

**T.C.  
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ**



**GRAFEN TABANLI PLAZMONİK SENSÖRLER VE UYGULAMALARI**

**Gülten ONAY**

**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**FİZİK**

**ANABİLİM DALI**

**DOKTORA TEZİ**

**HAZİRAN 2019**

**ANTALYA**

**T.C.  
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ**



**GRAFEN TABANLI PLAZMONİK SENSÖRLER VE UYGULAMALARI**

**Gülten ONAY**

**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**FİZİK**

**ANABİLİM DALI**

**DOKTORA TEZİ**

**HAZİRAN 2019**

**ANTALYA**

**T.C.  
AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**GRAFEN TABANLI PLAZMONİK SENSÖRLER VE UYGULAMALARI**

**Gülten ONAY  
FİZİK  
ANABİLİM DALI  
DOKTORA TEZİ**

**Bu tez FDK-2017-2760 nolu tez projesi olarak Akdeniz Üniversitesi Bilimsel  
Araştırma Birimi (BAP) tarafından desteklenmiştir.**

**HAZİRAN 2019**

**T.C.**  
**AKDENİZ ÜNİVERSİTESİ**  
**FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ**

**GRAFEN TABANLI PLAZMONİK SENSÖRLER VE UYGULAMALARI**

**Gülten ONAY**  
**FİZİK**  
**ANABİLİM DALI**  
**DOKTORA TEZİ**

Bu tez 14/06/2019 tarihinde jüri tarafından Oybirliği/Oyçokluğu ile kabul edilmiştir.

Prof. Dr. Nuri ÜNAL

Prof. Dr. Şükrü ÖZEN

Doç. Dr. Mustafa KURT

Doç. Dr. Sinan BALCI

Dr. Öğr. Üyesi Şerafettin YALTKAYA

## ÖZET

### GRAFEN TABANLI PLAZMONİK SENSÖRLER VE UYGULAMALARI

Gülten ONAY

Doktora Tezi, Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Prof. Dr. Nuri ÜNAL

Haziran 2019; sayfa 105

Metal/dielektrik ara yüzeyinde uyarılan yüzey plazmon polaritonlar, sensör uygulamalarında uzun yıllardır kullanılmaktadır. Bununla birlikte, son yıllarda bilgisayar teknolojisindeki büyük gelişme sayesinde sensörler üzerindeki çalışmalar, simülasyon çalışmalarıyla da desteklenmeye başlamıştır. Simülasyon çalışmalarında, plazmonik sensörler üzerine yapılan çalışmalarda kullanılan aşamaların en aza indirilmesi konusunda yoğunlaşmaktadır. Ayrıca, elektrik alan etkisiyle optik özelliklerinde değişiklik yapılabilen grafen, tasarlanacak olan plazmonik sensörlerde kullanılmaktadır. Zaman uzayında sonlu farklar yöntemi (FDTD) simülasyon programı ile tasarlanan plazmonik sensörün geniş bir aralıkta frekans cevabını elde etmek mümkün olmaktadır.

Bu tez kapsamında temel malzeme olarak kullanılan grafen; elektromanyetik spektrumun kızılötesi bölgesinden THz frekans bölgesine kadar plazmonik özellik gösterebilen bir malzemedir. Ayrıca, tasarlanan yapıya elektrik alan uygulanarak grafenin optik özelliklerinde değişiklik yapılabilir. Böylece, görünür bölgede grafen tabanlı sensör tasarlamak mümkün olmaktadır. Plazmonik sensörün tasarımı aşamasında metot olarak periyodik yapı ile eşleme kullanılmıştır. Bu metot ile yapıların boyut, şekil ve malzeme çeşidi değiştirilerek malzemenin rezonans dalgaboyu değiştirilebilmektedir. Rezonans frekansı aktif olarak ayarlanabilen sensör tasarımının günümüzde büyük avantajları bulunmaktadır. Tasarlanan plazmonik sensörler üretildikten sonra özellikleri değiştirilememektedir. Hâlihazırda tasarlanmış olan sensörü farklı bir dalgaboyu aralığında çalıştırmak için en baştan sensör tasarlamak gerekmektedir. Sensörler üzerine yapılan çalışmalar; sensör tasarımı, simülasyon aşamalarını gerçekleştirme, üretim ve kullanma aşamalarından oluşmaktadır. Ancak deney sonuçları ile hesaplamalar çelişirse ya da parametre değişikliğine gidilecek olursa en başa dönmek gerekmektedir. Bu tez kapsamında rezonans frekansı aktif kontrollü plazmonik sensör tasarlamak günümüz teknolojisi ile birleşerek büyük avantajlar sunmaktadır. Diğer taraftan temel malzeme olarak kullanılan grafene voltaj uygulanarak elektron durum yoğunluğu değiştirilebilmektedir. Böylece grafenin optik özelliklerinde değişiklik yapılabilmesi için tasarlanacak sensörde kullanılmaktadır.

Gerçekleştirilen çalışmalarda temel amaç rezonans frekansı aktif ayarlanabilen plazmonik sensör tasarlanmaktadır. Tasarlanacak olan plazmonik sensörün çok geniş frekans aralığında çalışılmasına olanak sağladığı için grafen temel malzeme olarak kullanılmıştır. Çünkü grafen, THz bölgesinde plazmonik özellik gösterebilen bir malzemedir. İşte bizim bu noktada amacımız plazmonik sensörlerin rezonans frekansını, grafenin kimyasal potansiyelini değiştirerek aktif olarak ayarlamaktır.

Böylece yapılacak çalışmalarda aşamaların tekrarlanmasına gerek kalmadan çalışmalara devam edilebilecektir. Hem zamandan tasarruf edilecek hem de araştırma yelpazesi genişletilecektir.

Özet olarak; bu tez kapsamında rezonans frekansı aktif olarak ayarlanabilen grafen tabanlı plazmonik sensör tasarımı yapılacaktır. Tasarlanan plazmonik sensör üzerinde istenilen değişiklikler rezonans frekansının aktif kontrolü ile gerçekleştirilecektir.

**ANAHTAR KELİMELEER:** FDTD, grafen, Maxwell denklemleri, plazmonik sensör, rezonans frekansı

**JÜRİ:** Prof. Dr. Nuri ÜNAL

Prof. Dr. Şükrü ÖZEN

Doç. Dr. Mustafa KURT

Doç. Dr. Sinan BALCI

Dr. Öğr. Üyesi Şerafettin YALTKAYA

## **ABSTRACT**

### **THE PLASMONIC SENSORS BASED ON GRAPHENE AND APPLICATIONS**

**Gulten ONAY**

**PhD Thesis in Physics**

**Supervisor: Prof. Dr. Nuri UNAL**

**June 2019; pages 105**

The plasmon polaritons on surface, that are induced in the metal/dielectric interface, have been used in sensor applications for a long time. Thanks to the great improvement on the informatic technology, the studies on sensors have begun to be supported with the simulation studies. The phases of the design, simulation, production and usage have been pursued for the studies of the plasmonic sensors. Despite these applying the phases at every turn, designing plasmonic sensors, of which resonance frequency can be tuned in actively, provides important advantages. The plasmonic sensors that will be designed as a graphene,-of which qualifications can be changed, have been also used. This graphene has an electrical traction effect. It has been possible to receive the answer of the frequency of the plasmonic sensor in a large vacancy, that has been designed with FDTD simulation programme.

The graphene, which is used as a fundamental material within this thesis, is a material, which has a plasmonic qualification between the infrared to THz frequency range. A sensor has been able to design in a visible area by changing its optical qualifications and applying electric field. The match-up with a periodical structure has been used methodically during the design of the plasmonic sensor. The resonance wavelength can be changed by changing the dimension, the form and the kind of the material of the structures. The design of the sensor, of which resonance frequency can be tuned in actively, has great advantages nowadays. After the designed sensors have been produced, their qualifications can not be changed. To operate the currently designed sensor in a different wavelength gap, sensor is supposed to be designed from the beginning. The studies on sensors consist of the phases of the sensor design, bringing about the simulation phases, production and the usage. If the results of the experiment contrasts with the reckonings, or the variance of the parameter decided, it is supposed to be started over. To design a plasmonic sensor,-of which resonance frequency is controlled actively within this project, presents great advantages by combining with the current technology. On the other hand, the electron circumstance intensity of a graphene is able to be changed by applying voltage on it. In this way it has been used on the sensor, which will be designed, because of that the qualifications of a graphen are able to be changed.

The main purpose of the actualized studies, is to design a plasmonic sensor, of which resonance frequency can be tuned in actively. A graphene has been used, because of that the plasmonic sensor-that will be designed- is supposed to have a large gap for scanning from the large frequency gap, namely; from the infrared area till THz frequency area. Because a graphene is a material that has plasmonic qualifications in

THz area. Our aim is to proceed about the studies, without repeating these phases, because of that the resonance frequency of the plasmonic sensors can be tuned in actively. In this way, both the time will be saved, and the researches will be varied.

In substance, the plasmonic sensor design based on graphene, of which resonance frequency can be tuned in actively, will be do within this thesis. The intended alteration on the designed plasmonic sensor, will be able to carry out without starting over, because of the resonance frequency.

**KEYWORDS:** FDTD, graphene, Maxwell equations, plasmonic sensor, resonance frequency

**COMMITTEE:** Prof. Dr. Nuri UNAL

Prof. Dr. Sukru ÖZEN

Assoc. Prof. Mustafa KURT

Assoc. Prof. Sinan BALCI

Asst. Prof. Serafettin YALTKAYA



## ÖNSÖZ

Aktif kontrollü sensör tasarımları üzerine yapılan çalışmalar son yıllarda oldukça popüler hale gelmiştir. Hem deneysel hem de teorik çalışmalar bu kadar fazla iken bu bilgi havuzuna katkıda bulunmak için üzerime düşenin en iyisini yapmaya çalışıyorum. Kullandığım simülasyon programı ile sensör tasarımları üzerine çalışmalarımı büyük özveri ile gerçekleştiriyorum. Bu yolda ilerlerken aldığım desteklere teşekkürü borç bilirim.

Doktora eğitimimin ilk gününden itibaren varlığıyla bana en büyük desteği veren, laboratuvarımıza yaptığı ziyaretlerde anlattığı anılarıyla yol gösterici olan saygıdeğer bilim insanı Prof. Dr. Nuri ÜNAL hocama teşekkür ve minnetlerimi sunarım.

Bilgi birikimini benden esirgemeyen, tezimin temelini birlikte attığım, çalışmalarımnda her zaman yanımda olan değerli hocam Dr. Öğretim Üyesi Ramazan ŞAHİN hocama teşekkür ederim. Paylaştığı bilgilerle, manevi desteğiyle bu zorlu yolculukta motivasyonumun büyük parçası olan sayın Dr. Öğretim Üyesi Şerafettin YALTKAYA hocama teşekkür ederim. Tezimin tez izleme komite üyesi Doç. Dr. Mustafa KURT hocama nezaketi ve destekleri için teşekkür ederim.

Akademik hayatımın ilk gününden bu yana maddi ve manevi desteklerini hiçbir zaman esirgemeyen ve gösterdikleri sabırdan dolayı, babam Ramazan ONAY, annem Saliha ONAY ve ablam Gülten İstem KARAKAŞ' a emeklerinin küçük bir karşılığı olarak bu çalışmayı ithaf ediyorum.

Tabii ki son olarak bizlere bilgiyi armağan eden bilim insanlarına, doğanın gizemini çözme noktasında cesaret verdikleri için ve değerli bilim insanlarını bize bağışlayan tarihe teşekkür ederim.

