GEBZE YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ MÜHENDİSLİK VE FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

T.C.

2-BOYUTLU FOTONİK KRİSTALLERDE YÜZEY PLAZMONLARININ FDTD YÖNTEMİ İLE SİMÜLASYONU

Mustafa Suphi Gülsu YÜKSEK LİSANS TEZİ FİZİK ANABİLİM DALI

GEBZE

2011

GEBZE YÜKSEK TEKNOLOJİ ENSTİTÜSÜ MÜHENDİSLİK VE FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

2-BOYUTLU FOTONİK KRİSTALLERDE YÜZEY PLAZMONLARININ FDTD YÖNTEMİ İLE SİMÜLASYONU

Mustafa Suphi Gülsu YÜKSEK LİSANS TEZİ FİZİK ANABİLİM DALI

TEZ DANIŞMANI PROF.DR.F.NECATİ ECEVİT

GEBZE

2011



YÜKSEK LİSANS TEZİ JÜRİ ONAY SAYFASI

G.Y.T.E. Mühendislik ve Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulu'nun 04.07.2011 tarih ve 2011/21 sayılı kararıyla oluşturulan jüri tarafından 21.09.2011 tarihinde tez savunma sınavı yapılan Mustafa Suphi GÜLSU'nun tez çalışması Fizik Anabilim Dalında YÜKSEK LİSANS tezi olarak kabul edilmiştir.

JÜRİ

ÜYE

(TEZ DANIŞMANI) : PROF.DR. F. NECATİ ECEVİT

ÜYE : PROF.DR. SAİT EREN SAN

ÜYE : DOÇ.DR. M. HASAN ASLAN

İMZA

ONAY

İMZA/MÜHÜR

ÖZET

TEZİN BAŞLIĞI: 2-BOYUTLU FOTONİK KRİSTALLERDE YÜZEY PLAZMONLARININ FDTD YÖNTEMİ İLE SİMÜLASYONU YAZAR ADI: MUSTAFA SUPHİ GÜLSU

Dielektirik bir alt tabaka üzerine konan ince bir altın metal film, onun üzerine bir altın disk dilimi yerleştirilmesi ile elde edilen iki boyutlu metalik fotonik bir kristal katmandan yansıyan ışığın taşımış olduğu bilgi, zaman uzayında sonlu farklar yöntemi kullanılarak araştırıldı. Farklı film kalınlığına, boyutuna ve örgü periyoduna sahip altından yapılmış fotonik kristal (FC) üzerinde meydana gelen yüzey plasmonlarının elektromanyetik alan yayılımları Zaman Uzayında Sonlu Fark (ZUSF) yöntemi kullanılarak MEEP programı ile incelendi.

SUMMARY

THESIS TITLE: SIMULATION WITH FDTD METHOD OF SURFACE PLASMONS IN TWO DIMENSIONAL PHOTONIC CRYSTALS

AUTHOR: MUSTAFA SUPHİ GÜLSU

Dielectric has been searched as the information carried by a light reflected on a superfical metalic photonic cristal layer which obtained by using method of finitedifference time domain that a thin gold metal film put over lower layer and positioning a piece of gold disc on it. Plasmonic electromagnetic field propagation, that occured over photonic crystal (which is) made of gold and having different film thickness and dimension, has been examined by MEEP programme that using Finite-difference time-domain (FDTD) method.

TEŞEKKÜR

Yüksek lisans tezi çalışmam boyunca, sabırlı bir şekilde başarılı olmam için bana her türlü desteği sunan, sevgili ve değerli hocam,

Prof.Dr. F. Necati Ecevit' e

Her zaman maddi ve manavi destek olan aileme;

Sevgili değerli Türkçe öğretmeni ve dostum, Mustafa Çetiner' e ve Özgen Uçar' a

En zor anımda yardımcı olan ve desteğiyle güç veren sevgili ve değerli hocam Yrd. Doç. Dr. Gülay Birkök' e

Bu günlere gelmemde üzerimde emeği olan tüm arkadaş ve dostlarıma,

sonsuz saygı ve sevgi ile teşekkürler....

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa</u>
ÖZET	IV
SUMMARY	V
TEŞEKKÜR	VI
İÇİNDEKİLER	VII
SİMGELER VE KISALTMALAR	IX
ŞEKİLLER DİZİNİ	XI
1. GİRİŞ	1
2.YÜZEY PLAZMONLARININ GENEL TEORİSİ	2
2.1 Metallerin Elektromanyetik Bilimi	2
2.1.1 Maxwell Denklemleri	2
2.1.2 Materyal Denklemleri	3
2.1.3 Lorentz Modeli	4
2.1.4 Drude Modeli	7
2.1.5 Lorentz Drude Modeli	9
2.2 Yüzey Plazmonu	10
2.2.1 Metal Dielektirik Arayüzünde Yüzey Plazmonları	10
3. ZAMAN UZAYINDA SONLU FARKLAR YÖNTEMİ	22
3.1 ZUSF 'nin Ana Fikri	22
3.2 Sonlu Farklar Yöntemi	22
3.3 ZUSF için Maxwell Denklemleri	25
3.4 Yee Hücresi	27
3.5 ZUSF Denklemleri	29
3.6 ZUSF Algoritması	32
3.7 Kararlılık Kriteri	33
3.8 Sınır Şartı	34
4. SİMÜLASYON	36

4.1 Simülasyon Modeli	36
4.2 Simülasyon	37
4.3 Örgü Peryodunun Değişiminin Etkisi	38
4.4 İnce Altın Film Katmanının Kalınlığının Değişiminin Etkisi	45
4.5 Altın Diskin Boyunun Değişiminin Etkisi	49
ONUÇLAR	53
XAYNAKLAR	55
ĎZGEÇMÍŞ	57
Ck 1	
2k 2	
2k 3	

VIII

SİMGELER VE KISALTMALAR

<u>Simgeler</u>	<u>Açıklama</u>
$\rho_{\rm dis}$: Dış yükler
ε	: Dielektirik geçirgenlik
ε(ω)	: Dielektirik fonksiyon
ε ₀	: Boşluğun dielektirik geçirgenliği
μ	: Manyetik geçirgenlik
μ_0	: Boşluğun manyetik geçirgenliği
е	: Elektron yükü
v	: Elektronun hızı
σ	: İletkenlik katsayısı
Κ	: Yay sabiti
Y	: Sönümlenme sabiti
τ	: Rahatlama zamanı
ω_0	: Doğal salım frekansı
ħ	: Planck sabiti
ω	: Açısal frekans
$\omega_{\rm p}$: Plazma frekansı
Ν	: Elektron sayısı
m	: Elektronun kütlesi
t	: Zaman
r	: Konum
n	: Kırılma indisi
С	: Işık hızı
k	: Dalga vektörü
\mathbf{f}_{j}	: Salınım kuvveti
E	: Elektrik alan
Н	: Manyetik alan
Μ	: Mıknatıslanma
Р	: Polarizasyon
D	: Elektrik yerdeğiştirme alanı

В	: Manyetik akı yoğunluğu
J	: Akım yoğunluğu
S	: Poynting vektörü
π	: Pi
J	: Birim alanı üzerine birim saniyede düşen ışığın enerji miktarı
R	: Yansıtıcılık
Т	: Geçirğenlik
Δx, Δy, Δz,	: ZUSF içerisnde birim hücre boyutu
L	: Örgü Peryodu
h _d	: Altın diskin kalınlığı
$h_{\rm f}$: Altın filmin kalınlığı
d	: Altın diskin çapı

Kısaltmalar <u>Açıklama</u>

FC	: Fotonik krsital
ZUSF	: Zaman Uzayında Sonlu Fark
LD	: Lorentz- Drude
ТМ	: Enine Manyetik
TE	: Enine Elektrik
YPP	: Yüzey Plasmon Polarition
EM	: Elektromanyetik dalga
MUK	: Mükemmel Uyumlu Katman
SSK	: Sogurucu Sınır Koşulu

ŞEKİLLER DİZİNİ

<u>Şekil</u>	<u>yfa</u>
2.1. Atomun merkezinin çevresinde belirli bir yörüngede dönen elektron şematik	
olarak gösterilişi. Kalın çizgilerle gösterilen oklar, elektron üzerine etkiyen dış bi	r
elektrik alana karşı, elektronun hızlanması üzerine oluşan karşı kuvvetlerdir. Bu	
kuvvetler, geri çağırıcı, sürtünme kuvvetidir.	5
2.2. Kartezyen koordinatlar sisteminde, x yönü boyunca düzlem dalgalar yayılır.	12
2.3. kartezyen koordinatlar içinde elektromanyetik dalganın yayılımı. k yayılım	
vektörü. Yayılım yönünün normaline dik doğrultuda elektrik ve manyetik alan	
vektörleri gösterilir.	13
2.4. A gelenin, T geçen, R yansıyan elektromanyetik dalganın genliğini temsileder	ſ.
Sırasıyla gelen açı, geçen açı ve yansıyan açıdır. n1 ve n2 iki farklı ortamın kırılm	a
indisidir.	14
2.5. Metal ve dieleketrik bir ortamın $z = 0$ düz bir arayüzü boyunca oluşan YPP	
yayılımı için tanımlanan geometri.	18
2.6. Silica (siyah çizgiler) , hava (gri çizgiler) ve ihmal edilen çarpışma frekanslı b	ir
Drude metali arasında bir arayüzde dispersiyon ilişkisi.	20
3.1. Merkezi farklar yaklaşımına göre türev hesabı.	24
3.2. Birim Yee hücresi.	27
3.3. Yee birim hücresinin kartezyen koordinatlar sistemi içerisinde tanımlanmış tür	m
uzaya yayılmış kafes yapısı.	28
3.4. Alan bileşenlerinin yerleşimi.	29
3.5. ZUSF içerisinde alan bileşenlerinin hesaplandığı zaman akış çizelgesi.	33
4.1. İki boyutda L örgü peryodu ile fotonik kristal katmanın tekrar etmesi ile elde	
edilen bir sensör dizaynı.	36
4.2. Lörgü peryodu ile kendini tekrar eden iki boyutta fotonik kristale üsten bak	ış.
Altın diskin çapı d harfi ile gösterilir.	36
4.3. Yüzey plasmon tekniğine dayadırılan metal fotonik kristal katman yapısının	
şeması.	37
4.4. Örgü sabiti L=600 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik ala	n
dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.	39

4.5. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, L= 600 nm örgü sabitli yapı içerisir	ıde
alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.	39
4.6. Örgü sabiti L=650 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik a	alan
dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.	40
4.7. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, L= 650 nm örgü sabitli yapı içerisir	ıde
alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.	40
4.8. Örgü sabiti L=690 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik a	alan
dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.	41
4.9. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, L= 690 nm örgü sabitli yapı içerisir	ıde
alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.	41
4.10. Örgü sabiti L=700 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik	alan
dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.	42
4.11. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, L= 700 nm örgü sabitli yapı içerisi	inde
alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.	42
4.12. Örgü sabiti L=750 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik	alan
dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.	43
4.13. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, L= 750 nm örgü sabitli yapı içerisi	inde
alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.	43
4.14. Örgü sabiti L=800 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik	alan
dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.	44
4.15. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, L= 800 nm örgü sabitli yapı içerisi	inde
alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.	44
4.16. İnce altın film kalınlığı hf = 30 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisi	inde
mayetik alan dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.	45
4.17. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, İnce altın film kalınlığı hf = 30 nm	ı' de
alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.	46
4.18. İnce altın film kalınlığı hf = 45 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisi	nde
mayetik alan dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.	46
4.19. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, İnce altın film kalınlığı hf = 45 nr	n' de
alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.	47
4.20. İnce altın film kalınlığı hf = 55 nm için için gerçekleştirilen simülasyon	
içerisinde mayetik alan dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.	47

4.21. 690 nm dalga boyunda yayılım için, İnce altın film kalınlığı hf = 55 nm' de	
alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.	48
4.22. İnce altın film kalınlığı hf = 65 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisind	e
mayetik alan dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.	48
4.23. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, İnce altın film kalınlığı hf = 65 nm'	de
alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.	49
4.24. Altın diskin çap uzunluğu d = 365 nm için gerçekleştirilen simülasyon	
içerisinde mayetik alan dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.	50
4.25. 690 nm dalga boyunda yayılım için, altın diskin çap uzunluğu d = 365 nm	
alınan, geçen ve yansıyan akının grafiği.	50
4.26. Altın diskin çap uzunluğu d = 465 nm için gerçekleştirilen simülasyon	
içerisinde mayetik alan dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.	51
4.27. 690 nm dalga boyunda yayılım için, altın diskin çap uzunluğu d = 465 nm	
alınan, geçen ve yansıyan akının grafiği.	51
4.28. Altın diskin çap uzunluğu d = 565nm için gerçekleştirilen simülasyon	
içerisinde mayetik alan dağılımının farklı t zamanlarındaki görüntüleri.	52
4.29. 690 nm dalga boyunda yayılım için, altın diskin çap uzunluğu d = 565 nm	
alınan, geçen ve yansıyan akının grafiği.	52

1. GİRİŞ

Geleneksel yarı iletken ve dielektrik malzemelerin yerine son günlerde metalik malzemeler ile elde edilen fotonik kristaller, yeni sensör dizaynları için geliştirilmektedir. Fotonik kristallerle yapılan sensörler genellikle analitin kırılma indisinin gerçek kısmı içindeki değişimleri ölçmektedir. Metalik fotonik materyaller, yüzey plazmonları olarak bilinen elektromanyetik yüzey dalgalarının metal üzerinde uyarılmalarından dolayı paha biçilemez bir özellik gösterirler. Yüzey plasmonları fotonik devrimi içerisinde, son zamanlarda önemli bir yer tutmaktadır.

