yapı için frekans öz değerlerinin bulunmasında kullanılmaz. Ancak, hesaplama uzayında alan bileşenlerinin belirli bir

noktada zamanla deęişimleri kaydedilip bu verilere FFT uygulanarak yapı için öz deęerler frekans uzayında hesaplanabilir (Tran 1995, RSoft 2005b). DDA yönteminde olduęu gibi, indirgenemez Brillouin bölgesi içindeki her bir dalga vektörü için açısıl frekans özdeęerleri, $\omega_n(\mathbf{k})$, hesaplanarak band yapısı oluşturulur. FDTD yönteminin incelenen örgütün band yapısının eldesi için uyarlanması bu kısımda anlatılacaktır.

İncelenen fotonik kristal 2 boyutlu olduęundan, birim hücreyi tarayan Yee hücreleri 2 boyutlu kartezyen koordinatlarda tanımlanmalıdır. 2 boyutlu fotonik kristal için Yee hücreleri, xy düzleminde $\Delta x = \Delta y = \xi$ kenar uzunluklarına sahip özdeş karelerden oluşturulacaktır. Şekil 3.9’da seçilen Yee hücrelerinin geometrisi ve bu hücrelerde $TM (E_z, H_x, H_y)$ alan kipi için elektrik ve manyetik alan vektörlerinin yerleştirilmesi görülmektedir:



Şekil 3.9. 2 boyutlu fotonik kristal için seçilen Yee hücreleri ve TM çözümler için bu hücreler üzerine yerleştirilen alan bileşenleri

Görüldüęü gibi, her elektrik/manyetik alan bileşeni dört manyetik/elektrik alan bileşeniyle çevrelenmiştir. $TE (H_z, E_x, E_y)$ kipi için FDTD yöntemi uygulanırken şekildeki elektrik alan bileşenleriyle manyetik alan bileşenlerinin yerleri deęiştirilir.

Maxwell dolanım denklemleri 2 boyutlu yapıda TM kipi ($\mathbf{E} // \hat{\mathbf{z}}$) için,

$$\frac{\partial D_z(x, y, t)}{\partial t} = \frac{\partial H_y(x, y, t)}{\partial x} - \frac{\partial H_x(x, y, t)}{\partial y} \quad (3.43)$$

$$\frac{\partial H_x(x, y, t)}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E_z(x, y, t)}{\partial y} \quad (3.44)$$

$$\frac{\partial H_y(x, y, t)}{\partial t} = \frac{1}{\mu_0} \frac{\partial E_z(x, y, t)}{\partial x} \quad (3.45)$$

ve TE kipi ($\mathbf{H} // \hat{\mathbf{z}}$) için de,

$$\frac{\partial H_z(x, y, t)}{\partial t} = \frac{1}{\mu_0} \left[\frac{\partial E_y(x, y, t)}{\partial x} - \frac{\partial E_x(x, y, t)}{\partial y} \right] \quad (3.46)$$

$$\frac{\partial D_x(x, y, t)}{\partial t} = \frac{\partial H_z(x, y, t)}{\partial y} \quad (3.47)$$

$$\frac{\partial D_y(x, y, t)}{\partial t} = -\frac{\partial H_z(x, y, t)}{\partial x} \quad (3.48)$$

şeklinde yazılabilir. Problemin boyutunun 3'ten 2'ye indirilmesiyle, her iki kip için de daha yalın üç türevsel denklem elde edilmektedir. Yer değiştirme ve elektrik alanları arasındaki ilişki ise 2 boyutta TM ve TE kipler için sırasıyla,

$$E_z(x, y, t) = \varepsilon_0 \varepsilon(x, y) D_z(x, y) \quad (3.49)$$

$$E_{x,y}(x, y, t) = \varepsilon_0 \varepsilon(x, y) D_{x,y}(x, y) \quad (3.50)$$

ifadeleri ile verilmektedir. Eş. 3.49 ve Eş. 3.50'nin Maxwell denklemlerinde yerine konulmayıp ara basamakta hesaplanması, doğrusal olmayan yapıyla çalışılmasından kaynaklanmaktadır. Doğrusal olmayan durumda, TM kipi için Eş. 3.43, TE kipi için

Eş. 3.47 ve Eş. 3.48'den yerdeğiştirme alanı bileşen(ler)i hesaplamış Eş. 3.49 ve Eş. 3.50'den türetilen polinom eşitliğinin çözülmesiyle, elektrik alanı değerleri elde edilir ve manyetik alan bileşen(ler)i için hesaplamaya geçilir (Tran 1995).

TM alan kipi için yazılan Eş. 3.43 - Eş. 3.45, Yee hücresinde tanımlanan bileşenler için merkezi sonlu farklarla,

$$D_z \Big|_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} = D_z \Big|_{i+1/2, j+1/2}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\xi} \left[\begin{array}{l} (H_y \Big|_{i+1, j+1/2}^n - H_y \Big|_{i, j+1/2}^n) \\ - (H_x \Big|_{i+1/2, j+1}^n - H_x \Big|_{i+1/2, j}^n) \end{array} \right] \quad (3.51)$$

$$H_x \Big|_{i+1/2, j}^{n+1} = H_x \Big|_{i+1/2, j}^n - \frac{\Delta t}{\mu_0 \xi} \left[E_z \Big|_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} - E_z \Big|_{i+1/2, j-1/2}^{n+1/2} \right] \quad (3.52)$$

$$H_y \Big|_{i, j+1/2}^{n+1} = H_y \Big|_{i, j+1/2}^n + \frac{\Delta t}{\mu_0 \xi} \left[E_z \Big|_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} - E_z \Big|_{i-1/2, j+1/2}^{n+1/2} \right] \quad (3.53)$$

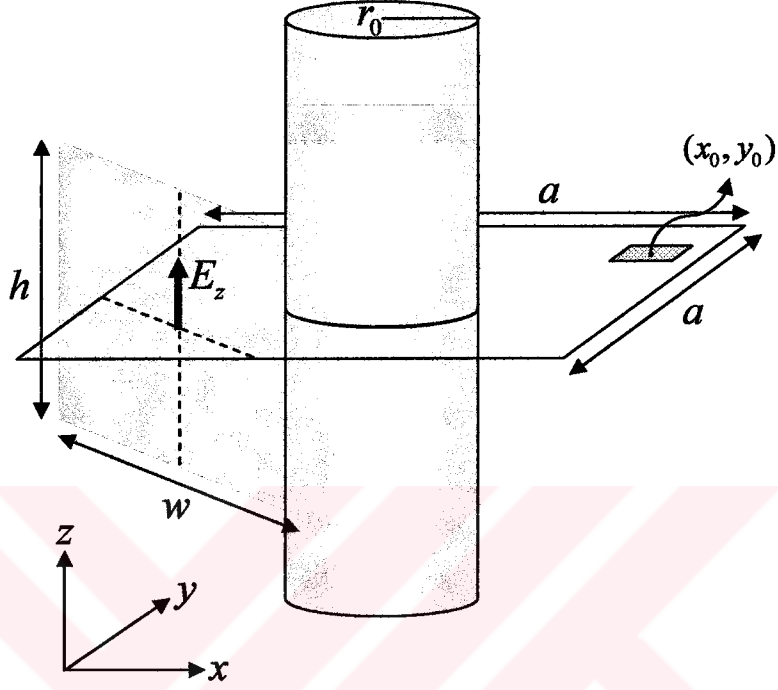
şeklinde yazılabilir. TE kipler için verilen Eş. 3.46 ve Eş. 3.48 ifadeleri de benzer şekilde yazılabilir. Kullanılan gösterimde kurucu ilişki,

$$E_z \Big|_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{D_z \Big|_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2}}{\xi \Big|_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2}} \quad (3.54)$$

halini alır.

2 boyutlu fotonik kristal için band yapısının FDTD yöntemi ile belirlenmesinde hesaplamalar, DDA hesaplarına benzer şekilde, tek bir birim hücre içerisinde periyodik sınır koşulları uygulanarak yapılır. Şekil 3.10'da r_0 yarıçaplı dielektrik silindiri xy düzlemine paralel kesen birim hücre görülmektedir. Birim hücre içerisindeki 2 boyutlu yapı, düzleme dik gönderilen TM kipindeki elektromanyetik dalga ile uyarılmaktadır. Hesaplama süresince E_z alan bileşeninin (x_0, y_0) noktasındaki zamanla değişimini kaydeden zamansal *gösterge* taralı olarak gösterilmiştir. Daha sonra, belirlenen dalga

vektörü için kaydedilen alan bileşeninin zamanla değişimine FFT uygulanarak frekans özdeğerleri elde edilir.



Şekil 3.10. FDTD yöntemi ile 2 boyutlu fotonik kristalin band yapısının eldesinde kullanılan düzenek

Birim hücreyi uyaran *TM* kipindeki düzlem dalga,

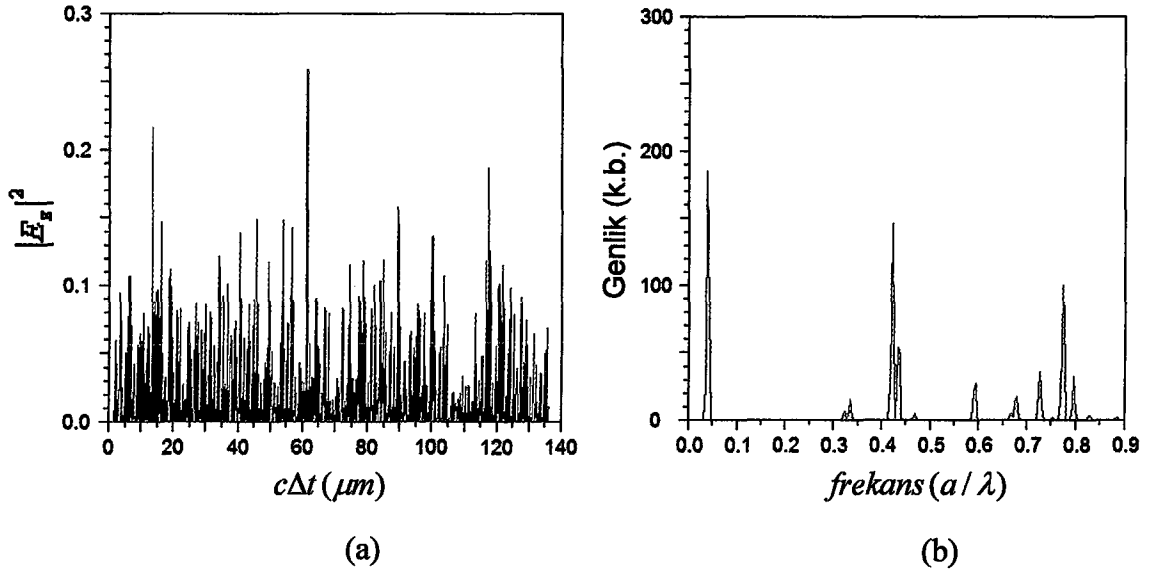
$$E_z(\mathbf{r}, t) = \exp[i(k_x x + k_y y)] \exp\left[-\left(\frac{t}{\tau} - t_d\right)^2\right] \sin(\omega t) \quad (3.55)$$

şeklinde yazılan tek renkli bir atmadır. Eşitlikte τ atma süresini, t_d ise atmanın gecikme süresini temsil etmektedir.

İncelenen yapının doğrusal davrandığı durumda hesaplanan band yapısı için zamansal göstergenin kaydettiği $|E_z|^2$ değerinin zamanla değişimi Şekil 3.11a'da görülmektedir. Bu verilerin FFT dönüşümünün alınmasıyla elde edilen frekans özdeğerleri de, Şekil 3.11b'de keskin pikler olarak dikkati çekmektedir.

Yukarıda anlatılan yöntemin kullanılması, FDTD'nin fotonik band yapısı hesabına uyarlanmasını sağlamaktadır. Burada, yalnız TM kipi için hesaplamaların anlatılmasına karşın TE kipi için de Eş. 3.46 - Eş. 3.48 yardımıyla band yapısı elde edilebilir. Yapılması gereken, Şekil 3.9'daki kafeste elektrik ve manyetik alan vektörlerinin yerini değiştirip birim hücreyi TE kutuplanmış bir düzlem dalgayla uyarmaktır.

FDTD band yapısı hesaplarında, $N \times N$ Yee hücresi kullanılıyorsa, bir zaman adımı için hesaplama zamanı $O(N)$ mertebesindedir. Bu yüzden fotonik band yapısı için uyarlanmış FDTD uygulaması, *N. Mertebe Yöntemi* olarak da adlandırılır (Chan vd 1995). Çalışmada, $2^m \times 2^m$ ($m = 1,2,3,\dots$) özdeş Yee hücresinden oluşan kafesler kullanılacaktır. Hesaplama alanındaki Yee hücresi sayısının ikinin kuvveti olması, hem FFT'nin uygulanması hem de doğrusal fotonik kristal için elde edilen sonuçların DDA yöntemi ile elde edilen sonuçlarla karşılaştırılması için uygundur.



Şekil 3.11. (a) 2 boyutlu fotonik kristalin FDTD band yapısı TM kipi için hesabında $|E_z|^2$ değerinin zamanla değişimi (b) Değişim verilerine FFT uygulanmasıyla elde edilen frekans öz değerleri

Şekil 3.12’de incelenen 2 boyutlu fotonik kristalin FDTD band yapısı hesabında izlenen yöntemin akış şeması görülmektedir. İşlemler şema üzerinde hazırlık, FDTD hesabı ve band yapısı eldesi olmak üzere üç temel kısımda incelenmektedir. Hazırlık aşamasında incelenen yapı tanımlanmakta ve bu yapıya uygun Yee hücreleri seçilmektedir. Yee hücrelerinin seçimiminin ardından, Courant koşuluna uyan zaman adımı seçilmektedir. FDTD simülasyonunun bitiş zamanının seçimiyle yapının önceden belirlenen düzlem dalga şeklindeki atmayla etkileşiminin FDTD ile incelenmesine başlanmaktadır.

FDTD hesabının ardından, zamansal göstergede saklanan alan bileşeninin zamanla değişim verisi üçüncü aşamaya (band yapısı eldesi) aktarılmaktadır. Bu aşamada, doğrusal durumda FFT ile elde edilen frekans öz değerleri DDA ile elde edilen band yapısıyla karşılaştırılmaktadır. Öz değerlerin DDA ile elde edilenlere yakınsamaması ya da bunlardan fazla/az sayıda özdeğer elde edilmesi durumunda, başa dönülerek Yee hücresi, zaman adımı, bitiş zamanı ve uyarının frekansı, süresi ve taşıdığı güç değiştirilip aynı adımlar DDA yöntemine yakınsayan sonuçlar elde edilene kadar

tekrarlanmaktadır. Tüm bu işlemler deneme-yanılma yoluyla yürütüldüğü için FDTD band yapısı hesabı DDA yöntemiyle karşılaştırıldığında çok daha uzun sürmektedir.

Doğrusal durum için DDA ile elde edilenlere yakınsayan sonuçların FDTD ile eldesinin ardından, doğrusal olmayan durumda hesaplara geçilmektedir. Doğrusal olmayan durum için akış şeması Şekil 3.12'de görülen şemadan tek bir fark taşımaktadır: Uyarının gücü düzenli olarak değiştirilip şekilde görülen yordam yinelenmektedir. Doğrusal olmayan durumda band yapısının kaynak gücüyle değişim verisinin eldesiyle sonuçlar, doğrusal durum ile karşılaştırılıp kaynak gücünün band yapısına etkisi yorumlanmaktadır.