## İÇİNDEKİLER

ÖZET.....	i
ABSTRACT.....	iii
ÖNSÖZ.....	v
AKADEMİK BEYAN .....	viii
SİMGELER VE KISALTMALAR .....	ix
ŞEKİLLER DİZİNİ.....	xiii
1. GİRİŞ .....	1
2. KAYNAK TARAMASI .....	3
2.1. Yüzey Plazmon Teorisi .....	10
2.1.1. Metallerin elektromanyetik teorisi.....	10
2.1.2. Madde içinde Maxwell denklemleri .....	11
2.1.3. Metallerin optik özellikleri .....	14
2.1.4. Serbest elektronlar ve bant arası geçişler.....	14
2.1.5. Optik frekanslarda metaller .....	15
2.1.6. Drude modeli .....	17
2.1.7. Lorentz modeli.....	20
2.1.8. Lorentz-Drude modeli .....	22
2.2. Metal-Dielektrik Ara Yüzeyinde Yüzey Plazmon Polariton.....	22
2.2.1. Dalga denklemi .....	23
2.2.2. Tek yüzeyli sistemlerde yüzey plazmon polariton .....	28
2.2.3. Çok yüzeyli sistemlerde yüzey plazmon polariton.....	30
2.2.4. Yayılan ve lokalize yüzey plazmonlar.....	32
2.3. Yüzey Plazmonların Uyarımı .....	36
2.3.1. Prizma ile eşleme (Kretschmann-Otto konfigürasyonu) .....	36
2.3.2. Periyodik yapı ile eşleme.....	37
3. MATERYAL VE METOT .....	39
3.1. Zaman Uzayında Sonlu Farklar Yöntemi (FDTD).....	39
3.1.1. FDTD modeli.....	39
3.1.2. FDTD modelinde Maxwell denklemleri.....	39
3.1.3. Yee hücresi .....	41
3.1.4. Ayırıklaştırma .....	42

3.1.5. FDTD denklemleri.....	44
3.1.6. FDTD algoritması.....	47
3.1.7. İteraktif denklemlerin kararlılık kriteri.....	50
3.1.8. Sınır koşulları.....	50
3.2. Grafen .....	51
3.2.1. Grafenin optik özellikleri.....	52
3.2.2. FDTD modelinde grafen.....	52
4. BULGULAR VE TARTIŞMA .....	54
4.1. Plazmonik Tabanlı Uygulamalar .....	54
4.1.1. Kretchmann yöntemi uygulaması .....	54
4.1.2. Izgara yapı ile eşleme uygulaması .....	56
4.1.3. Sıradışı geçirgenlik uygulaması .....	58
4.1.4. Grafen tabanlı uygulamalar .....	62
4.2. Güneş Pilleri .....	78
4.2.1. Güneş pillerinin çalışma prensibi .....	79
4.2.2. Güneş pillerinin özellikleri .....	80
4.2.3. Güneş pili çeşitleri .....	81
4.2.4. Güneş pilleri uygulamalar.....	83
4.3. Raman Saçılması .....	93
4.3.1. Raman spektroskopisi prensibi.....	93
4.3.2. Yüzey zenginleştirilmiş raman spektroskopisi (SERS).....	94
4.3.3. SERS uygulaması .....	96
5. SONUÇLAR .....	98
6. KAYNAKLAR .....	100
ÖZGEÇMİŞ	

## AKADEMİK BEYAN

Doktora Tezi olarak sunduđum ‘‘Grafen Tabanlı Plazmonik Sensörler ve Uygulamaları’’ adlı bu çalışmanın, akademik kurallar ve etik değerlere uygun olarak yazıldığını belirtir, bu tez çalışmasında bana ait olmayan tüm bilgilerin kaynağını gösterdiğimi beyan ederim.

14/06/2019

Gülten ONAY

## SİMGELER VE KISALTMALAR

### Simgeler

$Ag$  : Gümüş

$Au$  : Altın

$\vec{B}$  : manyetik alan

$c$  : ışık hızı

$Cr$  : Bakır

$\vec{D}$  : elektriksel yer değiştirme vektörü

$\vec{E}$  : elektrik alan

$E_F$  : Fermi enerjisi

$\vec{F}$  : kuvvet

$GaAs$  : Galyum Arsenik

$\vec{H}$  : manyetik alan

$\vec{J}$  : akım yoğunluğu

$k_0$  : boş uzayın dalga vektörü

$\vec{k}$  : yayılım vektörü

$k_{SPP}$  : yüzey plazmon polariton dağınım vektörü

$\vec{M}$  : mıknatıslanma

$m$  : kütle

$m_e$  : elektron kütlesi

$N$  : birim hücredeki elektron sayısı

$n$  : kırılma indisi reel kısım

$nm$  : nanometre

$\tilde{n}$  : kompleks kırılma indisi

$\vec{P}$  : polarizasyon

$Pt$	: Platin
$\vec{P}$	: kutuplanma vektörü
$\vec{S}$	: Poynting vektörü
$Si$	: Silisyum
$THz$	: Tera Hertz
$\sigma$	: iletkenlik
$\epsilon_0$	: ortam dielektrik sabiti
$\epsilon_r$	: metal dielektrik sabiti
$\omega$	: frekans
$\omega_p$	: plazma frekansı
$\gamma$	: sönüm sabiti
$\omega_0$	: rezonans frekansı
$\vec{a}$	: ivme
$\vec{X}$	: yer deęiřtirme
$e^-$	: elektron
$\rho$	: yük yoğunluęu
$\kappa$	: kırılma indisi imajiner kısım
$q_e$	: elektron yükü
$\vec{r}$	: yer deęiřtirme vektörü
$\chi_e$	: elektrik alınganlıęı
$t$	: zaman
$\mu$	: kimyasal potansiyel
$\beta$	: plazma dalga vektörü
$\vec{\nabla}$	: laplasyen
$\Delta x$	: yer deęiřtirme

$\Delta t$	: geen zaman
$v$	: dalga hızı
$\tau$	: durulma süresi
$\lambda_{SPR}$	: yüzey plazmon rezonans dalgaboyu
$\hbar$	: Planck sabiti
$um$	: mikron
$r$	: yarıap
$\mu_g$	: grafen kimyasal potansiyeli
$\alpha$	: paracığın polarize edilebilirliđi
$V$	: paracık hacmi

### **Kısaltmalar**

ABC	: Sođurucu Sınır Koşulları
AR	: Yansıma Önleyici
DDA	: Ayrık Dipol Yaklaşımı
FDTD	: Zaman Uzayında Sonlu Farklar
GFSS	: Seçici Yüzey Grafen frekansı
IMI	: Dielektrik/Metal/Dielektrik
LSPR	: Lokalize Yüzey Plazmon Rezonans
MIM	: Metal/Dielektrik/Metal
NPs	: Nanoprizmalar
PML	: Mükemmel Uyumlu Katman
SBM	: Örneklenmiş Bragg Aynaları
SPP	: Yüzey Plazmon Polariton
SPR	: Yüzey Plazmon Rezonans

SERS : Yüzey Zenginleştirilmiş Raman Saçılması

SLG : Tek katman grafen

TE : Enine Elektrik alan

TM : Enine Manyetik alan



## ŞEKİLLER DİZİNİ

Şekil 2.1. Romalılar tarafından yapılan Lycurgus Kupası.....	3
Şekil 2.2. İletim elektronları bant yapısı.....	14
Şekil 2.3. a) Yalıtkanların bant yapısı, b) Yarıiletkenlerin bant yapısı, (c) Metallerin bant yapısı .....	15
Şekil 2.4. Altın metali için Drude ve Lorentz-Drude modeli dielektrik sabitleri reel/imajiner kısımlar .....	17
Şekil 2.5. a) Altın metalinin kırılma indisi reel kısmı, b) imajiner kısmı, c) Altın metali dielektrik sabitinin reel ve imajiner kısımları .....	20
Şekil 2.6. Çekirdek-elektron sistemi şematik gösterimi .....	21
Şekil 2.7. Elektromanyetik spektrum.....	23
Şekil 2.8. Kartezyen koordinatlarda elektromanyetik dalganın yayılımı .....	24
Şekil 2.9. Poynting vektörü.....	25
Şekil 2.10. Elektromanyetik dalganın metal-dielektrik ara yüzeyindeki p-modundaki polarizasyonu .....	27
Şekil 2.11. Metal-dielektrik ara yüzeyinde oluşan polarizasyon .....	28
Şekil 2.12. Farklı ortamlarda ilerleyen ışık için hesaplanan dispersiyon bağıntıları.....	29
Şekil 2.13. Yüzey plazmonlar için multi-yüzey geometrisi.....	30
Şekil 2.14. Kararlı dalga profili a) fotonik kristal içinde ışık, b) periyodik yapıda yüzey plazmon polaritonlar .....	33
Şekil 2.15. Elektrik alan dağılımları a) $\omega^+$ modu ve b) $\omega^-$ modu.....	33
Şekil 2.16. Düzgün metalik ızgara ve düzlemsel metal için SPP'lerin dağılım ilişkisinin şematik gösterimi .....	34
Şekil 2.17. Yayılan yüzey plazmon polaritonlar.....	34
Şekil 2.18. Lokalize yüzey plazmon polaritonlar .....	35
Şekil 2.19. Otto ve Kretschmann konfigürasyonu .....	37
Şekil 2.20. Periyodik yapı ile eşleme (Grating Coupling).....	37
Şekil 3.1. Yee Hücresi .....	42
Şekil 3.2. FDTD metodu çalışma şeması.....	42

<b>Şekil 3.3.</b> Merkezi fark yaklaşımı- Türev hesabı.....	44
<b>Şekil 3.4.</b> FDTD modeli.....	44
<b>Şekil 3.5.</b> FDTD algoritması akış şeması.....	49
<b>Şekil 3.6. a)</b> Grafit, <b>b)</b> Grafen.....	51
<b>Şekil 3.7.</b> Grafen malzemenin kimyasal potansiyeli değişiminde geçirgenlik- dalga boyu grafiği.....	52
<b>Şekil 3.8.</b> Grafen şeritler ile modelleme .....	53
<b>Şekil 4.1.</b> Yapının FDTD tasarımı (Cam yüzeyüne 50 nm Ag film).....	54
<b>Şekil 4.2.</b> Işığın geliş açısına bağlı yansıma grafiği.....	55
<b>Şekil 4.3. a)</b> Elektrik alan yoğunluğu, <b>b)</b> Yüzey plazmon rezonansın dispersiyon ilişkisi FDTD ile hesaplaması .....	55
<b>Şekil 4.4.</b> Cam/Cr/Au ızgaralama yöntemi FDTD modeli görüntüsü .....	56
<b>Şekil 4.5.</b> Farklı kırılma indisine sahip ortamlarda geçirgenlik-dalgaboyu grafiği .....	57
<b>Şekil 4.6.</b> Farklı periyotlar için geçirgenlik-dalgaboyu grafiği.....	57
<b>Şekil 4.7.</b> Sıradışı geçirgenlik biçin tasarlanan yapının FDTD modeli görüntüsü .....	58
<b>Şekil 4.8.</b> Nanodelikler varken ve yokken; <b>a)</b> geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, <b>b)</b> yansıma-dalgaboyu grafiği .....	59
<b>Şekil 4.9. a)</b> Geçirgenlik ve yansımanın dalgaboyuna bağlı grafiği, <b>b)</b> farklı hole yarıçaplarında geçirgenlik-dalgaboyu grafiği .....	60
<b>Şekil 4.10.</b> Nano deliklerin geçirgenlik ve yansıma şiddetleri .....	61
<b>Şekil 4.11.</b> Kullanılan Au metalinin kırılma indisi teorik hesabı .....	61
<b>Şekil 4.12.</b> FDTD modelleme görüntüsü .....	62
<b>Şekil 4.13. a)</b> Farklı periyotlarda geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, <b>b)</b> Periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalgaboyu grafiği, <b>c)</b> Periyoda bağlı kalite faktör grafiği .....	63
<b>Şekil 4.14. a)</b> 300 nm periyotta farklı katman sayısında geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, <b>b)</b> periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalgaboyu grafiği, <b>c)</b> periyoda bağlı kalite faktör grafiği.....	64
<b>Şekil 4.15. a)</b> 400 nm periyotta farklı katman sayısında geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, <b>b)</b> periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalgaboyu grafiği, <b>c)</b> periyoda bağlı kalite faktör grafiği.....	65