Bu tez çalışması içerisinde, dielektrik bir alt tabaka üzerine konan altın ince metal film, ince altın metal film üzerine altın disk dilimi yerleştirlmesi ile elde edilen iki boyutlu metalik fotonik kristal katman tabakasından geçen ve yansıyan ışığın bilgisi, zaman uzayında sonlu farklar yöntemini kullanarak araştırıldı. Zaman uzayında sonlu farklar metodunu, elektromanyetik sistemlerin simülasyonunu modellemek için MIT (Masschusetts Institute of Technology) tarafından geliştirilen MEEP (MIT Elektromanyetik Denklem Yayılım) programı kullanılarak yapıldı. Fotonik kristallerle yapılan, metalik fotonik kristaller için, farklı altın film kalınlığı, farklı altın diskin uzunluğu, ve farklı fotonik kristal örgü peryodunun bir fonksiyonu ele alınarak fotonik kristallere dayandırılan, metalik fotonik materyal için en uygun boyutta sensör dizaynı araştırıldı. Daha önce yapılmış bir çalışma göz önene alınarakdan tez çalışması yürütüldü. Bu tezdeki çalışmada kullanılan model, [1]' nolu referansta verilen model temel alınarak yapılmıştır . O çalışmadan farklı olarak farklı dalga boylarında, altın için farklı optiksel sabitler ve ortam içinde yayılan ışığın farklı polarizasyon yönü içerisinde çalışmalar yapılmıştır. Avrıca farklı modeller için simülasyon kodları yazılmış ve çalıştırılmış ancak detaylı çalışmaları yapılmamıştır.

2.YÜZEY PLAZMONLARININ GENEL TEORİSİ

2.1 Metallerin Elektromanyetik Bilimi

2.1.1 Maxwell Denklemleri

Elektromanyetik alanların metaller ile etkileşimi, Maxwell denklemlerine dayanan klasik çerçeve içinde tam olarak anlaşılabilir [2]. Gerçekte tüm olay, elektromanyetik alanların nükleonlar ve elektronlar ile etkileşime girdiği mikroskobik dünya içerisinde gerçekleşir. Bu mikroskobik dünya içinde meydana gelen etkileşimi açıklamak için kullanılan denklemlere, mikroskobik Maxwell denklemleri denir. Mikroskobik alem içerisinde, atomu oluşturan nükleonlar ve elektronlar noktasal yükler olarak tanımlanır. Atom içerisinde bu yüklerin sürekli hareketine bağlı olarak ortaya çıkan elektromanyetik dalgalanmalar, bu noktasal yükler arasındaki yaklaşık ~10⁻¹⁰ m mesafeden daha kısa bir mesafe içinde, makroskobik ölçüm araçları ile ölçüleyemecek kadar hızlı bir değişim gösterirler. Bu nedenle tüm mikroskobik dalgalanmaların ortalaması alındığında makroskobik denklemlerin içinde görüldüğü gibi, oldukça yavaş ve düzgün değişen makroskobik büyüklüğün değerine denk gelir [3]. Dielektrik ortam içerisinde makroskobik Maxwell denklemleri,

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{D} = \boldsymbol{\rho}_{dis} \tag{1.1a}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B} = 0 \tag{1.1b}$$

$$\nabla \times E = -\frac{\partial B}{\partial t}$$
(1.1c)

$$\nabla \times H = J_{dis} + \frac{\partial D}{\partial t}$$
(1.1d)

olarak tanımlanır. E elektrik alan, *H* manyetik alan, *J* akım yoğunluğu, *D* elektrik yerdeğiştirme alanı, *B* manyetik akı yoğunluğu, ρ serbest elektrik yük yoğunluğudur.

2.1.2 Materyal Denklemleri

Metaller, kendi içlerinde keyfi bir yönelime sahip küçük kristal kümelerden meydana gelen bir yapıdır. Dış bir ortamdan metaller üzerine elektromanyetik bir alan kuvveti uygulandığı zaman, mıknatıslanma, polarizasyon ve iletkenlik gibi dışardan uygulanan alan kuvvetine karşı metallerin karakteristik özelliklerinden doğan bazı tepkiler ortaya çıkar[4]. Bu olayların tümü, fiziksel nicelikler arasında bir bağlantı kurmaya yarayan, bünye denklemleri ile açıklanır. Bünye denklemleri:

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon \boldsymbol{E} \tag{1.2a}$$

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\mu} \boldsymbol{H} \tag{1.2b}$$

Dört makroskopik alan vektörü E, D, B ve H arasında, P (polarizasyon) ve M (mıknatıslama) vasıtasıyla, Bünye denklemleri içinde:

4

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon_0 \boldsymbol{E} + \boldsymbol{P} \tag{1.3a}$$

$$\boldsymbol{H} = \frac{1}{\mu_0} \boldsymbol{B} - \boldsymbol{M} \tag{1.3b}$$

şeklinde ki gib bir bağlantı kurulur.

Boş uzayın ε_0 , elektriksel geçirgenliği ve μ_0 , manyetik geçirgenliği olarak tanımlanır. Konumuzun çerçevesi içerisinde manyetik özellikler göstermeyen malzemeler ile ilgilendiğimizden, *M* mıknatıslanmayı sıfır olarak alırız. Bundan dolayı materyal denklemi içine katkı yalnızca *P* polarizasyon etkisinden gelir. Metal yapı içerisinde rastgele yönelimlere sahip dipoller üzerine dış bir elektrik alan uygulandığında, bu dipoller elektrik alanın uygulanma yönüne göre aynı doğrultuda bir yönelme gösterirler. Bundan dolayı da metal ortam içinde birim hacimde aynı yönelime sahip elektrik dipol momentler toplanır. *P* polarizasyon, elektrik alanın

4

uygulanması sonucu ortaya çıkan aynı yönde yönelmiş dipol momentlerin toplamı olarak tanımlanır. Tek bir elektron için dipol moment,

$$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{e}\boldsymbol{r} \tag{1.4}$$

şeklinde yazılır. *e* elektronun yükü, *r* ise elektrik alan etkisi altında elektronun yer değişdirme mesafesidir. *N* elektronlu bir elektron sistemi içinde oluşan toplam dipol moment için polarizasyon,

$$\boldsymbol{P} = N \boldsymbol{p} \tag{1.5}$$

olarak ifade edilir. En son kurucu lineer denklem, E elektirk alan ve iç akım yoğunluğu arasındaki ilişki σ iletkenlik yoluyla tanımlanır.

$$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{E} \tag{1.6}$$

2.1.3 Lorentz Modeli

Elektromanyetik dalgalar metal bir ortam ile karşılaştığında metal ortamın içinde bulunan elektronlar ve nükleonlar gibi yüklü parçaçıklar ile kompleks bir etkileşime girerler [5]. Bu etkileşim klasik mekaniğe dayandırılan basit bir model üzerinden kolayca açıklanabilir. Bu model içinde, metal atomlarının yapısında bulunan nükleonlara bağlı elektronlar üzerine dış bir elektromanyetik kuvvet uygulandığında, elektronun davranışı Hooke kanununa göre tanımlanan elastiklik kuvveti ile titreşimler gösterir. Gelen elektromanyetik salınım alanına karşı, bu yükler kendi kendilerine salınırlar ve ikinci bir elektromanyetik dalga yayıcı olarak hareket ederler. Yüklü parçaçıklar ile elektromanyetik alanlar arasındaki etkileşimi açıklayan klasik bir hareket denklemi yazılabilmesi için, Lorentz kuvveti ve Newton'un ikinci kanunu birleştirilir. Lorentz kuvveti:

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{e} \left(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B} \right) \tag{1.7}$$

e elektronun yükü, *v* ise elektronun hızıdır [6]. Elektronun hızı, boş uzayda ilerleyen

ışığın hızı ile karşılaştırıldığında çok küçük olduğundan, Lorentz kuvveti içinde yer alan manyetik alanın katkısı ihmal edilecek kadar küçüktür. Bu durumda Lorentz kuvveti içinde sadece elektrik alandan bir katkı gelir.



Şekil 2.1. Atomun merkezinin çevresinde belirli bir yörüngede dönen elektron şematik olarak gösterilişi. Kalın çizgilerle gösterilen oklar, elektron üzerine etkiyen dış bir elektrik alana karşı, elektronun hızlanması üzerine oluşan karşı kuvvetlerdir. Bu kuvvetler, geri çağırıcı, sürtünme kuvvetidir.

Tek bir elektron için, $m\ddot{r} + m\gamma\dot{r} + Kr = -eE$ hareket denklemi aşağıdaki gibi,

$$K\mathbf{r} + m\gamma \frac{d\mathbf{r}}{dt} + m\frac{d^2\mathbf{r}}{d^2t} = -e\mathbf{E}$$
(1.9)

yazılır. İlk terim merkeze yerleşmiş nükleonlara bağlı elektronlar için geri çağırıcı kuvvet, ikinci terim sürtünme kuvvet, üçünçü terim uygulanan alana karşı kütlenin zamanla ivmelenmesini göstermektedir. Denklem (1.9)' da, *K* yay sabiti, γ sönümlenme sabiti, *r* elektronun nükleona olan uzaklığı, *m* kütle olarak tanımlanmaktadır. Zamana bağlı harmonik bir hareket yapan $E = E_0 e^{-i\omega t}$ bir elektirk alan vektörüne, benzer bir ifadeyi de *r* mesafesi için zamana bağlı harmonik hareketi için $r = r_0 e^{-i\omega t}$ yazabiliriz. Bu durumda, r ye göre çözüm oldukça basitleşir.

$$\vec{r} = \frac{(-e/m)\vec{E}}{-\omega^2 + i\,\omega\,\gamma + K/m} \tag{1.10}$$

Doğal salınım frekansı , ω_0 kütle yay sistemi içerisinde $(\omega_0)^2 = K/m$ olarak tanımlanır ve ortam içinde dipollerin rezonans frekansı olarak da bilinir. Bu (1.10) deklemi, polarisazyon denklemi içinde yerine yazarsak,

$$\boldsymbol{P} = \frac{(N e^2/m)}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i \,\omega \,\gamma} \boldsymbol{E}$$
(1.11)

polarizasyon ve elektrik alan arasındaki ilişkiyi elde ederiz. Materyal denklemi içinde tanımlanan elektriksel yerdeğiştirme vektörü **D**, polarizasyon ve elektrik alan ile ilişkilendirildiğinden, (1.11) denklemini $D = \varepsilon_0 E + P$ de yerine yazarsak ve her yönde aynı özelliği gösteren isotropik materyallerle uğraşmamızdan dolayı,

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon_0 \varepsilon \boldsymbol{E} \tag{1.12}$$

(1.3a), (1.11) ve (1.12) denklemlerini birleştirdiğimizde, $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i \varepsilon_2(\omega)$ dielektrik fonksiyon aşağıdaki gibi,

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{Ne^2}{m\varepsilon_0} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i\,\gamma\,\omega}$$
(1.13)

tanımlanır. Yukarıda ki denklem içinde $\omega_p = \sqrt{Ne^2/m\varepsilon_0}$ plazma frekansı olarak tanımlanır. Dielektrik fonksiyon, $\varepsilon_1(\omega)$ gerçek ve $\varepsilon_2(\omega)$ sanal kısımlarına ayrılarak iki kısım içinde incelenir.

$$\epsilon_{1}(\omega) = 1 + \frac{\omega_{p}^{2}(\omega_{0}^{2} - \omega^{2})}{(\omega_{0}^{2} - \omega^{2})^{2} + \gamma^{2}\omega^{2}}$$
(1.14)

$$\varepsilon_{2}(\omega) = 1 + \frac{\omega_{p}^{2} \gamma \omega}{(\omega_{0}^{2} - \omega^{2})^{2} + \gamma^{2} \omega^{2}}$$
(1.15)

Kompleks kırılma indisi $n = \sqrt{\varepsilon(\omega)} = n_1 + i n_2$ dir. Kompleks sanal ve gerçek kırılma indisleri $(n_1 + i n_2)^2 = (n_1^2 - n_2^2) + i(2n_1n_2)$, dielektrik fonsiyonun sanal ve kompleks kısımlarına göre kolayca ayrıştırılabilir. Dielektrik fonksiyonu çoklu salınımlar içinde genelleştirildiğinde,

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \sum_{j=1}^{N} \frac{f_j \omega_{pj}}{(\omega_j^2 - \omega^2) - i\gamma_j \omega}$$
(1.16)

çoklu salınım özelliği gösteren sistemlere göre, Lorentz modeli olarak tanımlanır.

2.1.4 Drude Modeli

Metaller içlerinde hem serbest hem de bağlı elektronlar bulundururlar ancak bu elektronların çoğu serbest haldedir. Bu durumda, metallerin optiksel özellikleri serbest elektron gazının dielektrik fonksiyonuna bire bir benzeyen bir plazma modeli ile açıklanabilir. Dış bir elektrik alana maruz kalan bir elektron denizi için, Drude modeline göre tanımlanacak hareket denklemi içinde yalnızca serbest elektronların var olduğu unutulmamalıdır.. Bu hareket denklemi içinde bağlı elektronlara uygun olarak tanımlanan yay sabiti sıfır olarak tanımlanır ve serbest elektronlar için yeni bir hareket denklemi oluşturulur. Bu oluşturulan hareket denklemi içinde yay sabitinin sıfır olarak alınması, doğal salınım frekansı olarak tanımlanan ω_0 frekansının sıfıra eşit olmasına neden olur. O nedenle dış bir elektrik alana maruz kalan bir elektron gazı için oldukça basit bir hareket denklemi yazabiliriz.

$$m\frac{\partial r^2}{\partial t^2} + m\gamma \frac{\partial r}{\partial t} = -eE \qquad (1.17)$$

Uygulanan elektrik alanın $E(t) = E_0 e^{-i\omega t}$ zamana bağımlı harmonik bir hareket yaptığını varsaydığımızdan, bir elektronun diğer bir elektronla çarpışmasından sonra ikinci defa başka bir elektronla çarpışmasına kadar geçen süre zarfında salınım hareketi için, $x(t) = x_0 e^{-i\omega t}$ özel bir çözüm denklemi yazılır[5]. Uygulanan elektromanyetik alana karşı elektronlar salınırlar ve elektronların yapmış olduğu salınım hareketi kendine has bir $\gamma = 1 / \tau$ çarpışma frekansı ile sönümlenir. Serbest bir elektron gazının rahatlama zamanı τ olarak bilinir. Oda sıcaklığında $\gamma = 100$ THz çarpışma frekansına karşı gelen, rahatlama zamanı yaklaşık olarak 10^{-14} sn civarındadır.

$$\boldsymbol{r}(t) = \frac{\boldsymbol{e}}{\boldsymbol{m}(\omega^2 + i\gamma\omega)} \boldsymbol{E}(t)$$
(1.18)

Elektrik alanın etkisi altında P = -Ne r polarizasyon aşağıdaki biçimde yazılır.

$$\boldsymbol{P} = -\frac{Ne^2}{m(\omega^2 + i\,\gamma\,\omega)}\boldsymbol{E}$$
(1.19)

Materyal denklemin deplasman denklemi içinde P' ye göre bu ifade yerine yazılırsa:

$$\boldsymbol{D} = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega + i \, \gamma \, \omega} \right) \boldsymbol{E}$$
(1.20)

Serbest elektron gazının dielektrik fonksiyonu veya Drude modeli olarak

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\gamma\omega}$$
(1.21)

tanımlanır. Bu $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega)$ +i $\varepsilon_2(\omega)$ kompleks dielektrik fonksiyonunun sanal ve gerçek kısımları içinde aşağıdaki gibi ayrıştırılır.