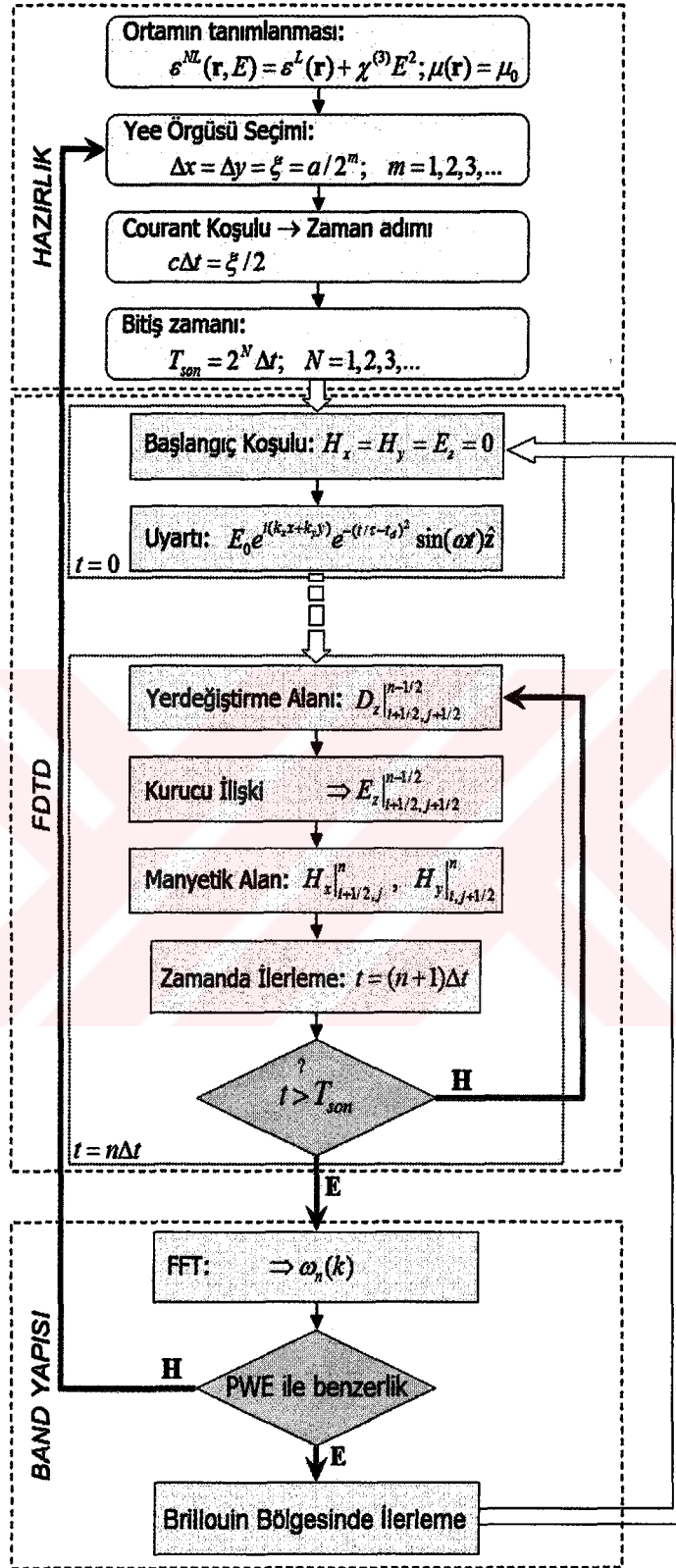
3.3.9. Yöntemin zayıf noktaları

FDTD yöntemi, EM alanın malzemeyle etkileşiminin incelenmesi için uygun olmasına rağmen, fotonik band yapısı eldesi için uyarlanmasında bazı zorluklarla karşılaşmaktadır. DDA yöntemine benzer şekilde, çalışılan ortamın uygun Yee hücreleriyle kaplanması yöntemin temel sorunlarından biridir. Yee hücreleri kartezyen koordinatlarda tanımlandığından, kıvrımlı yüzeylere sahip malzemelerin sınırlarında Şekil 3.2'de görülen zorlukla karşılaşmaktadır. Kare şeklinde seçilen Yee hücreleri malzemeyi sınırlarda iyi temsil edememektedir. FDTD bu nedenle, çok zaman harcayan bir yöntemdir. Bu yüzden, FDTD yöntemi ile fotonik band yapısı eldesi bilgisayarda DDA yöntemine göre çok daha uzun işlemci zamanı gerektirmektedir.

FDTD fotonik band yapısı hesabında karşılaşılan bir başka zorluk, yöntemin çakışıklıkları ayırt edememesidir. Buna karşın, DDA yöntemi ise öz değerleri bir matris ifadesi ile belirlediğinden, bir k noktası için özdeğerlerin çakışıklık derecelerini kolaylıkla belirleyebilmektedir. Şekil 3.11b'de görülen her pik, bir özdeğeri temsil etmektedir. Bu piklerden herhangi biri incelenerek çakışıklık derecesinin belirlenmesi olanaksızdır. Ayrıca, elde edilen spektrumda fiziksel öz değerlere karşılık gelen piklerin yanında yalancı pikler de bulunabilmektedir. FDTD yöntemi ile yapılan hesaplamada bu yalancı piklerin hesaba katılmaması için bir güvenilirlik sınırı tanımlanmalıdır.

Uygulamada, deneme yanılma ile 0 ile 1 arasında bir sınır belirlenip normalize şiddeti belirlenen sınırın altında kalan pikler hesaplamadan çıkartılır.

Şekil 3.10'daki düzenekte görülen uyarı kaynağı ve zamansal göstergenin konumlarının uygun şekilde belirlenmesi, FDTD'ye dayalı fotonik band yapısı eldesinde karşılaşılan zorluklardan biridir. Kaynağın yüksek simetri doğrultularından birinde tanımlanması, kaynağın salınım frekansına karşılık gelen, yalnızca o doğrultudaki kipi uyarabilir. Bu da diğer kiplerin belirlenememesi sonucunu doğurabilmektedir. Ayrıca, seçilen kaynak frekansı fotonik kristalin band aralığına düşüyorsa, hiçbir kip uyarılmayabilir. Benzer şekilde, zamansal göstergenin de yüksek simetri noktalarından biri üzerine konulmaması gerekmektedir. Bu bilgiler ışığında uygun kaynak ve gösterge konumları ile kaynak frekansı deneme yanılma ile belirlenir. Tüm bunlar, FDTD'ye dayalı band yapısı hesabında hazırlık aşamasının DDA yöntemine göre oldukça uzun olmasını getirmektedir. Bu nedenle çalışmada, DDA yöntemi referans yöntem olarak kabul edilmiştir. FDTD ile band yapısı eldesinde, öncelikle doğrusal durumda elde edilen sonuçlar DDA ile elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmıştır.



Şekil 3.12. İncelenen iki boyutlu fotonik kristal için FDTD band yapısı hesabının akış şeması

4. BULGULAR ve TARTIŞMA

Kare örgü yapısındaki fotonik kristalin band yapısı, 3. Bölüm’de ele alınan DDA ve FDTD yöntemleri ile doğrusal durum için elde edilmiştir. Fotonik kristalin birim hücresi, kullanılan her iki yöntemde de $2^m \times 2^m$ ($m=1,2,3,\dots$) özdeş kareden ($\zeta = a/2^m \mu m$) oluşan kafesle bölümlendirilmiştir. En uygun kafes bölümlendirmesi, elde edilen band yapılarının yakınsama davranışı incelenerek belirlenmiştir.

Yakınsama incelemesinde, aralık orta frekansı değerlerinin yakınsaması ele alınmıştır. m , belirlenen band aralıklarını düşük frekanstan başlayarak sıralayan bir sayma sayısı olmak üzere,

$$\Delta^{m,m+1} = \frac{|\omega_{n,orta}^m - \omega_{n,orta}^{m+1}|}{\omega_{n,orta}^{m+1}} < 10^{-3} \quad (4.1)$$

koşulunun sağlandığı m değeri için elde edilen sonuçların yakınsadığı kabul edilmiştir.

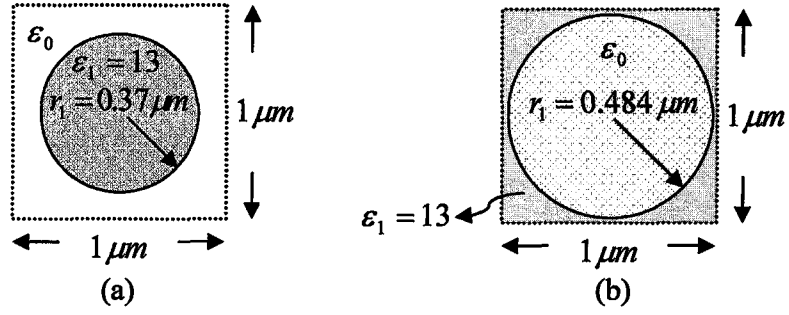
FDTD band yapısı hesaplamaları için Bölüm 3.3.8’de tartışılan düzenekte fotonik kristalin birim hücresine (Bkz. Şekil 3.10) Eş. 3.55’te belirtilen, P gücündeki ω frekanslı tek renkli atmalar gönderilmiştir. Hesaplamalarda Bölüm 3.3.7’de ele alınan periyodik sınır koşulları benimsenmiştir. Şekil 3.10’da (x_0, y_0) noktasında görülen zamansal göstergenin yeri doğrusal durumda, DDA yöntemi ile elde edilen tüm öz değerlerin eldesi için uygun bir noktada sabitlenmıştır.

İncelenen fotonik kristalin doğrusal durumdaki ($\chi^{(3)} = 0$) band yapısının eldesinin ardından, küçük bir Kerr duygunluğu ($\chi^{(3)} = 2 \times 10^{-14} m^2 / V^2 = 0.02 \mu m^2 / V^2$) için doğrusal olmayan fotonik kristalin band yapısı hesabına geçilmiştir. Hesaplamalar negatif Kerr katsayısı ($\chi^{(3)} = -2 \times 10^{-14} m^2 / V^2 = 0.02 \mu m^2 / V^2$) için tekrarlanarak sonuçlar karşılaştırılmıştır. Doğrusal fotonik kristal için FDTD band yapısı hesaplamalarında EM dalga gücü $P = 0.01 k.b.$ alınmıştır.

Elektrik alan genliđi, Kerr katsayısı ve EM dalga gücü için SI birim sisteminde sırasıyla V/m , m^2/V^2 ve W birimleri kullanılmasına karşın, incelenen yapının μm ölçeğinde olması nedeniyle bu nicelikler için sırasıyla $V/\mu m$, $\mu m^2/V^2$ ve W birimlerinin kullanılması daha uygun görülmüştür. Ayrıca, elektrik alan genliğinin birimsiz kabul edilmesi ile Kerr katsayısı da birimsiz kabul edilebilmektedir ($\epsilon^{NL} = \epsilon^L + \chi^{(3)}E^2$). Bu durumda EM dalga gücü için keyfi birim (k.b.) kullanılmaktadır (RSoft 2005b). Bu nedenle, Kerr katsayısı bundan sonra birimsiz olarak ($\chi^{(3)} = \pm 0.02$) verilecektir.

Uygulama alanları da göz önünde bulundurularak çalışmada, xy düzlemine izdüşümü boşlukta kare örgü yapısında dizilmiş dielektrik daireler (Bkz. Şekil 2.19a) ve bunun tersi, dielektrik malzeme içerisinde dairesel hava boşluklarından (Bkz. Şekil 2.19b) oluşan fotonik kristallerin band yapıları elde edilerek karşılaştırılmıştır. İlerleyen bölümlerde ilk durum *dielektrik daireler*, ikinci durum ise *dairesel hava boşlukları* terimleri ile kısaltılacaktır.

Fotonik band yapısı hesaplarında ele alınan malzemenin dielektrik sabiti $\epsilon = 13$ alınmıştır. Bunun yanında, hesaplamalarda her iki durum için TE ve TM band yapıları dairelerin yarıçapları değiştirilerek elde edilip TE ve TM band aralıkları ile bunların örtüşme bölgesinin band aralığı oranları göz önünde bulundurularak en uygun değerlerin elde edildiđi yarıçap değerleri belirlenmiştir. Yapılan ön inceleme sonunda hesaplamaların Şekil 4.1'de görülen yapılarda yürütülmesi benimsenmiştir:

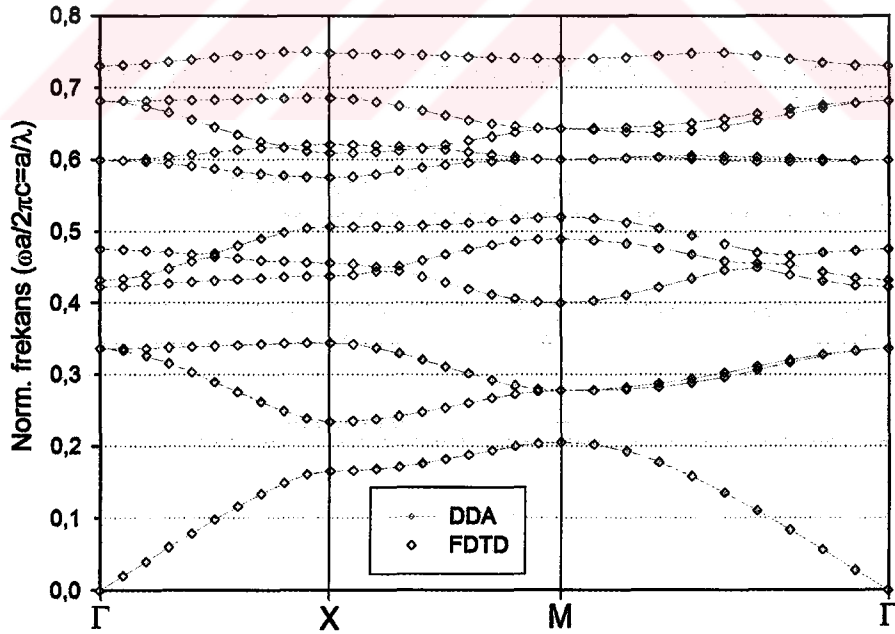


Şekil 4.1. (a) Dielektrik daireler ve (b) dairesel hava boşlukları için yapılan hesaplamalarda temel alınan geometri ve fiziksel parametreler

4.1. Doğrusal Fotonik Kristal

4.1.1. Dielektrik daireler

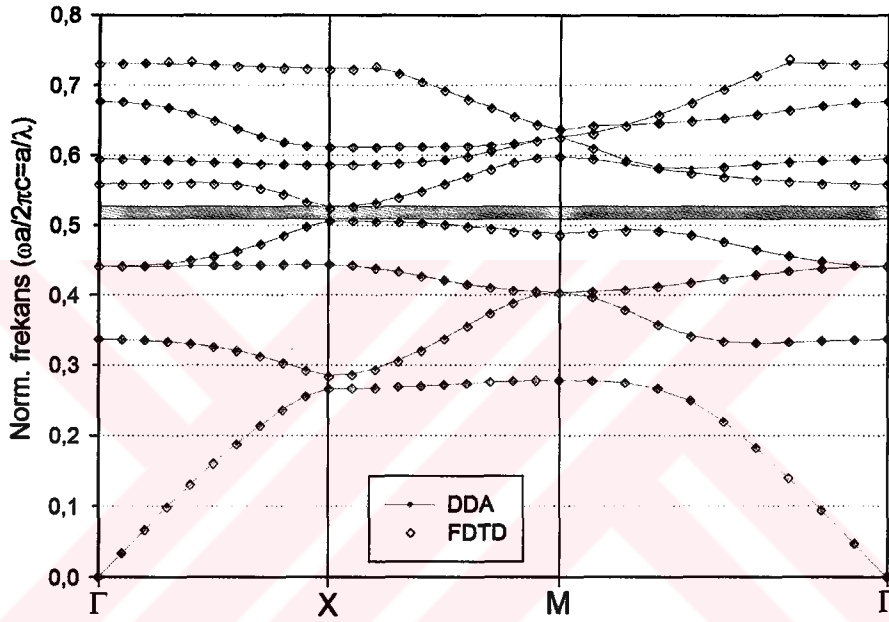
Doğrusal dielektrik daireler için DDA ve FDTD yöntemi ile elde edilen TM band yapıları Şekil 4.2’de görülmektedir:



Şekil 4.2. Dielektrik daireler için DDA ve FDTD yöntemleri ile hesaplanan TM band yapısı ($\zeta = 2^{-7} \mu\text{m}$)

Şekilde en düşük frekanstan başlayarak ilk 11 band gösterilmiştir. Açık mavi renkli bölgeler TM band aralıklarıdır.