<b>Şekil 4.16. a)</b> 500 nm periyotta farklı katman sayısında geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, <b>b)</b> periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalgaboyu grafiği, <b>c)</b> periyoda bağlı kalite faktör grafiği.....	66
<b>Şekil 4.17. a)</b> 600 nm periyotta farklı katman sayısında geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, <b>b)</b> periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalgaboyu grafiği, <b>c)</b> periyoda bağlı kalite faktör grafiği.....	67
<b>Şekil 4.18. a)</b> 300 nm periyotta tek katmanlı grafen ile farklı kimyasal potansiyellerde geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, <b>b)</b> periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalgaboyu grafiği, (periyoda bağlı kalite faktör grafiği).....	68
<b>Şekil 4.19. a)</b> 300 nm periyotta 4-katmanlı grafen ile farklı kimyasal potansiyellerde geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, <b>b)</b> periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalgaboyu grafiği, (periyoda bağlı kalite faktör grafiği) .....	69
<b>Şekil 4.20. a)</b> 400 nm periyotta tek katmanlı grafen ile farklı kimyasal potansiyellerde geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, <b>b)</b> periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalgaboyu grafiği, (periyoda bağlı kalite faktör grafiği) .....	70
<b>Şekil 4.21. a)</b> 400 nm periyotta 4- katmanlı grafen ile farklı kimyasal potansiyellerde geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, <b>b)</b> periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalgaboyu grafiği, (periyoda bağlı kalite faktör grafiği) .....	71
<b>Şekil 4.22.</b> 500 nm periyotta, <b>a)</b> tek katmanlı grafen ile <b>b)</b> 4-katmanlı grafen ile farklı kimyasal potansiyellerde geçirgenlik-dalgaboyu grafiği.....	72
<b>Şekil 4.23.</b> 600 nm periyotta, <b>a)</b> tek katmanlı grafen ile <b>b)</b> 4-katmanlı grafen ile farklı kimyasal potansiyellerde geçirgenlik-dalgaboyu grafiği.....	73
<b>Şekil 4.24.</b> FDTD metodu grafen nanodisk tasarımı .....	74
<b>Şekil 4.25.</b> Farklı kimyasal potansiyel değerlerinde geçirgenlik-dalgaboyu grafiği .....	75
<b>Şekil 4.26. a)</b> 1 eV kimyasal potansiyelde farklı yarıçaplara sahip grafen nano disklerin ve <b>b)</b> 200 nm yarıçapta farklı kimyasal potansiyellerde geçirgenlik-dalgaboyu grafikleri .....	75
<b>Şekil 4.27.</b> FDTD metodu grafen kare disk tasarımı .....	76
<b>Şekil 4.28.</b> “0,25 eV” kimyasal potansiyelde farklı periyotlarda <b>a)</b> geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, <b>b)</b> Periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalga boyu grafiği, <b>c)</b> Periyoda bağlı kalite faktör grafiği .....	76
<b>Şekil 4.29.</b> “0,5 micron” periyotta farklı kimyasal potansiyellerde <b>a)</b> geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, <b>b)</b> Periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalga boyu grafiği, <b>c)</b> Periyoda bağlı kalite faktör grafiği .....	77

<b>Şekil 4.30.</b> “6 micron” periyotta farklı kimyasal potansiyelerde <b>a)</b> geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, <b>b)</b> periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalga boyu grafiği, <b>c)</b> periyoda bağlı kalite faktör grafiği.....	78
<b>Şekil 4.31.</b> Güneş pilinin çalışma mekanizması .....	80
<b>Şekil 4.32.</b> Güneş pilinin çeşitleri şematik gösterimi .....	81
<b>Şekil 4.33.</b> Güneş pilinin çalışma prensibi .....	83
<b>Şekil 4.34.</b> FDTD yönteminde düzlemsel güneş pili tasarımı .....	85
<b>Şekil 4.35.</b> Optiksel ve elektriksel birim hücre.....	86
<b>Şekil 4.36. a)</b> Silikon levhanın yansıma, geçirgenlik ve absorpsiyon değerlerinin dalgaboyuna bağlı grafiği, <b>b)</b> absorpsiyon değerinin teorik hesaplaması ile simülasyon çalışmasının karşılaştırması .....	87
<b>Şekil 4.37. a)</b> Elektron-delik çiftlerinin nerede yoğunlaştığını gösteren simülasyon, <b>b)</b> Absorpsiyonun y eksenine boyunca yoğunlaşma miktarı .....	88
<b>Şekil 4.38.</b> Absorpsiyonu artırmak için kullanılan malzeme varken ve yokken kıyaslaması.....	89
<b>Şekil 4.39.</b> FDTD modeli ile tasarlanan periyodik nanoparçacıklı güneş pili.....	89
<b>Şekil 4.40.</b> “Absorbsiyon artışı g” nin farklı yarıçaplı nanoparçacıklarda <b>(a)</b> gümüş için, <b>(b)</b> altın için dalgaboyuna bağlı grafikleri .....	90
<b>Şekil 4.41. a)</b> Plazmonik güneş pilinin ve <b>b)</b> düzlem güneş pilinin profili .....	91
<b>Şekil 4.42.</b> 2-boyutta ızgara yapılı güneş pili simülasyon görüntüsü .....	92
<b>Şekil 4.43.</b> Sıfır polarizasyon açısı; Doksan derece polarizasyon açısı.....	92
<b>Şekil 4.44.</b> Raman saçılmasının molekülün titreşim düzeyleri ile olan ilişkisi .....	94
<b>Şekil 4.45.</b> Raman saçılması ve SERS şeması.....	95
<b>Şekil 4.46.</b> Yüzey Zenginleştirilmiş Raman spektroskopisi .....	96
<b>Şekil 4.47.</b> FDTD metodu ile SERS uygulaması.....	96
<b>Şekil 4.48.</b> Sıcak nokta (hot point) şiddetleri.....	97

## 1. GİRİŞ

Plazmonik, metal/dielektrik ara yüzeylerinde elektronlar ile elektromanyetik radyasyon arasındaki etkileşimi inceleyen, nanofotonun bir dalı olarak bilinmektedir. Metal/dielektrik ara yüzeyindeki elektronlar ile elektromanyetik radyasyon arasındaki etkileşim, elektromanyetik radyasyon elektriksel bileşeni tarafından uyarılan serbest elektronların kolektif salınımlar yapması ile gerçekleşmektedir. Meydana gelen plazma salınımlarının kuantası “plazmon” adını almaktadır. Böylelikle tıpkı mekanik salınımların kuantalarının fonon, ışığın kuantalarının foton olarak adlandırılması gibi plazma salınımlarının kuantaları da plazmon olarak adlandırılmaktadır.

Yüzey plazmon kavramı, 1902 yılında Wood tarafından ilk kez gözlemlenmiştir (Wood, 1902). Wood' un yaptığı bu gözlemlerde, polarize ışığı bir kırınım düzenleyicinin yüzeyinden bir aynaya yansıttığı zaman aynada karanlık ve aydınlık bantlar tespit etmiştir. Bu keşfin ardından bu konu üzerine çalışmalar devam etmiştir. Teorik olarak gelişmelere Lord Rayleigh ve Fano katkıda bulunmuşlardır. Yüzey plazmon rezonans (SPR) kavramı tam anlamıyla 1968 yılında Otto ve Kretschmann tarafından rapor edilmiştir (Schasfoort ve Tudos, 2008). SPR teorisinin temel ilkesi; metalin serbest elektronları ile enerji taşıyan fotonun birleşmesi veya enerji aktarımı şeklinde açıklanabilmektedir. Metal üzerine gönderilen ışığın geliş açısı, her metal ve metal yüzeyinin çevresine göre değişmektedir. Elektromanyetik radyasyon ve metal üzerindeki serbest elektronlar arasında bir eşleşme olduğu zaman enerji transferi gerçekleşmektedir. Özet olarak, sistem üzerine gönderilen ışık birçok açıda yansırken, ışığın bir bölümü rezonans açısında metal tarafından absorplanmaktadır. Yapılan çalışmalar geliştirilerek elde edilen gelişmeler ile SPR temeline dayalı olarak sensör çalışmalarının geliştirilmesine olanak sağlanmıştır. 1980 yılında ilk biyosensör çalışması, bilim insanı Liedberg ve arkadaşları tarafından gerçekleştirilmiştir (Liedberg ve ark., 1983; Nylander ve ark., 1982). Bu çalışmayı takip eden birçok çalışma bulunmaktadır. Bu çalışmalardan tez içerisinde kaynak taraması bölümünde bahsedilmektedir. Günümüzde de oldukça popüler bir çalışma alanı olan SPR temelli biyosensörler, herhangi bir işaretlemeye gerek kalmadan biyomoleküller arasındaki etkileşimleri ölçmede kullanılmaktadır. SPR temelli biyosensörler, hızlı cevap süresine ve yüksek seçiciliğe sahip özellik göstermektedir.

Geleneksel çalışma alanı olan dielektrik ve yarıiletken malzemeler yerine son yıllarda metalik malzemeler ile elde edilen fotonik kristaller ve bunların yeni sensör çalışmaları için kullanımları oldukça popüler hale gelmiştir. Metal fotonik materyaller, yüzey plazmonların metal yüzeyinde uyarılmalarından dolayı oldukça önemli özellikler göstermektedir. Fotonik kristallerle yapılan sensörler genellikle kullanılan örneğin kırılma indisinin reel kısmının değişimlerini ölçmektedir. Yüzey plazmonları fotonik alanındaki çalışmalar içerisinde, son zamanlarda önemli bir yer tutmaktadır.

Plazmonik alanında yapılan çalışmalar, uygulamalar, tasarımı yapılan yapıların özellikleri, plazmonun gelecekteki teknolojiye yapacağı katkılar ile ne kadar ilgi çekici bir alan olsa da konuya tam olarak doğru yaklaşmak için bazı temel teorik bilgilerin incelenmesi gerekmektedir. Bu noktada metaller ile elektromanyetik radyasyon arasındaki etkileşimler ile ortaya çıkan plazmonik olayların teorik olarak anlaşılması için metallerin optik özelliklerinin araştırılması gerekmektedir. Aynı zamanda plazmonların uyarım yöntemleri; Kretschmann yöntemi ve ızgara metodunun

incelenmesi, SPR ve yüzey plazmon polariton kavramlarının iyi anlaşılması gerekmektedir. Bu konudaki ayrıntılı teorik incelemeler, tezin ilerleyen bölümlerinde ele alınmaktadır.