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2 \tau^2}{1 + \omega^2 \tau^2}$$
(1.22a)

$$\varepsilon_{2}(\omega) = \frac{\omega_{p}^{2}\tau}{\omega(1+\omega^{2}\tau^{2})}$$
(1.22b)

2.1.5 Lorentz Drude Modeli

Yüzey plasmonları üzerine yapılan araştırmalarda genellikle iki soy metal çok fazla kullanılır. Kullanılan bu soy metaller altın ve gümüştür. 0.1 eV den 6 eV' ye kadar bir aralığı kapsayan bölge içinde metallerin dielektrik yanıtlarının ara bant ve serbest elektron kısımlarının her ikisini de yorumlamak için Lorentz- Drude (LD) modeli kullanılır.

LD modeli aşağıda tanımlanan kompleks dielektrik fonksiyon ifadesi içinde gösterilir.

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon(\omega)^{(s)} + \varepsilon(\omega)^{(b)}$$
(1.23)

LD modeline göre kompleks dielektrik fonksiyon yukarıda görüldüğü gibi iki kısım içinde ele alınır. Bunlardan ilki iç band geçişleri (genellikle metaller içinde serbest elektron kısmı olarak söz edilir) ile ilgilidir. İkinci kısım ise ara band geçişlerini (metaller içinde bağlı elektronların etkisini gösterir.) tanımlar. Bu durumda LD modeli aşağıdaki gibi tanımlanır [7]:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2 f_0}{\omega^2 + i \gamma_0 \omega} + \sum_{j=1}^N \frac{f_j \omega_{pj}}{(\omega_0^2 - \omega^2) - i \gamma \omega}$$
(1.24)

Kompleks dielektrik fonksiyonun, ilk iki terimi Drude modeli veya serbest elektron modeli olarak bilinir. Kalan son terimi ise Lorentz modeli ile ilgilidir. Deneysel olarak elde edilen 11 tane metalin optiksel sabiti çeşitli yayınlar içerisinde verilmiştir [8].

2.2 Yüzey Plazmonu

Yüzey plazmonu fikri hakkında ilk bilgiler, 1902 yılında Wood tarafından yapılan deneysel bir çalışmaya kadar uzanır[9]. Wood yapmış olduğu deneysel çalışma içerisinde, çok renkli bir ışık demeti ile metalik bir kırınım ağını aydınlattı. Kırınım ağından geçen ışığı bir aynaya yansıttı ve ayna üzerinde kırılan ışığın spektrumu içerisinde dar bir alanda oluşan siyah bandların varlığına dikkat çekti. Wood bunun yalnızca bir anamoli olabileceğini söyledi. Fano, yaptığı çalışmalarda kırınım ağının yüzeyi üzerinde elektromanyetik yüzey dalgalarının uyarılması ile bu anomalilerin bir alakası olabileceği sonucuna vardı. 1958 yılında Thurbadar, bir alt tabaka üzerine yerleştirilmiş çok ince metal bir filmi aydınlattığında, metal filmin yansıtıcılığının önemli ölçüde azaldığını fark etti. Ancak böyle bir olayı yüzey plasmonları ile ilişkilendirmedi. Thurbadar'ın elde etmiş olduğu sonuçları Otto, 1968 yıllında tam olarak açıkladı. Otto, toplam yansıma metodu içinde yansıtıcılığın önemli ölçüde azalmış olmasına neden olarak, metalin yüzeyi üzerinde oluşan yüzey plasmonunu gösterdi. Aynı yıl Kretschmann ve Raether tarafından da toplam yansıma metodunu ortaya çıkaran farklı düzenekler içerisinde de yüzey plasmonlarının oluşabileceği gösterildi.

2.2.1 Metal Dielektirik Arayüzünde Yüzey Plazmonları

Bu bölümün amacı yüzey plasmonlarının metal dielektrik bir ortamın arayüzünde nasıl oluştuğunu açıklamaktır. Elektromanyetik yüzey dalgalarına genel bir çerçeve içerisinde bakıldığında, bu dalgalar üç özel durum içinde ele alınır. Bunlar: yüzey plasmonları, yüzey fonon polaritionu ve Sommerfeld yüzey dalgalarıdır. Elektrodinamiğin teorisine göre, yüzey plasmonları bir yüzey dalgasıdır. Yüzey dalgaları, insanlar tarafından üretilen radyo dalgalarının dünya çevresinde yayılmaya başladığı ilk günden beri, geniş kapsamlı bir şekilde üzerinde çalışmalar yapılan bir konu olmuştur. Bir başka bakış noktası olan, optik alanına göre ise, yüzey plasmonları bir arayüzün modlarıdır. Yüzey plazmonları üzerine, 70 ve 80' ler de başlayan çalışmalar günümüzde de devam etmektedir. Katı hal fiziğine göre ise plazmon, elektronların topluca uyarılmasıdır. İngilizce içerisinde "Surface Plasmon Polarition" kelimelerinin baş harfleri ile literatürde SPP olarak bilinir . Yüzey Plazmon Polarition (YPPs), elektromanyetik dalgalar ve metal içinde bulunan, daha çok metalin yüzeyinde yoğunlaşmış serbest elektronların, metal dielektrik arayüzü boyunca etkileşmesi sonucu oluşan uyarımlardır [10]. Bu uyarımlar yalnızca metal dielektrik ara yüzü boyunca yayılırlar ve ara yüz bölgesi içinde sınırlandırılmış bir yayılım gösterirler. Bazı yayınların içinde yüzey plasmon polaritionunun elektrostatik sınırına yüzey plasmonları denirken, pek çok yazar bu ayrımı yapmadan genel bir kullanım adı ile 'yüzey plasmonu' ifadesini kullanır. Peki polarition ne demektir? Materyal ortamı içerisinde hareket eden bir elektromanyetik dalga, ortamı polarize eden bir alandır ve bu nedenle de yükleri mekaniksel bir hareket yapması için uyarır. Materyal ortam içerisinde elektromanyetik alan ve yüklerin birleşimine izin verir. Bu birleşmiş uyarım polariton olarak adlandırılır.

Hangi tür arayüzlerde YPP oluşumu gözlenebilir? Metal yüzey ve bu metal yüzey ile bitişik bir dielektrik malzemenin yüzey geometrisi, metalik nano yapılar ve kompleks diğer parçacıkların bir seri dizilim içinde YPP modları oluştuğu gözlenir. Ayrıca yüzeyler arasında meydana gelen katmanlarda ve bu katmanların pürüzlü veya düz yüzey morfolojisi içerisinde çeşitli YPP modlarının oluşumu gözlemlenebilir. Gözlemlenen bu yüzeyler üzerinde de YPP modlarının özellikleri tanımlanabilir.

Metal dielektrik ortamın, en genel hali ile tanımlanan yalın düz bir arayüzde, elektromanyetik dalgaların yayılması sonucu oluşan yüzey plasmonlarını araştırabilmek için, ortam için yazılan makroskobik Maxwell denklemleri kullanmak zorundayız. Yayılım yönüne göre dik bir düzlem içinde sınırlandırılmış olan YPP modlarının yayılımı da kesinlikle yok olan alanlardan oluşur. Bu iki farklı ortam arasındaki tek arayüz de şekillenmiş yok olan dalgaları ve yayılımı ana özelliklerine göre kısaca yeniden gözden geçirmek oldukça eğiticidir[11]. Dielektrik geçirgenliği $\varepsilon(\omega)$ ile karakterize edilen izotropik, homojen ve manyetik olmayan (μ =1) bir ortam içinde EM dalgaların, E(r,t) elektrik alana göre karşı gelen dalga denklemi aşağıdaki gibi verilir:

$$\nabla^2 \boldsymbol{E} - \frac{\varepsilon(\omega)}{c^2} \frac{\partial^2 \boldsymbol{E}}{\partial t^2} = 0 \qquad (1.25)$$

Bu denklem içerisinde, *c* boş uzayda ilerleyen ışığın hızı olarak tanımlanır. Basit bir düzlem dalga için yazılan $E(r,t)=E_0 \exp[i (k \cdot r - \omega t)]$ elektrik alanı denklem (1.25) içerisinde yazıldığında:

$$\nabla^2 \boldsymbol{E} + k_0^2 \varepsilon \boldsymbol{E} = 0 \tag{1.26}$$

denklemin çözümü içerisinden, $k(\omega)$ dalga yayılım vektörüne göre bir dispersiyon ilişkisi ortaya çıkar:

$$|k(\omega)| = k^{2} = k_{x}^{2} + k_{y}^{2} + k_{z}^{2} = \varepsilon(\omega) \frac{\omega^{2}}{c^{2}} = \varepsilon k_{0}^{2} \quad (1.27)$$

denklemi içinde tanımlanan k_0 ifadesi , $k_0 = \omega/c$ vakumlu bir ortam içerisinde yayılan dalganın dalga vektörünü temsil eder. Yukarda tanımlanan (1.26) denklem, Helmholtz denklemi olarak genellikle adlandırılır.



Şekil 2.2. Kartezyen koordinatlar sisteminde, *x* yönü boyunca düzlem dalgalar yayılır.

Yayılım geometrisinin çözümünü en basit bir şekilde ele alabilmek için, iki boyutlu bir yapı içerisinde tek boyutta ilerleyen elektromanyetik dalganın keyfi bir dalga yayılım yönü şeçilir. Bu durumda yalnızca dielektrik fonksiyonu $\varepsilon(\omega)$ tek bir yön içerisinde sınırlanmış olur ve diğer yönlerden bagımsız olarak çözüm içinde ele

alınır. Şekil 2.2' de gösterildiği gibi, kartezyen koordinatlar sisteminde elektromanyetik dalgaların *x* yalnızca yayılım yönü, gelen dalganın geliş düzlemine dik yönü *y*, olarak tanımlanırsa, dielektrik sabitin yalnızca *z*' ye bağlı olduğu görülebilir $\varepsilon = \varepsilon$ (*z*). Elektromanyetik dalganın yayılım denkleminin çözümünü iki boyutlu yapı içinde düşündüğümüzden, denklem (1.27) için aşağıdaki gibi *z* ≥ 0 yarı sonsuz uzay içinde yayılan bir düzlem dalganın elektrik alan kısmı dalga yayılım vektörüne göre açıklanabilir:

$$E(r,t) = E_0 e^{-i\omega t} \exp[i(k_x x + k_z z)]$$
 (1.28)

Elektromanyetik konusu içinde, bir noktadan diğer bir noktaya yayılan elektromanyetik dalganın taşımış olduğu enerji Poynting vektörünün çözümünden elde edilir. Uzayın herhangi bir noktası içinde birim zamanda geçen elektromanyetik dalganın elektrik ve manyetik alanı içerisinde depolanan enerji yoğunluğu veya birim hacim başına düşün enerji akısının ölçüsü, Poynting vektörü olarak adlandırılır;

$$S = |E \times H|k \tag{1.29}$$



Şekil 2.3. kartezyen koordinatlar içinde elektromanyetik dalganın yayılımı. *k* yayılım vektörü. Yayılım yönünün normaline dik doğrultuda elektrik ve manyetik alan vektörleri gösterilir.

Elektromanyetik dalganın yayılımı, $k = k \hat{n}$, Şekil 2.3 de gösterilmekdedir. Kompleks Poynting vektörü, *S*, elektromanyetik alandaki zaman ortalamalı güç akışını temsil eder. Kompleks Poynting vektörü:

$$S = \frac{1}{2} \frac{c}{4\pi} E \times H^* \tag{1.30}$$

Enerji akışı "birim zamanda birim alandan akan enerji":

$$S = \frac{c}{8\pi} \sqrt{\frac{\varepsilon}{\mu}} |E_0|^2 \hat{n} = \frac{c}{8\pi} \sqrt{\frac{\mu}{\varepsilon}} |H_0^2| \hat{n} \qquad (1.31)$$

(1.32)

Ortalama sürede enerji yoğunluğu:

 $u = \frac{\varepsilon}{2} |E_0|^2$



Şekil 2.4. A gelenin, *T* geçen, *R* yansıyan elektromanyetik dalganın genliğini temsileder. $(\theta_i, \theta_t, \theta_r)$ Sırasıyla gelen açı, geçen açı ve yansıyan açıdır. n₁ ve n₂ iki farklı ortamın kırılma indisidir.

Farklı iki ortam arasında ki sınıra bir düzlem dalga düştüğünde gelen dalga, *A*, düzlem arasında ikiye ayrılır: ortam içine geri dönen dalgaya, *R*, yansıyan dalga,

Gelen elektromanyetik dalganın enerjisi iki farklı ortam arasında nasıl bölündüğünü inceleyelim. Manyetik malzemeler ile ilgilenmediğimizden, μ =1 olarak alınır. Gelen elektromanyetik dalganın içinde taşınan enerji miktarı sınırın iki farklı ortam arasındaki sınırın her birim alanı üzerine birim saniyede düşen ışığın enerji miktarı:

$$J^{(i)} = S^{(i)} \cos(\theta_i) = \frac{c n_1}{8\pi} |A|^2 \cos(\theta_i)$$
 (1.33)

sınırın birim alanı üzerinden her saniyede ayrılan yansıyan ve geçen dalganın enerjiside benzer bir ifade içerisinde verilir:

$$J^{(r)} = S^{(r)} \cos(\theta_r) = \frac{c n_1}{8\pi} |R|^2 \cos(\theta_r)$$
 (1.34)

$$J^{(t)} = S^{(t)} \cos(\theta_t) = \frac{c n_2}{8\pi} |T|^2 \cos(\theta_t)$$
 (1.35)

Bu denklemler oranlandığında,

$$R = \frac{J^{r}}{J^{i}} = \frac{|R|^{2}}{|A^{2}|} \qquad \text{ve} \qquad T = \frac{J^{r}}{J^{i}} = \frac{n_{2}}{n_{1}} \frac{\cos(\theta_{t})}{\cos(\theta_{t})} \frac{|T|^{2}}{|A|^{2}} \qquad (1.36)$$

R yansıtıcılık ve T geçirğenlik olarak tanımlanır.