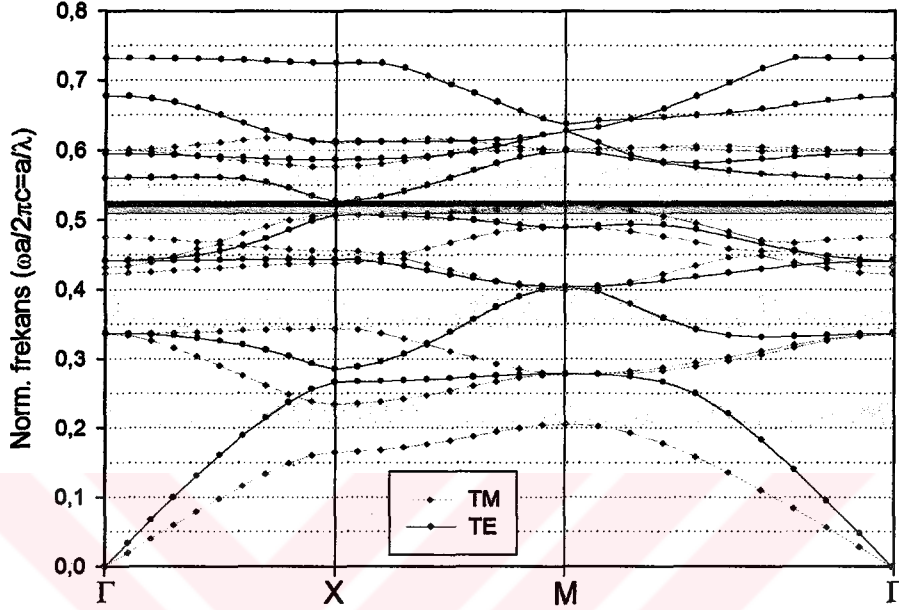
TM band yapısı eldesinin ardından yürütülen TE band yapısı hesaplamaları Şekil 4.3'te verilmiştir. İlk 8 TE bandının görüldüğü band yapısında yalnızca bir band aralığı (açık kırmızı renkli bölge) belirlenmiştir. TE band aralığının TM band aralıklarına göre daha dar olduğu görülmektedir.



Şekil 4.3. Dielektrik daireler için DDA ve FDTD yöntemleri ile hesaplanan TE band yapısı ($\zeta = 2^{-7} \mu\text{m}$)

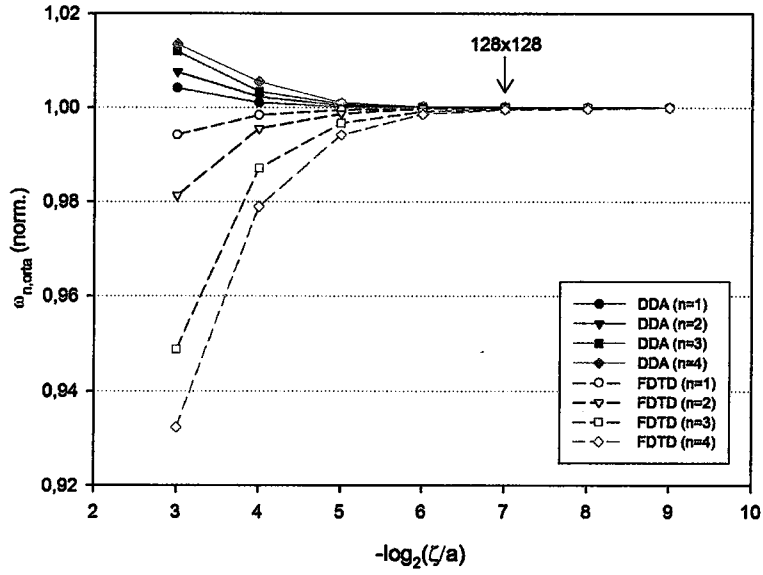
TE ve TM band yapılarında iki yöntem ile elde edilen sonuçların karşılaştırılması, DDA yöntemi ile belirlenen frekans öz değerlerinin tümünün FDTD yöntemi ile de bulunabildiğini göstermiştir. Ayrıca, 3. TM band aralığı ile TE band aralığının frekans bölgelerinin birbirine yakın olması dikkat çekmektedir. DDA yöntemi ile elde edilen TE ve TM band yapılarının birlikte çizimi (Şekil 4.4), bu band aralıklarının dar bir bölgede örtüştüğünü ortaya çıkarmıştır. Bu dar bölgede ne TE ne de TM kutuplanmış EM dalgalar için ilerleyen dalga çözümleri mevcuttur. Kutuplayıcı aygıtlar gibi uygulamalar

göz önünde bulundurularak, doğrusal olmayan fotonik kristalde örtüşme bölgesinin EM dalga gücü ile değişimi üzerinde özellikle durulacaktır.



Şekil 4.4. Dielektrik daireler için DDA yöntemi ile hesaplanan TE ve TM band yapılarının birlikte gösterimi ($\zeta = 2^{-7} \mu m$)

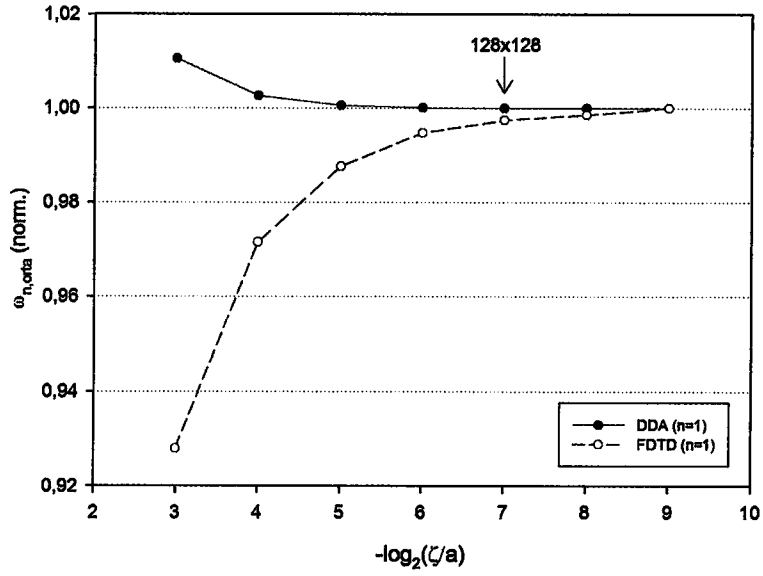
Yukarıda incelenen TE ve TM band yapılarının eldesinde DDA ve FDTD yöntemlerinin her ikisi için de 128×128 karelik ($\zeta = 2^{-7} \mu m$) kafes kullanılmıştır. Kafesin bu şekilde seçimine hesaplamaların yakınsama davranışı incelemesi sonucunda karar verilmiştir. Yakınsama incelemesinde aralık orta frekanslarının kafes bölümlendirmesi ile değişimi temel alınmıştır. DDA ve FDTD yöntemleri ile elde edilen band yapılarının yakınsaması Şekil 4.5'te görülmektedir:



Şekil 4.5. Dielektrik daireler için TM band yapısının eldesinde kullanılan DDA ve FDTD hesaplamalarının yakınsama davranışı

Yakınsama davranışı incelemesinde DDA ve FDTD yöntemleri ile elde edilen sonuçlar, kendi içlerinde 512×512 karelik kafes için elde edilen sonuçlar ile normalize edilerek verilmiştir. DDA sonuçlarının üstten, FDTD sonuçlarının ise aşağıdan birbirlerine yakınsadığı belirlenmiştir. Şekilde 128×128 karelik bölümlendirme için elde edilen sonuçlar ayrıca işaretlenmiştir. Bu seçimin nitel olarak yeterli yakınsama sağladığı görülmüştür. Buna karşılık, yakınsama davranışının nicel incelemesi aşağıda tartışılacaktır.

TE band yapısı için yakınsama incelemesi sonuçları Şekil 4.6'da verilmiştir. TM band yapısı için elde edilen sonuçlara benzer olarak, DDA ve FDTD sonuçları sırasıyla üstten ve alttan birbirlerine yakınsamaktadır. İşaretlenen 128×128 karelik bölümlendirme için FDTD sonuçlarının TM band yapısında görüldüğü kadar iyi yakınsamadığının belirlenmesine rağmen, işlem sürelerinin uzunluğu ve zaman kısıtlaması göz önünde bulundurularak hesaplamalara bu kafeste devam edilmiştir.



Şekil 4.6. Dielektrik daireler için TE band yapısının eldesinde kullanılan DDA ve FDTD hesaplamalarının yakınsama davranışı

DDA ve FDTD yöntemleri ile belirlenen TE ve TM band aralıkları ile bunların örtüşme bölgesine ait sayısal veriler Çizelge 4.1’de sıralanmıştır. FDTD yöntemi ile elde edilen sonuçlarda band kenarları ($\omega_{n,die}$ ve $\omega_{n,hava}$) ve aralık orta frekanslarına ($\omega_{n,orta}$) ait sayısal değerlerin hem TE hem de TM band aralıkları için DDA sonuçlarına yakın olduğu görülmektedir. Buna karşın, TE band aralığının ve örtüşme bölgesinin genişliğinin ($\omega_{n,hava} - \omega_{n,die}$) ve band aralığı oranlarının (G/M, %) DDA ile elde edilen değerlerden belirgin ölçüde farklı olduğu görülmüştür. Bunun nedeni, TE band aralığının TM band aralıklarından dar olmasıdır.

Çizelge 4.1. Dielektrik daireler için DDA ve FDTD yöntemleri ile elde edilen TE ve TM band yapılarında band aralıklarına ait sayısal değerlerin karşılaştırması

		n	$\omega_{n,die}$	$\omega_{n,hava}$	$\omega_{n,orta}$	Band Aralığı ($\omega_{n,hava} - \omega_{n,die}$)	Band Aralığı Oranı (G/M, %)
DDA	TM	1	0.20603	0.23470	0.22037	0.028667	13.009
		2	0.34456	0.40025	0.37241	0.055684	14.952
		3	0.52077	0.57603	0.54840	0.055264	10.077
		4	0.68634	0.73132	0.70883	0.044976	6.3451
	TE	1	0.50678	0.52658	0.51668	0.019807	3.8336
	Ö.B. ¹	1	0.52077	0.52658	0.52368	0.0058139	1.1102
FDTD	TM	1	0.20603	0.23464	0.22033	0.028602	12.981
		2	0.34457	0.40024	0.37241	0.055676	14.950
		3	0.52060	0.57593	0.54827	0.055330	10.092
		4	0.68600	0.73104	0.70852	0.045034	6.3561
	TE	1	0.50644	0.52446	0.51545	0.018021	3.4962
		Ö.B. ¹	1	0.52060	0.52446	0.52253	0.0038549

¹ TE ve TM band aralıklarının örtüşme bölgesi

Yukarıda nitel olarak tartışılan DDA ve FDTD sonuçlarının yakınsama davranışına ait veriler Çizelge 4.2’de sıralanmıştır. Çizelge, 128×128 ve 256×256 bölmeli kafesler için her iki yöntemle TE ve TM band aralıkları için elde edilen verilerin Eş. 4.1’de yerine konulması ile oluşturulmuştur. DDA yöntemi ile elde edilen verilerin tümünün 128×128 bölmeli kafes için benimsenen yakınsama koşulunu sağladığı görülmektedir. Buna karşın FDTD sonuçları TM band aralıklarının tümü için koşulu sağlamakta iken, TE band aralığı için sınırın biraz üzerinde (1.1715×10^{-3}) bir değer elde edilmiştir.

Çizelge 4.2. Dielektrik daireler için DDA ve FDTD yöntemleri ile belirlenen band aralıklarında aralık orta frekanslarının yakınsama davranışı

	TM				TE
	$\Delta_1^{7,8}$	$\Delta_2^{7,8}$	$\Delta_3^{7,8}$	$\Delta_4^{7,8}$	$\Delta_1^{7,8}$
DDA	1.2112×10^{-5}	2.6683×10^{-5}	4.4358×10^{-5}	5.4539×10^{-5}	9.6322×10^{-6}
FDTD	8.5921×10^{-5}	1.1548×10^{-4}	2.5365×10^{-4}	1.1817×10^{-4}	1.1715×10^{-3}

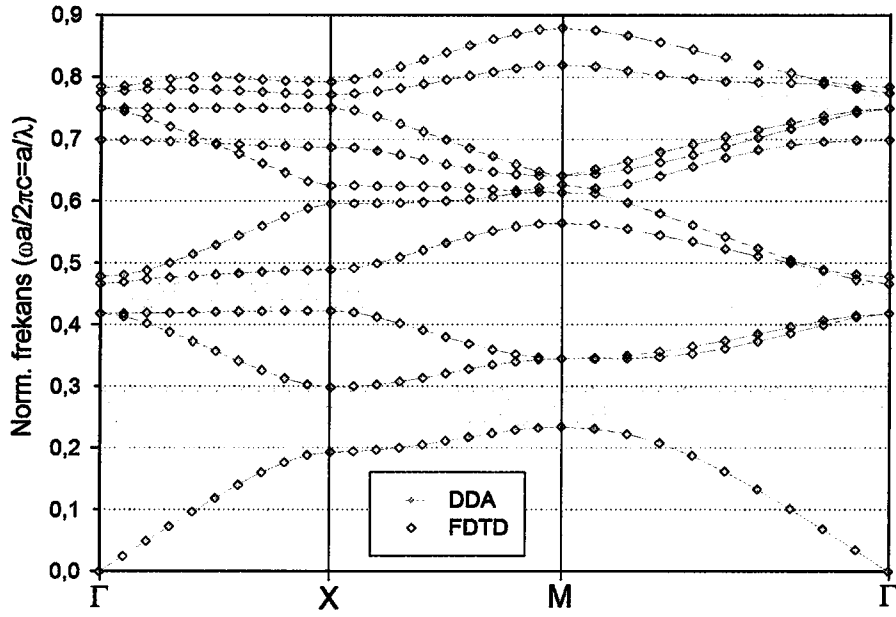
İki yöntem için yakınsama davranışının ayrı ayrı incelenmesinin yanı sıra, 128×128 bölmeli kafes için elde edilen FDTD sonuçlarının aynı kafes için elde edilen DDA sonuçlarına yakınsaması da incelenmiş ve bulunan değerler Çizelge 4.3'te sıralanmıştır. FDTD sonuçlarının tüm TM band aralıkları için DDA sonuçlarına yakınsama koşulunu (Eş. 4.1) sağlayacak biçimde yakınsadığı gözlenirken, TE band aralığı için benimsenen üst sınırın biraz üzerinde (2.5671×10^{-3}) bir değer bulunmuştur.