Yüzey plazmon polariton uyarımının gerçekleşmesi, enerjinin korunumu ve momentum korunumu yasalarının gerçekleştirilmesi ile elde edilebilmektedir. Uyarımlar için kullanılan farklı metotlar bulunmaktadır. Bu metotlar, ızgara ile eşleme ve Kretchmann metodu olarak tezde ayrıntılı olarak açıklanmıştır.

Bu tez çalışmasında temel malzeme olarak kullanılan grafen, elektromanyetik spektrumun geniş aralığında plazmonik özellik gösterebilen bir malzemedir. Ayrıca, grafene elektrik alan uygulanarak optik özelliklerinde değişiklik yapılarak görünür bölgede sensör tasarlanabilmektedir. Tez içerisinde grafen tabanlı plazmonik sensörler üzerine yapılan çalışmalar, zaman uzayında sonlu farklar yöntemini kullanarak araştırılmıştır. FDTD metodu kullanılarak, elektromanyetik radyasyon ile etkileşime giren sistemlerin hesaplamaları, tez çalışması kapsamında gerçekleştirilmiştir. Grafen ile yapılan çalışmalarda farklı yapı tasarımları ve ışık kaynakları ile çeşitli sensör tasarımları araştırılmıştır.

Son yıllarda, bilgisayar teknolojisindeki büyük gelişmeler ile birlikte sensörler üzerindeki çalışmalar, simülasyon çalışmalarıyla da desteklenmeye başlamıştır. Bu tez kapsamında ön görülen çalışmalarda tasarlanan optik yapılar FDTD ile modellenmiştir. Tasarlanan plazmonik sensörün geniş bir aralıkta frekans cevabını elde etmek mümkün olmaktadır. Elde edilen çıktılar grafikler ile incelenmiştir. Plazmonik sensörün tasarımında periyodik yapı ile eşleme metodu kullanılmıştır. Bu metot ile yapıların boyut, şekil ve malzeme çeşidi değiştirilerek rezonans dalgaboyu değiştirilebilmektedir. Normal koşullarda tasarlanan plazmonik sensörler üretildikten sonra özellikleri değiştirilememektedir. Hâlihazırda tasarlanmış olan sensörü farklı bir dalgaboyu aralığında çalıştırmak için en baştan sensör tasarlamak gerekmektedir. Bu tez kapsamında yapılan çalışmalarda, rezonans frekansı aktif kontrollü plazmonik sensör tasarlamak birçok açıdan avantajlı olacaktır. Grafenin optik özelliklerinde değişiklik yapılabildiği için tasarlanacak olan sensörde kullanılacaktır.

Bu tez çalışmasının amacı; yapılan literatür araştırmalarının ışığında plazmonik sensör çalışmalarında grafen malzemesi kullanılarak farklı yapı tasarımları ile SPR aktif ayarlanabilen sensör tasarımı gerçekleştirilmesidir. Plazmonik yapılar araştırılırken yüzeylerin tasarımı, kullanılan malzeme çeşitleri, malzemelere yeni optik özellikler kazandırılması ve bu optik özellikler üzerinde kontrol sağlanması oldukça önemlidir. Teorik gelişmelerin teknolojiye uyarlanmasıyla, plazmonik sensörlerin geliştirilmesi, dalgaboyu altı cihazların geliştirilmesi, metallerin optik özelliklerinin araştırılması gibi birçok alanda çalışmalar yapılmaktadır. Özellikle nanoboyutlarda yüzeylerin periyodik yapılandırılması, optik dalgaboyu uygulamalarında büyük önem taşımaktadır. Grafenin optik ve elektriksel özellikleri bu alanda kullanılmasında oldukça büyük avantaj sağlamaktadır. Grafen tabanlı uygulamalarda, plazmonik sensörlerin yeniden yapılandırılması ve yeni özellikler kazandırılması mümkün olabilmektedir.

## 2. KAYNAK TARAMASI

Plazmonik tarihi, Mısırlılar ve Romalıların ev eşyalarında metal kolloidler kullandıkları neredeyse 2500 yıl öncesine dayanmaktadır. Yüzey plazmonlar, bilim adamları tarafından metal nanoparçacıkların optik özelliklerinin araştırılmasından önce sanatçılar tarafından cam ve kilise pencerelerinin renklendirilmesinde kullanılmıştır. En ünlü örnek, 2400 yıl önce Romalılar tarafından yapılan, yüzeyinde Altın (Au) ve Gümüş (Ag) kolloidleri olan bir cam eser olan Lycurgus Kupası'dır. Kadehin yüzeyine gömülü olan Au ve Ag kolloidleri, çeşitli renklerde sıradışı optik tepkilere neden olmuştur (Tanyeli 2011).



**Şekil 2.1.** Romalılar tarafından yapılan Lycurgus kupası

İlk olarak 1857 gibi erken bir tarihte Michael Faraday plazmonik kavramıyla bilimsel olarak araştırmalara başlamıştır. Nano ölçekli bulk ve kolloidal metallerin optik davranışlarındaki farklılıkları keşfetmiştir. Ardından renk değişimlerini parçacıkların boyutuna bağlamıştır (Faraday 1857).

Yüzey plazmonların gözlemlendiği ilk bilimsel çalışmalardan bazıları yirminci yüzyılın başlarına dayanmaktadır. 1902 yılında Prof. Dr. Robert W. Wood, metal ızgaralarda optik yansıma ölçümlerinde açıklanamayan özellikleri gözlemlemiştir (Wood, 1902). Aynı dönemde, 1904 yılında Maxwell Garnett, daha sonra yeni geliştirilen Drude metal teorisini kullanarak, metal katkılı camlarda gözlenen parlak renkleri ve Lord Rayleigh tarafından türetildiği gibi küçük kürelerin elektromanyetik özelliklerini açıklamıştır (Garnett 1904). Bu gelişmenin ardından daha fazla anlayış geliştirme çabasıyla, 1908 yılında Gustav Mie, Maxwell denklemlerini çözerek metal nano parçacıkların ışıkla etkileşimi için nicel bir açıklama önermiştir (Tanyeli 2011). Bahsedilen bu gelişmelerden elli yıl sonra, 1956'da, bilim insanı David Pines teorik olarak metallerin içine nüfuz eden elektronların karakteristik enerji kayıplarını keşfetmiştir. Bu kayıpları da aslında metaldeki serbest elektronlar ile yaptıkları kolektif salınımlarına bağlamıştır (Pines 1956). Daha önceki yıllarda yapılan, serbest elektron gazları plazma salınımları çalışmalarına benzer şekilde, bu salınımları "plazmonlar"

olarak adlandırmıştır. 1957'de Rufus Ritchie tarafından ince filmlerde elektron enerji kayıpları üzerine metal yüzeylerin yakınında plazmon modlarının bulunabileceği gösterilmiştir (Ritchie1957). Bu çalışma, yüzey plazmonların ilk teorik tanımını temsil etmektedir. Bir yıl sonra, bilim insanı John Joseph Hopfield elektromanyetik radyasyon ile metalde bulunan bağlı elektronlar arasındaki toplu salınımlar için “polariton” kavramını ortaya koymuştur (Hopfield 1958). Yüzey plazmonlar üzerine yapılan çalışmalarda önemli bir ilerleme de 1968'de yapılmıştır. O tarihte, Wood'un orijinal gözlemlerinden neredeyse yetmiş yıl sonra, Ritchie ve arkadaşları, metal ızgaraların kullanımı sırasında, ızgaralarda meydana gelen sıradışı olayı “yüzey plazmon rezonansları” olarak tanımlamışlardır (Ritchie 1968). Andreas Otto, Erich Kretschmann ve Heinz Raether, metal filmlerde yüzey plazmonların optik olarak uyarılması için yöntemler sunmuşlardır (Otto 1968; Kretschmann ve Raether 1968).

Bu yıllarda, yüzey plazmonların özellikleri iyi bilinmektedir, ancak yüzey plazmonlarının metal nano parçacıkların optik özellikleriyle arasındaki bağlantı henüz kurulmamıştır. 1970 yılında Garnett'in renkler üzerinde yaptığı çalışmadan altmış yıldan fazla bir süre sonra, Uwe Kreibig ve Peter Zacharias, metal katkılı camlardan, altın ve gümüş nano parçacıklarının elektronik ve optik tepkisini karşılaştırdıkları bir çalışma yapmışlardır (Kreibig ve Zacharias 1970). Çalışmalarında, ilk defa metal nano parçacıkların optik özellikleri ile yüzey plazmonları arasında bağlantı kurmuşlardır.

Plazmonik alanı gelişmeye devam ettikçe ve kolektif salınım yapan elektronlar ile elektromanyetik alan arasındaki momentum eşleşmesinin önemi daha belirgin hale geldikçe, Stephen Cunningham ve arkadaşları 1974'te yüzey plazmon polariton (SPP) terimini tanıtmışlardır (Cunningham vd. 1974). Metal optik alanındaki bir başka büyük keşif de aynı yılda gerçekleşmiştir. Martin Fleischmann ve arkadaşları pürüzlü gümüş yüzeyinde bulunan piridin moleküllerinden güçlü Raman saçılmasını gözlemlemişlerdir (Fleischmann 1974). O yıllarda gerçekleşmemiş olmasına rağmen, Raman saçılması yüzey plazmonlarının varlığından dolayı kaba gümüş yüzeye yakın elektromanyetik alanlar ile zenginleştirilmiştir. Bu gözlem Yüzey Geliştirilmiş Raman Saçılması (SERS) alanı oluşturmuştur. Tüm bu keşifler, yüzey plazmon nano fotonisinde çalışmalar yapılması için temel hazırlamıştır.

Yüzey plazmon optiğinin ilk günlerinden beri temel çalışmalardan daha çok uygulamaya yönelik araştırmalara kademeli bir geçiş olmuştur. Plazmon temelli araştırmalarda şu andaki artış, optik litografi, optik veri depolama ve yüksek yoğunluklu elektronik malzeme üretimi gibi önemli teknolojik alanların temel fiziksel sınırlara yaklaştığı bir zamanda gerçekleşmektedir. Yüzey plazmonlarının benzersiz özelliklerini kullanarak mevcut teknolojik zorlukların üstesinden gelinebilmektedir. Son zamanlarda yapılan çalışmalar sayesinde, çeşitli pasif dalga kılavuzları, aktif anahtarlar, biyosensörler, litografi maskeleri ve daha fazlasını içeren çok çeşitli plazmon tabanlı optik cihazlar ve teknikler geliştirilmiştir. Bu gelişmeler plazmonik kavramına, bilime ve metal tabanlı optik ve nano fotonik teknolojisine ışık tutmuştur (Brongersma 1999).

Metalik nanoyapıların dizaynı, fabrikasyonu ve optik özelliklerinin analizi için güçlü elektromanyetik simülasyon kodları, nanofabrikasyon teknikleri ve fiziksel analiz teknikleri, araştırmacılara ve mühendislere optik tasarımı, üretimi ve analizi için gerekli araçları sağlamıştır. Tüm bu çalışmalar ışığında metal nano parçacıkların oluşumundaki gelişmelerle birlikte karmaşık geometrilere uygulanabilir bir çözüme ihtiyaç



duyulmuştur. Bu amaç doğrultusunda, bilgisayar teknolojisindeki ilerlemeyle de birlikte, Zaman Uzayında Sonlu Farklar yöntemi (FDTD) gibi sayısal yöntemler geliştirilmiştir.

