

**T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ**



**FOTONİK YAPILARIN FARKLI ANALİTİK VE NÜMERİK METOTLAR
ALTINDA İNCELENMESİ**

Can ERTUĞAY

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI

DOKTORA TEZİ

HAZİRAN 2022

ANTALYA

**T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ**



**FOTONİK YAPILARIN FARKLI ANALİTİK VE NÜMERİK METOTLAR
ALTINDA İNCELENMESİ**

Can ERTUĞAY

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FİZİK ANABİLİM DALI

DOKTORA TEZİ

HAZİRAN 2022

ANTALYA

T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FOTONİK YAPILARIN FARKLI ANALİTİK VE NÜMERİK METOTLAR
ALTINDA İNCELENMESİ

Can ERTUĞAY

FİZİK ANABİLİM DALI

DOKTORA TEZİ

Bu tez TÜBİTAK 2211-A Genel Yurt içi Doktora Burs Programı ve YÖK 100/2000
Öncelikli Alanlar Doktora Burs Programı ile desteklenmiştir.

HAZİRAN 2022

T.C.
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

FOTONİK YAPILARIN FARKLI ANALİTİK VE NÜMERİK METOTLAR
ALTINDA İNCELENMESİ

Can ERTUĞAY

FİZİK ANABİLİM DALI

DOKTORA TEZİ

Bu tez 27/06/2022 tarihinde jüri tarafından oybirliği ile kabul edilmiştir.

Prof. Dr. İsmail BOZTOSUN (Danışman)

Prof. Dr. Asım SOYLU

Doç. Dr. Mesut KARAKOÇ

Doç. Dr. Edip BAYRAM

Doç. Dr. Gökhan KOÇAK

ÖZET

FOTONİK YAPILARIN FARKLI ANALİTİK VE NÜMERİK METOTLAR ALTINDA İNCELENMESİ

Can ERTUĞAY

Doktora Tezi, Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof.Dr. ismail BOZTOSUN

Haziran 2022, 141 sayfa

Bu çalışmada fotonik yapılar arasında üç temel ışık tuzaklama yapısı olan Fabry-Perot interferometresi, fotonik kristaller ve dielektrik mikro rezonatörler içinden geniş çalışma alanı bulunduran fotonik kristaller ve mikro rezonatörlerin öz-değerleri ve öz-durumları detaylı olarak çalışılmıştır. Dielektrik mikro küre rezonatörlerinin morfoloji bağımlı rezonans modları (MDRs) için Mie saçılma teorisine dayanan ve çözüm için transandantal bir denklem seti sunan geleneksel metotlara alternatif olarak daha çok kuantum mekaniğinde kullanılan WKB (Wentzel–Kramers–Brillouin) yaklaşımı kullanılarak hem enine elektrik (Transverse Electric-TE) modlar hem de enine manyetik (Transverse Magnetic-TM) modlar için iki ayrı kuantizasyon koşulu elde edilmiştir. Ayrıca yine geleneksel olarak kullanılan nümerik metotlardan olan ve kafes örgü dizaynına dayanan sonlu fark (Finite Difference-FD) metoduna alternatif olarak, kafes örgü dizaynından ziyade kesikli uzaydaki grid yapı üzerinde rastlantısal nokta setleri kullanan RBF (Radial Basis Function) metoduyla rezonans modları ve alan dağılımları çok iyi bir doğrulukla elde edilmiştir.

Bu gibi fotonik yapıların öz-değerleri ve alan dağılımlarını elde edebilmek için çözülmesi gereken diferansiyel denklemler kolay olmayan denklemlerdir. Fakat elektromanyetik teoride karşılaşılan bu denklemler ve kütleli parçacıklar için söz konusu olan diferansiyel denklemler arasındaki benzerlikler oldukça fazladır. Bu nedenle fotonik kristaller ve mikro rezonatörler için söz konusu olan denklemler, kuantum mekaniğinde yoğun olarak kullanılan metotlarla çözüme ulaştırılabilir. Diğer yandan bu çalışmada mükemmel küresel mikro rezonatörler için kullanılan yöntemlerin prolate ve oblate gibi diğer geometriler için de kullanılabileceği öngörülmüştür.

ANAHTAR KELİMELEER: fotonik, fotonik kristaller, mikro rezonatörler, WKB yaklaşımı, FD metodu, RBF metodu

JÜRİ: Prof. Dr. İsmail BOZTOSUN

Prof. Dr. Asım SOYLU

Doç. Dr. Mesut KARAKOÇ

Doç. Dr. Edip BAYRAM

Doç. Dr. Gökhan KOÇAK



ABSTRACT

INVESTIGATION OF THE PHOTONIC STRUCTURE USING DIFFERENT ANALYTICAL AND NUMERICAL METHODS

Can ERTUĞAY

PhD Thesis in PHYSICS

Supervisor: Prof. Dr. İsmail BOZTOSUN

June 2022, 141 pages

In this study, the eigenvalues and eigenstates of photonic crystals and micro-resonators, which have a wide working area among photonic structures (Fabry-Perot interferometer, photonic crystals and dielectric micro-resonators), were studied in detail. For the morphology-dependent resonance modes (MDRs) of dielectric microsphere resonators, as an alternative to traditional methods based on Mie scattering theory and offering a transcendental equation set for solution, the WKB (Wentzel-Kramers-Brillouin) approach, which is mostly used in quantum mechanics, is used and two quantization conditions are obtained for both transverse electric (TE) and transverse magnetic (TM) modes. In addition, as an alternative to the finite difference (FD) method, which is one of the traditionally used numerical methods and based on the lattice mesh design, the resonance modes and field distributions are obtained with very good accuracy using the RBF (Radial Basis Function) method, which uses random point sets on the grid structure in the discrete space rather than the lattice mesh design.

The differential equations that need to be solved in order to obtain the eigenvalues and the field distributions of such photonic structures are not easy ones. However, these equations encountered in electromagnetic theory and the differential equations for massive particles are very similar. Therefore, the equations for photonic crystals and micro-resonators can be solved by methods, which are used extensively in quantum mechanics. On the other hand, it is predicted that the methods used for perfect spherical micro-resonators in this study, can also be used for other geometries such as prolate and oblate.

KEYWORDS: photonic, photonic crystals, micro resonators, WKB approximation, FD method, RBF method

COMMITTEE: Prof. Dr. İsmail BOZTOSUN

Prof.Dr. Asım SOYLU

Assoc.Prof.Dr. Mesut KARAKOÇ

Assoc.Prof.Dr. Edip BAYRAM

Assoc.Prof.Dr. Gökhan KOÇAK



ÖNSÖZ

Hepimizin bildiği gibi 20. yüzyılın özellikle ikinci yarısından itibaren yaşanan elektronik devrimi dünyayı daha öncesinde hayal bile edilemeyecek bir çağa getirmiştir. Telekomünikasyon, bilgi işleme, internet vb. alanlarda yaşanan gelişmeler kelimenin tam anlamıyla dijital bir çağ başlatmıştır. Diğer yandan bu elektronik ve dijital devrimin sağlık alanına katkıları da olağanüstü bir seviyededir. Tüm bu gelişmelere kapı açan teknolojilerin tümü sinyal iletiminin temel oluşturduğu teknolojilerdir. Sinyal iletimi ise temelde elektronik kapsamında değerlendirilmektedir. Yani tüm bu teknolojilerde bilgi taşıyıcı araç temelde elektronlardır. Elektron ise yüklü ve kütleli bir parçacık olduğu için sağlayabildiği tüm bu büyük avantajların yanında bazı dezavantajları da beraberinde getirmektedir. Uzun yıllardır elektronik çerçevesinde gelişen tüm bu işlevleri gerçekleştirebilmek için yeni bir alan olan "FOTONİK" 20. yüzyılın sonlarına doğru gündeme gelmiştir. Yani elektronik devrimini takip edecek olan yeni çağ "fotonik çağı" olarak adlandırılabilir. Çünkü elektronların aksine yüksüz ve kütesiz olan fotonların sinyal iletiminde kullanılması, elektronların beraberinde getirdiği dezavantajları elimine edebilmektedir. Fiber optik teknolojisiyle bu durumu yakından hissetmeye başladık bile. Fotonik alanı bu avantajları sayesinde cazibesini giderek arttırmaktadır. Bu nedenlerden dolayı ben de bu alanda bir tez çalışması yapmak istedim. Son olarak bu alanda özellikle hesaplamalara dair yeterince Türkçe kaynak olmadığı düşüncesiyle ve belki tezi okuyacaklara yardımcı olur umuduyla, incelediğim örneklerin hesaplamalarına dair kendi yazdığım "MATHEMATICA" kod yapılarını da yeri geldiğinde ekledim. Bu örneklerle dair "Python" ve "MATLAB" dillerinde yazdığım kodları da e-mail ile bana ulaşp talep edenlerle memnuniyetle paylaşabilirim.

Bu çalışma boyunca desteklerini benden esirgemeyen danışman hocam Prof. Dr. İsmail BOZTOSUN'a, doktora öğrenimim süresince "2211-A Genel Yurt İçi Doktora Burs Programı" ile destek aldığım TÜBİTAK'a ve "YÖK 100/2000 Öncelikli Alanlar Doktora Burs Programı" ile destek aldığım YÖK'e teşekkürlerimi sunmak isterim.

İÇİNDEKİLER

ÖZET	i
ABSTRACT	iii
ÖNSÖZ	v
AKADEMİK BEYAN	viii
SİMGELER VE KISALTMALAR	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ	x
ÇİZELGELER DİZİNİ	xvii
1. GİRİŞ	1
2. KAYNAK TARAMASI	5
2.1. Elektronik Enerji Bant Yapıları	5
2.1.1. Durum yoğunlukları	13
2.2. Optik Enerji/Momentum Bant Diyagramları	19
2.2.1. İki seviyeli sistem	22
2.3. Maxwell Denklemleri ve Dielektrik Materyaller	30
2.3.1. Dielektriğin doğrusallığı	32
2.3.2. Dielektriğin türdeşliği	32
2.3.3. Bir dielektrik materyal için Maxwell denklemleri	32
2.3.4. Elektrik ve manyetik alan için dalga denklemleri	33
2.4. Fotonik Kristaller	34
2.4.1. Fotonik kristal örgü yapısı	35
2.4.2. Bir boyutlu fotonik kristallerin konum uzayında incelenmesi	37
2.4.3. Fotonik bant aralıkları	44
2.4.4. Bir boyutlu fotonik kristallerin bant diyagramı hesaplamaları	50
2.4.5. İki boyutlu fotonik kristallerin bant diyagramı hesaplamaları	61
2.4.6. Fotonik bant aralığı haritaları	75
2.4.7. Fotonik durum yoğunlukları	76
2.4.8. Off-plane bant yapısı	77
2.4.9. Saf periyodik yapıda değişiklik (defect)	80
2.4.10. Fotonik kristal alan dağılımlarının hesaplanması	83
2.5. Optik Mikro Rezonatörler	115
2.5.1. TE-TM modları ve süreklilik koşulları	118
3. MATERYAL VE METOT	120

3.1. WGM Modların WKB Yaklaşımı ile Çözümü	120
3.1.1. Genel çözüm	122
3.1.2. Düşük mertebe rezonanslar için tam kuantizasyon koşulu	126
3.2. WGM Modların RBF Metodu ile Çözümü	127
4. BULGULAR VE TARTIŞMA	131
4.1. WKB Yaklaşımı ile Elde Edilen Sonuçlar	131
4.2. RBF Metodu ile Elde Edilen Sonuçlar	133
5. SONUÇLAR	137
6. KAYNAKLAR	138
ÖZGEÇMİŞ	



AKADEMİK BEYAN

Doktora Tezi olarak sunduğum “Fotonik Yapıların Farklı Analitik ve Nümerik Metotlar Altında İncelenmesi” adlı bu çalışmanın, akademik kurallar ve etik değerlere uygun olarak bulunduğunu belirtir, bu tez çalışmasında bana ait olmayan tüm bilgilerin kaynağını gösterdiğimi beyan ederim.

27/06/2022

Can ERTUĞAY



SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler:

E_b	: Bant aralığı enerjisi
E_f	: Fermi enerji seviyesi
$^{\circ}K$	: Temel sıcaklık ölçüsü birimi (Kelvin)
$\hbar$	: İndirgenmiş Planck sabiti
c_0	: Işık hızı
$\vec{\nabla}$	: Nabla operatörü
μ_0	: Boş uzayın manyetik geçirgenliği
ε_0	: Boş uzayın elektrik geçirgenliği

Kısaltmalar:

PhC	: Fotonik kristal (Photonic Crystal)
PBG	: Fotonik bant aralığı (Photonic Band Gap)
PWE	: Düzlem dalga açılımı (Plane Wave Expansion)
TE	: Enine elektrik mod (Transverse Electric)
TM	: Enine manyetik mod (Transverse Magnetic)
DOS	: Durum yoğunluğu (Density Of State)
PhDOS	: Fotonik durum yoğunluğu (Photonic Density Of State)
FD	: Sonlu fark (Finite Difference)
FDTD	: Sonlu fark zaman alanı (Finite Difference Time Domain)
RBF	: Radyal Tabanlı Fonksiyon (Radial Basis Function)
WGM	: Fısıldayan galeri modu (Whispering Gallery Mode)

ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 1.1 Düzlem dalga açılım metoduyla elde edilmiş bir fotonik kristal bant diyagramı (Ho vd 1990)	2
Şekil 1.2 FDTD metoduyla elde edilmiş örnek bir yansım/geçme spektrumu ..	3
Şekil 1.3 n_0 kırılma indisine sahip bir çevre ortamı içinde bulunan n_s kırılma indisine sahip, R_0 yarıçaplı örnek bir optik mikro küre	4
Şekil 2.1 $_{13}Al$ için elektron yerleşimi	6
Şekil 2.2 Birden fazla atom bir araya geldiğinde meydana gelen kristal örgü ...	7
Şekil 2.3 5 atomlu bir kristal örgüde atomlar arası mesafeye göre enerji seviyelerindeki yarıma	8
Şekil 2.4 a) İki atomlu durumda enerji seviyeleri yerleşimi; b) Dört atomlu durumda enerji seviyeleri yerleşimi	9
Şekil 2.5 Çok fazla sayıda atom söz konusu olduğunda bantların neredeyse süreklilik arz etmesi	9
Şekil 2.6 N tane $_{11}Na : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ atomundan oluşan bir örgü için bantlarda yer alabilecek elektron sayıları	10
Şekil 2.7 İletken, yarı iletken ve yalıtkanlarda bantlar arası enerji seviyeleri ...	11
Şekil 2.8 Valans ve iletim bantlarındaki kesikli enerji seviyeleri	12
Şekil 2.9 a) Değerlik bandının tam dolu olduğu durumlarda yalıtkanlar için Fermi seviyesi; b) Değerlik bandının tam dolu olduğu durumlarda yarı iletkenler için Fermi seviyesi; c) Değerlik bandının tam dolu olduğu durumlarda iletkenler için Fermi seviyesi; d) $_{11}Na : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ atomlarından oluşmuş bir örgü için değerlik bandının yarı dolu olduğu bir durumda Fermi seviyesi	13
Şekil 2.10 a) a ayrıtlı küp şeklinde bir kristal örgü bloğu içinde tuzaklanmış elektronlar; b) Tek boyutta blok için potansiyel enerji	14
Şekil 2.11 a) Kütleli parçacıklar için $E(k) \propto k^2$ şeklindeki kuadratik dağılım ilişkisi; b) Foton için $E(k) \propto k$ şeklindeki lineer dağılım ilişkisi	15
Şekil 2.12 Kesikli ve sürekli durum dağılımının basit bir temsili	16

Şekil 2.13 k uzayında bileşenlerin düzlemler üzerindeki görünümü	18
Şekil 2.14 k uzayında a) Tüm durumları kapsayan k yarıçaplı küre; b) Sadece pozitif k değerlerini kapsayan $1/8$ 'lik küre	18
Şekil 2.15 a) İki enerji seviyeli basit sistem; b) Bir çok enerji seviyesinden oluşan değerlik ve iletim bantlarının a'daki duruma bir analogisi; c) Değerlik ve iletim bantlarının hem enerji hem de momentum bilgisi verebilecek olan gerçekçi diyagramları; d) Gerçekçi değerlik ve iletim bandı diyagramlarında olası dikey geçişler	22
Şekil 2.16 + yüklü çekirdek etrafında dolanan elektron ve bu sisteme gelen ışık	25
Şekil 2.17 Farklı argümanlardaki sinc^2 fonksiyonu	28
Şekil 2.18 Gelen foton enerjisini soğurarak değerlik bandındaki belli bir seviyeden iletim bandındaki belli bir seviyeye geçişin ayrıntıları	29
Şekil 2.19 a) Bir boyutta; b) İki boyutta; c) Üç boyutta fotonik kristaller (Joannopoulos vd 2008)	34
Şekil 2.20 a) İki boyutlu PhC için kare örgü; b) İki boyutlu PhC için altıgen örgü (Sukhoivanov ve Guryev 2009)	36
Şekil 2.21 Üç boyutlu PhC örgü tipleri a) FCC; b) Woodpile; c) Spiral; d) Diamond (Sukhoivanov ve Guryev 2009)	37
Şekil 2.22 Bir boyutlu kesikli periyodik dielektrik yapı	38
Şekil 2.23 Şekil 2.22'deki bir boyutlu periyodik yapı için yansıma ve geçme spektrumları	41
Şekil 2.24 (a) Hava içinde bulunan $d = 0.15\mu m$ kalınlıklı $n_1 = 3.5$ kırılma indisli tek bir dielektrik katman; (b) bu katman boyunca uzanan x uzayındaki elektrik alan dağılımı	42
Şekil 2.25 (a) Sürekli olarak $(d, n_1) - (d, n_2)$ katman çiftlerinden oluşan bir boyutlu yapı; (b) katmanlardan birinin $1.5d$ kalınlıkta olduğu defetli bir boyutlu yapı; (c) katmanlardan birinin $2d$ kalınlıkta olduğu defetli bir boyutlu yapı	43
Şekil 2.26 Şekil 2.25'de görülen yapılar için yansıma spektrumları	44

Şekil 2.27 Bir boyutta bir PhC için bant yapısı (Sukhoivanov ve Guryev 2009)	45
Şekil 2.28 Elmas örgülü üç boyutlu bir PhC bant yapısı (Ho vd 1990)	46
Şekil 2.29 a örgü periyoduna sahip sonsuza giden bir boyutlu bir atom zinciri	47
Şekil 2.30 a örgü periyoduna sahip dairesel atom zinciri	48
Şekil 2.31 n_1 ve n_2 kırılma indislerine sahip d_1 ve d_2 kalınlıklı iki dielektrik bloğun periyodik olarak birleştirilmesi ile oluşturul a örgü periyoduna sahip bir boyutlu PhC örneği	51
Şekil 2.32 Bant yapısı hesaplanacak olan $\varepsilon_1 = 1$ dielektrik sabitli $d_1 = 0.2\mu m$ kalınlıklı hava katmanları arasındaki $\varepsilon_2 = 9$ dielektrik sabitli $d_2 = 0.8\mu m$ kalınlıklı dielektrik materyalden oluşan $a = 1\mu m$ birim hücre boyutuna sahip PhC örneği	54
Şekil 2.33 Şekil 2.32'deki örnek yapının bir boyuttaki dielektrik fonksiyonu Fourier açılımı için yazılan "MATHEMATİCA" kod yapısı	55
Şekil 2.34 Şekil 2.32'deki örnek yapının bir boyuttaki dielektrik fonksiyonu a) fonksiyonun kendisi; b) 11 adet düzlem dalga kullanımıyla yapılan Fourier açılımı; c) 101 adet düzlem dalga kullanımıyla yapılan Fourier açılımı; d) 1001 adet düzlem dalga kullanımıyla yapılan Fourier açılımı	57
Şekil 2.35 Şekil 2.32'deki örnek yapının bant yapısı için yazılan "MATHEMATİCA" kod yapısı	59
Şekil 2.36 Şekil 2.32'deki örnek yapının bant yapısı	61
Şekil 2.37 z eksenini boyunca uzanan dielektrik çubukların xy düzleminde hava ortamı içinde periyodik yerleşimiyle oluşturulmuş iki boyutlu bir PhC yapısı	61
Şekil 2.38 Şekil 2.37'deki iki boyutlu yapı için birim hücre	64
Şekil 2.39 İki boyutlu PhC birim hücrelerinin kesiklileştirilmesi a) Birim hücre; b) Birim hücrenin x boyutunun kesiklileştirilmesi; c) Birim hücrenin y boyutunun kesiklileştirilmesi; d) Birim hücrenin xy düzleminin birlikte kesiklileşmiş görünümü; e) Dielektrik materyalin çevre ortamından (burada hava) ayıklanmış ve kesiklileşmiş görünümü (Sukhoivanov ve Guryev 2009)	65

Şekil 2.40 Şekil 2.37'deki örnek iki boyutlu PhC yapının birim hücresi için dielektrik fonksiyonun Fourier açılımı için "MATHEMATICA" kod yapısı	66
Şekil 2.41 Şekil 2.37'deki örnek iki boyutlu PhC yapının birim hücresi için dielektrik fonksiyonun sabit 81×81 nod sayısı ile yapılan Fourier açılımları a) Kontrol için saf hali ile dielektrik fonksiyon; b) 121 adet ters örgü düzlem dalga kullanılarak yapılan Fourier açılımı; c) 441 adet ters örgü düzlem dalga kullanılarak yapılan Fourier açılımı; d) 1681 adet ters örgü düzlem dalga kullanılarak yapılan Fourier açılımı	68
Şekil 2.42 Şekil 2.37'deki iki boyutlu örnek yapının üç boyutlu bant yapısı için yazılan "MATHEMATICA" kod yapısı	69
Şekil 2.43 Şekil 2.37'deki iki boyutlu örnek yapının üç boyutlu bant yapısı	71
Şekil 2.44 a) Kare örgülü iki boyutlu PhC için k-path; b) Altıgen örgülü iki boyutlu PhC için k-path; c) Kübik örgülü üç boyutlu PhC için k-path (Sukhoivanov ve Guryev 2009)	72
Şekil 2.45 Kare örgülü iki boyutlu PhC için k-path yüksek simetri noktaları detayları	72
Şekil 2.46 Şekil 2.37'deki örnek yapının iki boyutlu bant yapısını elde etmek için yazılan "MATHEMATICA" kodu	73
Şekil 2.47 Şekil 2.37'deki örnek yapının iki boyutlu bant yapısı	75
Şekil 2.48 Şekil 2.37'deki yapı için dielektrik çubuk yarıçaplarının $0 - 0.5\mu m$ aralığında değişimiyle elde edilen PBG haritası	76
Şekil 2.49 İki boyutlu bir PhC için örnek fotonik durum yoğunlukları (PhDOS) (Sukhoivanov ve Guryev 2009)	77
Şekil 2.50 İki boyutlu bir PhC üzerinde a) In-plane; b) Off-plane yayılım	78
Şekil 2.51 Brillouin bölgesinin off-plane yayılım için değişimi	78
Şekil 2.52 Şekil 2.37'deki örnek yapının iki boyutlu a) In-plane; b) Off-plane bant yapısı	79

Şekil 2.53 a) Hava içine yerleştirilmiş dielektrik çubuklardan oluşan saf periyodik yapı; b) Yukarıdan, aşağıdan, sağdan ve soldan dört dielektrik çubuk ortasında kalan bir adet dielektrik çubuğun yapıdan çıkarılması ile oluşturulan yeni yapı	80
Şekil 2.54 a) Hava içine yerleştirilmiş dielektrik çubuklardan oluşan saf periyodik yapı için birim hücre; b) Yukarıdan, aşağıdan, sağdan ve soldan dört dielektrik çubuk ortasında kalan bir adet dielektrik çubuğun yapıdan çıkarılması ile oluşturulan yeni yapı için birim hücre (defect'li birim hücre)	81
Şekil 2.55 Defect'li birim hücrenin 51×51 nod ile kesiklileştirilerek, tüm noktaların dielektrik sabiti değerleri ile gösterimi	82
Şekil 2.56 Şekil 2.37'deki örnek yapının iki boyutlu a) Defect olmaksızın; b) Defect'li bant yapıları	83
Şekil 2.57 FDTD metodu için temel akış diyagramı	84
Şekil 2.58 Alanların dağılım gösterdiği 2 boyutlu bir uzay parçasının kesiklileştirilmesi	85
Şekil 2.59 Bir uzay parçasının kesiklileştirilmesi ile oluşturulan grid yapı a) 2 boyut; b) 3 boyut	86
Şekil 2.60 Alan bileşenleri ile birlikte bir, iki ve üç boyutta birim hücre için alternatif seçimler a) Bir boyutta birim hücre; b) 1×1 şeklinde iki boyutlu birim hücre; c) 4×4 şeklinde iki boyutlu birim hücre; d) $1 \times 1 \times 1$ şeklinde üç boyutlu birim hücre; e) $2 \times 2 \times 2$ şeklinde üç boyutlu birim hücre	87
Şekil 2.61 a) Dielektrikliğın sadece z boyutunda değıştiğı katmanlı bir boyutlu yapı; b) Bu yapının ızgara (grid) halde düşünölmesiyle elde edilen yapı	89
Şekil 2.62 Bir boyutta $E_y/\tilde{H}_x$ modu bileşenleri	90
Şekil 2.63 N_z tane birim hücreden oluşan 1 boyutta grid uzay	91
Şekil 2.64 Zaman bakımından elektrik alan (mavi oklar) ve manyetik alan (kırmızı oklar) bileşenleri arasındaki yayılım ilişkisi (Rumpf 2015)	92
Şekil 2.65 Elektromanyetik alanın sadece sınırların dışına doğru hareket edişini garanti edecek olan sınır materyal özellikleri (Rumpf 2015)	93

Şekil 2.66 Elektromanyetik dalgadaki bir değişimin (disturbance) bir sonraki noktada hissedilmesi için $2\Delta t$ süre geçmesi gerektiği ele alındığında alan bileşenleri arasındaki yayılım ilişkisi ve mükemmel sınır koşulu (Rumpf 2015) .	94
Şekil 2.67 Farklı N_λ değerlerine göre dalga boyu yapısı (Rumpf 2015)	96
Şekil 2.68 Bir elmas örgüsünün birim hücresi (Rumpf 2015)	97
Şekil 2.69 N_d 'nin farklı değerlerinin yapıyı temsil edebilirliği (Rumpf 2015) .	98
Şekil 2.70 Gausyen dalga formu	99
Şekil 2.71 Farklı t_0 değerleri için Gausyen puls durumları a) $t_0 = 0$ için; b) $t_0 = \tau$ için; c) $t_0 = 6\tau$ için	100
Şekil 2.72 TF/SF'ye göre biçimlendirilmiş grid uzay	101
Şekil 2.73 TF/SF içinde kaynak noktası etrafında grid uzay	102
Şekil 2.74 Bir boyutta FDTD için örnek-1 grid yapısı	106
Şekil 2.75 Bir boyutta FDTD için örnek-1 alan dağılımları MATHEMATICA kod yapısı	107
Şekil 2.76 Bir boyutta FDTD için örnek-1 alan dağılımları a) $4.8 \cdot 10^{-15} s$ 'de; b) $6 \cdot 10^{-15} s$ 'de; c) $7.1 \cdot 10^{-15} s$ 'de; d) $8.3 \cdot 10^{-15} s$ 'de	109
Şekil 2.77 Bir boyutta FDTD için örnek-1 yansıma ve geçme spektrumları MATHEMATICA kod yapısı	110
Şekil 2.78 Bir boyutta FDTD için örnek-1 yansıma ve geçme spektrumları . .	111
Şekil 2.79 Bir boyutta FDTD için örnek-2 grid yapısı	111
Şekil 2.80 Bir boyutta FDTD için örnek-2 alan dağılımları, yansıma ve geçme spektrumları MATHEMATICA kod yapısı	113
Şekil 2.81 Bir boyutta FDTD için örnek-2 alan dağılımları, yansıma ve geçme spektrumları a) $3.60 \cdot 10^{-9} s$ anında; b) $5 \cdot 10^{-9} s$ anında; c) $7.20 \cdot 10^{-9} s$ anında; d) $1.40 \cdot 10^{-8} s$ anında; e) $1.80 \cdot 10^{-8} s$ anında; f) $2.90 \cdot 10^{-8} s$ anında	115
Şekil 2.82 Hava içindeki R_0 yarıçaplı n_s kırılma indisli dielektrik küre ve küre içindeki tam yansımalar	117

Şekil 3.1 Hava içindeki R_0 yarıçaplı dielektrik küre için radyal bölgelere göre efektif potansiyel ve enerji	121
Şekil 4.1 Analitik , FD ve RBF eşitliklerinden elde edilmiş, ilk üç radyal moda ait normalize alan dağılımları a) TE mod; b) TM Mod	135
Şekil 4.2 Farklı sayıda veri noktası için toplam hata varyasyonları a) RBF; b) FD	135



ÇİZELGELER DİZİNİ

Çizelge 2.1 Pauili dışarlama ilkesi uyarınca ana ve alt kabuklara elektron yerleşimi	6
Çizelge 3.1 Bazı RBF fonksiyonları (kerneller)	128
Çizelge 4.1 $l = 120$ ve $n_s = 1.52$ değerlerine sahip dielektrik mikroküre WGM rezonans modları için WKB ile elde edilen karşılaştırmalı ilk beş değer	131
Çizelge 4.2 $l = 120$ ve $n_s = 1.52$ değerlerine sahip dielektrik mikroküre WGM rezonans modlarının $\beta \sim \nu/n_s$ rejiminde elde edilen düşük mertebe WGM rezonans modları için WKB ile elde edilen karşılaştırmalı ilk beş değer	132
Çizelge 4.3 $l = 120$ ve $n_s = 1.52$ değerlerine sahip dielektrik mikroküre WGM rezonans modları için RBF ve FD ile elde edilen karşılaştırmalı ilk beş değer .	134

1. GİRİŞ

Işığın madde ile olan etkileşimini inceleyen alan "fotonik" olarak adlandırılır. Fotonik alanı temelde fotonların üretilmesi, yönlendirilmesi, madde ile olan etkileşimi, algılanması ve taşınması ile ilgilenmektedir. Örneğin bilgi iletiminde elektronik yapılar yerine fotonik yapıların kullanımı tıpkı devrimsel elektronik çağı gibi yeni bir devrimsel çağı, yani belki de fotonik çağı olarak adlandırabileceğimiz bir dönemi tetiklemektedir. Bunun yeni bir devrimsel çağ olacağının başlıca nedenlerini şöyle sıralayabiliriz:

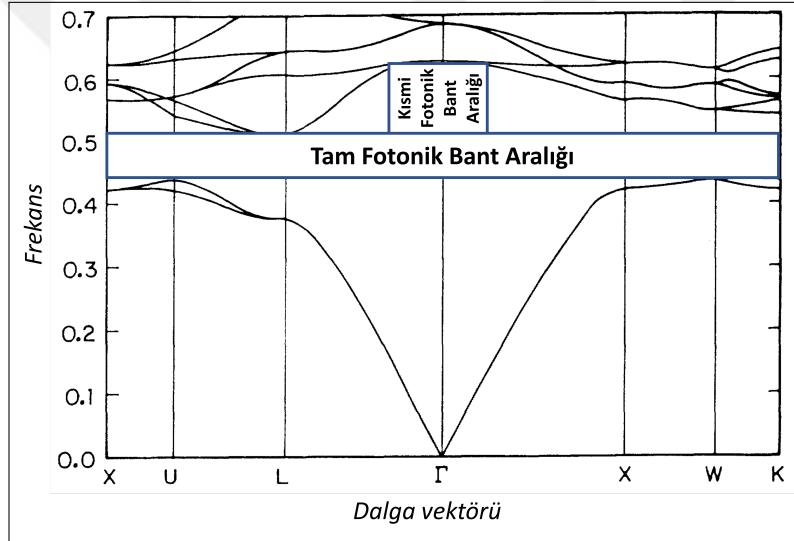
- Işığın dielektrik bir materyal içerisindeki hızı elektronun bir metal içerisindeki hızından çok daha büyüktür.
- Dielektrik materyallerin bant genişliği metallerin bant genişliğinden çok daha büyüktür.
- Işığın madde ile etkileşiminde meydana gelen enerji kaybı elektronun madde ile etkileşiminde meydana gelen enerji kaybından çok daha küçüktür.

Üç temel ışık tuzaklama yapısı olan Fabry-Perot interferometresi, fotonik kristaller ve fısıldayan galeri mod (Whispering Gallery Modes-WGM) rezonatörler içinden geniş çalışma alanları bulunduran fotonik kristaller ve WGM rezonatörler fotonik alanı içinde özel yer teşkil etmektedir.

Temelde dielektrik sabitlerinin periyodik bir şekilde değişimiyle meydana getirilen yapılar olan fotonik kristaller lazerlerden fiber optiklere, sensörlerden optik çoklayıcılara kadar bir çok alanda kullanılmaktadır. Bahsi geçen periyodik yapılandırmada yapılan manipülasyonlar sayesinde ışık fotonik kristal yapı içerisinde yönlendirilebilmekte, belli frekanslardaki ışık yapı içerisinde sınırlandırılabilen ve/veya tuzaklanabilmektedir. Örneğin bir fotonik kristal devre tasarımı sayesinde ışık çok küçük bir alana sıkıştırılabilmekte ve devrenin istenilen belli bir noktasına yönlendirilebilmektedir. Böylesi bir periyodik yapı üzerinde ilk çalışmayı Lord Rayleigh yayınlamıştır (Rayleigh 1888). Çalışma sonucu Lord Rayleigh çalıştığı materyallerin ışığın gelme açısına bağlı olarak yayılmasını yasaklayan bir bant aralığına sahip olduğunu gösterdi. İlk defa 1987'de Yablonovitch ve arkadaşlarının yaptığı çalışmayla iki ve üç boyutta fotonik bant

aralıklı yapılar üretilmiştir (Yablonovitch 1987). Elde edilen materyallerde ışığın tuzaklanması gerçekleştirilebilmiştir.

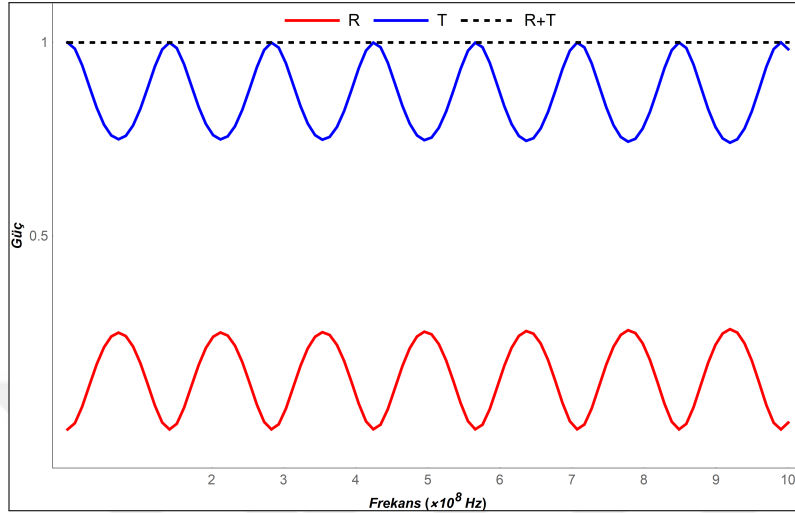
Fotonik kristallerde temel soru; "tasarlanan yapıya gelen elektromanyetik dalganın hangi frekansları ne ölçüde yapı içinde ilerleyebilecek ve ne ölçüde geri yansıyacak?" şeklindedir. Bu soruların cevabını belirlemeye çalışan iki geleneksel metot bulunmaktadır. Bunlardan ilki düzlem dalga açılım metodu (Plane Wave Expansion Method-PWE) ve sonlu fark zaman alanı metodudur (Finite Difference Time Domain Method-FDTD). PWE metodu temelde, Şekil 1.1'de örnek olarak verilen bir bant yapısı diyagramı elde etmeyi sağlar. Bu bant yapısı, hangi yöndeki, hangi frekanstaki dalgaların yapı içerisinde ilerleyip ilerleyemeyeceği bilgisini verir.



Şekil 1.1. Düzlem dalga açılım metoduyla elde edilmiş bir fotonik kristal bant diyagramı (Ho vd 1990)

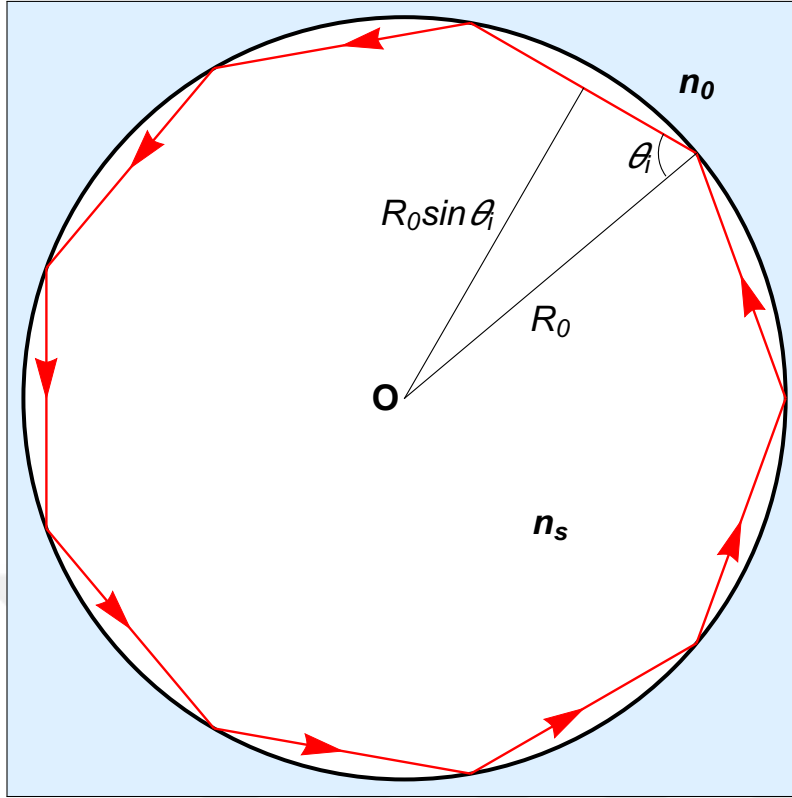
Şekil 1.1'de görülen "fotonik bant aralığı" (Photonic Bandgap-PBG) ifadesi fotonik kristaller için kritik öneme sahip bir ifadedir. PBG hangi yöndeki, hangi frekanstaki dalgaların yapı içerisinde ilerleyip ilerleyemeyeceği sorusunun cevabını verir. Diyagram Şekil 1.1'de görülebileceği üzere tam bant aralıkları (Complete PBG) ve kısmi bant aralıkları (Partial PBG) söz konusu olabilir. Tam PBG'ler hiçbir yönde yapı içinde ilerlemenin mümkün olmadığı frekans aralıklarını gösterirken kısmi PBG'ler belli yönlerde yapı içerisinde ilerlemenin mümkün olmadığı frekans aralıklarını göstermektedir.

FDTD metodu ise komplike yapılar da dahil olmak üzere yapıdaki alan dağılımlarını, yansıma ve geçme spektrumlarını elde etmeyi sağlar. Şekil 1.2’de FDTD ile araç modellemesinde elde edilmiş örnek bir yansıma/geçme spektrumu görülmektedir.



Şekil 1.2. FDTD metoduyla elde edilmiş örnek bir yansıma/geçme spektrumu

Diğer yandan bir çok araştırmada büyük ilgi gören, dielektrik kürelerden yapılan optik mikro-kaviteler, yani WGM rezonatörler, rezonans modları ile ilişkili yüksek Q faktörleri nedeniyle kavite kuantum elektrodinamiğindeki deneylere ilham kaynağı olmakta, hassas biyo-sensörlere yol açmaktadır. Kavitelelerdeki yüksek enerji yoğunluğu araştırmacıların koharent ışık geçişi ve Raman saçılması gibi çeşitli nonlineer süreçleri gözlemlemesine olanak tanımaktadır (Novotny ve Hecht 2006). WGM rezonatörler Şekil 1.3’de görülebileceği gibi n_0 kırılma indisine sahip bir çevre ortamı içinde bulunan n_s kırılma indisine sahip optik mikro kavitelerdir.



Şekil 1.3. n_0 kırılma indisine sahip bir çevre ortamı içinde bulunan n_s kırılma indisine sahip, R_0 yarıçaplı örnek bir optik mikro küre

Şekil 1.3’de görülen kırmızı oklar kavite içinde tuzaklanmış, yani rezonansa uğramış olan ışığı temsil etmektedir. Bu rezonatörlerde ise temel soru hangi frekanslı dalgaların rezonansa uğrayacağıdır. Bu rezonans modları morfoloji’ye bağlı rezonans modları (Morphology Dependent Resonances-MDRs) veya fısıldayan galeri modları (Whispering Gallery Modes-WGMs) olarak adlandırılmaktadır. Bu fenomen ilk defa St. Paul Katedrali’nin akustik özelliklerini inceleyen Lord Rayleigh tarafından farkedilmiştir (Rayleigh 1896). Akustik dalgalar için incelenen bu fenomen daha sonra elektromanyetik dalgalar için çalışılmaya başlanmıştır.

Bu tez çalışmasında fotonik kristallerin bant diyagramları ve alan dağılımları ile WGM rezonatörlerinin rezonans modlarının eldesi için kullanılan yaygın geleneksel metotlara alternatif olarak farklı analitik ve nümerik metotların kullanımı çalışılmış, bu metotların geleneksel metotlara karşı avantaj ve dezavantajları tartışılmıştır.

2. KAYNAK TARAMASI

Bu tez çalışmasında ilk olarak fotonik kristallerin (Photonic Crystals-PhCs) bant diyagramları ve alan dağılımları, daha sonra da WGM rezonatörlerinin rezonans modlarının eldesi için kullanılan yaygın geleneksel metotlar verilecektir. Sonrasında ise bu geleneksel metotlara alternatif olarak farklı analitik ve nümerik metotların kullanımı tartışılacaktır. Temelde dielektrik sabitlerinin periyodik bir şekilde değişimiyle meydana getirilen yapılar olan fotonik kristaller için gözlenen etkiler kristal bir örgüdeki periyodik düzenli atomlarda, yani katı hal fiziğinde incelenen örgü yapılarında gözlenen etkilere çok benzer. Çünkü PhC'ler de dielektrikliğin, yani bir anlamda optik geçirgenliğin periyodik modülasyonları kullanılarak inşa edilirler. Bir PhC'deki kırılma indisinin periyodik modülasyonları katı haldeki atomik örgü yapısına benzer bir örgü yapısı oluşturur. PhC içindeki foton davranışı bir atomik örgüdeki elektron deşik davranışına benzerdir. Bu periyodik örgü yapısı nedeniyle hem PhC'de hem de katı hal atomik örgü yapısında bant aralıkları söz konusudur. Bant aralığı bir enerji aralığını ifade eder ve bu aralıktaki bir enerji değerine sahip parçacıklar (ki PhC durumunda bu parçacıklar fotonlardır) yapı içinde bulunamazlar. Teorik olarak bir PhC'deki öz fonksiyonların belirlenmesi katı hal atomik örgü yapısında ele alınan parçacık dalga fonksiyonlarının hesaplamalarına çok benzerdir. Bu benzerlik fotonik bant aralıklarının elde edilmesinde kullanılır. Bu nedenle bu çalışmadaki birinci fotonik yapı olan PhC'lerin detaylı incelemesine geçmeden önce elektromanyetik teori, katı hal örgü yapıları ve elektronik enerji bant yapıları gibi konular hakkında bazı temelleri vermek faydalı olacaktır.

2.1. Elektronik Enerji Bant Yapıları

Bir PhC için en önemli özelliklerden birisi fotonik bant aralıkları (Photonic BandGap-PBG)'dir. PBG, bir PhC içinde ışığın yayılmasının engellendiği enerji veya frekans aralığını ifade eder. PBG aralığında bir frekansa sahip bir radyasyon yapı içine geldiğinde tamamen yansıtılır. Eğer periyodik yapıda bir manüplasyon meydana getirilecek olursa bunun etkisi bir yarı iletken kristal yapısındaki manüplasyon etkilerinin benzeri şeklinde olacaktır. Bunun anlamı, yapılan manüplasyonun öz frekansına karşılık gelen enerjideki PBG içinde yeni öz durumların meydana gelmesi ve

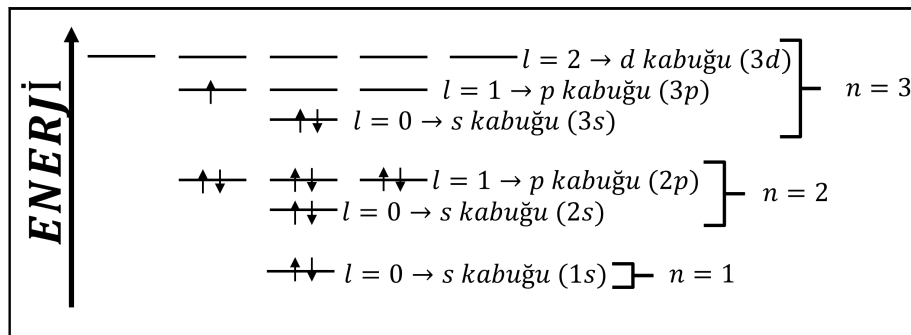
böylece bu frekans içinde yer alan bir radyasyonun yapı içinde yayılabilir olmasıdır. İşte bu sebeplerle detaylı PhC hesaplamalarına geçmeden önce katı hal kristal örgülerdeki elektronik enerji bant yapılarını incelemek faydalı olacaktır.

Elektronlar n ve l kuantum sayılarına göre Pauli dışarlama ilkesine uyarak yörüngelere (enerji düzeylerine), yani kabuk ve alt kabuklara yerleşebilirler. n değeri ana seviyeyi (kabuğu) anlatırken $0, 1, 2, \dots, n - 1$ değerlerini alan l değeri alt kabukları anlatır. İlk 3 ana kabuk, alt kabuk ve isimleri, orbital sayıları, Pauli ilkesine göre yerleşebilecek elektron sayıları Çizelge 2.1'deki gibidir.

Çizelge 2.1. Pauli dışarlama ilkesi uyarınca ana ve alt kabuklara elektron yerleşimi

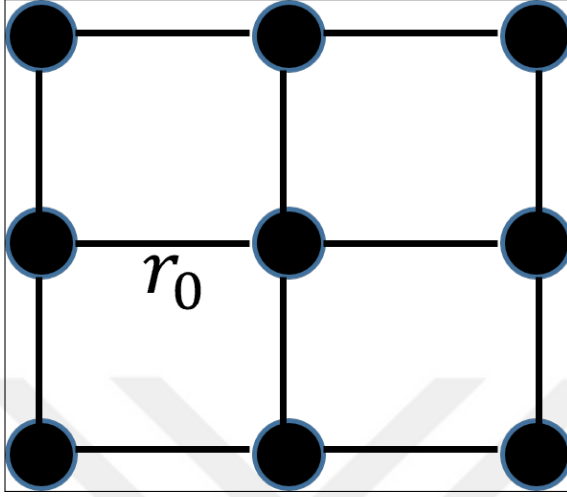
n	l	alt kabuk adı	ororbital sayısı	alt kabuk elektron sayısı	n seviyesi elektron sayısı
1	0	s	1	2	2
2	0	s	1	2	8
	1	p	3	6	
3	0	s	1	2	18
	1	p	3	6	
	2	d	5	10	

Örneğin ${}_{13}\text{Al}$: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$ için elektron yerleşimi Şekil 2.1'de görüldüğü gibidir:



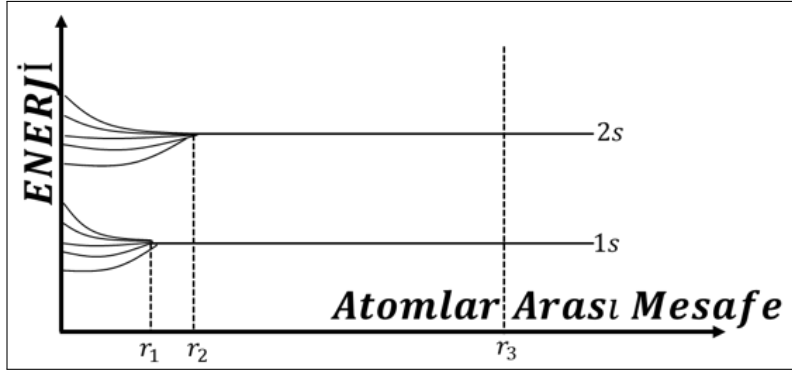
Şekil 2.1. ${}_{13}\text{Al}$ için elektron yerleşimi

Birden fazla atom bir araya geldiğinde, atomlar arası etkileşim nedeniyle Şekil 2.2’de görülen kristal örgüdeki atomların aralarındaki denge mesafesi r_0 ’a göre enerji seviyeleri üst üste binip enerji bantlarını meydana getirirler.



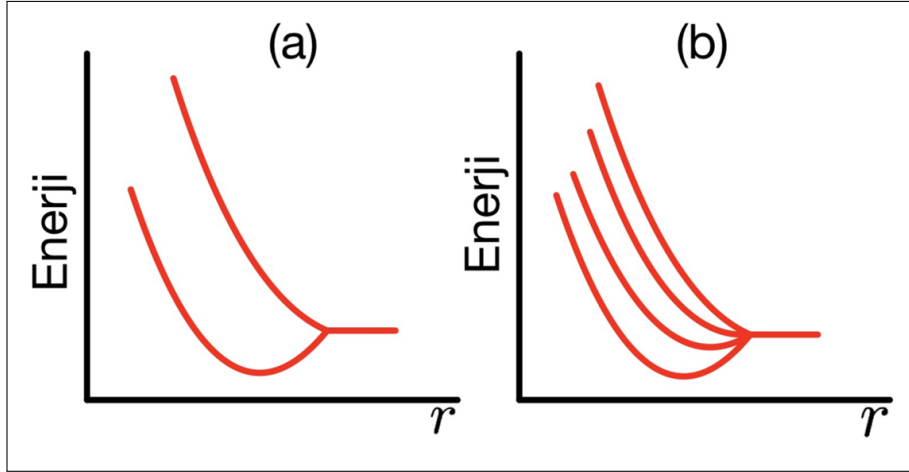
Şekil 2.2. Birden fazla atom bir araya geldiğinde meydana gelen kristal örgü

N tane atomdan oluşmuş bir katı için her bir enerji seviyesi, yani tek bir atom için gördüğümüz her bir alt kabuk seviyesi N tane enerji seviyesine ayrılır ve bunlar artık enerji bandı adını alırlar. Örneğin 5 atomdan oluşan bir yapıda her bir enerji seviyesi 5 tane enerji seviyesine ayrılır. Atomlar arası mesafe çok büyükken, yani atomlar birbirinden çok uzaktayken birbirleri ile etkileşmiyor demektir ve bu nedenle enerji seviyelerinde bir yarıлма olmaz. Şekil 2.3’de gösterilen r_3 mesafesinde hiçbir etkileşme yoktur ve seviyeler yalın haldedir. Her bir atom tek başına daha önce anlatıldığı gibi elektron dizilimine uyar. Atomlar arası mesafe azaldıkça, yani atomlar birbirine yaklaştıkça önce yüksek enerji seviyeleri yarılmaya başlar: Şekil 2.3’de önce r_2 mesafesinde $2s$ sonra ise r_1 mesafesinde $1s$ durumları 5’er adet enerji seviyesine yarılmıştır. İşte burada görülen her bir beşli seviye bir enerji bandını oluşturur.