 $k_x \in (-\infty, +\infty), k_z = \sqrt{\epsilon k_0^2 - k_x^2}$ sınırları içinde, denklem (1.28) geçerlidir. Bu denklem elektromanyetik yüzey problemlerine uygulandığında, *z* =0 düzlemi içinde yayılan elektromanyetik dalga arayüzde yayılımın korunması ile uyuşur. $E(x, y, z) = E(z)e^{i\beta t}$ denklemi, elektromanyetik dalganın *z* yönü içinde büyüklüğünün oluştuğunu, hemde *x* yönünde yayıldığını anlatır. Tabiki unutulmaması gereken şey, burada elektromanyetik dalganın yayılım yönü ve polarizasyon yönü, denklem içinde yazılan ifadeleri tanımlar. Kompleks parametre $\beta = k_x$ yayılan dalgaların, yayılım sabiti olarak adlandırılır ve yayılım yönü içinde dalga vektörünün bileşenine karşılık gelir. Bu ifademizi denklem (1.26) içinde yerine yazarsak,

$$\frac{\partial^2 \boldsymbol{E}(\boldsymbol{z})}{\partial \boldsymbol{z}^2} + (k_0^2 \boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\beta}^2) \boldsymbol{E} = \boldsymbol{0}$$
 (1.37)

elde edilir.

Benzer bir ifade de, *H* manyetik alanı için yazılabilir. (1.28) denklemine göre, dalga kılavuzu içinde belirli bir yönde ilerleyen elektromanyetik dalganın modlarını analiz yapmamız artık mümkündür. Tanımlanan dalga denkleminin daha açık bir çözümünü elde edebilmek için, *E* Elektrik ve *H* manyetik alanlarının farklı yönlerdeki, farklı alan bileşenlerini bulmamız gereklidir. Bu alan bileşenlerini elde edebilmek için, (1.1c, 1.1d) Maxwell rotasyonel denklemlerini kullanabiliriz. Zamana bağlı $(\partial/\partial t = -i\omega)$ harmoniklikten, *y* yönü $(\partial/\partial y = 0)$ içinde homojen ve *x* yönü $(\partial/\partial x = i\beta)$ boyunca yayılımdan dolayı, Maxwell rotasyonel denkleminin çözümünden elde edilen 6 skaler denklemi için yerlerine yazıldığında, aşağıda tanımlanan denklemler kümesi meydana gelir:

$$\frac{\partial E_{y}}{\partial z} = -i\omega \mu_{0} H_{x}$$
(1.38a)

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - i\beta E_z = i\omega\mu_0 H_y$$
(1.38b)

$$i\beta E_{y} = i\omega\mu H_{z}$$
 (1.38c)

$$\frac{\partial H_{y}}{\partial z} = i \,\omega \,\varepsilon_{0} \,\varepsilon \,E_{x} \tag{1.38e}$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - i\beta H_z = i\omega\varepsilon_0\varepsilon E_y \qquad (1.38f)$$

$$i\beta H_{v} = -\omega \varepsilon_{0} \varepsilon E_{z}$$
 (1.38g)

Böyle bir çözüm içinde, yayılan dalgaların farklı polarizasyonlarından dolayı iki farklı polarizasyon durumu için de iki farklı denklem kümesi elde edilir. İlk polarizasyon durumu TM enine manyetik veya *p*-polarizasyon modlarıdır. E_x , E_z ve H_y alan bileşenleridir. İkinci polarizasyon durumu TE enine elektirk veya *s*polarizasyon modlarıdır. Bu modlar içerisinde H_x , H_z ve E_y alan bileşenleri vardır.

TM modları için,

$$E_{x} = -i \frac{1}{\omega \varepsilon_{0} \varepsilon} \frac{\partial H_{y}}{\partial z}$$
(1.39a)

$$E_{z} = -\frac{\beta}{\omega \varepsilon_{0} \varepsilon} H_{y}$$
(1.39b)

$$\frac{\partial^2 H_y}{\partial z^2} + (k_0^2 \varepsilon - \beta^2) H_y = 0$$
 (1.39c)

TE modları için benzer bir şekilde,

$$H_{x} = i \frac{1}{\omega \mu_{0}} \frac{\partial E_{y}}{\partial z}$$
(1.40a)

$$H_{z} = i \frac{\beta}{\omega \mu_{0}} E_{y}$$
(1.40b)

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial z^2} + (k_0^2 \varepsilon - \beta^2) E_y = 0$$
 (1.41c)



Şekil 2.5. Metal ve dieleketrik bir ortamın z = 0 düz bir arayüzü boyunca oluşan YPP yayılımı için tanımlanan geometri.

Şekil (2.5) içinde gösterildiği gibi, z < 0 yarı sonsuz bölgesini $\varepsilon_1(\omega)$ dielektrik fonksiyonlu, kompleks karakteristik özellikli bir dielektriksel geçirgenliğe sahip bir metal yapı ile bitişik soğurucu olmayan, z>0 bölgesi içine yerleştirilen ε_2 pozitif gerçek dielektrik sabitli bir dielektrik ortam arasında, z=0' dan sonsuza uzanan tek bir arayüzde yüzey plasmon polaritionlarını oluşturabilmek için sırasıyla TM ve TE dalgaların yayıldığını varsayalım.

İlk olarak TM polarizasyon yönü içinde yayılan dalgalar için bir çözüm arayalım. Her iki yarı sonsuz uzay içinde (1.39) denklemlerini kullanarak yerlerine yazdığımızda,

z > 0 bölgesi içinde,

$$H_{v}(z) = A_{2} e^{i\beta x} e^{-k_{2} z}$$
 (1.42a)

$$E_{x}(z) = i A_{2} \frac{1}{\omega \varepsilon_{0} \varepsilon_{2}} k_{2} e^{i\beta x} e^{-k_{2} z}$$
(1.42b)

$$E_{z}(z) = -A_{2} \frac{\beta}{\omega \varepsilon_{0} \varepsilon_{2}} e^{i\beta x} e^{-k_{2}z}$$
(1.42c)

z < 0 bölgesi içinde,

$$H_{y}(z) = A_{1}e^{i\beta x}e^{k_{1}z}$$
 (1.43a)

$$E_{x}(z) = i A_{1} \frac{1}{\omega \varepsilon_{0} \varepsilon_{2}} k_{1} e^{i\beta x} e^{-k_{1} z}$$
(1.43b)

$$E_{z}(z) = -A_{1} \frac{\beta}{\omega \varepsilon_{0} \varepsilon_{2}} e^{i\beta x} e^{-k_{1} z}$$
(1.43c)

Arayüzde H_y ve $\epsilon_i\,E_z$ 'nin sürekli olması istendiğinden, $\,A_1$ = $A_2\,$ dir,

$$\frac{k_2}{k_1} = -\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \tag{1.44}$$

(1.42, 1.43) denklemleri içinde, üstellerin içinde gösterilen işaretler, tamamen kurgulanan sistem içerisinde materyallerin yerleşimlerine göre keyfi bir şekilde seçilir. Yüzeyde sınırlandırmak için, dielektrik ortamın dielektrik sabiti $\varepsilon_2 > 0$ olduğunda, metal için dielektrik fonksiyonunun gerçek kısmı Re [ε_1] < 0 olmalıdır. Metal ve dielektrik arasında, dielektrik sabitlerinin gerçek kısmının zıt işaretleri ile yalnızca YPP oluştuğu gözlenir. Bu ifadeye göre, H_y alanı için (1.39c) dalga denklemini kullanmak zorundayız. Yerine konulmasıyla,

$$k_1^2 = \beta^2 - k_0^2 \varepsilon_1 \tag{1.45}$$

$$k_2^2 = \beta^2 - k_0^2 \varepsilon_2 \tag{1.46}$$

denklemleri elde edilir. Hemen üstte tanımlanan denklemler ile (1.44) denklemlerinin birleştirilmesi, bu bölümün ana sonucuna ortaya çıkartır. Bu ana sonuç bize metal dielektrik ortamın arayüzünde ortaya çıkan YPPs yüzey plasmon polaritionun dispersiyon ilişkisini tanımlar.

$$\beta = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}}$$
(1.47)

Genellikle metaller, dielektrik malzemelerin dielektriksel geçirğenliğinin değerinden oldukça büyük değer alırlar. $|\epsilon_1| \gg \epsilon_2$, normal bileşen içinde meydana gelen alan dielektrik ortam içinde baskın olurken, teğetsel alan bileşeni, metal ortam içinde baskındır. YPP elektrik alanı, metal ortam içinde boyuna iken dielektrik ortam içinde eninedir. Metallerin içlerinde serbest elektron salınımları ve dielektrik malzemenin içinde yayılan EM dalgaların özellikleri birleştiğinde YPP' nin karma doğasını yansıtır. Metallerin içindeki omik kayıplardan dolayı YPP sönümlenmesi meydana gelir. Metaller içinde YPP' nin boyuna elektrik alan bileşeni, YPP sönümlenmesi tanımlanır. YPP ' nin modlarının özelliklerinin anlaşılabilinmesi için önemli bir durumdur.

İkinci olarak, YPP elde edebilmek için TE polarizasyon yönünde yayılan dalgalar için çözüm aradığımızda, her iki yarı sonsuz uzay içinde (1.40) denklemlerini kullanırız. Bu denklemleri yerlerine yazdığımızda, yüzeye göre sınır koşullarını sağlaması gerekir. Sınır koşullarını TE modları sağlamadığından, TE polarizasyon modları her iki yüzey için YPP modları oluşturamaz. Yüzey plasmon polaritonları yalnızca TM polarizasyonu içinde var olurlar.



Şekil 2.6. Silica (siyah çizgiler) , hava (gri çizgiler) ve ihmal edilen çarpışma frekanslı bir Drude metali arasında bir arayüzde dispersiyon ilişkisi.

Şekil 2.6 içinde, üç katmanlı yapı için, üst katman hava (ε_1 =1) ile doldurulmuş ve en alt katman dielektrik sabitli (ε_2 =2.25) silica yerleştirilmiş, silica üzerine Drude dielektirik fonksiyonun gerçek kısmı içinde sönümlenmenin ihmal edildiği bir metal kaplama katman için, (1.44) denklemine göre çizimler gösterilir. β dalga vektörünün hem gerçek (sürekli egriler ile) hem de sanal kısmı (kesikli eğriler ile) gösterilir. Yüzey plasmon polarition uyarımları, hava ve silica'nın kendilerine has ışık çizgilerinin sağına doğru uzanan dispersiyon eğrilerinin kısmına karşı gelir. Metallerin yapısında ışıma $\omega > \omega_p$ bölgesi içerisinde meydana gelir. Bağlı ve ışınımsal modların bölgeleri arasında, sanal β yayılımı ile belirli bir frekans aralık bölgesinde sadece yasaklı yayılım gösterirler.

Düşük (orta kızıl ötesi veya daha düşük) frekanslara karşı gelen küçük dalga vektörlerine göre, YPP yayılım sabiti ışık çizgisi k_0 ' a çok yakındır ve dalgalar dielektrik bölge içerisinde bir çok dalgaboyunun üzerinde yayılır. Bu nedenle YPPs, yatay gelen ışık alanının doğası sonucu elde edilir ve Sommerfeld- Zenneck dalgaları olarak bilinir.

Büyük dalga vektörlerinin zıt bölgesi içinde, YPPs 'nin frekansı, karakteristik yüzey plasmon frekansına yaklaşır.

$$\omega_{sp} = \frac{\omega_p}{\sqrt{1 + \varepsilon_2}} \tag{1.48}$$

3. ZAMAN UZAYINDA SONLU FARKLAR YÖNTEMİ

Günümüzde, sayısal yöntemler içinde en çok kullanılan yöntemlerden biri de FDTD' dir. İlk kez 1966 yılında, Kane Yee tarafından ortaya atıldı [12]. "Zaman Uzayında Sonlu Farklar" yöntemi , İngilizce "Finite Difference Time Domain " kelimelerinin baş harflerinin birleştirilmesi ile kısa adı literatürde FDTD olarak bilinir. Elektromanyetik uygulamalarda Zaman Uzayında Sonlu Farklar (ZUSF) yöntemi, Maxwell denklemlerindeki zamansal ve konumsal analatik türevlerin sayısal merkezi farklar, eşdegerleri ile değiştirilerek, zamanda ardışıl olarak çözüm sağlayan bir yöntemdir.

3.1 ZUSF 'nin Ana Fikri

Zaman Uzayında Sonlu Farklar yöntemi, elektromanyetik alanı içinde Maxwell denklemleri olarak bilinen denklemlerden yalnızca iki rotasyonel denklemin doğrudan zaman bölgesinde çözümüne dayandırılan bir yöntemdir. Maxwell denklemlerindeki zamana bağlı rotasyonel denklemlerin, merkezi sonlu farklar açılımı kullanılarak ayrıklaştırma yapılması ile Zaman Uzayında Sonlu Farklar (ZUSF) yöntemi elde edilir. Elektrik ve manyetik alan bileşenlerine ait ayrıklaştırılmış denklemler, bilgisayar ortamında çözülerek modellenen yapının zaman cevabı elde edilir. Zaman cevabının hızlı Fourier dönüşümü alınarak da modellenen yapının geniş bir aralıkta frekans cevabını elde etmek mümkündür [13].