Çizelge 4.3. Dielektrik daireler için FDTD yöntemi ile belirlenen band aralıklarında aralık orta frekanslarının DDA ile elde edilen sonuçlara yakınsaması

TM				TE
$\Delta_1^{FDTD,DDA}$	$\Delta_2^{FDTD,DDA}$	$\Delta_3^{FDTD,DDA}$	$\Delta_4^{FDTD,DDA}$	$\Delta_1^{FDTD,DDA}$
1.4350×10^{-4}	1.6812×10^{-6}	2.4307×10^{-4}	4.3325×10^{-4}	2.5671×10^{-3}

4.1.2. Dairesel hava boşlukları

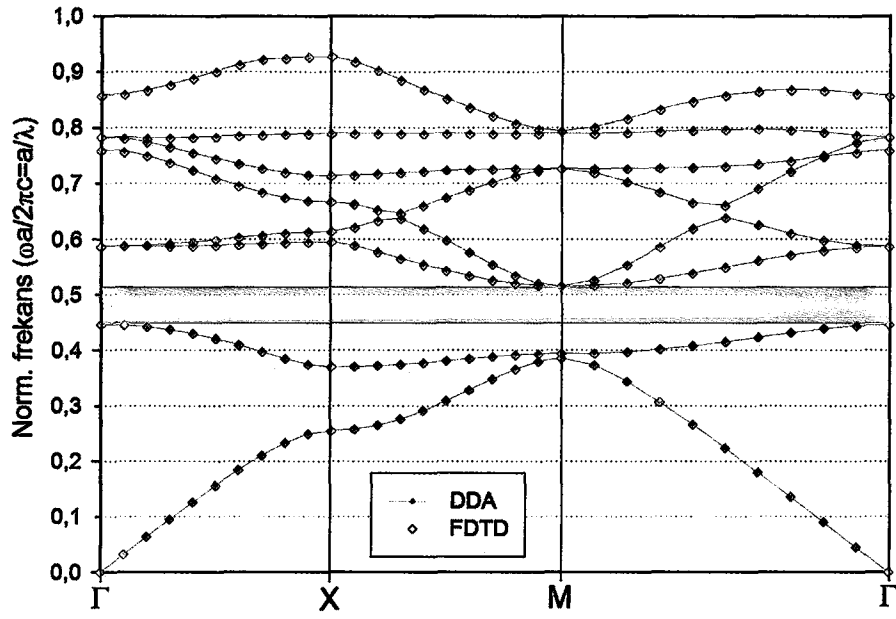
Doğrusal dielektrik malzemede dairesel hava boşlukları için DDA ve FDTD yöntemleri ile elde edilen TM band yapısı Şekil 4.7'de görülmektedir. Şekilde en düşük enerjiden başlayarak ilk 10 band sıralanmıştır. Dielektrik daireler için elde edilen band yapısından (Bkz. Şekil 4.2) farklı olarak, incelenen frekans aralığında 3 TM band aralığı (açık mavi renkli bölgeler) gözlenmiştir. FDTD sonuçlarının bu yapı için de DDA sonuçları ile örtüştüğü gözlenmiştir.



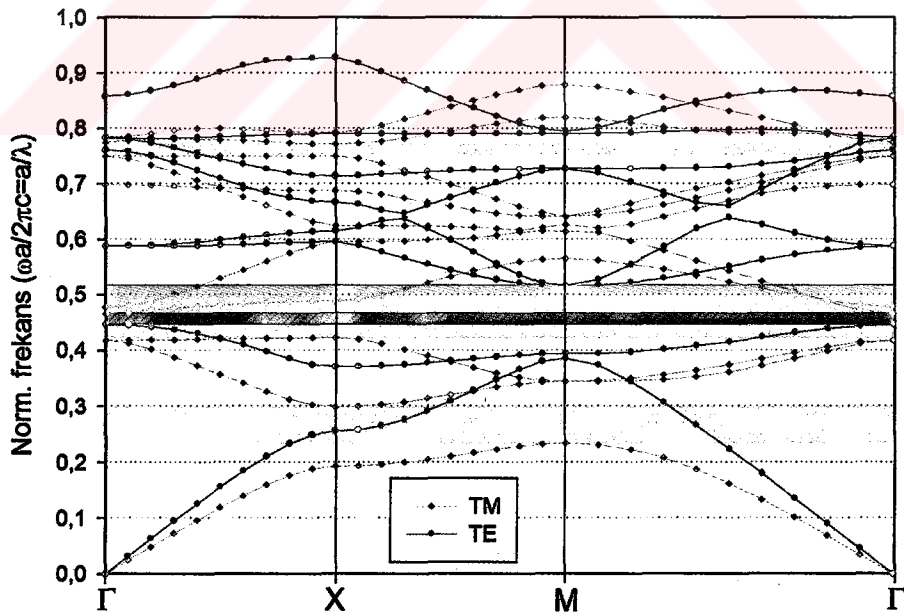
Şekil 4.7. Dairesel hava boşlukları için DDA ve FDTD yöntemleri ile hesaplanan TM band yapısı ($\zeta = 2^{-7} \mu\text{m}$)

Dairesel hava boşlukları için elde edilen ilk 8 TE bandı ve band aralığı (açık kırmızı renkli bölge) Şekil 4.8’de görülmektedir.

DDA ve FDTD sonuçlarının TE band yapısı için birbirleri ile örtüştüğünün görülmesinin yanı sıra, elde edilen TE band aralığının dielektrik daireler için elde edilenden (Bkz. Şekil 4.3) daha geniş olduğu ($G/M_{DDA} = \%14.405$) belirlenmiştir. Ayrıca, TE band aralığı ile 2. TM band aralığının örtüştüğü ve örtüşme bölgesinin yine dielektrik daireler için elde edilenden (Bkz. Şekil 4.4) daha geniş olduğu ($G/M_{DDA} = \%4.3626$) gözlenmiştir (Şekil 4.9).

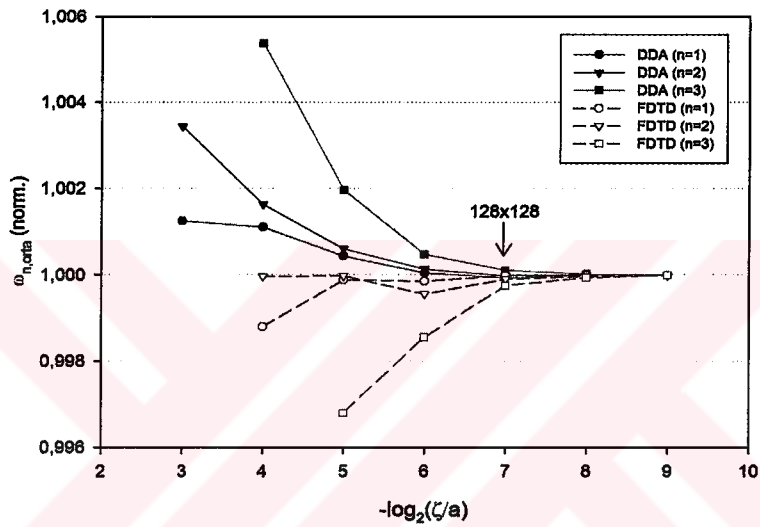


Şekil 4.8. Dairesel hava boşlukları için DDA ve FDTD yöntemleri ile hesaplanan TE band yapısı ($\zeta = 2^{-7} \mu m$)

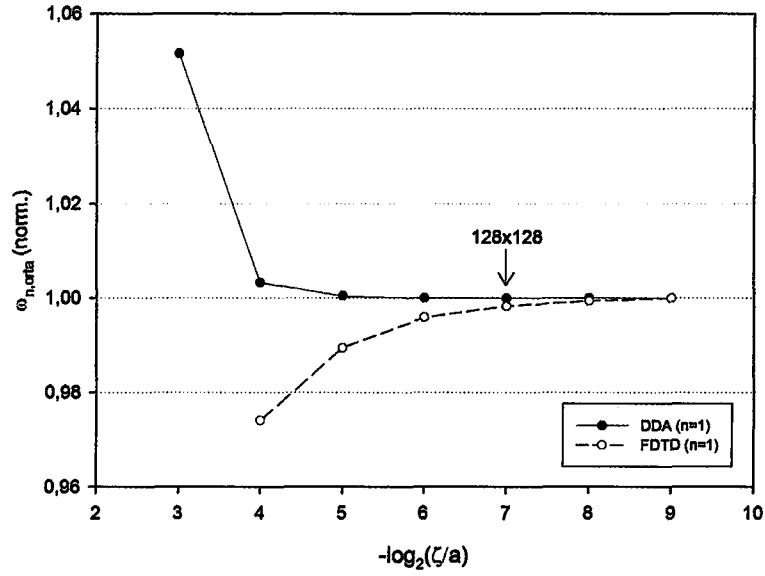


Şekil 4.9. Dairesel hava boşlukları için DDA yöntemi ile hesaplanan TE ve TM band yapılarının birlikte gösterimi ($\zeta = 2^{-7} \mu m$)

DDA ve FDTD yöntemleri ile elde edilen sonuçların yakınsama davranışı incelemesi Şekil 4.10'da verilmiştir. Bölüm 4.1.1'de incelenen yakınsama davranışına benzer olarak, DDA ve FDTD sonuçlarının birbirlerine, sırasıyla, üstten ve alttan yakınsadığı gözlenmiştir. Ancak, dairesel hava boşlukları için yürütülen hesapların daha hızlı yakınsadığı görülmektedir. Bu, seçilen geometride dairelerin yarıçapının ($r_1 = 0.484a$) daha büyük olmasıyla, dolayısıyla bölümlendirmede yapılan hataların azalmasıyla ilişkilidir. Şekil 4.11'de TE band yapısı hesaplarının yakınsaması görülmektedir.



Şekil 4.10. Dairesel hava boşlukları için TM band yapısının eldesinde kullanılan DDA ve FDTD hesaplamalarının yakınsama davranışı



Şekil 4.11. Hava boşlukları için TE band yapısının eldesinde kullanılan DDA ve FDTD hesaplamalarının yakınsama davranışı

Çizelge 4.4'te dairesel hava boşlukları için yürütülen TE ve TM band yapısı hesaplamalarında elde edilen band aralıklarına ait değerler sıralanmıştır. FDTD hesaplamalarının TE band aralığı ve örtüşme bölgesi için DDA sonuçlarına Bölüm 4.1.1'de tartışılan duruma göre (Bkz. Çizelge 4.1) daha çok yakınsadığı görülmektedir. Bu durum, dairesel hava boşlukları için seçilen yarıçapın daha büyük ve elde edilen TE band aralığı ile band aralıklarının örtüşme bölgesinin daha geniş olmasıyla açıklanabilir.

Dairesel hava boşlukları için yürütülen yakınsama incelemesine ait sayısal veriler Çizelge 4.5'te sıralanmıştır. Burada hem DDA hem de FDTD sonuçlarının TM band aralıkları için yakınsama koşulunu (Eş. 4.1) sağladığı görülmektedir. Buna karşın, FDTD hesaplamalarının TE band aralığı için yakınsama sınırının biraz üzerinde (1.1044×10^{-3}) bir değer bulunmuştur.

Son olarak, 128×128 özdeş bölme için elde edilen FDTD sonuçlarının aynı seçim için elde edilen DDA sonuçlarına yakınsaması ile ilgili değerler Çizelge 4.6'da verilmiştir.

Çizelge 4.4. Hava boşlukları için DDA ve FDTD yöntemleri ile elde edilen TE ve TM band yapılarında band aralıklarına ait sayısal değerlerin karşılaştırılması

		n	$\omega_{n,die}$	$\omega_{n,hava}$	$\omega_{n,orta}$	Band Aralığı ($\omega_{n,hava} - \omega_{n,die}$)	Band Aralığı Oranı (G/M, %)
DDA	TM	1	0.23379	0.29885	0.26632	0.065059	24.429
		2	0.42266	0.46617	0.44441	0.043515	9.7915
		3	0.75014	0.77177	0.76095	0.021630	2.8425
	TE	1	0.44627	0.51554	0.48091	0.069275	14.405
	Ö.B.¹	1	0.44627	0.46617	0.45622	0.019903	4.3626
FDTD	TM	1	0.23374	0.29887	0.26631	0.065131	24.457
		2	0.42264	0.46611	0.44438	0.043466	9.7814
		3	0.74977	0.77440	0.76209	0.024629	3.2318
	TE	1	0.44582	0.51402	0.47992	0.068200	14.211
	Ö.B.¹	1	0.44582	0.46611	0.45597	0.020286	4.4490

¹ TE ve TM band aralıklarının örtüşme bölgesi

Çizelge 4.5. Hava boşlukları için DDA ve FDTD yöntemleri ile belirlenen band aralıklarında aralık orta frekanslarının yakınsama davranışı

	TM			TE
	$\Delta_1^{7,8}$	$\Delta_2^{7,8}$	$\Delta_3^{7,8}$	$\Delta_1^{7,8}$
DDA	7.9986×10^{-5}	3.0040×10^{-5}	8.8704×10^{-5}	1.3185×10^{-5}
FDTD	5.9034×10^{-5}	8.2832×10^{-5}	1.8561×10^{-4}	1.1044×10^{-3}

Çizelge 4.6. Hava boşlukları için FDTD yöntemi ile belirlenen band aralıklarında aralık orta frekanslarının DDA ile elde edilen sonuçlara yakınsaması

TM			TE
$\Delta_1^{FDTD,DDA}$	$\Delta_2^{FDTD,DDA}$	$\Delta_3^{FDTD,DDA}$	$\Delta_1^{FDTD,DDA}$
6.0736×10^{-5}	7.5674×10^{-5}	1.4916×10^{-3}	2.0402×10^{-3}

4.2. Doğrusal Olmayan Fotonik Kristal

İncelenen iki durum için fotonik band yapılarının doğrusal durumda eldesinin ardından dielektrik malzemenin doğrusallıktan Kerr tipi sapma gösterdiği durum için hesaplamalara geçilmiştir. Doğrusal olmayan fotonik kristallerin band yapısı eldesi FDTD yöntemi ile gerçekleştirilmiştir. Hesaplamalarda doğrusal olmayan duygunluğun elektrik alanı ile değişiminin belirli bir E_{sat} genliği için doyuma gittiği varsayılmıştır. Bu durumda, doğrusal olmayan duygunluğun uygulanan elektrik alanı ile değişimi aşağıdaki eşitlikte görüldüğü gibidir:

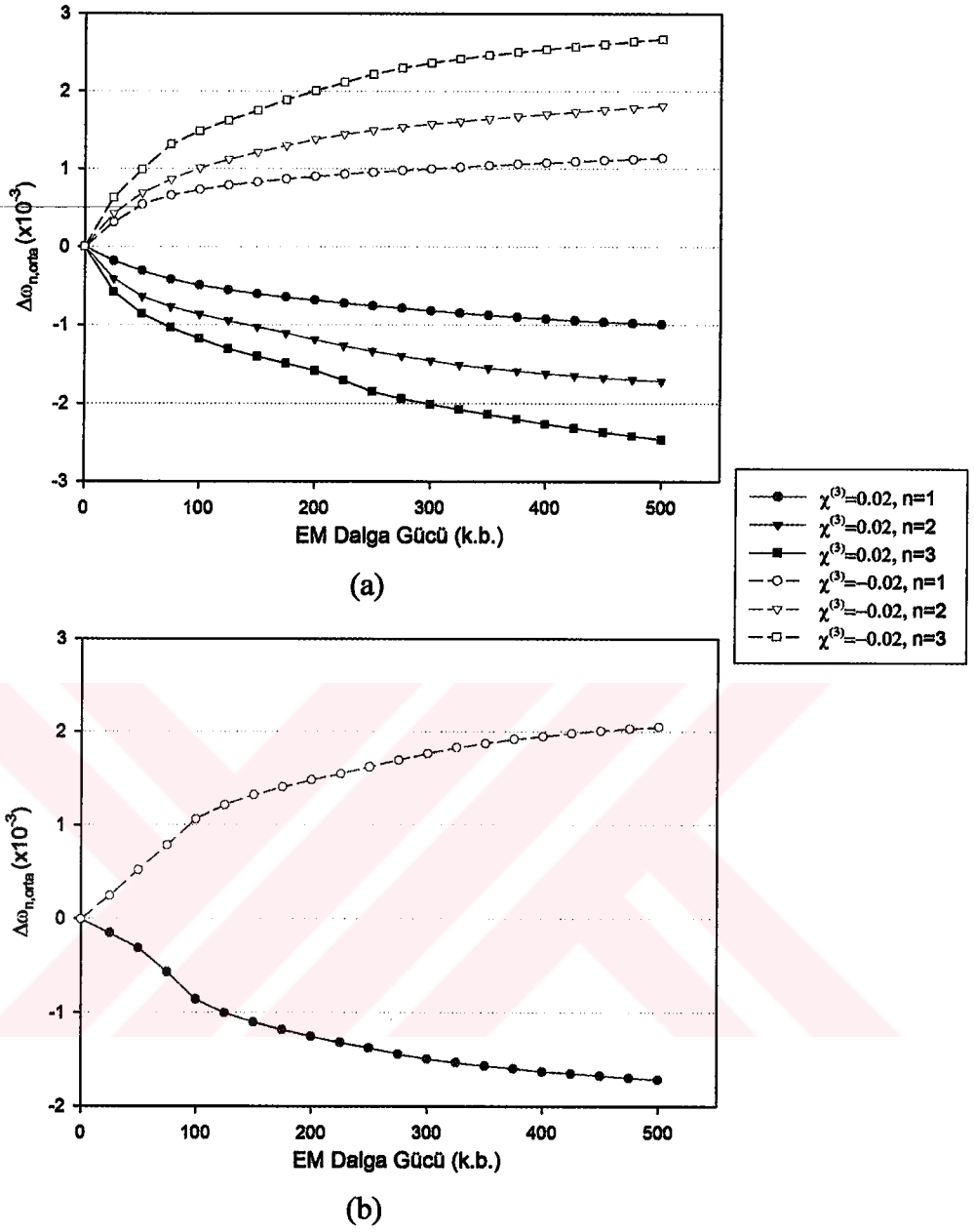
$$\chi^{NL} = \chi^{(1)} + \chi^{(3)} \frac{E^2}{1 + \frac{E^2}{E_{sat}^2}} \quad (4.2a)$$

$$\chi^{NL} = \chi^{(1)} + \chi^{(3)} \frac{E^2}{1 + sE^2} \quad (4.2b)$$

Yukarıdaki eşitliklerde E_{sat} doyum genliğini gösterirken $s \equiv 1/E_{sat}^2$ “doyum katsayısı” olarak tanımlanmaktadır. Doyum katsayısının birimi $\chi^{(3)}$ ile aynıdır ($\mu m^2/V^2$) ancak burada her ikisi de birimsiz nicelikler olarak ele alınmaktadır.

4.2.1. Dielektrik daireler

Dielektrik daireler için gelen EM dalga gücünün 25 k.b. 'den 500 k.b. 'ye kadar 25 k.b. adımlarla değiştirilmesi ile TM ve TE band yapılarında aralık orta frekansının değişimi Şekil 4.12'de gösterilmiştir:



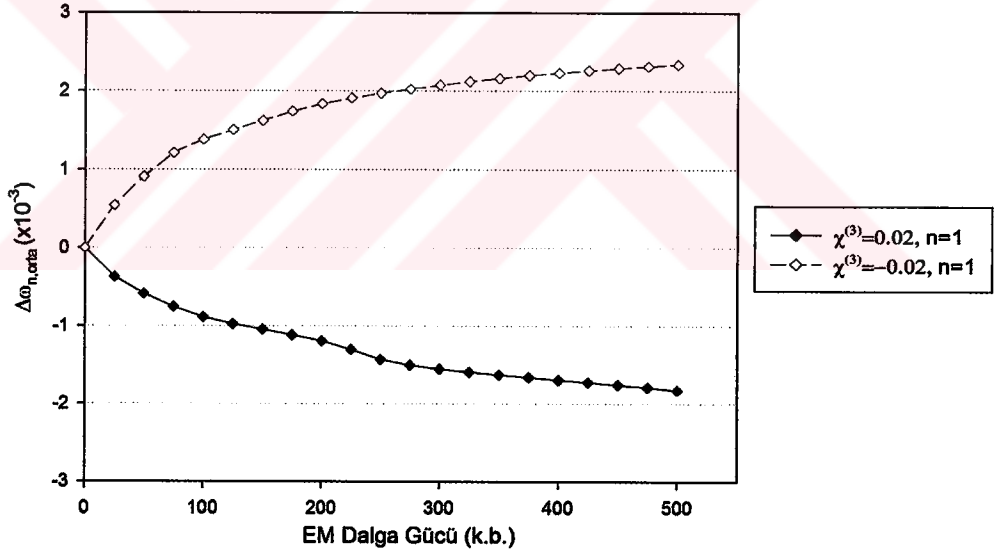
Şekil 4.12. Dielektrik daireler için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarında aralık orta frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi

Şekilde TM ve TE band aralıklarında aralık orta frekanslarının pozitif Kerr duygunluğu için kırmızıya kayarken, negatif duygunluk için maviye kaydığı görülmektedir. Literatürde elde edilen sonuçlarla karşılaştırma, sonuçların benzer çalışmalarda elde edilenler ile tutarlı olduğunu göstermiştir (Tran 1995, Lousse ve Vigneron 2001, Huttunen ve Törmä 2002).

TM aralık orta frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi daha ayrıntılı incelendiğinde, kırmızıya/maviye kaymanın artan frekans ile arttığı gözlenmiştir. Daha yüksek frekanslardaki band aralığının aralık orta frekansı daha aşağıdakinin frekansına göre daha çok kırmızıya/maviye kaymaktadır.

Doğrusal olmayan Kerr uygunluğu doyuma giden eşitlik ile (Eş. 4.2) modellendiğinden, aralık orta frekansları düşük güçler için hızla değişirken yüksek güçler için doğrusala yakın bir eğilim izlemektedir.

TE ve TM band aralıklarının örtüşme bölgesinin aralık orta frekansının EM dalga gücü ile değişimi Şekil 4.13'te verilmiştir. TE ve TM band aralıkları pozitif/negatif Kerr uygunluğu için kırmızıya/maviye kaydığından, örtüşme bölgesinin değişimi de aynı karakteristiğe sahiptir.



Şekil 4.13. Dielektrik daireler için belirlenen TM ve TE band aralıklarının örtüşme bölgesinde aralık orta frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi

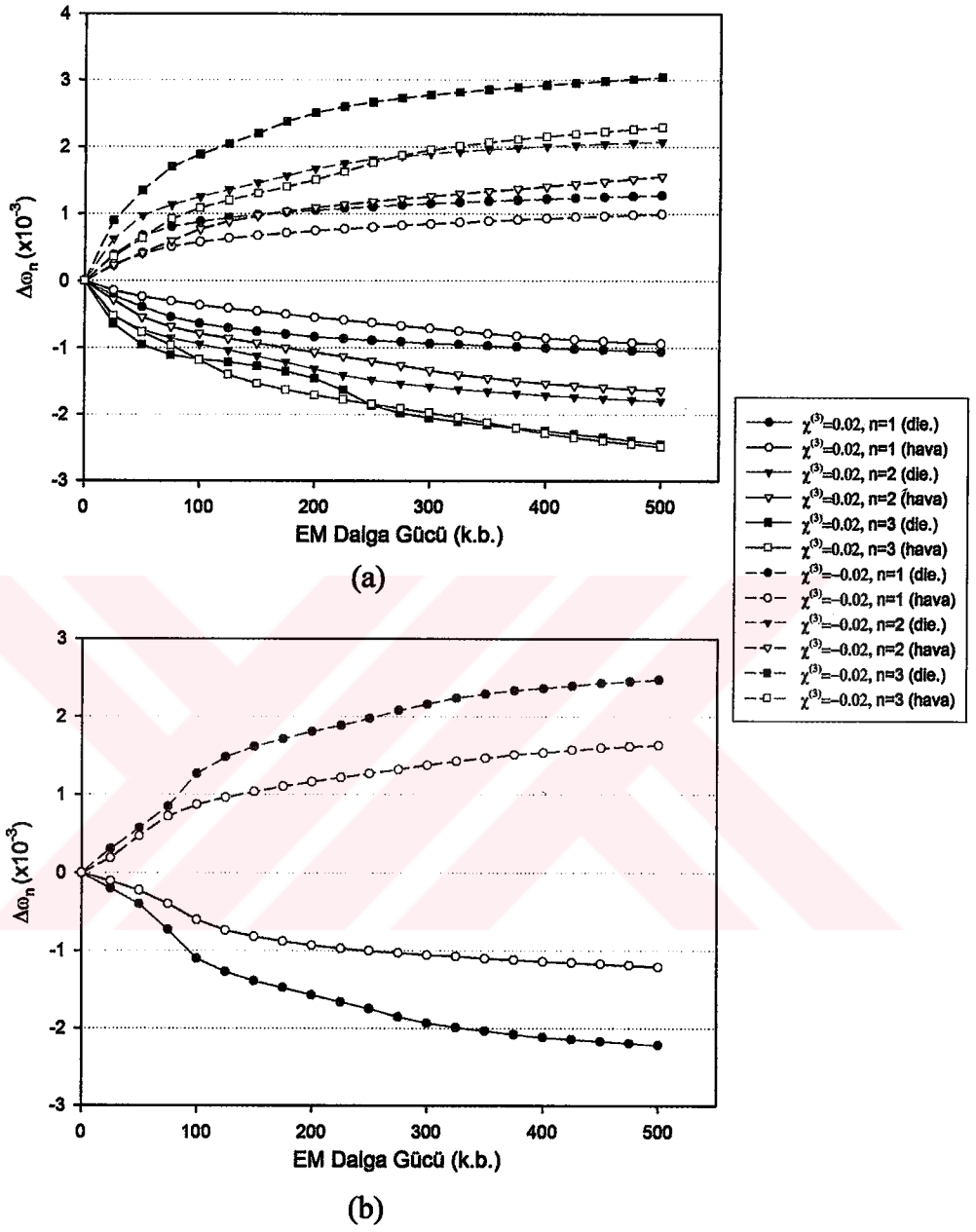
Aralık orta frekansının değişiminin doğrusal durumdaki değer ile $\omega_{n,orta}$ orantılı olmasına karşın, dielektrik ve hava bandlarının band aralığı kenarlarındaki değişimleri farklı özellikler sergilemektedir (Şekil 4.14). Band aralığı sınırlarını belirleyen frekans

değerlerinin ($\omega_{n,die}$ ve $\omega_{n,hava}$) EM dalga gücü ile değişimini gösteren grafikte, pozitif ve negatif Kerr duygunlukları için $\omega_{n,die}$ değerlerinin genel olarak $\omega_{n,hava}$ değerlerine göre daha çok değiştiği belirlenmiştir. Bu, dielektrik bandlarının band aralığı kenarlarında hava bandlarına göre doğrusallıktan sapmaya daha duyarlı olduğu anlamına gelmektedir. Burada tartışılan gözlemler TE ve TM band aralıklarının örtüşme bölgesi için de aynıdır (Şekil 4.15).

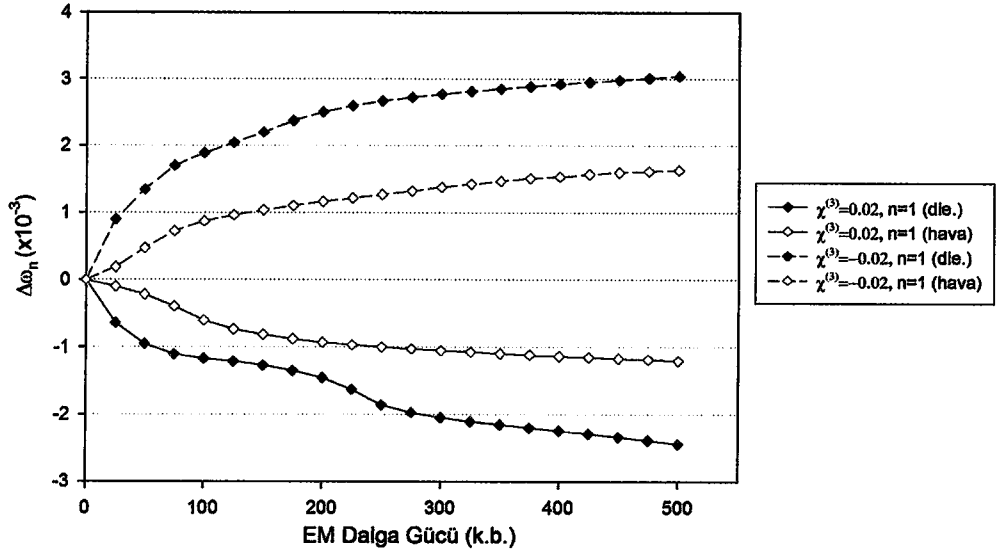
Band aralığı kenarlarının ve aralık ortası frekanslarının değişiminin belirlenmesi ile band aralıklarının genişliklerinin ve band aralığı oranlarının değişiminin incelenmesine geçilmiştir. Band aralığı genişliğindeki yüzde değişim,

$$\% \Delta(\omega_{n,hava} - \omega_{n,die}) = \frac{\Delta\omega_{n,hava} - \Delta\omega_{n,die}}{\omega_{n,hava} - \omega_{n,die}} \times 100 \quad (4.3)$$

ifadesi ile belirlenebilir. Eşitlik incelendiğinde, pozitif Kerr duygunluğu için dielektrik bandındaki değişimin daha büyük olmasının band aralığında genişlemeye, negatif Kerr duygunluğu için de daralmaya neden olacağı anlaşılmaktadır. Bu, Şekil 4.16'da görülmektedir. Pozitif Kerr duygunluğu için 1. ve 2. TM band aralıklarının tüm güç değerleri için band aralıklarının değiştiği gözlenirken, 3. TM band aralığının belirli aralıklarda daraldığı belirlenmiştir (Şekil 4.16a). Band kenarlarının EM dalga gücü ile değişiminin incelenmesi, 3. TM band aralığında dielektrik bandındaki değişimlerin belirli bölgelerde ($100 < P < 250$ ve $P > 375$) hava bandına göre daha az olması ve Eş. 4.3'ün göz önünde bulundurulması ile bu değişim görülebilir. Buna karşılık, negatif Kerr duygunluğu için tüm band aralıklarının daraldığı gözlenmiştir. TE band aralığının EM dalga gücü ile değişimi incelendiğinde pozitif Kerr duygunluğu için tüm güç değerlerinde genişleme ve negatif Kerr duygunluğu için de daralma görülmektedir (Şekil 4.16b). Ayrıca, band aralığı genişliklerinde gözlenen değişimlerin TE ve TM band aralıklarının tümü için yüksek güç değerlerinde doğrusala yakın bir değişim gösterdiği gözlenmiştir.