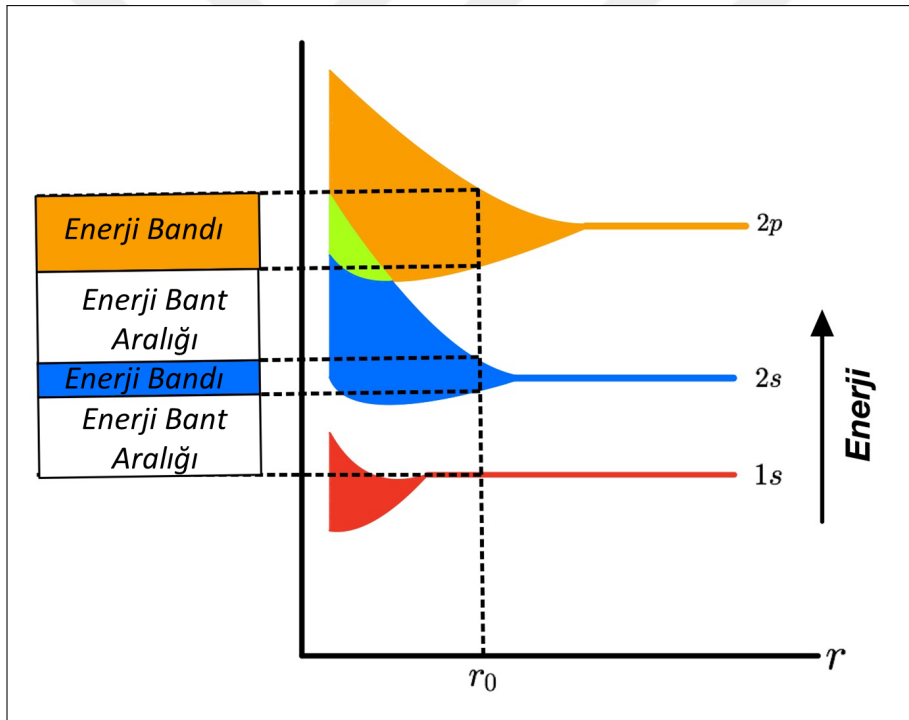


Şekil 2.3. 5 atomlu bir kristal örgüde atomlar arası mesafeye göre enerji seviyelerindeki yarıлма

Bir enerji bandının genişliği katıdaki atomların sayısından bağımsızdır. Bu nedenle atom sayısı arttıkça enerji seviyeleri daha yakın aralıklarla yarılırlar. Örneğin Şekil 2.4b ile gösterilen dört atomlu durumda enerji seviyeleri, Şekil 2.4a ile gösterilen iki atomlu durumdakinden daha yakın aralıklarla yerleşmiştir. Çok fazla sayıda atom söz konusu olduğunda ise çok fazla sayıda yarıлма söz konusu olacaktır ve öyle ki Şekil 2.5'de görülebileceği gibi yarılmaların oluşturduğu bantlar neredeyse süreklilik arz eder. Şekil 2.5'de görüldüğü gibi kristal yapının denge mesafesi olan r_0 'dan enerji eksenine paralel olacak şekilde çekilen çizginin bantlar içinde kalan kısmı enerji bantlarını oluşturur. Bunun anlamı şekilden de anlaşılabilir olduğu gibi bu enerji değerlerinde elektronların bulunabileceği şeklindedir. Çekilen bu çizginin bantlar dışında kalan kısımları ise "**bant aralıklarını**" oluşturur ki şekilden de anlaşılabilir olduğu gibi bu enerji değerlerinde elektronlar bulunamaz. Bu durumdaki bir örgü yapıda bulunan en düşük enerji seviyesindeki elektronlar $1s$ 'dedir ve bu bir tek enerji seviyesinde bulunabilirler. Çünkü r_0 denge mesafesinde yerleşmiş atomlardan oluşan bu katı için bu mesafede $1s$ seviyesi için bir yarıлма söz konusu değildir. Fakat daha yüksek enerjilerdeki seviyelerde elektronların bulunabileceği enerji seviyeleri çok daha fazladır



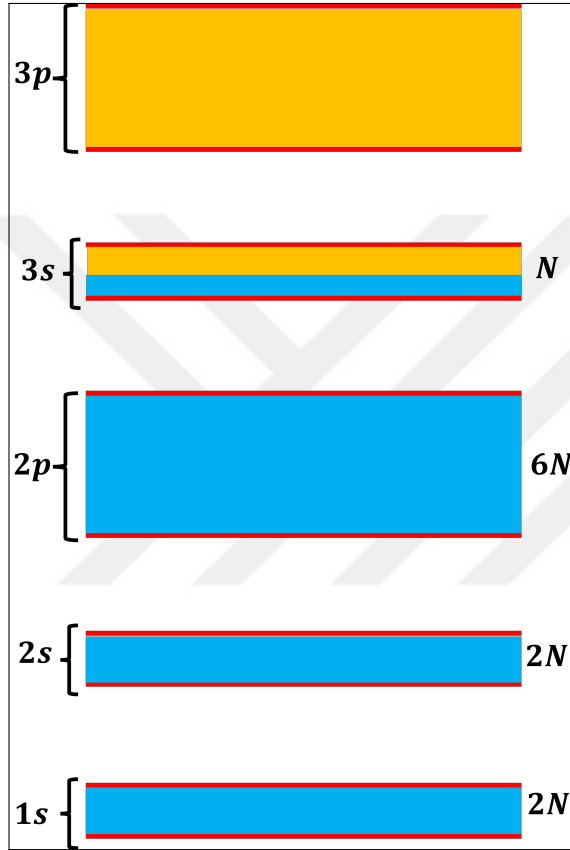
Şekil 2.4. a) İki atomlu durumda enerji seviyeleri yerleşimi; b) Dört atomlu durumda enerji seviyeleri yerleşimi



Şekil 2.5. Çok fazla sayıda atom söz konusu olduğunda bantların neredeyse süreklilik arz etmesi

N tane atomun bulunduğu bir örgü için her bir seviyenin yarılmasıyla oluşan bantta, $2(2l + 1)N$ tane elektron bulunabilir. Şekil 2.6'da N tane ${}_{11}\text{Na} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ atomundan oluşan bir örgü için bantlarda yer alabilecek elektron sayıları görülmektedir. $3s$ seviyesi yarı dolu olduğu için bu seviyenin yarılması ile oluşan bantta $2N$ tane değil

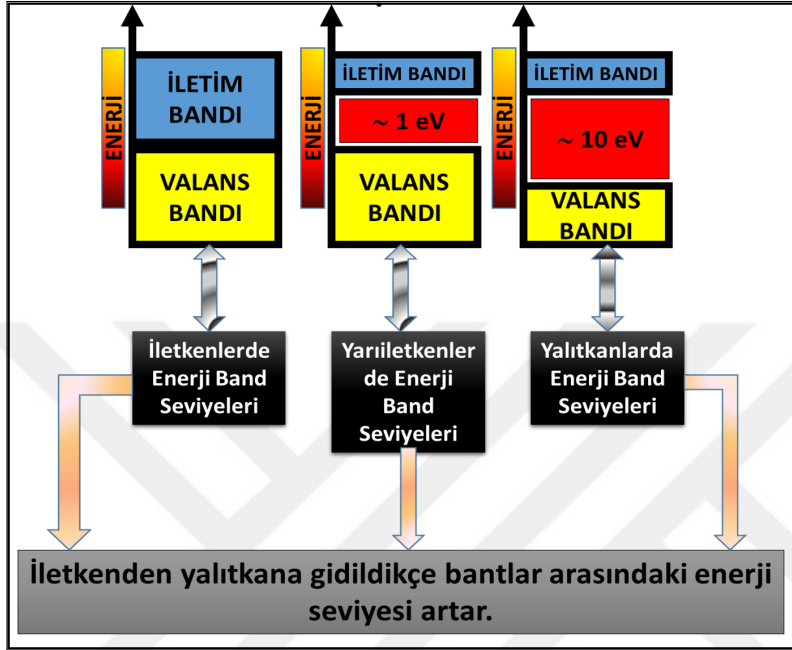
N tane elektron bulunabilir. İşte enerji bant teorisine göre ve Fermi istatistiğine bağlı olarak elektronlar yukarıda bahsedilen elektronik durumları, yani atomik orbitalleri doldururlar. Dolmamış orbitallerdeki elektronların oluşturmuş olduğu bant seviyesine "**değerlik bandı**" veya "**valans bandı**" denir. Örneğin Şekil 2.6'de gösterilen ve N tane sodyum atomundan oluşmuş örgü için $3s$ seviyesindeki yarılmalara oluşan bant değerlik bandıdır.



Şekil 2.6. N tane ${}_{11}\text{Na} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ atomundan oluşan bir örgü için bantlarda yer alabilecek elektron sayıları

Değerlik bandının daha üzerinde bulunan boş bir bant söz konusudur ve buna "**iletim bandı**" denir. Değerlik bandından iletim bandına geçebilen elektronlar sistemde serbest olarak hareket edebilirler ve böylelikle iletkenliği meydana getirirler. Buna göre değerlik bandından iletim bandına elektron geçiş kabiliyetine göre iletkenlik çok ya da azdır. Şekil 2.7'den de görülebileceği gibi yalıtkanlarda değerlik ve iletim bantları arasındaki bant aralığı çok fazla olduğu için değerlik bandından bir elektronu iletim bandına geçirmek oldukça zordur. Fakat iletkenlerde bu iki bant neredeyse iç içe geçmiştir ve

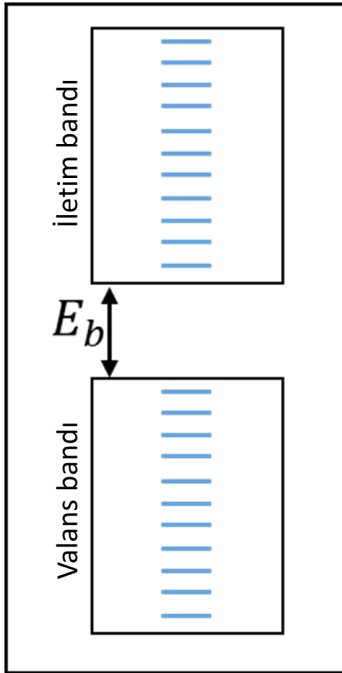
düşük enerjiler verildiğinde bile değerlik bandından iletim bandına geçişler sağlanabilir. Yarı iletkenlerde ise bu iki bant aralığı yalıtkanlara göre çok daha düşük bir değerdedir (yaklaşık 1 eV) ve bu nedenle yarı iletken bir malzeme düşük enerjiler verildiğinde bir yalıtkan gibi davranırken yeterli yüksek enerjilerde iletken gibi davranacaktır.



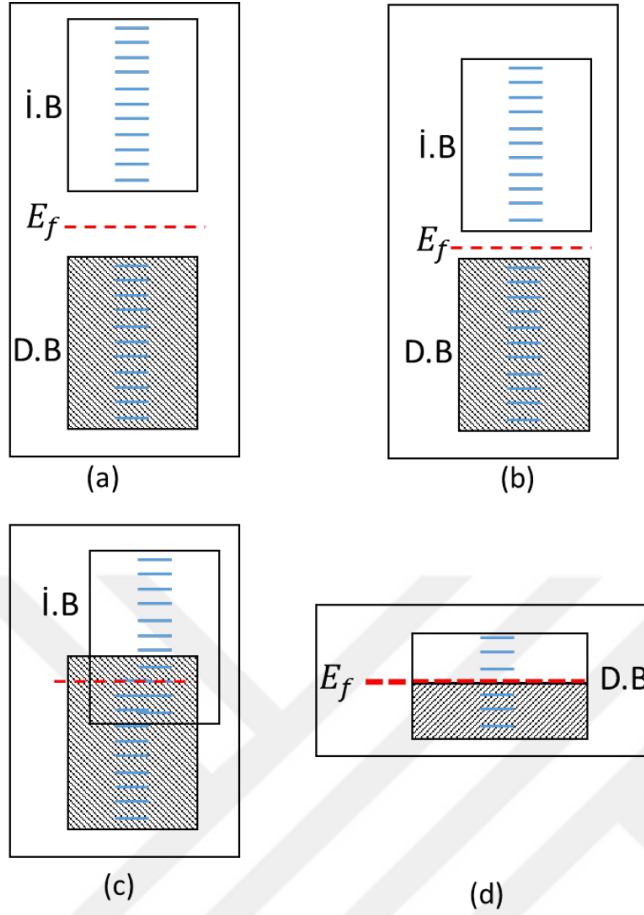
Şekil 2.7. İletken, yarı iletken ve yalıtkanlarda bantlar arası enerji seviyeleri

Değerlik bandı da iletim bandı da belli kesikli enerji düzeylerinden oluşur ve elektronlar bu belli enerji düzeylerinde bulunabilirler. Şekil 2.8’de bu enerji düzeyleri mavi çizgilerle gösterilmiştir. Değerlik bandında bu belli enerji seviyelerinden birinde bulunan bir elektrona bant aralığı enerjisini (E_b) atlatılabileceği bir enerji verilirse elektron iletim bandına zıplayabilir. Tanım olarak $0^\circ K$ ’de elektronların doldurduğu en yüksek enerji seviyesine **Fermi seviyesi** (E_f) denir. Değerlik bandındaki bir elektronun serbest elektron statüsü kazanması için Fermi seviyesinin üzerindeki enerjilere çıkabilecek enerjiye sahip olmaları gerekir. Bu sağlandıktan sonra elektron artık iletim bandında demektir ve uygulanan elektrik alanlar sayesinde sistem içinde istenildiği gibi hızlandırılarak yönlendirilebilir. Fermi seviyesi için yukarıda verilen tanım ortalama bir tanımdır ve bant yapıları söz konusu olduğunda aslında bu seviye elektronların elektrokimyasal potansiyellerini veren bir seviyedir ve termodinamik denge durumunda %50 ihtimalle bir elektronun yer alabileceği varsayımsal bir enerji seviyesidir. Fermi

seviyesi için verilen ilk tanım ikincisi ile genişletilmek zorunda kalınmıştır çünkü aşağıda görüleceği üzere bant yapıları söz konusu olduğunda (örneğin tam dolu bir değerlik bandından bahsederken), yalıtkan ve yarı iletkenlerde Fermi seviyesi değerlik ve iletim bantları arasında bir seviyededir, yani ilk tanıma göre elektronların doldurduğu en yüksek seviye bu tam dolu değerlik bandı söz konusu olduğunda Fermi seviyesi olarak anılmaz. Şekil 2.9a ve Şekil 2.9b’de değerlik bandının tam dolu olduğu durumlarda yalıtkan ve yarı iletkenler için Fermi seviyesi gösterilmektedir. Şekil 2.9c’de görüldüğü gibi değerlik ve iletim bantları iç içe geçmiş olan iletkenlerde Fermi seviyesi bu iki bandın kesiştiği bölge içinde bir değerdedir. Bu seviyeyi geçebilecek bir elektron değerlik bandından iletim bandına geçer ve serbest elektron statüsü kazanır. Şekil 2.9d’de görüldüğü gibi örneğin $_{11}\text{Na} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ atomlarından oluşmuş bir örgü için değerlik bandının (buradaki sodyum örneğinde değerlik bandını $3s$ seviyesindeki yarılmalar oluşturuyor) yarı dolu olduğu bir durumda Fermi seviyesi ilk tanımdaki gibi elektronların doldurduğu en yüksek enerji seviyesine denk gelir ve görülebileceği gibi Fermi seviyesi değerlik bandı içinde kalmaktadır. Yarı dolu bir değerlik bandına sahip olan bir metalde bu Fermi seviyesini geçebilecek bir elektron serbest elektron statüsü kazanmış demektir ve uygulanacak elektrik alan altında hızlandırılıp yönlendirilebilir.



Şekil 2.8. Valans ve iletim bantlarındaki kesikli enerji seviyeleri



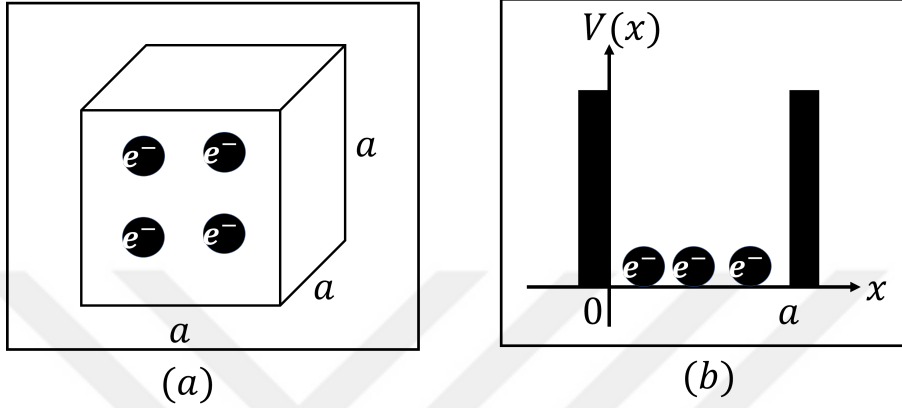
Şekil 2.9. a) Değerlik bandının tam dolu olduğu durumlarda yalıtkanlar için Fermi seviyesi; b) Değerlik bandının tam dolu olduğu durumlarda yarı iletkenler için Fermi seviyesi; c) Değerlik bandının tam dolu olduğu durumlarda iletkenler için Fermi seviyesi; d) $_{11}\text{Na} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ atomlarından oluşmuş bir örgü için değerlik bandının yarı dolu olduğu bir durumda Fermi seviyesi

Sorulması gereken sıradaki soru ise bir çok enerji seviyesinden oluşan bir banttaki belli bir enerji seviyesinin yoğunluğunun ne olduğudur. Sonraki bölüm bununla ilgilidir.

2.1.1. Durum yoğunlukları

Şekil 2.10a'da a ayrıtlı küp şeklinde bir kristal örgü bloğu görülmektedir. Bu blok içindeki elektronlar asla dışarı çıkamazlar. Bunu yapabilmeleri için oldukça fazla enerjiye sahip olmaları gerekir. Bunun diğer bir anlamı blok sınırlarındaki potansiyel enerjinin yaklaşık olarak sonsuz olmasıdır. Blok içinde ise potansiyel sıfırdır. Böyle bir

potansiyel enerjinin bir tek boyut için görünümü Şekil 2.10b’de görüldüğü gibidir. $x = 0$ ve $x = a$ sınırlarındaki duvarlar potansiyelin sınırlarda sonsuz olduğunu anlatmaktadır. Duvarlar arasındaki enerji seviyelerini belirlemenin yolu ise bu potansiyel için Schrödinger denkleminin çözülmesidir. Bu durumda Schrödinger denklemi eşitlik (2.1)’deki gibi olur.



Şekil 2.10. a) a ayrıtlı küp şeklinde bir kristal örgü bloğu içinde tuzaklanmış elektronlar; **b)** Tek boyutta blok için potansiyel enerji

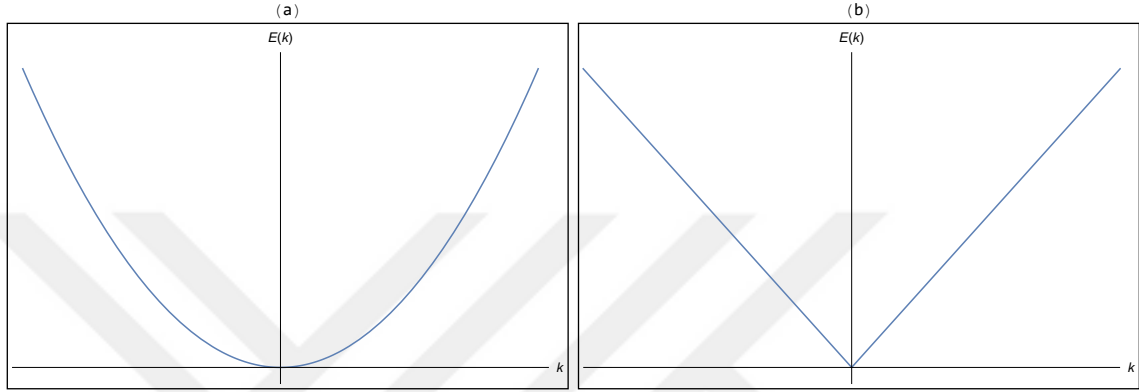
$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = k^2 \psi \quad (2.1)$$

Burada $k = \sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}}$ ile verilen dalga sayısıdır. $x = 0$ ve $x = a$ sınırları dışındaki uzayda potansiyel sonsuz olduğu için (2.1) sadece $\psi = 0$ oluşuyla anlam kazanır ki bu da sınırlar dışındaki uzayda dalga fonksiyonu olmayacağını, yani elektronların sınır içinde tuzaklanmış olduğunu anlatır. Potansiyelin sıfır olduğu kuyu içinde $\psi(x)$ çözümü, k dalga sayısı ve E enerji çözümleri eşitlik (2.2)’deki gibi olur ($n = 0, 1, 2, \dots$).

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(kx) \\ k &= n \frac{\pi}{a} \\ E &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2 \end{aligned} \quad (2.2)$$

Kütleli Parçacıklar ve Kütsüz Foton için $E(k)$ Dispersiyon İlişkisi

Eşitlik (2.2)'den görülebileceği gibi kütleli parçacıklar için $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ olduğundan $E(k) \propto k^2$ 'dir ve bu kuadratik dağınım Şekil 2.11a'daki gibi olur. Diğer yandan kütsüz foton için, c_0 ışık hızı olmak üzere $E(k) = pc_0 = \hbar kc_0$ olduğundan $E(k) \propto k$ 'dir ve bu lineer dağınım Şekil 2.11b'deki gibi olur.



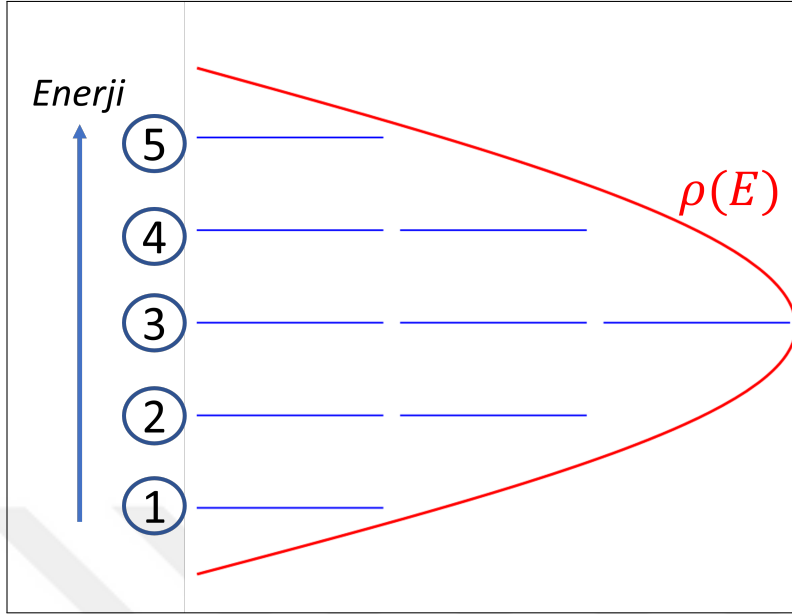
Şekil 2.11. a) Kütleli parçacıklar için $E(k) \propto k^2$ şeklindeki kuadratik dağınım ilişkisi; b) Foton için $E(k) \propto k$ şeklindeki lineer dağınım ilişkisi

Hesaplamalarda $\rho(E)$ ile sembolize edilecek olan durum yoğunluğu (Density of States-DOS) belli bir E enerji seviyesinin birim enerjideki elektron-volt başına yoğunluğunu, yani durum sayısını ifade eder. Örneğin belli bir E seviyesinde elektron-volt (ev) başına 5 durum varsa, diğer bir E seviyesinde 5000 durum söz konusu olabilir.

Durum Demekle Kastedilen Nedir?

Basitçe farklı enerji seviyelerini anlatır. Tek boyutlu bir parçacık durumunda belli bir E için sadece bir durum söz konusu iken boyut sayısının artışıyla aynı E seviyesine sahip birden fazla durum söz konusu olabilir. Aynı E seviyesine sahip durum sayısı bu durumun dejenerasyonunu anlatır. Örneğin ilk durumun 1, ikincinin 2, üçüncünün 3, dördüncünün 2 ve beşinci durumun 1 dejenere olduğu basit bir sitem Şekil 2.12'deki gibi gösterilebilir. Seviyeler arası mesafe çok çok küçük olduğu için bu kesikli gösterimi karşılayabilecek olan sürekli dağılım Şekil 2.12'de görülen kırmızı eğridir ve bu sürekli hesaplamalarla

elde edilen DOS'un bir temsilidir.



Şekil 2.12. Kesikli ve sürekli durum dağılımının basit bir temsili

DOS basitçe durum sayısı N 'in enerjiye göre değişimidir. Bu açıklamanın matematiksel ifadesi $\rho(E) = \frac{dN}{dE}$ olur. Bu eşitlikten durum sayısı eşitlik (2.3)'teki gibi olur.

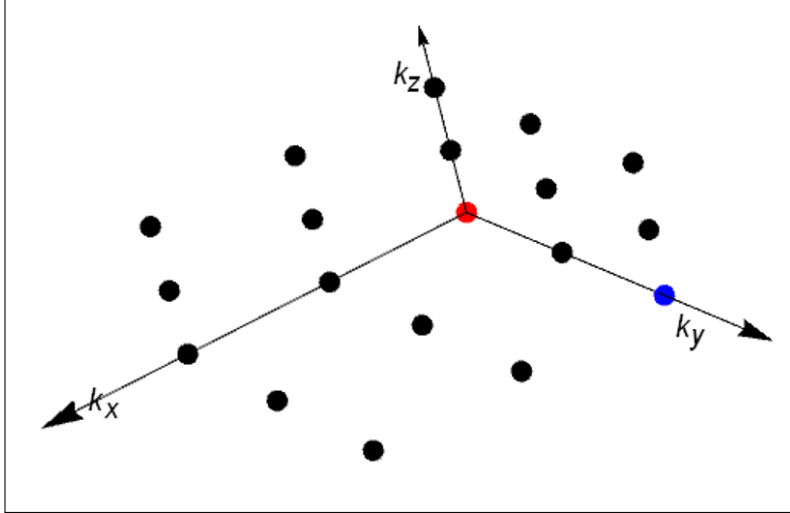
$$N = \int \rho(E) dE \quad (2.3)$$

Diğer yandan çok basit anlamda durum sayısı tüm kesikli durumların sayısı şeklinde $N = \sum_i n_i$ olarak düşünülebilir. Bu kesikli toplamı sürekli toplam şeklinde karşılayabilecek integral ise $N = \int dn$ olacaktır. Fakat buradaki n değerleri kesikliliği anlattığı için sürekli toplam olan integral ifadesi için uygun değildir. Eşitlik (2.2)'ye bakıldığında enerji ifadesi'nin $E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} n^2$ ile ifadesi kesikliliği belirtirken $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ile ifadesi kesikli olmayı zorunlu kılmaz. Bu durumda kabaca $N = \int dn$ yerine $N = \int () dk$ şeklinde bir sürekli toplam dikkate almak daha uygundur. Şimdi geriye kalan dn ifadesi'nin dk içerecek şekilde nasıl ifade edilebileceğini incelemektir. $k = n \frac{\pi}{a}$ olduğu için $dn = \frac{a}{\pi} dk$ olacaktır. Bu açıklamaların tümü tek boyuttadır. Üç boyut için açıklamalar genişletildiğinde $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$, $n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$, $dn_x = \frac{a}{\pi} dk_x$, $dn_y = \frac{a}{\pi} dk_y$ ve $dn_z = \frac{a}{\pi} dk_z$ olur. Böylelikle $N = \int dn$ integrali eşitlik (2.4)'teki gibi

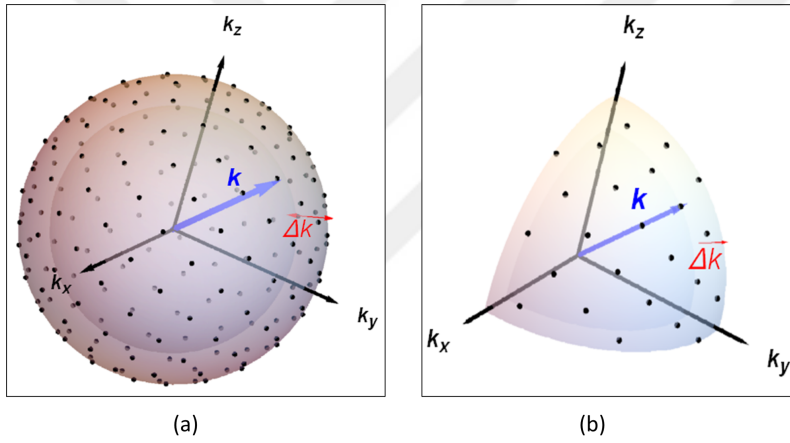
olur.

$$N = \int dn = \left(\frac{a}{\pi}\right)^3 \int \int \int dk_x dk_y dk_z \quad (2.4)$$

Kartezyen koordinatlarda verilen bu eşitlikler küresel polar koordinatlarda ifade edilmelidir. Bunu yapabilmek için konum uzayında değil k uzayında, yani diğer bir deyişle momentum uzayında durumları anlamaya çalışmak gerekir. Şekil 2.13'de k_x , k_y ve k_z bileşenlerinden oluşan k uzayının kartezyen koordinat görünümü içinde düzlemler üzerindeki değerler noktalar ile temsil edilmektedir. Bu şekilde sadece düzlemlerdeki noktalar resmedilmiştir fakat elbette ki düzlemler arasında da noktalar mevcuttur. Diğer yandan unutulmamalıdır ki bu kristal örgünün bir temsili değildir, bu sadece sahip olunabilecek olası durumların k uzayındaki kartezyen koordinatlarda bir nevi temsidir. Örneğin orijinde kırmızı nokta ile gösterilen durum duran bir dalgaya sahip bir parçacık durumunu temsil ederken k_y ekseninde mavi ile gösterilen durum x ve z yönlerinde hareket etmeyen fakat y yönünde sahip olduğu yüksek momentum değeri ile hızla hareket eden bir parçacık durumunu temsil eder. Şekilde çizimi yapılmayan düzlemler arası noktalar ise her üç yönde harekete sahip parçacık durumlarını temsil edecektir. Bunun yanında yine şekilde gösterilmeyen ve negatif yönlerde değerleri temsil eden noktalar da söz konusudur. Bu noktaların tümünü merkezi orijinde olan bir küre yapısı ile temsil edecek olursak bu küre Şekil 2.14'de görüldüğü gibi k yarıçaplı bir küre olacaktır.



Şekil 2.13. k uzayında bileşenlerin düzlemler üzerindeki görünümü



Şekil 2.14. k uzayında **a)** Tüm durumları kapsayan k yarıçaplı küre; **b)** Sadece pozitif k değerlerini kapsayan $1/8$ 'lik küre

Diğer yandan $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ olduğu için belli bir E seviyesinden bahsedebilmenin yolu aynı $|k|$ modülüne sahip olan k durumlarıdır ve bu da Şekil 2.14a'daki küre üzerinde kalan noktalardır. Bu noktaların daha sonra sonsuz küçük dk ifadesine evriltilecek olan sonlu küçük Δk kalınlıklı küre kabuğu içinde olan noktalar olduğu söylenebilir. Bu durumda k uzayında Kartezyen koordinatlardaki $\int \int \int dk_x dk_y dk_z$ iç içe integral hesabı polar küresel koordinatlarda $\int dk^3 = \int k^2 \sin\theta dk d\theta d\phi$ olur. Burada polar kısmı temsil eden $\theta \in [0, \pi]$ aralığındayken azimutal kısmı temsil eden $\phi \in [0, 2\pi]$ aralığındadır. Diğer yandan k uzayının radyal kısmı $k \in [0, \infty]$ aralığındadır. Böylelikle eşitlik (2.5)

söz konusu olur.

$$\int dk^3 = \int k^2 \sin\theta dk d\theta d\phi = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int k^2 dk = 4\pi \int k^2 dk \quad (2.5)$$

k 'ya bağıllık yerine E 'ye bağıllığı aradığımız için (2.5)'i E ile ifade etmeliyiz. $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ifadesinin kendisi ve diferansiyeli ile $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ve $dk = \frac{m}{\hbar\sqrt{2mE}} dE$ eşitlikleri elde edilir. Böylelikle $\int dk^3 = 4\pi \int k^2 dk = 4\pi \int \frac{\sqrt{2}m^{3/2}}{\hbar^3} \sqrt{E} dE$ olur. E bağımlı bu eşitliğin (2.4)'de kullanılmasıyla $N = \frac{8a^3 m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 \sqrt{2}} \int \sqrt{E} dE$ olur. Diğer yandan $k = n\frac{\pi}{a}$ olduğu için pozitif k_x, k_y ve k_z bileşenlerine ihtiyaç olduğu anlaşılmaktadır. Bu ise Şekil 2.14a'de görülen $|k|$ yarıçaplı Δk kalınlıklı küre kabuğunun $1/8$ 'inde ancak mümkündür. Bu $1/8$ 'lik küre Şekil 2.14b'de görülmektedir ve **Fermi küresi** adını alır. Böylece son elde edilen N ifadesinin $1/8$ ile çarpılması eşitlik (2.6)'yı verir.

$$N = \frac{a^3 m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 \sqrt{2}} \int \sqrt{E} dE \quad (2.6)$$

Eşitlik (2.6), eşitlik (2.3) ile karşılaştırılırsa durum yoğunluğu $\rho(E)$ 'nin eşitlik (2.7)'deki gibi olduğu anlaşılır.

$$\rho(E) = \frac{a^3 m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 \sqrt{2}} \sqrt{E} \quad (2.7)$$

Öngörüldüğü gibi $\rho(E)$ 'nin boyutu $\frac{1}{[Enerji]}$ 'dir.

Sonraki kısımda bir bant yapısının bize ne anlattığı açıklanmaya çalışılacak ve sonrasında ise optik durum yoğunluklarından bahsedilecektir.

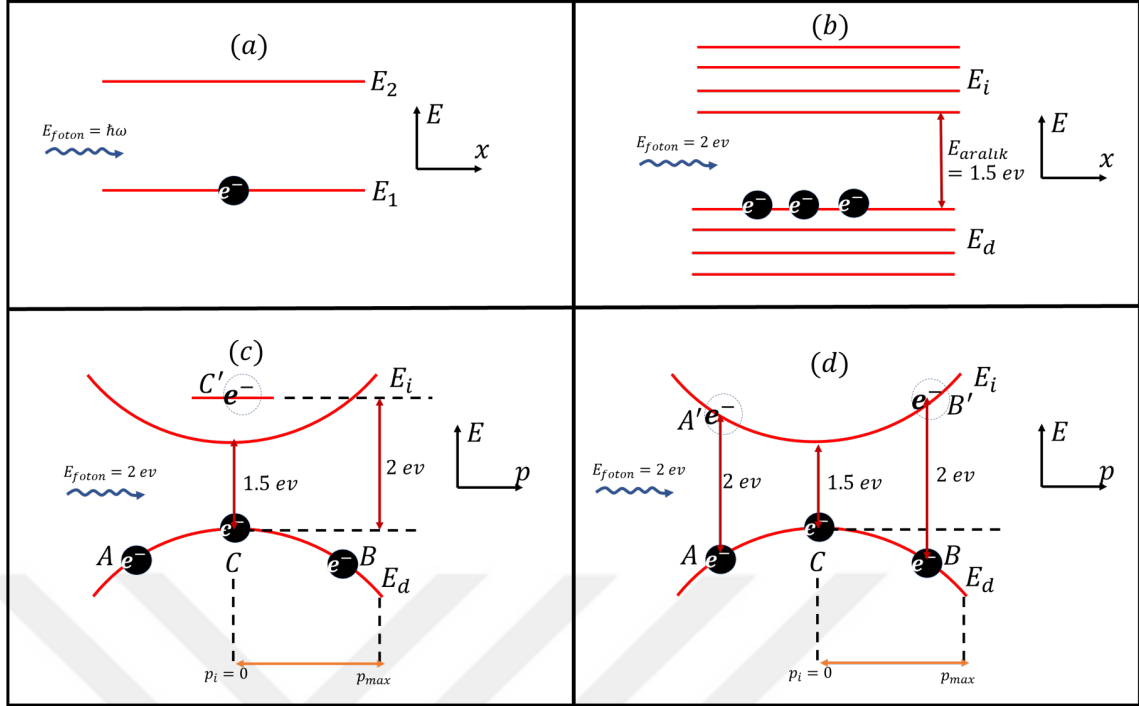
2.2. Optik Enerji/Momentum Bant Diyagramları

Bu bölümde bir bant yapısının ne anlattığı açıklanmaya çalışılacaktır. Tüm açıklamalar Şekil 2.15 üzerinden yürütülecektir.

En basit anlamda Şekil 2.15a'da görüldüğü gibi iki enerji seviyesinden oluşan bir sisteme $\hbar\omega$ enerjili bir foton gönderildiğini düşünelim. Eğer soğurulan foton enerjisi şekilde görülen E_1 ve E_2 seviyeleri arasındaki aralığı aşabilecek değerdeyse E_1

seviyesini işgal etmiş olan bir elektron bu fotonu soğuracak ve dikey olarak yukarı enerji seviyesi olan E_2 seviyesine yerleşecektir. Şekil 2.15b'de bu şablon elektronik enerji bant yapılarına genişletilmiş olarak görülmektedir. E_d ile gösterilen değerlik bandı ve E_i ile gösterilen iletim bandı birbirine çok yakın, yani neredeyse süreklilik arz eden enerji seviyelerinden oluşmaktadır. Değerlik ve iletim bandı arasındaki bant aralığı 1.5 ev 'tur. Şekil 2.15b,c,d'deki tüm şablonlarda $T = 0^\circ K$ sıcaklığı varsayılmıştır, yani tüm elektronlar başlangıçta değerlik bandında bulunmaktadır. Şekil 2.15b'de değerlik bandındaki elektronlar foton soğurmaya hazır durumdadırlar ve soğurma işlemi gerçekleşirse her zamanki gibi dikey yukarı yönde hareket ederek daha yüksek, izinli bir enerji seviyesine yerleşeceklerdir. Fakat Şekil 2.15b'de görülen durumda foton soğurulmasıyla birlikte bahsi geçen daha üst bir seviyeye yerleşim asla mümkün değildir. Bunun sebebi ise momentum korunumudur. Yani bir çok atomdan oluşmuş bir katı örgü enerji bant yapısı grubu söz konusu olduğunda Şekil 2.15b'de görülen şablon gerçekçi değildir. Çünkü değerlik ve iletim bandındaki her bir izinli seviye karakteristik bir enerji değerine sahip olduğu gibi karakteristik bir momentum değerine de sahiptir. Şekil 2.15b ise sadece karakteristik enerji değerlerini gösterebilmektedir. Şekil 2.15c ile gösterilen şablon gerçekçi bir bant yapısı gösterimidir. Burada dikey eksen enerjiyi gösterirken yatay eksen artık $p = \hbar k$ ile hesaplanan momentum değerlerini gösterebilmektedir. Örneğin Şekil 2.15c'deki değerlik bandının en yüksek enerji seviyesi olarak gösterilen C noktasında bulunan bir elektronun şekilde gösterildiği gibi sisteme gelen 2 ev enerji değerine sahip bir fotonu soğurduğunu düşünecek olursak; ilk olarak fotonun enerji katkısı olan 2 ev değeri elektronun bu fotonu soğurup dikey olarak 1.5 ev 'luk bant aralığını aşıp iletim bandı üzerindeki C' ile gösterilen bir seviyeye yerleşebileceğini söyler. Yatay eksen ile gösterilen momentum durumunu da kontrol etmek gerekir. Yani burada ne kadarlık bir momentum katkısı foton tarafından sağlanmaktadır? sorusu incelenmelidir. $p_i = 0$ değerinde bir ilk momentuma sahip elektronun foton soğurması sonucundaki p_s son momentumu, momentum korunumu nedeniyle p_{foton} ile verilen foton momentumuna eşit olmalıdır $p_s = p_{foton}$. Şimdi a kristal örgü sabitine sahip olan kristal örgü yapının da incelenmesi gerekir. Eğer fotonun yapıya olan momentum katkısı yok denecek kadar az ise momentum ekseninde hareket yok demektir, yani üst seviyelere doğru hareket tamamen dikey doğrultuda olacaktır. Bu bant diyagramındaki bant

kenarında bulunan maksimum momentum kabaca $p_{max} \approx \hbar \frac{2\pi}{a}$ 'dir. Diğer yandan $p_{foton} = \hbar \frac{2\pi}{\lambda_{foton}}$ 'dir. Örgü sabiti a 'nın kabaca 0.3 nm ve foton dalga boyu λ_{foton} 'un ise kabaca 500 nm olduğunu düşünerek $\frac{p_{max}}{p_{foton}} = \frac{\lambda_{foton}}{a} \approx 1600$ mertebesinde olduğu görülür. Bu $p_{max} \gg p_{foton}$ olduğunu söyler. Yani fotonun momentum katkısı neredeyse sıfırdır ve bu nedenle elektronun fotonu soğurması ile üst enerji seviyelerine doğru hareketi tamamen dikey yönde gerçekleşir. Böylece Şekil 2.15c'deki değerlik bandının en yüksek enerji seviyesi olarak gösterilen C noktasında bulunan bir elektronun şekilde gösterildiği gibi sisteme gelen 2 eV enerji değerine sahip bir fotonu soğurduğunda dikey olarak 1.5 eV 'luk bant aralığını aşır ve iletim bandı üzerindeki C' ile gösterilen bir seviyeye yerleşebileceği söylenebilir. Fakat bu durum da asla gerçekleşemez, çünkü C' ile gösterilen nokta izinli bir seviye değildir. Bunun nedeni ise tüm izinli seviyelerin değerlik ve iletim bantları olarak resmedilen kırmızı eğriler üzerinde bulunmasıdır ve bu nedenle C' ile gösterilen nokta izinli bir enerji seviyesi noktası değildir. Bu E_d ve E_i eğrileri gerçekçi bir anlamda enerji/momentum diyagramlarıdır, yani gerçekçi bant yapılarını temsil edebilirler. Diğer bir deyişle bu diyagramlar bize tüm olası durumları, yani tüm olası enerji/momentum çiftlerini anlatırlar. Bant yapıları, kristal örgü bilgileri kullanılarak Schrödinger denkleminin çözülmesiyle elde edilirler. Şekil 2.15d'de 2 eV 'luk foton enerjisini soğurarak iletim bandındaki izinli seviyelere yerleşebilecek olan elektronlar değerlik bandında A ve B noktalarında gösterilen elektronlar olarak resmedilmişlerdir. Bu iki elektron dikey olarak yukarı yönde hareket ettiklerinde değerlik bandındaki seviyelerinden 2 eV yukarıda ve iletim bandı üzerinde izinli seviyelerde bulunan A' ve B' ile gösterilen seviyelere yerleşebilirler.



Şekil 2.15. a) İki enerji seviyeli basit sistem; b) Bir çok enerji seviyesinden oluşan değerlik ve iletim bantlarının a'daki duruma bir analogisi; c) Değerlik ve iletim bantlarının hem enerji hem de momentum bilgisi verebilecek olan gerçekçi diyagramları; d) Gerçekçi değerlik ve iletim bantı diyagramlarında olası dikey geçişler

2.2.1. İki seviyeli sistem

Şekil 2.15d'de sisteme gelen belli bir E_{foton} enerjisinin değerlik bandındaki elektronlar tarafından soğurulması ile iletim bandına geçişleri gösterilmiştir. Momentum korunumu nedeniyle tamamen dikey doğrultuda $A \rightarrow A'$ ve $B \rightarrow B'$ geçişleri, değerlik bandındaki A ve B noktalarına karşılık gelen bir E_1 enerji seviyesinden, iletim bandındaki A' ve B' noktalarına karşılık gelen bir E_2 enerji seviyesine geçişi, yani 2.15a'da görülen iki seviyeli bir sistemi anlatır. Bu iki seviyeli sistem incelenerek elde edilebilecek olan durum yoğunlukları ve geçiş oranları sayesinde tüm enerjiler üzerinden bir toplama işlemiyle değerlik ve iletim bantları arasındaki geçişler daha iyi anlaşılacaktır. Bu iki seviyeli sistemin modellenmesi her zamanki gibi Schrödinger denklemi ile yapılır. Zamana bağlı Schrödinger denklemi eşitlik (2.8)'deki gibidir.

$$H\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) \quad (2.8)$$

Burada H sistemin Hamiltonyeni, yani kinetik ve potansiyel enerjilerinin toplamı iken $\Psi(x, t)$ ise sistemin toplam dalga fonksiyonudur. Bu toplam dalga fonksiyonu $\Psi(x, t) = C_1(t)\Psi_1(x, t) + C_2(t)\Psi_2(x, t)$ şeklinde E_1 enerji seviyeli ve E_2 enerji seviyeli durumların lineer bir kombinasyonudur. Diğer yandan dalga fonksiyonlarının zamana bağlı terimleri bilindiği üzere $e^{-i\omega t}$ çarpanıyla verilir. Buna göre $\Psi_1(x, t) = \psi_1(x)e^{-i\omega_1 t}$ ve $\Psi_2(x, t) = \psi_2(x)e^{-i\omega_2 t}$ şeklinde verilirler. Burada $\psi_1(x)$ ve $\psi_2(x)$ dalga fonksiyonlarının zamandan bağımsız kısımları iken ω_1 ve ω_2 sırasıyla E_1 ve E_2 seviyelerinin açısal frekanslarıdır ve $\omega_1 = E_1/\hbar$, $\omega_2 = E_2/\hbar$ eşitliklerini sağlarlar. Bu durumda sistemin toplam dalga fonksiyonu eşitlik (2.9)'deki gibi olacaktır.

$$\Psi(x, t) = C_1(t)e^{-i\omega_1 t}\psi_1(x) + C_2(t)e^{-i\omega_2 t}\psi_2(x) \quad (2.9)$$

Şimdi, henüz foton yokken sistemi inceleyip, bu durumda geçiş olmayacağını matematiksel olarak ispat edelim. Bu ispat zamanla değişmeyen $C_1(t)$ ve $C_2(t)$ katsayılarını bize vermelidir. Böyle bir durumda H hamiltonyeni sadece konuma bağlıdır. Bu hamiltonyen $H_0(x)$ olsun. $H_0(x)$ Hamiltonyeni, eşitlik (2.9)'deki sistem dalga fonksiyonu, $\hbar\omega_1 = E_1$, $\hbar\omega_2 = E_2$ eşitlikleri ve zamandan bağımsız kısımlar için $H_0\psi_1(x) = E_1\psi_1(x)$ ile $H_0\psi_2(x) = E_2\psi_2(x)$ eşitlikleri eşitlik (2.8)'deki Schrödinger denkleminde kullanılırsa geçici olarak f ile isimlendirilen eşitlik (2.10) elde edilir.

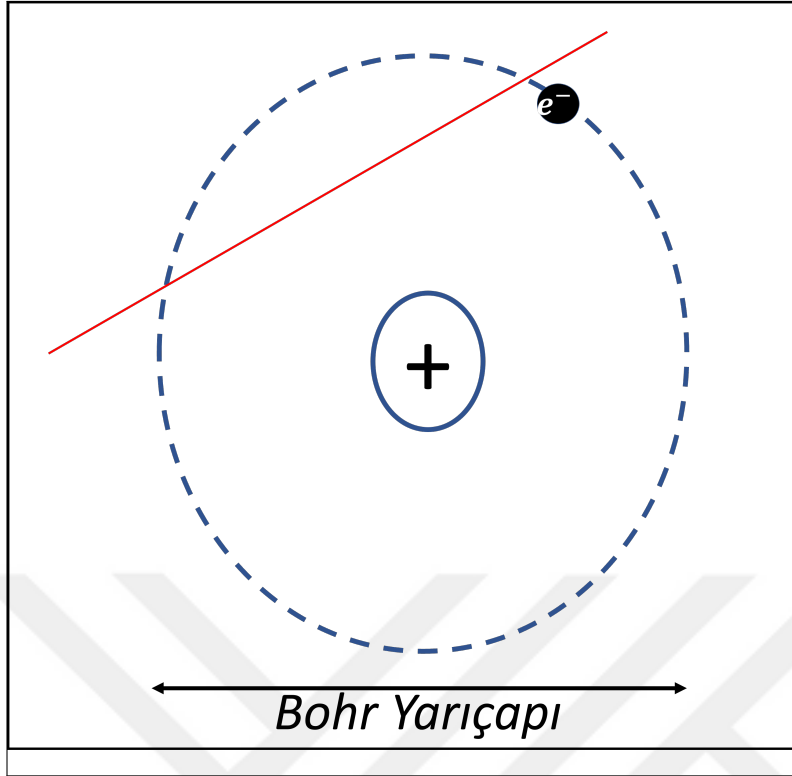
$$f = i\hbar e^{-i\omega_1 t}\psi_1(x)\frac{dC_1(t)}{dt} + i\hbar e^{-i\omega_2 t}\psi_2(x)\frac{dC_2(t)}{dt} = 0 \quad (2.10)$$

Diğer yandan $\psi_1(x)$ ve $\psi_2(x)$ dalga fonksiyonları ortogonal oldukları için $\langle \psi_1, \psi_1 \rangle = \langle \psi_2, \psi_2 \rangle = 1$ iken $\langle \psi_1, \psi_2 \rangle = \langle \psi_2, \psi_1 \rangle = 0$ 'dır. Bu iç çarpımları kullanarak eşitlik (2.10)'daki f ile verilen eşitliği sırasıyla soldan $\langle \psi_1 |$ ve $\langle \psi_2 |$ ile çarpalım. Bu çarpımlardan elde edilen sonuçlar eşitlik (2.11)'deki gibi olur.

$$\begin{aligned} \langle \psi_1, f \rangle &= \frac{dC_1(t)}{dt} = 0 \\ \langle \psi_2, f \rangle &= \frac{dC_2(t)}{dt} = 0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

Eşitlik (2.11) ile gösterildiği gibi sistemin bir foton ile etkileşmediği durumda $C_1(t)$ ve $C_2(t)$ katsayıları zamanla değişmemekte, yani bir geçiş söz konusu olmamaktadır.

Sistemin foton ile etkileştiği durumda Schrödingerdeki Hamiltonyen $H_0(x)$ 'e ek olarak hem konuma hem de zamana bağlı olan bir ilave potansiyel enerji içermelidir. Bu ilave Hamiltonyen terimini $H'(x, t)$ ile gösterirsek toplam Hamiltonyen $H(x, t) = H_0(x) + H'(x, t)$ olacaktır. Bu ilave potansiyel enerji k_L dalga vektörüne ve ω_L açısal frekansına sahip fotonun, yani elektromanyetik dalganın elektrik alan bileşeni ile meydana gelen potansiyel enerji olacaktır. Bu elektrik alanı E_L ile gösterecek olursak $E_L = E_0 \sin(k_L z - \omega_L t)$ şeklinde ilerleyen bir dalga formudur. Burada E_0 , elektrik alanın genliğini göstermektedir. z ile gösterilen konum parametresi elektronun yörüngesinde bulunduğu atom ile ilgilidir ve burada her hangi bir önemi olmayacaktır, çünkü $k_L z$ terimi önemsiz hale gelecektir. Bunun nedenini açıklamaya çalışacak olursak; Şekil 2.16'de $+$ yüklü çekirdek etrafında dolanan elektron görülmektedir. Şekilde gösterilen Bohr yarıçapı yaklaşık olarak 0.3 nm mertebesinde iken kırmızı ile gösterilen ve sisteme gelen optik dalganın dalga boyu yaklaşık olarak 100 nm mertebesinde. Bu durum ise dalganın dalga boyunun Bohr yarıçapından çok çok büyük olduğu anlamına gelir. Böylece optik dalganın elektrik alan bileşeninin konumla neredeyse hiç değişmeyeceği anlamına gelir. Öyleyse elektrik alan için $E_L = E_0 \sin(\omega_L t)$ eşitliği kullanılabilir. Böylelikle q toplam elektrik yükü olmak üzere bu elektrik alan nedeniyle meydana gelen potansiyel enerji, yani Hamiltonyenin $H'(x, t)$ bileşeni $H'(x, t) = -q \int E_L dx = q E_0 x \cos(\omega_L t)$ olacaktır.



Şekil 2.16. + yüklü çekirdek etrafında dolanan elektron ve bu sisteme gelen ışık

Bu H' teriminin de eklenmesiyle meydana gelen toplam $H(x, t) = H_0(x) + H'(x, t)$ Hamiltonyeni eşitlik (2.9)'deki sistem dalga fonksiyonu, $\hbar\omega_1 = E_1$, $\hbar\omega_2 = E_2$ eşitlikleri ve zamandan bağımsız kısımlar için $H_0\psi_1(x) = E_1\psi_1(x)$ ile $H_0\psi_2(x) = E_2\psi_2(x)$ eşitlikleri eşitlik (2.8)'deki Schrödinger denkleminde kullanılırsa eşitlik (2.12) elde edilir.

$$i\hbar e^{-i\omega_1 t} \psi_1(x) \frac{dC_1(t)}{dt} + i\hbar e^{-i\omega_2 t} \psi_2(x) \frac{dC_2(t)}{dt} = C_1 e^{-i\omega_1 t} H' \psi_1(x) + C_2 e^{-i\omega_2 t} H' \psi_2(x) \quad (2.12)$$

Eşitlik (2.12) soldan $\langle \psi_1 |$ ile çarpılırsa eşitlik (2.13) elde edilir.

$$i\hbar e^{-i\omega_1 t} \frac{dC_1(t)}{dt} = C_1 e^{-i\omega_1 t} qE_0 \cos(\omega_L t) \langle \psi_1, x \psi_1 \rangle + C_2 e^{-i\omega_2 t} qE_0 \cos(\omega_L t) \langle \psi_1, x \psi_2 \rangle \quad (2.13)$$

x 'in kesinlikle bir tek fonksiyon olduğunu bildiğimiz için $\psi_1(x)$ ister tek isterse çift

fonksiyon olsun $\langle \psi_1, x\psi_1 \rangle$ iç çarpımının sıfır olduğunu söyleyebiliriz. Fakat $\psi_1(x)$ ve $\psi_2(x)$ hakkında detaylı veriye sahip olmadan $\langle \psi_1, x\psi_2 \rangle$ iç çarpımı hakkında bir şey söyleyemeyiz. Böylece eşitlik (2.13), eşitlik (2.14)'e evrilir.

$$i\hbar e^{-i\omega_1 t} \frac{dC_1(t)}{dt} = C_2 e^{-i\omega_2 t} qE_0 \cos(\omega_L t) \langle \psi_1, x\psi_2 \rangle \quad (2.14)$$

Benzer açıklamalarla eşitlik (2.12) soldan $\langle \psi_2 |$ ile çarpılırsa eşitlik (2.15) elde edilir.

$$i\hbar e^{-i\omega_2 t} \frac{dC_2(t)}{dt} = C_1 e^{-i\omega_1 t} qE_0 \cos(\omega_L t) \langle \psi_2, x\psi_1 \rangle \quad (2.15)$$

$\langle \psi_1, x\psi_2 \rangle$ ifadeleri dipol matris elemanları olarak adlandırılırlar ve belli materyaller için değerleri bilinmektedir. Bu durumda bu matris elemanlarının da değerlerinin bilindiği düşünülürse, son iki eşitlik setinde sadece iki adet bilinmeyen söz konusudur ve bunlar $C_1(t)$ ve $C_2(t)$ 'dir. Başlangıç değerlerine sahip olduğu sürece bu eşitlikler çözülebilir. Eşitlik (2.14) ve eşitlik (2.15), sırasıyla eşitlik (2.16) ve eşitlik (2.17) ile de ifade edilebilir.

$$\frac{dC_1(t)}{dt} = \frac{qE_0 \langle \psi_1, x\psi_2 \rangle}{i\hbar} C_2 e^{i(\Delta\omega)t} \cos(\omega_L t) \quad (2.16)$$

$$\frac{dC_2(t)}{dt} = \frac{qE_0 \langle \psi_2, x\psi_1 \rangle}{i\hbar} C_1 e^{-i(\Delta\omega)t} \cos(\omega_L t) \quad (2.17)$$

Burada $\Delta\omega = \omega_1 - \omega_2$ 'dir. $t = 0$ anında henüz bir soğurma söz konusu olmadığı için $C_1(0) = 1$ ve $C_2(0) = 0$ 'dır. Diğer yandan pico-saniye mertebesindeki geçişler için tüm zamanlar boyunca $C_1(t) \approx 1$ yaklaşımı iyi bir yaklaşıklıktır. Bu başlangıç değerleri ve $\cos(\omega_L t) = \frac{e^{i\omega_L t} + e^{-i\omega_L t}}{2}$ eşitliği ile birlikte eşitlik (2.17) çözümlerse eşitlik (2.18) elde edilir.

$$C_2(t) = \frac{-qE_0 \langle \psi_1, x\psi_2 \rangle}{\hbar} \left[\frac{e^{i(\Delta\omega + \omega_L)t} - 1}{\Delta\omega + \omega_L} + \frac{e^{i(\Delta\omega - \omega_L)t} - 1}{\Delta\omega - \omega_L} \right] \quad (2.18)$$

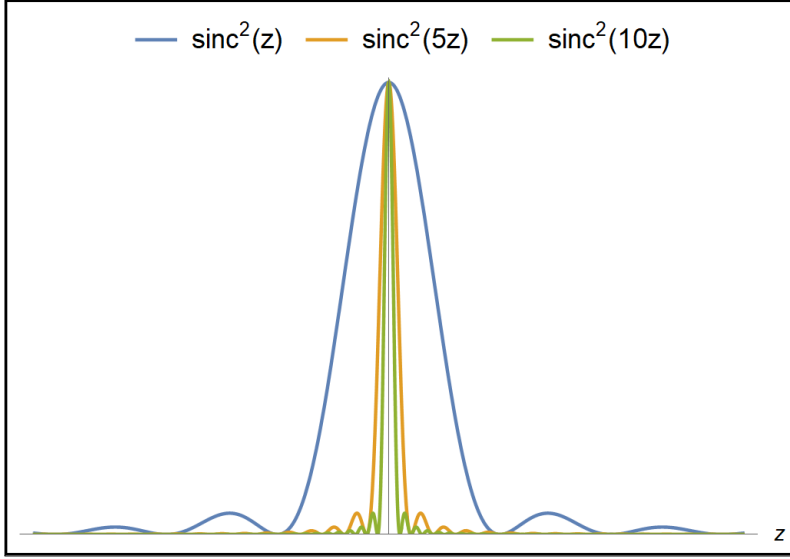
$\omega_L \approx \Delta\omega$ olduğunda eşitlik (2.18)'deki köşeli parantez içindeki ikinci terim birinci terimden çok çok büyüktür ki genel olarak durum böyledir. Böylece eşitlik (2.18), eşitlik (2.19)'a evrilir.

$$C_2(t) = \frac{qE_0 \langle \psi_1, x\psi_2 \rangle}{2i\hbar} e^{i(\Delta\omega - \omega_L)t} t \operatorname{sinc}\left(\frac{\Delta\omega - \omega_L}{2}t\right) \quad (2.19)$$

Burada kullanılan $\operatorname{sinc}(z)$ fonksiyonu $\operatorname{sinc}(z) = \frac{\sin(z)}{z}$ ye eşittir. Son eşitliğin makroskobik yorumu yapılmalıdır. E_2 seviyesinde bir elektronun bulunma olasılığı doğal olarak $P_2(t) = |C_2(t)|^2$ ile hesaplanır. Örneğin bir t_1 süresinde $P_2(t_1) = |C_2(t_1)|^2 = 0.1$ ise bu, E_1 'deki elektronların %10'unun t_1 sürede E_2 seviyesinde olacağını söyler. Örneğin başlangıçta E_1 seviyesinde 10 tane elektron varsa bu t_1 süresinde E_1 'deki 10 elektronun %10'u, yani 1 tane elektron E_2 'de olacaktır. Öyleyse birim zamanda $E_1 \rightarrow E_2$ geçişini sağlayabilecek elektron oranı $\frac{d|C_2(t)|^2}{dt}$ ile hesaplanmalıdır. Eşitlik (2.19)'ye göre $|C_2(t)|^2$, eşitlik (2.20)'deki gibi olur.

$$|C_2(t)|^2 = \left| \frac{qE_0 \langle \psi_1, x\psi_2 \rangle}{2\hbar} \right|^2 t^2 \operatorname{sinc}^2\left(\frac{\Delta\omega - \omega_L}{2}t\right) \quad (2.20)$$

Diğer yandan Şekil 2.17'de görülen farklı argümanlardaki sinc^2 fonksiyonlarına bakılacak olursa argüman büyüdükçe, yani buradaki duruma analogiyle zaman arttıkça sinc^2 fonksiyonu giderek Dirac delta fonksiyonuna benzemektedir. Böylece $\operatorname{sinc}^2\left(\frac{\Delta\omega - \omega_L}{2}t\right) \rightarrow \frac{2\pi}{t} \delta(\Delta\omega - \omega_L)$ şekline dönüşür.