Son zamanlarda, metal nano yapılar ile nano ölçekte, ışığı (SPP'ler) yönlendirme ve manipüle etme yetenekleri büyük ilgi görmüştür ve araştırmalar artmıştır. 1997'de Junichi Takahara ve arkadaşları, metalik nano tellerin nanometre boyutlarında sahip oldukları çap değerleri ile optik ışınların yönlendirilmesini sağladığını öne sürmüşlerdir (Takahara vd. 1997). 1998'de Thomas Ebbesen ve arkadaşları, kaynaktan yayılan ışığın dalgaboyundan daha küçük metal açıklıklar yoluyla olağanüstü optik iletimi rapor etmişlerdir ve 2001 yılında John Pendry'nin önerdiği ince bir metalik filmin "mükemmel bir mercekle" gibi davranabileceğini göstermişlerdir (Ebbesen 1998; Pendry 2000). Tüm bu bulgular bilim insanlarının yaptığı birçok çalışma için referans olmuştur (Barnes vd. 2003; Zia vd. 2006).

Bu alanda yapılan çalışmalar devam ederken diğer taraftan sayısal yöntemler geliştirilmeye devam etmiştir. Sayısal yöntemler arasında en popüler olan zaman uzayında sonlu farklar yöntemi (FDTD) olmuştur. FDTD metodu uzun yıllardır mevcut olmasına rağmen, bilgisayar maliyetleri düşmeye, kapasiteleri artmaya ve teknoloji gelişmeye devam ettikçe popüleritesi artmaya devam etmektedir. Ayrıca, bu metoda yönelik çalışmalar ve geliştirmeler sürekli olarak devam ettirilmektedir. Bu bölümde FDTD metodunu bu kadar popüler yapan ve çeşitli alanlarda günümüzün teknolojisine kadar olan gelişimini izleyen önemli çalışmalardan bazıları gözden geçirilecektir.

İlk kez 1966 yılında, bilim insanı Yee tarafından FDTD metodu önerilmiştir. FDTD metodu aslında Maxwell denklemlerinin diferansiyel biçimini ayrıştırmanın basit bir yolu olarak karşımıza çıkmaktadır. Yee'nin önerdiği bu algoritma sadeliğine ve geliştirilebilirliğine rağmen yayınlanmasından sonra gerekli ilgiyi görmemiştir. Ancak, zaman geçtikçe teknolojiye ilerlemeler ve bilgisayar alanındaki ilerlemeler ışığında FDTD metoduna olan ilgi artmaya başlamıştır. Sayısal dağılım ve ızgara anizotropisi hataları, dalga boyu başına yeterli sayıda ızgara alanı olmasıyla küçük tutulabilmektedir. Taflove bu hataları titizlikle analiz eden ilk kişiler arasında yer almaktadır (Taflove 1988). Taflove ayrıca orijinal ortogonal grid Yee algoritması için doğru stabilite kriterlerini sunan ilk kişi olmuştur (Taflove ve Brodwin 1975).

FDTD yöntemi, dağınık alanları veya toplam alanları hesaplamak için kullanılabilir. Yalnızca dağınık alanlar hesaplanırken, alanların kaynağı bilinen olay alanının bir işlevidir ve malzeme parametrelerindeki arka plan ortamındakilerden farklıdır (Holland 1977; Holland vd. 1980).

Son zamanlarda, optik alanındaki araştırmacılar elektromanyetik alanları ihtiyaç duyulan uzamsal düzende kontrol etme ve SPP yüzey dalgalarını destekleme kabiliyeti nedeniyle, plazmonik ve metamalzeme alanlarına büyük ilgi göstermektedirler (Vakil ve Engheta 2011; Adamson 2017; Zhu vd. 2016). Yapılan çalışmalarda çoğunlukla Altın (Au) ve Gümüş (Ag) metalleri kullanılmaktadır. Ancak, SPP'un metal/dielektrik ara yüzeyde ilerlemesi sırasında Ag ve Au olarak daha yüksek SPP kaybı yaşanmaktadır. Dahası, Ag ve Au geçirgenlik durumlarının kontrolü oldukça zordur. Bu dezavantajlar, Ag ve Au'nun meta malzeme ve dönüşüm optiği olarak kullanımını sınırlamaktadır. İşte bu noktada grafen malzemesi ile yapılan tasarımlar çok daha fazla çalışmalar

yapılmasına olanak sağlamışlardır (Sarker vd. 2017). Grafenin ana özelliklerinden biri, iletkenliğinin ve geçirgenliğinin bir önleyici elektrostatik veya manyetostatik alan ile ayarlanabilmesi ve çok sınırlı SPP yüzey aktif cihazlarını destekleyebilmesidir (Lin vd. 2012; Wang vd. 2015). Plazmonik tabanlı cihazlar çok yönlü kullanım özellikleri ile son zamanlarda oldukça önem kazanmışlardır. Grafenin olağanüstü optik, elektriksel ve mekanik özellikleri bu kontrolü sağlamak için kullanılabilir. Grafenin optik özelliklerinin ayarlanabilirliği, aktif plazmonik alan için büyük önem taşımaktadır. Grafenin plazmoniklerle olan birleşimi, küçük aktif optik elemanlar olarak, hızlı, nispeten ucuz nano cihazların üretimi için kullanılabilir. Ancak bu olayın iki temel sorunu vardır: grafeni plazmonik elementlerle birleştirmek ve grafenin özellikleri üzerinde etkili kontrol sağlamak (Grigorenko vd. 2012).

Grafen ve türevleri hemen hemen her bilim ve mühendislik alanında çalışılmaktadır. Son gelişmeler göstermiştir ki grafen bazlı malzemelerin elektronik ve optoelektronik cihazlar, kimyasal sensörler, enerji depolaması ve nanokompozitler üzerinde derin bir etkisi olabilir (Singh 2011).

2012 yılında Rasoul Alae ve arkadaşları, grafen tabakalarının, mükemmel absorpsiyon gösteren malzeme için yapı taşları olarak nasıl kullanılacağını göstermişlerdir. Uzak kızılötesi bölgede, grafen mikro şeritlerine dayanan yeni bir mükemmel soğurucu sınıfını araştırmışlardır. Mekanizmanın çalışma prensibinin grafen levhaların kimyasal potansiyeline olan bağımlılığı analiz edilerek araştırılmıştır. Ayrıca, bu çalışmada gözlemlenen davranışı çok iyi açıklayan bir Fabry-Perot modeline dayanan yarı-analitik bir yaklaşım kullanılmıştır. Yapılan bu çalışma aslında grafenin çok yönlülüğünü göstermiş ve gelecekte optik veya THz bölgelerinde kullanılabileceğini ortaya koymuştur (Alae vd. 2012).

L. Ding ve arkadaşlarının yaptığı bir çalışmada grafen tabakalarının sayısı yani grafen kalınlığı değiştirilerek nümerik hesaplama yapılmıştır. Bu çalışmada grafenin polarizasyona bağımlı optik absorpsiyon özelliği, görünür dalga boyu etki alanında çok katmanlı matris yöntemi ile incelenmiştir. Sayısal simülasyon, üç katmanlı Kretschmann konfigürasyonunun grafen polarizörünün teorik olarak 450 nm ila 750 nm arasında geniş bantlı bir dalga boyu aralığında olağanüstü sönme oranını gösterdiğini ve böylece grafen katmanlarının görünür ışık dalgasını tamamen absorbe edebileceğini göstermektedir (Ding vd. 2017).

2017 yılında P. C. Sarker ve arkadaşları, FDTD metodu ile grafen tabanlı optik cihazların analizi ve tasarımı üzerine çalışma yapmışlardır. Çalıştıkları frekans aralığı THz - uzak kızılötesi bölge olmuştur. Karşılaştırmalar, önerilen yöntemin doğruluğunu ispatlayan güçlü bir benzerlik olduğunu göstermektedir. Çok katmanlı grafen tabakaları büyük bir avantaj sağlamaktadır (Sarker vd. 2017).

Ayrıca, daha yüksek elektron hareketliliği, daha yüksek ısıl iletkenlik ve grafiksel malzemenin güçlü içsel dayanımı nedeniyle, grafen tabanlı ara bağlantılar, dalga kılavuzları, antenler ve alan etkili aktarıcılar üzerinde birçok araştırma yapılmıştır. Grafen malzemesinin optik ve elektrik özellikleri üzerine araştırmalar yapılmıştır.

İletilen dalganın ve kontrol edilebilir bandın ayarlanabilir polarizasyon rotasyonunu elde etmek için eşzamanlı olarak yanıt geçmesi için, terahertz uygulamaları

için yeni bir grafen frekans seçici yüzey (GFSS) önerilmiştir. Böylelikle bant geçişi GFSS (graphene frequency selective surface) uygulaması, polarizasyon seçimi ve aynı anda ayarlanabilir frekans seçimi ile geleneksel işlevselliğini artırabilmektedir (Li vd. 2017).

Görünür ve yakın kızılötesi ışığın elektro-optik modülasyonu, iletişimden algılamaya ve akıllı pencerelere kadar çok çeşitli uygulamalar için önemlidir. Bununla birlikte, şu anda mevcut yaklaşımlar oldukça hacimli cihazlarla sonuçlanmaktadır, düşük entegrasyona maruz kalmaktadır ve düşük güç tüketimi seviyelerinde ve mikroelektronik sürücülerin gerektirdiği hızlı anahtarlama hızlarında zorlukla çalışabilmektedir. Burada, ultra ince metal-grafen hibrit filmlerde desenli düzlemsel nanoyapıların, görünür ve yakın kızılötesi spektral bölgelerde yüksek oranda ayarlanabilir plazmonları sürdürdüğünü göstermektedir. Yansımadaki güçlü değişiklikler ve gelen ışığın absorpsiyonu, plazmonlar ayarlandığında ve rezonansa gerçekleştiğinde gerçekleşir. Özet olarak, ince metallerin optik tepkisini modüle etmek için grafen kullanılabilir (Yu vd. 2016).

2013 yılında, orta-kızılötesi spektrumunda çalışan tek ve az katlı katkılı grafen şerit dizisine dayanan aktif bir plazmonik anahtar teorik ve sayısal hesaplamalar ile incelenmiştir. Önemli rezonans dalga boyu kaymalarının ve modülasyon derinliklerinin bir grafen şeridinin doping konsantrasyonunun hafif bir değişimi ile olabileceğini göstermişlerdir. Ayrıca, birkaç katmanlı grafen şerit dizisi cihazı, tek kat katmana ulaşılabilir modülasyon derinliği açısından daha iyi performans göstermektedir. Bu beklentiler kızılötesi ve THz bölgelerdeki uygulamalar için ultra hızlı aktif grafen bazlı plazmonik cihazlara doğru yolu açmaktadır (Chu ve Gan 2013).

2017 yılında Liyun Ding ve arkadaşları tarafından eşsiz elektriksel ve fotonik özelliklere sahip gelecek vaat eden bir malzeme olan grafenin görünür spektrum aralığında polarizasyona bağlı optik absorpsiyon gösterdiği rapor edilmiştir. Bu olayın grafen kalınlığı, yani grafen katmanlarının sayısı ile yüksek derecede ilişkili olduğu gösterilmiştir. Sayısal simülasyon sonucu, üç katmanlı grafen polarizörünün sönme oranının oldukça yüksek olduğunu, geniş bant polarizörü ve optik sensör gibi birçok uygulamada büyük bir potansiyel olduğunu göstermektedir.

Eşsiz elektriksel ve fotonik özelliklere sahip gelecek vaat eden bir malzeme olan grafenin görünür spektral aralıkta polarizasyona bağlı optik absorpsiyon gösterdiği rapor edilmiştir. Burada, polarizasyona bağımlı olan bu optik absorpsiyonun grafen kalınlığı, yani grafen katmanlarının sayısı ile yüksek derecede ilişkili olduğunu gösterdik. (Ding vd. 2017).