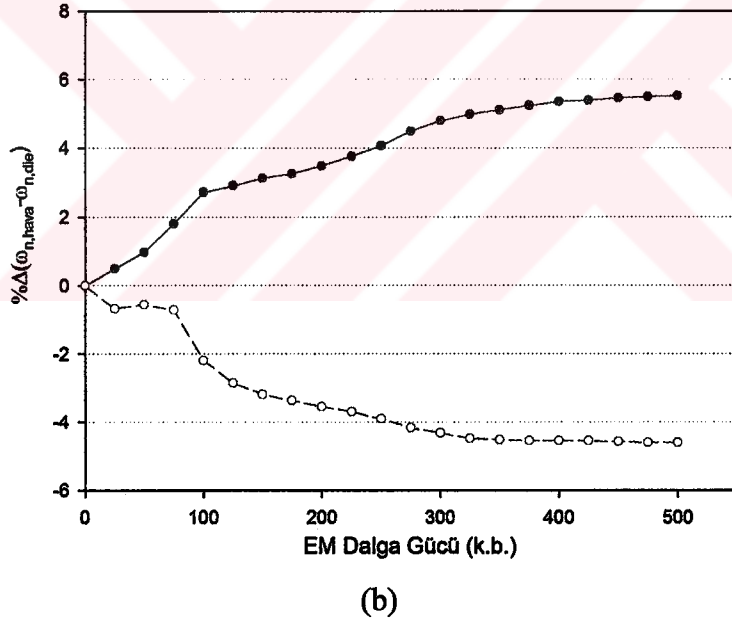
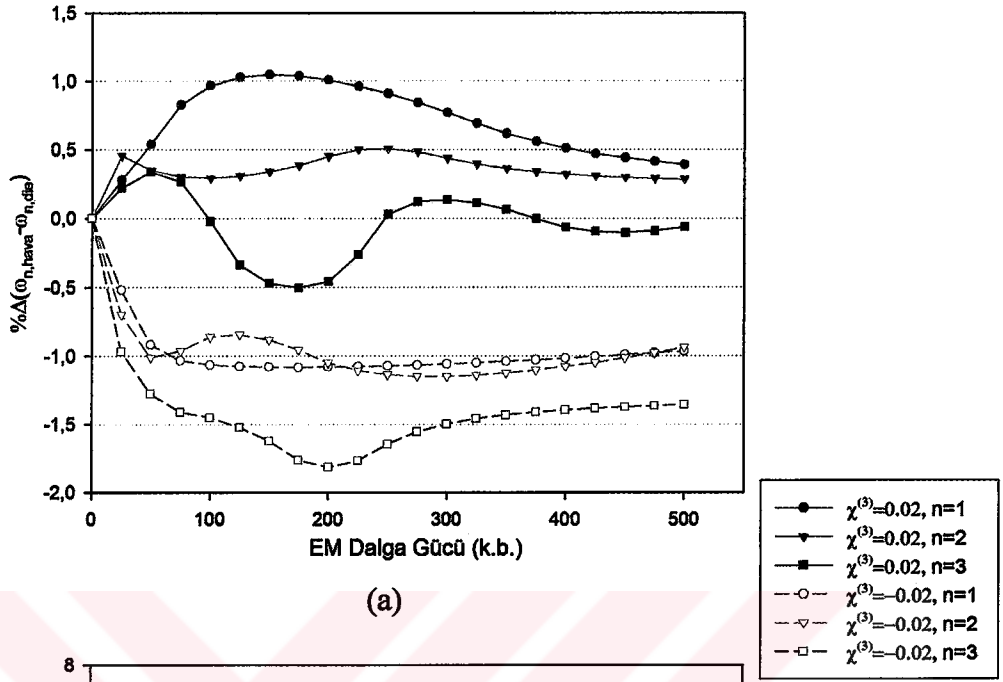
Şekil 4.14. Dielektrik daireler için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarında band kenarı frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi



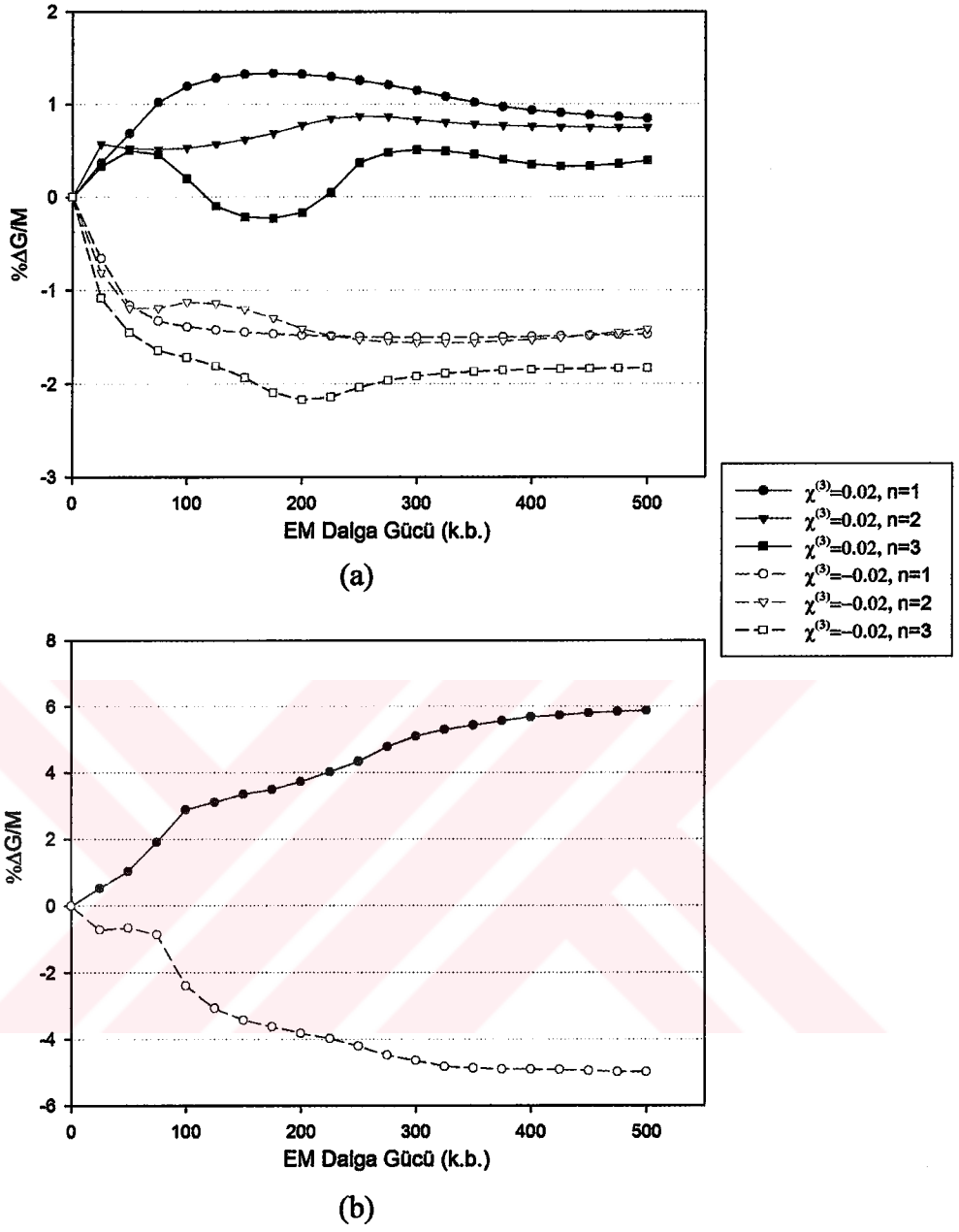
Şekil 4.15. Dielektrik daireler için belirlenen TM ve TE band aralıklarının örtüşme bölgesinde band kenarı frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi

Son olarak, band aralığı oranlarının (G/M) EM dalga gücü ile değişimi incelenmiş ve band aralığı genişliğine benzer eğilim belirlenmiştir (Şekil 4.17).

Kerr tipi dielektrik daireler için frekans değerlerinde gözlenen değişimlerin çok küçük olmasına karşın ($\sim \%0.1 - \%1$), bu değişimlerin bileşiminden oluşan band aralığı genişliği ve oranının daha büyük olduğu görülmüştür.



Şekil 4.16. Dielektrik daireler için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarının genişliğinin EM dalga gücü ile değişimi

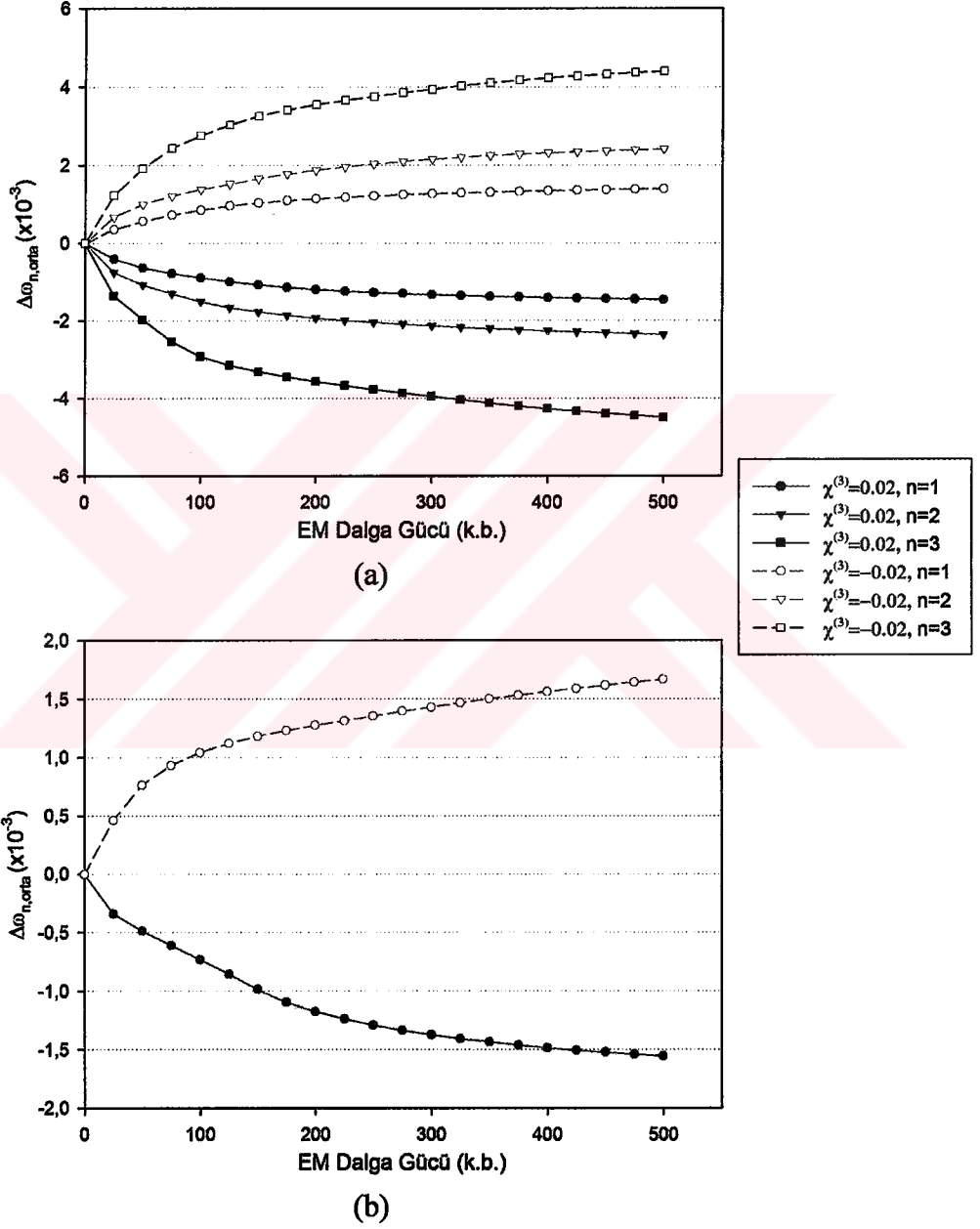


Şekil 4.17. Dielektrik daireler için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarında band aralığı oranlarının EM dalga gücü ile değişimi

4.2.2. Dairesel hava boşlukları

Kerr tipi dielektrik malzemede dairesel hava boşlukları için yapılan hesaplamalarda TM ve TE band aralıklarının aralık orta frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi Şekil 4.18'de görülmektedir. Bölüm 4.2.1'de tartışılan sonuçlara benzer olarak, TM ve TE

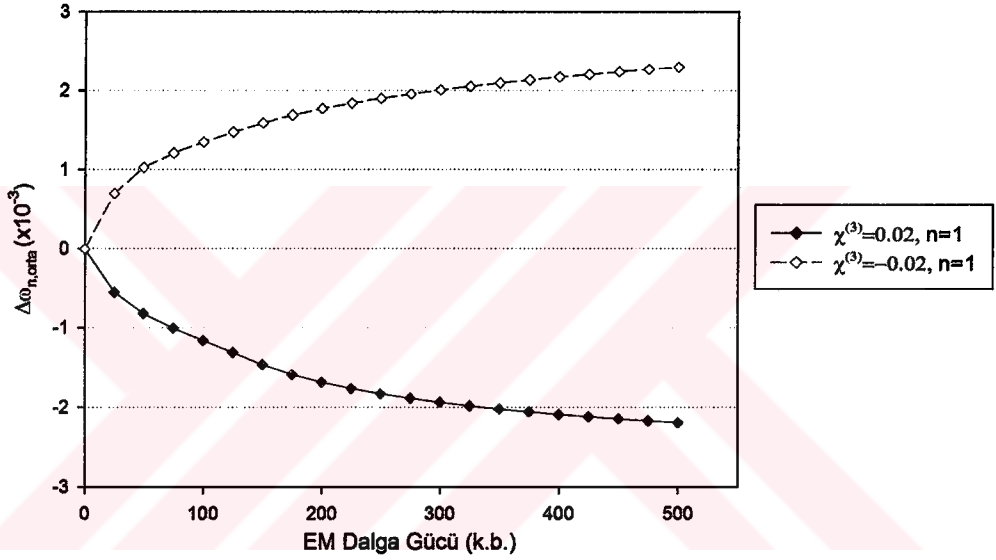
band aralıklarının pozitif Kerr duygunluğu için kırmızıya, negatif Kerr duygunluğu için maviye kaydığı belirlenmiştir. Bunun yanında, TM band aralıklarının aralık ortası frekanslarının kayma miktarlarının yine artan frekans ile arttığı gözlenmiştir (Şekil 4.18a).