Şekil 2.17. Farklı argümanlardaki sinc^2 fonksiyonu

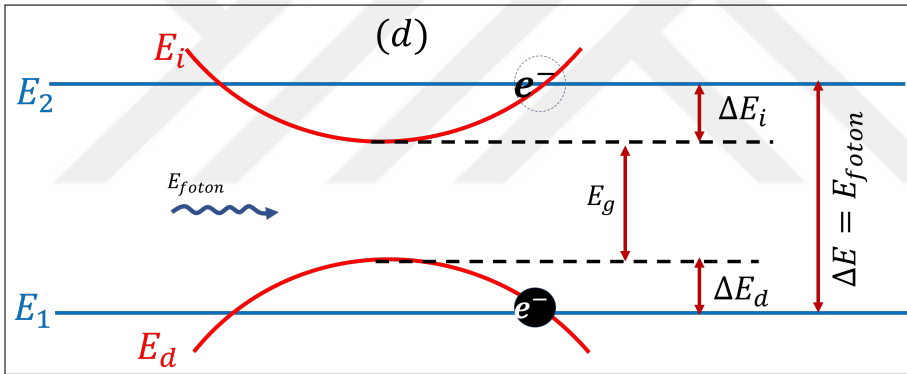
Böylece birim zamanda sırasıyla ω_1 ve ω_2 frekanslarına sahip E_1 ve E_2 seviyeleri arasındaki $E_1 \rightarrow E_2$ geçişini sağlayabilecek elektron oranı, yani kısaca birim zamandaki geçiş oranı eşitlik (2.21)'deki gibi olur.

$$W_{1,2} = \frac{d|C_2(t)|^2}{dt} = \left| \frac{qE_0 \langle \psi_1, x \psi_2 \rangle}{2\hbar} \right|^2 2\pi \delta(\Delta\omega - \omega_L) \quad (2.21)$$

Eşitlik (2.21) ile verilen bu geçiş oranına "**Fermi'nin altın kuralı**" denir. Görüldüğü gibi burada tüm parametreler sabittir. Bu da birim zamandaki geçiş oranının sabit olduğunu anlatır.

$E_1 \rightarrow E_2$ geçişini sağlayabilecek kaç tane durum olduğu sorusunun cevabı temelde iki parametreye bağlıdır; bunlardan ilki değerlik bandındaki E_1 enerjili durum sayısı ve ikincisi ise E_{foton} enerjisine karşılık gelen $\Delta E = E_2 - E_1$ enerji aralığıdır. $\rho_d(E)dE$ ile verilen değerlik bandındaki belli bir E enerjisindeki durum yoğunluğu olacaktır. E_1 ve E_2 durumlarının bizzat kullanılması hesaplamalarla başa çıkmayı zorlaştırmaktadır, fakat geçiş tam olarak $\Delta E = E_{foton}$ olduğu için durum yoğunluğu hesaplamalarında enerjisi bilinen E_{foton} ile çalışmak daha uygundur. Böylece $\rho_d(E)$ yerine $\rho_r(\Delta E)$ ile çalışılabilir. Burada $\rho_r(\Delta E)$ ifadesi $\Delta E = E_2 - E_1$ seviye farkının bir fonksiyonu olarak durum yoğunluğudur ve genellikle "**indirgenmiş durum yoğunluğu**" olarak

adlandırılır. Şekil 2.18 bu iki seviyeli geçişin ayrıntılarını göstermektedir. Şekilde görülen ΔE_i değeri E_{foton} enerjisini soğurarak değerlik bandından iletim bandına geçen elektron için iletim bandında yerleştiği enerji seviyesinin iletim bandının üstünde kalan enerji aralığını ifade eder ve basitçe elektronun kinetik enerjisine eşittir ve $\Delta E_i = \frac{\hbar^2}{2m_e}$ ile hesaplanır. Benzer şekilde ΔE_d değeri ise değerlik bandındaki söz konusu soğurmayı sağlayabilecek elektronların yerleşmiş olduğu seviyenin, değerlik bandının altında kalan enerji aralığını ifade eder ve basitçe bu seviyedeki tüm elektronların kinetik enerjisidir $\Delta E_d = \frac{\hbar^2}{2m_T}$ ile hesaplanır. Burada m_e iletim bandına geçmiş ve artık serbest elektron statüsü kazanmış olan elektronun kütlesi iken m_T ise değerlik bandındaki söz konusu enerji seviyesinde bulunan tüm elektronların kütleleri toplamıdır. Diğer yandan E_g değeri ise değerlik ve iletim bantları arası bant aralığı değeridir. Bu tanımlarla birlikte Şekil 2.18'den görülebileceği gibi foton enerjisine eşit olan ΔE değeri eşitlik (2.22)'daki gibi olur.



Şekil 2.18. Gelen foton enerjisini soğurarak değerlik bandındaki belli bir seviyeden iletim bandındaki belli bir seviyeye geçişin ayrıntıları

$$\Delta E = E_g + \Delta E_i(k) + \Delta E_d(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_T} \quad (2.22)$$

Eşitlik (2.22)'ye göre k dalga sayısı değeri eşitlik (2.23)'teki gibi olur.

$$k = \sqrt{\frac{(\Delta E - E_g)2m_r}{\hbar^2}}, \quad (2.23)$$

Burada $m_r = \frac{m_e m_T}{m_e + m_T}$ ile verilen indirgenmiş kütledir. Böylece eşitlik (2.7)'den yapılan

analojiyle ΔE enerjisi için durum yoğunluğu eşitlik (2.24)'deki gibi olur

$$\rho(\Delta E) = \frac{a^3 m^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3 \sqrt{2}} \sqrt{\Delta E - E_g} \quad (2.24)$$

2.3. Maxwell Denklemleri ve Dielektrik Materyaller

Bu çalışmada ilgilenilen ortamlar optik ortamlardır, yani dielektrik materyallerdir ve konular temelde ışığın bu ortamlarla etkileşiminden meydana gelmektedir. Bilindiği üzere ışık $10^{14} Hz$ mertebesinde osile eden (titreşen) elektrik ($\vec{E}$) ve manyetik ($\vec{B}$) alanlarının bir kombinasyonudur. Bu alanların yayılımı periyodik fonksiyonlarla tanımlanır. Elektromanyetik dalga enerjisinin taşınması, Amper ve Faraday yasalarına uygun olarak $\vec{E}$ ve $\vec{B}$ alanlarının enerjiyi değiş tokuş edişiyile gerçekleşir. $\vec{B}$ 'nin varyasyonu $\vec{E}$ 'ye diktir. Tek bir frekansa sahip olan bir elektromanyetik dalga $\vec{E}$ ve $\vec{B}$ 'nin harmonik varyasyonlarını ortaya koyar. Bir ortam içindeki elektrik ve manyetik alanların durumunu gösteren, yani elektromanyetik teorisinin temeli olan en genel Maxwell denklemlerinin diferansiyel formları eşitlik seti (2.25)'deki gibidir.

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} &= \frac{\rho_T}{\epsilon_0} \rightarrow \text{Elektrik alan için Gauss yasası} \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{H} &= 0 \rightarrow \text{Manyetik alan için Gauss yasası} \\ \vec{\nabla} \times \vec{E} &= -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \rightarrow \text{Faraday yasası} \\ \vec{\nabla} \times \vec{H} &= \vec{J}_f + \epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \rightarrow \text{Maxwell-Ampere yasası} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Burada ϵ_0 boş uzayın elektrik geçirgenliğini, ϵ ortamın elektrik geçirgenliğini, ρ_T toplam hacim yük yoğunluğunu, μ ortamın manyetik geçirgenliğini, $\vec{J}_f$ serbest hacim akım yoğunluğunu ifade ederken $\frac{\partial}{\partial t}$ kısmi türevi zamana göre türevi gösterir. Eşitliklerde kullanılan $\vec{H}$ alanı yardımcı manyetik alandır. ρ_T , ϵ , μ ve $\vec{H}$ ifadeleri (2.26)'deki gibi verilir.

$$\begin{aligned}
\rho_T &= \rho_f + \rho_b \\
\varepsilon &= \varepsilon_0(1 + \chi_e) \\
\mu &= \mu_0(1 + \chi_m) \\
\vec{H} &= \frac{\vec{B}}{\mu}
\end{aligned} \tag{2.26}$$

Son eşitlik setinde ρ_f serbest hacim yük yoğunluğunu, ρ_b serbest hacim yük yoğunluğunu, μ_0 boş uzayın manyetik geçirgenliğini, χ_e ortamın elektrik alinganlığını ve χ_m ise ortamın manyetik alinganlığını ifade eder. χ_e ve χ_m boyutsuz niceliklerdir ve boş uzaydaki değerleri sıfırdır. ε ve μ 'nun boş uzay geçirgenlik değerlerine olan bağıllıkları sırasıyla $\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = 1 + \chi_e$ ve $\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0} = 1 + \chi_m$ ile ifade edilir. μ_r "**dielektrik ortamın bağıl manyetik geçirgenliği**" adını alırken ε_r "**dielektrik ortamın bağıl elektrik geçirgenliği**" veya "**dielektrik sabiti**" adını alır.

$\vec{E}$ ilgilenilen uzay bölgesinde mümkün olan tüm yüklerin oluşturacağı elektrik alanların ve bu yükler dışında bu uzay bölgesinde varlığı söz konusu olabilecek tüm dış elektrik alanların toplamını ifade ederken $\vec{B}$ ise ilgilenilen uzay bölgesinde mümkün olan tüm akımların oluşturacağı manyetik alanların ve bu akımlar dışında bu uzay bölgesinde varlığı söz konusu olabilecek tüm dış manyetik alanların toplamını gösterir. İlgilenilen uzay bölgesindeki yük ve akım varlığının durumlarına göre denklemler özel hallerini alacaktır.

İletken materyaller yüklerin herhangi bir çekirdeğe bağlı olmadan serbest olarak hareket ettiği materyaller iken dielektrik materyallerde ise tüm yükler bir atom veya moleküle bağlıdır. Bir $\vec{E}$ alanı bu yükleri bir miktar hareket ettirebilir. Tüm yükler üzerindeki bu miktarlar birlikte ele alındığında yük dağılımı üzerinde «uzatma» ve «döndürme» etkilerine neden olabilir ve böylece dielektrik malzemede belirgin bir davranış ortaya çıkar. + yükler $\vec{E}$ yönünde itilirken – yükler $-\vec{E}$ yönünde itilir. Yani bir "**kutuplanma**" meydana gelir. $\vec{E}$ alanı yeterince büyükse iyonlaşma meydana gelir ve madde bir iletken haline gelir.

Bir çok kutuplanmış ya da kutuplanmamış molekülden meydana gelen bir dielektrikte durum her ne olursa olsun bir dış alan ($\vec{E}_{\text{dış}}$) doğrultusunda çok sayıda küçük dipoller meydana gelir. Yani malzeme her durumda kutuplanmış olur. Birim

hacim başına (V) dipol momenti ($\vec{p}$) eşitlik (2.27) ile gösterildiği gibi kutuplanmayı ($\vec{P}$) ifade eder

$$\vec{P} = \frac{\vec{p}}{V} \quad (2.27)$$

2.3.1. Dielektriğin doğrusallığı

Bu $\vec{P}$ kutuplanması $\vec{P} = \epsilon_0 \chi_e \vec{E}$ şeklinde toplam alan $\vec{E}$ ile orantılı ise bu dielektrik materyal için "**doğrusaldır**" denir.

Bir dielektrik materyal de aslında bir iletken materyalin yapmaya çalıştığını yapmaya çalışır fakat bunu ancak kısmi olarak yapabilir. Çok basit anlamda bir dielektrik varlığındaki alan dielektrik yokluğunda oluşacak olan alanı perdeler ve $1/\epsilon_r$ çarpanı kadar azaltır. Örneğin bu durumun kullanıldığı en temel örnek kapasitörlerdir. Bir kapasitörün sığasını arttırmanın yaygın yolu kapasitörü bir dielektrik materyal ile doldurmaktır.

2.3.2. Dielektriğin türdeşliği

Bir ortamın türdeş (homojen) olmasıyla anlatılmak istenen, ortam özelliklerinin ortamın her yerinde aynı olmasıdır. Dielektrik ortamlar söz konusu olduğunda ortam özelliğini belirleyen ise χ_e elektrik alınganlığıdır. Buna göre eğer dielektrik bir ortam homojen türdeş ise χ_e elektrik alınganlığı ortam içinde her yerde aynı demektir.

2.3.3. Bir dielektrik materyal için Maxwell denklemleri

Bir dielektrik ortamda serbest yük yoğunluğu bulunmaz, tüm yükler bir atoma bağlıdır. Bu nedenle $\rho_f = 0$ ve $\vec{J}_f = 0$ 'dır. Net yük yoğunluğu olarak sadece bir dış elektrik alanla indüklenebilecek bir bağlı yük yoğunluğundan bahsedilebilir ($\rho_b \neq 0$). Fakat serbest akım yoksa bir bağlı akım da olmayacaktır ($\vec{J}_b = 0$). Bu durumda toplam yük yoğunluğu $\rho_T = \rho_b$ ve toplam akım yoğunluğu ise $\vec{J}_T = \vec{J}_d$ olacaktır. $\vec{J}_d$ yer değiştirme akımı ise $\epsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$ ile verilir. Buna göre eşitlik seti (2.25)'deki Maxwell

denklemleri dielektrik bir ortam için eşitlik seti (2.28)'deki gibi olur:

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} \cdot \vec{E} &= \frac{\rho_b}{\varepsilon_0} \rightarrow \text{Elektrik alan için Gauss yasası} \\
 \vec{\nabla} \cdot \vec{H} &= 0 \rightarrow \text{Manyetik alan için Gauss yasası} \\
 \vec{\nabla} \times \vec{E} &= -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \rightarrow \text{Faraday yasası} \\
 \vec{\nabla} \times \vec{H} &= \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \rightarrow \text{Maxwell-Ampere yasası}
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

2.3.4. Elektrik ve manyetik alan için dalga denklemleri

ω açısal frekansına sahip bir elektromanyetik dalga için konuma ($\vec{r}$) ve zamana (t) bağlı kompleks elektrik ve manyetik alan eşitlikleri eşitlik (2.29)'deki gibidir.

$$\begin{aligned}
 \vec{E}(\vec{r}, t) &= \vec{E}(\vec{r})e^{i\omega t} \\
 \vec{H}(\vec{r}, t) &= \vec{H}(\vec{r})e^{i\omega t}
 \end{aligned} \tag{2.29}$$

Bir çok malzeme için $\mu = \mu_0$ 'dir. Bu gerçeği kullanarak fakat elektrik geçirgenliğinin $\varepsilon \equiv \varepsilon(r) = \varepsilon_0 \varepsilon_r(r)$ şeklindeki konuma bağlılığını muhafaza ederek Faraday ve Maxwell-Ampere yasalarını (2.30)'daki gibi tekrar yazalım:

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} \times \vec{E} &= -\mu_0 \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} \rightarrow \text{Faraday yasası} \\
 \frac{1}{\varepsilon_r(r)} \vec{\nabla} \times \vec{H} &= \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \rightarrow \text{Maxwell-Ampere yasası}
 \end{aligned} \tag{2.30}$$

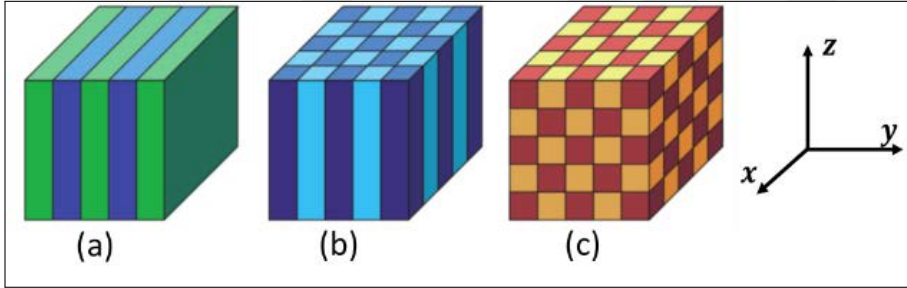
Buna göre $\varepsilon_0 \mu_0 = \frac{1}{c_0^2}$ gerçeğini ve (2.29) eşitliklerini kullanarak Faraday yasasının rotasyonelini alarak ve bu işlemde Maxwell-Ampere yasasını kullanarak elektrik alan için, benzer şekilde Maxwell-Ampere yasasının rotasyonelini alarak ve bu işlemde Faraday yasasını kullanarak manyetik alan için dalga denklemi, yani Helmholtz denklemleri elde edilebilir. Bu denklemler eşitlik (2.31)'deki gibi olur:

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\varepsilon_r(r)} \right) \left[\vec{\nabla} \times \left(\vec{\nabla} \times \vec{E}(r) \right) \right] &= \frac{\omega^2}{c_0^2} \vec{E}(r) \rightarrow \text{Elektrik alan için Helmholtz} \\ \vec{\nabla} \times \left[\left(\frac{1}{\varepsilon_r(r)} \right) \left(\vec{\nabla} \times \vec{H}(r) \right) \right] &= \frac{\omega^2}{c_0^2} \vec{H}(r) \rightarrow \text{Manyetik alan için Helmholtz} \end{aligned} \quad (2.31)$$

Eşitlik (2.31) ile verilen Helmholtz denklemleri tüm fotonik yapılar için temel teşkil eden öz-değer denklemleridir.

2.4. Fotonik Kristaller

Işığın madde ile olan etkileşimini inceleyen alan Fotonik olarak adlandırılır. Dielektrik sabitinin periyodik bir şekilde değişimiyle meydana getirilen yapılar ise Fotonik Kristal (PhC) olarak adlandırılır. Dielektrik sabitinin periyodik değişimi bir, iki veya üç boyutta söz konusu olabilir. Bu yapılar Şekil 2.19’de görüleceği gibi sırasıyla bir boyutta, iki boyutta ve üç boyutta PhC olarak adlandırılır.



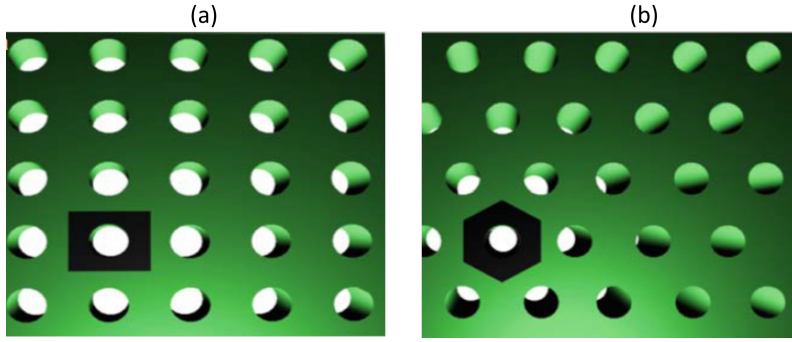
Şekil 2.19. a) Bir boyutta; b) İki boyutta; c) Üç boyutta fotonik kristaller (Joannopoulos vd 2008)

Bu kesikli periyodik değişiklik nedeniyle elektromanyetik dalga materyal içinde belli yön ve frekanslarda yayılamaz ve bu nedenle de fotonik kristallere optiksel yalıtkanlar da denir. Bu şekilde periyodik bir yapı üzerinde ilk çalışmayı Lord Rayleigh yayınlamıştır (Rayleigh 1888). Çalışma sonucu Lord Rayleigh çalıştığı materyallerin ışığın gelme açısına bağlı olarak yayılmasını yasaklayan bir bant aralığına sahip olduğunu gösterdi. İlk defa 1987’de Yablonovitch ve arkadaşlarının yaptığı çalışmayla iki ve üç boyutta fotonik bant aralıklı yapılar üretilmiştir (Yablonovitch 1987). Elde edilen materyallerde ışığın tuzaklanması gerçekleştirilebilmiştir.

Fotonik kristal yapılar lazerden, fiber optiklere, sensörlerden optik çoklayıcılara kadar bir çok alanda kullanılmaktadırlar. Örneğin bilgi iletiminde fotonik kristallerin önemi gittikçe artmaktadır çünkü bilgi aktarımında ışık elektronlara nazaran çok daha avantajlıdır. Işık bir dielektrik malzeme içerisinde elektronların metal içerisinde ilerleyişinden çok daha hızlı ilerleyebilir. Ayrıca ışık elektronların etkileşimlerinde olduğunun aksine çok fazla enerji kaybına neden olmaz. Işığın dielektrik materyal içerisinde yönlendirilmesinde ise yapının periyodik düzeninde meydana getirilen bazı örgü manüpülasyonları oldukça önemlidir. Bu manüpülasyonlar kullanılarak bant yapılarında değişiklik meydana getirilebilir.

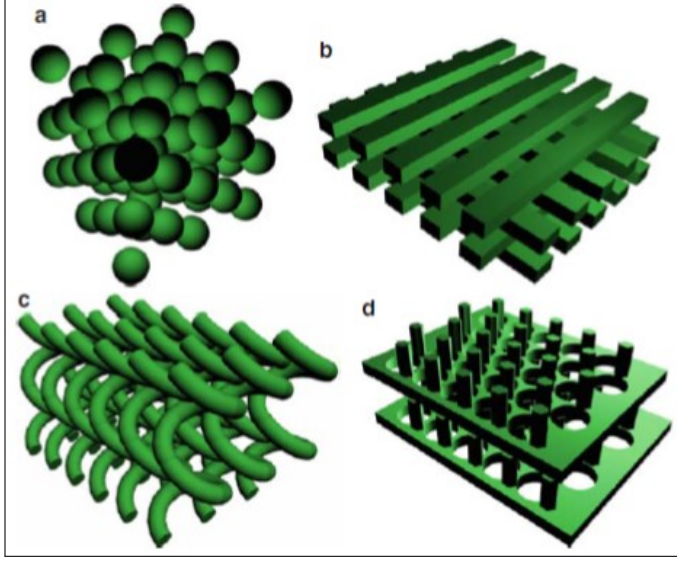
2.4.1. Fotonik kristal örgü yapısı

PhC ler farklı geometrik yapılara sahiptir. Bu yapılar katı hal atomik örgü yapısındaki kristal örgü tiplerine karşılık geldiği için PhC yapısı anlatılırken "**örgü**" terimi kullanılmaktadır. Bir boyutlu PhC'ler çok az sayıda periyodik yapı varyasyonları sergileyebilirler. Çünkü katmanlı bir yapıyla temsil edilirler, yani sadece kırılma indisi, tabakaların kalınlığı veya periyod içindeki tabaka sayısı değişebilir. İki ve üç boyutlu PhC örgü yapılarında elemanların şekil ve yerleşimlerine dair varyasyonlar sonsuz sayıda örgü tipine izin verecektir. Bu sebeple en genel örgü yapılarını, yani bu yapılardaki kompleks durumları incelemek için burada iki boyutlu örgü tipleri incelenecektir. Teknolojik nedenlerden dolayı iki adet yaygın iki boyutlu PhC örgü tipi kullanılmaktadır. Bunlar "**kare**" ve "**altıgen**" örgülerdir. Bu örgü yapıları Şekil 2.20'de görülmektedir. Kare örgüde birim hücre kare formundadır. Elemanlar yuvarlak, kare, altıgen veya diğer bir şekilde olabilirler fakat tüm elemanlar aynı şekilde olmalıdırlar. Burada yuvarlak şekilli elemanlara sahip bir kare örgü PhC görülmektedir. Altıgen örgüde birim hücre düzgün altıgen formundadır. Elemanlar yine yuvarlak, kare, altıgen veya diğer bir şekilde olabilirler fakat tüm elemanlar aynı şekilde olmalıdırlar. Burada yuvarlak şekilli elemanlara sahip bir altıgen örgü PhC görülmektedir.



Şekil 2.20. a) İki boyutlu PhC için kare örgü; b) İki boyutlu PhC için altıgen örgü (Sukhoivanov ve Guryev 2009)

Üç boyutlu PhC tipli örgü yapısı çok daha fazla sayıdadır. Üç boyutlu PhC ler katı hal kristallere en fazla benzeyenler olduğu için böyle PhC lerin birçok örgü tipi benzer yapı ve benzer isme sahiptir. Üretim yöntemine bağlı olarak 3D PhC ler katı hal kristallerinde elde edilemeyen yapılara sahip olabilirler. Bazı Üç boyutlu PhC kristal örgü örnekleri Şekil 2.21’de görülmektedir. Bunlar arasında yüz merkezli kübik (Face Centered Cubic – FCC) ve elmas örgüleri (Diamond Lattice) için katı hal kristal analogiler mevcutken odun yığını (woodpile) ve spiral (veya Glancing Angle Deposition – GLAD) örgüleri sadece PhC ler için elde edilebilir, yani bir katı hal kristal analogi mevcut değildir. Bu nedenle PhC ler çok sayıda olası örgü tipine sahiptirler öyle ki bant yapısı, geçirgenlik ve yansıma spektrumu gibi temel özellikler çok geniş bir aralıkta yer alabilir.

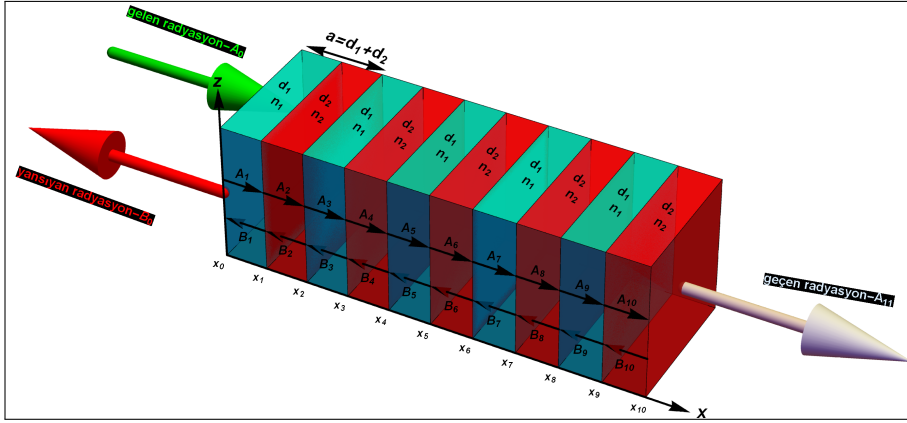


Şekil 2.21. Üç boyutlu PhC örgü tipleri a) FCC; b) Woodpile; c) Spiral; d) Diamond (Sukhoivanov ve Guryev 2009)

2.4.2. Bir boyutlu fotonik kristallerin konum uzayında incelenmesi

Bu çalışmada incelenecek olan temel fotonik yapılardan fotonik kristaller için çok kritik öneme sahip olan bant diyagramları konum uzayından ziyade ters örgü uzayında (diğer bir deyişle momentum uzayında) hesaplamalar gerektirmektedir. Bunun nedenlerine ve ters-örgü uzayında hesaplamalara geçmeden önce bir boyutlu bir fotonik kristal yapı olan ve "**Bragg ızgarası**" da denen sadece bir boyutlu periyodik bir yapı için yansıma-geçme spektrumlarının ve alan dağılımlarının konum uzayında incelenmesine dair açıklamaları vermek faydalı olacaktır.

Şekil 2.22'da $n_0 = 1$ kırılma indisli hava içinde bulunan bir boyutlu kesikli periyodik dielektrik katmanlardan oluşan bir yapı görülmektedir. Yapı d_1 kalınlıklı, n_1 kırılma indisli ve d_2 kalınlıklı, n_2 kırılma indisli dielektrik katman çiftlerinden oluşmaktadır. $a = d_1 + d_2$ parametresi ise dielektrikliğin kendisini tekrar ettiği periyodu temsil etmektedir ve daha sonra bu parametre PhC örgü sabiti olarak adlandırılacaktır.



Şekil 2.22. Bir boyutlu kesikli periyodik dielektrik yapı

Dağılım ilişkisini elde etmek için eşitlik (2.31)'de elde edilen Helmholtz denklemi ile formüle edilen öz değer problemini periyodik yapı içinde çözmek gerekir. Daha sonra düzlem dalga açılımı ile çözümde görüleceği gibi belli sebeplerden dolayı öz-fonksiyon ve $\varepsilon_r(r)$ dielektrik fonksiyonu koordinat bağımlı hallerinden kurtarılıp Fourier açılımının kullanılmasıyla PhC'nin ters örgü uzayında tanımlanırlar. Şimdi ise Şekil 2.22'daki basit yapı için dalga denklemi çözülüp konum uzayında yansıma spektrumu elde edilecektir.

Üç boyutta, elektrik alan için en genel hali yazılan eşitlik (2.31)'deki Helmholtz denkleminin bir boyuttaki formu eşitlik (2.32)'deki gibidir.

$$\frac{\partial^2 E_z(x)}{\partial x^2} + k_0^2 n^2(x) E_z(x) = 0 \quad (2.32)$$

Burada $E_z(x)$, z doğrultusunda osile eden ve x doğrultusunda ilerleyen elektrik alanı göstermektedir. Dielektriklik sadece x doğrultusunda değişmektedir ve bu sebeptendir ki bu yapı bir boyutlu bir yapı olarak adlandırılmaktadır. Ayrıca $\varepsilon(x) = n^2(x)$ ve $\omega = k_0 \cdot c_0$ eşitlikleri kullanılmıştır. Burada k_0 , havadaki dalga sayısını; c_0 , ışık hızını; ve $n(x)$ ise sadece x boyutunda değişen kırılma indisini temsil etmektedir. Eşitlik (2.32)'deki Helmholtz denkleminin bir boyuttaki formunun çözümü eşitlik (2.33)'deki gibidir.

$$E_j(x) = A_j e^{in_j k_0 x_j} + B_j e^{-in_j k_0 x_j} \quad (2.33)$$

Burada j alt indisi Şekil 2.22'daki $x_0, x_1, \dots, x_{10}$ noktalarını, bu noktalardaki elektrik alan E_j ve kırılma indisi n_j değerlerini ifade etmek için vardır. A_j ve B_j katsayıları ise sırasıyla $+x$ ve $-x$ yönünde ilerleyen dalga genliklerini göstermektedir. Buna göre ilk katmana gelen dalganın A_0 bileşeni gelen dalga genliğini, ilk katmandan yansıyan B_0 bileşeni yansıyan dalga genliğini ve A_{11} bileşeni ise geçen dalga genliğini ifade etmektedir. Dalga mekaniğinden bilindiği üzere yansıma katsayısı R ve geçme katsayısı T eşitlik (2.34)'deki gibidir.

$$R = \left| \frac{B_0}{A_0} \right|^2$$

$$T = \left| \frac{A_{11}}{A_0} \right|^2 \quad (2.34)$$

Böylece her bir k_0 değeri için R ve T değerleri sırasıyla yansıma ve geçme spektrumlarını verecektir. Tek yapılması gereken her bir katmandaki x_j sınırında eşitlik (2.33)'deki çözümü kullanarak elektromanyetik sınır koşullarını uygulamaktır. Elektrik alan için bir x_j sınırındaki elektromanyetik sınır koşulları, bu sınırda elektrik alanların ve türevlerinin birbirine eşit olması gerektiğidir ve eşitlik (2.35)'daki gibi verilirler.

$$E_j(x_j) = E_{j+1}(x_j)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} E_j(x_j) = \frac{\partial}{\partial x} E_{j+1}(x_j) \quad (2.35)$$

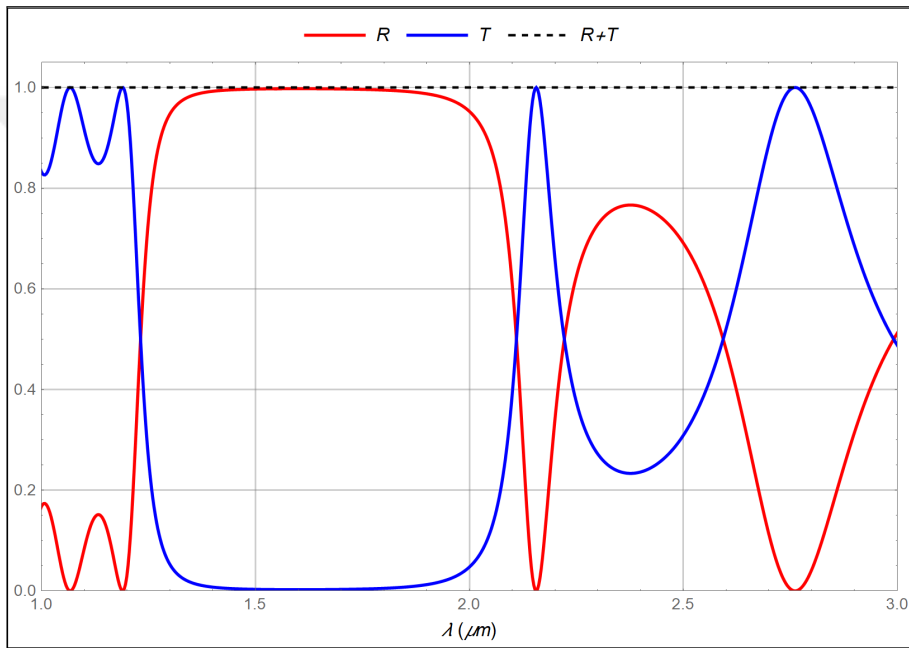
Eşitlik (2.33)'deki çözümün eşitlik (2.35)'daki sınır koşullarına uygulanmasıyla Şekil 2.22 ile verilen örnek için eşitlikler (2.36)'deki gibi olur:

$$\begin{aligned}
A_0 e^{ik_0 n_0 x_0} + B_0 e^{-ik_0 n_0 x_0} &= A_1 e^{ik_0 n_1 x_0} + B_1 e^{-ik_0 n_1 x_0} \\
ik_0 n_0 A_0 e^{ik_0 n_0 x_0} - ik_0 n_0 B_0 e^{-ik_0 n_0 x_0} &= ik_0 n_1 A_1 e^{ik_0 n_1 x_0} - ik_0 n_1 B_1 e^{-ik_0 n_1 x_0} \\
A_1 e^{ik_0 n_1 x_1} + B_1 e^{-ik_0 n_1 x_1} &= A_2 e^{ik_0 n_2 x_1} + B_2 e^{-ik_0 n_2 x_1} \\
ik_0 n_1 A_1 e^{ik_0 n_1 x_1} - ik_0 n_1 B_1 e^{-ik_0 n_1 x_1} &= ik_0 n_2 A_2 e^{ik_0 n_2 x_1} - ik_0 n_2 B_2 e^{-ik_0 n_2 x_1} \\
&\vdots \\
A_9 e^{ik_0 n_9 x_9} + B_9 e^{-ik_0 n_9 x_9} &= A_{10} e^{ik_0 n_{10} x_9} + B_{10} e^{-ik_0 n_{10} x_9} \\
ik_0 n_9 A_9 e^{ik_0 n_9 x_9} - ik_0 n_9 B_9 e^{-ik_0 n_9 x_9} &= ik_0 n_{10} A_{10} e^{ik_0 n_{10} x_9} - ik_0 n_{10} B_{10} e^{-ik_0 n_{10} x_9} \\
A_{10} e^{ik_0 n_{10} x_{10}} + B_{10} e^{-ik_0 n_{10} x_{10}} &= A_{11} e^{ik_0 n_{11} x_{10}} + B_{11} e^{-ik_0 n_{11} x_{10}} \\
ik_0 n_{10} A_{10} e^{ik_0 n_{10} x_{10}} - ik_0 n_{10} B_{10} e^{-ik_0 n_{10} x_{10}} &= ik_0 n_{11} A_{11} e^{ik_0 n_{11} x_{10}} - ik_0 n_{11} B_{11} e^{-ik_0 n_{11} x_{10}}
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Şekil 2.22'deki yapı için $n(x)$ kırılma indisi eşitlik (2.37)'deki gibidir.

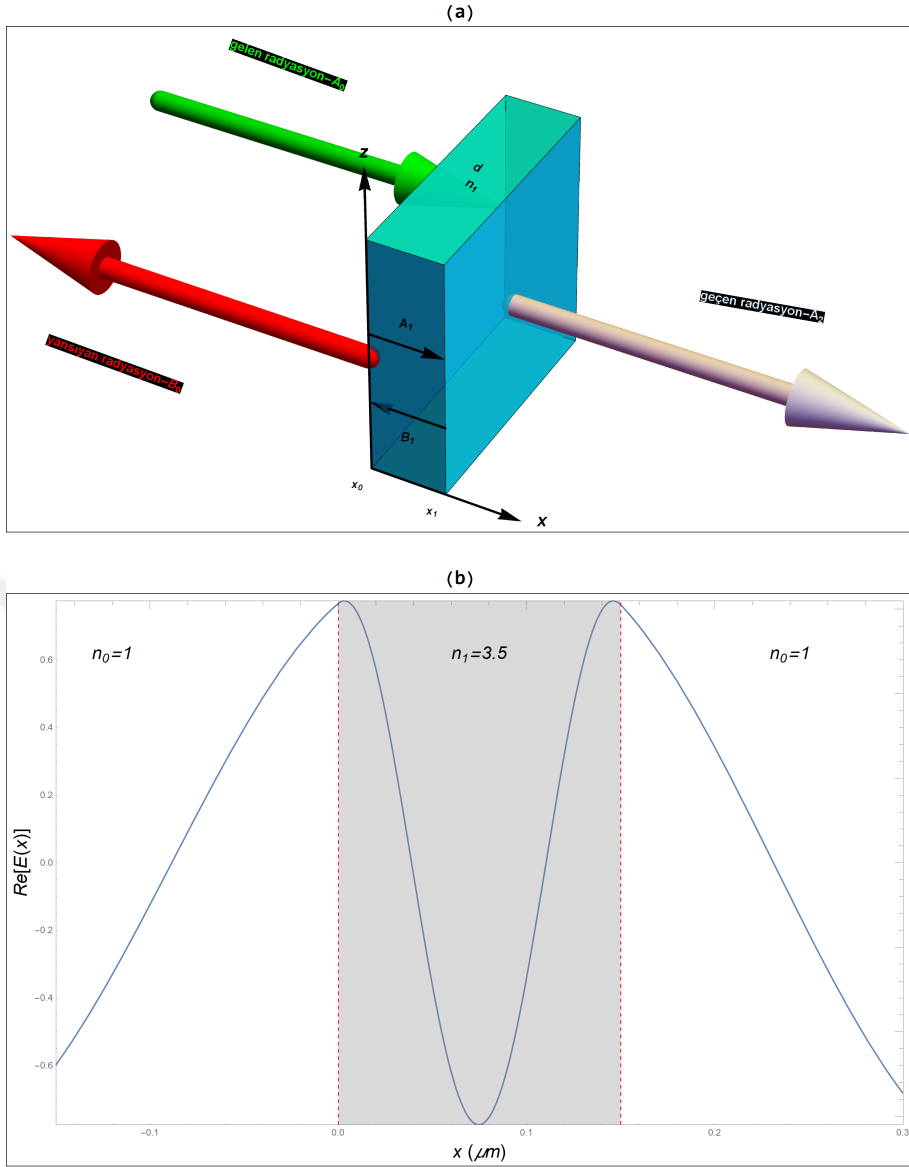
$$n(x) = \begin{cases} n_0 = n_0, & x < x_0 = 0 \\ n_1 = n_1, & x_0 < x < x_1 \\ n_2 = n_2, & x_1 < x < x_2 \\ n_3 = n_1, & x_2 < x < x_3 \\ n_4 = n_2, & x_3 < x < x_4 \\ n_5 = n_1, & x_4 < x < x_5 \\ n_6 = n_2, & x_5 < x < x_6 \\ n_7 = n_1, & x_6 < x < x_7 \\ n_8 = n_2, & x_7 < x < x_8 \\ n_9 = n_1, & x_8 < x < x_9 \\ n_{10} = n_2, & x_9 < x < x_{10} \\ n_{11} = n_0, & x_{10} < x \end{cases} \tag{2.37}$$

Eşitlik (2.36)'daki eşitlik sisteminde $B_{11} = 0$ olmalıdır, çünkü x_{10} arayüzünden sonraki ortam artık yapının bittiği ve hiçbir dielektrik değişimin olmadığı salt hava ortamıdır ve artık bir yansıma söz konusu değildir. Bu sistem çok iyi bilinen Cramer matrisi metoduyla B_0 ve A_{11} için çözülürse her bir k_0 öz-değeri için R yansıma spektrumu ve T geçme spektrumları eşitlik (2.34) ile hesaplanabilir. Şekil 2.23, Şekil 2.22'deki bu örnek yapının $n_0 = 1, n_1 = 3.5, d_1 = 0.15\mu m, n_2 = 2, d_2 = 0.15\mu m$ değerleri ile birlikte $\lambda \in [1, 3]\mu m$ aralığındaki dalgalı boyları için yansıma (R) ve geçme (T) spektrumlarını göstermektedir.



Şekil 2.23. Şekil 2.22'deki bir boyutlu periyodik yapı için yansıma ve geçme spektrumları

Diğer yandan Şekil 2.24a'da hava içinde bulunan $d = 0.15\mu m$ kalınlıklı $n_1 = 3.5$ kırılma indisli tek bir dielektrik katman ve Şekil 2.24b'da ise bu katman boyunca uzanan x uzayındaki elektrik alan dağılımını gösterilmektedir. Şekil 2.24b'deki kırmızı kesikli çizgiler dielektrik katman ve hava arası arayüzleri temsil etmektedir. Görülebileceği gibi dalga fonksiyonunun dielektrik katman içindeki frekansı havaya nazaran daha büyüktür. Bu durum katmanın kırılma indisinin daha büyük oluşu ve bu nedenle de eşitlik (2.33)'deki eksponansiyel terimin argümanını büyütmesinden kaynaklanır. Ayrıca dalga fonksiyonunun düzgün ve sürekli oluşu eşitlik (2.35) ile verilen sınır koşullarının uygulanmış olmasından kaynaklanır.



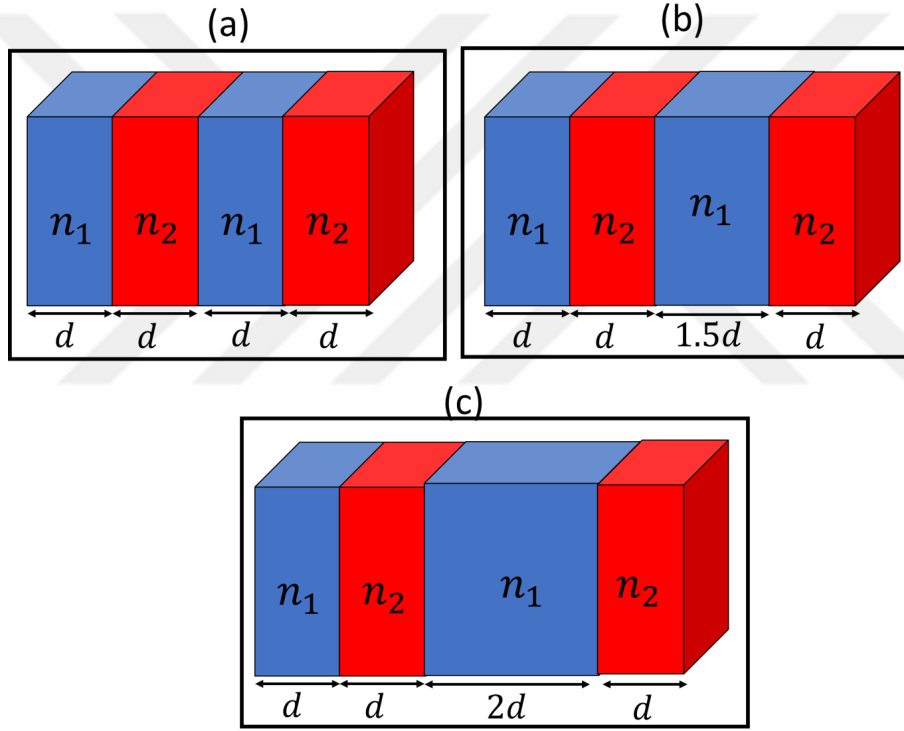
Şekil 2.24. (a) Hava içinde bulunan $d = 0.15\mu m$ kalınlıklı $n_1 = 3.5$ kırılma indisli tek bir dielektrik katman; (b) bu katman boyunca uzanan x uzayındaki elektrik alan dağılımı

Sırasıyla kırılma indisi ve katman kalınlığı olarak (n_1, d_1) ve (n_2, d_2) şeklindeki katman çiftlerinden oluşan bir Bragg ızgarası için maksimum yansımaya uğrayacak olan dalganın dalgaboyuna "**Bragg dalga boyu**" (λ_{Br}) denir. ve eşitlik (2.38)'deki gibidir.

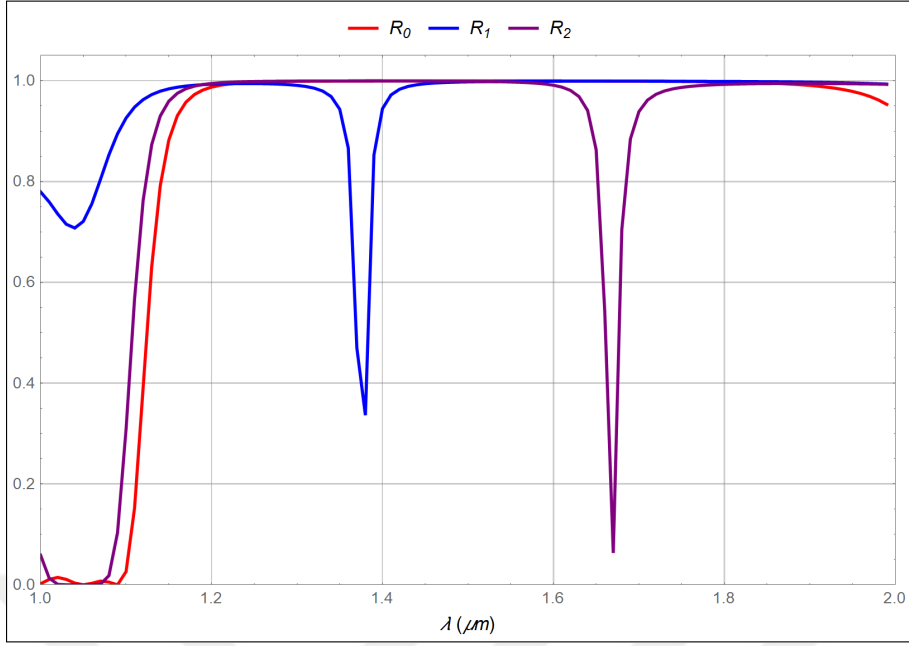
$$\lambda_{Br} = 2(n_1 d_1 + n_2 d_2) \quad (2.38)$$

Herhangi bir kusur (defect) olmaksızın saf periyodik bir Bragg reflektörü tüm katman çiftlerinin aynı kalınlıkta olduğu periyodik bir yapıdır. Defect'li bir katman

barındıran Bragg reflektörlerinde ise katmanlardan birinin kalınlığı veya kırılma indisi değişmiştir. Defect barındıran durumlarda yapının yansıma spektrumu ciddi bir değişim gösterecektir. Bu defect katmanları rezonatör görevi görür. Şekil 2.25a'da katman çiftlerindeki periyodiklik saf haldedir ve her bir katman d kalınlıklıdır. Şekil 2.25b,c'de ise katmanlardan birinin kalınlığı sırasıyla $1.5d$ ve $2d$ şeklinde manipüle edilmiştir. Şekil 2.25a,b,c'deki yapılara ait yansıma spektrumları ise Şekil 2.26'de sırasıyla R_0 , R_1 ve R_2 olarak gösterilmektedir. Görüldüğü üzere defect'li bir katman söz konusu olduğunda, yani katmanlar manipüle edildiğinde, yansıma spektrumunda keskin bir geçme piki gözlenir.



Şekil 2.25. (a) Sürekli olarak $(d, n_1) - (d, n_2)$ katman çiftlerinden oluşan bir boyutlu yapı; (b) katmanlardan birinin $1.5d$ kalınlıkta olduğu defetcli bir boyutlu yapı; (c) katmanlardan birinin $2d$ kalınlıkta olduğu defetcli bir boyutlu yapı



Şekil 2.26. Şekil 2.25’de görülen yapılar için yansıtma spektrumları

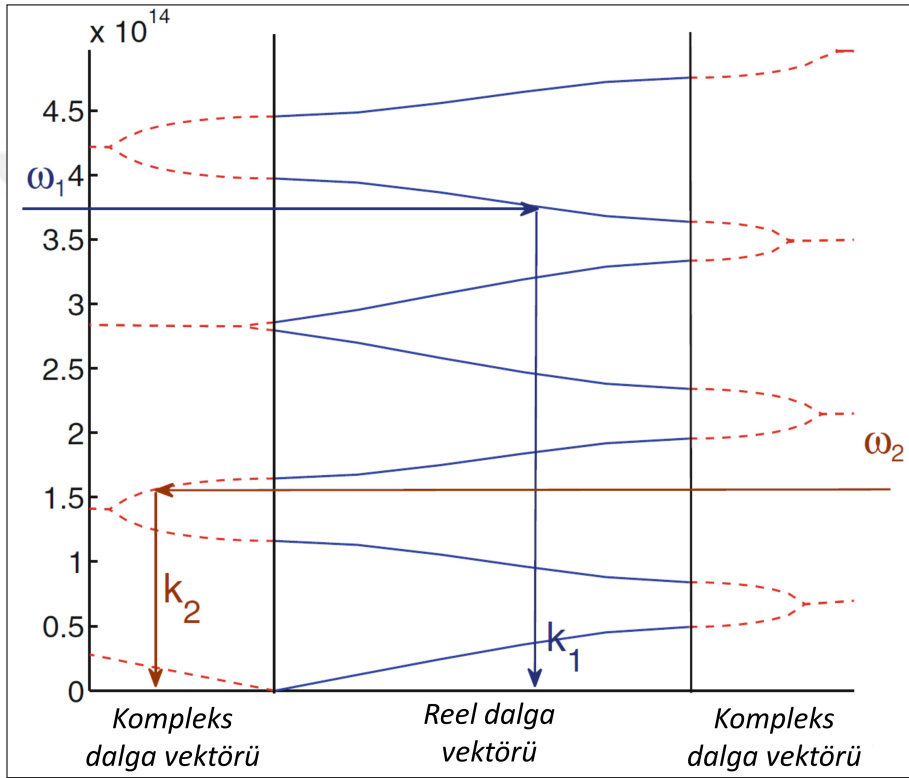
Bu şekilde bir boyutlu dielektrik bir yapı, farklı kalınlıklı ve farklı dielektrik sabitli katman çiftleri kullanılarak çeşitli formlarda tasarlanabilir ve böylece istenen bir dalgaboyunda yüksek yansıtma, diğer bir dalgaboyunda ise yüksek geçirgenlik (transparanlık) elde edilebilir. Yüksek verimli reflektörler, ayarlanabilir lazer aynalar, anti-reflection filmler, dikey kavis yüzeyli lazer yayıcılar, fiber Bragg ızgarası temelli dalgaboyu bölmeli optik çoklayıcı ve ayırıcılar çeşitli Bragg ızgarası dizaynları ile üretilen bazı optik cihazlara örnek olarak verilebilir.