3.2 Sonlu Farklar Yöntemi

Sonlu farklar yöntemi, türevsel denklemlerin sayısal çözümünde oldukça yaygın olarak kullanılan bir yöntemdir [14]. Sayısal yöntemler içerisinde ise ZUSF ardışıl bir yöntemdir. Buna göre ZUSF' nin temel dayanak noktası, bilinmeyen büyüklüklerin Taylor serisine açılarak, çeşitli mertebelerden analatik türevlerin sayısal eşdeğerlerinin bulunması üzerine kurulur[15]. Sonlu Farklar yöntemini
uygulamak için, hesaplanmak istenen fonksiyonun bilgisayar ortamında çözülebilmesi için Taylor serisinden faydalanılarak sonlu farklar açılımının yapılması gerekir. Bundan dolayı kısmi türev içeren denklemlerin belirli bir hata payı ile zamana ve konuma göre ayrıklaştırılması sağlanır. Ayrıklaştırma için ileri farklar, geri farklar ve merkezi farklar olmak üzere üç çeşit yaklaşımda bulunulur.

Öncelikle yapılması gereken, sürekli bir f(x) fonksiyonunu ayrıklaştırma işlemi yapılabilmesi için, f(x) fonksiyonunu Taylor serisine açmaktır. f(x)' in $x=x_0$ noktası, $\pm \delta/2$ civarındaki Taylor serisine açılırsa,

$$f(x_0 + \frac{\delta}{2}) = f(x_0) + \left(\frac{\delta}{2}\right) \frac{f'(x_0)}{1!} + \left(\frac{\delta}{2}\right)^2 \frac{f''(x_0)}{2!} + \left(\frac{\delta}{2}\right)^3 \frac{f'''(x_0)}{3!} + \dots \quad (3.1)$$

$$f(x_0 - \frac{\delta}{2}) = f(x_0) - \left(\frac{\delta}{2}\right) \frac{f'(x_0)}{1!} + \left(\frac{\delta}{2}\right)^2 \frac{f''(x_0)}{2!} - \left(\frac{\delta}{2}\right)^3 \frac{f'''(x_0)}{3!} + \dots$$
(3.2)

şeklinde denklemler bulunur. İkinci denklem birinci denklemden çıkarıldığı takdirde,

$$f(x_{0} + \frac{\delta}{2}) - f(x_{0} - \frac{\delta}{2}) = \delta f'(x_{0}) + \frac{2}{3!} \left(\frac{\delta}{2}\right)^{3} f'''(x_{0})$$
(3.4)

denklemi elde edilir. (2.20) denklemindeki birinci dereceden türev ifadesi eşitliğin öbür tarafında yalnız bırakılırsa,

$$f'(x) = \frac{\partial f(x)}{\partial x}\Big|_{x=x_0} = \frac{f(x_0 + \frac{\delta}{2}) - f(x_0 - \frac{\delta}{2})}{\delta} - \frac{(\delta)^2}{24} f'''(x_0)$$
(3.5)

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x}\Big|_{x=x_0} = \frac{f(x_0 + \frac{\delta}{2}) - f(x_0 - \frac{\delta}{2})}{\delta} - O(\delta^2)$$
(3.6)

sonucu bulunmuş olur. Burada $O(\delta^2)$, yüksek dereceli terimleri göstermektedir ve hata notasyonu olarak ifade edilir. Eğer, δ ' nin değeri yeteri kadar küçük ise, yüksek dereceli terimler ihmal edilebilecek kadar küçük olur. Bu durumda türevin yaklaşık sonucu,

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x}\Big|_{x=x_0} = \frac{f(x_0 + \frac{\delta}{2}) - f(x_0 - \frac{\delta}{2})}{\delta}$$
(3.7)

şeklinde hesaplanır. Denklem (2.23) 'e göre merkezi farklar açılımı, yaklaşık olarak fonksiyonun x_0 noktasındaki türevini verir. Bu durum Şekil 2.3'deki grafikten de oldukça kolay bir şekilde görülmekdedir. f(x) fonksiyonunun P nokatasındaki türevi, yaklaşık olarak A ve B noktalarını birleştiren doğrunun eğimine eşittir[16].



Şekil 3.1. Merkezi farklar yaklaşımına göre türev hesabı.

ZUSF denklemlerinin konuma ve zamana bağlı çözümü için, türev ifadelerinin (3.7) denklemine göre düzenlenmesi gerekir. Tek boyutlu bir durum için, $u(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z)$ bir fonksiyon için konuma ve zaman göre ayrıklaştırma yapıldığı zaman,

$$\frac{\partial u}{\partial x}(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = \frac{u^n(i+\frac{1}{2}, j, k) - u^n(i-\frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} + O(\Delta x)^2 \quad (3.8)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t}(i\Delta x, j\Delta y, k\Delta z, n\Delta t) = \frac{u^n(i+\frac{1}{2}, j, k) - u^n(i-\frac{1}{2}, j, k)}{\Delta t} + O(\Delta t)^2$$
(3.9)

eşitlikleri elde edilir [17]. Burada $O(\Delta x)^2$ ve $O(\Delta t)^2$ fonksiyonları, merkezi farklar yaklaşımı ile sayısal türev alma işlemi sırasında oluşan hata fonksiyonları olarak adlandırılır. 2. dereceden doğruluğa sahip sayısal türevde bu hata miktarı çok küçük olduğundan genellikle ihmal edilir.

Ayrıklaştırma sırasında n zaman adımında ve (i, j, k) noktalarindaki herhangi bir alan bileşeni için aşagıdaki yaklaşım yapılur.

$$UA_{i,j,k}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{UA_{i,j,k}^{n+1} + UA_{i,j,k}^{n}}{2}$$
(3.10)

3.3 ZUSF için Maxwell Denklemleri

Hacimsel yük yoğunluğu sıfır olan (ρ =0) kayıplı bir ortamda (σ ≠0) Maxwell denklemleri aşağıdaki şekildeki gibi yazılır.

$$\nabla \times \boldsymbol{H} = \varepsilon \, \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} + \sigma \boldsymbol{E} \tag{3.11}$$

$$\nabla \times E = -\mu \frac{\partial H}{\partial t}$$
(3.12)

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E} = 0 \tag{3.13}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{H} = 0 \tag{3.14}$$

Kartezyen koordinat sistemi içinde Maxwell denklemlerinin zamana bağlı rotasyonel ifadeleri ise,

$$\frac{\partial \boldsymbol{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{E} \qquad (3.15)$$
$$\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{H} - \frac{\sigma}{\varepsilon} \boldsymbol{E} \qquad (3.16)$$

şeklinde ifade edilir. Burada tekrar edersek, *E* elektrik alan, *H* manyetik alan, μ ortamın manyetik geçirgenliği, ε ortamın dielektrik sabiti, σ ise ortamın iletkenlik katsayısıdır. ZUSF denklemlerini elde edebilmek için Maxwell denklemlerinin rotasyonel bağıntılarını,

$$\nabla \times A = \begin{vmatrix} i & j & k \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix}$$

$$\nabla \times A = i\left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}\right) + j\left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\right) + k\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right)$$
(3.17)

eşitliğine göre açılım yaparsak. Bu durumda manyetik alanın ve elektirk alanın zamana bağlı olarak değişimleri ,

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left[i \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) + j \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) + k \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \right]$$
(3.18)
$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon} \left[i \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right) + j \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right) + k \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right) \right]$$
$$- \frac{\sigma}{\epsilon} \left(i E_x + j E_y + k E_z \right)$$
(3.19)

eşitlikleri ile elde edilir. Bu denklemlerden açık bir şekilde görülebilir ki: elektrik ve manyetik alanın üçer bileşeni vardır ve gerekli açılımlar yapıldığı takdirde, 3 boyutlu kartezyen koordinat sistemi (x, y, z) içinde 6 adet skaler denklem elde ederiz.

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right)$$
(3.20)

$$\frac{\partial H_{y}}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_{z}}{\partial x} - \frac{\partial E_{x}}{\partial z} \right)$$
(3.21)

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right)$$
(3.22)

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - \sigma E_x \right)$$
(3.23)

$$\frac{\partial E_{y}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_{x}}{\partial z} - \frac{\partial H_{z}}{\partial x} - \sigma E_{y} \right)$$
(3.24)

$$\frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z \right)$$
(3.25)

Elde edilen 6 adet kısmi diferansiyel denklem, 3 boyutlu ZUSF algoritmasının temel denklemlerini oluşturur. Denklemlerden görüldüğü gibi uzayın herhangi bir noktasındaki elektrik ve manyetik alan bileşenleri birbirlerine tamamen bağlıdır ve bu bağlılık ortamın μ , ε ve σ parametreleri ile doğrudan ilğilidir.

3.4 Yee Hücresi

ZUSF yönteminin temel mantığı elektrik ve manyetik alan bileşenlerinin 3 boyutlu uzayda birim Yee hücresi üzerine Şekil 2.1' deki gibi alan bileşenlerinin yerleştirilmesine dayanır. Elektrik alan bileşenleri kenarların ortasına, manyetik alan bileşenleri ise yüzlerin ortasına gelecek şekilde tanımlıdır.



Şekil 3.2. Birim Yee hücresi.

Şekil 2.2 de gösterildiği gibi, (i, j, k) indisleri, alan bileşenlerinin Yee hücresi üzerindeki konumu ifade eder. Herhangi bir alan bileşeninin koordinat bilgisi *x*, *y*, *z* eksenleri boyunca $i\Delta x$, $j\Delta y$, $k\Delta z$ ile belirlenir. Burada Δx , Δy , Δz , birim Yee hücresinin 3 boyutlu uzayda *x*, *y*, *z* eksenleri boyunca birim uzunluğunu ifade etmektedir.



Şekil 3.3. Yee birim hücresinin kartezyen koordinatlar sistemi içerisinde tanımlanmış tüm uzaya yayılmış kafes yapısı.

Bir hücrede belirli bir noktadaki elektrik ve manyetik alan değerlerinden söz edilebilmesi için konumda ve zamanda ortalama alınması gereklidir. Örneğin, alan bileşenlerini hücre merkezine ötelemek için o doğrultudaki diğer iki manyetik alan bileşeninin aritmetik ortalaması alınır [18].

$$H_{x}(i,j,k) = \frac{1}{2} [H_{x}(i,j,k) + H_{x}(i+1,j,k)]$$
(3.26)

Elektrik alan bileşeni için ise komşu dört bileşene ihtiyaç vardır. Örneğin, hücre merkezindeki E_z değerini hesaplamak için,

$$E_{z}(i,j,k) = \frac{1}{4} [E_{z}(i,j,k) + E_{z}(i+1,j,k) + E_{z}(i,j+1,k) + E_{z}(i+1,j+1,k)] \quad (3.27)$$

işleminin gerçekleştirilmesi gerekir. Aşağıda gösterilen Şekil 3.3' deki çizimden görüldüğü gibi bütün elektirk alan bileşenleri hücrenin kenarlarına teğet durumdadır. Manyetik alan bileşenleri ise yüzeye dik haldedir. Diğer bir ifadeyle her manyetik alan bileşeni komşu 4 elektrik alan bileşeni ile; her elektrik alan bileşeni ise komşu 4 manyetik alan bileşeni ile çevrilir. Bu gösterim şekli aynı zamanda 3 boyutlu Faraday ve Ampere yasalarını da ifade etmekdedir.



Şekil 3.4. Alan bileşenlerinin yerleşimi.

3.5 ZUSF Denklemleri

ZUSF denklemlerini elde etmek için, Şekil 3.3' deki yerleşim göz önüne alınarak (3.20) – (3.25) ' de verilen 6 adet Kartezyen koordinatlarda Maxwell denklemlerini kullanarak konuma ve zamana göre ayrıklaştırmalar yapılarak güncelleme denklemleri yazılır. Bu durumda, n zaman adımında güncelleme denklemleri,

$$\frac{H_{x}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) - H_{x}^{n-\frac{1}{2}}(i,j,k)}{\Delta t} = \frac{1}{\frac{1}{\mu} \left[\frac{E_{y}^{n}(i,j,k+\frac{1}{2}) - E_{y}^{n}(i,j,k-\frac{1}{2})}{\Delta z} - \frac{E_{z}^{n}(i,j+\frac{1}{2},k) - E_{z}^{n}(i,j-\frac{1}{2},k)}{\Delta y}\right] \quad (3.28)$$

$$\frac{H_{y}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) - H_{y}^{n-\frac{1}{2}}(i,j,k)}{\Delta t} = \frac{1}{\frac{1}{\mu} \left[\frac{E_{z}^{n}(i+\frac{1}{2},j,k) - E_{z}^{n}(i-\frac{1}{2},i,k)}{\Delta x} - \frac{E_{x}^{n}(i,j,k+\frac{1}{2}) - E_{x}^{n}(i,j,k-\frac{1}{2})}{\Delta z}\right] \quad (3.29)$$

$$\frac{H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k)-H_{z}^{n-\frac{1}{2}}(i,j,k)}{\Delta t} = \frac{1}{\mu} \left[\frac{E_{x}^{n}(i,j+\frac{1}{2},k)-E_{x}^{n}(i,j-\frac{1}{2},k)}{\Delta y}-\frac{E_{y}^{n}(i+\frac{1}{2},j,k)-E_{y}^{n}(i+\frac{1}{2},j,k)}{\Delta x}\right] \quad (3.30)$$

$$\frac{E_{x}^{n+1}(i,j,k) - E_{x}^{n}(i,j,k)}{\Delta t} = \frac{1}{\epsilon} \left[\frac{H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i,j+\frac{1}{2},k) - H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i,j-\frac{1}{2},k)}{\Delta y} - \frac{H_{y}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k+\frac{1}{2}) - H_{y}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k-\frac{1}{2})}{\Delta z} \right] - \frac{\sigma}{\epsilon} \left[E_{x}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) \right]$$
(3.31)

$$\frac{E_{y}^{n+1}(i,j,k) - E_{y}^{n}(i,j,k)}{\Delta t} = \frac{1}{\epsilon} \left[\frac{H_{x}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k+\frac{1}{2}) - H_{x}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k-\frac{1}{2})}{\Delta z} - \frac{H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2},j,k) - H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i-\frac{1}{2},j,k)}{\Delta x} \right] - \frac{\sigma}{\epsilon} \left[E_{y}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) \right] \qquad (3.32)$$

$$\frac{E_{z}^{n+1}(i,j,k) - E_{z}^{n}(i,j,k)}{\Delta t} = \frac{1}{\epsilon} \left[\frac{H_{y}^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2},j,k) - H_{y}^{n+\frac{1}{2}}(i-\frac{1}{2},j,k)}{\Delta x} - \frac{H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i,j+\frac{1}{2},k) - H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i,j-\frac{1}{2},k)}{\Delta y} \right]$$

$$-\frac{\sigma}{\varepsilon} \left[E_z^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) \right]$$
(3.33)