Şekil 4.18. Dairesel hava boşlukları için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarında aralık orta frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi

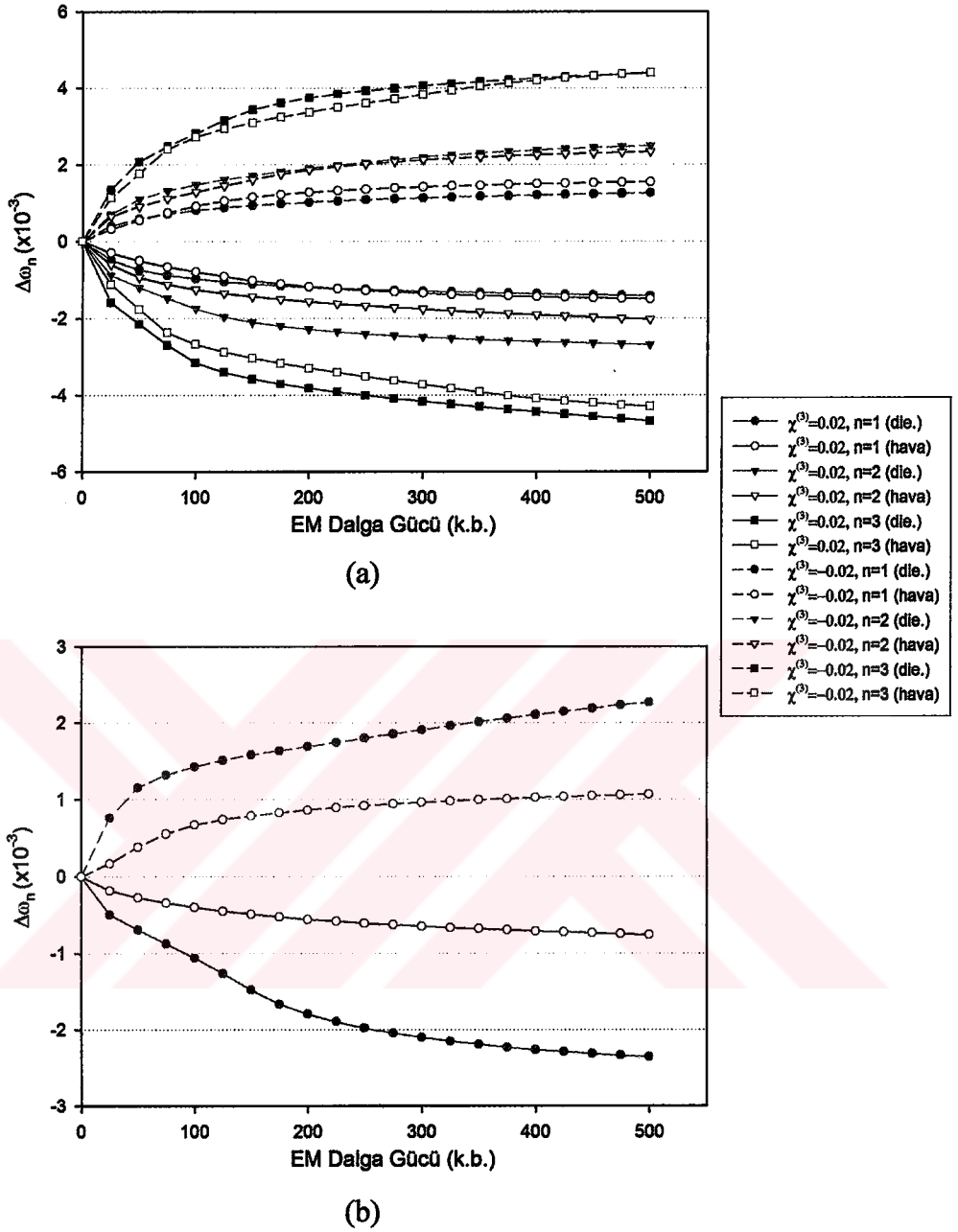
TE ve TM band aralıklarının örtüşme bölgesinin aralık orta frekansının pozitif ve negatif Kerr duygunlukları için değişimi Şekil 4.19’da verilmiştir. Burada daha önce tartışılan sonuçlara benzer sonuçların elde edildiği görülmektedir.

Dielektrik daireler ve dairesel hava boşlukları için elde edilen sonuçların karşılaştırılması, ikinci durumda TM band aralıklarındaki kayma miktarlarının daha büyük olduğunu, buna karşın, TE band aralığının ve örtüşme bölgesinin kayma miktarlarının ilk durum ile hemen hemen aynı olduğunu göstermiştir.



Şekil 4.19. Dairesel hava boşlukları için belirlenen TM ve TE band aralıklarının örtüşme bölgesinde aralık ortası frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi

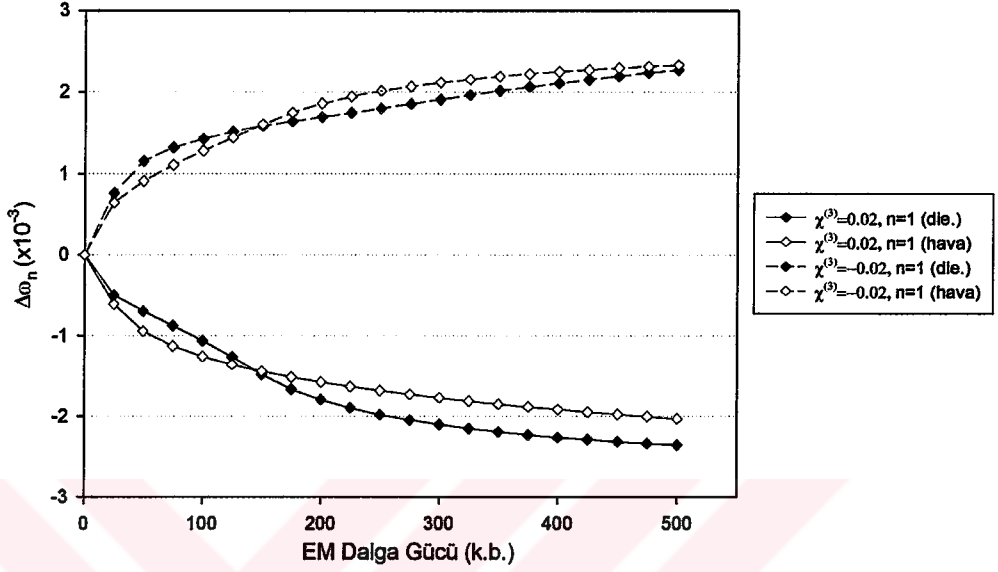
TM ve TE band yapılarında band kenarı frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi Şekil 4.20’de görülmektedir. Şekilde, aralık orta frekanslarında gözlenen değişimden farklı olarak, dielektrik bandlarının band aralığı kenarlarında doğrusallıktan sapmaya hava bandlarına göre genel olarak daha duyarlı olduğu belirlenmiştir. Bu durum, Bölüm 4.2.1’de elde edilen sonuçlarla uyumludur. Ancak, 1. TM band aralığında pozitif Kerr duygunluğu için $P > 225$ ve negatif Kerr duygunluğu için $P < 75$ bölgelerinde hava bandının kayma miktarının daha fazla olduğu bulunmuştur.



Şekil 4.20. Hava boşlukları için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarında band kenarı frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi

TE ve TM band aralıklarının örtüşme bölgesinin kenarlarındaki frekans değerlerinin değişimi Şekil 4.21’de görülmektedir. Burada, pozitif Kerr duygunluğu için $P < 150$ değerlerinde band aralığı kenarında dielektrik bandının daha duyarlı olduğu

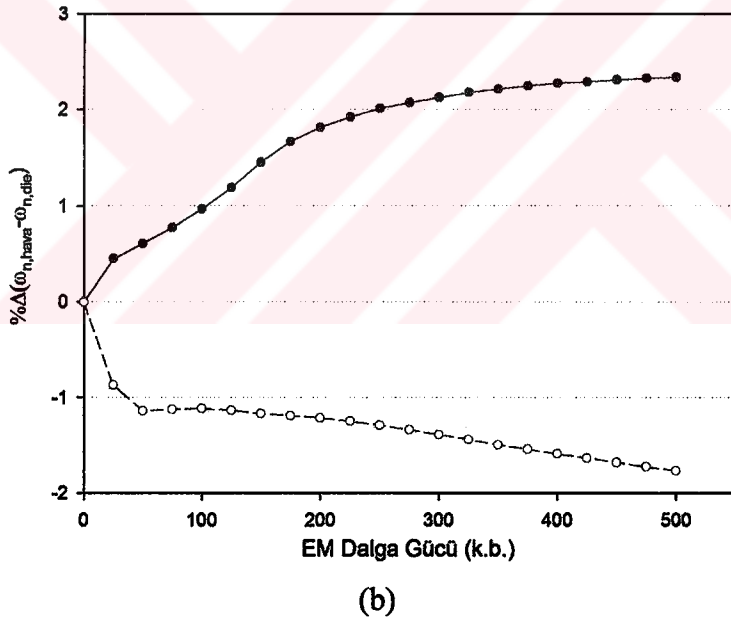
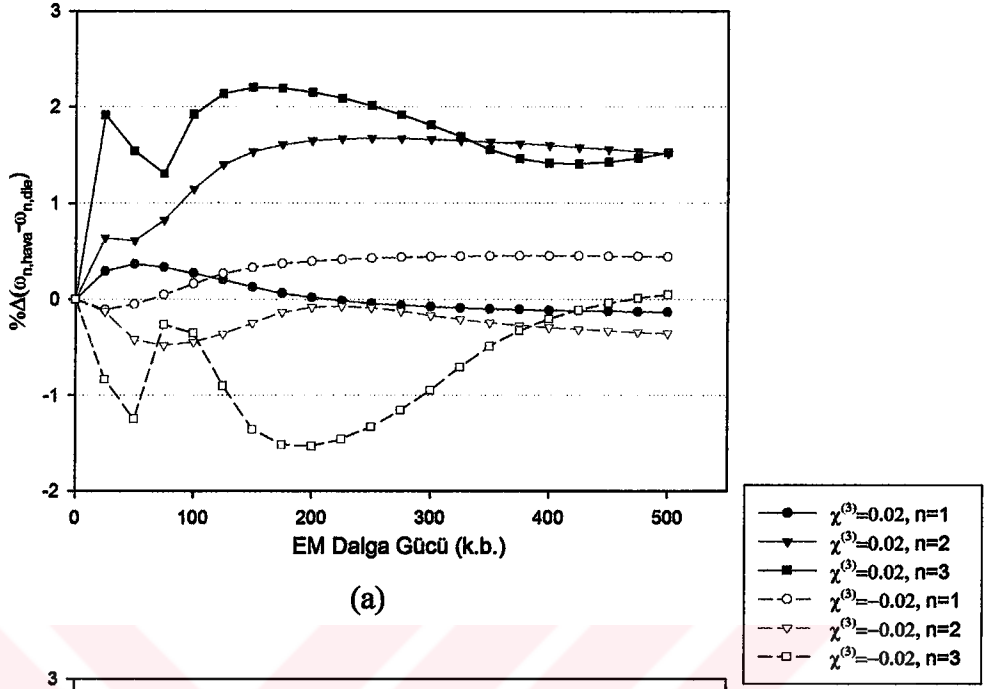
belirlenmiştir. Negatif Kerr duygunluğu için, $P < 175$ değerleri için dielektrik bandının, daha büyük değerler için hava bandının daha duyarlı olduğu gözlenmiştir.



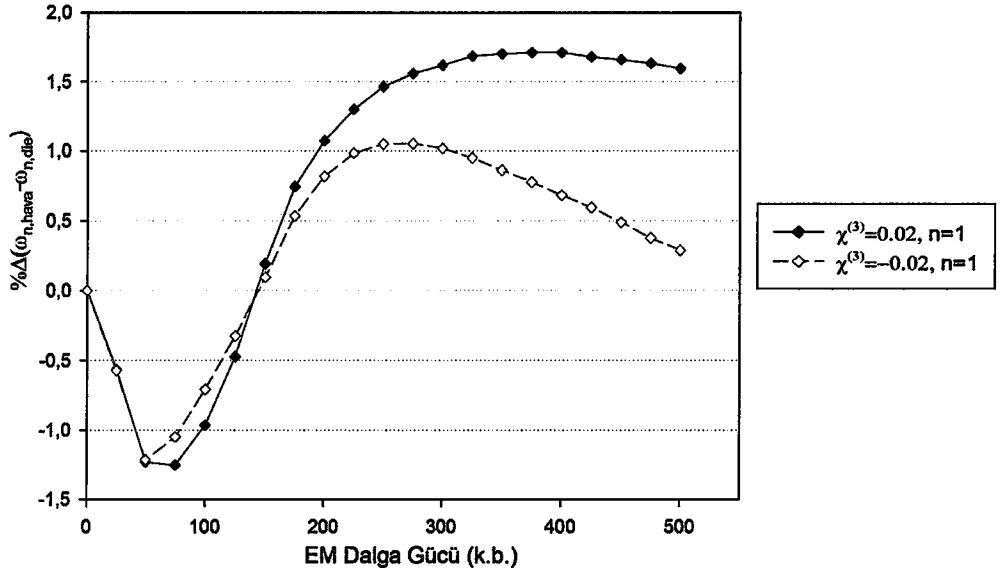
Şekil 4.21. Dairesel hava boşlukları için belirlenen TM ve TE band aralıklarının örtüşme bölgesinde band kenarı frekanslarının EM dalga gücü ile değişimi

Şekil 4.22'de verilen TE ve TM band aralıklarının genişliğinin EM dalga gücü ile değişimi yukarıdaki tartışmaların ışığında incelendiğinde, 2. ve 3. TM band aralıklarının pozitif Kerr duygunluğu için tüm güç değerlerinde arttığı ve negatif Kerr duygunluğu için de azaldığı gözlenmiştir. Buna karşılık, 1. TM band aralığının pozitif Kerr duygunluğu için düşük güç değerlerinde genişlediği ve, $P > 225$ olmak üzere, yüksek güç değerleri için daraldığı gözlenmiştir. TE band aralığı için, daha önce tartışılanlara uygun sonuçlar bulunmuştur.

Band aralığı genişliğinin TE ve TM band aralıklarının örtüşme bölgesi için değişiminin incelenmesi sonucu, band aralığının pozitif ve negatif Kerr duygunlukları için belirli güç değerlerine (sırasıyla $P = 150$ ve $P = 175$) kadar daralırken, daha yüksek güç değerleri için genişlediği gözlenmiştir (Şekil 4.23).



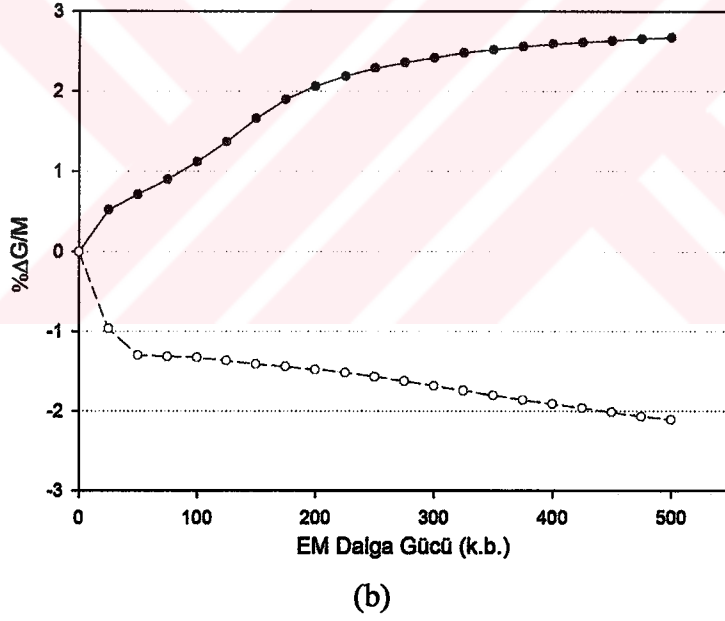
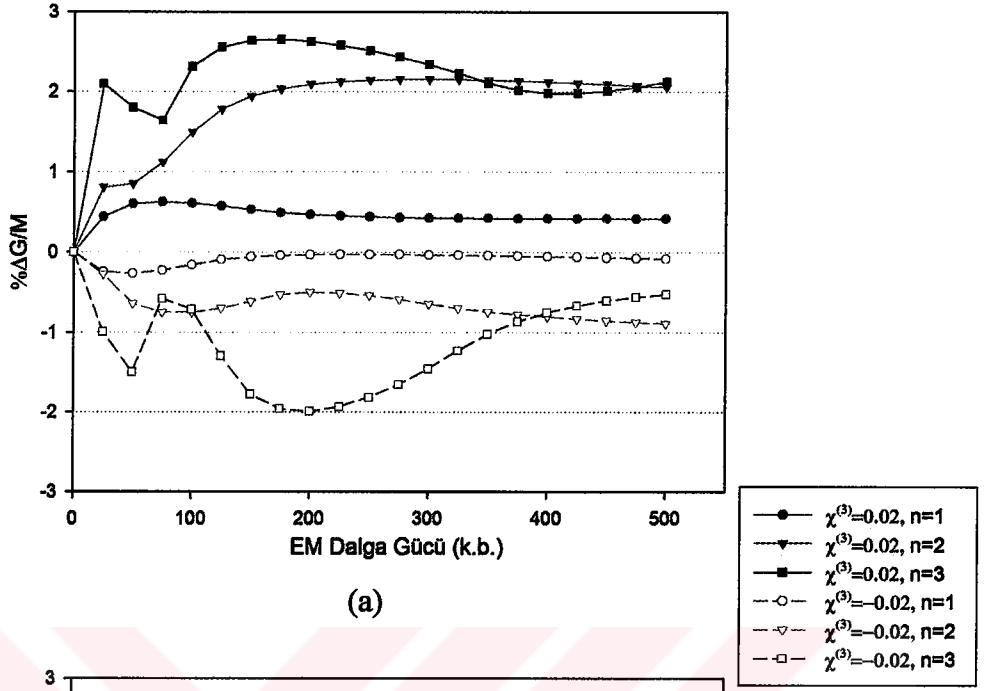
Şekil 4.22. Dairesel hava boşlukları için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarının genişliğinin EM dalgı gücü ile deęiřimi