2.4.3. Fotonik bant aralıkları

Fotonik kristaller için kritik öneme sahip olan bant diyagramları konum uzayından ziyade ters örgü uzayında (diğer bir deyişle momentum uzayında) hesaplamalar gerektirmektedir. Çünkü bir boyutlu yapılarda bir önceki bölümde görüldüğü gibi sınır şartları ile yazılan eşitlik sisteminin çözülmesiyle yansıtma spektrumu elde edilebilirken iki ve üç boyutlu yapılar söz konusu olduğunda bu çözüm yolu neredeyse imkansız hale gelmektedir. Bu nedenledir ki PhC karakteristiklerinin en genel biçimi olan bant yapıları (PBGs) kritik önem taşır hale gelir.

PBG, bir PhC içinde ışığın yayılmasının engellendiği enerji veya frekans aralığını

ifade eder. PhC terminolojisindeki bir diğer önemli terim ise öz frekanstır ve yapının rezonans frekanslarını anlatır. PhC arayüzlerinde çok sayıda Fresnel yansıması meydana gelir. İleri ve geri dalgalar arasındaki yapıcı ve yıkıcı girişimler radyasyonun iletimine veya yansımasına neden olur. Her bir öz durum seti radyasyon dalga vektörünün özel bir değerine karşılık gelir. Bant yapısının fiziksel anlamı radyasyonun ve radyasyonun içinde yayıldığı ortamın özelliklerini birbirine bağlamaktır (Sukhoivanov ve Guryev 2009). Bir boyutta bir PhC için bant yapısı örnek çizimi Şekil 2.27'deki gibidir.



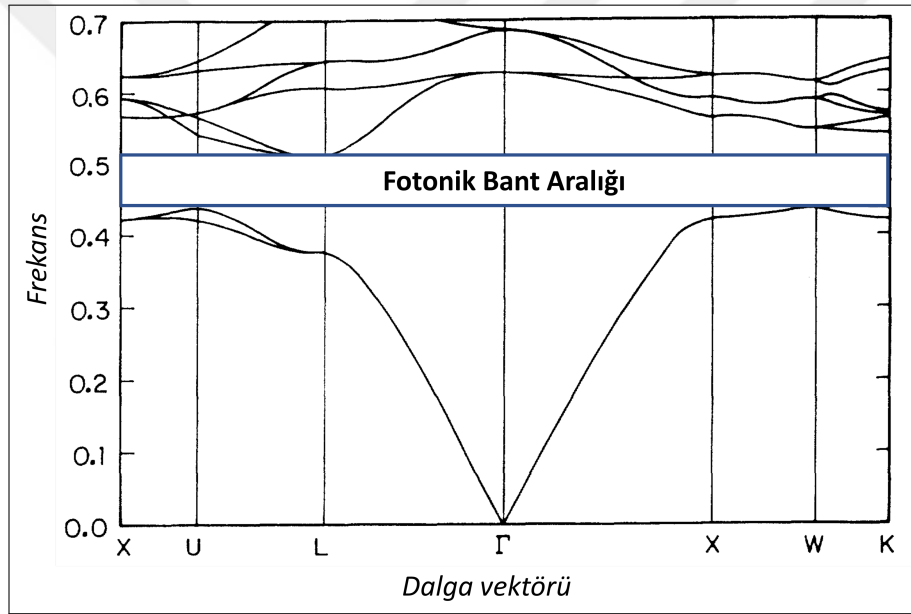
Şekil 2.27. Bir boyutta bir PhC için bant yapısı (Sukhoivanov ve Guryev 2009)

Şekil 2.27'de yatay eksen ortama gelen radyasyonun dalga vektörünü, dikey eksen ise ortamın rezonans frekanslarını gösterir. Şekil 2.27 üzerinden iki örnek durum aşağıda incelenmektedir:

Örnek Durum 1: Ortama gelen radyasyonun frekans değerinin dikey ekseninde gösterilen ortam rezonans frekanslarından ω_1 'e eşit olduğunu düşünelim. Bant yapısına göre ω_1 frekanslı radyasyon yapı içine nüfuz ettiğinde yapı tarafından izinli olan bir reel dalga vektörüne sahiptir. Bu dalga vektörünün değeri bant yapısından bulunabilir. Şekle göre k_1 değeri ω_1 frekansına karşılık gelmektedir. k_1 değeri reel olduğu için ω_1 frekanslı

gelen radyasyon yapı içinde yayılabilir.

Örnek Durum 2: Ortama gelen radyasyonun frekans değerinin dikey ekseninde gösterilen ortam rezonans frekanslarından ω_2 'ye eşit olduğunu düşünelim. Şekle göre ω_2 değerine karşılık gelen dalga vektörü kompleks k_2 vektörüdür. Bu durumda ω_2 frekansına sahip gelen radyasyon yapı içinde yayılamaz ve yansıtılır. Bununla birlikte kompleks dalga vektörünün sanal kısmı ya radyasyon sönümüne ya da radyasyon kazancına karşılık gelir. Durum sönümü ifade ettiğinde sönüm sonlu bir değer olduğu için bir mesafeye kadar radyasyon yapıya nüfuz edecektir. Böylece yasaklı frekans aralıkları PBG'leri meydana getirir. Örneğin Şekil 2.28'de tam bir bant aralığının var olduğu görülmektedir.



Şekil 2.28. Elmas örgülü üç boyutlu bir PhC bant yapısı (Ho vd 1990)

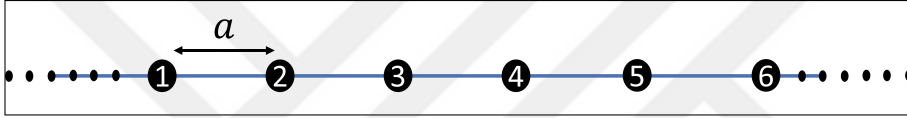
Geleneksel bant yapısı hesaplamaları temel olarak şöyledir: Bant yapıları radyasyon yapı içinde belli bir yönde yayılırken radyasyon davranışı hakkındaki tüm bilgiyi verebilir ve PhC parametrelerinin elde edilmesine olanak tanır. Geleneksel hesaplamalarda düzlem dalga açılımı (Plane Wave Expansion-PWE) önemlidir. Bant yapısı hesaplarındaki problem tanımı, dağınım ilişkilerini, yani PhC boyunca geçen radyasyonun dalga vektöründeki PhC rezonans frekansları veya öz frekanslara olan bağıllığını bulmaktan ibarettir.

Eşitlik (2.31)'de elektrik ve manyetik alanlar için gösterilen Helmholtz denklemleri

birer öz-değer denklemidir ve bu öz-değer denklemlerinin çözümü ters örgü uzayında, yani momentum uzayında yapılmalıdır. Çünkü yapı içinde öz-fonksiyonlar olan $E(r)$, $H(r)$ ve $\varepsilon(r)$ dielektrik fonksiyonları sonsuz periyotludur. Sonsuz periyotlu fonksiyonlarla hesap yapılamayacağı için sistem momentum uzayında incelenmek zorundadır. Sonsuz periyotlu yapı ile kastedileni açıklamaya çalışalım.

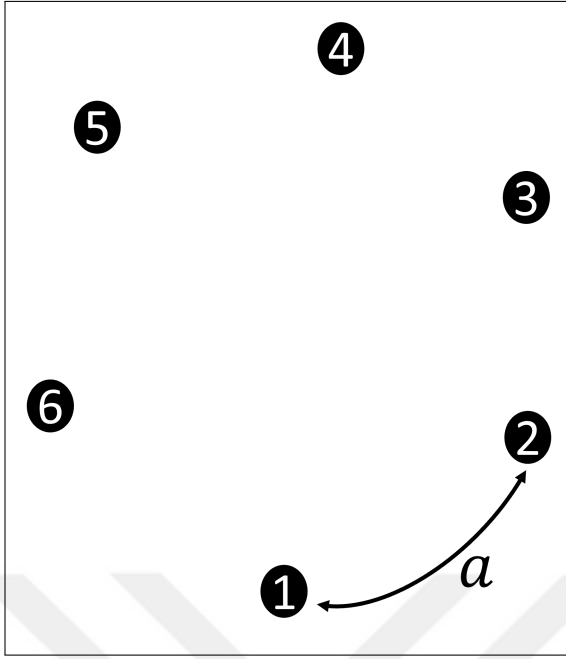
Sonsuz Periyotlu Yapı İle Kastedilen Nedir?

İlk olarak hatırlamak gerekir ki dalga fonksiyonunun kendisi olan $\psi(x)$ komplekstir. Fiziksel olarak dalga fonksiyonuna dair durumlar olasılık yoğunluğu olan $|\psi(x)|^2$ ile belirlenir. Şekil 2.29'da a örgü periyoduna sahip sonsuza giden bir boyutlu bir atom zinciri örneklendirilmektedir.



Şekil 2.29. a örgü periyoduna sahip sonsuza giden bir boyutlu bir atom zinciri

Şimdi kendimizi fiziksel anlam barındıran $|\psi(x)|^2$ 'nin yerine koyduğumuzu ve bu zincirdeki 4 numaralı atomda durduğumuzu ve etrafımıza baktığımızı düşünelim. Sonrasında a örgü periyodu kadar ilerleyip 5 numaralı atomda durduğumuzu ve yine etrafımıza baktığımızı düşünelim. 4 numaralı atomdayken etrafımıza bakışımız ile 5 numaralı atomdayken etrafımıza bakışımız arasında herhangi bir farklılık hissedemeyiz, çünkü içinde bulunduğumuz tüm uzay yapısı sonsuza giden özdeş atomlar zincirinden oluşmaktadır. Yani $|\psi(x)|^2 = |\psi(x + a)|^2$ 'dir ve bu bizim fiziksel olarak nerede olduğumuza dair bir fikrimizin olmayışını anlatır. Fakat sonuç olarak dalga fonksiyonunun kendisi olan $\psi(x)$, x 'e bağlıdır ve 4 numaralı atomdayken başka 5 numaralı atomdayken ise başka birşeydir. $\psi(x)$ komplekstir ama kompleks oluşu yine de onun "bir şey" olduğu gerçeğini değiştirmez. Matematiksel olarak tekrarlamak gerekirse $|\psi(x)|^2 = |\psi(x + a)|^2$ olsa da $\psi(x + a) = C\psi(x)$ şeklindedir. Şekil 2.29'da sonsuza gitmek ile asıl anlatılmak istenen zincirin başı/sonu olmayışdır. Bunun daha gerçekçi bir ifadesi Şekil 2.30'de görüldüğü gibi başı/sonu olmayan dairesel bir zincir yapısıdır.



Şekil 2.30. a örgü periyoduna sahip dairesel atom zinciri

Elbette ki sadece $N = 6$ ile örneklendirilen böylesi bir dairesel zincir için durum gerçekte atom sayısı N 'in çok çok daha büyük olduğu gerçeğinden ibarettir. N çok çok büyük olduğu için de çok çok büyük olarak düşünülmesi gereken dairesel zincirin bir cephesi neredeyse bir "çizgi" olarak düşünülebilir. Şekil 2.29 'da yapılan analogi buna dayanmaktadır.

Şimdi Şekil 2.30'deki $N = 6$ atomluk başı/sonu olmayan dairesel zincir şablonunu kullanarak PWE metodu için oldukça önemli olan Bloch teoremini anlayabiliriz.

Bloch Teoremi

Bloch teoremi sonsuz periyotlu bir ortamdaki $\psi(x)$ öz-fonksiyonunun, a örgü periyoduna sahip bir $u(x)$ periyodik fonksiyonu ile e^{ikx} şeklindeki bir düzlem dalga formunun çarpımından oluşan bir ifadeyle temsil edilebileceğini söyler. Teoremin matematiksel formu eşitlik (2.39)'deki gibidir:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= u(x)e^{ikx} \\ u(x) &= u(x + a)\end{aligned}\tag{2.39}$$

$\psi(x + a) = C\psi(x)$ gerekliliğini ve Şekil 2.30'deki $N = 6$ atomluk başı/sonu olmayan

dairesel zincir şablonunu kullanarak her bir atom üzerindeki dalga fonksiyonu eşitlik (2.40)'deki gibi olacaktır:

$$\begin{aligned}
 \psi_1(x) &= \psi(x) \\
 \psi_2(x) &= \psi(x + a) = C\psi(x) \\
 \psi_3(x) &= \psi(x + 2a) = C^2\psi(x) \\
 \psi_4(x) &= \psi(x + 3a) = C^3\psi(x) \\
 \psi_5(x) &= \psi(x + 4a) = C^4\psi(x) \\
 \psi_6(x) &= \psi(x + 5a) = C^5\psi(x)
 \end{aligned} \tag{2.40}$$

ψ_6 'dan bir kez daha ilerlediğimizi düşünürsek $\psi(x + 6a) = C^6\psi(x)$ olacaktır. Şekil 2.30'e baktığımızda ψ_6 'dan bir kez daha ilerleyişin bizi yine $\psi_1(x) = \psi(x)$ 'e götüreceğini görürüz. Böylece $\psi(x + 6a) = C^6\psi(x) = \psi(x)$ olması gerektiği anlaşılır. Bu durum N atomluk bir zincir için en genel hali ile düşünüldüğünde $C^N\psi(x) = \psi(x)$ olacaktır. Bu eşitliğin sağlanması sadece ve sadece $C^N = 1$ oluşuyla gerçekleşir. $C^N = 1$ eşitliğini sağlayabilecek C ifadesi ise matematiksel olarak sadece eşitlik (2.41)'deki ifadeyle sağlanabilir:

$$C = e^{i2\pi \frac{q}{N}} \tag{2.41}$$

Burada $q = 0, 1, 2, 3, \dots, N$ şeklindedir. Buna göre $\psi(x + a) = C\psi(x) = e^{i2\pi \frac{q}{N}}\psi(x)$ olur. Şimdi bilmediğimiz $\psi(x)$ fonksiyonu için $\psi(x) = e^{ikx}$ şeklinde bir düzlem dalga formu önerelim ve $k = \frac{2\pi q}{Na}$ olduğunu söyleyelim. Bu durumda eşitlik (2.41)'a göre $C = e^{ika}$ olacaktır. Bu matematiksel formlar eşitlik (2.40)'daki tüm eşitlikleri sağlayabilmektedir. Tüm bunlara göre eşitlik (2.42) söz konusu olacaktır:

$$\psi(x + a) = C\psi(x) = e^{ika}e^{ikx} = e^{ika}\psi(x) \tag{2.42}$$

Diğer yandan eşitlik (2.39) ile verilen Bloch teoremine göre

$$\psi(x + a) = u(x + a)e^{ik(x+a)} \tag{2.43}$$

olacaktır. Eğer Bloch teoremi doğru ise eşitlik (2.42) ve eşitlik (2.43) birbirine eşit olmalıdır.

$$\begin{aligned}\psi(x+a) &= u(x+a)e^{ik(x+a)} = \underbrace{u(x+a)}_{=u(x)} e^{ikx} e^{ika} \\ &= \underbrace{u(x)}_{=\psi(x)} e^{ikx} e^{ika} = e^{ika} \psi(x)\end{aligned}$$

şeklinde teorem doğrulanmış olur.

2.4.4. Bir boyutlu fotonik kristallerin bant diyagramı hesaplamaları

Az sonra bir boyutlu bir PhC bant yapısı için bir örnek çözülecektir. Fakat öncesinde Fourier açılımına dair bazı temel bilgiler vermek faydalı olacaktır.

Fourier Açılımına Dair Bazı Temel Bilgiler

Herhangi T periyotlu bir $f(x)$ fonksiyonunun kompleks formdaki Fourier açılımı eşitlik (2.44)'deki gibi verilir:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} C_n e^{in\omega_0 x} \quad (2.44)$$

Burada C_n , n -inci Fourier katsayısı iken $\omega_0 = \frac{2\pi}{T}$ ise temel harmoniğin açısal frekansıdır. C_n Fourier katsayıları ise eşitlik (2.45) ile hesaplanır.

$$C_n = \frac{1}{T} \int_0^T f(x) e^{-in\omega_0 x} dx \quad (2.45)$$

$n = 0$ değeri için C_0 katsayısı hesaplanırken $1/0$ problemi ile karşılaşılacaktır. Tüm katsayılar içinde C_0 katsayısı özel bir yer teşkil eder ve bir periyot içinde $f(x)$ fonksiyonunun ortalama değerini ifade eder. Böylelikle C_0 katsayısı eşitlik (2.46) ile

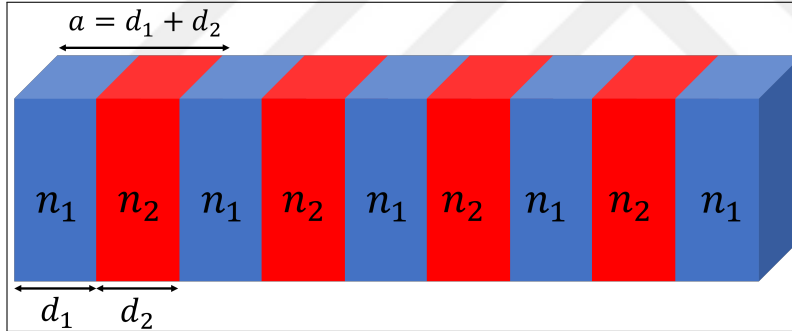
hesaplanır.

$$C_0 = \frac{1}{T} \int_0^T f(x) dx \quad (2.46)$$

C_0 ayrımının da yapılması ile (2.44) eşitliğinin eşitlik (2.47)'daki gibi yazılması daha uygun olacaktır.

$$f(x) = C_0 + \sum_{\substack{n=-\infty \\ n \neq 0}}^{\infty} C_n e^{in\omega_0 x} \quad (2.47)$$

Şekil 2.31'de bir boyutlu periyodik bir dielektrik yapı görülmektedir. Yapı n_1 ve n_2 kırılma indislerine sahip d_1 ve d_2 kalınlıklı iki dielektrik bloğun periyodik olarak birleştirilmesi ile oluşturulmuştur. a ile gösterilen uzunluğa **PhC örgü periyodu** denir ve yapıdaki dielektrikliğin kendisini tekrar ettiği aralığı anlatır.



Şekil 2.31. n_1 ve n_2 kırılma indislerine sahip d_1 ve d_2 kalınlıklı iki dielektrik bloğun periyodik olarak birleştirilmesi ile oluşturul a örgü periyoduna sahip bir boyutlu PhC örneği

Eşitlik (2.31) ile verilen manyetik alan için Helmholtz, yani öz-değer denkleminin bir boyutlu formu eşitlik (2.48)'daki gibidir:

$$\hat{\Theta}H(x) = \lambda H(x) \quad (2.48)$$

Burada $\hat{\Theta}$ öz-değer denkleminin operatörünü, $H(x)$ öz fonksiyonları ve λ ise denklemin

öz-değerlerini temsil etmektedir. $\hat{\Theta}$ operatörü ve λ öz-değeri eşitlik (2.49)'daki gibidir.

$$\begin{aligned}\hat{\Theta} &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\varepsilon(x)} \frac{\partial}{\partial x} \right] \\ \lambda &= \frac{\omega^2}{c_0^2}\end{aligned}\quad (2.49)$$

Bloch teoremine göre $H(x) = h(x)e^{ikx}$ olacaktır ve teoremden belirtildiği gibi burada $h(x) = h(x + a)$, şeklinde PhC örgü periyoduna (a) sahip periyodik bir fonksiyondur. $\vec{k} \cdot \vec{a} = 2\pi N$ eşitliğini sağlayabilecek olan $\vec{k}$ dalga vektörlerine **ters örgü vektörü** denir ve genellikle $\vec{G}$ ile temsil edilir. Bir boyut için $x + a$ şeklindeki periyodiklik k uzayında, yani ters örgü uzayında $k + G$ ile devam eder. Ters örgü uzayında çalışıldığı için öz-değer denklemindeki tüm fonksiyonların Fourier açılımları yapılmalıdır. Buna göre eşitlik (2.48)'daki $H(x)$ öz-fonksiyonları ve $\frac{1}{\varepsilon(x)}$ fonksiyonu için Fourier açılımları eşitlik (2.50)'deki gibi olur.

$$\begin{aligned}H(x) &= \sum_G h(G)e^{i(k+G)x} \rightarrow \text{sağ taraf için} \\ H(x) &= \sum_{G'} h(G')e^{i(k+G')x} \rightarrow \text{sol taraf için} \\ \frac{1}{\varepsilon(x)} &= \sum_{G''} \chi(G'')e^{i(G'')x}\end{aligned}\quad (2.50)$$

Burada $h(G)$, $h(G')$ ve $\chi(G'')$ Fourier katsayılarıdır. Bu Fourier açılımları eşitlik (2.48)'daki öz-değer denkleminde türevlerin uygun kullanımıyla eşitlik (2.51) elde edilir.

$$\sum_{G''} \sum_{G'} h(G')\chi(G'')(k + G')(k + G' + G'')e^{i(k+G'+G'')x} = \sum_G \frac{\omega^2}{c_0^2} h(G)e^{i(k+G)x} \quad (2.51)$$

Eşitlik (2.51)'e bakıldığında karşılıklı eksponansiyel terimlerin eşit olması gerekliliği nedeniyle $G' + G'' = G$ olduğu anlaşılır ve böylece (2.51) eşitliği eşitlik (2.52) eşitliğine evrilir.

$$\sum_G \sum_{G'} h(G')\chi(G - G')(k + G')(k + G)e^{i(k+G)x} = \sum_G \frac{\omega^2}{c_0^2} h(G)e^{i(k+G)x} \quad (2.52)$$

Son eşitlikte G üzerinden toplamalar eşit olacağı için (2.53) eşitliği ile verilen ters örgü

uzayındaki öz-değer denklemi elde edilmiş olur.

$$\sum_{G'} \chi_{G-G'}(k+G')(k+G)h_{G'} = \frac{\omega^2}{c_0^2} h_G \quad (2.53)$$

Buna göre $\hat{\Theta}$ operatörünün matris formu eşitlik (2.54) ve bu matrisin $\hat{\Theta}_{G-G'}$ elemanları eşitlik (2.55)'deki gibi olur:

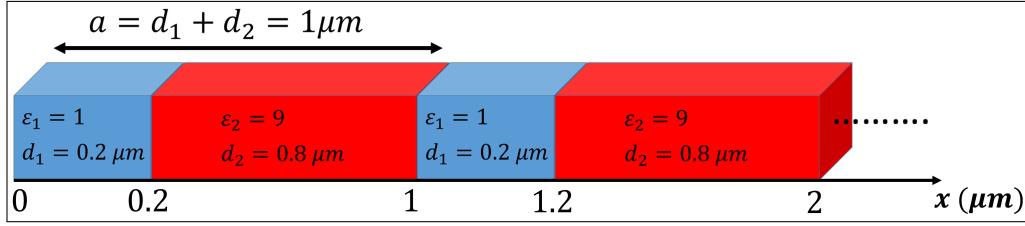
$$\hat{\Theta} = \begin{bmatrix} \hat{\Theta}_{G_1 G'_1} & \hat{\Theta}_{G_2 G'_1} & \cdots & \hat{\Theta}_{G_N G'_1} \\ \hat{\Theta}_{G_1 G'_2} & \hat{\Theta}_{G_2 G'_2} & \cdots & \hat{\Theta}_{G_N G'_2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \hat{\Theta}_{G_1 G'_N} & \hat{\Theta}_{G_2 G'_N} & \cdots & \hat{\Theta}_{G_N G'_N} \end{bmatrix} \quad (2.54)$$

$$\hat{\Theta}_{G-G'} = \chi_{G-G'}(k+G')(k+G) \quad (2.55)$$

Son olarak, elde edilen ω öz-değerleri, genellikle literatürde örgü periyodu a ile ilişkilendirilerek $\omega_r = \omega \frac{a}{2\pi c_0}$ şeklinde hesaplanan "**indirgenmiş öz-değerler**" şeklinde verilir. Bu çalışma boyunca verilen tüm örneklerde $c_0 = 1$ alınarak, öz-değerler bu şekilde indirgenmiş öz-değerler olarak ifade edilecektir.

Bir Boyutlu Phc Bant Yapısı için Örnek

Burada bir boyutlu bir PhC bant yapısı bir örnek üzerinden elde edilecektir. Şekil 2.32 bant yapısı hesaplanacak olan bir boyutlu yapıyı göstermektedir. Yapı $\varepsilon_1 = 1$ dielektrik sabitli $d_1 = 0.2\mu m$ kalınlıklı hava katmanları arasındaki $\varepsilon_2 = 9$ dielektrik sabitli $d_2 = 0.8\mu m$ kalınlıklı dielektrik materyalden oluşmaktadır. Böylelikle PhC örgü periyodu $a = d_1 + d_2 = 1\mu m$ 'dir.



Şekil 2.32. Bant yapısı hesaplanacak olan $\varepsilon_1 = 1$ dielektrik sabitli $d_1 = 0.2\mu m$ kalınlıklı hava katmanları arasındaki $\varepsilon_2 = 9$ dielektrik sabitli $d_2 = 0.8\mu m$ kalınlıklı dielektrik materyalden oluşan $a = 1\mu m$ birim hücre boyutuna sahip PhC örneği

Bu örnek için bir periyot içindeki dielektrik fonksiyon eşitlik (2.56)'deki gibidir.

$$\varepsilon(x) = \begin{cases} \varepsilon_1, & 0 < x < d_1 \\ \varepsilon_2, & d_1 < x < a \end{cases} \quad (2.56)$$

Eşitlik (2.47)'ya göre dielektrik fonksiyonun Fourier açılımı eşitlik (2.57)'deki gibi olur.

$$\varepsilon(x) = C_0 + \sum_{\substack{j=-\infty \\ j \neq 0}}^{\infty} C_j e^{ij\omega_0 x} \quad (2.57)$$

Burada $\omega_0 = \frac{2\pi}{a}$ temel harmoniğin açısal frekansıdır ve $\varepsilon(x)$ fonksiyonunun bir periyot, yani $[0, a]$ içindeki ortalama değeri olan C_0 , eşitlik (2.46) ve eşitlik (2.56)'a göre eşitlik (2.58)'deki gibi olur.

$$C_0 = \frac{1}{a} \int_0^a \varepsilon(x) dx = \frac{1}{a} \left(\int_0^{d_1} \varepsilon_1 dx + \int_{d_1}^a \varepsilon_2 dx \right) = \frac{1}{a} (\varepsilon_1 d_1 + \varepsilon_2 d_2) \quad (2.58)$$

Eşitlik (2.45)'ye göre diğer C_j katsayıları ise eşitlik (2.59) ile hesaplanır.

$$C_j = \frac{1}{a} \int_0^a \varepsilon(x) e^{-ij\omega_0 x} dx = \frac{1}{a} \left(\int_0^{d_1} \varepsilon_1 e^{-ij\omega_0 x} dx + \int_{d_1}^a \varepsilon_2 e^{-ij\omega_0 x} dx \right) \quad (2.59)$$

$$\frac{i}{a j \omega_0} \left[\varepsilon_1 \left(e^{-ij\omega_0 d_1} - 1 \right) + \varepsilon_2 \left(e^{-ij\omega_0 a} - e^{-ij\omega_0 d_1} \right) \right]$$

Şekil 2.33'de bu örnekteki dielektrik fonksiyonun Fourier açılımının elde edilebilmesi için yazılan "MATHEMATİCA" kod yapısı verilmiştir. Bu kod yapısındaki "FuncFourierEps[G]" fonksiyonunun argümanı olan G için örneğin 5 değeri verilerek çalıştırılırsa 11, 50 değeri verilerek çalıştırılırsa 101 ve 500 değeri verilerek çalıştırılırsa 1001 tane düzlem dalga kullanılarak dielektrik fonksiyon için Fourier açılımı yapılmış olur. Şekil 2.34'nin (a), (b), (c) ve (d) kısımlarında sırasıyla yapı boyunca dielektrik fonksiyonunun tam hali ve sonrasında 11, 101 ve 1001 tane düzlem dalga kullanımıyla yapılan Fourier açılımları görülmektedir. Görüleceği üzere Fourier açılımında kullanılan düzlem dalga sayısı arttıkça doğruluk da giderek artmaktadır.

```

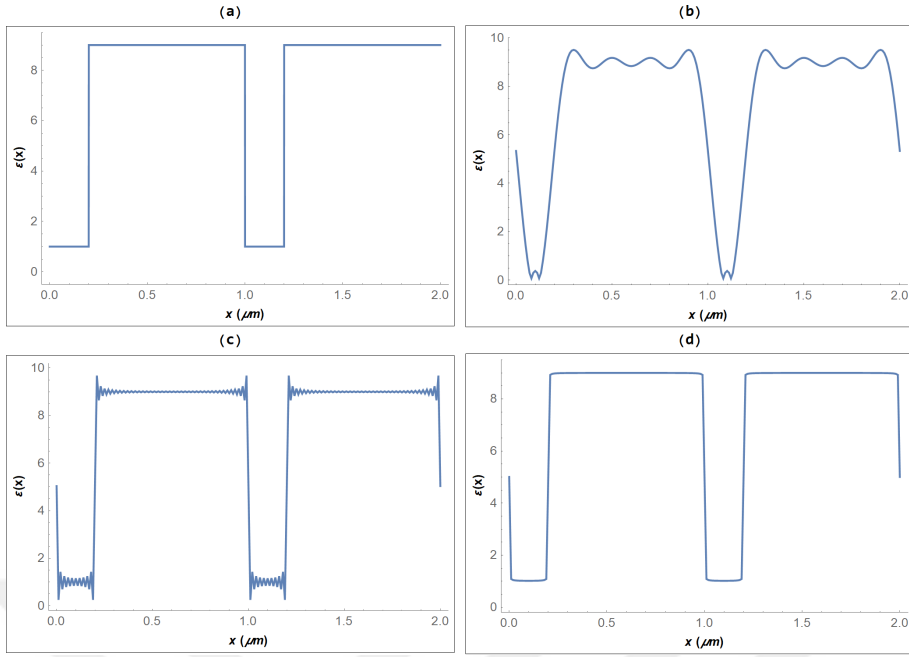
d1 = 0.2; d2 = 0.8; a = d1 + d2;
eps1 = 1; eps2 = 9;
FuncEps0[x_] = If[0 ≤ x < d1 || a ≤ x < a + d1 || 2 * a ≤ x < 2 * a + d1 || 3 * a ≤ x < 3 * a + d1, eps1, eps2];
w0 = 2 * Pi / a;
xRange = N[Subdivide[0, 2, 200]];
FuncFourierEps[G_] :=
(
  FourierEps = 0;
  For[i = -G, i ≤ G, i++,
    If[i ≠ 0,
      Cn =  $\frac{I}{a * i * w0} * (eps1 * (e^{-I * i * w0 * d1} - 1) + eps2 * (e^{-I * i * w0 * a} - e^{-I * i * w0 * d1}))$ ;
      Cn =  $\frac{1}{a} * Integrate[FuncEps0[x], \{x, 0, a\}]$ ;
    ];
    FourierEps = FourierEps + Cn * e^{I * i * w0 * xRange};
  ];
  FourierEps = Abs[FourierEps];
  Return[FourierEps];
);

```

Şekil 2.33. Şekil 2.32'deki örnek yapının bir boyuttaki dielektrik fonksiyonu Fourier açılımı için yazılan "MATHEMATİCA" kod yapısı

Şekil 2.33 ile verilen "MATHEMATICA" kod yapısına dair parametreler ve tanımları:

d1	→	hava katmanı kalınlığı
d2	→	dielektrik materyal katmanı kalınlığı
a	→	birim hücre uzunluğu
eps1	→	hava katmanı dielektrik sabiti
eps2	→	dielektrik materyal katmanı dielektrik sabiti
FuncEps0	→	uzay boyunca dielektrik sabiti fonksiyonu
w0	→	temel harmoni için açısal frekan
xRange	→	$[0, 2]\mu m$ aralığında 201 noktaya bölünmüş x uzayı
FuncFourierEps	→	dielektrik fonksiyonun Fourier açılımını verecek olan fonksiyon
FourierEps	→	"FuncFourierEps" fonksiyonunun döndüreceği sonuç
Cn	→	Fourier açılımı için Fourier katsayısı



Şekil 2.34. Şekil 2.32'deki örnek yapının bir boyuttaki dielektrik fonksiyonu **a)** fonksiyonun kendisi; **b)** 11 adet düzlem dalga kullanımıyla yapılan Fourier açılımı; **c)** 101 adet düzlem dalga kullanımıyla yapılan Fourier açılımı; **d)** 1001 adet düzlem dalga kullanımıyla yapılan Fourier açılımı

Bir boyutta verilen bu örnek yapının bant yapısı $k \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ aralığında $\frac{\pi}{5a}$ aralıklarla 11 adet k dalga vektörü için hesaplanacaktır. Her bir k değeri için $G' \in [-\frac{100\pi}{a}, \frac{100\pi}{a}]$ aralığında $\frac{2\pi}{a}$ aralıklarla 101 adet ve G' ve yine aynı şekilde 101 adet G ters örgü vektörü kullanılacaktır. Hesap aşamaları kabaca şöyle olmalıdır;

- Her bir G' değerlerinin altında tüm G değerleri $\{\{G_1G'_1, G_2G'_1, \dots, G_{101}G'_1\}, \{G_1G'_2, G_2G'_2, \dots, G_{101}G'_2\}, \dots, \{G_1G'_{101}, G_2G'_{101}, \dots, G_{101}G'_{101}\}\}$ şeklinde ayrı ayrı hesaba katılır.
- Listedeki her bir değer için $G'' = G - G'$ değeri hesaplanır. Bu değer $\frac{1}{\varepsilon(x)}$ fonksiyonunun Fourier açılımı katsayısı olan $\chi_{G-G'}$ için kullanılacaktır.
- Böylece $\chi_{G-G'}(k + G)(k + G')$ matris elemanları ile θ matrisi oluşturulur ve bu matrisin öz değerleri hesaplanır.
- Öz-değer denkleminin sağ tarafı $\frac{\omega^2}{c_0^2}$ olduğu için ve biz ω değerlerini istediğimiz için elde edilen öz-değerlerin karekökü alınır.

- Elde edilen öz-değerler bir k değeri için elde edilmiştir ve tüm hesap tüm k değerleri için tekrarlanır.
- Örneğin herhangi bir k değeri için elde edilen öz-değerler küçükten büyüğe sıralandığında en küçük olanı söz konusu bu k değeri için 1. bant değerini, bir sonraki öz-değer bu k değeri için 2. bant değerini,...vb. anlatır. Yani elde edilen öz-değer listelerinin ilk elemanları 1. bandı, ikinci elemanlar 2. bandı,...vb. oluşturur.

Örnek için "MATHEMATICA" kod yapısı Şekil 2.35 ve elde edilen bant yapısı ise Şekil 2.36'daki gibidir. Kod ilk iki bant için sonuçları vermektedir, diğer bantlar da benzer şekilde elde edilebilir. Hesaplamalarda ışık hızı için $c_0 = 1$ değeri kullanılmıştır. Kod yapısında değişkenlerin temsil ettiği parametreler aşağıdaki gibi (değişken $\rightarrow$ parametre) şeklinde gösterilmektedir.

```

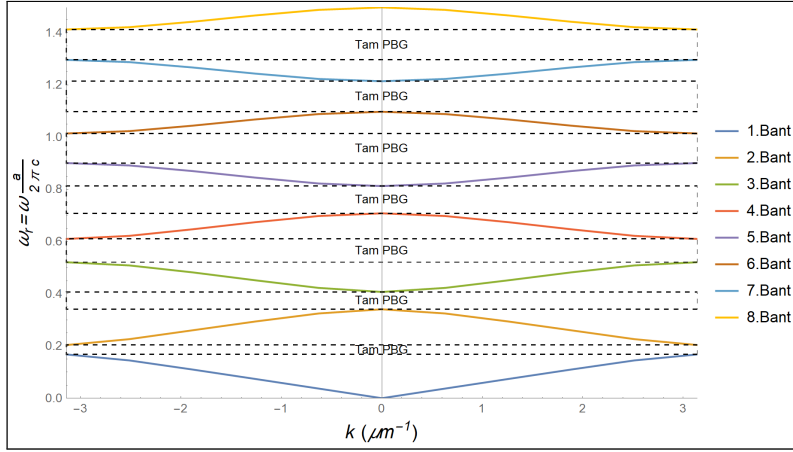
d1 = 0.2; d2 = 0.8; eps1 = 1; eps2 = 9; a = d1 + d2;
kList = Table[i *  $\frac{\pi}{5 * a}$ , {i, -5, 5}];
ListGus = Table[i *  $\frac{2 * \pi}{a}$ , {i, -50, 50}];
ListG = Table[i *  $\frac{2 * \pi}{a}$ , {i, -50, 50}];
OmegaList = List[];
For[i = 1, i ≤ Length[kList], i++,
  k = kList[[i]];
  Teta = List[];
  Append[OmegaList, List[]];
  For[n = 1, n ≤ Length[ListGus], n++,
    AppendTo[Teta, List[]];
    Gus = ListGus[[n]];
    For[m = 1, m ≤ Length[ListG], m++,
      G = ListGus[[m]];
      G2us = G - Gus;
      If[G2us == 0,
        Chi =  $\frac{1}{a} * \left( \frac{1}{\text{eps1}} * d1 + \frac{1}{\text{eps2}} * d2 \right)$ ,
        Chi =  $\frac{I}{a * G2us} * \left( \left( \frac{1}{\text{eps1}} * e^{-I * G2us * d1} - 1 \right) + \left( \frac{1}{\text{eps2}} * (e^{-I * G2us * a} - e^{-I * G2us * d1}) \right) \right)$ 
      ];
      TetaElement = Chi * (k + G) * (k + Gus);
      AppendTo[Teta[[n]], TetaElement];
    ];
  ];
  Omega =  $\sqrt{\text{Abs}[\text{Eigenvalues}[Teta]]}$ ;
  Omegar =  $\sqrt{\text{Abs}[\text{Eigenvalues}[Teta]]} * \frac{a}{2 * \pi}$ ;
  AppendTo[OmegaList, Sort[Omegar]];
];
Bant1Deger = Table[OmegaList[[i, 1]], {i, 1, Length[OmegaList]};
Bant1 = Transpose[{kList, Bant1Deger}];
Bant2Deger = Table[OmegaList[[i, 2]], {i, 1, Length[OmegaList]};
Bant2 = Transpose[{kList, Bant1Deger}];

```

Şekil 2.35. Şekil 2.32'deki örnek yapının bant yapısı için yazılan "MATHEMATİCA" kod yapısı

Şekil 2.35 ile verilen "MATHEMATICA" kod yapısına dair parametreler ve tanımları:

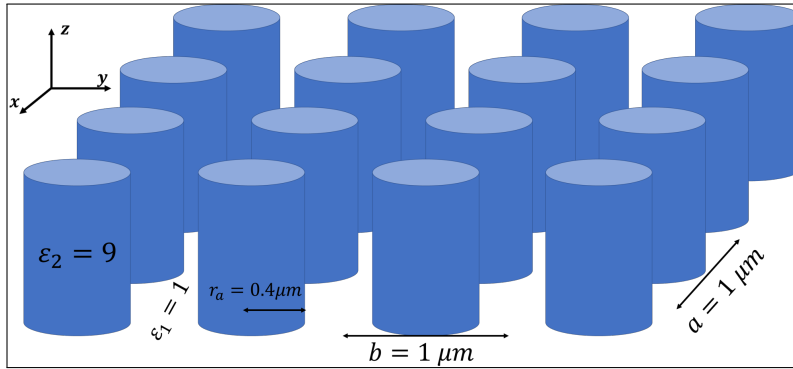
d1	→	hava katmanı kalınlığı
d2	→	dielektrik materyal katmanı kalınlığı
a	→	birim hücre uzunluğu
eps1	→	hava katmanı dielektrik sabiti
eps2	→	dielektrik materyal katmanı dielektrik sabiti
kList	→	kullanılan dalga vektörleri listesi
teta	→	öz-değer denklemi operatörü
ListGus	→	kullanılan G' ters örgü vektörleri listesi
ListG	→	kullanılan G ters örgü vektörleri listesi
OmegaList	→	öz-değerlerin kaydedileceği liste
Teta	→	öz-değer denklemi operatör matrisi
G	→	hesaplama sırasında gelen G ters örgü vektörü
Gus	→	hesaplama sırasında gelen G' ters örgü vektörü
G2us	→	hesaplama sırasında gelen G'' ters örgü vektörü
Chi	→	$\frac{1}{\epsilon}$ için Fourier katsayısı
TetaElement	→	operatör matrisi elemanları
Omega	→	hesaplanan öz-değerler
Omegar	→	indirgenmiş öz-değerler
OmegaList	→	indirgenmiş öz-değerler listesi
Bant1Deger	→	1. Bant değerleri
Bant1	→	(k, ω) şeklindeki 1. Bant noktaları
Bant2Deger	→	2. Bant değerleri
Bant2	→	(k, ω) şeklindeki 2. Bant noktaları



Şekil 2.36. Şekil 2.32’deki örnek yapının bant yapısı

2.4.5. İki boyutlu fotonik kristallerin bant diyagramı hesaplamaları

İki ve üç boyutta gelen radyasyona göre radyasyon modu ayrımı söz konusu olur. Bu iki mod **TE (H polarize)** ve **TM (E polarize)** mod olarak adlandırılır ve PhC düzlemine dik olan alan bileşenlerine bağlıdır. Böylece TE modda radyasyon sıfırdan farklı H_z , E_x ve E_y bileşenleri söz konusu iken TM modda sıfırdan farklı E_z , H_x ve H_y bileşenleri söz konusudur. Şekil 2.37’de z eksenine boyunca uzanan dielektrik çubukların xy düzleminde hava ortamı içinde periyodik yerleşimiyle oluşturulmuş iki boyutlu bir PhC yapısı görülmektedir.



Şekil 2.37. z eksenine boyunca uzanan dielektrik çubukların xy düzleminde hava ortamı içinde periyodik yerleşimiyle oluşturulmuş iki boyutlu bir PhC yapısı

Buna göre z eksenine boyunca uzanan dielektrik çubukların xy düzleminde hava ortamı içinde periyodik yerleşimiyle oluşturulmuş iki boyutlu bu sistem için Kartezyen

koordinatlarda nabla operatörü, $\vec{E}$ ve $\vec{H}$ alanları eşitlik (2.60)'deki gibi olur.

$$\begin{aligned}
 \vec{\nabla} &= \frac{\partial}{\partial x}\hat{x} + \frac{\partial}{\partial y}\hat{y} \rightarrow xy \text{ düzleminde nabla operatörü} \\
 \vec{E} &= E_x(x, y)\hat{x} + E_y(x, y)\hat{y} \rightarrow TE \text{ mod için elektrik alan} \\
 \vec{H} &= H_z(x, y)\hat{z} \rightarrow TE \text{ mod için manyetik alan} \\
 \vec{E} &= E_z(x, y)\hat{z} \rightarrow TM \text{ mod için elektrik alan} \\
 \vec{H} &= H_x(x, y)\hat{x} + H_y(x, y)\hat{y} \rightarrow TM \text{ mod için manyetik alan}
 \end{aligned} \tag{2.60}$$

Böylece eşitlik (2.31)'deki Helmholtz denklemleri ile elde edilen öz-değer denklemleri, TM mod için elektrik alan ve TE mod için manyetik alan kullanımıyla iki boyutta eşitlik (2.61)'daki gibi olur.

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\partial}{\partial r} E_z(\vec{r}) \right) \right] &= \frac{\omega^2}{c_0^2} E_z(\vec{r}) \rightarrow TM \text{ mod} \\
 \frac{\partial}{\partial r} \left[\left(\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} \right) \left(\frac{\partial}{\partial r} H_z(\vec{r}) \right) \right] &= \frac{\omega^2}{c_0^2} H_z(\vec{r}) \rightarrow TE \text{ mod}
 \end{aligned} \tag{2.61}$$

Eşitlik (2.50)'dekine benzer şekilde sırasıyla TM mod için öz-değer denkleminde kullanılmak üzere elektrik alan ve TE mod için öz-değer denkleminde kullanılmak üzere manyetik alan öz-fonksiyonları ve dielektrik fonksiyonun Fourier açılımları eşitlik (2.62) ve eşitlik (2.63)'teki gibidir.

$$\begin{aligned}
 E_z(\vec{r}) &= \sum_{\vec{G}} e_z(\vec{G}) e^{i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} \rightarrow \text{sağ taraf için} \\
 E_z(\vec{r}) &= \sum_{\vec{G}'} e_z(\vec{G}') e^{i(\vec{k} + \vec{G}') \cdot \vec{r}} \rightarrow \text{sol taraf için} \\
 \frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} &= \sum_{\vec{G}''} \chi(\vec{G}'') e^{i\vec{G}'' \cdot \vec{r}}
 \end{aligned} \tag{2.62}$$

$$\begin{aligned}
H_z(\vec{r}) &= \sum_{\vec{G}} h_z(\vec{G}) e^{i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}} \rightarrow \text{sağ taraf için} \\
H_z(\vec{r}) &= \sum_{\vec{G}'} h_z(\vec{G}') e^{i(\vec{k} + \vec{G}') \cdot \vec{r}} \rightarrow \text{sol taraf için} \\
\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})} &= \sum_{\vec{G}''} \chi(\vec{G}'') e^{i\vec{G}'' \cdot \vec{r}}
\end{aligned} \tag{2.63}$$

Burada e_z , h_z ve χ sırasıyla elektrik alan, manyetik alan ve $\frac{1}{\varepsilon(\vec{r})}$ için Fourier açılımı katsayılarıdır. Bu eşitliklerin eşitlik (2.61)'de kullanılmasıyla k uzayındaki öz-değer denklemleri eşitlik (2.64)'daki gibi olur.

$$\begin{aligned}
\sum_{\vec{G}'} \chi(\vec{G} - \vec{G}') \left| \vec{k} + \vec{G}' \right|^2 e_z(\vec{G}') &= \frac{\omega_E^2}{c_0^2} e_z(\vec{G}) \rightarrow TM \text{ mod} \\
\sum_{\vec{G}'} \chi(\vec{G} - \vec{G}') \left(\vec{k} + \vec{G}' \right) \left(\vec{k} + \vec{G}' \right) h_z(\vec{G}') &= \frac{\omega_H^2}{c_0^2} h_z(\vec{G}) \rightarrow TE \text{ mod}
\end{aligned} \tag{2.64}$$

xy düzleminde düzlem dalga vektörü $\vec{k} = \vec{k}_x + \vec{k}_y$, düzlem ters örgü vektörleri $\vec{G} = \vec{G}_x + \vec{G}_y$ ve $\vec{G}' = \vec{G}'_x + \vec{G}'_y$ olur. ω_E ve ω_H ise sırasıyla TM ve TE mod için öz-frekanslardır.

Bu çalışma boyunca iki boyutlu PhC bant diyagramları TE mod için hesaplanacaktır.

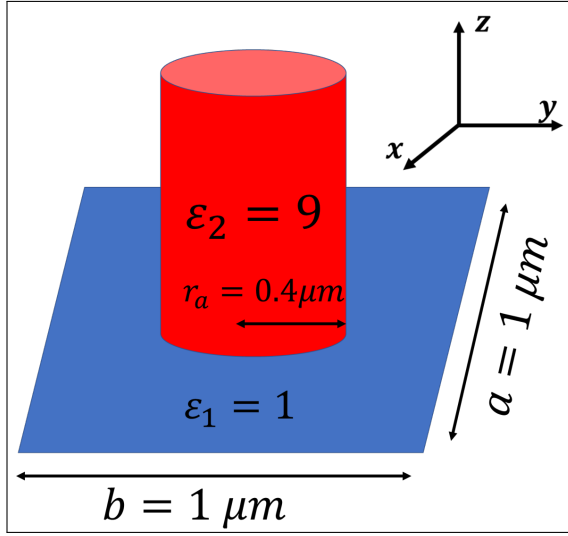
İki boyutlu PhC bant yapıları hesaplamaları öncesinde dielektrik fonksiyonun Fourier açılımları incelenecektir

İki Boyutlu Bir Sistemde Dielektrik Fonksiyonun Fourier Açılımları

Eşitlik (2.65) iki ve üç boyutta bir PhC yapısı için dielektrik fonksiyonun Fourier açılımını göstermektedir:

$$\chi(\vec{G}) = \frac{1}{V} \int \varepsilon(\vec{r}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} d\vec{r} \tag{2.65}$$

Burada V , PhC birim hücresinin hacmidir. Birim hücre ile kastedilen tıpkı bir boyutta olduğu gibi dielektrikliğin kendisini periyodik olarak tekrar ettiği en küçük birim yapıdır ve örneğin Şekil 2.37'deki iki boyutlu yapı için Şekil 2.38'deki gibidir. Görüleceği gibi bu örnekteki birim hücre hacmi ab çarpımına eşittir.



Şekil 2.38. Şekil 2.37'deki iki boyutlu yapı için birim hücre

Basitçe dielektrik fonksiyon eşitlik (2.66)'deki gibi ifade edilebilir.

$$\varepsilon(\vec{r}) = \varepsilon_2 + (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)S(\vec{r}) \quad (2.66)$$

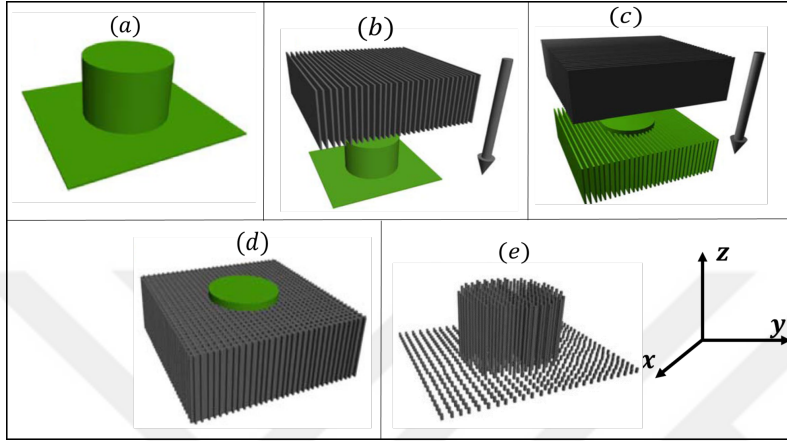
$S(\vec{r})$ ile verilen adım (step) fonksiyonudur ve eşitlik (2.67) ile ifade edilir.

$$S(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & |\vec{r}| < r_a \\ 0, & |\vec{r}| > r_a \end{cases} \quad (2.67)$$

Burada r_a , birim hücrede görülen, hava ortamı içindeki dielektrik çubuğun yarıçapıdır.

En basit PhC konfigürasyonları söz konusu olduğunda Fourier açılımı katsayılarının analitik açılımları mümkündür fakat yapı bir miktar düzensiz olduğunda bile analitik açılımlar imkansız hale gelir. Öyle ki basit konfigürasyonlarda bile analitik hesaplar oldukça karmaşık hale gelir. Bu durumda açılımlar için nümerik metotlar devreye girer. Burada da en genel açılım süreci olması bakımından bu nümerik açılımlardan bahsedilecektir. Bu açılımlar birim hücrenin kesiklileştirilmesi ile mümkün olur. En basit anlamda birim hücrenin kesiklileştirilmesi onu xy düzleminde üniform bir şekilde kafesli bir örgü ile bölmektir. Böylelikle bu kafesli örgünün nodları ortamın dielektrikliği

hakkında bilgi verecektir. Bu örgünün yoğunluğu, yani nod sayısı çok küçük olduğunda sonuçlar sağlıklı olmayacaktır. Yoğunluk çok fazla olduğunda ise hesaplamalar çok zaman alacaktır. Bu nedenle optimum bir yoğunluk elde etmek en sağlıklı süreç için temel motivasyon olmalıdır. Şekil 2.39 bu kesiklileştirme işleminin aşamalarını görsel olarak ifade etmektedir.