şeklinde yazılır. Burada tanımlanan denklemlerde zamanda en ileride olan manyetik alan ve elektrik alan bileşenleri çekilirse,

$$H_{x}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) = H_{x}^{n-\frac{1}{2}}(i,j,k)$$

$$+ \frac{\Delta t}{\mu} \left[\frac{E_{y}^{n}(i,j,k+\frac{1}{2}) - E_{y}^{n}(i,j,k-\frac{1}{2})}{\Delta z} - \frac{E_{z}^{n}(i,j+\frac{1}{2},k) - E_{z}^{n}(i,j-\frac{1}{2},k)}{\Delta y} \right]$$

$$H_{y}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) = H_{y}^{n-\frac{1}{2}}(i,j,k)$$

$$+ \frac{\Delta t}{\mu} \left[\frac{E_{z}^{n}(i+\frac{1}{2},j,k) - E_{z}^{n}(i-\frac{1}{2},j,k)}{\Delta x} - \frac{E_{x}^{n}(i,j,k+\frac{1}{2}) - E_{z}^{n}(i,j,k-\frac{1}{2})}{\Delta z} \right]$$

$$H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k) = H_{z}^{n-\frac{1}{2}}(i,j,k)$$

$$+ \frac{\Delta t}{\mu} \left[\frac{E_{x}^{n}(i,j+\frac{1}{2},k) - E_{x}^{n}(i,j-\frac{1}{2},k)}{\Delta y} - \frac{E_{y}^{n}(i+\frac{1}{2},j,k) - E_{z}^{n}(i-\frac{1}{2},j,k)}{\Delta x} \right]$$

$$(3.36)$$

$$E_{x}^{n+1}(i,j,k) = \left(\frac{2\varepsilon - \sigma \Delta t}{2\varepsilon + \sigma \Delta t}\right) E_{x}^{n}(i,j,k) + \left(\frac{2\Delta t}{2\varepsilon + \sigma \Delta t}\right)$$

$$\left[\frac{H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i,j+\frac{1}{2},k)-H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i,j-\frac{1}{2},k)}{\Delta y}-\frac{H_{y}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k+\frac{1}{2})-H_{y}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k-\frac{1}{2})}{\Delta z}\right]$$

(3.37)

$$E_{y}^{n+1}(i,j,k) = \left(\frac{2\varepsilon - \sigma \Delta t}{2\varepsilon + \sigma \Delta t}\right) E_{y}^{n}(i,j,k) + \left(\frac{2\Delta t}{2\varepsilon + \sigma \Delta t}\right)$$

$$\begin{bmatrix} H_{x}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k+\frac{1}{2}) - H_{x}^{n+\frac{1}{2}}(i,j,k-\frac{1}{2}) \\ \Delta z \end{bmatrix} - \frac{H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2},j,k) - H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i-\frac{1}{2},j,k)}{\Delta x} \end{bmatrix}$$
(3.38)
$$E_{z}^{n+1}(i,j,k) = (\frac{2\varepsilon - \sigma \Delta t}{2\varepsilon + \sigma \Delta t}) E_{z}^{n}(i,j,k) + (\frac{2\Delta t}{2\varepsilon + \sigma \Delta t})$$

$$[\frac{H_{y}^{n+\frac{1}{2}}(i+\frac{1}{2},j,k) - H_{y}^{n+\frac{1}{2}}(i-\frac{1}{2},j,k)}{\Delta x} - \frac{H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i,j+\frac{1}{2},k) - H_{z}^{n+\frac{1}{2}}(i,j-\frac{1}{2},k)}{\Delta y}]$$
(3.39)

 H_x , H_y , H_z , E_x , E_y , E_z için ayrı ayrı güncelleme denklemleri yazılır. Böylece kayıplı bir ortam için yazılan Maxwell denklemleri için 3 boyutlu ZUSF denklemleri elde edilmiş olur. Elektrik alan bileşenlerinin hesaplandığı denklemlerde ε ve σ paremetreleri kullanılır. Manyetik alan bileşenlerinin hesaplandığı denklemlerde ise μ paremetresi kullanılır. σ paremetresi iletkenliği temsil etmek üzere denklemlerde yer alır. 2 boyutlu ZUSF denklemlerini elde edebilmek için, öncelikle 3 boyutlu Maxwell denklemlerini 2 boyut içinde ifade edilebilecek şekilde yeniden düzenlenmelidir. Yukarıda tanımlanan 3 boyutlu Maxwell denklemlerini, problem uzayının keyfi olarak seçilen herhangi bir uzay ekseni boyunca değişmediği kabulü altında, mesala z yönü boyunca hiçbir şeyin değişmediği varsayımı yapılırsa, $\partial/\partial z = 0$ için (3.20) – (3.25) denklemler içinde ifadesinin geçtiği her yer sıfır olur. Geriye kalan denklemler TM _z (Enine Elektrik)ve TE _z (Enine Manyetik) modlar olarak ele alınan iki gurup içerisinde tanımlanır.

3.6 ZUSF Algoritması

ZUSF yöntemi ile elektromanyetik dalga yayılımının zaman ve konuma bağlı simülasyon yapılırken, modellenen yapı *x*, *y*, *z* eksenleri boyunca tanımlanan boyutları $(\Delta x) \times (\Delta y) \times (\Delta z)$ olan $N_x \times N_y \times N_z$ adet küçük hücreye bölünür. Toplam hücre sayısı ele alınan problemin boyutuna ve seçilen Yee hücre boyuna bağlı olup binlerce veya milyonlarca olabilir. Ayrıklaştırılmış ZUSF denklemlerinde her bir hücrenin μ , ε ve σ paremetreleri belirlendikten sonra her bir alan bileşeni için başlangıç değeri atanır. Daha sonra uygun bir cevap elde edilinceye kadar istenilen bir zaman aralığı içinde denklemler ardışıl olarak çözülür.

Elektrik ve manyetik alan bileşenlerinin Yee hücresi içerisine faklı konumlara yerleştirilmesi nedeniyle hesaplama zamanları arasında Δt /2 kadar fark bulunur. Bu durum Şekil 3.4 ' deki çizimde de kolayca görülebilir. Manyetik alan bileşenleri *t*=0, Δt , $2\Delta t$... anlarında hesaplanırken, elektrik alan bileşenleri *t*= $\Delta t/2$, $3\Delta t/2$, $5\Delta t/2$ anlarında hesaplanır. Maksimum zaman adımı tamamlanıncaya kadar hesaplama döngüsü tekrarlanır.



Şekil 3.5. ZUSF içerisinde alan bileşenlerinin hesaplandığı zaman akış çizelgesi.

3.7 Kararlılık Kriteri

ZUSF simulasyonuna ait parametrelerinin seçimi oldukça önemli bir kriterdir. Bu durum, (3.34)-(3.39) denklemlerinden kolayca görülebilir ki; elektrik alan bileşeninin değeri, alan bileşeninin bir zaman adımı önceki değerine ve komşu manyetik alan bileşenlerine bağlıdır. Ardışıl denklemler açık denklem sistemi oluşturduğundan her zaman sonlu çözümü garanti etmezler. Çözümün kararlılığını garanti etmek için hücre boyutları ($\Delta x, \Delta y, \Delta z$) ile her bir sabit zaman adımı Δt arasında *Courant* kararlılık kriteri gereğince bir ilişki sağlanmalıdır. Fakat kararlılığın sağlanması her zaman doğruluğu garanti etmez. Kararlılık kriteri

$$\Delta t \leq \frac{1}{\upsilon_{maks} \sqrt{\left(\frac{1}{\Delta_x}\right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta_y}\right)^2 + \left(\frac{1}{\Delta_z}\right)^2}}$$
(3.40)

şeklindedir. Tanımlanan (3.40) denklemine göre, ZUSF' nin çözümünün kararlı olabilmesi için, seçilen zaman adımında dalganın kat ettiği maksimum mesafe hücrenin boyutunu aşmamalıdır. Daha doğru bir ifade ile, simülasyon alanı içinde ilerleyen dalga hareketinin bir zaman adımında hücre içerisinde kalabilmesi için zaman adımı yeterince küçük seçilmelidir. Hücre uzunluğu ve kaynak tarafından üretilen frekansın dalgaboyu tüm hesap hücresinin uzayına tam bir dogrulukta yayılması için kararlılık kriteri kullanılır. Burada v_{maks} elektromanyetik dalganın en yüksek hızını gösterir. Denklem (3.41)' den de kolayca görülebildiği gibi dalganın yayılım hızı ortamın bağıl manyetik geçirgenliğine ve bağıl dielektrik sabitine bağlıdır. Boş uzay için elektromanyetik dalganın en yüksek hızı, ışık hızına $(c=3\times10^8 m/s)$ eşit olur.

$$v = \frac{1}{\sqrt{\mu \varepsilon}} = \frac{c}{\sqrt{\mu_r \varepsilon_r}} m/s$$
(2.40)

Hücre boyutunun küçük tutulması zaman adımının küçük tutulmasını gerektirir. Fakat hücre boyutunun ve zaman adımının küçültülmesi hem hafıza gereksinimini arttırır, hem de simülasyon süresini uzatır. Bu nedenle hücreler arası mesafenin modellenen probleme özgü şeçilmesi gerekir [19].

3.8 Sınır Şartı

Bir çok elektromanyetik problem açık uzay problemi üzerine kuruludur. Ancak sınırlı bilgisayar kaynakları, günümüzde açık uzayda ilerleyen elektromanyetik dalgaların sonsuza kadar uzanmasını hesaplayacak bir güce sahip olmadığından, uzayın istenilen bir yerde kesilerek çözüm aranan probleme uygun bir biçimde sonlandırılması gereklidir. Bu gerekçeden dolayı, gerçekte sonsuzluğun modellenmesi için hesap uzayımızın kesilen bölgesinin dışında kalan bölgeyi içine alarak uygulanan sınır koşullarına Soğurucu Sınır Koşullar (Absorbing Boundary Condition -ABC) adı verilir. Kısa adı SSK olarak ifade edilir. ZUSF içerisinde bir çok SSK türü mevcuttur.

Mükemmel Uyumlu Katman (Perfectly Matched Layer -PML), kısa adı MUK, ilk kez 1994 yılında J. P. Berenger tarafından geliştirildi. ABC sınır koşullarının iyileştirilmesine yönelik önemli bir adımdır [20]. MUK sınır koşulu kayıplı ortamlar için ugulanmış olup, sınıra ulaşan dalganın tüm frekans ve geliş açısında gelen elektromanyetik dalgaların problem uzayına geri yansımasının en aza indirilmesi konusunda son derece başarılıdır.

4. SİMÜLASYON

4.1 Simülasyon Modeli

Temel simülasyon modelimiz içerisinde fotonik kristaller, metal ve dielektrik malzemlerin iki boyutta peryodik olarak tekrar etmesi ile elde edilir. İçerisinde farklı dalga boylarının bulunduğu bir ışık demeti, fotonik kristal üzerine düşürüldüğünde, belirli dalga boyu aralığındaki elektromanyetik dalgalar, fotonik kristal içerisinde girememekte ve fotonik kristalin yüzeyinden tamamen geri yansımaktadır. Fotonik kristaller için tanımlanan en genel bu özelliği kullanarak, metal ve dielektrik malzemelerin peryodik dizilimi ile fotonik bir kristalin yapısından, metal dielektrik arayüzünde yüzey plasmon üretebilen bir sensör dizaynı simülasyon modeli için amaçlanmıştır. Aşağıdaki şekiller içinde sensör modelinin yandan ve kuş bakışı iki görünüşü çizildi.



Şekil 4.1. İki boyutda L örgü peryodu ile fotonik kristal katmanın tekrar etmesi ile elde edilen bir sensör dizaynı.



Şekil 4.2. L örgü peryodu ile kendini tekrar eden iki boyutta fotonik kristale üsten bakış. Altın diskin çapı d harfi ile gösterilir.

4.2 Simülasyon

Bu tez de yer alan, Şekil 4.1' de gösterilen yapı içerisinde, bir cam alt tabaka üzerine ince altın bir film, onun üzerine de altın bir disk katmanının birleştirilmesi ile meydana gelen metal bir fotonik kristal katman üzerine dayandırılan bir sensörün nano boyutta fotonik kristalin en küçük hücre dizaynını inceliyeceğiz. Rezonans frekansında, gelen bir düzlem dalga, plasmon bağlaşımından dolayı, metal yüzeyde tamamen soğurulur. Rezonans frekansının dışında, gelen bir düzlem dalganın hepsi yansıtılır. Bundan dolayı metalik fotonik kristal sensör yüzeyinde, yüksek dinamik bir bölgenin oluşumuna yol açar.



Şekil 4.3. Yüzey plasmon tekniğine dayadırılan metal fotonik kristal katman yapısının şeması.