2016 yılında, görünür spektrumunda gümüş nanoprizmaların (Ag NPs) plazmon rezonansının aktif olarak ayarlandığı Balcı ve arkadaşları tarafından rapor edilmiştir. Grafenin iyonik geçişi, Fermi seviyesini 0,2 ila 1 eV arasında değiştirilmiştir. Bu durum grafenin emilim özelliğini etkilemektedir. Birleştirilmiş grafen-Ag NP'ler sistemi klasik olarak sönümlü bir harmonik osilatör modeli ile tanımlanabilmektedir. Atomik katman birikimi, aralarındaki eşleşmeyi optimize etmek için grafen-Ag NP ayrılmasının atomik seviye hassasiyetle kontrol edilmesini sağlamaktadır (Balcı vd. 2016).

Spektrumun görünür bölge aralığında, grafenin düşük absorpsiyonu, ultra hızlı optoelektronik uygulamalarda, bu malzemedan faydalanmayı zorlaştırır. Hashemi ve arkadaşları, 2013 yılında nümerik olarak yaptıkları çalışmada tek katmanlı grafenin absorpsiyon değerini arttırmak için grafeni metalik nano yapılar ile tasarlamayı önermişlerdir. Simülasyon sonuçlarına göre, metalik nano yapılardaki yüzey plazmon rezonanslarının uyarılmasının, grafen katmanının yakınındaki lokal elektromanyetik alanı önemli ölçüde arttırdığı gözlenmiştir. Bu nedenle, grafen tabakasının absorpsiyonun çarpıcı bir şekilde artmasına yol açtığı sonucuna varılmıştır (Hashemi vd. 2013).

Nano ızgaralar kullanılarak, grafen yüzey plazmon dalgaları uyarımı ile grafenin optik absorpsiyon geliştirmeleri üzerine çalışma yapılmıştır. Absorpsiyon spektrumunun grafenin Fermi enerjisi ile değiştirilebileceğini göstermişlerdir (Tang 2015).

Yüzey plazmon rezonans dalga boyunun ayarlanabilirliği, grafen ve nanopartiküller arasına yerleştirilen  $Al_2O_3$  boşluk tabakasının kalınlığı değiştirilerek gösterilmiştir. Ara katman tabakası  $Al_2O_3$  kalınlığı 0,3 ila 1,8 nm arasında değiştirilerek, rezonans dalga boyu 583'ten 566 nm değiştirilir. Değişim, Au nanoparçacıklarda uyarılan lokalize yüzey plazmonları ve tek katmanlı grafen film arasındaki elektromanyetik alan birleştirme gücündeki bir değişiklikten kaynaklanmaktadır. Diğer taraftan, grafen filmi sistemde yokken,  $Al_2O_3$  kalınlığının değiştirilmesi üzerine rezonans dalga boyunda belirgin bir kayma gözlenmemiştir (Niu vd. 2012).

Etkili yüzey iletkenliğine sahip olan grafen, metalmalzemeler üzerine yapılan çalışmalarda oldukça fazla tercih edilmektedir. Çünkü grafen tabanlı fonksiyonel THz cihazlarının basit ve verimli tasarımı için yüzey iletkenliği önemli yer tutmaktadır. Diğer taraftan yüzey iletkenliği, yapılan deneylerde doğrudan ölçülebilmektedir. Teknik önemi ve yeni THz cihazlarına olan ihtiyacı nedeniyle THz ürün yelpazesine odaklanılsa bile, sunulan yaklaşım radyo, mikrodalga fırın, kızılötesi ve görünür ortamlar gibi diğer frekanslar için de geçerlidir. Yapılan bir çalışmada da bu konu üzerine değinilmiştir (Andryieuski 2013).

Grande ve arkadaşları basit bir geometriye dayanan kılavuzlu mod rezonanslarını kullanan tek katmanlı grafen içinde ışık soğurulmasını arttırmak için çalışma yapmışlardır. Burada tek boyutlu bir dielektrik ızgara önerilmiş ve bu yapı üzerinde çalışmalar yapılmıştır. Sayısal bulgular, optimize edilmiş konfigürasyonun, hem TE hem de TM modları için sistem üzerine gelen ışığın % 60'ını absorplandığı ortaya konmaktadır. Bu, tek katmanlı grafen absorpsiyonuna göre ( $\approx$  %2,3) teorik bir geliştirme faktörü ile sonuçlanmaktadır. Basit ve esnek tasarım, yenilikçi, ölçeklenebilir ve üretimi kolay grafen tabanlı optik emiciler gerçekleştirmenin bir yolunu göstermektedir (Grande vd. 2014).

Lokalize yüzey plazmon rezonansları (LSPR'ler), metalik nanoparçacıkların elektromanyetik dalga ile uyarılması ile meydana gelen elektron salınımlarıdır. Bu rezonans frekansları, nanoparçacıkların içerisinde buldukları ortamın değişimlerine karşı çok hassastırlar. Bahsi geçen hassasiyet, rezonansların ortaya çıkan frekans kaymalarını ölçerek LSPR tabanlı sensörlerin araştırılması için kullanılabilir. Diğer taraftan da kızılötesi frekanslarda grafen malzemesi, SPP ların yüksek oranda tutulması, ışık-madde etkileşimi ve çevrenin algılanması için kullanılabilir.

Vasic ve arkadaşları da bu konu üzerine çalışma yapmışlardır. Üzerinde çalışılan sensör çalışmasında, elektromanyetik bir alanın LSP larına etkin bir şekilde bağlanmasını sağlayan paralel grafen şeritlerden oluşmaktadır. Grafen şeritler, metal nanopartiküllerin görünür frekanslardaki hassasiyetiyle karşılaştırılabilir hassasiyete sahiptir. Sadece birkaç nanometre kalınlığındaki filmlerin on mikron etrafındaki dalga boylarında algılanmasını sağlamaktadır (Vasic vd. 2013).

Optik bölgedeki grafenin yansıması ve geçirgenliği, frekans, sıcaklık ve taşıyıcı yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak analiz edilir. grafen Optik özellikleri doğrudan bantlar arası elektron geçişleriyle belirlendiğini gösteriyoruz. Görünür aralıktaki grafen geçirgenliği frekanstan bağımsızdır ve ince yapı sabiti tarafından verilen evrensel değeri alır (Falkovsky 2008).

Kızılötesi spektroskopisi, biyomoleküllerin kimyasal olarak tanımlanması için tercih edilen bir tekniktir. Bununla birlikte, kızılötesi ışık, nanometre boyutlarda moleküllerle zayıf etkileşime girmektedir. Burada, yüksek hassasiyetli ayarlanabilir plazmonik biyosensör çalışmasında grafenin eşsiz elektro-optik özelliklerinden yararlanılmaktadır. Nanoyapılı grafenin plazmon rezonansı, proteini farklı frekanslarda seçici bir şekilde problamak ve karmaşık kırılma indeksini çıkarmak için dinamik olarak ayarlanmaktadır. Buna ek olarak, grafenden, metallere iki kat daha yüksek derecede kadar olan aşırı uzaysal ışık sınırlaması, kırılma indisi ve titreşimli parmak izlerinin tespitinde üstün hassasiyet sağlayan biyomoleküller ile benzeri görülmemiş derecede yüksek bir örtüşme oluşturmaktadır. Ayarlanabilir spektral seçicilik ve grafen duyarlılığının artırılması, biyosensör üzerine yapılacak çalışmalar için heyecan verici umutlar yaratmaktadır (Rodrigo vd. 2016).

Tek katmanlı grafenden oluşturulan mükemmel optik soğurma yapıları deneysel olarak analiz edilebilmektedir. Yapılan bir çalışmada tasarlanan yapının soğurma yapısı, gelişmiş foto-dedektörlerin tasarımında ve modülatörler için büyük potansiyele sahiptir (Fan vd. 2017).

2014 yılında Miloua ve arkadaşları yapmış oldukları çalışmada; grafen tabanlı bir boyutlu fotonik kristalde ışık soğurulmasını artırma olasılığını teorik olarak araştırmışlardır. Tek boyutlu grafen tabanlı fotonik kristalleri kullanarak teknolojik açıdan önemli dalga boylarında toplam ışık absorpsiyonunun mümkün olduğunu kanıtlamışlardır. Transfer matrisi yöntemi ile kırılma indislerinin ve katman sayılarının yapının optik cevabı üzerindeki etkisini araştırmışlardır. Bir tepe, çoklu tepe veya geniş bant elde etmenin ve tam optik absorpsiyonun mümkün olduğunu göstermişlerdir. Sonuç olarak, önerilen fotonik yapılar fotoğraf algılama, ekranlama ve optik algılama gibi uygulamalarda sayısız potansiyeli mümkün kılmaktadır (Miloua vd. 2014).

Si örneğinin üzerine SiO<sub>2</sub> kaplanmıştır. Ardından SiO<sub>2</sub> üzerine grafen tabaka konularak plazmon polariton uyarımı gerçekleştirilmiştir. Buradaki tasarımda sol tarafta SiO<sub>2</sub> ızgaralar kullanılmıştır. Tasarımın sağ tarafında ise SiO<sub>2</sub> levha ile devam edilmiştir. FDTD ile kurulan simülasyon sonuçlarında, grafen / nanoteller / substrat nano yapısının orta-kızılötesi dalga boylarında modellenmemiş grafen içindeki SPP yayılımını önemli ölçüde uyarmak için önerilmiştir (Lu vd. 2016).

Altın film üzerine ayrı ayrı metal ve dielektrik ızgaralar yerleştirilerek kıyaslama yapılmıştır (MM ve DM yapılar). Bant aralığı özellikleri, dağılım ilişkisi, yansıtma eğrileri ve rezonans elektrik alan dağılımları karşılaştırmalı simüle edilmiş ve MM ve DM ızgaralarında analiz edilmiştir. Bu çalışma ile farklı iki yapıda uyarılan yüzey plazmon polaritonların, farklı cihazlar için kullanım koşulları araştırılmıştır (Liu 2013).

SPR, hassas biyomoleküler saptama kabiliyeti ile mevcut biyosensörde uygulanan en güçlü ve yaygın kullanılan yöntemlerden biri olarak kabul edilir. Hiçbir etiketleme özellikleri, gerçek zaman ve yüksek hassasiyet SPR sensörlerine olağanüstü bir gelecek sağlar Biyolojik tespit, klinik teşhis, gıda uygulamalarında analiz vb. SPR sensörleri geleneksel olarak metalik filmler etrafındaki veya açısız ve dalga boyu sorgulama yöntemlerini kullanan kesintisiz metalik filmlerin çevresindeki kırılma indisi değişikliklerini tespit etmeye dayanmaktadır (Zheng 2013).

2017 yılında Jiang ve arkadaşları, Grafen tabanlı plazmonik ayarlanabilir bir terahertz filtre üzerinde çalışma yapmışlardır. Bu çalışmada FDTD metodu kullanılmıştır. Gerçekleştirilen hesaplama sonuçlarına göre, rezonans dalga boyunun geçit voltajının değişmesiyle önemli ölçüde değişmektedir. Ayrıca, geçirgenlik SiC'nin genişliğinin değişmesiyle de değişmektedir (Jiang 2017).

Özellikle, üstün taşıyıcı mobilitesi ve grafenin ayarlanabilir iletkenliği (geçirgenlik) aktif optik cihazlarda faydalıdır. Yayılan ve lokalize yüzey plazmon modlarının, nanoyapılı bir grafen içinde uyarılabileceği doğrulanmıştır (Huang 2017).