Şekil 2.39. İki boyutlu PhC birim hücresinin kesiklileştirilmesi **a)** Birim hücre; **b)** Birim hücrenin x boyutunun kesiklileştirilmesi; **c)** Birim hücrenin y boyutunun kesiklileştirilmesi; **d)** Birim hücrenin xy düzleminin birlikte kesiklileşmiş görünümü; **e)** Dielektrik materyalin çevre ortamından (burada hava) ayıklanmış ve kesiklileşmiş görünümü (Sukhoivanov ve Guryev 2009)

Elbette kesiklileştirme işleminde kullanılacak kafes örgünün nod sayısı, yani yoğunluğu kadar Fourier açılımı için kullanılan ters örgü uzayı düzlem dalga sayısı da önem arz edecektir. Şekil 2.40'de Şekil 2.37'deki örnek iki boyutlu PhC yapının birim hücresi için sabit nod sayısı ile farklı düzlem dalga sayıları kullanılarak yapılmış dielektrik fonksiyon Fourier açılımları için "MATHEMATICA" kod yapısı ve Şekil 2.41'de ise bu örnek için çıktılar görülmektedir. Hem x hem de y boyutunda 81 adet, yani toplamda $81 \times 81 = 6561$ nod sayısı kullanılmıştır. Bu kodda Fourier açılımı sonucunu verecek olan "FuncEpsFourier" fonksiyonunun argümanı olan NG değeri kullanılacak ters örgü düzlem sayısını belirler. Örneğin NG için 5 değeri verilirse x boyutunda $[-5,5]$ aralığında toplam 11 tane ve aynı şekilde y boyutunda $[-5,5]$ aralığında toplam 11 tane düzlem dalga, yani toplamda 121 tane düzlem dalga kullanımıyla açılım yapılır. Görüleceği gibi kullanılan ters örgü uzayı düzlem dalga sayısı arttıkça doğruluk

da giderek artmaktadır. Kod yapısındaki diğer değişkenlerin temsil ettiği parametreler aşağıdaki gibi (değişken $\rightarrow$ parametre) şeklinde gösterilmektedir.

```

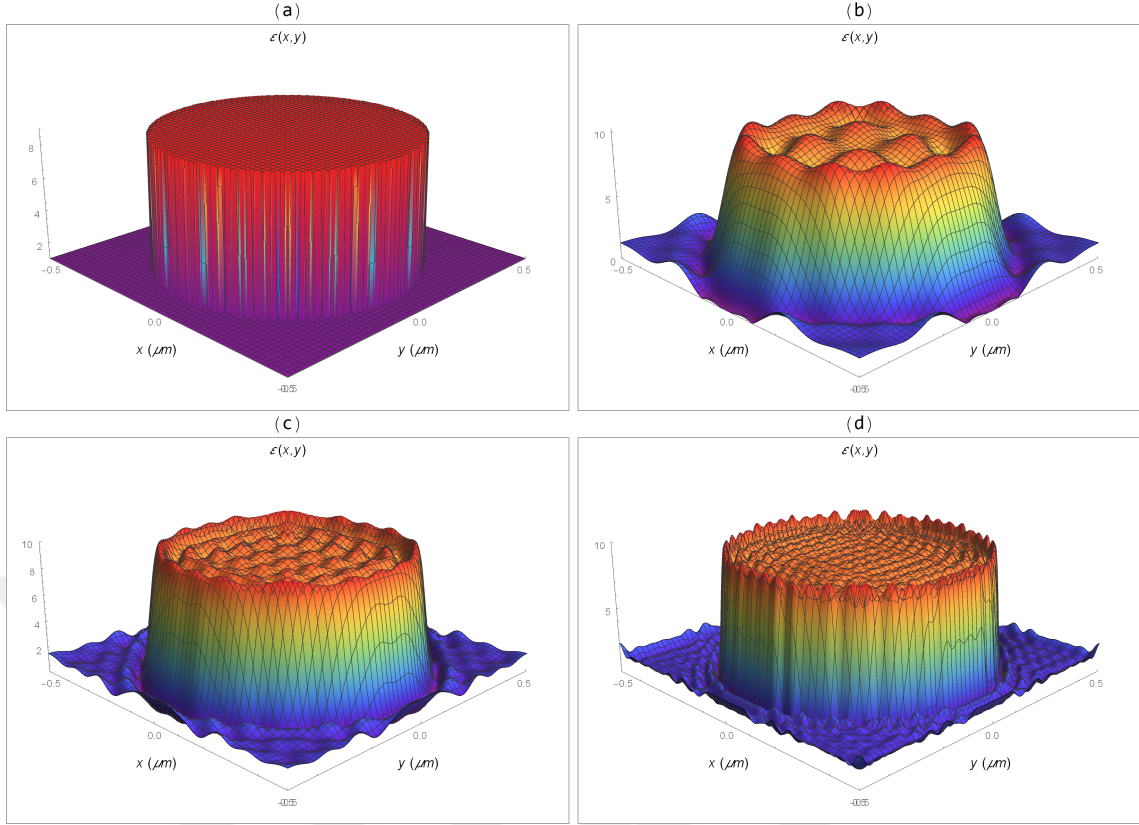
a = 1; b = 1; ra = 0.4; eps1 = 9; eps2 = 1;
Gx0 = N[2 * Pi / a]; Gy0 = N[2 * Pi / b];
Nod = 81;
MeshGrid[x_List, y_List] := {ConstantArray[x, Length[x]], Transpose@ConstantArray[y, Length[y]]}
xNod = Subdivide[- $\frac{a}{2}$ ,  $\frac{a}{2}$ , Nod - 1];
yNod = Subdivide[- $\frac{b}{2}$ ,  $\frac{b}{2}$ , Nod - 1];
{xNod, yNod} = MeshGrid[xNod, yNod];
delta = xNod[[1, 2]] - xNod[[1, 1]];
Eps0 = List[];
For[i = 1, i ≤ Length[xNod], i++,
  AppendTo[Eps0, List[]];
  For[j = 1, j ≤ Length[xNod[[i]]], j++,
    rKare = xNod[[i, j]]^2 + yNod[[i, j]]^2;
    If[rKare < (ra^2), AppendTo[Eps0[[i]], eps1], AppendTo[Eps0[[i]], eps2]];
  ];
];
Eps0List = Flatten[{xNod, yNod, Eps0}, {2, 3}];
FuncEpsFourier[NG_] :=
(
  FuncChi[Gx_, Gy_] :=
  (
    Chi = 0;
    For[m = 1, m ≤ Length[xNod], m++,
      For[n = 1, n ≤ Length[yNod[[m]]], n++,
        rKare = (xNod[[m, n]]^2 + (yNod[[m, n]]^2);
        If[rKare < (ra^2), eps = eps1; eps = eps2];
        Chi = Chi + eps * e-I * (Gx * xNod[[m, n]] + Gy * yNod[[m, n]]) * delta^2;
      ];
    ];
    Chi =  $\frac{1}{a * b}$  * Chi;
    Return[Chi];
  );
  FourierEps = 0;
  For[i = -NG, i ≤ NG, i++,
    gx = i * Gx0;
    For[j = -NG, j ≤ NG, j++,
      gy = j * Gy0;
      temp = FuncChi[gx, gy];
      FourierEps = FourierEps + temp * eI * (gx * xNod + gy * yNod);
    ];
  ];
  FourierEps = Abs[FourierEps];
  FourierEpsList = Flatten[{xNod, yNod, FourierEps}, {2, 3}];
  Return[FourierEpsList];
);

```

Şekil 2.40. Şekil 2.37'deki örnek iki boyutlu PhC yapının birim hücresi için dielektrik fonksiyonun Fourier açılımı için "MATHEMATICA" kod yapısı

Şekil 2.40 ile verilen "MATHEMATICA" kod yapısına dair parametreler ve tanımları:

a	→	birim hücre x boyutu
b	→	birim hücre y boyutu
ra	→	dielektrik çubuk yarıçapı
eps1	→	dielektrik çubuk dielektrik sabiti
eps2	→	çevre ortam (hava) dielektrik sabiti
Gx0	→	x boyutu için temel frekans
Gy0	→	y boyutu için temel frekans
Nod	→	birim hücrenin x ve y boyutlarının bölüneceği nod sayısı
xNod	→	birim hücrenin 0 simetrik x boyutu apsileri
yNod	→	birim hücrenin 0 simetrik y boyutu ordnatları
delta	→	hem x hem de y boyutu için iki nod arası mesafe
Eps0	→	birim hücre içinde orjinal dielektrik fonksiyonun değerleri(Karşılaştırma için)
Eps0List	→	birim hücre içinde orjinal dielektrik fonksiyonun $(x, y, \varepsilon(x, y))$ şeklindeki koordinatları (Karşılaştırma için)
FuncEpsFourier	→	dielektrik fonksiyonun Fourier açılımını verecek olan fonksiyon
FuncChi	→	dielektrik fonksiyonun Fourier açılımındaki Fourier katsayısını verecek olan fonksiyon
Chi	→	"FuncChi" fonksiyonunun döndüreceği Fourier katsayısı
Gx	→	hesaplama sırası gelen G_x ters örgü vektörü
Gy	→	hesaplama sırası gelen G_y ters örgü vektörü
FourierEps	→	birim hücre içinde "FuncEpsFourier" fonksiyonunun hesapladığı dielektrik fonksiyon Fourier açılımı değeri
FourierEpsList	→	birim hücre içinde "FuncEpsFourier" fonksiyonun döndürdüğü dielektrik fonksiyon Fourier açılımı için $(x, y, \varepsilon(x, y))$ şeklindeki koordinatları



Şekil 2.41. Şekil 2.37'deki örnek iki boyutlu PhC yapının birim hücresi için dielektrik fonksiyonun sabit 81×81 nod sayısı ile yapılan Fourier açılımları **a)** Kontrol için saf hali ile dielektrik fonksiyon; **b)** 121 adet ters örgü düzlem dalga kullanılarak yapılan Fourier açılımı; **c)** 441 adet ters örgü düzlem dalga kullanılarak yapılan Fourier açılımı; **d)** 1681 adet ters örgü düzlem dalga kullanılarak yapılan Fourier açılımı

İki boyutta verilen bu örnek yapının bant yapısı $k_x \times k_y = \{-\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{2a}, 0, \frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{a}\} \times \{-\frac{\pi}{a}, -\frac{\pi}{2a}, 0, \frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{a}\}$ şeklinde 25 adet k dalga vektörü için yapılacaktır. Her bir k değeri için $\{G'_x, G'_y\} = \{G_x, G_y\} = \{-3\frac{2\pi}{a}, -3\frac{2\pi}{a}\}, \{-3\frac{2\pi}{a}, -2\frac{2\pi}{a}\}, \dots, \{3\frac{2\pi}{a}, 2\frac{2\pi}{a}\}, \{3\frac{2\pi}{a}, 3\frac{2\pi}{a}\}$ şeklinde bileşenlere sahip 49 adet G' ve 49 adet G ters örgü vektörü kullanılacaktır. Hesap aşamaları bir boyuttaki anlatım ile aynıdır. Örnek için üç boyutlu bant yapısındaki sadece ilk iki bantı içeren "MATHEMATICA" kod yapısı Şekil 2.42 ve elde edilen ilk yedi bantı gösteren üç boyutlu bant yapısı ise Şekil 2.43'deki gibidir. Kod ilk iki bant için sonuçları vermektedir, diğer bantlar da benzer şekilde elde edilebilir. Hesaplamalarda ışık hızı için $c_0 = 1$ değeri kullanılmıştır. Kod yapısında değişkenlerin temsil ettiği

parametreler aşağıdaki gibi (değişken $\rightarrow$ parametre) şeklinde gösterilmektedir.

```

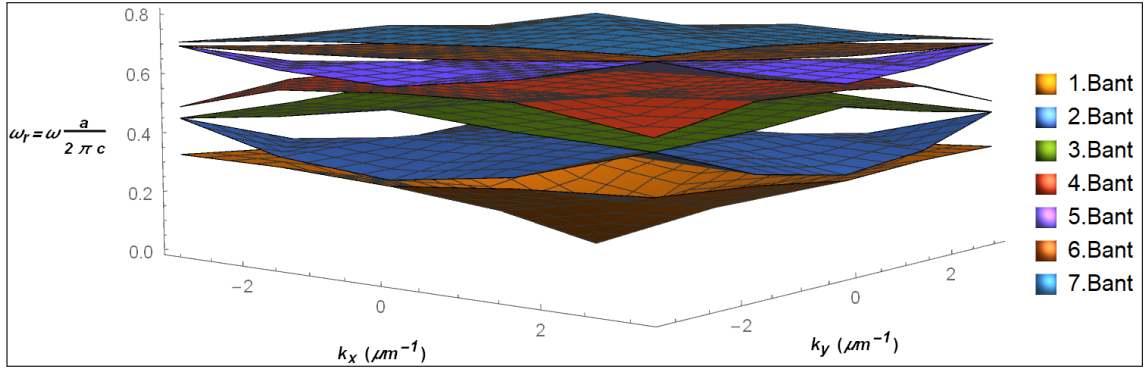
a = 1; b = 1; ra = 0.4; eps1 = 9; eps2 = 1; Nod = 30; NG = 3;
meshgrid[x_List, y_List] := {ConstantArray[x, Length[x]], Transpose@ConstantArray[y, Length[y]]}
xNod = N[Subdivide[-a/2, a/2, Nod - 1]]; yNod = N[Subdivide[-b/2, b/2, Nod - 1]];
{xNod, yNod} = meshgrid[xNod, yNod]; delta = xNod[[1, 2]] - xNod[[1, 1]];
kxList = Table[i *  $\frac{\pi}{2 * a}$ , {i, -2, 2}]; kyList = Table[i *  $\frac{\pi}{2 * b}$ , {i, -2, 2}];
{kxList, kyList} = meshgrid[kxList, kyList];
G = List[];
For[i = -NG, i ≤ NG, i++,
  TempGx = i *  $\frac{2 * \pi}{a}$ ;
  For[j = -NG, j ≤ NG, j++,
    TempGy = j *  $\frac{2 * \pi}{b}$ ;
    AppendTo[G, {TempGx, TempGy}];];];
FuncChi[Gxx_, Gyy_] := {Chi = 0;
  For[m = 1, m ≤ Length[xNod], m++,
    For[n = 1, n ≤ Length[xNod[[m]]], n++,
      rKare = xNod[[m, n]]^2 + yNod[[m, n]]^2;
      If[rKare < ra^2, eps = eps1; eps = eps2;];
      Chi = Chi + (1 / eps) * e-I*(Gxx*xNod[[m,n]] + Gyy*yNod[[m,n]]) * delta^2;];];
  Chi =  $\frac{1}{a * b}$  * Chi;
  Return[Chi];};
ListChi = List[];
For[i = 1, i ≤ ((2 * NG + 1) * (2 * NG + 1)), i++,
  AppendTo[ListChi, List[]];
  For[j = 1, j ≤ ((2 * NG + 1) * (2 * NG + 1)), j++,
    Gus2x = G[[i, 1]] - G[[j, 1]];
    Gus2y = G[[i, 2]] - G[[j, 2]];
    AppendTo[ListChi[[i]], FuncChi[Gus2x, Gus2y]]];];];
Bant1Deger = List[];
Bant2Deger = List[];
For[i = 1, i ≤ Length[kxList], i++,
  AppendTo[Bant1Deger, List[]]; AppendTo[Bant2Deger, List[]]; For[j = 1, j ≤ Length[kyList], j++,
    kx = kxList[[i, j]]; ky = kyList[[i, j]];
    Teta = List[]; sayac = 1;
    For[gusx = 1, gusx ≤ Length[G], gusx++,
      AppendTo[Teta, List[]];
      For[gusy = 1, gusy ≤ Length[G], gusy++,
        Gx = G[[gusx, 1]]; Gusx = G[[gusy, 1]];
        Gy = G[[gusx, 2]]; Gusy = G[[gusy, 2]];
        Chinew = ListChi[[gusx, gusy]];
        TetaElement = Chinew * ((kx + Gx) * (kx + Gusx) + (ky + Gy) * (ky + Gusy));
        AppendTo[Teta[[sayac]], TetaElement];];
        sayac = sayac + 1;];
    Omega = Sort[ $\sqrt{\text{Abs}[\text{Eigenvalues}[\text{N}[\text{Teta}]]}]$ ]; Omegar = Sort[ $\sqrt{\text{Abs}[\text{Eigenvalues}[\text{N}[\text{Teta}]]}] * \frac{a}{2 * \pi}$ ];
    AppendTo[Bant1Deger[[i]], Omegar[[1]]]; AppendTo[Bant2Deger[[i]], Omegar[[2]]];
  ];];
Bant1 = List[]; Bant2 = List[];
For[i = 1, i ≤ Length[kxList], i++,
  For[j = 1, j ≤ Length[kyList], j++,
    AppendTo[Bant1, {kxList[[i, j]], kyList[[i, j]], Bant1Deger[[i, j]]}];
    AppendTo[Bant2, {kxList[[i, j]], kyList[[i, j]], Bant2Deger[[i, j]]}];
  ];];

```

Şekil 2.42. Şekil 2.37'deki iki boyutlu örnek yapının üç boyutlu bant yapısı için yazılan "MATHEMATICA" kod yapısı

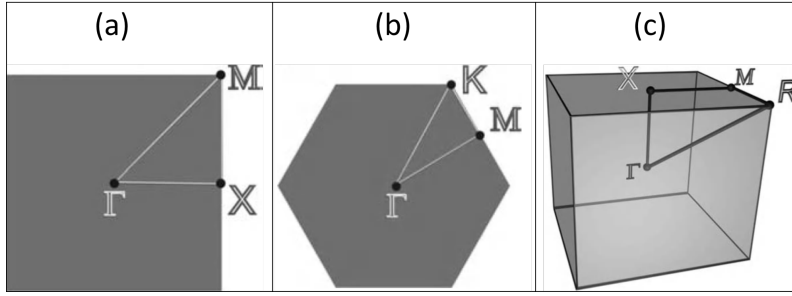
Şekil 2.42 ile verilen "MATHEMATİCA" kod yapısına dair parametreler ve tanımları:

a	→	birim hücre x boyutu
b	→	birim hücre y boyutu
ra	→	dielektrik çubuk yarıçapı
eps1	→	dielektrik çubuk dielektrik sabiti
eps2	→	çevre ortam (hava) dielektrik sabiti
Nod	→	birim hücrenin x ve y boyutlarının bölüneceği nod sayısı
xNod	→	birim hücrenin 0 simetrik x boyutu apsisi
yNod	→	birim hücrenin 0 simetrik y boyutu ordinatları
delta	→	hem x hem de y boyutu için iki nod arası mesafe
kxList	→	kullanılan 2 boyulu dalga vektörleri için k_x bileşen listesi
kyList	→	kullanılan 2 boyulu dalga vektörleri için k_y bileşen listesi
G	→	hesaplama kullanılan $(2NG + 1) \times (2NG + 1)$ adet (G_x, G_y) ters örgü vektörü ikilileri listesi
FuncChi	→	birim hücre içinde $\frac{1}{\varepsilon(x,y)}$ fonksiyonunun Fourier açılımındaki Fourier katsayısını verecek olan fonksiyon
Chi	→	"FuncChi" fonksiyonunun döndüreceği Fourier katsayısı
ListChi	→	"FuncChi" fonksiyonunun hesapladığı Fourier katsayıları listesi
Gus2x	→	G''_x ters örgü vektörü bileşeni
Gus2y	→	G''_y ters örgü vektörü bileşeni
Gusx	→	hesaplama sırasında gelen G'_x ters örgü vektörü bileşeni
Gusy	→	hesaplama sırasında gelen G'_y ters örgü vektörü bileşeni
Gx	→	hesaplama sırasında gelen G_x ters örgü vektörü bileşeni
Gy	→	hesaplama sırasında gelen G_y ters örgü vektörü bileşeni
Chinew	→	hesaplama sırasında gelen Fourier katsayısı değeri
kx	→	hesaplama sırasında gelen k_x dalga vektörü bileşeni
ky	→	hesaplama sırasında gelen k_y dalga vektörü bileşeni
Teta	→	öz-değer denklemi operatör matrisi
TetaElement	→	operatör matrisi elemanları
Omega	→	hesaplanan öz-değerler
Omegar	→	indirgenmiş öz-değerler
Bant1Deger	→	1. Bant değerleri
Bant1	→	(k_x, k_y, ω_r) şeklindeki 1. Bant noktaları
Bant2Deger	→	2. Bant değerleri
Bant2	→	(k_x, k_y, ω_r) şeklindeki 2. Bant noktaları



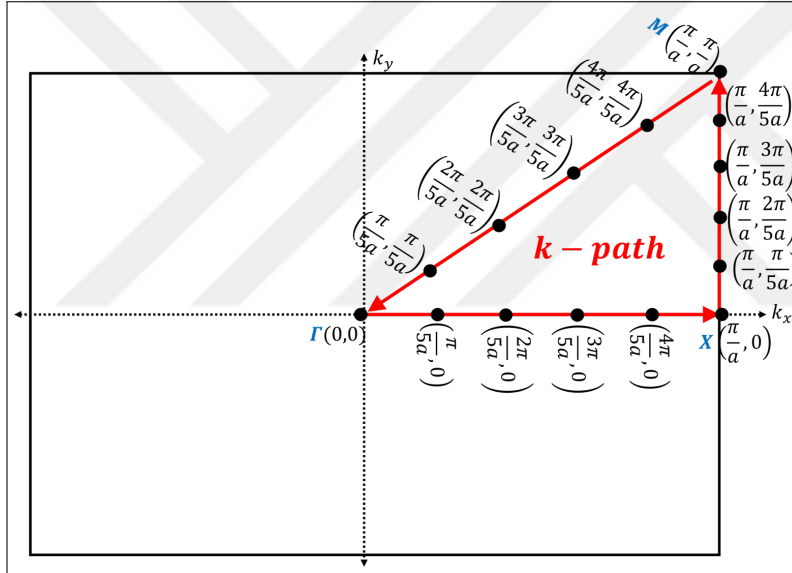
Şekil 2.43. Şekil 2.37’deki iki boyutlu örnek yapının üç boyutlu bant yapısı

Anlaşılabileceği gibi iki boyutlu bir PhC için bant yapıları üç boyutlu bir grafik vermektedir. Çünkü xy düzlemi k_x ve k_y değerlerini ve geri kalan üçüncü eksen de öz-değerleri göstermek zorundadır. Bu durumda üç boyutlu bir yapının bant diyagramının da dört boyutlu bir grafik gerektireceği anlaşılır. Fakat bu standart yollarla imkansızdır. Ayrıca bir boyuttaki hesaplamaların aksine iki ve üç boyuttaki yapılar için hesaplamalarda Brillouin bölgesi içindeki tüm noktalar için hesaplamalar çok zaman almaktadır ve analizleri zordur (Sukhoivanov ve Guryev 2009). Bu nedenle iki veya üç boyutlu bant yapılarını ifade edebilecek iki boyutlu bir grafik elde etmenin gerekliliği ortaya çıkar. Bu da "**yüksek simetri noktalarının**" kullanılmasıyla mümkündür. Bu noktalar kısaca Brillouin bölgesinin noktalarıdır, öyle ki PhC örgüsüne bağlı olarak Brillouin’in 90, 180, 30 veya 60° döndürülmesiyle bu noktalar kendilerine dönüşürler. Bant yapısı hesabı genellikle Brillouin bölgesinin merkezinden başlar. Merkezdeki nokta Γ ile gösterilir ve bu noktada dalga vektörü sıfır değerindedir. Yüksek simetri noktalarının bağlantısı ile elde edilen kontur’a "**k-path**" denir. Şekil 2.44a,b’de sırasıyla kare ve altıgen örgülü iki boyutlu PhC için k-path’ler görülmekteyken, (c)’de ise kübik örgülü üç boyutlu bir PhC için k-path görülmektedir. Görülebileceği gibi üç boyut söz konusu olduğunda k-path oldukça karmaşıklaşır (Sukhoivanov ve Guryev 2009).



Şekil 2.44. a) Kare örgülü iki boyutlu PhC için k-path; b) Altıgen örgülü iki boyutlu PhC için k-path; c) Kübik örgülü üç boyutlu PhC için k-path (Sukhoivanov ve Guryev 2009)

Şekil 2.45’de kare örgülü iki boyutlu PhC için k-path yüksek simetri noktaları detayları görülmektedir.



Şekil 2.45. Kare örgülü iki boyutlu PhC için k-path yüksek simetri noktaları detayları

Bu durumda tek yapılması gereken bu yüksek simetri noktalarını baz alarak aynı şekilde hesaplama yapmaktır. Şekil 2.46’da Şekil 2.45’deki noktalar baz alınarak Şekil 2.37’deki örnek yapının iki boyutlu bant yapısını elde etmek için yazılan "MATHEMATICA" kodu verilmiştir. Kod yapısında önceki kodlardan farklı olarak "kPath" parametresi Şekil 2.45’de gösterilen yüksek simetri noktaları listelenmiştir. Şekil 2.47 ise elde edilen ilk yedi bandı göstermektedir.

```

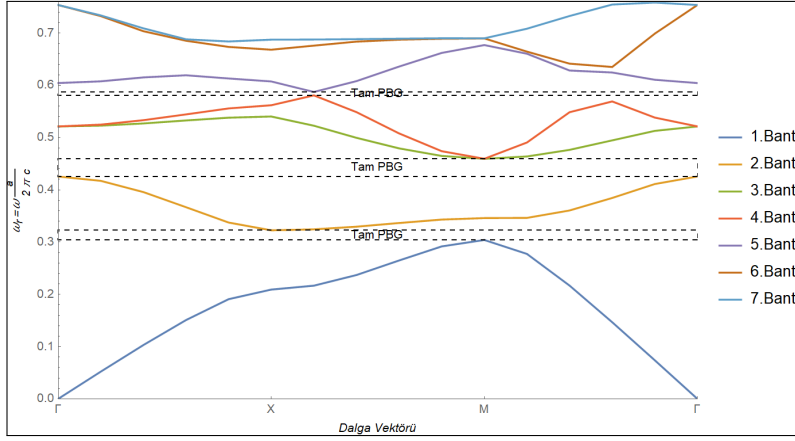
a = 1; b = 1; ra = 0.4; eps1 = 9; eps2 = 1; Nod = 30; NG = 6;
meshgrid[x_List, y_List] := {ConstantArray[x, Length[x]], Transpose@ConstantArray[y, Length[y]]}
xNod = N[Subdivide[-a/2, a/2, Nod - 1]]; yNod = N[Subdivide[-b/2, b/2, Nod - 1]];
{xNod, yNod} = meshgrid[xNod, yNod]; delta = xNod[[1, 2]] - xNod[[1, 1]];
kPath = {
  {0, 0}, { $\frac{\pi}{5 * a}$ , 0}, { $\frac{2 * \pi}{5 * a}$ , 0}, { $\frac{3 * \pi}{5 * a}$ , 0}, { $\frac{4 * \pi}{5 * a}$ , 0},
  { $\frac{\pi}{a}$ , 0}, { $\frac{\pi}{a}$ ,  $\frac{\pi}{5 * a}$ }, { $\frac{\pi}{a}$ ,  $\frac{2 * \pi}{5 * a}$ }, { $\frac{\pi}{a}$ ,  $\frac{3 * \pi}{5 * a}$ }, { $\frac{\pi}{a}$ ,  $\frac{4 * \pi}{5 * a}$ },
  { $\frac{\pi}{a}$ ,  $\frac{\pi}{a}$ }, { $\frac{4 * \pi}{5 * a}$ ,  $\frac{4 * \pi}{5 * a}$ }, { $\frac{3 * \pi}{5 * a}$ ,  $\frac{3 * \pi}{5 * a}$ }, { $\frac{2 * \pi}{5 * a}$ ,  $\frac{2 * \pi}{5 * a}$ }, { $\frac{\pi}{5 * a}$ ,  $\frac{\pi}{5 * a}$ }, {0, 0}
};
FuncChi[Gxx_, Gyy_] := {Chi = 0;
  For[m = 1, m ≤ Length[xNod], m++,
    For[n = 1, n ≤ Length[xNod[[m]]], n++,
      rKare = xNod[[m, n]]^2 + yNod[[m, n]]^2;
      If[rKare < ra^2, eps = eps1, eps = eps2];
      Chi = Chi + (1 / eps) * e-I * (Gxx * xNod[[m, n]] + Gyy * yNod[[m, n]]) * delta^2];];
  Chi =  $\frac{1}{a * b}$  * Chi;
  Return[Chi];};
G = List[];
For[gx = -NG, gx ≤ NG, gx++,
  TempGx = gx *  $\frac{2 * \pi}{a}$ ;
  For[gy = -NG, gy ≤ NG, gy++,
    TempGy = gy *  $\frac{2 * \pi}{b}$ ;
    AppendTo[G, {TempGx, TempGy}];];];
ListChi = List[];
For[i = 1, i ≤ Length[G], i++,
  AppendTo[ListChi, List[]];
  For[j = 1, j ≤ Length[G], j++,
    Gus2x = G[[i, 1]] - G[[j, 1]];
    Gus2y = G[[i, 2]] - G[[j, 2]];
    AppendTo[ListChi[[i]], FuncChi[Gus2x, Gus2y]];];];
Bands = List[];
For[i = 1, i ≤ Length[G], i++,
  AppendTo[Bands, List[]];
];
For[i = 1, i ≤ Length[kPath], i++,
  Teta = List[]; sayac = 1;
  kx = kPath[[i, 1]]; ky = kPath[[i, 2]];
  For[gus = 1, gus ≤ Length[G], gus++,
    AppendTo[Teta, List[]];
    For[g = 1, g ≤ Length[G], g++,
      Gx = G[[gus, 1]]; Gusx = G[[g, 1]]; Gy = G[[gus, 2]]; Gusy = G[[g, 2]];
      Chinesw = ListChi[[gus, g]];
      TetaElement = Chinesw * ((kx + Gx) * (kx + Gusx) + (ky + Gy) * (ky + Gusy));
      AppendTo[Teta[[sayac]], TetaElement];
    ]; sayac = sayac + 1;];
  Omega = Sort[ $\sqrt{\text{Abs}[\text{Eigenvalues}[N[\text{Teta}]]]}$ ]; Omegar = Sort[ $\sqrt{\text{Abs}[\text{Eigenvalues}[N[\text{Teta}]]} * \frac{a}{2 * \pi}$ ];
  For[k = 1, k ≤ 7, k++,
    AppendTo[Bands[[k]], Omegar[[k]]];];];
kPathNumbers = Table[i, {i, 0, Length[kPath] - 1}];
Bant1 = Transpose[{kPathNumbers, Bands[[1]]}];
Bant2 = Transpose[{kPathNumbers, Bands[[2]]}];

```

Şekil 2.46. Şekil 2.37'deki örnek yapının iki boyutlu bant yapısını elde etmek için yazılan "MATHEMATICA" kodu

Şekil 2.46 ile verilen "MATHEMATİCA" kod yapısına dair parametreler ve tanımları:

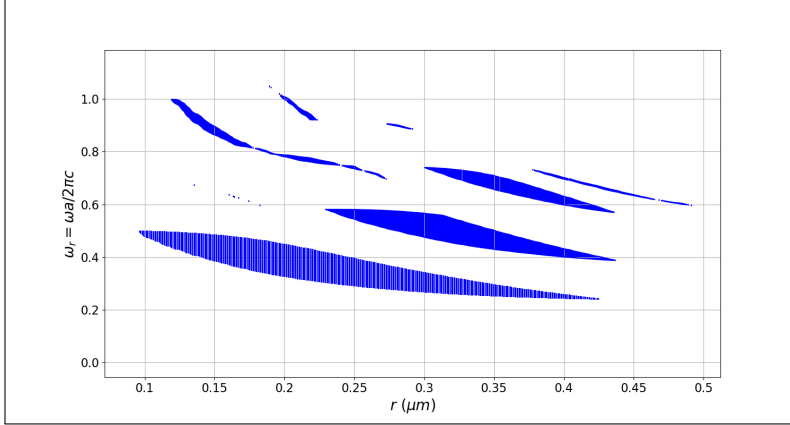
a	→	birim hücre x boyutu
b	→	birim hücre y boyutu
ra	→	dielektrik çubuk yarıçapı
eps1	→	dielektrik çubuk dielektrik sabiti
eps2	→	çevre ortam (hava) dielektrik sabiti
Nod	→	birim hücrenin x ve y boyutlarının bölüneceği nod sayısı
xNod	→	birim hücrenin 0 simetrik x boyutu apsisleri
yNod	→	birim hücrenin 0 simetrik y boyutu ordinatları
delta	→	hem x hem de y boyutu için iki nod arası mesafe
kPath	→	kullanılan (k_x, k_y) şeklindeki yüksek simetri noktaları listesi
G	→	hesaplama kullanılan $(2NG + 1) \times (2NG + 1)$ adet (G_x, G_y) ters örgü vektörü ikilileri listesi
FuncChi	→	birim hücre içinde $\frac{1}{\varepsilon(x,y)}$ fonksiyonunun Fourier açılımındaki Fourier katsayısını verecek olan fonksiyon
Chi	→	"FuncChi" fonksiyonunun döndüreceği Fourier katsayısı
ListChi	→	"FuncChi" fonksiyonunun hesapladığı Fourier katsayıları listesi
Gus2x	→	G''_x ters örgü vektörü bileşeni
Gus2y	→	G''_y ters örgü vektörü bileşeni
Gusx	→	hesaplama sırasında gelen G'_x ters örgü vektörü bileşeni
Gusy	→	hesaplama sırasında gelen G'_y ters örgü vektörü bileşeni
Gx	→	hesaplama sırasında gelen G_x ters örgü vektörü bileşeni
Gy	→	hesaplama sırasında gelen G_y ters örgü vektörü bileşeni
Chinew	→	hesaplama sırasında gelen Fourier katsayısı değeri
Teta	→	öz-değer denklemi operatör matrisi
TetaElement	→	operatör matrisi elemanları
Omega	→	hesaplanan öz-değerler
Omegar	→	indirgenmiş öz-değerler
Bants	→	İlk 7 bant değerinin aktarılacağı liste
kPathNumbers	→	$\Gamma, \dots, X, \dots, M, \dots, \Gamma$ isimlerini alacak olan yüksek simetri noktalarının sayı değerleri
Bant1	→	(yüksek simetri noktası, ω_r) şeklindeki 1. Bant noktaları
Bant2	→	(yüksek simetri noktası, ω_r) şeklindeki 2. Bant noktaları



Şekil 2.47. Şekil 2.37’deki örnek yapının iki boyutlu bant yapısı

2.4.6. Fotonik bant aralığı haritaları

Bir PhC aracı dizayn edildiğinde genellikle bant yapılarının eldesinden ziyade PhC parametrelerinin belirlenmesi istenir. Örneğin belli frekanslarda PBG’ye sahip bir PhC dizayn etmek arzulanır. Bunun için PhC materyallerinin geçirgenliklerini, element boyutlarını ve örgü türlerini belirlemek gerekir. Bu tür problemleri çözmek için PBG haritaları kullanılır ve bunlara indirgenmiş bant yapıları da denir. Bu haritalar kırılma indisi, PhC element boyutları vb. gibi PhC parametreleri değerleri ile elde edilen tam PBG’lerin bir projeksiyonudur. Bir PBG haritası elde etmek için PhC parametrelerinin farklı değerlerindeki bant yapıları elde edilir, bu bant yapılarından tam PBG’ler ayıklanır ve ayıklanan bu tam PBG’ler bahsi geçen haritaları meydana getirir. Burada örnek olarak yine Şekil 2.37’deki yapı için haritalar elde edilecektir. Fakat bu defa dielektrik çubukların yarıçapları $0 - 0.5\mu m$ aralığında farklı değerlerle hesap yapıp tam PBG’ler ayıklanacak ve haritalar ayıklanacaktır. Bant yapısı hesapları yine aynı fakat farklı yarıçap değerlerinde olduğundan kod yapısı verilmeyecektir. Buna göre elde edilmiş PBG haritası Şekil 2.48’deki gibidir.



Şekil 2.48. Şekil 2.37’deki yapı için dielektrik çubuk yarıçaplarının $0 - 0.5\mu m$ aralığında değişimiyle elde edilen PBG haritası

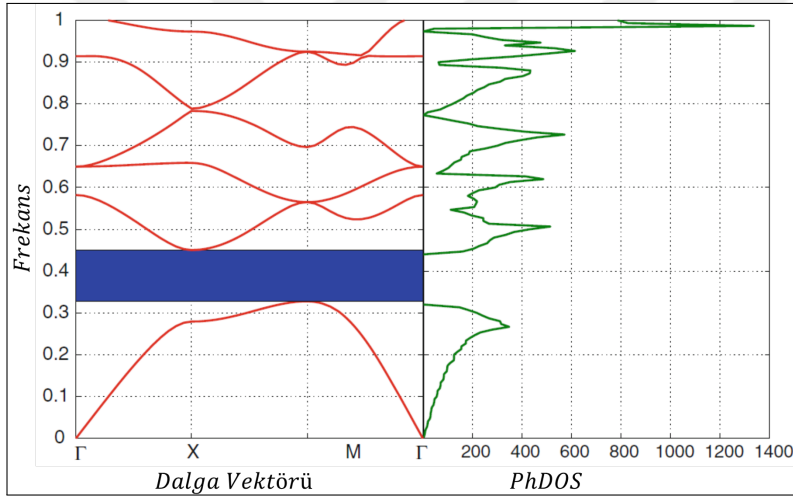
Şekil 2.48’e göre bazı yarıçap aralıklarında birden fazla PBG olduğu anlaşılmaktadır (Örneğin $0.25\mu m$ ve $0.4\mu m$ yarıçap aralıklarında). Bu haritayı yorumlamak adına bir örnek vermek gerekirse; örneğin eğer dielektrik çubukların yarıçapı $0.15\mu m$ olarak dizayn edilirse yaklaşık olarak $0.4 - 0.5$ frekans aralığındaki gelen radyasyonun yapı içinde ilerleyemeyeceği anlaşılır.

2.4.7. Fotonik durum yoğunlukları

Şimdiye kadar yapılan hesaplamalarda Brillouin bölgesi üzerinde çalışılmış ve nümerik hesap yapabilmek adına sadece belli kesikli $\vec{k}$ değerlerini seçerek bu değerlere karşılık gelen öz durumlar hakkında bilgi sahibi olunmuştur. Fakat fiziksel anlamda Brillouin bölgesi içinde sonsuz tane nokta vardır ve bu nedenle sorulması gereken soru Brillouin bölgesindeki tüm noktalar için elde edilecek öz durum sayısının ne olduğudur. Bu sorunun cevabı ise sürekli bir toplam, yani bir integral hesabını işaret eder. Elektronik bant yapılarında incelenilen durum yoğunluklarına benzer şekilde elde edilecek olan ve n tane bant için ω frekansına sahip öz durum sayısı, yani fotonik durum yoğunluğu eşitlik (2.68)’deki gibi ifade edilir. Integral altındaki BZ ifadesi Brillouin bölgesi içinde hesap yapılacağını söyler. İntegranttaki $\delta[\omega - \omega_n(\vec{k})]$ şeklindeki delta fonksiyonu aynı frekansa sahip öz-durumların elde edilmesini sağlar ve böylece söz konusu bant içindeki aynı frekansa sahip öz-durumlar toplanabilir hale gelir. İntegralden sonraki $\sum_n$ toplamı ile de tüm bantlar üzerinden toplam gerçekleştirilir.

$$PhDOS = N(\omega) = \sum_n \int_{BZ} d^2 \vec{k} \delta[\omega - \omega_n(\vec{k})] \quad (2.68)$$

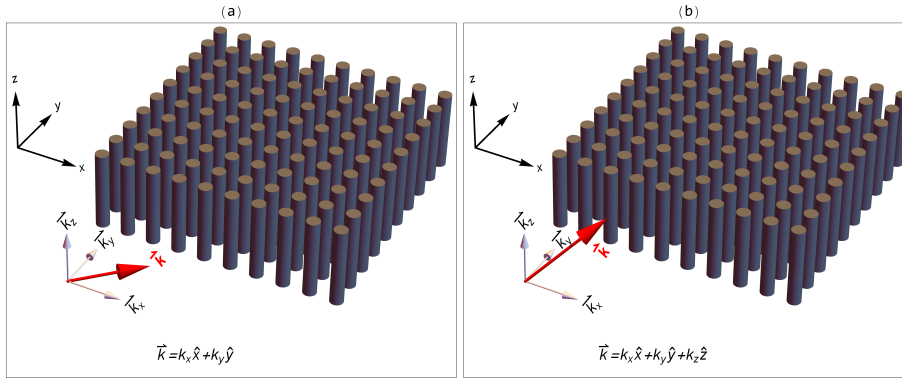
Şekil 2.49, iki boyutlu bir PhC için fotonik durum yoğunluklarını (PhDOS) göstermektedir. Düşük veya sıfır değerdeki PhDOS, söz konusu frekans aralığında öz-durumun olmadığı anlamına gelir ki bu da PBG'lere işaret eder. Eğer PhDOS yüksekse bu çok sayıda öz-durum anlamına gelir. Çok sayıda öz-durum, PhC boyunca geçebilecek olan çok sayıda radyasyon yoluna, yani yüksek geçirgenliğe sahip bir PhC anlamına gelir. Böylece geçiş sayısını hesaplamaksızın PhDOS, PhC'nin spektral özellikleri hakkında bilgi verebilir.



Şekil 2.49. İki boyutlu bir PhC için örnek fotonik durum yoğunlukları (PhDOS) (Sukhoivanov ve Guryev 2009)

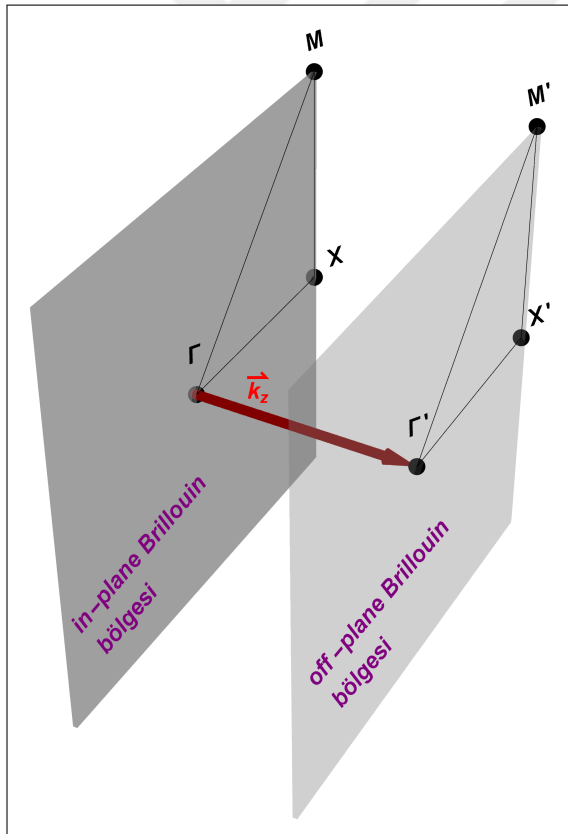
2.4.8. Off-plane bant yapısı

Önceki bölümde iki boyutlu PhC üzerinde $\vec{k} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y}$ şeklinde iki boyutlu radyasyon yayılımı incelenmişti. Bu yayılımla oluşan bant yapısına "in-plane bant yapısı" denir. Bu bölümde iki boyutlu PhC üzerinde $\vec{k} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y} + k_z \hat{z}$ şeklinde üç boyutlu radyasyon yayılımı incelenecektir. Yani artık $\vec{k}_z$ bileşen sıfır değildir. Bu yayılımla oluşan bant yapısına "off-plane bant yapısı" denir. Durum Şekil 2.50'de gösterildiği gibidir.



Şekil 2.50. İki boyutlu bir PhC üzerinde a) In-plane; b) Off-plane yayılım

İki boyutlu bant yapısı çizimi için daha önce bahsedilen yüksek simetri noktaları burada da dikkate alınır. Bununla birlikte artık $\vec{k}_z \neq 0$ olduğu için Brillouin bölgesi z yönünde $\vec{k}_z$ kadar kayar. Brillouin bölgesinin off-plane yayılım için değişimi Şekil 2.51’de gösterildiği gibidir.

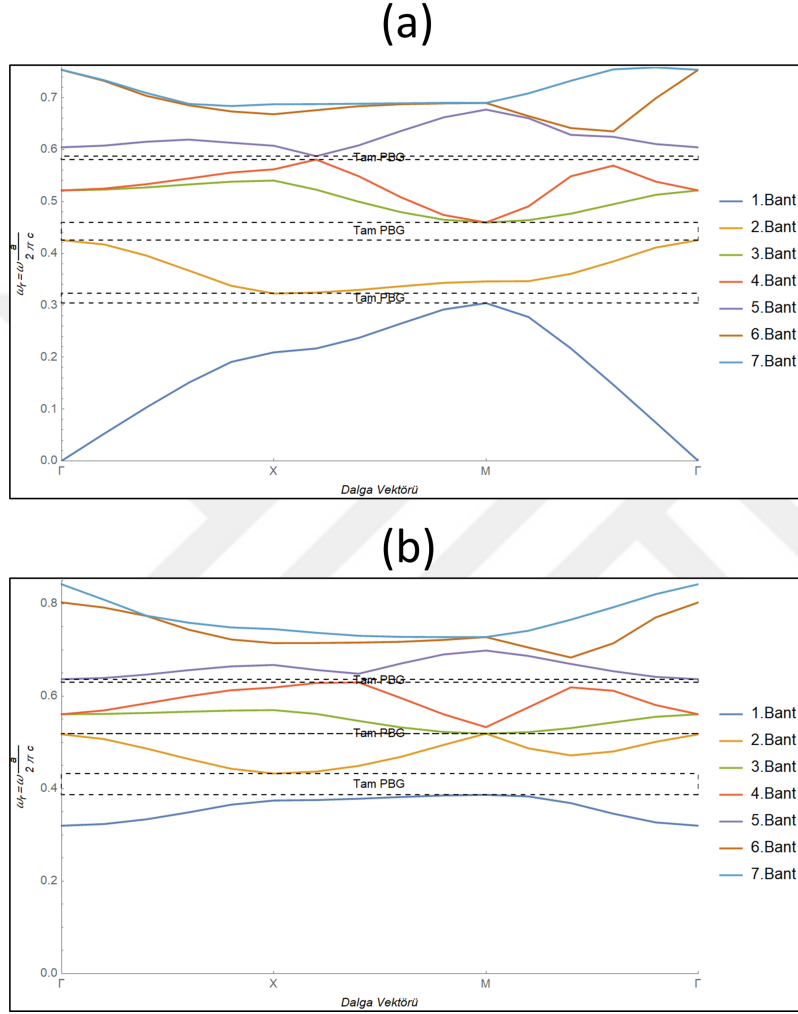


Şekil 2.51. Brillouin bölgesinin off-plane yayılım için değişimi

Burada artık $k_z \neq 0$ olduğu için eşitlik (2.64)’deki skaler çarpım yapılırsa $(k_x +$

$G_x \left(k_x + G'_x \right) + \left(k_y + G_y \right) \left(k_y + G'_y \right) + k_z^2$ olduğunu görürüz. Bu nedenle in-plane kod yapısındaki tek değişiklik bu skaler çarpıma sadece k_z^2 eklentisidir.

Şekil 2.52'de Şekil 2.37'deki örnek yapı için daha önce Şekil 2.47 ile verilen in-plane bant yapısı ile birlikte off-plane bant yapısı karşılaştırma için birlikte verilmektedir.



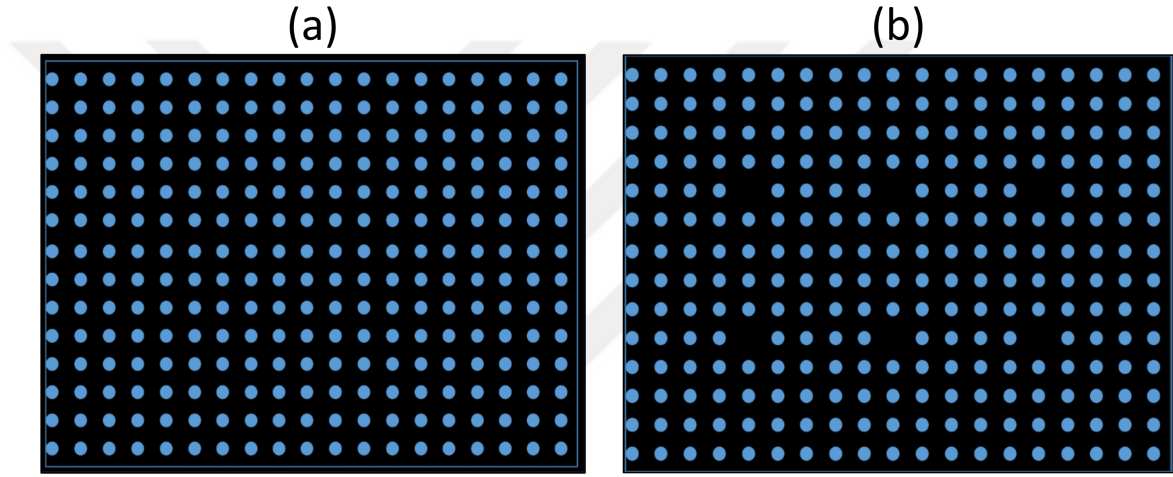
Şekil 2.52. Şekil 2.37'deki örnek yapının iki boyutlu **a)** In-plane; **b)** Off-plane bant yapısı

Şekil 2.52'den de görülebileceği gibi off-plane yayılım durumunda PhC bant yapısı önemli ölçüde değişiklik gösterebilir. In-plane yayılıma nazaran gözlenebilecek en önemli değişim bant diyagramının sıfırdan farklı bir frekansla başlaması ve bant düzlüğünün daha da fazla olmasıdır.

Böyle bir yayılımı kullanan cihazlara örnek olarak radyasyonun PhC elemanları boyunca yayıldığı PhC fiberler verilebilir.

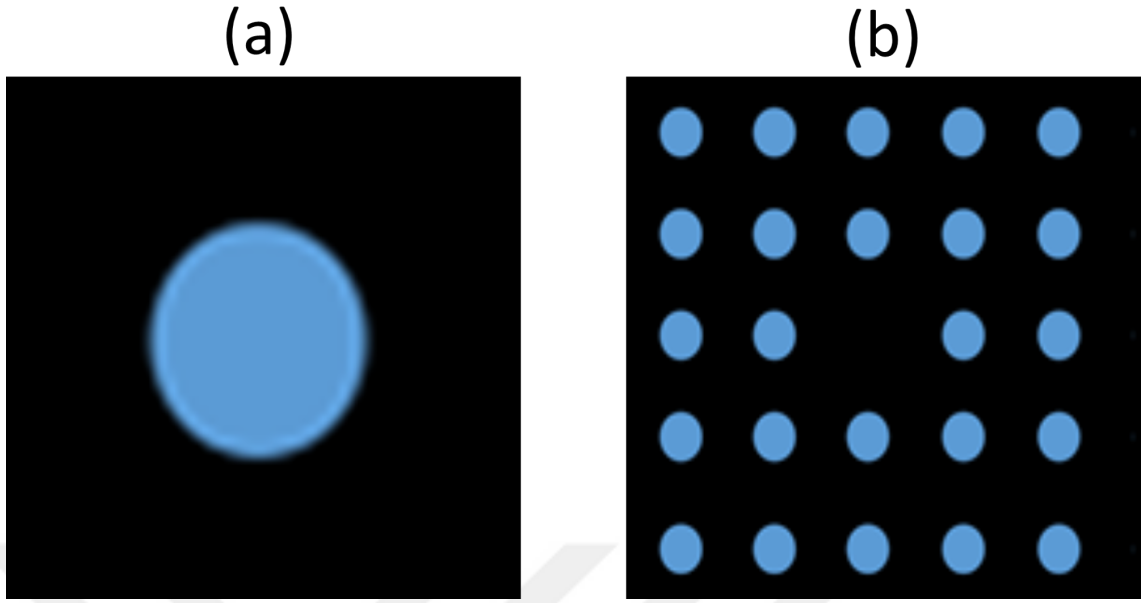
2.4.9. Saf periyodik yapıda değişiklik (defect)

Saf periyodik yapıda oluşturulan bir değişiklik (defect) ile birlikte optik özellikler saf periyodik yapıdakinden farklı olacaktır ve dolayısıyla farklı bir bant yapısı söz konusu olacaktır. Örneğin saf periyodik yapıda yasaklı olan bir frekans aralığı defect'li yapıda izinli olabilir. Şekil 2.53a'da hava içine yerleştirilmiş dielektrik çubuklardan oluşan saf periyodik yapı ve (b)'de ise yukarıdan, aşağıdan, sağdan ve soldan dört dielektrik çubuk ortasında kalan bir adet dielektrik çubuğun yapıdan çıkarılması ile oluşturulan yeni yapı görülmektedir.



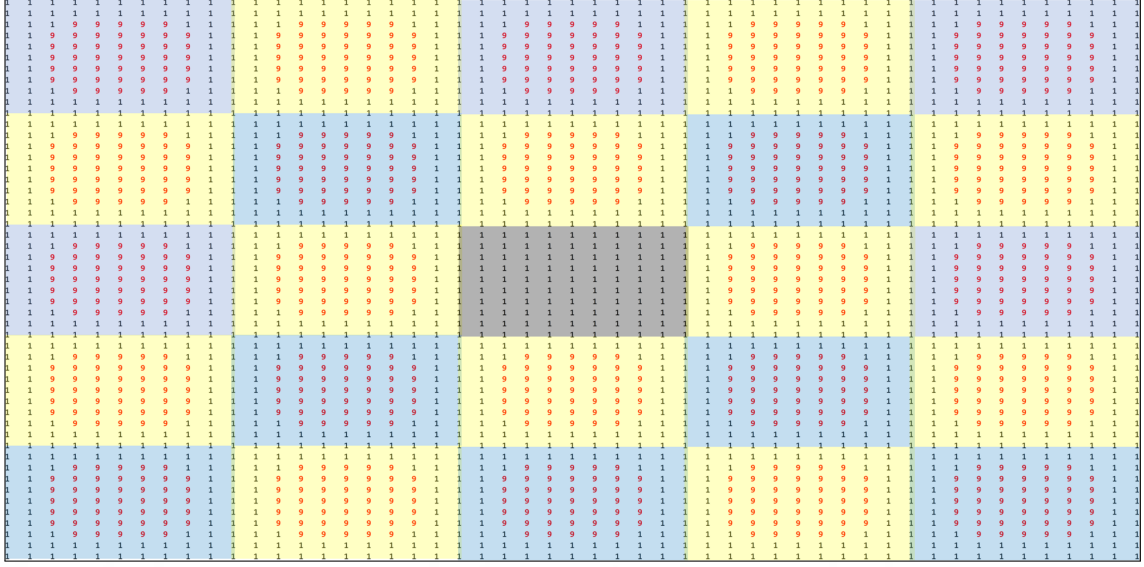
Şekil 2.53. a) Hava içine yerleştirilmiş dielektrik çubuklardan oluşan saf periyodik yapı; b) Yukarıdan, aşağıdan, sağdan ve soldan dört dielektrik çubuk ortasında kalan bir adet dielektrik çubuğun yapıdan çıkarılması ile oluşturulan yeni yapı

Yeni yapı için de hesaplar daha önce olduğu gibidir fakat birim hücreler yapı boyunca periyodikliğin sağlanması gerektiği için Şekil 2.54'deki gibi olacaktır.



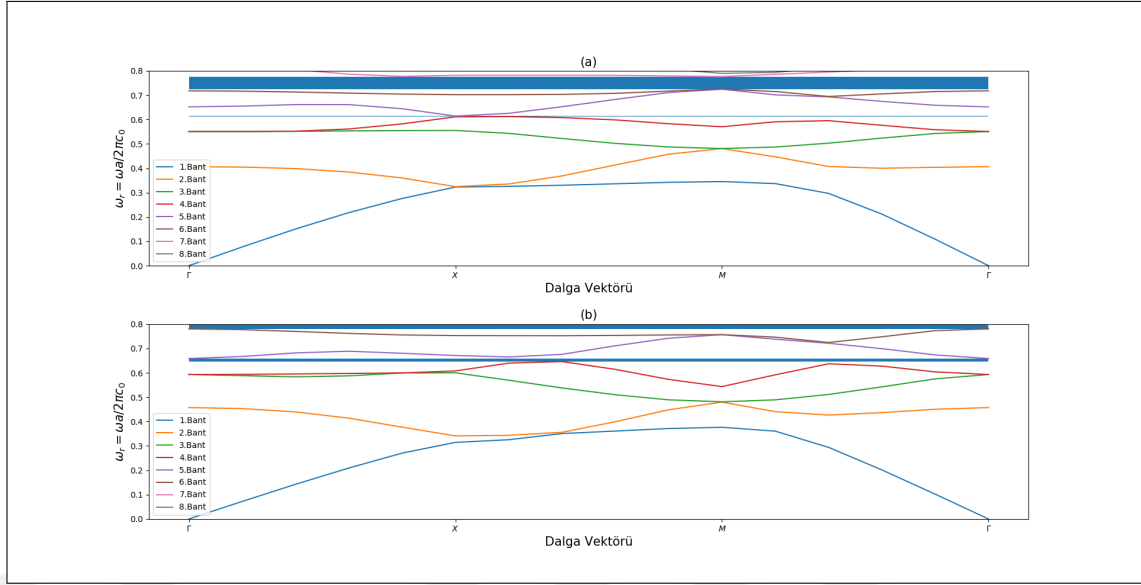
Şekil 2.54. a) Hava içine yerleştirilmiş dielektrik çubuklardan oluşan saf periyodik yapı için birim hücre; b) Yukarıdan, aşağıdan, sağdan ve soldan dört dielektrik çubuk ortasında kalan bir adet dielektrik çubuğun yapıdan çıkarılması ile oluşturulan yeni yapı için birim hücre (defect'li birim hücre)

Şekil 2.37'deki örnek yapının boyutları ile birlikte hava ve dielektrik çubukların dielektrik sabiti değerleri dikkate alınıp, yukarıda bahsedildiği şekilde saf yapıdan çıkarılan bir adet çubukla birlikte oluşan yeni birim hücrenin 51×51 nod ile bölünerek, tüm noktaların dielektrik sabiti değerleri ile gösterimi Şekil 2.55'deki gibi olur. Bu şekilde mavi ve sarı saydam dikdörtgenlerle çevrilmiş hücreler defect olmaksızın ilk durumda hesaba katılan ve daha önce hesaplamaların üzerinden yürütüldüğü birim hücreleri temsil ederken, ortadaki siyah saydam dikdörtgenle gösterildiği gibi bir adet çubuğun çıkarılmasıyla oluşan tüm resim ise defect'li birim hücreyi temsil etmektedir.