Sensör yapısı içerisinde, şekilde de görüldüğü gibi $n_{cam} = 1.5$ kırılma indisine sahip yarı sonsuz bir cam tabaka üzerine, buharlaştırılan h_f kalınlıklı ince altın film: filmin üzerine ise h_d kalınlıklı altın bir disk yerleştirilmesi sonucu tez içerisinde iki boyutlu metal fotonik kristal katmanın simülasyon modellemesini MEEP [21] programını kullanarak gerçekleştirilmiştir. Şekilde de görüldüğü gibi, iki buyutta hesap uzayı x-z yönleri boyunca uzanır. Hesap uzayının z yönü 3µm (mikro metre), x yönü boyunca L örgü peryodudur. Altın diskin x yönü boyunca çapı d = 465 nm, z yönü boyunca altın diskin genişliği $h_d = 50$ nm, altın filmin katmanın hesap hücresinin x yönü boyunca uzunluğu L, altın filmin katmanın z yönü boyunca genişliği ya da kalınlığı $h_f = 55$ nm olarak tanımlandı. Hesap uzayını tercih edilen noktada sonlandırmak için her iki z yönünde, x yönü boyunca uzanan L uzunluğunda ve 500 nm kalınlığında Mükemmel Uyumlu Katman (PML) verleştirildi. Kalan diğer iki yüzede peryodik sınır koşulları uygulandı. Bir düzlem dalga formunda, yayılım gösteren 690 nm merkezi bir dalga boyu ile merkezi dalga boyunu çevreleyen Gaussian spekturum genişliğinde yayın yapan Gaussian bir pals kaynak kullanıldı. Kaynaktan Z_{kaynak} = -1.050 nm düzleminden çıkan elektromanyetik dalga, yerleştirilmiş olduğu hava bölgesi içinden tüm hücreye z yönü boyunca bir yayılım gösterir. Altın disk ve altın film arasındaki arayüz z=0 'da olacak şekilde seçildi. Pals kaynağından çıkan elektromanyetik dalganın SSPs uyarabilmesi için TM modunda manyetik alanı H_{y} , y yönü içine doğru polarize olmuş bir biçimde sayısal alan içinde, elektromanyetik dalga yayılır. Yansıyan ve geçen için ışık düzlemi, altın disk ve altın filmin arayüz oluşturduğu z=0 noktasından yansıma noktası, kaynağa doğru Z_{yansıyan} = -500nm noktasına ve kaynaktan öteye Z_{gecen} = 500 nm noktasına yerleştirildi. Bu sayede geçen ve yansıyan tüm elektromanyetik dalganın bilgisi bu tez çalışması içerisinde ele alındı.

4.3 Örgü Peryodunun Değişiminin Etkisi

Bu bölümde, metalik fotonik bir kristal yapıdan meydana gelen yüzey plasmon rezonansının örgü periyodunun değişiminin etkisini inceleyeceğiz. Simülasyon içerisinde metalik fotonik kristalin içinde yer alan altın ince film katmanının örgü sabiti, L' nin 600, 650, 690, 700, 750, 800 nm uzunluğunda değişmesi sonucu, geçenin ve yansıyanın akısındaki değişim incelendi. Örgü sabiti L=600 nm için gelen enerjinin alan dağılımı ile geçen ve yansıyan akının değerleri,



Şekil 4.4. Örgü sabiti L=600 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik alan $|H_y|^2$ dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.



Şekil 4.5. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, L= 600 nm örgü sabitli yapı içerisinde alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.

Örgü sabiti L=650 nm için gelen enerjinin alan dağılımı ile geçen ve yansıyan akının değerleri,







Şekil 4.7. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, L= 650 nm örgü sabitli yapı içerisinde alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.

Örgü sabiti L=690 nm için gelen enerjinin alan dağılımı ile geçen ve yansıyan akının değerleri,



Şekil 4.8. Örgü sabiti L=690 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik alan $|H_y|^2$ dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.



Şekil 4.9. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, L= 690 nm örgü sabitli yapı içerisinde alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.

Örgü sabiti L=700 nm için gelen enerjinin alan dağılımı ile geçen ve yansıyan akının değerleri,



Enerji yoğunluğu

Şekil 4.10. Örgü sabiti L=700 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik alan $|H_y|^2$ dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.



Şekil 4.11. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, L= 700 nm örgü sabitli yapı içerisinde alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.

Örgü sabiti L=750 nm için gelen enerjinin alan dağılımı ile geçen ve yansıyan akının değerleri,



Şekil 4.12. Örgü sabiti L=750 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik alan $|H_y|^2$ dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.



Şekil 4.13. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, L= 750 nm örgü sabitli yapı içerisinde alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.

Örgü sabiti L=800 nm için gelen enerjinin alan dağılımı ile geçen ve yansıyan akının değerleri,



Enerji yoğunluğu

Şekil 4.14. Örgü sabiti L=800 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik alan $|H_y|^2$ dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.



Şekil 4.15. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, L= 800 nm örgü sabitli yapı içerisinde alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.

4.4 İnce Altın Film Katmanının Kalınlığının Değişiminin Etkisi

Bu kısımda, metalik fotonik bir kristal yapı içerisinde yüzey plasmon rezonansının ince altın film katmanı kalınlığının değişiminin etkisini inceliyeceğiz. L= 750 nm örgü sabitli yapı içerisinde, her biri farklı film kalınlığına sahip, h_f = 30, 45, 55, 65 nm de, dört farklı simülasyon yapıldı. Film kalınlığının değişmesi sonucu geçen ve yansıyanın akısındaki değişim incelendi.

İnce altın film kalınlığı h_f = 30 nm için gelen enerjinin alan dağılımı ile geçen ve yansıyan akının değerleri,



Enerji yoğunluğu

Şekil 4.16. İnce altın film kalınlığı $h_f = 30$ nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik alan $|H_y|^2$ dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.



Şekil 4.17. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, İnce altın film kalınlığı $h_f =$ 30 nm' de alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.

İnce altın film kalınlığı $h_f = 45$ nm için gelen enerjinin alan dağılımı ile geçen ve yansıyan akının değerleri,



Enerji yoğunluğu

Şekil 4.18. İnce altın film kalınlığı h_f = 45 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik alan $|H_y|^2$ dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.



Şekil 4.19. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, İnce altın film kalınlığı $h_f =$ 45 nm' de alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.

İnce altın film kalınlığı $h_f = 55$ nm için gelen enerjinin alan dağılımı ile geçen ve yansıyan akının değerleri,



Enerji yoğunluğu

Şekil 4.20. İnce altın film kalınlığı $h_f = 55$ nm için için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik alan $|H_y|^2$ dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.



Şekil 4.21. 690 nm dalga boyunda yayılım için, İnce altın film kalınlığı $h_f = 55$ nm' de alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.

İnce altın film kalınlığı $h_f = 65$ nm için gelen enerjinin alan dağılımı ile geçen ve yansıyan akının değerleri,





Şekil 4.22. İnce altın film kalınlığı h_f = 65 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik alan $|H_y|^2$ dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.



Şekil 4.23. 690 nm dalga boyunda bir yayılım için, İnce altın film kalınlığı $h_f =$ 65 nm' de alınan geçen ve yansıyan akının grafiği.

4.5 Altın Diskin Boyunun Değişiminin Etkisi

Bu bölüm de, metalik fotonik bir kristal yapı içerisinde yüzey plasmon rezonansını üzerinde altın diskin boyutunun değişiminin etkisini inceleyeceğiz. Her biri farklı kalınlığına sahip altın disklerin çap uzunlukları sırasıyla d= 365, 465, 565 nm, olmak üzere üç farklı simülasyon yapıldı. Altın disklerin çap uzunluklarının değişmesi sonucu geçen ve yansıyanın akısındaki değişim incelendi. Altın diskin çap uzunluğu d = 365 nm için gelen enerjinin alan dağılımı ile geçen ve yansıyan akının değerleri,



Enerji yoğunluğu

Şekil 4.24. Altın diskin çap uzunluğu d = 365 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik alan $|H_y|^2$ dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.



Şekil 4.25. 690 nm dalga boyunda yayılım için, altın diskin çap uzunluğu d = 365 nm alınan, geçen ve yansıyan akının grafiği.

Altın diskin çap uzunluğu d = 465 nm için gelen enerjinin alan dağılımı ile geçen ve yansıyan akının değerleri,



Enerji yoğunluğu

Şekil 4.26. Altın diskin çap uzunluğu d = 465 nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik alan $|H_y|^2$ dağılımının farklı t zamanlarında ki görüntüleri.



Şekil 4.27. 690 nm dalga boyunda yayılım için, altın diskin çap uzunluğu d = 465 nm alınan, geçen ve yansıyan akının grafiği.

Altın diskin çap uzunluğu d = 565 nm için gelen enerjinin alan dağılımı ile geçen ve yansıyan akının değerleri,



Şekil 4.28. Altın diskin çap uzunluğu d = 565nm için gerçekleştirilen simülasyon içerisinde mayetik alan $|H_y|^2$ dağılımının farklı t zamanlarındaki görüntüleri.



Şekil 4.29. 690 nm dalga boyunda yayılım için, altın diskin çap uzunluğu d = 565 nm alınan, geçen ve yansıyan akının grafiği.

SONUÇLAR

L= 600, 650, 690, 700, 750, 800 nm örgü sabitinin artışıyla, yansıma pikinin keskinliği daha küçük frekans bölgesine kayarken frekans piki küçülür; keskin pik alanının daha büyük frekanslara doğru bir genişleme meydana gelir ve keskin pik frekansından daha büyük bir pik değeri oluştuğu Şekil 4.5, 4.7, 4.9, 4.11, 4.13, 4.15 içinde gözlenir. Oluşan plazmonik rezonansların uzun dalga boylarına doğru bir değişim gösterdikleri grafiklerden de görülebilir. Örgü peryodu artarken oluşan frekans pikinin niçin azaldığını, elde edilen grafiklerden kolayca anlayabiliriz. Yapılan sensör çalışması içerisinde, sensörün incelenen en küçük yapısı içerisinde, örgü peryodunun artışı farklı diskler arasında mesafenin artışına neden olur. Bu durum, disklerin kenarlarında sınırlandırılan plazmon alanları çok zayıf bir etkileşimin doğmasına ve sensör duyarlılığında büyük bir azalmaya neden olur.

Örgü sabiti L= 750 nm de, h_f = 30, 45, 55, 65 nm altın film katmanın kalınlığında dört farklı fotonik kristal yapı içerisinde incelenen, yansıma pikinin değişimi Şekil 4.17, 4.19, 4.21, 4.23' den kolayca görülebilir. Yansıma pikinin frekans konumu altın film katmanının kalınlığının 30-65 nm aralığındaki değişimlerinden çok az etkilendiği ortaya çıkmaktadır.

Örgü sabiti L= 750 nm için d = 365, 465, 565 nm disk çapına sahip altın disk büyüklüğünün değişimi, yansıma frekansının pik konumları üzerinde değişimi çok zayıf bir şekilde değiştiğine dikkat edelim. Bu durum, Şekil 4.25, 4.27, 4.29' den kolayca görülebilir. Örgü sabitinin sabit tutularak sadece disk çapının artışı komşu birim hücrelerin aynı mesafede yaklaşmasına ve diskler arasında mesafenin azalmasına yol açar. Azalan mesafe sonucu, fotonik kristalin hücreleri arasında snırlandırılmış plasmonlar çok güçlü bir şekilde etkileşirler. Güçlü bir etkileşimin ortaya çıkmasının nedeni, fotonik kristalin geometrik yapısından dolayı sınırlandırılmış yeni plazmon alanlarının doğması şeklinde açıklanabilir.

Geliştirilmek istenen yeni sensör dizaynları için bu çalışma içinde elde edilen beceri ve bilgi birikimi daha sonraki çalışmalar için bir referans olarak kullanılabilinir. Bu çalışmada yalnızca metalik fotonik bir kristalin tek bir hücresi incelendi. En uygun sensör yapılabilmesi için sensörü oluşturan birim hücrenin nano katmanlarının boyutunda ve büyüklüğünde ki değişimin etkisi ile en uygun sensör modeli araştırıldı. Ayrıca, yürütülen çalışma gelecekte Meep programı ile simülasyan yapmak isteyen kişiler için bir temel oluşturabilir. Bu çalışmanın geleceğinde, metalik fotonik bir kristal katman üzerine bir sensör analiti yerleştirilmesi ile genliğe dayalı algılama metodu ve uzak alan faz tepkisini kullanarak sensör yapımı üzerine çalışmalarımız devam edecektir.

KAYNAKLAR

[1] Shi Lina, Kabashin Andrei and Skorobogatiy Maksim, "Spectral, amplitude and phase sensitivity of a plasmonic gas sensor in a metallic photonic crystal slab geometry: Comparison of the near and far field phase detection strategies", ScienceDirect, Vol. 143, No.1, pp. 76-86, 2009

[2] Maier Stefan A., Plasmonics: Fundamentals and Applications, New York, U.S., Springer Science, 2007

[3] David Jackson John, Classical Electrodynamics, U.S., Wiley & Sons, 1998

[4] Zhang Keqian and Li Dejie, Electromagnetic Theory for Microwaves and Optoelectronics, Germany, Springer Berlin Heidelberg, 1998

[5] Pedrotti Frank L., S.J. And Pedrotti Leno S., İntorductin in Optics, U.S., Prentice-Hall International, 2006

[6] Born M., Wolf E., Principles of Optics, U.K., Cambridge University Press, 1999

[7] Lee Byoungho, Lee II-Min, Kima Seyoon, Oha Dong-Ho and Hesselink Lambertus, "Review on subwavelength confinement of light with plasmonics", Jurnal of Modern Optics, Vol.57, No.16, pp. 1479-1497, 2010

[8] Rakić Aleksandar D., Djuriŝić Aleksandra B., Elazar Jovan M., and Majewski Marian L., "Optical properties of metallic films for vertical-cavity optoelectronics devices", Optical Society of America, Vol. 37, No.22, pp. 5271-5283, 1998

[9] Wolfbeis O.S., Springer Series on Chemical Sensors and Bisensors, Germany, Springer Verlag Heidelberg, 2006

[10] <u>http://n.bonod.free.fr/papers/Manuscript.pdf</u>

[11] Bozhevolnyi Sergey I., Plasmonic Nanoguides and Circuts, U.S., Pan Stanford publising Pte. Ltd, 2009

[12] K.S. YEE, "Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media" IEEE Trans. On Antennas and Prop., vol.2, pp.302-307, 1966

[13] Kunz, K.S. And Luebbers, R.J., The Finite- Difference Time-Domain Method for Electromagnetics, Boca Raton, FL., CRC Press, 448p, 1993

[14] Çiçek, A., "2 Boyutlu Doğrusal Olmayan Fotonik Kristallerin Modellenmesi ve Band Yaplarının Eldesi", Yüksek lisans Tezi, Akdeniz Üniversitesi, 2006

[15] Aksoy, S., "Zaman Uzayında Sonlu Farklar Yöntemi", Ders notları, Revizyon1.3.1, Elektronik Mühendisliği Bölümü, Gebze Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Gebze,Kocaeli, 2010

[16] Sadiku, M.N.O., Numerical Techniques in Electromagnetics, Boca Raton, FL., CRC Pres, 743p., 2000

[17] Taflove, A., Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, Boston, MA, U.S., Artech House, 599P, 1995

[18] Sevgi, L., Elektromanyetik Problemler ve Sayısal Yöntemler, İstanbul, Türkiye, Birsen Yayınevi, 214s, 1999

[19] Krishnaiah, K.M., Novel stable subgridding algorithm in finite difference time domain method, PhD Thesis, U.S., University of Bristol, 1997

[20] Berenger , J. P., "A Perfectly matched layer for the absorptin of electromagnetic waves", Journal Of Computational Physics, Vol.114, No.2, pp. 185-200, 1994

[21] http://ab-initio.mit.edu/wiki/index.php/Meep

ÖZGEÇMİŞ

Mustafa Suphi Gülsu, 1980 yılında Kırşehir' de doğdu. İlk ve orta ögretimini bu şehirde tamamladıktan sonra 2000 yılında Kırıkkale Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik bölümünde lisans eğitimine başladı. 2006 yılında mezun oldu.