## **2.1. Yüzey Plazmon Teorisi**

### **2.1.1. Metallerin elektromanyetik teorisi**

Metallerin elektromanyetik dalga ile etkileşimi Maxwell denklemleri ile klasik çerçevede açıklanabilmektedir. Üstelik birkaç nanometre altındaki boyutlarda metal nanoparçacıklar bile kuantum mekaniğine ihtiyaç duyulmadan açıklanabilmektedir. Metaller, spektrumun görünür bölgesine kadar olan frekanslar için yüksek oranda yansıtıcı özellik gösterirler ve elektromanyetik alanın içlerine nüfuz etmelerine izin vermezler. Bu nedenle metaller, mikrodalga ve kızılötesi frekanslarda elektromanyetik alan için dalga kılavuzu ve rezonans kutularının yapımında kaplama malzemesi olarak kullanılmaktadır. Düşük frekanslarda, sonsuz veya sabit sonlu iletkenliği olan mükemmel iletken yaklaşımı çoğu amaç için geçerlidir. Çünkü malzeme üzerine gönderilen elektromanyetik radyasyonun sadece önemsiz bir kısmı metalin içine nüfuz etmektedir. Spektrumun yakın kızılötesi ve görünür bölgesine doğru daha yüksek frekanslarda, alan penetrasyonu büyük ölçüde artmaktadır. Ultraviyole frekanslarda, metaller, elektronik bant yapısına bağlı olarak, dielektrik karakter kazanmakta ve elektromanyetik radyasyonun ilerlemesine izin vermektedirler. Altın ve gümüş gibi soy metaller için elektronik bant arası geçişler bu şartlarda yüksek bir soğurmaya yol açmaktadır. Metallerin optik özellikleri kompleks dielektrik fonksiyonu çerçevesinde açıklanmaktadır (Maier 2007). Söz konusu etkileşimler elektromanyetik dalgaların malzeme içerisindeki elektron ve nükleonlar ile etkileşimlerine bağlı olarak mikroskobik çerçevede incelenmektedir. Burada kullanılan Maxwell denklemleri mikroskobik Maxwell denklemleri olarak tanımlanmaktadır. Noktasal yükler

mikroskopik çerçeveden çıkılıp ortalamaları alındığı zaman makroskopik çerçevede Maxwell denklemleri ile incelenebilmektedir (John 1998).

### 2.1.2. Madde içinde Maxwell denklemleri

Durgun halde  $\vec{P}$  kutuplanması,  $\rho_b$  bağlı yükünü oluşturmaktadır.

$$\rho_b = -\vec{\nabla} \cdot \vec{P}$$

Aynı şekilde bir  $\vec{M}$  manyetik kutuplanması (veya mıknatıslanma)  $\vec{J}_b$  bağlı akım yoğunluğunu oluşturmaktadır.

$$\vec{J}_b = \vec{\nabla} \times \vec{M}$$

Durgun olmayan halde, yani elektrik kutuplanmada zamanla herhangi bir değişim olduğu zaman, yeni bir yük akışı meydana gelmektedir. Buradaki yük akışı kısaca  $\vec{J}_p$  akım yoğunluğu olarak adlandırılmaktadır. Burada,  $\vec{J}_p$  akımının toplam akıma katılması gerekmektedir.

Kutuplanmış bir malzeme ele alınacak olursa kutuplanma bir uçta “ $\sigma_b = P$ ” kadar yük yoğunluğu ve diğer uçta da “ $-\sigma_b$ ” kadar bir yük yoğunluğu oluşmasına sebep olur. Eğer  $\vec{P}$  kutuplanması bir miktar artarsa, buna bağlı olarak her bir uçtaki yükte artmaktadır ve

$$dI = \frac{\partial \sigma_b}{\partial t} da_{\perp} = \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} da_{\perp}$$

şeklinde net akım oluşmaktadır. Buradan polarizasyon akım yoğunluğu, denklem (3.2) de verildiği gibi olmaktadır:

$$\vec{J}_p = \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \quad (3.2)$$

Bu kutuplanma akımının  $\vec{J}_b$  bağlı akımıyla ilgisi olmadığı unutulmamalıdır.  $\vec{J}_b$  akım yoğunluğu, elektronların spin ve yörüngesel hareketi ile ilgilidir.  $\vec{J}_p$  polarizasyon akım yoğunluğu ise elektrik kutuplanma değiştiği zaman yükün öteleme hareketinin bir sonucu olmaktadır.

Sonuç olarak toplam yük yoğunluğu iki parçaya ayrılabilir;

$$\rho_{tot} = \rho_{ext} + \rho_b = \rho_{ext} - \vec{\nabla} \cdot \vec{P}$$

Burada,  $\rho_{ext}$  sisteme elektrik alan uygulandığı zaman oluşan yük yoğunluğu,  $\rho_b$  iç yük yoğunluğu olarak tanımlanmaktadır.

Akım yoğunluğu;

$$\vec{J}_{tot} = \vec{J}_{ext} + \vec{J}_b + \vec{J}_p = \vec{J}_{ext} + \vec{\nabla} \times \vec{M} + \frac{\partial \vec{P}}{\partial t}$$

Buradan Gauss yasası;  $\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{1}{\epsilon_0} \rho$  şu şekilde de yazılabilir:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \frac{1}{\epsilon_0} (\rho_{ext} - \vec{\nabla} \cdot \vec{P})$$

$$\epsilon_0 (\vec{\nabla} \cdot \vec{E}) = (\rho_{ext} - \vec{\nabla} \cdot \vec{P})$$

$$\vec{\nabla} \cdot \epsilon_0 \vec{E} + \vec{\nabla} \cdot \vec{P} = \rho_{ext}$$

$$\vec{\nabla} \cdot (\epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}) = \rho_{ext}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_{ext}$$

Burada  $\vec{D}$  elektriksel yer değiştirme alanı, durgun halde olduğu gibi;  $\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$  ile verilir.

Diğer taraftan da, Amper yasası;  $\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$  şu şekilde de yazılabilir;

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \mu_0 \left( \vec{J}_{ext} + \vec{\nabla} \times \vec{M} + \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} \right) + \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

$$\frac{1}{\mu_0} (\vec{\nabla} \times \vec{B}) = \vec{J}_{ext} + \vec{\nabla} \times \vec{M} + \frac{\partial \vec{P}}{\partial t} + \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

$$\vec{\nabla} \times \left( \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M} \right) = \vec{J}_{ext} + \frac{\partial (\vec{P} + \epsilon_0 \vec{E})}{\partial t}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{J}_{ext} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$

Sonuç olarak, madde ortamında Maxwell denklemlerinin düzenlenmiş hali aşağıda verilmektedir.

$$(i) \vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_{ext}$$

$$(ii) \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$$

$$(iii) \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$



$$(iv) \vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{J}_{ext} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$

$\vec{D}$  elektriksel yer deęiřtirme vektörü,  $\vec{H}$  manyetik alan,  $\vec{J}_{ext}$  akım yoğunluęu,  $\vec{B}$  manyetik akı yoğunluęu,  $\rho$  serbest elektrik yük yoğunluęu olarak tanımlanmaktadır.

Metaller serbest elektronlara sahip malzemelerdir. Metaller üzerine elektromanyetik alan uygulandıęı zaman polarizasyon, mıknatıslanma gibi etkiler ortaya çıkmaktadır. Bu etkileřimler ařaęıdaki eřitlikler ile verilmektedir. Ařaęıdaki ilk denklemden, elektriksel yer deęiřtirme vektörünün elektrik alan ve elektriksel polarizasyon ile arasındaki baęlantıyı veren denklem verilmiřtir. Burada  $\epsilon_0$  boş uzayın dielektrik sabitidir. İkinci denklemden, manyetik alanın mıknatıslanma ile arasındaki etkileřim verilmiřtir (Vaughan 2014; Griffiths 2005).

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$$

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B} - \vec{M}$$

### Boř uzayda elektromanyetik dalgalar

Maxwell denklemlerinin çözümü boş uzayda incelendięinde polarizasyon ve mıknatıslanma sıfır olmaktadır.

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E}$$

$$\vec{H} = \frac{1}{\mu_0} \vec{B}$$

Verilen eřitlikler kullanılarak ve  $\rho_{dış}$ ,  $\vec{J}_{dış}$  sıfır alınarak Maxwell denklemleri tekrar yazılabilir;

$$(i) \vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$$

$$(ii) \vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$$

$$(iii) \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$(iv) \vec{\nabla} \times \vec{B} = +\epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

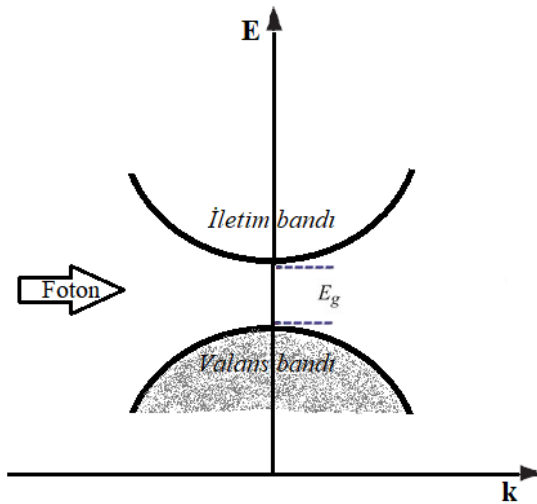
### 2.1.3. Metallerin optik özellikleri

Metal üzerine gönderilen elektromanyetik radyasyonun sadece önemsiz bir kısmını metalin içine nüfuz etmektedir. Spektrumun yakın kızılötesi ve görünür bölgesine doğru daha yüksek frekanslarda, alan penetrasyonu büyük ölçüde artmaktadır. Ultraviyole frekanslarda, metaller, elektronik bant yapısına bağlı olarak, dielektrik karakter kazanmakta ve elektromanyetik alanın ilerlemesine izin vermektedir. Au ve Ag gibi soy metaller için elektronik bant arası geçişler bu şartlarda yüksek bir soğurmaya yol açmaktadır. İlerleyen bölümlerde, metallerin optik özellikleri kompleks dielektrik fonksiyonu çerçevesinde açıklanacaktır.

### 2.1.4. Serbest elektronlar ve bant arası geçişler

Metallerin optik özelliklerini araştırmak için iletim elektronlarını metaller ve yarıiletkenlerde incelemek gerekmektedir. Burada iletim elektronları ve bant arası geçiş elektronları söz konusudur. İletim elektronları bulk metaller içerisinde serbestçe salınırken, geçiş elektronları sadece fotonlar tarafından indüklenebilmektedir (Bandgap enerjisinden daha büyük enerjili). Metallerin ve yarıiletkenlerin optik özellikleri kompleks dielektrik sabiti ile açıklanabilmektedir.