Şekil 2.55. Defect'li birim hücrenin 51×51 nod ile kesiklileştirilerek, tüm noktaların dielektrik sabiti değerleri ile gösterimi

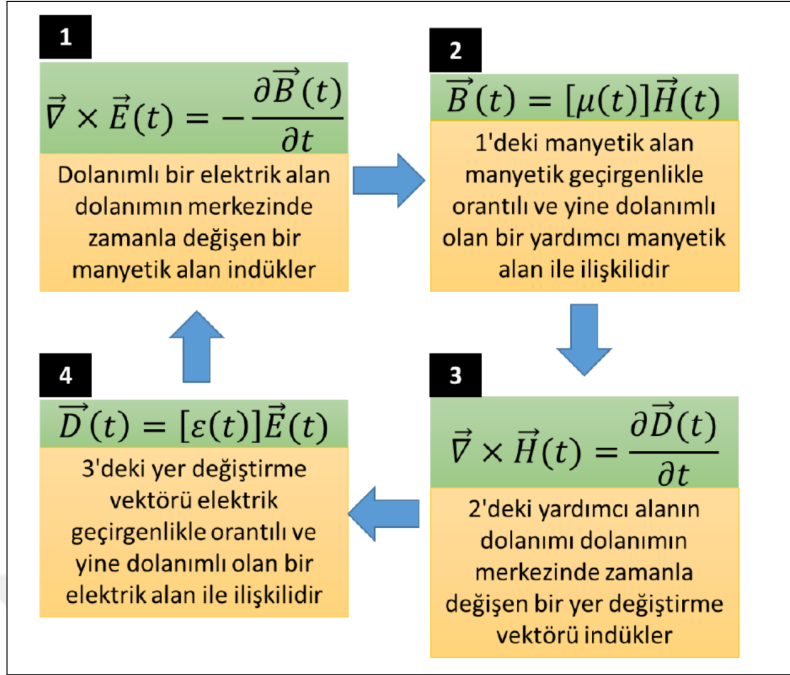
Bant yapısı hesabı yine daha önce olduğu gibidir fakat defect'li durumda dikkate alınması gereken birim hücre Şekil 2.55'de görülen tüm resimdir. Dikkat edilecek olursa bu birim hücre x boyutunda $5a$ ve y boyutunda ise $5b$ uzunluğundadır. Şekil 2.56'de Şekil 2.37'deki örnek yapının iki boyutlu defect olmaksızın ve yukarıda bahsedildiği şekilde defect içeren bant yapıları birlikte verilmektedir. Hesaplama defect'siz bant yapısı için $a \times b$ boyutlarındaki birim hücre $11 \times 11 = 121$ nod ile kesiklileştirilmiş ve $7 \times 7 = 49$ tane ters örgü vektörü kullanılmıştır. Diğer yandan defect'li bant yapısı için $5a \times 5b$ boyutlarındaki birim hücre $51 \times 51 = 2601$ nod ile kesiklileştirilmiş ve $9 \times 9 = 81$ tane ters örgü vektörü kullanılmıştır. Yayılım in-plane yayılımdır ve k dalga vektörü için kullanılan yüksek simetri noktaları Şekil 2.45'dekine uygun şekildedir.



Şekil 2.56. Şekil 2.37'deki örnek yapının iki boyutlu **a)** Defect olmaksızın; **b)** Defect'li bant yapıları

2.4.10. Fotonik kristal alan dağılımlarının hesaplanması

Bu bölüm yansıma ve geçme spektrumlarını elde etmeyi amaçlamaktadır. Yapı uzayı sürekli. Bu nedenle de gerçekte sürekli alanlar ve bu alanları ifade eden sürekli türevlere sahip Maxwell denklemleri söz konusudur. Tüm bunlar ise depo edilemeyecek olan sonsuz sayıda bilgi anlamına gelir. Fakat yapı uzayının ve buna bağlı olarak Maxwell denklemlerinin kesklileştirilmesiyle sonlu ve depo edilebilir bilgi edinmek mümkündür. Bu amaç için kullanılacak olan "Sonlu Farklar Zaman Alanı metodu (Finite Difference Time Domain-FDTD)" bu temele dayanmaktadır. Böylelikle elektromanyetik dalgalar, fiziksel dünyadaki yayılımlarını modelleyebilecek şekilde sayısal olarak simüle edilebilirler. FDTD'nin temel algoritması ilk olarak K.S. Yee tarafından 1966'da yayınlandı (Yee 1966). Bu nedenle uzayın kesklileştirilmesi ile oluşturulan grid yapıya genellikle Yee Grid denmektedir. Metodun temel akış diyagramı Şekil 2.57'deki gibidir.



Şekil 2.57. FDTD metodu için temel akış diyagramı

Alanların Normalizasyonu

Bilindiği üzere bir elektromanyetik dalganın elektrik ve manyetik alan bileşenleri arasında ciddi bir büyüklük mertebesi farkı söz konusudur. Bu ise nümerik (bilgisayar) hesaplamalarında ve simülasyonlarda bir yuvarlama hatasına (rounding error) neden olur. Bu nedenle her iki alanın da aynı mertebelerde olması adına normalizasyon gerekir. Buradaki tüm hesaplamalarda eşitlik (2.69)'de verilen normalize manyetik alan kullanılacaktır.

$$\vec{H} = \sqrt{\frac{\mu_0}{\epsilon_0}} \vec{H} \quad (2.69)$$

Kararlı Sonlu Fark Eşitlikleri (Stable Finite Difference Equations - SFDE)

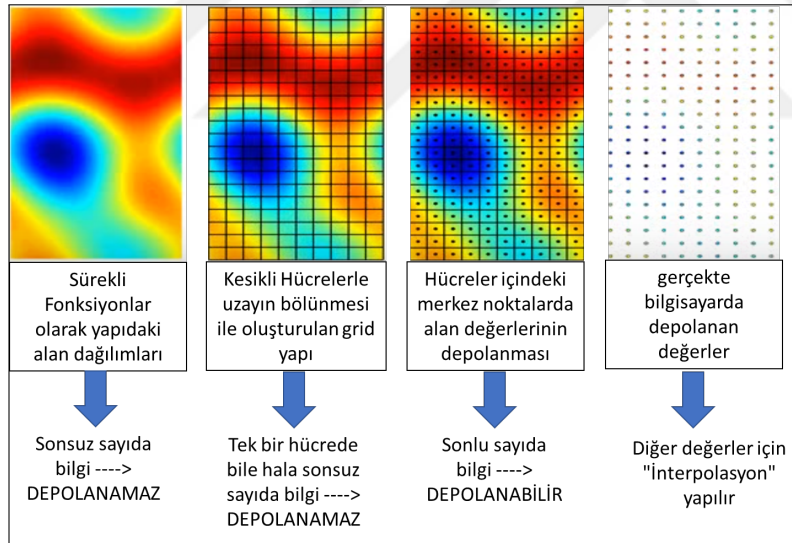
Bir eşitlikteki tüm terimler uzay ve zamanda aynı noktalarda var olmalıdırlar. Aksi halde böyle bir eşitlik üzerine yapılan nümerik hesaplamalar/simülasyonlar vb. "kararsız" olacaktır. Bu durumu sağlayan eşitliklere SFDE denir. Bu durumda alan

dağılımlarını resmedeceğimiz bilgisayar simülasyonları söz konusu olduğu için Maxwell denklemlerinin sonlu ifadelerindeki olası kararsızlıklar çözümlmelidir. Eşitlik (2.70)'de normalize manyetik alan içeren ve zamanda SFDE olma özelliğini gösterebilen Faraday ve Maxwell-Ampere yasalarının sonlu ifadeleri verilmektedir.

$$\begin{aligned}\vec{\nabla} \times \vec{E}(t) &= -\frac{[\mu_r]}{c_0} \frac{\partial \vec{H}(t)}{\partial t} \approx -\frac{[\mu_r]}{c_0} \frac{\vec{H}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) - \vec{H}\left(t - \frac{\Delta t}{2}\right)}{\Delta t} \\ \vec{\nabla} \times \vec{H}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right) &= \frac{[\varepsilon_r]}{c_0} \frac{\partial \vec{E}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)}{\partial t} \approx \frac{[\varepsilon_r]}{c_0} \frac{\vec{E}(t + \Delta t) - \vec{E}(t)}{\Delta}\end{aligned}\quad (2.70)$$

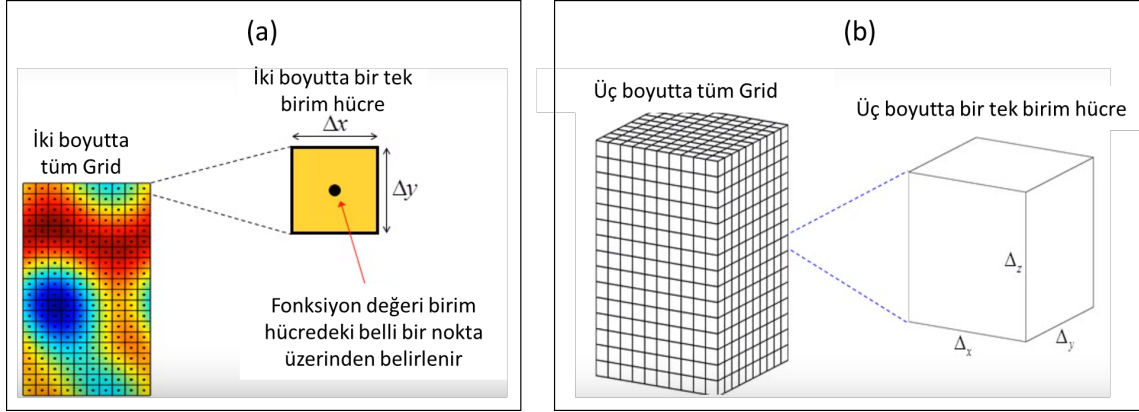
Uzayın Kesiklileştirilmesi - Grid Yapı Birim Hücre Seçimi

Şekil 2.58'de alanların dağılım gösterdiği 2 boyutlu bir uzay parçasının kesiklileştirilmesi gösterilmektedir.



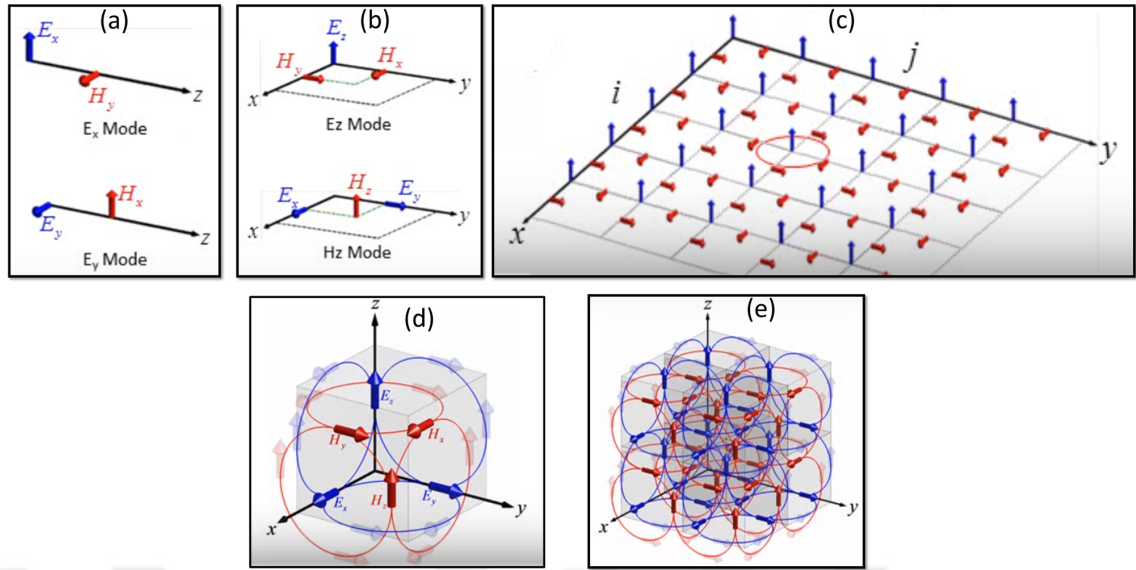
Şekil 2.58. Alanların dağılım gösterdiği 2 boyutlu bir uzay parçasının kesiklileştirilmesi

Şekil 2.59a'da 2 boyutlu bir uzay parçasının kesiklileştirilmesi ile oluşturulan grid yapıdaki bir tek birim hücre görülürken Şekil 2.59b'da ise 3 boyutlu bir uzay parçasının kesiklileştirilmesi ile oluşturulan grid yapıdaki bir tek birim hücre görülmektedir.



Şekil 2.59. Bir uzay parçasının kesiklileştirilmesi ile oluşturulan grid yapısı **a)** 2 boyut; **b)** 3 boyut

Şekil 2.60’de bir, iki ve üç boyutta birim hücre için alternatif seçimler, alan bileşenleri ile birlikte gösterilmektedir. Bu şekilde (a) 1 boyutlu birim hücre seçimi, (b) 2 boyutlu bir yapıda her iki boyuttan da birer tane tek birim hücre alınarak oluşturulan birim hücre seçimi, (c) 2 boyutlu bir yapıda her iki boyuttan da dörder tane tek birim hücre alınarak oluşturulan birim hücre seçimi, (d) 3 boyutlu bir yapıda her üç boyuttan da birer tane tek birim hücre alınarak oluşturulan birim hücre seçimi ve (e) 3 boyutlu bir yapıda her üç boyuttan da ikişer tane tek birim hücre alınarak oluşturulan birim hücre seçimi verilmiştir.



Şekil 2.60. Alan bileşenleri ile birlikte bir, iki ve üç boyutta birim hücre için alternatif seçimler **a)** Bir boyutta birim hücre; **b)** 1×1 şeklinde iki boyutlu birim hücre; **c)** 4×4 şeklinde iki boyutlu birim hücre; **d)** $1 \times 1 \times 1$ şeklinde üç boyutlu birim hücre; **e)** $2 \times 2 \times 2$ şeklinde üç boyutlu birim hücre

FDTD için Hesaplamalarda Kullanılacak Olan Eşitlik Setleri

Genel olarak üç boyutlu, diyagonal ve anizotropik bir materyal için normalize manyetik alan cinsinden Maxwell denklemleri sonlu eşitliklerinden elde edilen büyüklük bakımından Faraday yasasından gelen eşitlik seti eşitlik (2.71)'de ve Maxwell-Ampere yasasından gelen eşitlik seti ise eşitlik (2.72)'deki gibidir.

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} &= -\frac{\mu_{xx}}{c_0} \frac{\partial \tilde{H}_x}{\partial t} \\
 \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} &= -\frac{\mu_{yy}}{c_0} \frac{\partial \tilde{H}_y}{\partial t} \\
 \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} &= -\frac{\mu_{zz}}{c_0} \frac{\partial \tilde{H}_z}{\partial t}
 \end{aligned} \tag{2.71}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{H}_z}{\partial y} - \frac{\partial \tilde{H}_y}{\partial z} &= \frac{\varepsilon_{xx}}{c_0} \frac{\partial E_x}{\partial t} \\
\frac{\partial \tilde{H}_x}{\partial z} - \frac{\partial \tilde{H}_z}{\partial x} &= \frac{\varepsilon_{yy}}{c_0} \frac{\partial E_y}{\partial t} \\
\frac{\partial \tilde{H}_y}{\partial x} - \frac{\partial \tilde{H}_x}{\partial y} &= \frac{\varepsilon_{zz}}{c_0} \frac{\partial E_z}{\partial t}
\end{aligned} \tag{2.72}$$

Böylelikle hem uzayda hem de zamanda SFDE olma özelliğini sağlayabilecek olan Faraday yasasının sonlu eşitlikleri eşitlik (2.73) ve Maxwell-Ampere yasasının sonlu eşitlikleri ise eşitlik (2.74)'daki gibi olur.

$$\begin{aligned}
\frac{E_z^{i,j+1,k} \Big|_t - E_z^{i,j,k} \Big|_t}{\Delta y} - \frac{E_y^{i,j,k+1} \Big|_t - E_y^{i,j,k} \Big|_t}{\Delta z} &= -\frac{\mu_{xx}^{i,j,k}}{c_0} \frac{\tilde{H}_x^{i,j,k} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_x^{i,j,k} \Big|_{t-\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \\
\frac{E_x^{i,j,k+1} \Big|_t - E_x^{i,j,k} \Big|_t}{\Delta z} - \frac{E_z^{i+1,j,k} \Big|_t - E_z^{i,j,k} \Big|_t}{\Delta x} &= -\frac{\mu_{yy}^{i,j,k}}{c_0} \frac{\tilde{H}_y^{i,j,k} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_y^{i,j,k} \Big|_{t-\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \\
\frac{E_y^{i+1,j,k} \Big|_t - E_y^{i,j,k} \Big|_t}{\Delta x} - \frac{E_x^{i,j+1,k} \Big|_t - E_x^{i,j,k} \Big|_t}{\Delta y} &= -\frac{\mu_{zz}^{i,j,k}}{c_0} \frac{\tilde{H}_z^{i,j,k} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_z^{i,j,k} \Big|_{t-\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t}
\end{aligned} \tag{2.73}$$

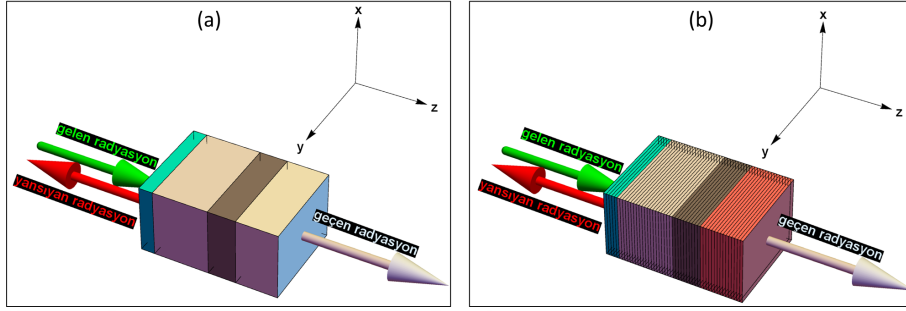
$$\begin{aligned}
\frac{\tilde{H}_z^{i,j,k} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_z^{i,j-1,k} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta y} - \frac{\tilde{H}_y^{i,j,k} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_y^{i,j,k-1} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta z} &= \frac{\varepsilon_{xx}^{i,j,k}}{c_0} \frac{E_x^{i,j,k} \Big|_{t+\Delta t} - E_x^{i,j,k} \Big|_t}{\Delta t} \\
\frac{\tilde{H}_x^{i,j,k} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_x^{i,j,k-1} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta z} - \frac{\tilde{H}_z^{i,j,k} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_z^{i-1,j,k} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta x} &= \frac{\varepsilon_{yy}^{i,j,k}}{c_0} \frac{E_y^{i,j,k} \Big|_{t+\Delta t} - E_y^{i,j,k} \Big|_t}{\Delta t} \\
\frac{\tilde{H}_x^{i,j,k} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_y^{i-1,j,k} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta x} - \frac{\tilde{H}_x^{i,j,k} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_x^{i,j-1,k} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta y} &= \frac{\varepsilon_{zz}^{i,j,k}}{c_0} \frac{E_z^{i,j,k} \Big|_{t+\Delta t} - E_z^{i,j,k} \Big|_t}{\Delta t}
\end{aligned} \tag{2.74}$$

Burada bir boyutlu bazı PhC yapıları için örnekler ve detaylı hesaplamalar verilecektir. Bu nedenle son elde edilen eşitlik setleri bir boyutlu yapılar için daha sade görünmesi adına tekrar yazılacaktır.

Bir Boyutlu PhC için FDTD Hesaplamaları

Şekil 2.61a'de dielektrikliğin sadece z boyutunda değiştiği bir boyutlu bir yapı

görülmektedir. Hesaplamalar için temel motivasyon bu sürekli yapıyı Şekil 2.61b'deki gibi ızgara (grid) şeklinde bölmek, ve buna göre daha önce yazılmış olan kesiklileştirilmiş eşitlikleri kullanarak alan dağılımlarını, yansıma ve geçme spektrumlarını elde etmektir.



Şekil 2.61. a) Dielektrikliğin sadece z boyutunda değiştiği katmanlı bir boyutlu yapı; b) Bu yapının ızgara (grid) halde düşünülmesiyle elde edilen yapı

Şekil 2.61'de x ve y boyutlarında dielektriklikte herhangi bir değişim yoktur ve bu nedenle $\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} = 0$ 'dır. Eşitlik (2.73) ve eşitlik (2.74)'daki eşitliklerin buna göre bir boyut için yeniden dizaynı eşitlik (2.75) ve eşitlik (2.76)'deki gibi olur.

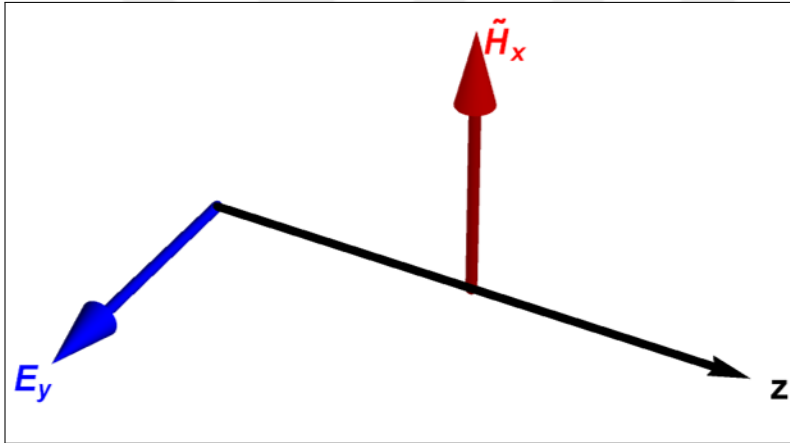
$$\begin{aligned}
 -\frac{E_y^{i,j,k+1}\big|_t - E_y^{i,j,k}\big|_t}{\Delta z} &= -\frac{\mu_{xx}^{i,j,k} \tilde{H}_x^{i,j,k}\big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_x^{i,j,k}\big|_{t-\frac{\Delta t}{2}}}{c_0 \Delta t} \\
 \frac{E_x^{i,j,k+1}\big|_t - E_x^{i,j,k}\big|_t}{\Delta z} &= -\frac{\mu_{yy}^{i,j,k} \tilde{H}_y^{i,j,k}\big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_y^{i,j,k}\big|_{t-\frac{\Delta t}{2}}}{c_0 \Delta t} \\
 0 &= \tilde{H}_z^{i,j,k}
 \end{aligned} \tag{2.75}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{\tilde{H}_y^{i,j,k}\big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_y^{i,j,k-1}\big|_{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta z} &= \frac{\varepsilon_{xx}^{i,j,k} E_x^{i,j,k}\big|_{t+\Delta t} - E_x^{i,j,k}\big|_t}{c_0 \Delta t} \\
 \frac{\tilde{H}_x^{i,j,k}\big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_x^{i,j,k-1}\big|_{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta z} &= \frac{\varepsilon_{yy}^{i,j,k} E_y^{i,j,k}\big|_{t+\Delta t} - E_y^{i,j,k}\big|_t}{c_0 \Delta t} \\
 0 &= E_z^{i,j,k}
 \end{aligned} \tag{2.76}$$

Eşitlik sistemi (2.75)'deki ilk eşitlik ve eşitlik sistemi (2.76)'deki ikinci eşitlik E_y ve $\tilde{H}_x$ bileşenlerini içermektedir ve bu ikisi birlikte $E_y/\tilde{H}_x$ modunu meydana getirirler. Diğer

yandan eşitlik sistemi (2.75)'deki ikinci eşitlik ve eşitlik sistemi (2.76)'deki ilk eşitlik E_x ve $\tilde{H}_y$ bileşenlerini içermektedir ve bu ikisi birlikte $E_x/\tilde{H}_y$ modunu meydana getirirler. Bundan sonraki hesaplamalar $E_y/\tilde{H}_x$ modu için devam edecektir. Eşitlik(2.77) bu modun sonlu eşitliklerini ve Şekil 2.62 ise bu modun bileşenlerini göstermektedir. x ve y boyutları iptal edildiği için bu doğrultulardaki grid hücreleri de söz konusu olmaz ve koordinat üst indisleri sadece k bağımlı olurlar.

$$\begin{aligned} -\frac{E_y^{k+1}|_t - E_y^k|_t}{\Delta z} &= -\frac{\mu_{xx}^k}{c_0} \frac{\tilde{H}_x^k|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_x^k|_{t-\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta t} \\ \frac{\tilde{H}_x^k|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_x^{k-1}|_{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta z} &= \frac{\varepsilon_{yy}^k}{c_0} \frac{E_y^k|_{t+\Delta t} - E_y^k|_t}{\Delta t} \end{aligned} \quad (2.77)$$



Şekil 2.62. Bir boyutta $E_y/\tilde{H}_x$ modu bileşenleri

Böylece FDTD hesaplamalarında kullanılacak olan elektrik ve manyetik alan sonlu eşitlikleri sırasıyla eşitlik (2.78) ve eşitlik (2.79)'daki gibi olur.

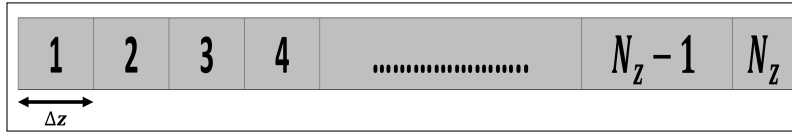
$$E_y^k|_{t+\Delta t} = E_y^k|_t + m_{E_y}^k \left(\frac{\tilde{H}_x^k|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_x^{k-1}|_{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta z} \right) \quad (2.78)$$

$$\tilde{H}_x^k|_{t+\frac{\Delta t}{2}} = \tilde{H}_x^k|_{t-\frac{\Delta t}{2}} + m_{H_x}^k \left(\frac{E_y^{k+1}|_t - E_y^k|_t}{\Delta z} \right) \quad (2.79)$$

Burada $m_{E_y}^k = \frac{c_0 \Delta t}{\varepsilon_{yy}^k}$ ve $m_{H_x}^k = \frac{c_0 \Delta t}{\mu_{xx}^k}$ dir.

Bir boyutlu PhC için Grid Uzay ve Drichlet Sınır Koşulları

Şekil 2.63’de toplam N_z tane birim hücreden oluşan 1 boyutta grid uzay görülmektedir.



Şekil 2.63. N_z tane birim hücreden oluşan 1 boyutta grid uzay

Eşitlik (2.78)’de $k = 1$ için sıfıncı hücredeki manyetik alan bileşeni ve eşitlik (2.79)’da ise $k = N_z$ için $N_z + 1$ -inci hücredeki elektrik alan bileşeni varlıklarını göstermektedir. Fakat grid yapı içinde sıfıncı veya $N_z + 1$ -inci hücreler söz konusu değildir. Bu hücrelerdeki alanların sıfıra eşitlenmesi ile problemin çözümü Drichlet sınır koşullarının uygulanması demektir. Drichlet sınır koşulları ile birlikte eşitlikler (2.80) ve (2.81)’deki gibi olur.

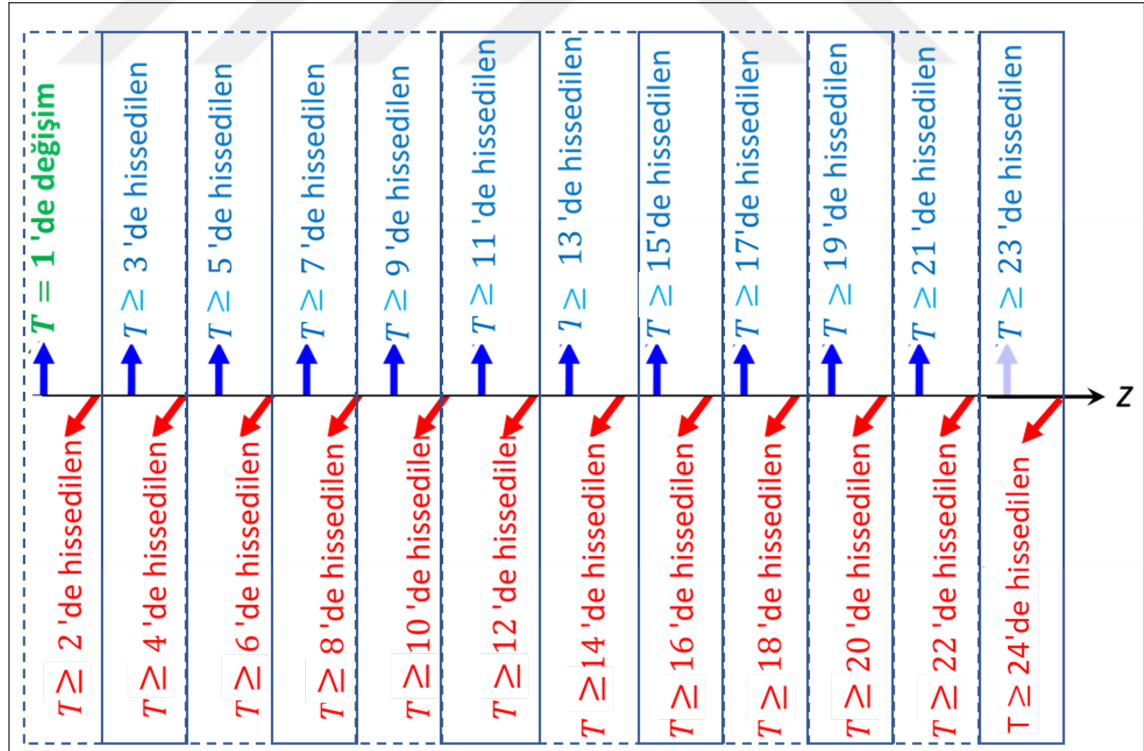
$$\begin{cases} E_y^k|_{t+\Delta t} = E_y^k|_t + m_{E_y}^k \left(\frac{\tilde{H}_x^k|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_x^{k-1}|_{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta z} \right), & k > 1 \\ E_y^k|_{t+\Delta t} = E_y^k|_t + m_{E_y}^k \left(\frac{\tilde{H}_x^k|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - 0}{\Delta z} \right), & k = 1 \end{cases} \quad (2.80)$$

$$\begin{cases} \tilde{H}_x^k|_{t+\frac{\Delta t}{2}} = \tilde{H}_x^k|_{t-\frac{\Delta t}{2}} + m_{H_x}^k \left(\frac{E_y^{k+1}|_t - E_y^k|_t}{\Delta z} \right), & k < N_z \\ \tilde{H}_x^k|_{t+\frac{\Delta t}{2}} = \tilde{H}_x^k|_{t-\frac{\Delta t}{2}} + m_{H_x}^k \left(\frac{0 - E_y^k|_t}{\Delta z} \right), & k = N_z \end{cases} \quad (2.81)$$

Drichlet Sınır Koşulları hesaplamalar için ilgi alanı olan grid uzayın içinde kalmayı sağlar.

Sürekli ve Kesikli Alan Yayılımlarının Uyumu-Güvenilirlik Koşulu

FDTD'de zaman artış adımı olan Δt süresi, "Courant koşulu" olarak bilinen kararlılık koşulu ile sınırlıdır (Taflove ve Hagness 2000). n kırılma indisli bir materyalde Δt süresi içinde elektromanyetik dalganın kat edeceği mesafe (gerçekte olan) $c_0\Delta t/n$ kadar olacaktır. FDTD hesaplamaları için yukarıda bahsedilen grid uzayında ise Δt süresi içinde kat edilen nümerik mesafe bir tek birim hücre uzunluğu olan Δz mesafesidir. Bu durumda gerçek (fiziksel) anlamdaki $c_0\Delta t/n$ mesafesi nümerik Δz mesafesinden büyük olmamalıdır. Yani $\frac{c_0\Delta t}{n} < \Delta z$ olmalıdır. Bu da bize nümerik hesaplamalarda kullanacağımız Δt zaman adımı için $\Delta t < \frac{n\Delta z}{c_0}$ şeklinde bir üst limit verir. Diğer yandan eşitlik (2.80) ve eşitlik (2.81)'e bakılırsa elektrik alanın Δt 'nin tam katlarında ve manyetik alanın ise buçuklu katlarında varlığını sürdürdükleri anlaşılır. Buradan da anlaşılır ki bir k noktasındaki elektrik alanda meydana gelen bir değişiklik (disturbance) bir sonraki $k + 1$ noktasında bulunan elektrik alan noktasında hissedilmesi için en azından iki zaman adımı $> 2\Delta t$ geçmesi gerekir. Bu durum Şekil 2.64'de resmedilmektedir.



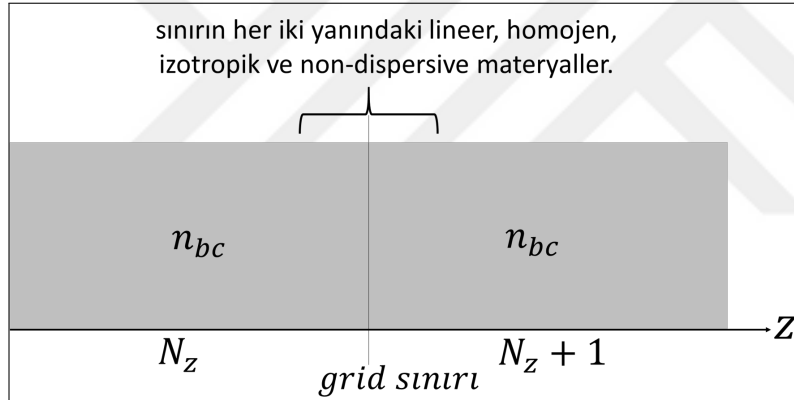
Şekil 2.64. Zaman bakımından elektrik alan (mavi oklar) ve manyetik alan (kırmızı oklar) bileşenleri arasındaki yayılım ilişkisi (Rumpf 2015)

Böylece bir boyuttaki inceleme için eşitlik (2.82) ile verilen en genel güvenilirlik koşulu ortaya çıkar. Burada n_{min} parametresi grid içindeki olası en küçük kırılma indisli materyali ifade eder.

$$\Delta t < \frac{n_{min} \Delta z}{2c_0} \quad (2.82)$$

Mükemmel Sınır Koşulları

Eğer grid sınırın her iki yanındaki materyaller Şekil 2.65’da gösterildiği gibi lineer, homojen, izotropik ve dağıtıcı değilse (nondispersive), elektromanyetik alan sadece sınırların dışına doğru hareket ediyor demektir (Rumpf 2015).

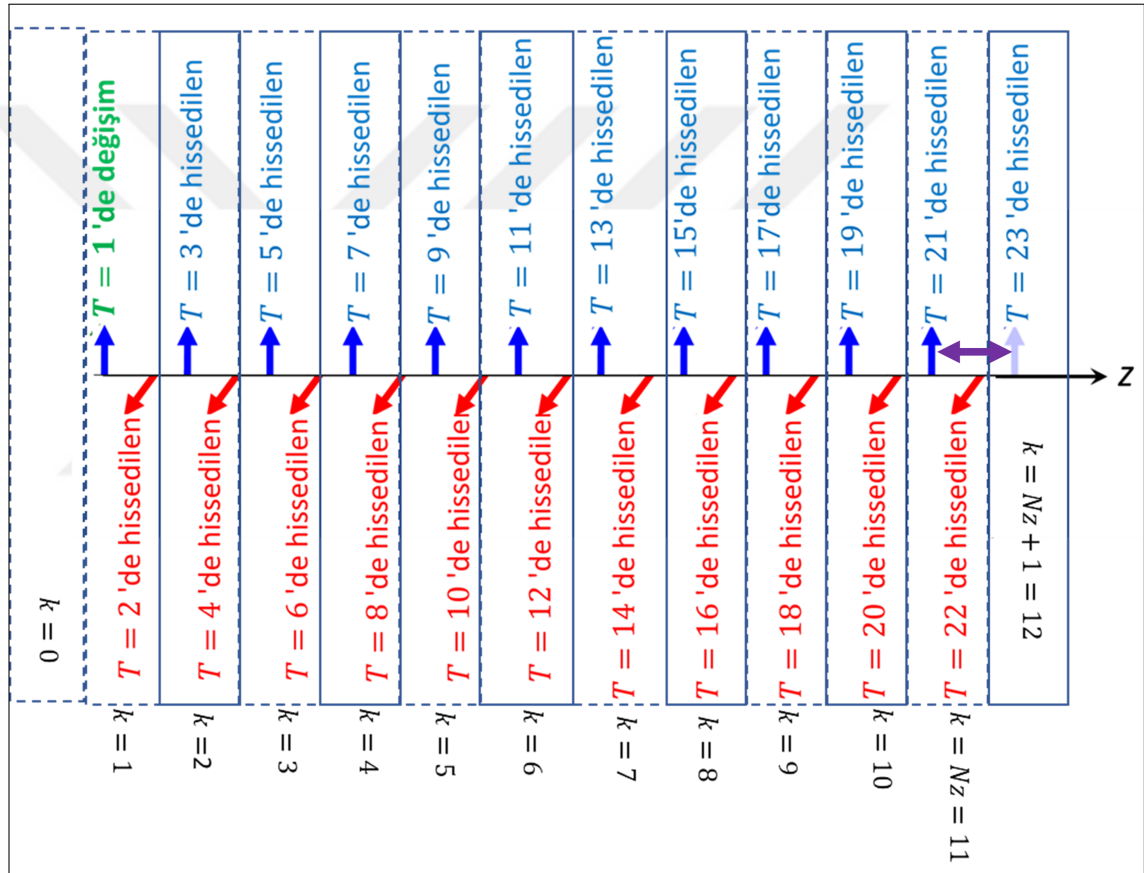


Şekil 2.65. Elektromanyetik alanın sadece sınırların dışına doğru hareket edişini garanti edecek olan sınır materyal özellikleri (Rumpf 2015)

Böylece daha önce belirtilen güvenlik koşuluna uygun olarak elektromanyetik dalgadaki bir değişimin (disturbance) bir sonraki noktada hissedilmesi için $2\Delta t$ süre geçmesi gerektiği ele alınarak devam edilirse, grid sınırları için eşitlik (2.83)’de verilen mükemmel sınır koşulları elde edilir. Elektromanyetik alanın sadece sınırların dışına doğru hareket ediyorsa sınırın her iki yanındaki materyallerin Şekil 2.65’deki gibi lineer, homojen, izotropik ve non-dispersive olduğunu ve buna bağlı olarak grid sınırının her iki yanında kırılma indisinin aynı n_{bc} değerine eşit olduğunu da göz önüne alarak diyebiliriz ki: Bir t anında grid sınırının hemen dışındaki $N_z + 1$ noktasındaki elektrik alan bileşeni,

grid sınırının hemen öncesindeki N_z noktasındaki elektrik alan bileşeninin $t - 2\Delta t$ anındaki değerini hissetmiştir. Bu durum 11 tane birim hücreye sahip bir grid yapı üzerinde $\Delta t = 1$ senaryosuyla Şekil 2.66'da resmedilmektedir.

$$\begin{aligned} E_y^{N_z+1} \Big|_t &= E_y^{N_z} \Big|_{t-2\Delta t} \\ \tilde{H}_x^0 \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} &= \tilde{H}_x^1 \Big|_{t-\frac{3\Delta t}{2}} \end{aligned} \quad (2.83)$$



Şekil 2.66. Elektromanyetik dalgadaki bir değişimin (disturbance) bir sonraki noktada hissedilmesi için $2\Delta t$ süre geçmesi gerektiği ele alındığında alan bileşenleri arasındaki yayılım ilişkisi ve mükemmel sınır koşulu (Rumpf 2015)

Böylece mükemmel sınır koşulları ile birlikte eşitlikler (2.84) ve (2.85)'deki gibi olur.

$$\begin{cases} E_y^k|_{t+\Delta t} = E_y^k|_t + m_{E_y}^k \left(\frac{\tilde{H}_x^k|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_x^{k-1}|_{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta z} \right), & k > 1 \\ E_y^k|_{t+\Delta t} = E_y^k|_t + m_{E_y}^k \left(\frac{\tilde{H}_x^k|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_x^1|_{t-\frac{3\Delta t}{2}}}{\Delta z} \right), & k = 1 \end{cases} \quad (2.84)$$

$$\begin{cases} \tilde{H}_x^k|_{t+\frac{\Delta t}{2}} = \tilde{H}_x^k|_{t-\frac{\Delta t}{2}} + m_{H_x}^k \left(\frac{E_y^{k+1}|_t - E_y^k|_t}{\Delta z} \right), & k < N_z \\ \tilde{H}_x^k|_{t+\frac{\Delta t}{2}} = \tilde{H}_x^k|_{t-\frac{\Delta t}{2}} + m_{H_x}^k \left(\frac{E_y^{N_z}|_{t-2\Delta t} - E_y^k|_t}{\Delta z} \right), & k = N_z \end{cases} \quad (2.85)$$

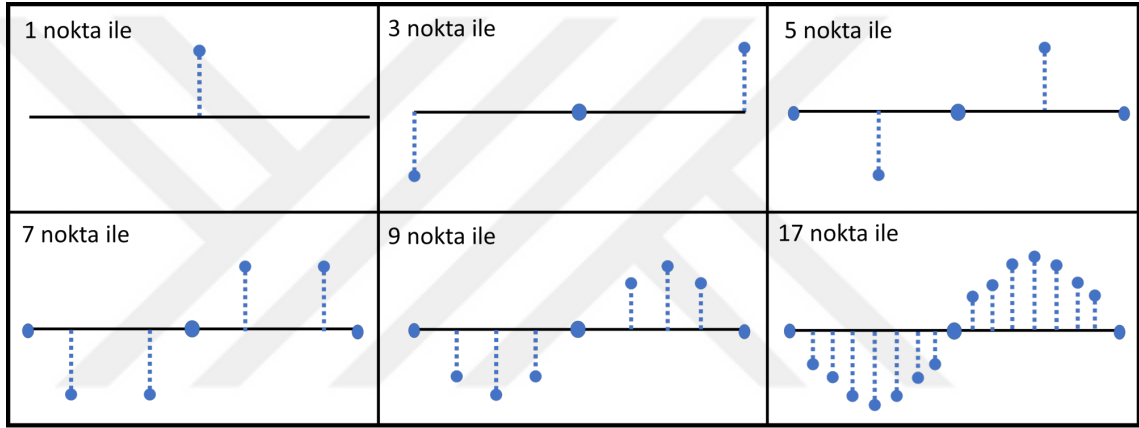
Grid Çözünürlüğü

Temel amaç tasarlanılan PhC üzerine gelecek olan elektromanyetik dalganın araç içinde nasıl dağılım göstereceği hakkında fikir sahibi olmaktır. Öyleyse bu elektromanyetik dalgaların uzunluk boyutunda olan dalga boylarının, modellenen grid yapıya giriciliğine izin verilmelidir ki simülasyonlarda görülecek sonuçlar gerçeği yansıtabilsin. Genellikle belli bir dalgaboyu aralığındaki elektromanyetik dalgaların yapıya girdiğinde neler olup bittiği modellenmek istenir. Bu durum, grid yapının çözünürlüğünü ayarlarken bu dalga boylarını dikkate almayı gerektirir. Örneğin boş uzaydaki frekansları $[f_0^{free}, f_{max}^{free}]$ aralığında olan elektromanyetik dalgalar, simülasyonda modellenmek istensin. Bu durumda bu elektromanyetik dalgalardan dalga boyu en küçük olanın dalga boyu $\lambda_{min} = \frac{c_0}{f_{max}^{free}}$ olacaktır. Bilindiği gibi boş uzaydaki bu değerin yapının kırılma indisine bölünmesi ile yapı içindeki dalga boyu değeri elde edilebilir. Fakat, mümkün olabilecek en genel durumun göz önüne alındığı ve grid yapının farklı kırılma indislerine sahip materyallerden oluşabileceği düşünülürse; n_{max} grid yapıdaki materyallerden kırılma indisi en yüksek olanının kırılma indisi değeri olmak üzere modelde görülebilecek mümkün olan en kısa dalga boyu değeri $\lambda_{min} = \frac{\lambda_{min}^{free}}{n_{max}} = \frac{c_0}{f_{max}^{free} n_{max}}$ olur. İstenen şey bu minimum dalga boyunu en az 10 tane hücre üzerinden çözümlemektir. Diğer bir deyişle bu minimum dalga boyu değerinin en az 10 tane hücrenin boyutuna eşit olması, yani en az 10 tane hücre ile temsil edilmesi

istenir. Bu durumda, bahsedilen dalga boyunu çözmek (temsil edilmek) istenen hücre sayısı $N_\lambda \geq 10$ olmak üzere grid çözünürlüğüne, yani grid hücrelerinin bir tek boyutunun (bir tek boyut için Δz) ne olması gerektiğine dair ilk tahmin eşitlik (2.86)'daki gibi olur.

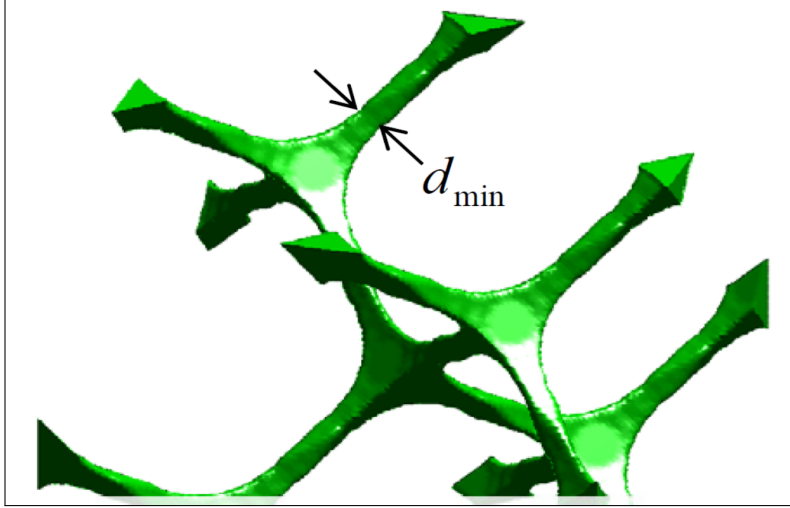
$$\Delta z \rightarrow \Delta_\lambda = \frac{\lambda_{min}}{N_\lambda} \quad (2.86)$$

Şekil 2.67'de farklı N_λ değerlerine göre dalga boyu yapısının belirgin oluşuna dair bir görüntü sergilenmektedir.



Şekil 2.67. Farklı N_λ değerlerine göre dalga boyu yapısı (Rumpf 2015)

Grid çözünürlüğüne dair dikkate alınması gereken ikinci şey üzerinde çalışılan yapıya dair mekanik özelliklerdir. Yapı karakteristik olarak farklı boyutlarda ve belki de çok çok küçük mekanik özelliklere sahip ayırt edici kısımlar barındırıyor olabilir. Bu özellikler içinden minimum olanı bulunup, ilk tahminde dalga boyu için yapıldığı gibi model buna göre çözümlenmelidir. Örneğin Şekil 2.68'de bir elmas örgüsünün birim hücresi görülmektedir ve görüldüğü gibi bu birim hücre içindeki karakteristik özelliklerden en küçüğü d_{min} kalınlığı ile gösterilen mekanik özelliktir.

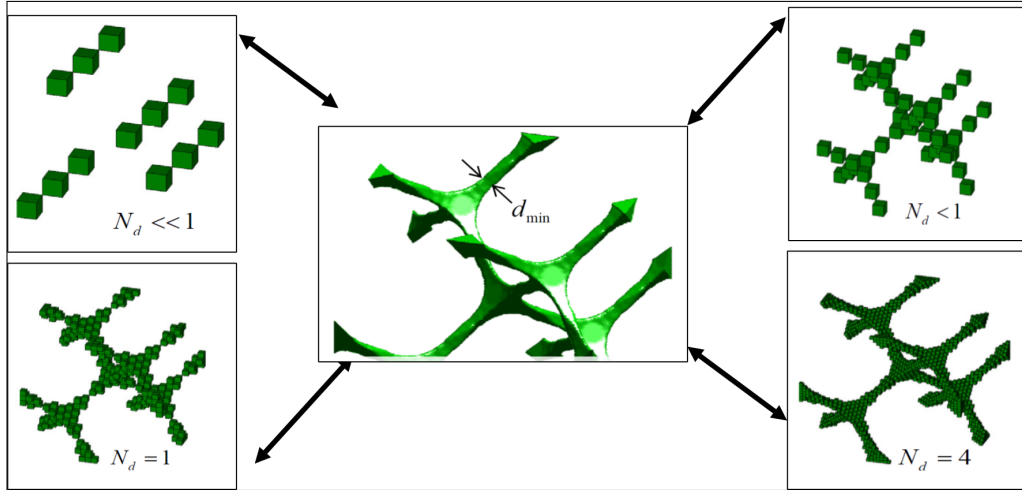


Şekil 2.68. Bir elmas örgüsünün birim hücresi (Rumpf 2015)

Tıpkı ilk tahminde dalga boyu için yapıldığı gibi burada da kaç tane hücrenin bu minimum özelliği temsil edeceğine karar verilmelidir. Olasılıkla en az bir tane hücre tercih edilir. Bahsedilen minimum değer (mekanik özellik), çözülmek (temsil edilmek) istenen hücre sayısı $N_d \geq 1$ olmak üzere grid çözünürlüğünde, yani grid hücrelerinin bir tek boyutunun (bir tek boyut için Δz) ne olması gerektiğine dair ikinci tahmin eşitlik (2.87)'daki gibi olur.

$$\Delta z \rightarrow \Delta_d = \frac{d_{min}}{N_d} \quad (2.87)$$

N_d 'nin farklı değerlerinin yapıyı temsil edebilirliği Şekil 2.69'de resmedilmektedir.



Şekil 2.69. N_d 'nin farklı değerlerinin yapıyı temsil edebilirliği (Rumpf 2015)

Böylece 1 boyutlu bir PhC için grid çözünürlüğü eşitlik (2.86) ve eşitlik (2.87) değerleri içinden en küçük değere göre ayarlanır. Durum eşitlik (2.88)'deki gibidir (Rumpf 2015).

$$\Delta z = \min(\Delta_\lambda, \Delta_d) \quad (2.88)$$

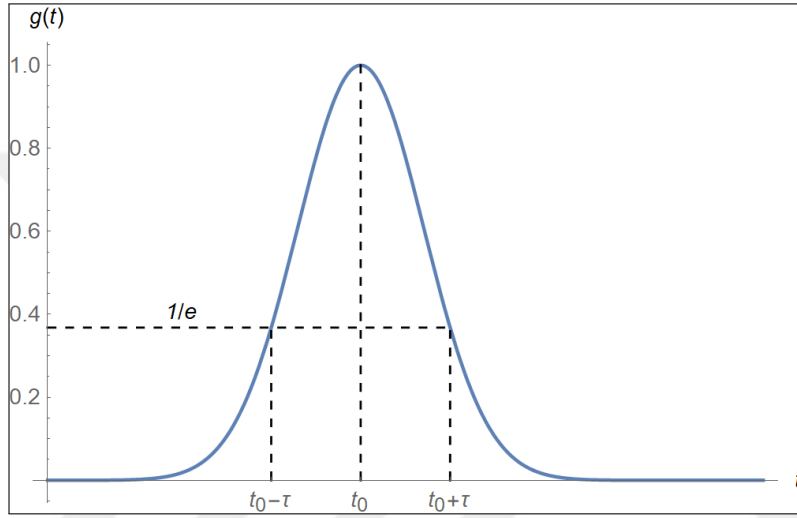
Grid çözünürlüğüne karar verilirken dikkate alınması gereken şey eşitlik (2.88)'deki haliyle elde edilen çözünürlüğün, modellenen aracın boyutunu tam sayı değerinde bir hücre adedi ile karşılayıp karşılayamayacağıdır. Yani PhC boyutu d kadar ise ve bir hücre boyutu eşitlik (2.88)'e göre karar verildiyse $d/\Delta z$ ifadesi PhC'yi kaplayan hücre sayısı olacaktır ve bunun bir tam sayı olması beklenir. Eğer sonuç bir tam sayı değilse bu sonuç kendisinden büyük olan en yakın tam sayıya yuvarlanır ve yeni çözünürlük değeri de bu değere göre belirlenir. Buna göre hücre sayısı eşitlik (2.89) ve buna uygun çözünürlük değeri de eşitlik (2.90)'deki gibi güncellenir.

$$N = \text{round} \uparrow \left(\frac{d}{\Delta z} \right) \quad (2.89)$$

$$\Delta z = \frac{d}{N} \quad (2.90)$$

FDTD Modellemelerinde Kullanılacak Uygun Elektromanyetik Dalga Kaynakları

Modellemede simülasyonlar uygun formdaki dalga kaynakları ile çalıştırılmalıdır. FDTD için Gausyen formlu dalga kaynakları uygundur. Kısa genişlikli bir Gausyen atma (puls) çok miktarda frekans aralığını barındıracaktır. Şekil 2.70’de bir Gausyen form görülmektedir. Zamana göre değişen dalga şiddet değeri eşitlik (2.91)’deki gibidir (Rumpf 2015).