Ek 1

MEEP

MEEP (ya da Meep) elektromanyetik alanlar ile materyallerin etkileşimlerini modellemek için MIT lisanslı, Zaman Uzayında Sonlu Farklar yöntemini kullanarak simülasyon yapan bir programıdır. Bu program kullanıcısına çalıştırma, kopyalama, dağıtma, inceleme, değiştirme ve geliştirme gibi özgürlükleri tanıyan özgür bir yazılımdır[21].

Meep' in genel özellikleri:

- Linux tabanlı çalışan özgür bir yazılım
- 1b, 2b, 3b ve silindirik koordinat içinde simülasyon yapabilme yeteneği
- Paralel bağlı bilgisayarlarda problemi çözdürme imkanı sağlar
- Lineer olmayan, dispersif, anisotropik materyallerin modellenme imkanı sağlar
- PML , Bloch peryodik sınır koşulları
- Keyfi materyal veya kaynak tanımlama

Zaman Uzayında simülasyon:

Basitçe Zaman Uzayında, elektromanyetik alanlar ile materyallerin etkileşiminin simülasyonunu yapabilmek için Maxwell denklemlerini alır ve sonlu hesap uzayında denklemleri zaman adımları içerisinde açarak hesaplama yapan bir programdır. Meep bir tür nümerik deney yapmakdır. Meep programının önemli uygulamaları:

- Geçen ve yansıyanın spektrumunu hesaplama
- Alan deseni
- Rezonans modları ve frekansları
Meep İçinde Birim

Uluslararası Birim Sistemi gibi standart bir sistemleri içerisinde ifade edilen nicelikler, Meep birimi içerisinde ölçüsüzdür. ε_0 , μ_0 ve c gibi sabitler, birimsiz olarak tanımlanır. ε_0 , μ_0 ve c sabitleri meep içerisinde 1 eşitt olarak tanımlanır. Modellenmek istenen yapı için, Meep programı içinde, " a " karakteristik uzunluk skalasıdır ya da mesafe birimi olarak atanır. Meep' de karakteristik uzunluk skalası kullanılacılar tarafından atanmassa, meep kendi karakteristik uzunluk skalasını otamatik bir şekilde atar. Meep' in içinde karakteristik uzunluk ölçeği " $1\mu m = 1 \times 10^{-6}$ metre " otamatik olarak atanır. Hesap hücresi ve içindeki herşeyin boyutu bu karakteristik uzunluk skalası içinde ölçülendirilerek, hesaplama yapar.

SI birim sistemi içerisinde frekans :

$$f = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \times 10^8 \, m/s}{\lambda}$$

Meep içerisinde frekans :

$$f = \frac{a}{\lambda} = \frac{1}{\lambda}$$

Meep içinde frekans daha iyi anlamak için bir örnek : 300 nm örgü sabitli bir photonik kristali modellediğimizi düşünelim. Bu durumda, meep içinde karakteristik uzunluk skalamız 'a= 300 nm 'dir. Uluslararası Birim Sistemi' ne göre, 5.3×10^{14} Hz frekansa sahip boş uzayda bir elektromanyetik dalganın yayıldığını varsayalım. Boş uzayda ilerleyen elektromanyetik dalganın dalga boyu:

$$\lambda = \frac{3 \times 10^8 m/s}{f} = \frac{3 \times 10^8 m/s}{5.3 \times 10^{14} s^{-1}} = 556 nm$$

Meep birimi içerisinde frekans:

$$f = \frac{a}{\lambda} = \frac{300 \, nm}{556 \, nm} = 0.53$$

olarak tanımlanır.

Meep İçinde Ayrık Adım Uzunluğu ve Sayısı Hesaplama

Meep programı, uzay ve zamanın içinde tanımlanan bir yapıyı ayrıklaştırabilmesi için çözünürlük 'resolution' ile tanımlanır. İki boyutda yapılan bir simülasyonun , x ve y yönleri boyunca 10 mikron metre uzunluğuna sahip hesap hücremiz için karakteristik uzunluk skalasmızı a = 1 mikron metre ve çözünürlük değerimiz 100 de olarak tanımlarsak. O zaman, hesap hücresi içerisinde ayrık adım uzunluğumuz:

$$\Delta_x = \frac{1 \mu m}{100} = 10 nm$$
 ve $\Delta_y = \frac{1 \mu m}{100} = 10 nm$

olarak buluruz. Hesap hücresi içerisinde ayrık adım uzunluğuzu tüm hesap hücresi boyunca adım sayısını bulmak için kullanabiliriz. Ayrık adım sayısı:

x ve y yönü boyunca ayrık adım sayısı:

$$N_x = \frac{10\,\mu\,m}{10\,nm} = \frac{10000\,nm}{10\,nm} = 1000$$

$$N_{y} = \frac{10\,\mu\,m}{10\,nm} = \frac{10000\,nm}{10\,nm} = 1000$$

MEEP İLE ÇEŞİTLİ OLAYLARI ANLAYABİLMEK İÇİN YAPILAN ÇALIŞMALAR

Elips'in Simülasyonu

Simülasyonu yapılan hesap alanın hücre boyutu x ekseni boyunca 30 mikrometre, y ekseninde ise 20 mikrometre boyutundadır. Hesap hücresinin ortasına yerleştirilen elips, y yönü içinde 10 mikrometre uzunluğuna, x yönü içerisinde 3 mikrometre genişliğe sahipdir. Simülasyon içerisinde bir düzlem kaynak kullanılmıştır. Düzlem kaynağın dalga boyu 599 nm dir. Düzlem kaynak, x ekseninin merkezinden -13 mikronmetre uzağa yerleştirilmiştir, y ekseni boyunca bir düzlem dalga ile, elips şeklindeki dielektrik malzememiz etkileşiminin alan desenleri incelenmiştir. İki boyut da gerçekleştirilen simülasyon içinde, İnce kenarlı mercekte ışığın odakta toplanma özelliğine benzer bir odak noktasında toplanma görüldü. Dielektrik malzemenin, dielektrik sabiti $\varepsilon = 2$ dir.



Şekil 6.1. Simülasyon yapılmadan önce hesap hücresi içinde elipsin yerleşim alanını gösteren resim.



Şekil 6.2. Elips için yapılan Meep simülasyon programı ile elde edilenn görüntüler içinden alınan anlık bir görüntü.

Elips modeli için Meep kaynak kodu:

```
;hesap alanının x ve y eksenlerinin
                            boyu
(define-param sx 30)
(define-param sy 20)
;hesap alanının boyutu
(set! geometry-lattice
          (make lattice (size sx sy no-size)))
;hesap alanı içerisinde materyallerin boyutu ve geometrik
biçimleri
(set! geometry
    (list
        (make ellipsoid (center 0 0 0)
          (material (make dielectric (epsilon 2)))
                        (size 3 10 infinity))
                         )
                       )
```

```
;PML' in yönü ve kalınlığı
(set! pml-layers (list (make pml (thickness 1.0))))
;çözünürlük
(set-param! resolution 10)
; kaynak
(define-param fcen 1.66888)
(define-param df 1.005)
(set! Sources
    (list
      (make source
       (src (make continuous-src
       (frequency fcen) (fwidth df)))
        (component Hy) (center -13 0) (size 0 20))))
;simülasyonu başlatmak
(run-until 200
    (at-beginning output-epsilon)
```

Dalga Klavuzu'nun Simülasyonu

Simülasyonu yapılan hesap alanın hücre boyutu x ekseni boyunca 16 mikrometre, y ekseninde ise 8 mikrometre boyutundadır. Hesap hücresinin x ekseni boyunca, yerleştirilen blok şeklinde uzanan dielektrik yapı, y yönü içinde 1 mikrometre genişliğindedir ve dielektrik sabiti, $\varepsilon = 12$ dir. Hesap hücresi içerisinde geri kalan alanlar hava ile doludur. Havanın dielektrik sabiti, $\varepsilon=1$ dir. Simülasyon içerisinde keyfi kaynak kullanılmıştır. Kaynağın dalga boyu 1,55 mikrometredir. Kaynak, x ekseninin merkezinden -7 mikronmetre uzağa yerleştirilmiştir, y ekseni boyunca 1 mikrometre genişliğinde, y yönünde belirli bir açı altında yayılım yapan Gaussian bir kaynak kullanılmıştır. Kaynakdan yayılan ışığın polarizasyon yönü Ez seçilmiştir. Simülasyon sonucu elde edilen görüntülerden, fiber optik kablolardaki gibi toplam iç yansıma olayı görülmektedir.



Şekil 6.3. Simülasyon yapılmadan önce hesap hücresi içinde dielektrik malzemelerin yerleşim alanını gösteren resim.



Şekil 6.4. Dalga kılavuzu için yapılan Meep simülasyon programı ile elde edine görüntüler içinden alınan anlık bir görüntü.

Dalga klavuzu içerisinde yayılım için Meep kaynak kodu :

```
; hesap alanının boyutu
(set! geometry-lattice
           (make lattice (size 16 8 no-size)))
;hesap alanı içerisinde materyallerin boyutu ve geometrik
biçimleri
(set! geometry
   (list
     (make block (center 0 0) (size infinity 1 infinity)
        (material (make dielectric (epsilon 12)))))
; kaynak
(define freq 0.6445655)
(define df 0.05)
(define-param kfact 72)
(define
  (my-amp-function p)
     (exp (* +1i (* 2 (* pi (* kfact (vector3-y p))))))
        (define-param TE? true)
(set! sources (list (make source
(src
              gaussian-src (frequency freq)
     (make
(fwidth df)))
(if TE? (component Ez)
      (component Hz))
        (center -7 0 0) (size 0 1)
```

İki Dielektrik Dalga Kılavuzu Arasında Işık İletimi

Bu çalışma içerisinde, iki dalga kılavuzu içinde ışık dalga yayılımı, sol tarafta ki dalga kılavuzu içerisine sınırlandırılan düzlem dalga köşegen yüzeyler arasında toplam iç yansımaya ugrayarak bir kılavuzdan diğer kılavuza doğru yayılımı incelendi. İki dalga kılavuzu aynı dielektrik malzemeden yapıldığı varsayıldı. Dielektirk malzemelerin dielektrik sabitleri $\varepsilon = 12$ dir. Hesap uzayının boyu hem x hem de y eksenleri boyunca 20 mikrometre olarak seçildi. Kaynak içinde yayılan ışığın merkezi dalga boyu, 680 nm dir.



Şekil 6.5. Simülasyon yapılmadan önce hesap hücresi içinde dielektrik malzemelerin yerleşim alanını gösteren resimi.



Şekil 6.4. İki Dalga kılavuzu arasında ışık geçiş simülasyonu, Meep programı ile elde edildi. Yapılan simülasyon içerisinden alınan anlık görüntü.

Simülasyon için Meep kodları:

```
;hesap alanının x ve y eksenlerinin boyu
(define-param sx 20)
(define-param sy 20)
;hesap alanının boyutu
(set! geometry-lattice
    (make lattice (size sx sy no-size)))
;hesap alanı içerisinde materyallerin boyutu ve geometrik
biçimleri
(set! geometry
        (list
    (make block (center -5.00000 2.500000 0.500000 )
                (size 5.049876 5.049876 5.049876)
(e1 -10.000000 -0.000000 1.000000)
(e2
   -5.000000 -0.000000 1.000000)
(e3
   -5.000000 5.000000 1.000000)
```

))

))

Tez çalışmamımızın Simülasyon modeli için Meep kodları:

```
(define-param L 0.6) ;L örgü peryodu
(define-param sz 3) ;3um mikrometre uzunluğunda
(define-param sx L) ;Lum mikrometre uzunluğunda
(define-param d 0.465) ;altın diskin çap uzunluğu
(use-output-directory "pnggörüntüleri")
;Drude-Lorentz
(define Au (make dielectric (epsilon 5.339)
(polarizations
(make polarizability
(omega 1e-20) (gamma 0.0486) (sigma 6.2634e41))
(make polarizability
(omega 2.1201) (gamma 0.1772) (sigma 0.1906))
(make polarizability
(omega 4.4214) (gamma 1.9662) (sigma 0.9835))
```

```
(make polarizability
```

```
(omega 3.353) (gamma 1.1844) (sigma 1.5974))
```

(make polarizability

```
(omega 2.7116) (gamma 0.578) (sigma 0.6653))
```

(make polarizability

(omega 2.3525) (gamma 0.3012) (sigma 0.4508))

)

)

```
(set! geometry-lattice
```

(make lattice (size sx no-size sz)))

(set! geometry

(list (make block (center 0 0 0.7775)

(size L infinity 1.445)

(material (make dielectric (epsilon 2.25))))

(make block (center 0 0 0.0275)

(size L infinity 0.055) (material Au))

(make block (center 0 0 -0.025)

(size d infinity 0.050) (material Au))

```
;atl piksel uygulaması
(set! eps-averaging?
;;;;;;;; x ve y yönlerin de peryodik sınır koşulu
(set-param! k-point (vector3 0
;;;;
;PML
(set! pml-layers
     (list (make pml (direction Z) (thickness 0.5))))
;kaynak
(define-param fcen 1.449275362)
(define-param df 1.005)
(set! sources
(list (make source (src (make gaussian-src
    (frequency fcen)(fwidth df)))
      (component Hy)(size L 0 0 )
       (center 0 0 -1.050))))
```

(set! resolution 100)