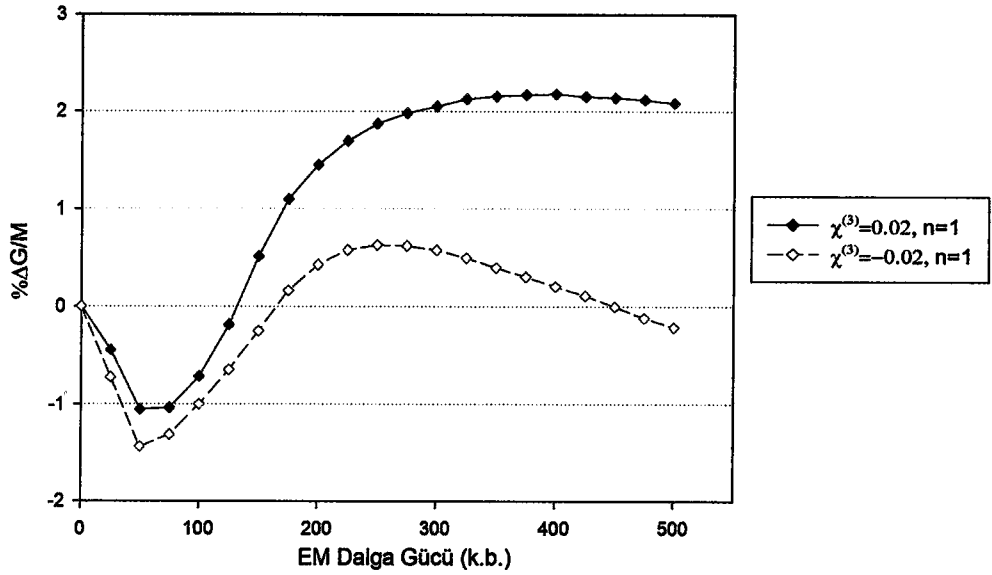
Şekil 4.23. Dairesel boşlukları için belirlenen TM ve TE band aralıklarının örtüşme bölgesinin genişliğinin EM dalga gücü ile değişimi

TE ve TM band aralıklarının genişliğinin EM dalga gücü ile değişimine benzer değişim band aralığı oranında da görülmüştür (Şekil 4.24). Ek olarak, örtüşme bölgesinin band aralığı oranının değişimi de yukarıda tartışılan sonuçlara benzer eğilim sergilemektedir.

İncelenen her iki durumda (dielektrik daireler ve dairesel hava boşlukları) aralık orta frekanslarında gözlenen değişimlerin her band aralığı için doğrusal durumdaki değerler ile orantılı değişim göstermesi ve duygunluktaki değişimi andıran biçimde doyuma gittiğinin belirlenmesi, bu verilere eğri uydurarak gözlemlerin geliştirilebileceği düşüncesini doğurmuştur. Hesaplamalarda dalga yüzü üzerinde elektrik alan değeri sabit olan düzlem dalga biçiminde uyarılar kullanıldığından, uyarı dalga yüzünde ışık şiddeti dağılımının sabit olduğu kabul edilebilir. Bu nedenle, E_0 EM dalganın genliği olmak üzere, elektrik alanı genliğinin karesi ile dalga gücü arasında orantı kurulabilir ($P \propto E_0^2$). Böylece elektriksel duygunluktaki değişim, $aP/(b + P)$ biçimindeki hiperboller ile temsil edilebilir.



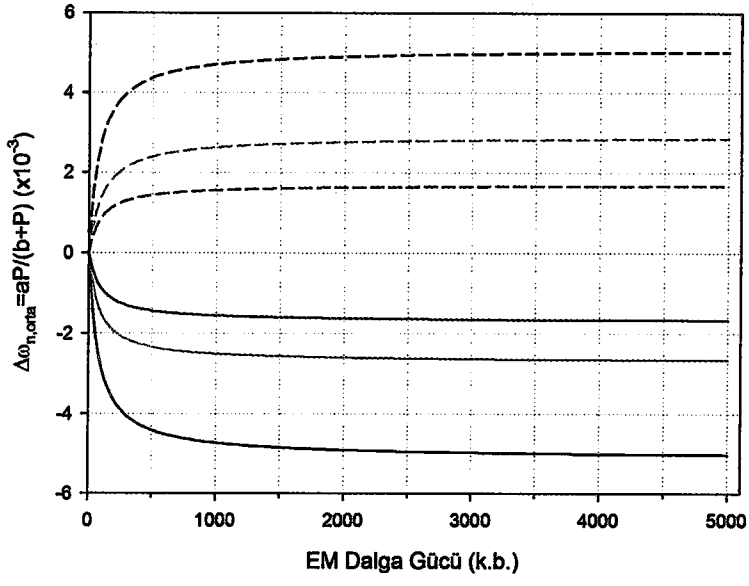
Şekil 4.24. Dairesel hava boşlukları için belirlenen (a) TM ve (b) TE band aralıklarında band aralığı oranlarının EM dalga gücü ile değişimi



Şekil 4.25. Hava boşlukları için belirlenen TM ve TE band aralıklarının örtüşme bölgesinde band aralığı oranlarının EM dalga gücü ile değişimi

Yukarıda bahsedilen hiperbol denklemi temel alınarak dairesel hava boşlukları için TM aralık ortası frekanslarına yapılan eğri uydurma sonucu, bu eğrilerin elde edilen verileri iyi temsil ettiği ($R^2 > 0.99$, a ve b parametreleri için standart hatalar $< \%2$) görülmüştür.

Aralık orta frekanslarına uydurulan eğrilerin $P = 5000$ EM dalga gücüne göre değişimi Şekil 4.26'da verilmiştir. Eğrilerin $P = 1000$ 'den büyük değerler için güç ile hemen hemen doğrusal değiştiği görülmektedir. Bu nedenle, çalışmada göz önünde bulundurulan fiziksel parametreler için doğrusallıktan sapma incelenirken çıkılan en yüksek gücün ($P = 500$) gözlenmek istenen fiziksel değişimlerin ortaya çıkması için yeterli olduğu sonucuna varılmıştır.



Şekil 4.26. Dairesel hava boşlukları için belirlenen aralık orta frekanslarının EM dalga gücü ile değişim verilerine uydurulan $f(P) = aP/(b + P)$ biçimindeki eğriler

5. SONUÇ

Çalışmada incelenen 2 boyutlu kare örgü yapısındaki fotonik kristalin band yapısı Düzlem Dalga Açılımı (DDA) ve Zamanda Sonlu Farklar (FDTD) yöntemleri ile elde edilmiş, iki yöntem için ayrı ayrı yürütülen yakınsama incelemesinde sonuçların ikinin kuvveti şeklinde artan kafes bölümlendirmeleri için hızla yakınsadığı belirlenmiştir. Ayrıca, elde edilen FDTD sonuçlarının DDA sonuçları ile karşılaştırılması sonucu, bu yöntemin incelenen örgünün band yapısının eldesinde kullanılabileceği belirlenmiştir.

Doğrusallıktan Kerr tipi sapma gösteren 2 boyutlu fotonik kristale yüksek ışık şiddetine sahip demet gönderilmesi ile açısız frekans öz değerlerinin Kerr duygunluğunun işaretine bağlı olarak, EM dalganın taşıdığı gücün artması ile daha düşük ya da yüksek frekanslara kaydığı görülmüştür. Band yapısında gözlenen bu kaymanın, band aralıklarının pozitif Kerr duygunluğu için kırmızıya, negatif Kerr duygunluğu için maviye kayması ile sonuçlandığı belirlenmiştir. Bunun yanında, band aralıklarında gözlenen kayma miktarlarının daha yüksek frekanslı bölgelerdeki band aralıkları için daha büyük olduğu görülmüştür.

Artan EM dalga gücü ile band aralığı kenarlarındaki frekans değerleri göz önünde bulundurularak band yapısındaki kaymalar incelendiğinde, genel eğilimin aksine, pozitif Kerr duygunluğu için dielektrik bandının band aralığı kenarındaki frekans değerinin hava bandının kenar değerine göre daha çok kırmızıya kaydığı gözlenmiştir. Bunun yanında, negatif Kerr duygunluğuna sahip ortamda da dielektrik bandlarının hava bandlarına göre daha çok maviye kaydığı görülmüştür.

Pozitif Kerr duygunluğu için dielektrik bandının genel olarak EM alan şiddetindeki değişimlere daha duyarlı olmasının band aralıklarının EM alan şiddetinin artırılması ile genişlediğini ve band aralığı oranlarının arttığını ortaya çıkarmıştır. Buna karşın, negatif Kerr duygunluğu için band aralıklarının daraldığı ve band aralığı oranlarının azaldığı belirlenmiştir.

6. KAYNAKLAR

- ARFKEN, G. 1985. *Mathematical methods for physicists*. Academic Press, ABD, s 573–577.
- ASHCROFT, N. W. ve MERMIN, N. D. 1976. *Solid State Physics*. Saunders College Publishing, ABD, s 63–95.
- BERENGER, J. P. 1994. A Perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *J. Of Computational Physics*. 114(2): 185–200.
- BOOTON, R. C. 1992. *Computational Methods for Electromagnetics and Microwaves*. Wiley Interscience, ABD, s 19–29.
- BOYD, R. W. 1992. *Nonlinear Optics*. Academic Press, 1. Baskı, San Diego, s 1–52.
- BUTCHER, P. N. ve COTTER, D. 1991. *The Elements of Nonlinear Optics*. Cambridge University Press, Cambridge, s 1–34.
- CHAN, C. T., YU, Q. L. ve HO, K. M. 1995. Order-N spectral method for electromagnetic waves. *Phys. Rev. B*. 51(23): 16635–16642.
- FRANKEN, P. A., HILL, A. E., PETERS, C. W. ve WEINREICH, G. 1961. Generation of Optical Harmonics. *Phys. Rev. Lett.* 7(4): 118–120.
- HO, K. M., CHAN, C. T. ve SOUKOLIS, C. M. 1990. Existence of a Photonic Gap in Periodic Dielectric Structures. *Phys. Rev. Lett.* 65 (25): 3152–3155.
- HUTTUNEN, A. ve TÖRMÄ, P. 2002. Band structures for nonlinear photonic crystals. *J. of App. Phys.* 91(7): 3988–3991.

- JOANNOPOULOS, J. D., MEADE, R. D. ve WINN, J. N. 1995. Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. Princeton University Press, New Jersey, s 8–37.
- JOHN, S. 1987. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys. Rev. Lett.* 58: 2486-2489.
- LOUSSE, V. ve VIGNERON, J. P. 2001. Self-consistent photonic band structure of dielectric superlattices containing nonlinear optical materials. *Phys. Rev. E* 63(2): 027602–027605.
- MAKSYMOV, I. S., MARSAL, L. F. ve PALLARÈS, J. 2004. Finite-difference time-domain analysis of band structures in one-dimensional Kerr-nonlinear photonic Crystals. *Optics Communications*, 239: 213–222.
- MAKSYMOV, I. S., MARSAL, L. F., USTYANSEV, M. A. ve PALLARÈS, J. 2005. Band structure calculation in two-dimensional Kerr-nonlinear photonic Crystals. *Optics Communications*, 248: 469–477.
- MEKIS, A., CHEN, J. C., KURLAND, I., FAN, S., VILLENEUVE, P. R. ve JOANNOPOULOS, J. D. 1996. High Transmission through Sharp Bends in Photonic Crystal Waveguides. *Phys. Rev. Lett.* 77(18): 3787–3790.
- MINGALEEV, S. ve KIVSHAR, Y. 2002. Nonlinear Photonic Crystals: Toward All-Optical Technologies. *Optics & Photonics News*, Temmuz: 48–51.
- PEDROTTI, F. L. ve PEDROTTI, L. S. 1993. Introduction to Optics. Prentice Hall, 2. Baskı, New Jersey, s 541–559.
- PENDRY, J. B. 1996. Calculating Photonic Band Structure. *J. of Phys. [Cond. Matt.]*. 8: 1085–1108.

- RSOFT DESIGN GROUP. 2005a. BandSOLVE 2.0 User Guide. RSoft Design Group, Inc., New York, s 209-212.
- RSOFT DESIGN GROUP. 2005b. FullWAVE 4.0 User Guide. RSoft Design Group, Inc., New York, s 71-78.
- SAKODA, K. 2001. Optical Properties of Photonic Crystals. Springer, Almanya, s 1-75.
- SALEH, B. E. A. ve TEICH, M. C. 1991. Fundamentals of Photonics. John Wiley & Sons, New York, s 737-855.
- SAUTER, E. G. 1996. Nonlinear Optics. John Wiley & Sons, New York, s 1-22.
- SHLAGER, K. L. ve SCHNEIDER, J. B. 1995. A Selective Survey of the Finite-Difference Time-Domain Literature. *IEEE Antennas & Propagation Magazine*, 37(4): 39-56.
- SOLJAČIĆ, M. ve JOANNOPOULOS, J. D. 2004. Enhancement of nonlinear effects using photonic crystals. *Nature Materials*, 3: 211-219.
- SULLIVAN, D. M. 2000. Electromagnetic Simulation Using the FDTD Method. Wiley-IEEE Press, ABD, s 49-63.
- TAFLOVE, A. ve HAGNESS, S. C. 2000. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method. Artech House, 2. Baskı, ABD, s 1-345.
- TINKHAM, M. 1964. Group Theory and Quantum Mechanics. McGraw-Hill, ABD, s 53-61.
- TRAN, P. 1995. Photonic-band-structure of material possessing Kerr nonlinearity. *Phys. Rev. B*, 52(15): 10673-10676.

YABLONOVITCH, E. 1987. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.* 58: 2059–2062.

YABLONOVITCH, E. 1991. Photonic Band Structure: The Face-Centered-Cubic Case Employing Nonspherical Atoms. *Phys. Rev. Lett.* 67 (17): 2295–2299.

YEE, K. S. 1966. Numerical solutions of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation.* 14(3): 302–307.



ÖZGEÇMİŞ

Ahmet Çiçek 01.02.1980 tarihinde Antalya'da doğdu. İlköğrenimini Antalya'da tamamladı. Orta öğrenimini 1996 yılında Adana Fen Lisesi'nde tamamladı. Aynı yıl kayıt yaptırdığı Bilkent Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü'nden 2003 yılında Fizik lisans derecesi ile mezun oldu. Eylül 2003'ten beri Akdeniz Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı'nda yüksek lisans eğitimini sürdürmektedir. Ayrıca, Ekim 2005'ten beri bu kurumda araştırma görevlisi olarak çalışmaktadır.