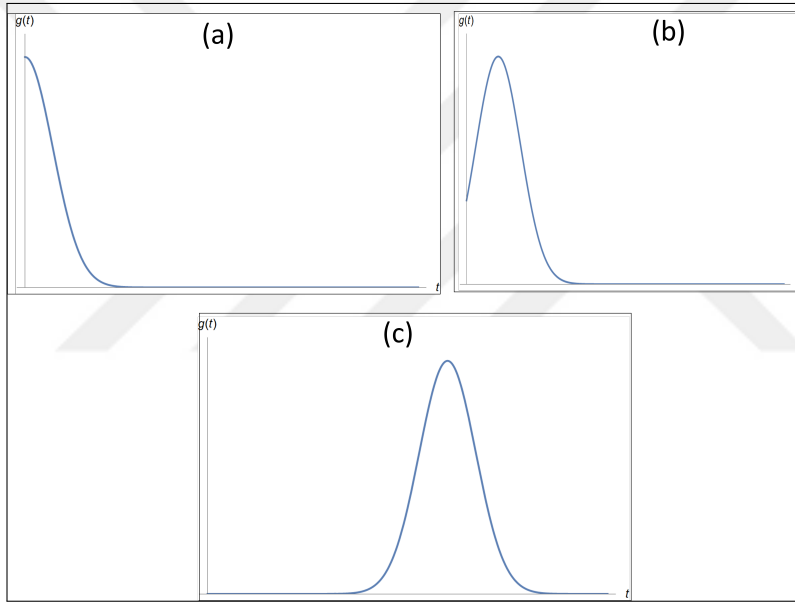
Şekil 2.70. Gausyen dalga formu

$$g(t) = e^{-\left(\frac{t-t_0}{\tau}\right)^2} \quad (2.91)$$

Burada τ , 2.70’den görüldüğü gibi puls genişliğinin bir ölçüsüdür. Görülebileceği gibi $1/e$ puls değerini veren iki zaman değeri olan $t_0 - \tau$ ve $t_0 + \tau$ zaman noktaları arasındaki fark 2τ kadarlık bir puls genişliğine karşılık gelir. Uygulamalarda kullanılabilecek makul τ değeri eşitlik (2.92) ile elde edilebilir. Burada yine f_{max} parametresi modellenen elektromanyetik dalgalar arasında en yüksek frekansın değeridir.

$$\tau \approx \frac{0.5}{f_{max}} \quad (2.92)$$

Nümerik anlamda her şeyin yolunda gitmesi için istenilen şey, puls'un sıfır değeri ile başlayıp yavaş yavaş artması ve daha sonra t_0 anında pik yaptıktan sonra da yavaş yavaş azalmasıdır. Yani tam anlamıyla ne solunda ne de sağında hiçbir adım (step) fonksiyon olmayan bir Gausyen puls formudur. Şekil 2.71'in (a), (b) ve (c) kısımlarında sırasıyla $t_0 = 0$, $t_0 = \tau$ ve $t_0 = 6\tau$ değerleri için Gausyen puls'ların durumları görülmektedir. Görülebileceği gibi (a) ve (b)'deki $t_0 = 0$ ve $t_0 = \tau$ için t_0 merkezinin sol taraflarında adım (step) fonksiyon oluşumu görülmektedir ve bu nedenle bu iki seçenek istenilenleri karşılamaz. Fakat (c)'deki $t_0 = 6\tau$ merkezi hiçbir şekilde adım fonksiyonu ile çevrelenmemiştir, puls değeri istenildiği gibi 0 ile başlayıp, yavaş yavaş artıp, t_0 değerinden sonra da yavaş yavaş azalmaktadır



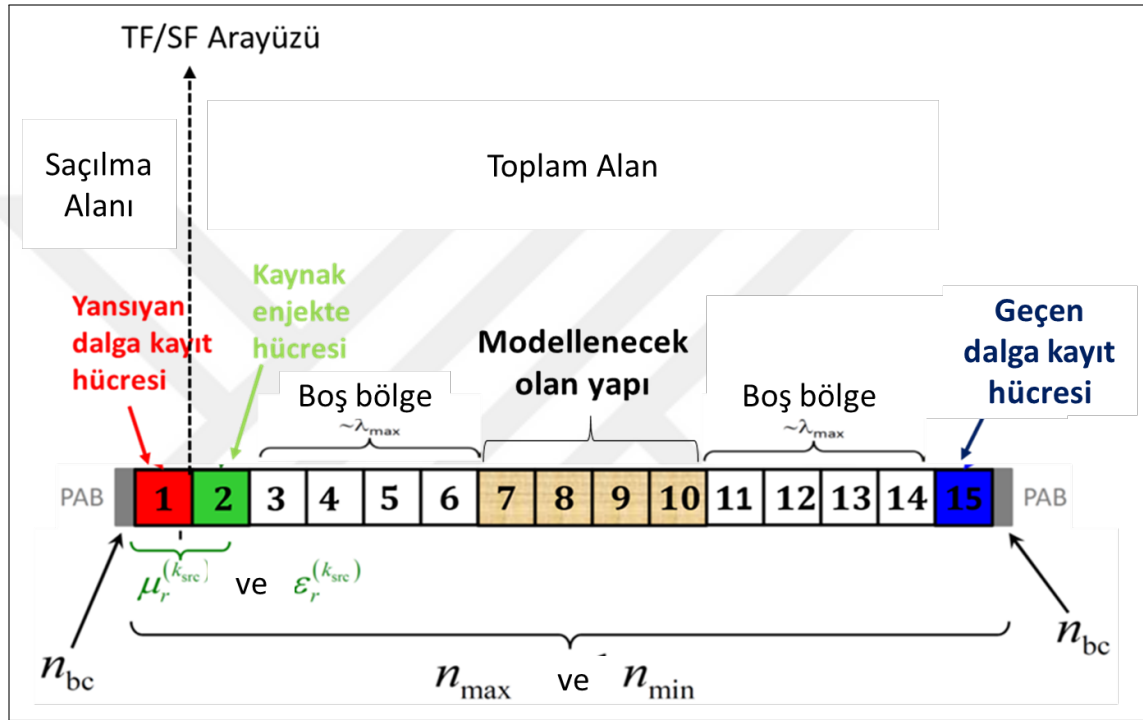
Şekil 2.71. Farklı t_0 değerleri için Gausyen puls durumları **a)** $t_0 = 0$ için; **b)** $t_0 = \tau$ için; **c)** $t_0 = 6\tau$ için

Modellemede kullanılacak bir elektromanyetik dalga kaynağından beklenenler aşağıdaki gibidir:

- Tek yönde ilerleyen ve ortam değişmedikçe değişmeyen bir form olmalı
- Grid sınırlarında sonsuza gitmeli
- Ortam değişikliği nedeniyle yansımalar olduğunda karşıt yönlerden gelerek karşılaşan dalgalar aynı ortam içinde birbiri içinden değişikliğe uğramadan

transparan bir şekilde geçmeli.

Tüm bu koşulları sağlayabilecek dalga kaynağı **Toplam Alan / Saçılmış Alan (Total Field/Scattered Field Soft Source–TF/SF)** olarak adlandırılan alan kaynağıdır. Bu uygulamada grid uzay temelde iki ana bölgeye ayrılır. İlk bölge saçılma alanı iken ikinci bölge toplam alan bölgesidir. Şekil 2.72’de toplam 15 birim hücreden oluşan bir grid uzay üzerindeki bölgeler ve ilgili birim hücreler gösterilmektedir.

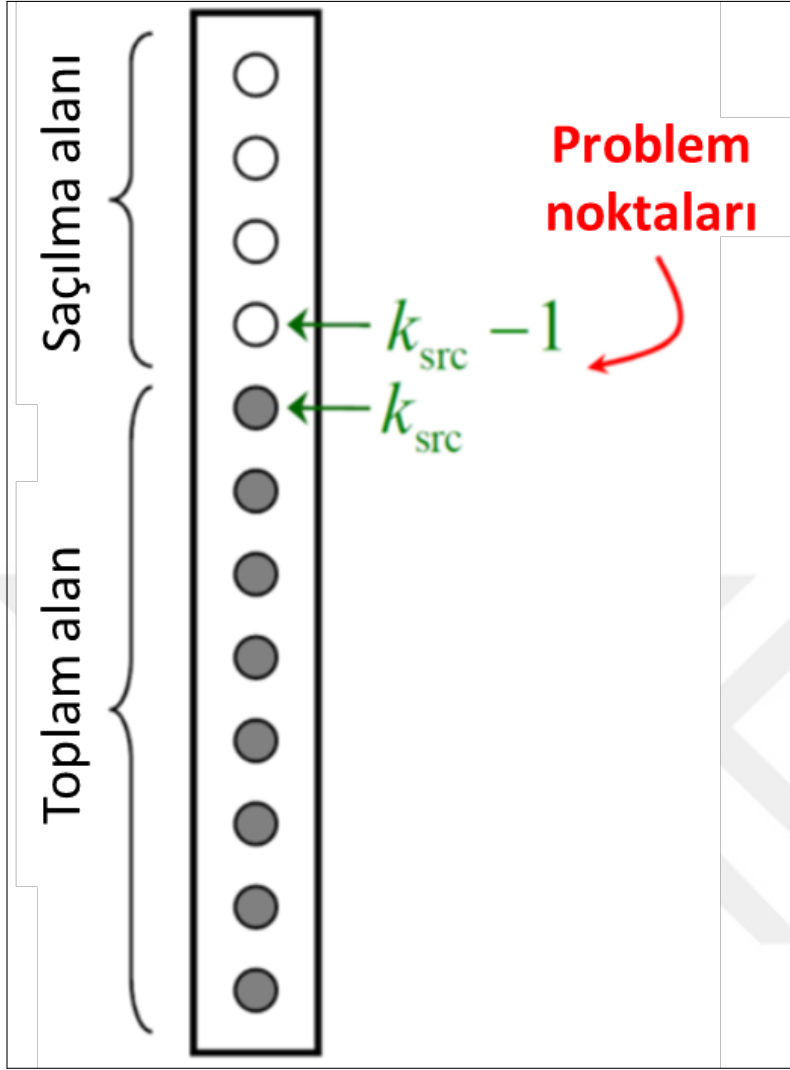


Şekil 2.72. TF/SF’ye göre biçimlendirilmiş grid uzay

Şekil 2.72’de [7 – 10] aralığındaki hücrelerde modellemesi yapılacak olan araç yerleştirilmiştir. [1 – 6] aralığındaki ve [11 – 15] aralığındaki hücreler ise modellemesi yapılacak olan aracı çevreleyen çevre materyale ait hücrelerdir. 1. hücre yansıyan dalga kayıt hücresi, 2. hücre Gausyen formülü dalga kaynağının enjekte edildiği hücre ve 15., yani son hücre ise geçen dalga kayıt hücresidir.

TF/SF Manyetik ve Elektrik Alan Düzeltmesi

Şekil 2.73’de $k_{src} - 1$ ile kodlanmış olan kaynak noktası için eşitlik (2.85)’deki manyetik alan eşitliği eşitlik (2.93)’deki gibidir.



Şekil 2.73. TF/SF içinde kaynak noktası etrafında grid uzay

$$\tilde{H}_x^{k_{src}-1} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} = \tilde{H}_x^{k_{src}-1} \Big|_{t-\frac{\Delta t}{2}} + m_{H_x}^{k_{src}-1} \left(\frac{red E_y^{k_{src}} \Big|_t - E_y^{k_{src}-1} \Big|_t}{\Delta z} \right) \quad (2.93)$$

Şekil 2.73 ve eşitlik (2.93) birlikte kontrol edilirse eşitlik (2.93)'de kırmızı ile gösterilen ve SF içinde kalan diğer tüm terimlerinin aksine, bir adet TF alanından terim barındırır. Bu terim eşitlik (2.94)'de gösterildiği gibi kaynak (src) ve saçılma (scctr) alanlarından oluşur

$$E_y^{k_{src}} \Big|_t = \left(E_y^{k_{src}} \Big|_t \right)_{src} + \left(E_y^{k_{src}} \Big|_t \right)_{scctr} \quad (2.94)$$

Öyleyse k_{src} hücresindeki alanın saçılmayla ilgili olan, yani eşitlik (2.93)'i ilgilendiren kısmı eşitlik (2.94)'nin sağ tarafındaki ikinci terimdir. Bu durumda eşitlik (2.93), düzeltilmiş halde eşitlik (2.95)'ye evrilmelidir.

$$\tilde{H}_x^{k_{src}-1} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} = \tilde{H}_x^{k_{src}-1} \Big|_{t-\frac{\Delta t}{2}} + m_{H_x}^{k_{src}-1} \left(\frac{E_y^{k_{src}} \Big|_t - (E_y^{k_{src}} \Big|_t)_{src} - E_y^{k_{src}-1} \Big|_t}{\Delta z} \right) \quad (2.95)$$

Eşitlik (2.96)'de $(E_y^{k_{src}} \Big|_t)$ terimi dışarı alınırsa son olarak eşitlik (2.96) elde edilmiş olur.

$$\tilde{H}_x^{k_{src}-1} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} = \tilde{H}_x^{k_{src}-1} \Big|_{t-\frac{\Delta t}{2}} + m_{H_x}^{k_{src}-1} \left(\frac{E_y^{k_{src}} \Big|_t - E_y^{k_{src}-1} \Big|_t}{\Delta z} \right) - \frac{m_{H_x}^{k_{src}-1}}{\Delta z} (E_y^{k_{src}} \Big|_t)_{src} \quad (2.96)$$

Benzer şekilde kaynak noktası etrafında elektrik alan eşitliği de kontrol edildiğinde aynı sebeplerden dolayı bir düzeltmeye ihtiyaç olduğu görülecektir. Elektrik alan eşitliğinin kaynak noktasındaki düzeltilmiş son hali ise eşitlik (2.97)'daki gibi olur.

$$E_y^{k_{src}} \Big|_{t+\Delta t} = E_y^{k_{src}} \Big|_t + m_{E_y}^{k_{src}} \left(\frac{\tilde{H}_x^{k_{src}} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} - \tilde{H}_x^{k_{src}-1} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}}}{\Delta z} \right) - \frac{m_{E_y}^{k_{src}}}{\Delta z} (\tilde{H}_x^{k_{src}-1} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}})_{src} \quad (2.97)$$

Diğer yandan eşitlik (2.96) ve eşitlik (2.97) nedeniyle ilgilenilmesi gereken iki tane kaynak terim söz konusudur bunlar TF alanında bulunan $(E_y^{k_{src}} \Big|_t)_{src}$ ve SF alanında bulunan $(\tilde{H}_x^{k_{src}-1} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}})_{src}$ terimleridir. Bu iki fonksiyonun ait olduğu hücreler farklı taraflarda bulundukları için ve elektrik alan ve manyetik alan da ortamın empedansı ile ilişkili oldukları için bu iki fonksiyon farklı genliklere sahip olabilirler. Yani görüldüğü gibi bu iki fonksiyon farklı zamanlarda ve farklı konumlarda varlıklarını sürdürürler. Bu gözlemlerin tümü dikkate alınarak bu iki fonksiyon yorumlanmalıdır. Genliklerin ne durumda olacağını görmek için işin en başında kullandığımız Maxwell eşitliklerine geri dönülmelidir. $E_y/\tilde{H}_x$ modu için $\frac{\partial \tilde{H}_x(t)}{\partial z} = \frac{\varepsilon_r}{c_0} \frac{\partial E_y(t)}{\partial t}$ idi. Genlik ilişkileri hakkında bilgi istendiği için alanların sinüsoidal dalgalar olduğu düşünülüp işlem yapılabilir. Buna göre

manyetik alanın farklı bir A genliğine sahip olabileceği düşünülerek aynı zamansal frekans terimi (ω) ve aynı uzaysal frekans terimine (β) sahip fakat bir ϕ faz farkı barındıran alan eşitlikleri eşitlik (2.98) ile verilebilir.

$$\begin{aligned} E_y(t) &= \sin(\omega t - \beta z) \\ \tilde{H}_x(t) &= A \sin(\omega t - \beta z - \phi) \end{aligned} \quad (2.98)$$

Bu iki dalga $\frac{\partial \tilde{H}_x(t)}{\partial z} = \frac{\varepsilon_r}{c_0} \frac{\partial E_y(t)}{\partial t}$ de kullanılırsa A genliği ve ϕ faz farkının eşitlik (2.99)'deki gibi olduğu görülür.

$$\begin{aligned} A &= -\sqrt{\frac{\varepsilon_{r,src}}{\mu_{r,src}}} \\ \phi &= 0 \end{aligned} \quad (2.99)$$

Bu durumda daha önce kullanılan formda bir $g(t)$ Gaussien kaynağı için kaynak terimler eşitlik (2.100)'deki gibi

$$\begin{aligned} \left(E_y^{k_{src}} \right)_{src} \Big|_t &= g(t) \\ \left(\tilde{H}_x^{k_{src}-1} \right)_{src} \Big|_{t+\frac{\Delta t}{2}} &= -\sqrt{\frac{\varepsilon_{r,src}}{\mu_{r,src}}} g \left(t + \frac{n_{src} \Delta z}{2c_0} + \frac{\Delta t}{2} \right) \end{aligned} \quad (2.100)$$

Burada $\frac{n_{src} \Delta z}{2c_0}$ terimi bir grid hücrenin yarısından gelen gecikme iken $\frac{\Delta t}{2}$ terimi ise yarım Δt adımı nedeniyle gelen gecikmeyi temsil etmektedir.

İyi Bir Simülasyon için Gereken İterasyon Sayısı Tahmini

Öncelikle dikkate alınması gereken birkaç şey vardır. Bunlardan ilki üzerinde modelleme yapılan cihazın tipidir. Eğer yüksek rezonanslı bir cihaz söz konusu ise çok fazla sayıda iterasyon gerekir. Çünkü enerji cihaza bağlanıp kalacaktır. Cihaz içinde enerji ya etrafta sekip durur, ya da yüksek bir rezonansa girer. Eğer tamamen saçıcı tipli bir cihaz söz konusuysa (örneğin bu bir metal olabilir), bir dalga ona çarpar ve seker. Çünkü enerji böyle bir cihazda bağlı kalmaz, bir kez vurur ve seker. Bu durumda daha az sayıda iterasyon yeterli olacaktır. İkinci nokta ise edinmek istenilen bilgilerin ne

olduğudur. Örneğin, eğer cihazın frekansa olan cevabı ayrıntılı bir şekilde isteniyorsa çok daha fazla iterasyon gerekecektir. Yani, spektral tepkisi çok keskin bir cihaz varsa ve ayrıntılı frekans cevabı bilgisi isteniyorsa çok fazla sayıda iterasyon yapılmalıdır. Çok dar bir rezonansa sahip bir cihaz söz konusu ise yapılması gereken şey, tam olarak bu rezonansın frekansın neresinde olduğunu bulmaktır.

Gerekli ve yeterli iterasyon sayısını tahmin etmek için öncelikle grid içindeki yayılımda en kötü, yani en yavaş senaryoya göz atalım. $v_{min} = \frac{c_0}{n_{max}}$ değeri grid içinde olabilecek en küçük yayılma hızını vereceğinden $\frac{\Delta z}{v_{min}} = \frac{\Delta z n_{max}}{c_0}$ değeri en küçük yayılma hızı ile Δz uzunluğundaki bir tek grid hücresinin katedilmesi için gereken süre olacaktır. Böylece $t_{prop} = \frac{N_z \Delta z n_{max}}{c_0}$ süresi N_z tane hücreden oluşan gridin tümünün en küçük yayılma hızı ile katedilmesi için gereken süre olur. T toplam simülasyon zamanı olmak üzere daha önce bir step function dan kaçınmak için 6τ 'luk bir gecikme zamanı ile kaynağın başlatılması gerektiği söylenmişti. Tolam simülasyon zamanının en az bir puls'un tümünü içermesi gerekir. Bu da bize simülasyon için en az bir 6τ kadar süreye daha ihtiyaç olduğunu söyler ve böylece son durumda $T \geq 12\tau$ olması gerektiği anlaşılır. Diğer yandan örneğin orta dereceli bir saçılma cihazından bahsediliyorsa muhtemelen en az 5 enerji zıplaması grid içerisinde ileri ve geri alınmak istenir. Bu yüzden bu süre de toplam simülasyon zamanına eklenmelidir. Böylelikle iyi bir simülasyon için gereken zaman tahmini eşitlik (2.101)'deki gibi olur.

$$T = 12\tau + 5t_{prop} \quad (2.101)$$

Tekrar hatırlatmak gerekirse burada t_{prop} süresi N_z tane hücreden oluşan gridin tümünün en küçük yayılma hızı ile katedilmesi için gereken süredir ve eşitlik (2.102)'deki gibidir

$$t_{prop} = \frac{N_z \Delta z n_{max}}{c_0} \quad (2.102)$$

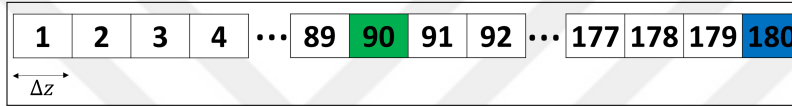
Son olarak Δt zaman aralığının da dikkate alınması ile minimum şartlar için gerekli toplam iterasyon sayısı (*Steps*) eşitlik (2.103)'deki gibi olur.

$$Steps = round \uparrow \left(\frac{T}{\Delta t} \right) \quad (2.103)$$

Aşağıda 1 boyutta FDTD için bazı örnekler yer almaktadır:

Bir Boyutta FDTD için Örnek-1: Araç Modelleme Yok

Birinci örnekte herhangi bir araç modellenmeyecek ve böylece grid yapı ve anlatılan süreç kolay bir modellemeyle test edilecektir. Herhangi bir aracın modellenmediği böyle bir örnekte beklenen %100 geçiş olmasıdır. Buna göre tasarlanan grid yapı Şekil 2.74'da gösterilmektedir.



Şekil 2.74. Bir boyutta FDTD için örnek-1 grid yapısı

Şekil 2.74'da gösterilen ve toplamda 180 hücreden oluşan grid yapıda yeşil ile gösterilen 90 numaralı hücre elektrik alan kaynağı için kayıt hücresi olarak seçilmiştir. Elbette ki son hücre olan 180 numaralı hücre geçen dalga kayıt hücresidir. Yapı içinde herhangi bir araç yoktur, yani yapı tamamiyle havadan oluşmaktadır ve bu nedenle elektrik ve manyetik geçirgenlik sabitleri sırasıyla $\epsilon_r = 1$ ve $\mu_r = 1$ 'dir. Toplam grid hücre sayısı $N_z = 180$, modellemede kullanılan elektromanyetik dalgalar içindeki en yüksek frekans $f_{max} = 4 \cdot 10^{14} Hz$ ve grid çözünürlüğü (1 hücre boyutu) $\Delta z = 1.4286 \cdot 10^{-8} m$ şeklindedir. Buna göre 90 numaralı hücrede üretilen dalga kaynağından çıkan dalgalar içindeki herhangi frekanslı bir dalga için yansımaya katsayısı $R = 0$ ve geçme katsayısı $T = 1$ olmalıdır. Şekil 2.75 bu örnekteki alan dağılımlarının simülasyonu için yazılan "MATHEMATICA" kod yapısını ve Şekil 2.76 ise bu simülasyonda farklı zamanlardaki alan dağılımlarını göstermektedir. Kod yapısındaki parametreler ve açıklamaları aşağıdaki gibidir:

```

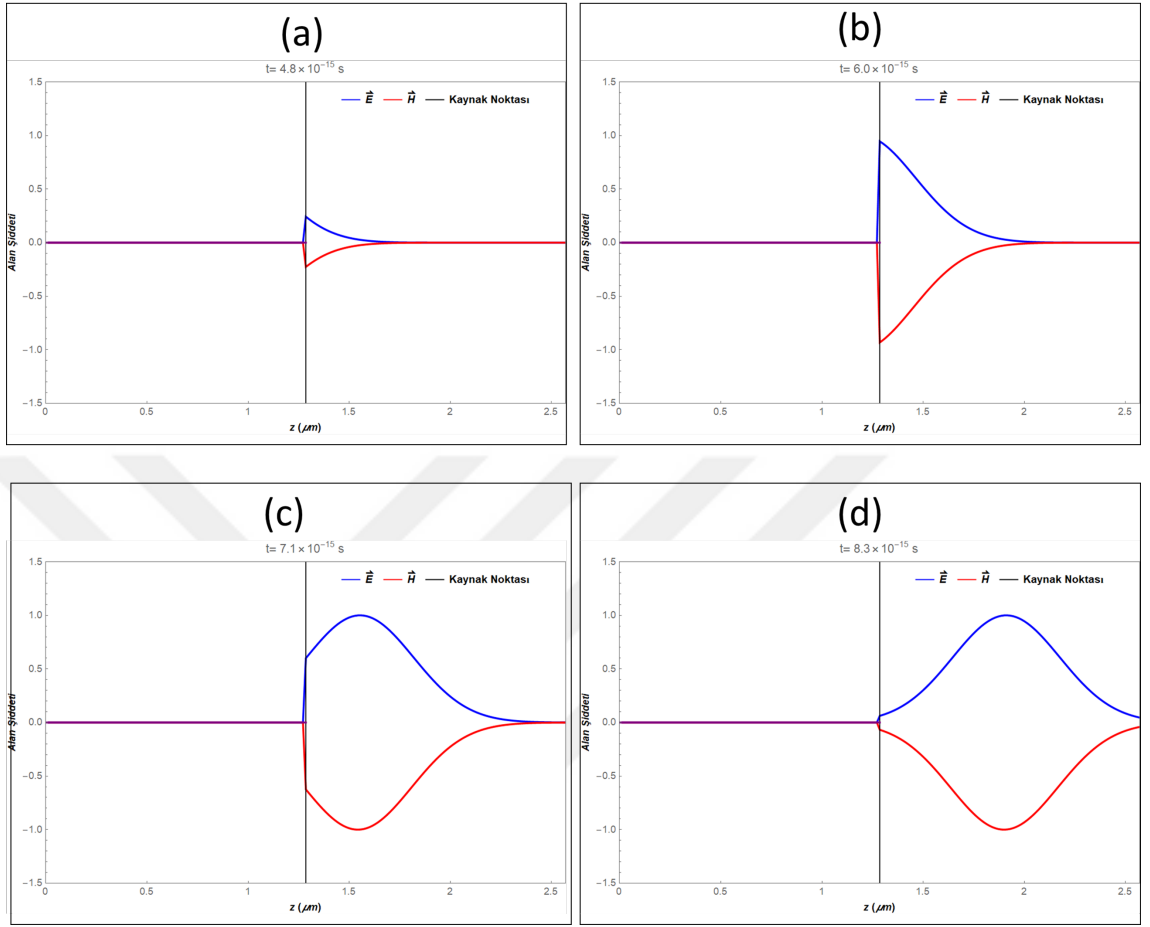
mu = 1; eps = 1; n = 1; dz = 1.4286 * 10-8; Nz = 180; c = 3 * 108; dt =  $\frac{n * dz}{2 * c}$ ;
fmax = 4 * 1014; tau =  $\frac{0.5}{(fmax)}$ ; t0 = 5 * tau; tprop =  $\frac{Nz * dz * n}{c}$ ; T = 12 * tau + 5 * tprop;
Steps = Ceiling[T / dt];
ersrc = 1; ursrc = 1; nsrsrc = 1; A = - $\sqrt{\frac{ersrc}{ursrc}}$ ; delt =  $\frac{nsrsrc * dz}{2 * c} + \frac{dt}{2}$ ; t = Range[0, Steps - 1] * dt;
Esrc = e- $(\frac{t-t0}{tau})^2$ ; Hsrc = A * e- $(\frac{t-t0+delt}{tau})^2$ ;
mHx = ConstantArray[1, Nz] *  $(\frac{c * dt}{mu})$ ;
mEy = ConstantArray[1, Nz] *  $(\frac{c * dt}{eps})$ ;
zarray = Table[i * dz, {i, 1, Nz}];
Hx = ConstantArray[0, Nz]; Ey = ConstantArray[0, Nz];
H1 = 0; H2 = H1; E1 = 0; E2 = E1; SourceIndex = 90;
frameE = List[]; frameH = List[];
For[i = 1, i ≤ Steps, i++,
  H2 = H1; H1 = Hx[[1]];
  For[k = 1, k ≤ (Nz - 1), k++,
    Hx[[k]] = Hx[[k]] + mHx[[k]] *  $\frac{(Ey[[k + 1]] - Ey[[k]])}{dz}$ ;
  ];
  Hx[[Nz]] = Hx[[Nz]] + mHx[[Nz]] *  $(\frac{E2 - Ey[[Nz]]}{dz})$ ;
  Hx[[SourceIndex - 1]] = Hx[[SourceIndex - 1]] -  $(\frac{mHx[[SourceIndex - 1]]}{dz}) * Esrc[[i]]$ ;
  E2 = E1; E1 = Ey[[Nz]]; Ey[[1]] = Ey[[1]] + mEy[[1]] *  $(\frac{Hx[[1]] - H2}{dz})$ ;
  For[k = 2, k ≤ (Nz), k++,
    Ey[[k]] = Ey[[k]] + mEy[[k]] *  $(\frac{Hx[[k]] - Hx[[k - 1]]}{dz})$ ;
  ];
  Ey[[SourceIndex]] = Ey[[SourceIndex]] -  $(\frac{mEy[[SourceIndex]]}{dz}) * Hsrc[[i]]$ ;
  AppendTo[frameE, Ey]; AppendTo[frameH, Hx];
];

```

Şekil 2.75. Bir boyutta FDTD için örnek-1 alan dağılımları MATHEMATICA kod yapısı

Şekil 2.75 ile verilen "MATHEMATICA" kod yapısına dair parametreler ve tanımları:

mu	→	manyetik geçirgenlik
eps	→	elektrik geçirgenlik
dz	→	grid yapı birim hücre uzunluğu
Nz	→	toplam hücre sayısı
c	→	ışık hızı
dt	→	zaman aralığı
fmax	→	maksimum elektromanyetik dalga frekansı
tau	→	makul puls genişliği ölçüsü
t0	→	puls merkezi
tprop	→	tüm gridin en küçük yayılma hızı ile katedilmesi için gereken süre
T	→	simülasyon süresi
Steps	→	simülasyon süresi için iterasyon sayısı
ersrc	→	kaynak noktasındaki ortamın elektrik geçirgenliği
ursrc	→	kaynak noktasındaki ortamın manyetik geçirgenliği
nsrc	→	kaynak noktasındaki ortamın kırılma indisi
A	→	manyetik alan genliği
delt	→	elektrik ve manyetik alan arasındaki toplam gecikme
t	→	kullanılan zaman listesi
Esrc	→	elektrik alan kaynağı
Hsrc	→	manyetik alan kaynağı
mHx	→	$c\Delta t/\mu$ ifadesi
mEy	→	$c\Delta t/\varepsilon$ ifadesi
zarray	→	tek boyutlu grid uzayı
Hx	→	her bir hücredeki H değeri
Ey	→	her bir hücredeki E değeri
H1,H2	→	manyetik alan mükemmel sınır koşullar için başlangıç değeri
E1,E2	→	elektrik alan mükemmel sınır koşullar için başlangıç değeri
SorceIndex	→	alan kaynağı hücre numarası
frameE	→	elektrik alan dağılımının kaydedileceği liste
frameH	→	manyetik alan dağılımının kaydedileceği liste



Şekil 2.76. Bir boyutta FDTD için örnek-1 alan dağılımları **a)** $4.8 \cdot 10^{-15} s$ 'de; **b)** $6 \cdot 10^{-15} s$ 'de; **c)** $7.1 \cdot 10^{-15} s$ 'de; **d)** $8.3 \cdot 10^{-15} s$ 'de

Diğer yandan Şekil 2.77 bu örnekteki yansıma ve geçme spektrumlarının simülasyonu için yazılan "MATHEMATICA" kod yapısını ve Şekil 2.78 ise bu simülasyon bittiği andaki yansıma ve geçme spektrumlarını göstermektedir ve beklendiği gibi tam geçiş söz konusudur. Bir önceki kod yapısına ilave parametreler ve açıklamaları aşağıdaki gibidir;

```

mu = 1; eps = 1; n = 1; dz = 1.4286 * 10^-8; Nz = 180; c = 3 * 10^8; dt =  $\frac{n * dz}{2 * c}$ ;
fmax = 4 * 10^14; tau =  $\frac{0.5}{fmax}$ ; t0 = 5 * tau; tprop =  $\frac{Nz * dz * n}{c}$ ; T = 12 * tau + 5 * tprop;
Steps = Ceiling[T / dt];

ersrc = 1; ursrc = 1; nsrsc = 1; A = - $\sqrt{\frac{ersrc}{ursrc}}$ ; delt =  $\frac{nsrsc * dz}{2 * c} + \frac{dt}{2}$ ; t = Range[0, Steps - 1] * dt;

Esrc = e^(- $\frac{t-t0}{tau}$ ); Hsrc = A * e^(- $\frac{t-t0+delt}{tau}$ );
mHx = ConstantArray[1, Nz] *  $\left(\frac{c * dt}{mu}\right)$ ;
mEy = ConstantArray[1, Nz] *  $\left(\frac{c * dt}{eps}\right)$ ;

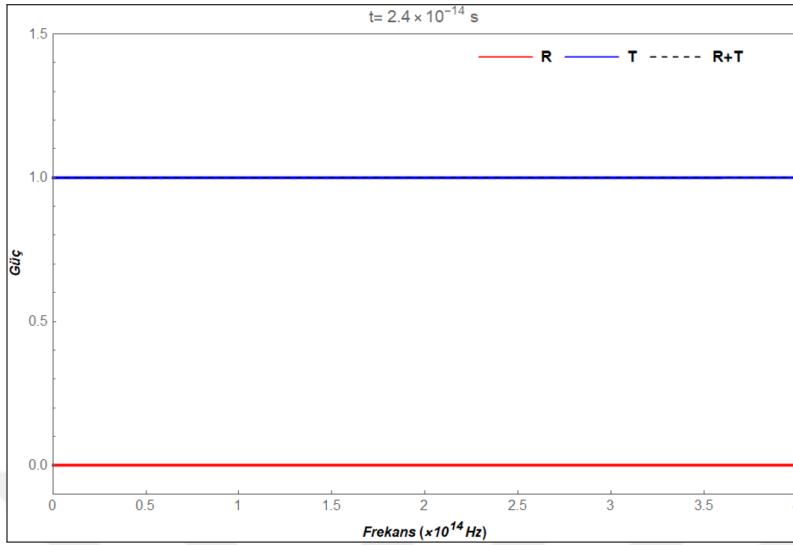
zarray = Table[i * dz, {i, 1, Nz}];
Hx = ConstantArray[0, Nz]; Ey = ConstantArray[0, Nz];
H1 = 0; H2 = H1; E1 = 0; E2 = E1; SourceIndex = 90;
NFREQ = 100; FREQ = Subdivide[0, fmax, NFREQ - 1]; K0 = Exp[-I * 2 * Pi * dt * FREQ];
REF = ConstantArray[0, NFREQ]; TRN = ConstantArray[0, NFREQ]; SRC = ConstantArray[0, NFREQ];
SourceIndex = 90; frameR = List[]; frameT = List[]; frameTot = List[];
For[i = 1, i <= 1000, i++,
  H2 = H1; H1 = Hx[[1]];
  For[k = 1, k <= (Nz - 1), k++,
    Hx[[k]] = Hx[[k]] + mHx[[k]] *  $\frac{(Ey[[k+1]] - Ey[[k]])}{dz}$ ;
  ];
  Hx[[Nz]] = Hx[[Nz]] + mHx[[Nz]] *  $\left(\frac{E2 - Ey[[Nz]]}{dz}\right)$ ;
  Hx[[SourceIndex - 1]] = Hx[[SourceIndex - 1]] -  $\left(\frac{mHx[[SourceIndex - 1]]}{dz}\right) * Esrc[[1]]$ ;
  E2 = E1; E1 = Ey[[Nz]]; Ey[[1]] = Ey[[1]] + mEy[[1]] *  $\left(\frac{Hx[[1]] - H2}{dz}\right)$ ;
  For[k = 2, k <= (Nz), k++,
    Ey[[k]] = Ey[[k]] + mEy[[k]] *  $\left(\frac{Hx[[k]] - Hx[[k-1]]}{dz}\right)$ ;
  ];
  Ey[[SourceIndex]] = Ey[[SourceIndex]] -  $\left(\frac{mEy[[SourceIndex]]}{dz}\right) * Hsrc[[1]]$ ;
  For[nf = 1, nf <= NFREQ, nf++,
    REF[[nf]] = REF[[nf]] + (K0[[nf]]^i) * Ey[[1]]; TRN[[nf]] = TRN[[nf]] + (K0[[nf]]^i) * Ey[[Nz]]; SRC[[nf]] = SRC[[nf]] + (K0[[nf]]^i) * Esrc[[1]];
  ];
  REFnew = dt * REF; TRNnew = dt * TRN; SRCnew = dt * SRC;
  REFPPOWER = Abs[(REFnew / SRCnew)^2]; TRNPOWER = Abs[(TRNnew / SRCnew)^2]; TOTAL = REFPPOWER + TRNPOWER;
  AppendTo[frameR, REFPPOWER];
  AppendTo[frameT, TRNPOWER];
  AppendTo[frameTot, TOTAL];
];

```

Şekil 2.77. Bir boyutta FDTD için örnek-1 yansıma ve geçme spektrumları MATHEMATICA kod yapısı

Şekil 2.77 ile verilen "MATHEMATICA" kod yapısına dair bir önceki kod yapısına ilave parametreler ve tanımları:

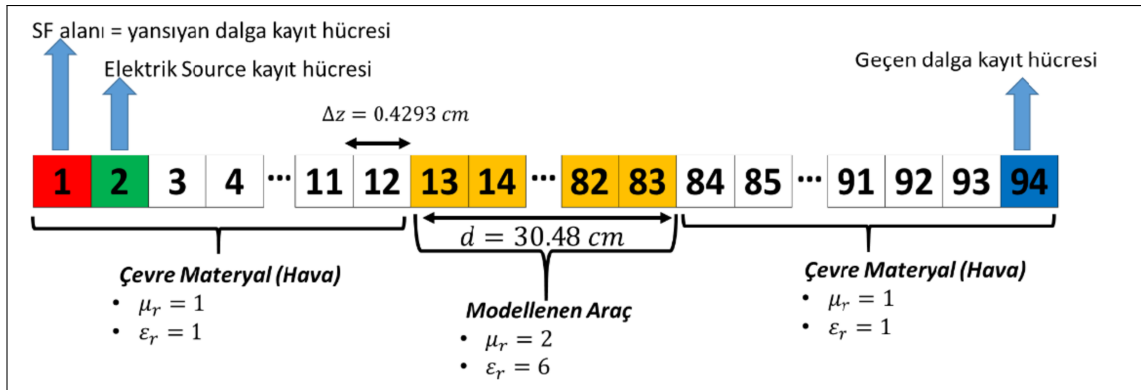
NFREQ	→	kullanılan frekans sayısı
FREQ	→	kullanılan frekans aralığı
K0	→	frekanslar için Fourier transformu
REF	→	yansıyan dalga Fourier transformu için kayıt listesi
TRN	→	geçen dalga Fourier transformu için kayıt listesi
SRC	→	kaynak dalga Fourier transformu için kayıt listesi
frameR	→	yansıyan güç kayıt listesi
frameT	→	geçen güç kayıt listesi
frameTot	→	toplam güç kayıt listesi



Şekil 2.78. Bir boyutta FDTD için örnek-1 yansıma ve geçme spektrumları

Bir Boyutta FDTD için Örnek-2: Araç Modelleme

Modellenen araç $d = 30.48\text{cm}$ kalınlığında $\epsilon_r = 6$ elektrik geçirgenliğe ve $\mu_r = 2$ manyetik geçirgenliğe sahip bir boyutlu bir yapıdır ve hava içinde bulunmaktadır. Şekil 2.79, bu modelleme için tasarlanan grid yapısını ayrıntılı olarak göstermektedir.



Şekil 2.79. Bir boyutta FDTD için örnek-2 grid yapısı

Modelleme için $[0, 1]$ GHz frekans aralığında dalga demeti kullanılmıştır. Şekil 2.80’de söz konusu modelleme için yazılan MATHEMATICA kod yapısı verilmiştir. Şekil 2.81’de ise dalganın doğuşu ve sonsuza gidişine kadar olan süreçteki bazı anlarda alanların

durumu (üstte), $[0, 1]$ GHz frekans aralığındaki dalgalar için yansıma ve geçme spektrumu ile özel olarak $0.5 GHz$ 'lik dalganın R ve T değerleri (altta) görülmektedir. Bir önceki kod yapısına ilave parametreler ve açıklamaları aşağıdaki gibidir;



```

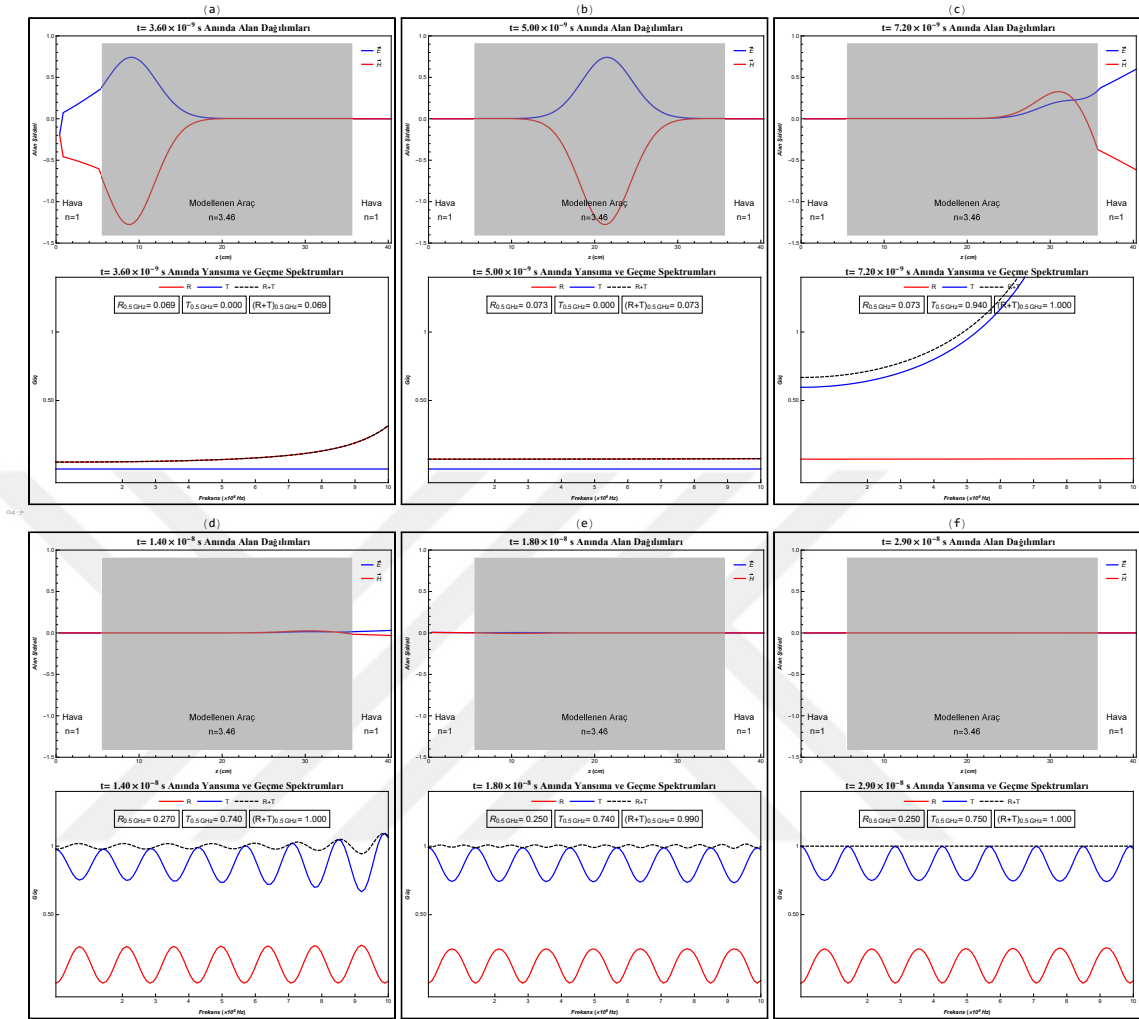
mu = 2; eps = 6; nmax =  $\sqrt{\mu * \text{eps}}$ ; d = 30.48; fmax =  $10^9$ ;
c = 299 792 458 *  $10^2$ ; LambdaMin =  $\frac{c}{fmax * nmax}$ ; NLambda = 20;
dz1 = LambdaMin / NLambda; dmin = d;
Nmekanik = 4; dz2 =  $\frac{dmin}{Nmekanik}$ ; dz = Min[dz1, dz2]; dc = d;
Nc =  $\frac{dc}{dz}$ ; Nc = Ceiling[Nc]; dz =  $\frac{dc}{Nc}$ ; CellForDevice = Nc;
CellForSpacerRegions = 2 * 10; CellForRecords = 3;
Nz = CellForDevice + CellForSpacerRegions + CellForRecords;
nz1 = 2 + 10 + 1; nz2 = Nz - 1 - 10; MUR = ConstantArray[1, Nz];
EPR = ConstantArray[1, Nz]; MUR[[nz1 ;; nz2]] = mu; EPR[[nz1 ;; nz2]] = eps;
nbc = 1;
dt = nbc * dz / 2 / c;
tau = 1 / (2 * fmax);
t0 = 6 * tau;
tprop = nmax * Nz * dz / c;
T = 12 * tau + 5 * tprop; STEPS = Ceiling[T / dt]; ersrc = 1; ursrc = 1; nsrsc = 1;
A = -Sqrt[ersrc / ursrc];
delt = nsrsc * dz / (2 * c) + dt / 2;
t = Range[0, STEPS - 1] * dt;
Esrc = Exp[-((t - t0) / tau)^2]; Hsrc = A * Exp[-((t - t0 + delt) / tau)^2];
NFREQ = 100;
FREQ = Subdivide[0, fmax, NFREQ - 1];
K0 = Exp[-I * 2 * Pi * dt * FREQ];
REF = ConstantArray[0, NFREQ];
TRN = ConstantArray[0, NFREQ];
SRC = ConstantArray[0, NFREQ];
mHx = c * dt / MUR; mEy = c * dt / EPR; zarray = Table[i * dz, {i, 1, Nz}];
Hx = ConstantArray[0, Nz]; Ey = ConstantArray[0, Nz];
H1 = 0; H2 = H1; E1 = 0; E2 = E1; SourceIndex = 2;
frameE = List[];
frameH = List[];
frameR = List[];
frameT = List[];
frameTot = List[];
For[i = 1, i ≤ STEPS, i++,
  H2 = H1; H1 = Hx[[1]];
  For[k = 1, k ≤ (Nz - 1), k++,
    Hx[[k]] = Hx[[k]] + mHx[[k]] *  $\frac{(Ey[[k + 1]] - Ey[[k]])}{dz}$ ;
  ];
  Hx[[Nz]] = Hx[[Nz]] + mHx[[Nz]] *  $\left(\frac{E2 - Ey[[Nz]]}{dz}\right)$ ;
  Hx[[SourceIndex - 1]] = Hx[[SourceIndex - 1]] -  $\left(\frac{mHx[[SourceIndex - 1]]}{dz}\right) * Esrc[[i]]$ ;
  E2 = E1; E1 = Ey[[Nz]];
  Ey[[1]] = Ey[[1]] + mEy[[1]] *  $\left(\frac{Hx[[1]] - H2}{dz}\right)$ ;
  For[k = 2, k ≤ (Nz), k++,
    Ey[[k]] = Ey[[k]] + mEy[[k]] *  $\left(\frac{Hx[[k]] - Hx[[k - 1]]}{dz}\right)$ ;
  ];
  Ey[[SourceIndex]] = Ey[[SourceIndex]] -  $\left(\frac{mEy[[SourceIndex]]}{dz}\right) * Hsrc[[i]]$ ;
  For[nf = 1, nf ≤ NFREQ, nf++,
    REF[[nf]] = REF[[nf]] + (K0[[nf]]^i) * Ey[[1]];
    TRN[[nf]] = TRN[[nf]] + (K0[[nf]]^i) * Ey[[Nz]];
    SRC[[nf]] = SRC[[nf]] + (K0[[nf]]^i) * Esrc[[i]];
  ];
  REFnew = dt * REF; TRNnew = dt * TRN; SRCnew = dt * SRC;
  REFPPOWER = Abs[(REFnew / SRCnew)^2];
  TRNPOWER = Abs[(TRNnew / SRCnew)^2];
  TOTAL = REFPPOWER + TRNPOWER;
  AppendTo[frameE, Ey]; AppendTo[frameH, Hx]; AppendTo[frameR, REFPPOWER];
  AppendTo[frameT, TRNPOWER]; AppendTo[frameTot, TOTAL];
];

```

Şekil 2.80. Bir boyutta FDTD için örnek-2 alan dağılımları, yansıma ve geçme spektrumları MATHEMATICA kod yapısı

Şekil 2.80 ile verilen "MATHEMATICA" kod yapısına dair bir önceki kod yapısına ilave parametreler ve tanımları:

LambdaMin	→	maksimum frekansa sahip dalganın modellenen araç içindeki dalga boyu
d	→	modellenen araç kalınlığı
nmax	→	modellenen araç kırılma indisi
NLambda	→	dalga boyu yapısını modellemek için kullanılan hücre sayısı
dz1	→	minimum dalgaboyu bakımından grid çözünürlüğü (grid çözünürlüğü için ilk tahmin)
dmin	→	minimum mekanik özellik
Nmekanik	→	mekanik özelliği modellemek için kullanılan hücre sayısı
dz2	→	minimum mekanik özellik bakımından grid çözünürlüğü (grid çözünürlüğü için ikinci tahmin)
dz	→	grid çözünürlüğü
dc	→	olası kritik araç boyutu (bu örnekte sadece d kalınlıklı tek araç)
Nc	→	modellenen araç için toplam grid hücre sayısı
CellForDevice	→	modellenen araç için toplam grid hücre sayısı
CellForSpacerRegions	→	boş bölge hücre sayısı
CellForRecords	→	kayıt hücre sayısı(1 kaynak, 1 yansıma ve 1 geçme)
Nz	→	toplam hücre sayısı
nz1	→	modellenen aracın ilk hücre numarası
nz2	→	modellenen aracın son hücre numarası
MUR	→	grid hücrelerinin manyetik geçirgenlik listesi
EPR	→	grid hücrelerinin elektrik geçirgenlik listesi
nbc	→	modellenen aracın her iki yanındaki sınırın (burada hava) kırılma indisi



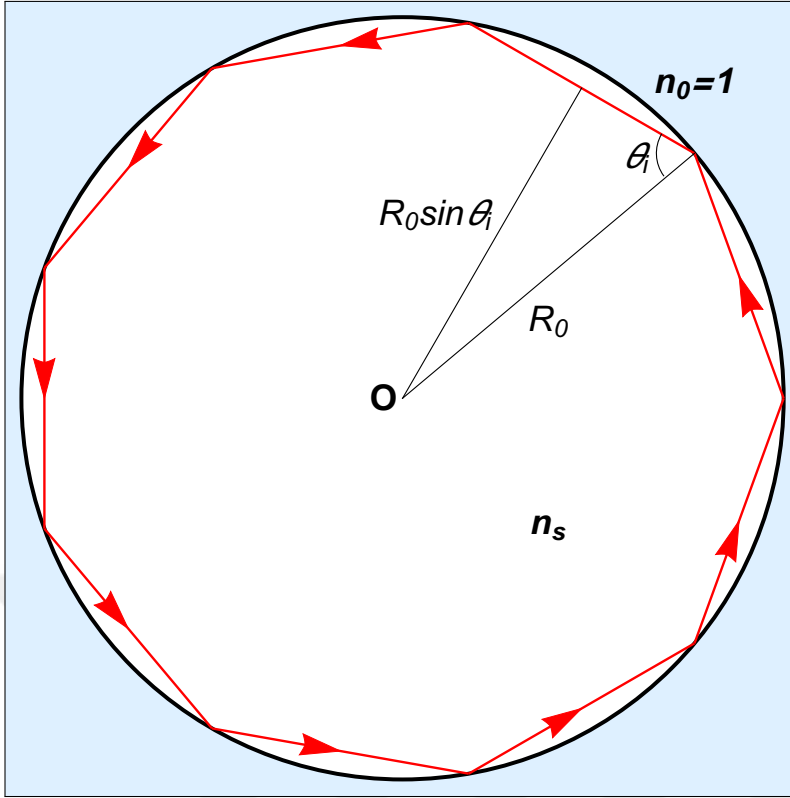
Şekil 2.81. Bir boyutta FDTD için örnek-2 alan dağılımları, yansıma ve geçme spektrumları **a)** $3.60 \cdot 10^{-9}$ s anında; **b)** $5 \cdot 10^{-9}$ s anında; **c)** $7.20 \cdot 10^{-9}$ s anında; **d)** $1.40 \cdot 10^{-8}$ s anında; **e)** $1.80 \cdot 10^{-8}$ s anında; **f)** $2.90 \cdot 10^{-8}$ s anında

2.5. Optik Mikro Rezonatörler

Özellikle 20. yüzyılın ikinci yarısından itibaren optik mikro kaviterler bir çok alanda ilgi konusu olmayı başarmıştır (Arnold vd 1996; Ilchenko ve Maleki 2001; Volmer ve Arnold 2008; Foreman vd 2015; Tang vd 2018; Zhang vd 2019; Balac 2019). Bu mikro kaviterlerin rezonans modları fısıldayan galeri modları (Whispering Gallery Mode-WGM) veya morfoloji bağlı rezonanslar (Morphology Dependent Resonances-MDRs) olarak da adlandırılırlar. Tarihsel olarak, Lord Rayleigh,

Londra'daki St. Paul Katedrali'nin akustik özelliklerini tanımlamak için WGM fenomenini önererek çalışmalara öncülük etmiştir (Rayleigh 1896; Rayleigh 1910; Rayleigh 1914). Rayleigh, katedral kubbesinin ses dalgalarını toplam iç yansımaları olan bir arayüzle yansıttığını ve onları sürekli olarak yeniden odakladığını fark etti. Aslında bu fenomen fısıldayan bir galeri yapısını temsil ediyordu. Daha sonra elektromanyetik dalgaların da tıpkı ses dalgaları gibi bir arayüzle birlikte oluşan rezonanslarla WGM dağılımları sergiledikleri gösterildi. Bundan sonra, küresel parçacıklar üzerinde elektromanyetik radyasyon dağılımları olan WGM olgusu Lorentz tarafından yeniden incelenmiştir (Lorentz 1890; Mie 1908; Debye 1909).

İyi bilinen bir gerçek olarak, ışık yakalamanın üç ana yapısı, yani Fabry-Perot interferometresi, fotonik kristaller ve WGM rezonatörleri arasında, en yüksek Q kalite faktörüne sahip yapılar WGM rezonatörleridir. (Chang ve Campillo 1996; Vahala 2003; Vahala 2004; Matsko 2006). Bu nedenle, WGM rezonatörleri son derece düşük radyasyon kayıplarına sahiptir. Daha somut olmak gerekirse, bir WGM rezonatöründe dalga, Şekil 2.82'de gösterildiği gibi küre içinde dahili yansımalar yaparak yüzeye yakın yörüngelerde uzun süre sıkışır. Bu nedenle, WGM rezonatörleri son derece düşük radyasyon kayıplarına sahiptir.



Şekil 2.82. Hava içindeki R_0 yarıçaplı n_s kırılma indisli dielektrik küre ve küre içindeki tam yansımalar

Rezonans modlarını anlamak için Maxwell denklemlerini bir küre geometrisi üzerinde çözmek gerekir. Çözümlerin matematiksel temeli geleneksel olarak Mie teorisine dayanmaktadır (Mie 1908). Şekil 2.82’de gösterildiği gibi, vakumda tipik olarak mikrometre mertebesinde R_0 yarıçapına ve n_s kırılma indisine sahip olan bir dielektrik küre düşünülürse, elektromanyetik alanlar eşitlik (2.104)’deki skaler Helmholtz denklemini sağlayacaktır. Burada, i alt simgesi, kırılma indisinin küre dışı ortam için değeri (burada hava) ve küre ortamı değeri n_s ayırımı yapmak için vardır. k_0 , vakumda ω frekansına sahip elektromanyetik alanın dalga numarasıdır ve ψ skaler alanı, TE mod için E_θ bileşenini ve TM mod içinse H_θ bileşenini temsil eder.

$$(\nabla^2 + k_0^2 n_i^2) \psi(\mathbf{r}) = 0 \quad (2.104)$$

Bu skaler alan, eşitlik (2.105)’deki gibi değişkenlere ayrılarak yazılabilir.

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi) \psi_r(r) = \psi_\theta(\theta) \psi_\varphi(\varphi) \psi_r(r) \quad (2.105)$$

Bu Laplasyen küresel koordinatlarda kullanıldığında, sınır durumlar için bir koşul sağlayan bir merkezkaç potansiyeli söz konusu olur (Oraevsky 2002; Little vd 1999). Mie, bu tür sınır durumlar için düzlem dalgaların etkileşimini incelemiştir (Mie 1908). Böylece, eşitlik (2.105), eşitlik (2.104)'de kullanılırsa, açısal ve radyal diferansiyel denklemler elde edilebilir. Mükemmel bir küre için, kutupsal ve azimutal kısımlarının çözümleri sırasıyla ilişkili Legendre polinomları $P_l^m(\cos\theta)$ ve $e^{im\varphi}$ ile verilir. Burada l açısal momentum mod numarasını temsil ederken m azimut mod numarasını temsil eder. Diferansiyel denklemin radyal kısmı eşitlik (2.106)'deki gibi olacaktır:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k_0^2 n_i^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] r \psi_r(r) = 0 \quad (l = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.106)$$

Böyle bir rezonatörde bir WGM modu için yansımanın gerçekten tam bir dahili yansıma olmadığı belirtilmelidir. Bunun nedeni, küre ve dış ortam arasındaki arayüzün eğimidir. Bu, WGM rezonans modlarının sızdıran modlar olduğu anlamına gelir. Bu nedenle, küre içindeki radyal çözümler, birinci tipi Riccati-Bessel fonksiyonlarına $((k_0 n_s r) j_l(k_0 n_s r))$ ve küre dışındaki radyal çözümler ise ikinci tür Riccati-Bessel fonksiyonlarına $((k_0 r) \eta_l(k_0 r))$ karşılık gelir. Burada j_l küresel Bessel ve η_l küresel Neuman fonksiyonlarını temsil etmektedir.

2.5.1. TE-TM modları ve süreklilik koşulları

$\vec{r} \cdot \vec{E}(\vec{r}) = 0$ olduğundan, TE modları için teğetsel bileşenler E_θ ve H_φ 'dir. Benzer şekilde, TM modları için teğetsel bileşenler H_θ ve E_φ olur. ω frekanslı bir elektromanyetik alan için, herhangi bir manyetik özellik göstermeyen bir ortam söz konusu olduğunda, Faraday ve Amper yasalarını kullanarak, TE modu için elektrik alanının teğetsel bileşeni cinsinden manyetik alanın teğetsel bileşeni ve TM modu için manyetik alanın teğetsel bileşeni cinsinden elektrik alanının teğetsel bileşeni, sırasıyla eşitlik (2.107) ve eşitlik (2.108) ile verilir. Bu eşitliklerde $\frac{\partial}{\partial r}(E_\theta) \gg \frac{1}{r}(E_\theta)$ ve

$\frac{\partial}{\partial r}(H_\theta) \gg \frac{1}{r}(H_\theta)$ kullanılmıştır.

$$H_\varphi = -\frac{i}{\omega r} \frac{\partial}{\partial r}(rE_\theta) \approx -\frac{i}{\omega} \frac{\partial}{\partial r}(E_\theta) \quad (2.107)$$

$$E_\varphi = \frac{i}{\epsilon\omega r} \frac{\partial}{\partial r}(rH_\theta) \approx \frac{i}{\epsilon\omega} \frac{\partial}{\partial r}(H_\theta) \quad (2.108)$$

Buna göre, (2.105) içindeki ψ skaler alanı, TE modları için E_θ bileşenini ve TM modları için H_θ bileşenini temsil eder. ψ_r ise bileşenlerin radyal kısımlarını temsil eder. Böylece, $r = R_0$ 'daki sınırda süreklilik koşullarının uygulanmasıyla, WGM rezonansları için karakteristik denklemler eşitlik (2.109)'daki gibi olur (Oraevsky 2002; Novotny 2012).

$$P \frac{\psi'(\beta n_s)}{\psi(\beta n_s)} = \frac{\xi'(\beta)}{\xi(\beta)}, \quad P = \begin{cases} n_s, & TE \text{ mod} \\ \frac{1}{n_s}, & TM \text{ mod} \end{cases} \quad (2.109)$$

Burada β parametresi $\beta = k_0 R_0$ eşitliği ile ifade edilir ve elde edilmek istenen k_0 rezonans modlarının bir ölçüsüdür. Görüleceği gibi boyutsuz bir parametredir ve boyut parametresi (size parameter) olarak da adlandırılır. Bu parametrenin denklemlerde yer alması küre yarıçapından bağımsız hesap yapılabilmesine olanak tanır. Diğer yandan $\psi(z)$ ve $\xi(z)$ sırasıyla birinci ve ikinci tip Riccati-Bessel fonksiyonlarıdır ve eşitlik (2.110)'daki gibidirler.

$$\begin{aligned} \psi(z) &= z j_l(z), \\ \xi(z) &= z \eta_l(z). \end{aligned} \quad (2.110)$$

Burada $j_l(z)$ ve $\eta_l(z)$ sırasıyla birinci ve ikinci tip küresel Bessel fonksiyonlarıdır.

3. MATERYAL VE METOT

Bu tez çalışmasında dielektrik mikro kürelerin WGM modları için geleneksel çözüm olan ve eşitlik (2.109) ile verilen transandantal eşitliğe alternatif olarak Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) yaklaşımı ile bir kuantizasyon terimi içeren yeni bir eşitlik analitik olarak türetilmiştir. Ayrıca WGM modların çözümü için çoğunlukla kullanılan ve nümerik bir metot olan sonlu farklar (Finite Difference) metoduna alternatif olarak RBF (Radial Basis Function) metodu kullanarak nümerik sonuçlar türetilmiştir.

İlk olarak WGM modların WKB yaklaşımı ile elde edilen çözümlerinden bahsedilecek ve daha sonra ise RBF ile elde edilen çözümler sunulacaktır.

3.1. WGM Modların WKB Yaklaşımı ile Çözümü

Bu çözüm için ilk olarak efektif potansiyel yaklaşımını anlatmak gerekir. Efektif potansiyel yaklaşımı Nussenzveis ve Johnson tarafından geliştirilmiştir (Nussenzveig 1992, Johnson 1993). Bu yaklaşımda problem, sonlu küresel kuyu potansiyeli için kuantum mekanik problemine benzetilir. (2.106) ile verilen ifade, $V(r)$ küresel simetrik potansiyeli altındaki E enerjili bir parçacık için söz konusu olan eşitlik (3.1)'deki radyal Schrödinger eşitliğine benzemektedir.

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + (E - V_{eff}(r)) \right] r\psi_r(r) = 0 \quad (3.1)$$

Burada m parçacık kütlesi ve $\hbar$ indirgenmiş Planck sabiti için $2m = \hbar = 1$ şeklindeki doğal birimler (natural units) kullanılmıştır. Diğer yandan $V_{eff}(r)$ ifadesi efektif potansiyeldir eşitlik (3.2)'de gösterildiği gibi $V(r)$ küresel simetrik potansiyeli ile $V_l(r) = \frac{l(l+1)}{r^2}$ şeklindeki merkezci potansiyelin toplamıdır.

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \quad (3.2)$$

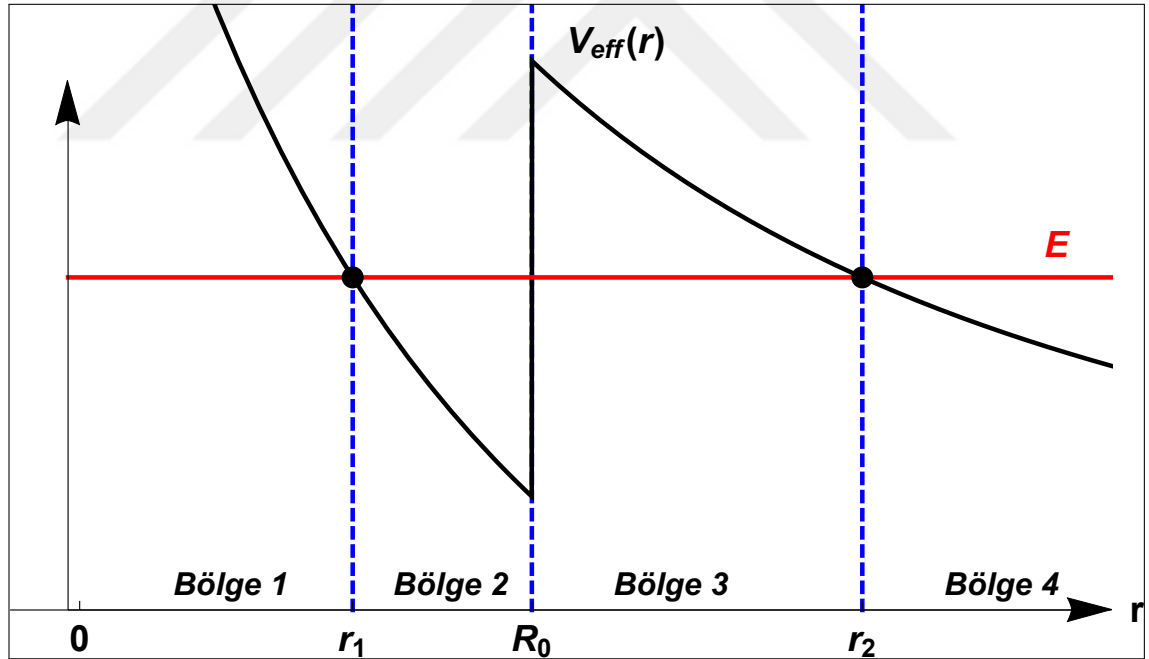
Eşitlik (2.106) ile eşitlik (3.2) karşılaştırılırsa elektromanyetik problemdeki dielektrik mikro küre için bir E enerjisi ve bir efektif potansiyelin sırasıyla eşitlik (3.3) ve eşitlik

(3.4)'deki gibi yazılabileceği görülür.

$$E = k_0^2 \quad (3.3)$$

$$V_{eff}(r) = E \left[(1 - n_i^2) + \frac{1}{k_0^2} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \quad (3.4)$$

Kırılma indisi için görülen i alt indisi yine küre içi ve küre dışı ortam ayrımını kastetmektedir. Eşitlik (3.4)'e bakıldığında, efektif potansiyel, kuantum mekanik problemin aksine elektromanyetik problemdeki E enerjisine bağlı olduğu görülür. Şekil 3.1, R_0 yarıçaplı bir dielektrik küre için bu efektif potansiyel ve enerjiyi gösterir. Kuantum mekaniğindeki tünellemeye benzer şekilde, sonlu yükseklikte potansiyel bariyerden bir enerji sızıntısının söz konusu olduğu görülebilir.



Şekil 3.1. Hava içindeki R_0 yarıçaplı dielektrik küre için radyal bölgelere göre efektif potansiyel ve enerji

Şekil 3.1 ve eşitlik (3.4)'e göre küre içinde ve dışındaki efektif potansiyeller eşitlik (3.5)'deki gibi olur.

$$V_{eff}(r) = \begin{cases} V_{içeri}(r) = E \left[(1 - n_s^2) + \frac{1}{k_0^2} \frac{l(l+1)}{r^2} \right], & r \leq R_0 \\ V_{dışarı}(r) = E \left[\frac{1}{k_0^2} \frac{l(l+1)}{r^2} \right], & r > R_0 \end{cases} \quad (3.5)$$

Şekil 3.1'daki r_1 ve r_2 noktaları dönüm noktalarıdır. Bu noktalarda potansiyel ve enerji birbirine eşittir. Bu nedenle, $V_{içeri}(r_1) = V_{dışarı}(r_2) = E$ eşleştirilerek, dönüm noktaları eşitlik (3.6)'deki gibi olur.

$$\begin{aligned} r_1 &= \frac{\sqrt{l(l+1)}}{k_0 n_s}, \\ r_2 &= \frac{\sqrt{l(l+1)}}{k_0}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

3.1.1. Genel çözüm

WKB dalga fonksiyonları, TE modu için E_θ bileşeninin radyal kısmını ve TM modu için H_θ bileşeninin radyal kısmını temsil eder. Klasik bölgelerde ($E > V$) ve klasik olmayan bölgelerde ($E < V$) olduğundan, momentum ve WKB dalga fonksiyonları sırasıyla eşitlik (3.7) ve eşitlik (3.8)'deki gibidir.

$$p(r) = \begin{cases} \sqrt{[E - V(r)]}, & E > V \\ \sqrt{[V(r) - E]}, & E < V \end{cases} \quad (3.7)$$

$$\psi_{WKB}(r) = \begin{cases} \frac{A_1}{\sqrt{|p(r)|}} e^{i \int |p(r)| dr} + \frac{A_2}{\sqrt{|p(r)|}} e^{-i \int |p(r)| dr}, & E > V \\ \frac{A_3}{\sqrt{|p(r)|}} e^{i \int |p(r)| dr} + \frac{A_4}{\sqrt{|p(r)|}} e^{-i \int |p(r)| dr}, & E < V \end{cases} \quad (3.8)$$

Şekil 3.1'ye bakılırsa 2. ve 4. bölgelerin klasik, 1. ve 3. bölgelerin ise klasik olmayan bölgeler olduğu görülebilir. Bu durumda reel momentumlar eşitlik (3.10)'deki gibi olur.

$$\begin{aligned}
p_1(r) &= \sqrt{[V_{\text{içeri}}(r) - E]}, & \text{Şekil 3.1'deki 1. bölge için} \\
p_2(r) &= \sqrt{[E - V_{\text{içeri}}(r)]}, & \text{Şekil 3.1'deki 2. bölge için} \\
p_3(r) &= \sqrt{[V_{\text{dışarı}}(r) - E]}, & \text{Şekil 3.1'deki 3. bölge için} \\
p_4(r) &= \sqrt{[E - V_{\text{dışarı}}(r)]}, & \text{Şekil 3.1'deki 4. bölge için}
\end{aligned} \tag{3.9}$$

Bilindiği gibi bir dönüm noktasında $E = V$ olduğundan WKB dalga fonksiyonları dönüm noktalarında çalışmaz ve momentum ifadeleri sıfır olur. Bu nedenle, eşitlik (3.8) ile verilen WKB dalga fonksiyonları dönüm noktalarında ıraksamaktadır. Bu, WKB dalga fonksiyonlarının dönüm noktalarından güvenli bir mesafede çalışabileceği anlamına gelir. Ancak özellikle öz-değerlerin belirlenmesinde, dönüm noktalarında WKB yaklaşımı dikkatle incelenmelidir. Bu incelemede, doğrusal potansiyel yaklaşımının doğru sonuçları vereceği dönüm noktası çevresinde bir yama bölgesi elde edilir. Bu yama, WKB dalga fonksiyonunun bölgenin her iki tarafında da çalışabileceği güvenli bir mesafede incelenir. Buna göre, r_1 dönüm noktası etrafındaki analizle, 1. ve 2. bölgelerdeki WKB dalga fonksiyonları eşitlik (3.10) ve eşitlik (3.11)'daki gibi olur.

$$\psi_1(r) \approx \frac{A}{\sqrt{p_1(r)}} \exp \left[- \int_r^{r_1} p_1(r) dr \right] \tag{3.10}$$

$$\psi_2(r) \approx \frac{2A}{\sqrt{p_2(r)}} \sin \left[\int_{r_1}^r p_2(r) dr + \frac{\pi}{4} \right] \tag{3.11}$$

Diğer yandan r_2 dönüm noktası etrafındaki analizle, 3. ve 4. bölgelerdeki WKB dalga fonksiyonları eşitlik (3.12) ve eşitlik (3.13)'daki gibi olur.

$$\psi_3(r) \approx \frac{1}{\sqrt{p_3(r)}} \left\{ C \exp \left[\int_r^{r_2} p_3(r) dr \right] + D \exp \left[- \int_r^{r_2} p_3(r) dr \right] \right\} \tag{3.12}$$

$$\psi_4(r) \approx \frac{1}{\sqrt{p_4(r)}} \exp \left[i \int_{r_2}^r p_4(r) dr \right] \tag{3.13}$$

Burada WKB analizinde elde edilen C, D, ve F, katsayıları arasındaki ilişki eşitlik (3.14)'daki gibidir

$$\begin{aligned} C &= \frac{i}{2} e^{-i\pi/4} F, \\ D &= e^{-i\pi/4} F. \end{aligned} \quad (3.14)$$

$r = R_0$ sınırında süreklilik koşullarının uygulanmasıyla, TE mod için E_θ bileşenin radyal kısmı ve TM mod için H_θ bileşenin radyal kısmı sırasıyla eşitlik (3.15) ve eşitlik (3.16)'daki gibi olur.

$$\begin{aligned} E_{\theta,1}(r = R_0) &= E_{\theta,0}(r = R_0), \\ H_{\varphi,1}(r = R_0) &= H_{\varphi,0}(r = R_0) \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} H_{\theta,1}(r = R_0) &= H_{\theta,0}(r = R_0), \\ E_{\varphi,1}(r = R_0) &= E_{\varphi,0}(r = R_0) \end{aligned} \quad (3.16)$$

Eşitlik (3.11) ve eşitlik (3.12) ile verilen $r = R_0$ sınırı etrafındaki WKB dalga fonksiyonlarına $r = R_0$ sınırındaki süreklilik koşullarının uygulanmasıyla TE ve TM modlar için sırasıyla eşitlik (3.17) ve eşitlik (3.18) elde edilir.

$$\begin{aligned} \psi_2(R_0) &= \psi_3(R_0), \\ \psi'_2(R_0) &= \psi'_3(R_0) \end{aligned} \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \psi_2(R_0) &= \psi_3(R_0), \\ \frac{1}{n_s^2} \psi'_2(R_0) &= \psi'_3(R_0) \end{aligned} \quad (3.18)$$

Sonuç olarak eşitlik (3.19) ile verilen ifade elde edilir.

$$\begin{aligned}
& -2ie^{-2\gamma}\{2[p_2(R_0)]^2p_3(R_0) - \tan\theta[p_2'(R_0)p_3(R_0) \\
& + 2n^2[p_3(R_0)]^2p_2(R_0) - n_s^2p_3'(R_0)p_2(R_0)]\} \\
& = \tan\theta\{[p_2'(R_0)p_3(R_0) - n^2p_3'(R_0)p_2(R_0)] \\
& - 2n^2[p_3(R_0)]^2p_2(R_0)\} - 2[p_2(R_0)]^2p_3(R_0)
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Burada TE mod için $n = 1$ ve TM mod için $n = n_s$ 'dir. Dğer yandan γ ve θ ifadeleri sırasıyla eşitlik (3.20) ve eşitlik (3.21)'deki gibidir.

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{R_0}^{r_2} P_3(r) dr = \sqrt{l(l+1)} \operatorname{arctanh} \sqrt{\frac{l(l+1) - \beta^2}{l(l+1)}} - \sqrt{l(l+1) - \beta^2} \tag{3.20}$$

$$\begin{aligned}
\theta = \frac{1}{\hbar} \int_{r_1}^{R_0} P_2(r) dr + \frac{\pi}{4} = \sqrt{(\beta n_s)^2 - l(l+1)} - \\
\sqrt{l(l+1)} \operatorname{arctan} \left[\sqrt{\frac{(\beta n_s)^2 - l(l+1)}{l(l+1)}} \right] + \frac{\pi}{4}
\end{aligned} \tag{3.21}$$

Eşitlik (3.19)'in sol tarafının reel kısmı $\frac{\sqrt{l(l+1)}}{n_s} \leq \beta \leq \sqrt{l(l+1)}$ rezonans aralığı için sıfırdır. Ayrıca Şekil 3.1'den ve eşitlik (3.10)'den $p_2'(R_0) = p_3'(R_0) = 0$ olduğu anlaşılır. Tanjant fonksiyonu için $q\pi$ periyodunun kullanılmasıyla (3.19) ifadesi eşitlik (3.22)'ye evrilir.

$$\theta = \alpha + q\pi \quad (q = 1, 2, 3, \dots) \tag{3.22}$$

Buradaki θ parametresi eşitlik (??) ile verildiği gibi α parametresi ise eşitlik (3.23)'teki gibidir.

$$\alpha = \operatorname{arctan} \left[-\frac{1}{n^2} \sqrt{\frac{(\beta n_s)^2 - l(l+1)}{l(l+1) - \beta^2}} \right], n = \begin{cases} 1, & TE \text{ mod} \\ n_s, & TM \text{ mod} \end{cases} \tag{3.23}$$

3.1.2. Düşük mertebe rezonanslar için tam kuantizasyon koşulu

θ_i , Şekil 2.82’de görülen gelme açısı olmak üzere, toplam açısal momentum $L = \sqrt{l(l+1)} = \beta n_s \sin \theta_i$ olduğu için açısal momentumun büyük değerleri için $\nu = l + 1/2$ tanımını kullanmak çok daha kullanışlı hale gelir. Böylece $L^2 \approx \nu^2$ yaklaşıklığı kullanılabilir. Diğer yandan toplam iç yansımalar için gelme açısı $\left[\sin^{-1}\left(\frac{1}{n_s}\right), \frac{\pi}{2} \right]$ aralığındadır. Bu nedenle, x parametresi, ν cinsinden $\frac{\nu}{n_s} \lesssim \beta \lesssim \nu$ aralığında yer alır. Son olarak, düşük dereceli rezonanslar, neredeyse yalayan (glancing) ışınlarla karşılık geldiğinden, $\beta \sim \nu/n_s$ rejimine karşılık gelir. Bu rejim için iki yaklaşık kuantizasyon koşulu Lam ve Treussart tarafından daha önce elde edilmiştir (Lam vd 1992; Treussart 1997). Bu tez çalışmasında bu rejim için WKB çözümü ile yeni bir kuantizasyon koşulu elde edilmiştir. Düşük mertebe rejimi için çözüm elde etmek adına WKB çözümündeki tüm terimler $x = \nu/N$ etrafında seri açılmıştır. Seri açılımdaki ilk iki terimin kullanılmasıyla elde edilen kuantizasyon koşulu eşitlik (3.24)’daki gibidir.

$$\beta_{TE,TM}(q) \sim \frac{1}{n_s} \left\{ \left[\left(\frac{\sqrt{4ab^3 + 27a^2c^2}}{6\sqrt{3}a^2} - \frac{c}{2a} \right)^{1/3} - \frac{b}{3a} \left(\frac{\sqrt{4ab^3 + 27a^2c^2}}{6\sqrt{3}a^2} - \frac{c}{2a} \right)^{-1/3} \right]^2 + \nu \right\} \quad (3.24)$$

Son eşitlikte c parametresi hem TE hem de TM mod için aynıdır ve $c = q\pi - \pi/4$ şeklindedir. Diğer yandan a ve b parametreleri TE ve TM mod için eşitlik (3.25) ve eşitlik (3.26)’deki gibidir.

$$a_{TE} = \frac{5n_s^3 - 9n_s}{6\sqrt{2}[\nu(n_s^2 - 1)]^{3/2}} - \sqrt{\frac{8}{9\nu}}, \quad (3.25)$$

$$a_{TM} = \frac{1}{n_s^3} \frac{8 - 9n_s^2 - 3n_s^4}{6\sqrt{2}[\nu(n_s^2 - 1)]^{3/2}} - \sqrt{\frac{8}{9\nu}}$$

$$\begin{aligned}
b_{TE} &= -\sqrt{\frac{2n_s^2}{\nu(n_s^2 - 1)}}, \\
b_{TM} &= -\frac{1}{n_s} \sqrt{\frac{2}{\nu(n_s^2 - 1)}}
\end{aligned} \tag{3.26}$$

3.2. WGM Modların RBF Metodu ile Çözümü

Nümerik hesaplamalar için geleneksel olarak çoğunlukla sonlu farklar metodu (Finite Difference-FD) kullanılmaktadır. FD metodu temelde uzaydaki noktaların iç içe geçen ızgara (mesh) bağımlılığı ile inşa edilen bir metottur ve bu nedenle uygun bir ızgara yapısı inşa etmek oldukça önemlidir. Bununla birlikte bu uygun yapının inşa edilmesikolay değildir ve bu nedenle çözümler bazen elde edilemez. RBF (Radial Basis Function) metodu ise bu ızgara yapı inşasını elimine ederek çalışabilen bir metottur ve FD metottaki kesikli grid yapıdaki noktalardan ziyade rastlantısal (quasi-random) nokta setleri kullanır. Tüm bu nedenlerden dolayı RBF metodu çoğunlukla ızgara inşasından bağımsız bir metot (meshless method veya mesh-free method) olarak adlandırılır (Buhmann 2003; Fasshauer 1999; Boztosun ve Charafi 2002).

RBF metodunda bir boyutlu bir $u(x)$ fonksiyonu eşitlik (3.27)'de gösterildiği gibi radyal fonksiyonların (RBF) lineer bir kombinasyonu şeklinde kullanılır.

$$u(x_i) \cong \sum_{j=1}^N \lambda_j \varphi(r_{ij}) \quad i = 1, 2, \dots, N \tag{3.27}$$

Burada $r_{ij} = \sqrt{(x_i - x_j)^2}$, N toplam veri noktası, λ_j belirlenecek olan katsayılar ve φ ise kullanılan radyal fonksiyonlardır (RBF). Çoğunlukla kullanılan bazı RBF fonksiyonları (kerneller) Çizelge 3.1'deki gibidir.

Çizelge 3.1. Bazı RBF fonksiyonları (kerneller)

Polynomial (R_n)	$\varphi(r) = r^n$; n tek
Thin Plate Spline ($TPSn$)	$\varphi(r) = r^n \log r$; n çift
Multiquadratic (MQ)	$\varphi(r, \varepsilon) = \sqrt{1 + (\varepsilon r)^2}$
Gaussian (GS) (MQ)	$\varphi(r, \varepsilon) = e^{-(\varepsilon r)^2}$

Dielektrik mikro kürelerin WGM modlarının RBF metoduyla çözümü için bu çalışmada r eksenine yerine $z = r/R_0$ eksenine kullanılmıştır. Bu nedenle eşitlik (2.106)'deki radyal ifade, küre içinde eşitlik (3.28)'ye evrilir.

$$\mathbf{H}\psi_{in}(z) + E\psi_{in}(z) = 0 \quad (3.28)$$

Bu durumda küre yüzeyinde $z = 1$ olur. Diğer yandan eşitlik (3.28)'deki $\mathbf{H}$ operatörü ve E enerjisi eşitlik (3.29)'deki gibidir.

$$\mathbf{H} = \frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{d}{dz} - \frac{l(l+1)}{z^2} \quad (l = 0, 1, 2, \dots), \quad (3.29)$$

$$E = (\beta n_s)^2 red,$$

Burada $\beta = k_0 R_0$ yine boyut (size) parametresi, yani elde edilmek istenen öz-değerlerken, n_s kürenin kırılma indisi ve $\psi_{in}(z)$ ise küre içindeki dalga fonksiyonudur. $z \rightarrow 0$ ve $z \rightarrow \infty$ limitleri için çözümler eşitlik (3.30)'deki gibi olur.

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \psi_{in}(z) = \frac{e^{-i\beta n_s z}}{\beta n_s z}, \quad (3.30)$$

$$\lim_{z \rightarrow 0} \psi_{in}(z) = z^l$$

Eşitlik (3.27)'in baz alınmasıyla eşitlik (3.28)'deki diferansiyel denklemin matris formu eşitlik (3.31)'deki gibi olur.

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{H}\varphi_{11} + E\varphi_{12} & \dots & \mathbf{H}\varphi_{1N} + E\varphi_{1N} \\ \mathbf{H}\varphi_{21} + E\varphi_{22} & \dots & \mathbf{H}\varphi_{2N} + E\varphi_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{H}\varphi_{N1} + E\varphi_{N2} & \dots & \mathbf{H}\varphi_{NN} + E\varphi_{NN} \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_N \end{bmatrix}}_{\mathbf{\Lambda}} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}}_{\mathbf{M}} \quad (3.31)$$

Eşitlik (3.30)'deki limit durumlar eşitlik (3.31)'de kullanılırsa eşitlik (3.32) elde edilir.

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \varphi_{11} & \dots & \varphi_{1N} \\ \mathbf{H}\varphi_{21} + E\varphi_{22} & \dots & \mathbf{H}\varphi_{2N} + E\varphi_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_{N1} & \dots & \varphi_{NN} \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \underbrace{\begin{bmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_N \end{bmatrix}}_{\mathbf{\Lambda}} = \underbrace{\begin{bmatrix} z_1^l \\ 0 \\ \vdots \\ \frac{e^{-i\beta n_s z_N}}{\beta n_s z_N} \end{bmatrix}}_{\mathbf{M}} \quad (3.32)$$

Burada N toplam veri noktası $z \in [0, 2]$ aralığı içinde belirlenmektedir. Böylece $z = r/R_0$ eksenini kullanıldığı için $z \in [0, 1]$ aralığı küre içini temsil ederken $z > 1$ ise küre dışını temsil eder.

Eşitlik (3.32), $\mathbf{\Lambda}$ matrisi için çözülürse $\Psi_{in} = \mathbf{\Phi}\mathbf{\Lambda}$ ve $\Psi'_{in} = \mathbf{\Phi}'\mathbf{\Lambda}$ vektörleri elde edilir. $\mathbf{\Phi}$ ve $\mathbf{\Phi}'$ matrisleri sırasıyla eşitlik (3.33) ve eşitlik (3.34)'deki gibi olur.

$$\mathbf{\Phi} = \begin{bmatrix} \varphi_{11} & \dots & \varphi_{1N} \\ \varphi_{21} & \dots & \varphi_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_{N1} & \dots & \varphi_{NN} \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

$$\mathbf{\Phi}' = \begin{bmatrix} \varphi'_{11} & \dots & \varphi'_{1N} \\ \varphi'_{21} & \dots & \varphi'_{2N} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi'_{N1} & \dots & \varphi'_{NN} \end{bmatrix} \quad (3.34)$$

Finalde küre içindeki alan dağılımı ve türevini temsil eden vektörler eşitlik (3.35) ve eşitlik (3.36)'deki gibi elde edilir.

$$\Psi_{in} = \Phi \Lambda \quad (3.35)$$

$$\Psi'_{in} = \Phi' \Lambda \quad (3.36)$$

Küre yüzeyi sınırında ($z = 1$), Ψ_{in} vektörünün satır numarası m olsun. Bu durumda $\Psi_{in,m}$ değeri elektromanyetik sınır koşullarını sağlamalıdır. Diğer yandan sınır koşullarını uygulayabilmek için küre dışındaki alan dağılımının ne olduğuna karar vermek gerekir. Daha önce belirtildiği gibi WGM modları sızdıran modlar olduğu için, yüzeye çok yakın bölgelerde dış alanın exponansiyel olarak bozunması gerektiği söylenebilir. Bu nedenle burada dış alan dağılımı için eşitlik (3.37) kullanılmıştır (Little vd 1999).

$$\psi_{out}(z) = e^{-\alpha(z-1)} \quad (3.37)$$

Burada $\alpha = \sqrt{\gamma^2 - \beta^2}$ ve $\gamma = \sqrt{l(l+1)}$ ile verilir. Eşitlik (3.37)'in dış alan dağılımı olarak kullanılmasıyla TE ve TM mod için sınır koşulları sırasıyla eşitlik (3.38) ve eşitlik (3.39)'deki gibi olur.

$$\frac{\Psi'_{in,m}}{\Psi_{in,m}} = \frac{\psi'_{out}(1)}{\psi_{out}(1)} \quad (3.38)$$

$$\frac{1}{n_s^2} \frac{\Psi'_{in,m}}{\Psi_{in,m}} = \frac{\psi'_{out}(1)}{\psi_{out}(1)} \quad (3.39)$$

Bu tez çalışmasında yapılan hesaplamalar için $z \in [0, 2]$ aralığındaki radyal uzayda $N = 201$ adet veri noktası ve $n = 4$ mertebesindeki TPS tipi RBF kerneli kullanılmıştır

4. BULGULAR VE TARTIŞMA

Dielektrik mikro kürelerin WGM modları için hem WKB hem de RBF metodu kullanımında hava içinde bulunan $n_s = 1.52$ kırılma indisli bir küre ve $l = 120$ açısal momentum kuantum mod sayılı bir sistem örnek olarak kullanılmıştır. Mükemmel küre için analitik bir transandantal eşitlik mevcut olduğundan, WKB ve RBF ile elde edilen sonuçların bu analitik eşitlikten elde edilen sonuçlarla karşılaştırılarak doğruluk ve hassasiyetleri gösterilebilmiştir. Öncelikle WKB yaklaşımı ile elde edilen sonuçlar ve daha sonra da RBF ile elde edilen sonuçlar sunulacaktır.

4.1. WKB Yaklaşımı ile Elde Edilen Sonuçlar

Çizelge 4.1’de eşitlik (3.22)’den elde edilen WKB sonuçları ve eşitlik (2.109)’den elde edilen sonuçlar hem TE hem de TM mod için karşılaştırmalı olarak verilmektedir. Çizelge sadece ilk beş boyut parametresini göstermektedir.

Çizelge 4.1. $l = 120$ ve $n_s = 1.52$ değerlerine sahip dielektrik mikroküre WGM rezonans modları için WKB ile elde edilen karşılaştırmalı ilk beş değer

TE Mod	β <i>eşitlik (2.109)</i>	β <i>eşitlik (3.22)</i>
$q = 1$	84.529948	84.519540
$q = 2$	89.292787	89.299336
$q = 3$	93.304176	93.314113
$q = 4$	96.932538	96.944170
$q = 5$	100.31663	100.32983
TM Mod	β <i>eşitlik (2.109)</i>	β <i>eşitlik (3.22)</i>
$q = 1$	85.016333	84.979189
$q = 2$	89.768226	89.760632
$q = 3$	93.766559	93.767044
$q = 4$	97.379282	97.384487
$q = 5$	100.74454	100.75395

Çizelge 4.2 ise düşük mertebe rejimi için WKB yaklaşımı ile elde edilen elde edilen eşitlik (3.24)'daki tam kuantizasyon koşulu ve yine aynı rejim için daha önce Lam ve Treussart tarafından elde edilen eşitliklerden (Lam vd 1992; Treussart 1997) elde edilen değerler hem TE hem de TM mod için karşılaştırmalı olarak verilmektedir. Bu Çizelge da yine sadece ilk beş boyut parametresini göstermektedir.

Çizelge 4.2. $l = 120$ ve $n_s = 1.52$ değerlerine sahip dielektrik mikroküre WGM rezonans modlarının $\beta \sim \nu/n_s$ rejiminde elde edilen düşük mertebe WGM rezonans modları için WKB ile elde edilen karşılaştırmalı ilk beş değer

TE Mod	$\sim \beta$ (Lam vd 1992)	$\sim \beta$ (Treussart 1997)	$\sim \beta$ eşitlik (3.24)
$q = 1$	84.433059	84.387004	84.428924
$q = 2$	88.946151	88.930317	88.965526
$q = 3$	92.641059	92.632300	92.669185
$q = 4$	95.906636	95.900824	95.940961
$q = 5$	98.891802	98.887554	98.931400
TM Mod	$\sim \beta$ (Lam vd 1992)	$\sim \beta$ (Treussart 1997)	$\sim \beta$ eşitlik (3.24)
$q = 1$	84.928526	84.882471	84.868131
$q = 2$	89.441618	89.425784	89.391700
$q = 3$	93.136526	93.127767	93.078854
$q = 4$	96.402103	96.396291	96.334602
$q = 5$	99.387269	99.383021	99.309791

WKB yaklaşımı ile elde edilen eşitlik (3.22) de yine eşitlik (2.109)'daki gibi transandantal bir eşitliktir. Fakat WKB ile elde edilen eşitlik bir q kuantizasyon terimi barındırmaktadır. Bu terim, istenilen kökün bulunmasında avantaj sağlar. Örneğin eşitlik (2.109)'daki klasik transandantal eşitlikte istenilen köke yakın bir başlangıç değeri kullanılan kök bulma metoduna verilmezse istenilen kökten başka bir kök elde edilebilir. Bu nedenle kökleri kabaca görmek için önce geniş bir kök aralığında bir grafik çizmek ve istenen köke yakın bir başlangıç değeri tahmin etmek gerekir. WKB yaklaşımı ile elde

edilen eşitlik (3.22) ise sahip olduğu q kuantizasyon terimi sayesinde herhangi bir başlangıç değeri ile istenen kökü verebilir. Örneğin birinci kök isteniyorsa basitçe bu eşitlikte $q = 1$, ikinci kök isteniyorsa $q = 2$ vb. kullanmak yeterlidir. Diğer yandan WKB yaklaşımı ile $\beta \sim \nu/n_s$ rejiminde elde edilen ve tam bir kuantizasyon koşulu olan eşitlik (3.24) de oldukça doğru sonuçlar verebilmektedir. Özellikle mod spektrumunda oldukça geniş bir alan kaplayan ilk mod için bu eşitlik ile elde edilen sonuç oldukça iyidir. Fakat radyal mod numarası q artışıyla doğruluk da giderek azalmaktadır.

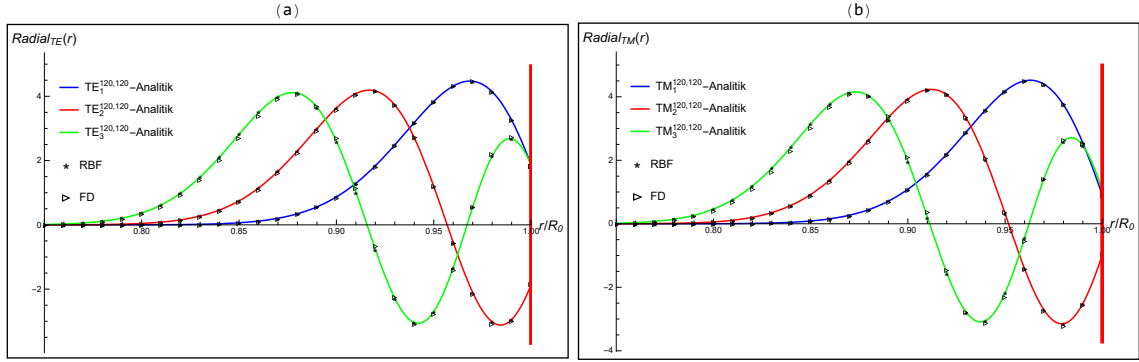
4.2. RBF Metodu ile Elde Edilen Sonuçlar

Çizelge 4.3’de eşitlik (3.38) ve eşitlik (3.39)’e dayanan, RBF metoduyla elde edilen sonuçlar, eşitlik (2.109) ile elde edilen analitik sonuçlar ve FD metoduyla elde edilen nümerik sonuçlarla karşılaştırmalı olarak verilmektedir. Çizelge yine sadece ilk beş boyut parametresini göstermektedir.

Çizelge 4.3. $l = 120$ ve $n_s = 1.52$ değerlerine sahip dielektrik mikroküre WGM rezonans modları için RBF ve FD ile elde edilen karşılaştırmalı ilk beş değer

TE Mod	β <i>eşitlik (2.109)</i> (Analitik)	β RBF	β FD
$q = 1$	84.529948	84.538003	84.537593
$q = 2$	89.292787	89.306497	89.266195
$q = 3$	93.304176	93.326542	93.215289
$q = 4$	96.932538	96.967013	96.757363
$q = 5$	100.31663	100.367147	100.032514
TM Mod	β <i>eşitlik (2.109)</i> (Analitik)	β RBF	β FD
$q = 1$	85.016333	85.027424	85.015727
$q = 2$	89.768226	89.785228	89.724687
$q = 3$	93.766559	93.792822	93.656808
$q = 4$	97.379282	97.418653	97.182735
$q = 5$	100.74454	100.801448	100.441668

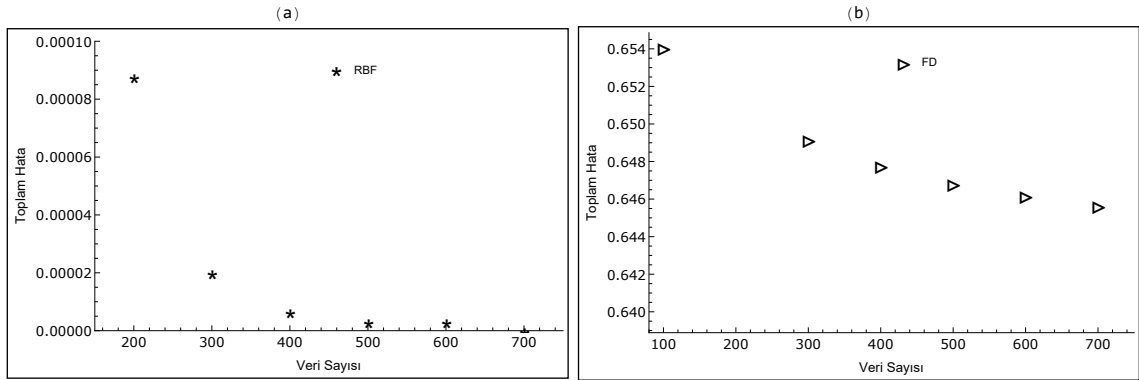
Diğer yandan ilk üç radyal modun normalize alan dağılımları da RBF, FD ve analitik eşitliklerle elde edilmiştir. Bu alan dağılımları Şekil 4.1’de gösterilmektedir. Şekilde q , l ve m sırasıyla radyal, açısız ve azimutal mod sayılarını göstermektedir.



Şekil 4.1. Analitik , FD ve RBF eşitliklerinden elde edilmiş, ilk üç radyal moda ait normalize alan dağılımları **a)** TE mod; **b)** TM Mod

RBF ve FD hesaplamaları için verilen sonuçların her ikisinde de $z \in [0, 2]$ uzay aralığında $N = 201$ tane veri noktası kullanılmıştır. Kullanılan RBF kerneli ise $n = 4$ mertebesinde TPS kernelidir. Kökleri elde etmek için kullanılan kök bulma metodu ise Newton kök bulma metodudur. FD metot için kullanılan FD metodu da tez yazarı tarafından yazılmıştır. Yazılan kodda, en doğru sonucu verebilen merkezi (central) türev FD metodu dikkate alınmıştır. Diğer iki FD metodu ise geri (backward) FD ve ileri (forward) FD metotlarıdır. Ayrım basitçe şöyledir; örneğin bir f_2 noktasının sonlu türevi geri FD metodunda $\frac{f_2 - f_1}{\Delta x}$, ileri FD metodunda $\frac{f_3 - f_2}{\Delta x}$ ile temsil edilirken merkezi FD metodunda $\frac{f_3 - f_1}{2\Delta x}$ ile temsil edilir.

RBF hesaplamalarının FD hesaplamaları ile karşılaştırılması adına ayrıca farklı sayıda veri noktaları alınarak da hesaplamalar yapılmış ve toplam hata varyasyonları elde edilmiştir. Bu varyasyonlar Şekil 4.2’de gösterilmektedir.



Şekil 4.2. Farklı sayıda veri noktası için toplam hata varyasyonları **a)** RBF; **b)** FD

řekilden de anlařılabileceėi gibi RBF metodu FD metoda nazaran daha iyi varyasyonlar sunmaktadır. Bunun anlamı aynı mertebede doėruluklar iin FD metodu RBF metoduna nazaran daha ok veri noktasına ihtiya duymaktadır.

RBF ile yapılan alıřma "International Journal of Modern Physics C" isimli uluslararası hakemli dergide "<https://doi.org/10.1142/S0129183122501406>" doi numarasıyla yayına kabul edilmiřtir.



5. SONUÇLAR

Herhangi bir seri açılım yapılmaksızın dielektrik mikro rezonatör rezonans modları için WKB yaklaşımı kullanılarak elde edilen eşitlik bir transandantal eşitlik olmasına karşın geleneksel metotla elde edilmiş olan transandantal eşitliğe nazaran avantaj sağlayan bir kuantizasyon terimine sahiptir. Geleneksel eşitlik kullanımında doğru kökü bulmak için başlangıç değeri olarak köke yakın bir değer tahmin etmek gerekir ve bu nedenle eğer yakın bir başlangıç değeri kullanılmazsa başka kökler elde edilebilmektedir. Buna karşın bu çalışmada elde edilen eşitlikteki kuantizasyon terimi sayesinde başlangıç değeri olarak hangi değer kullanılırsa kullanılsın istenilen, doğru köke ulaşmak mümkündür. Örneğin 1. köke ulaşmak isteniyorsa kuantizasyon terimi için 1 değerini vermek yeterlidir vb. Ayrıca büyük l değerlerine sahip rezonatörler için tam bir kuantizasyon koşulu da elde edilebilmiştir. Bu durumda temelde kütleli parçacıklar için geliştirilen ve daha çok kuantum mekaniğine hitap eden analitik hesaplama araçlarının, uygun süreçler belirlenerek elektromanyetik problemlerde de kullanılabileceği söylenebilir.

Diğer yandan dielektrik mikro rezonatör rezonans modları RBF metodunun kullanımıyla ilk defa elde edilmiştir. RBF yanında FD metoduyla da sonuçlar hesaplanmış ve karşılaştırma yapılmıştır. Bu karşılaştırmayla RBF ile elde edilen sonuçların çok daha hassas olduğu ve aynı sayıda veri noktası kullanıldığında RBF ile elde edilen hesaplamalardaki hata varyasyonlarının FD sonucu elde edilen hata varyasyonlarından daha iyi olduğu gözlenmiştir. Burada çalışılan ve analitik bir eşitliğe sahip olan mükemmel küre geometrinin yanında söylemek gerekir ki henüz analitik eşitliklere sahip olmayan prolate ve oblate geometriler gibi mükemmel küre harici geometrilerde de RBF kullanımıyla yüksek doğrulukta sonuçlar elde etmek mümkün görünmektedir

6. KAYNAKLAR

- Arnold, S., Holler, S. and Druger, S. D. 1996., The role of mdrs in chemical physics: Intermolecular energy transfer in microdroplets, *Optical processes in microcavities World Scientific*, 285–313.
- Balac, S. 2019, Wgmode: A matlab toolbox for whispering gallery modes volume computation in spherical optical microresonators, *Computer Physics Communications*, 243, 121–134.
- Boztosun, I., Charafi, A. 2002, An analysis of the linear advection-diffusion equation using mesh-free and mesh-dependent methods, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 26, 10, 889-895.
- Buhmann, M. D. 2003, Radial Basis Functions: Theory and Implementations, Cambridge University Press, Cambridge.
- Chang, R. K. and Campillo, A. J. 1996, Optical processes in microcavities, World scientific, 3.
- Debye, P. 1909, Der Lichtdruck auf Kugeln von beliebigem Material, *Annalen der Physik*, 335, 11, 57-136.
- Fasshauer, G. E. 1999, Solving differential equations with radial basis functions: multilevel methods and smoothing, *Advances in Computational Mathematics*, 11, 2-3, 139-159.
- Foreman, M. R., Swaim, J. D. and Vollmer, F. 2015, Whispering gallery mode sensors, *Advances in optics and photonics*, 7, 2, 168–240.
- Ho, K.M., Chan, C.T., Soukoulis, C.M. 1990, Existence of a photonic gap in periodic dielectric structures., *Phys. Rev. Lett.*, 65, 3152–3155.
- Ilchenko, V. S. and Maleki, L. 2001., Novel whispering-gallery resonators for lasers modulators and sensors, *Laser Resonators IV*, 4270, 120–130.

- Joannopoulos, J. D., Johnson, S. G., Meade, R. D. and Winn, J. N., 2008. Photonic Crystals: Molding the Flow of Light. *Princeton University Press*, 283 p., Princeton.
- Johnson, B. R. 1993, Theory of morphology-dependent resonances: shape resonances and width formulas, *JOSA A.*, 10, 2, 343-352.
- Lam, C. C., Leung, P. T. and Young, K. 1992, Explicit asymptotic formulas for the positions, widths, and strengths of resonances in Mie scattering, *JOSA B.*, 9, 9, 1585-1592.
- Little, B. E., Laine, J. P. and Hermann, A. 1999, Analytic theory of coupling from tapered fibers and half-blocks into microsphere resonators, *Journal of lightwave technology*, 17, 4, 704.
- Lorenz, L. 1890, Lysbevægelsen i og uden for en af plane Lysbølger belyst Kugle.
- Matsko, A. B. and Ilchenko, V. S. 2006, Optical resonators with whispering-gallery modes-part I: basics, *IEEE Journal of selected topics in quantum electronics*, 12, 1, 3-14.
- Mie, G. 1908, Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen, *Annalen der Physik*, 330, 3, 377-445.
- Novotny L., Hecht B., 2006. Principles of Nano-Optics, *Cambridge University Press*, New York.
- Novotny, L. and Hecht, B. 2012, Principles of nano-optics, *Cambridge university press*.
- Nussenzveig, H. M. 1992, Diffraction Effects in Semiclassical Scattering, *Montroll Memorial Lecture Series in Mathematical Physics-Cambridge University Press*.
- Oraevsky, A. N. 2002, Whispering-gallery waves, *Quantum electronics*, 32, 5, 377.
- Rayleigh, J. W. S. 1888. On the remarkable phenomenon of crystalline reflexion described by Prof. Stokes, *Phil. Mag.*, 26, 256-265.
- Rayleigh, J. W. S. B. 1896, The theory of sound, 2, Macmillan.

- Rayleigh, J. W. S. B. 1910, Cxii. the problem of the whispering gallery, *The London-Edinburgh and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 20, 120, 1001-1004.
- Rayleigh, L. 1914, Ix. further applications of besel's functions of high order to the whispering gallery and allied problems, *The London-Edinburgh and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 27, 157, 100-109.
- Rumpf, R. 2015, University of Texas at El Paso College of Engineering Department of Electrical and Computer Engineering, Electromagnetics and Photonics Lecture Notes <http://emlab.utep.edu/ee5390fdtd.htm>
- Sukhoivanov, I. A. and Guryev, I. V. 2009. Photonic Crystals: Physics and Practical Modeling, *Springer Heidelberg Dordrecht London, New York*.
- Taflove, A., Hagness, S.C. 2000, Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method.
- Tang, B., Sun, L., Zheng, W., Dong, H., Zhao, B., Si, Q., Wang, X., Jiang, X., Pan, A. and Zhang, L. 2018, Ultrahigh quality upconverted single mode lasing in cesium lead bromide spherical microcavity, *Advanced Optical Materials*, 6, 20, 1800391.
- Treussart, F. 1997, Etude expérimentale de l'effet laser dans des microsphères de silice dopées avec des ions neodyme, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI.
- Vahala, K. J. 2003, Optical microcavities, *nature*, 424, 6950, 839-546.
- Vahala, K. J. 2004, Optical microcavities, *World Scientific*, 5.
- Vollmer, F. and Arnold, S. 2008., Whispering-gallery-mode biosensing: label-free detection down to single molecules, *Nature methods*, 5, 7, 591.
- Yablonovitch, E. 1987. Inhibited spontaneous emission insolid-state physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.*, 58, 2059–2062.
- Yee, K. 1966, Numerical solution of inital boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media, *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 14, 3, 302-307.

Zhang, M., Cheng, W., Zheng, Z., Cheng, J. and Liu, J. 2019, Meridian whispering gallery modes sensing in a sessile microdroplet on micro/nanostructured superhydrophobic chip surfaces, *Microfluidics and Nanofluidics*, 23, 9, 1–13.



ÖZGEÇMİŞ

CAN ERTUĞAY

ÖĞRENİM BİLGİLERİ

Doktora 2015-2022	Akdeniz Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik ABD, Antalya
Yüksek Lisans 2013-2015	Akdeniz Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik ABD, Antalya
Lisans 2008-2012	Akdeniz Üniversitesi Fen Fakültesi, Fizik Bölümü, Antalya
Lisans 2003-2009	Anadolu Üniversitesi İşletme Bölümü, Eskişehir

MESLEKİ VE İDARİ GÖREVLER

Öğretim Görevlisi 2021-2022	AKEV Üniversitesi MYO, Optisyenlik Bölümü, Antalya
--------------------------------	---

ESERLER

Uluslararası hakemli dergilerde yayınlanan makaleler

- 1- Ertugay, C., Boztosun, I., Ozmen, S. F., Djapo, H. 2015.,Qualitative Elemental Analyses of a Meteorite Sample Found in Turkey by Photo-activation Analysis Method, *Journal of Physics Conference Series*, 590, (1):012054, Doi:10.1088/1742-6596/590/1/012054.

- 2- Agar, O., Tekin, H. O., Sayyed, M. I., Korkmaz, M. E., Culfa, O., Ertugay, C. 2019., Experimental investigation of photon attenuation behaviors for concretes including natural perlite mineral, *Results in Physics*, 12, 237-243, Doi:<https://doi.org/10.1016/j.rinp.2018.11.053>
- 3- Ertugay, C., Boztosun, I., 2022., Numerical investigation of the resonance modes for the dielectric optical micro-spheres by using radial basis function method, *International Journal of Modern Physics C*, <https://doi.org/10.1142/S0129183122501406>, (Kabul edildi)