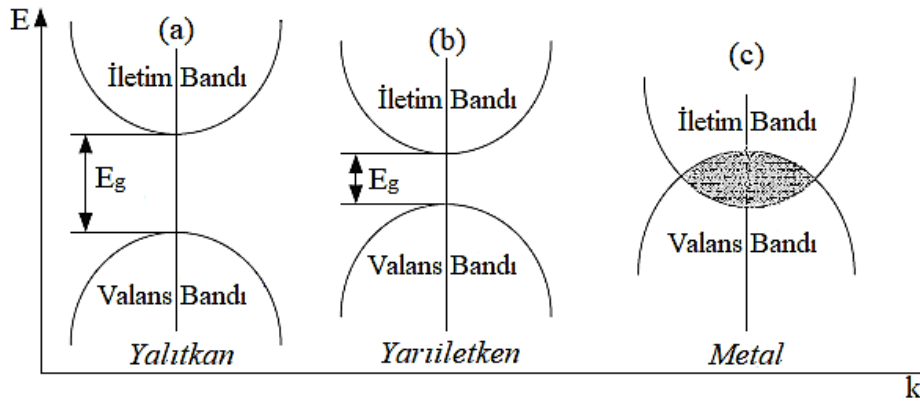
İletim elektronları metal içerisinde bulunan serbest elektronlar ile ilişkilidir. Bu durum Drude modeli ile açıklanmaktadır. Elektronlar uyarılmak için gerekli olan enerjiyi fotonlardan alınca Fermi enerji seviyesini aşarak iletim bandına geçebilmektedir. Şekil 2.2’de görüldüğü gibi herhangi bir uyarıcı olmadığında, valans bandından iletim bandına geçiş mümkün değildir. Yüksek enerjili fotonlar, bağlı elektronları daha düşük enerji seviyesinden boş iletim bandına geçirirler. Bu tür geçişlerde genellikle görünür ve kızılötesi dalga boyunda, ışık-madde etkileşimleri meydana gelmektedir.



Şekil 2.2. İletim elektronları bant yapısı

Bu durum bir elektron-hole çifti ile gerçekleşmektedir. Katı malzemelerin kendilerine özel bant yapıları vardır. Malzemelerin birçok elektriksel özelliklerini belirleyen de enerji bant yapılarıdır. Bant arası geçişler, malzemenin dielektrik

fonksiyonu ve optik özelliklerini belirlemektedir. Yalıtkan malzemelerde, valans bant ile iletim bantı arasında büyük bir boşluk bulunmaktadır. Sistem üzerine gönderilen foton enerjisi yeterli değil ise iletim bandına geçiş olmamaktadır. Yarıiletkenlerin bant yapısı da yalıtkanların bant yapısına benzemektedir. Ancak burada Fermi enerji seviyesi çok daha küçüktür. Metal malzemelerin bant yapısı incelendiğinde ise enerji bantları üstüste örtüşmüştür. Valans bant ile iletim bandının üstüste gelmesi, elektronların bantlar arasında serbestçe hareket etmelerini sağlamaktadır. Bu durum Şekil 2.3'de verilmektedir. Metallerde bant içi geçişler düşük frekanslı fotonlar ile kolaylıkla gerçekleşmektedir.



**Şekil 2.3.** a) Yalıtkanların bant yapısı, b) Yarıiletkenlerin bant yapısı, c) Metallerin bant yapısı

Sonuç olarak, serbest taşıyıcıların yoğunluğu iletme büyük ölçüde katkı sağlamaktadır. Yoğunlukları düşük olsa bile hareketlilikleri çok olduğu için metal malzemelerin iletkenliğine katkıda bulunmaktadırlar.

### 2.1.5. Optik frekanslarda metaller

Metaller mikrodalga frekanslarda mükemmel elektrik iletkeni olarak davranış gösterirler. Çünkü bu frekanslarda metaller, elektromanyetik dalgaları üzerlerine çarptıklarında belirgin şekilde zayıflatırlar. Ancak bu olay, dielektrik sabitinin imajiner kısmının yüksek olduğu mikrodalga frekansının aksine, kızılötesi ve optik frekanslar için, yani metalin kompleks geçirgenliğinin yüksek reel kısmı ile kayıplı dielektrikler gibi davranması durumunda geçerli değildir. Kızılötesi ve optik frekanslarda ise, metaller yüzey plazmonu polaritonları (SPP'lar) desteklemektedirler.

Metaller değerlik kabuğunda serbest elektron ve bağlı elektronlara sahiptirler. Kızılötesi ve optik frekanslarda serbest elektronlar üzerine fotonlar çarparak hareket ettirirler ve metallerde bant içi absorpsiyona yol açarlar. Öte yandan, sınırlı elektronlar bantlar arası absorpsiyona yol açar ve bu tür dalgalar metalleri etkilediğinde harmonik olarak salınım yaparlar (Bohren ve Huffman 2008).

Kısacası, hem serbest elektronlar hem de bağlı elektronlar, karmaşık geçirgenliğin negatif reel kısmına büyük katkıda bulunurlar. Metallerin optik

özelliklerini ve elektromanyetik radyasyon ile davranışlarını açıklayan en genel teorik modeller Drude modeli, Lorentz modeli, Lorentz-Drude modeli ve Drude-Debye modelleridir.

En basit model Drude modeli olarak bilinmektedir. Serbest elektron hareketi ve metallerin dağılma davranışları üzerinde bant içi absorpsiyon etkisini açıklayan en basit modeldir. Frekansa bağlı dielektrik sabiti Denklem 3.4 ile verilmektedir.

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - j\gamma\omega} \quad (3.4)$$

$\omega_p$  plazma frekansı,  $\gamma$  sönüm sabitidir. Her ne kadar Drude modeli basit ve yeterli bir model olsa da, bağlı elektronların etkisini dikkate almaz. Bu da bazı spesifik frekanslarda geçirgenliği önemli ölçüde etkilemektedir (Bohren ve Huffman, 2008).

Diğer taraftan Lorentz modeli (harmonik osilatör modeli) bağlı elektronları incelemektedir. Ancak serbest elektronları göz ardı etmektedir. Bu modelde frekansa bağlı dielektrik sabiti ise Denklem 3.5 ile verilmektedir.

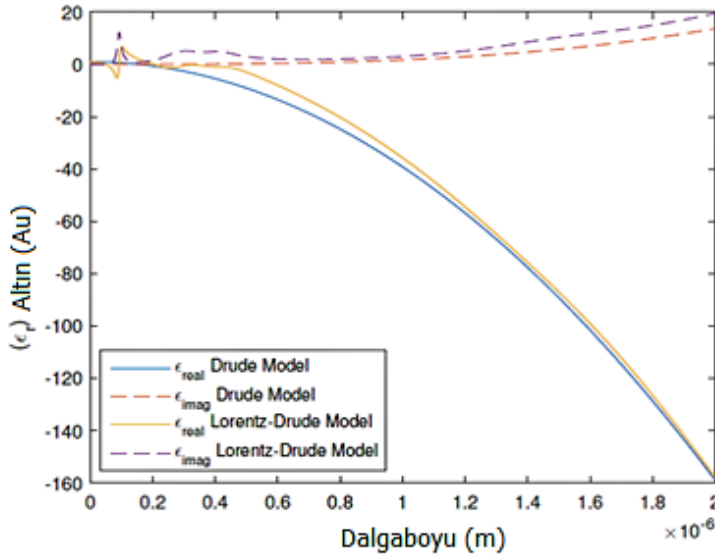
$$\varepsilon_r(\omega) = \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 + j\gamma\omega} \quad (3.5)$$

(3.5) denkleminde  $\omega_0$  Lorentz harmonik osilatörün rezonans frekansıdır. Böylece, SPP'ların kızılötesi ve optik frekanslardaki toplam etkisini yakalamak için Lorentz - Drude modeli göz önünde bulundurulur ve hem bant içi hem de bantlar arası etkileri inceleyen bir model meydana gelmektedir.

$$\varepsilon_r(\omega) = \varepsilon_r(\omega)^{serbest} + \varepsilon_r(\omega)^{bağlı}$$

$$\varepsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_{pf}^2}{\omega^2 - j\gamma_e\omega} + \sum_n \frac{\omega_{pn}^2}{\omega_{0n}^2 - \omega^2 + j\gamma_n\omega} \quad (3.6)$$

Aşağıdaki Şekil 2.4'de Au için Drude modeli ve Drude-Lorentz modeli gösterilmektedir.



**Şekil 2.4.** Altın metali için Drude ve Lorentz-Drude modeli dielektrik sabiti reel/imaginer kısımlar (Afridi 2016)

### 2.1.6. Drude Modeli

Drude modeli serbest elektron modeli olarak da bilinmektedir. Drude modeline göre; metallerdeki serbest elektronların serbest atomlardan oluşan gaz gibi davrandığı ve yüklerin metalde düzgün dağıldığı varsayılmaktadır. Ayrıca elektronlar sabit bir elektrostatik potansiyel içinde hareket etmektedirler. Bu durumda kristal yapının tüm özellikleri ortadan kalkmış olmaktadır. Serbest elektron modelinde, iletim elektronları arasındaki itici türde olan etkileşimler ihmal edilmektedir. Bundan dolayı elektronlar sonlu kare kuyu potansiyelinde hareket eden serbest parçacıkmiş gibi kabul edilmektedir. Bu kuyunun sınırları, metalin sınırları ile belirlenmektedir. İyonik metal üzerinde elektronlardan oluşan gaz formundaki yapıya “plazma” denmektedir.

Newton hareket denkleminde yola çıkılarak metalin kompleks dielektrik sabitini veren bağıntı elde edilebilmektedir.

$$\vec{F} = m_e \vec{a} = m_e \frac{d^2 X}{dt^2} + m_e \gamma \frac{dX}{dt} = -e\vec{E}(t) \quad (3.7)$$

Elektronun konumunun zamanla değişmesi ile elektrik alan da zamanla değişmektedir. Eğer elektrik alan monokromatik ise (yani tek dalga boyu/tek frekans/tek enerji varsa) uygulanan elektrik alanla aynı frekanslı hareket meydana gelmektedir;

$$\vec{E}(t) = \vec{E}_0 \exp(-i\omega t)$$

Bu durumda tıpkı kütle-yay sistemindeki gibi sürücü kuvvete bağlı hareket söz konusudur;

$$\vec{X}(t) = \vec{X}_0 \exp(-i\omega t)$$

$$\frac{dX}{dt} = -i\omega X_0 \exp(-i\omega t)$$

$$\frac{d^2X}{dt^2} = -\omega^2 X_0 \exp(-i\omega t)$$

Denklem çifti (3.7) denkleminde yerine yazılırsa;

$$-m_e \omega^2 X_0 \exp(-i\omega t) - i\omega X_0 m_e \gamma \exp(-i\omega t) = -e\vec{E}(t)$$

$$m_e(\omega^2 + i\omega\gamma)X_0 \exp(-i\omega t) = e\vec{E}(t)$$

$$\vec{X}(t) = \frac{e\vec{E}(t)}{m_e(\omega^2 + i\omega\gamma)} \quad (3.8)$$

Elektrik alan etkisi altında elektronun yerdeğiřtirmesi (3.8) bağıntısı ile verilmektedir. Plazma içerisindeki elektronların yer deęiřtirmesi sonucu meydana gelen elektrik dipollerin toplamı elektrik polarizasyonu vermektedir;

$$\vec{P}(t) = -Ne\vec{X}(t)$$

Klasik çerçevede, polarizasyon “ $q.d$ ” şeklinde ifade edilmektedir. Burada da aynı bakış açısı ile ilerlemek mümkün olmaktadır.  $N$  olarak ifade edilen terim zaten birim hacimdeki  $e^-$  ların sayısıdır.

Böylece metal için dielektrik sabiti  $\epsilon_r(\omega)$  elde edilebilir;

$$\vec{D}(t) = \epsilon_0 \vec{E}(t) + \vec{P}(t)$$

$$\begin{aligned} &= \epsilon_0 \vec{E}(t) - Ne\vec{X}(t) \\ &= \epsilon_0 \vec{E}(t) - \frac{Ne^2}{m_e(\omega^2 + i\omega\gamma)} \vec{E}(t) = \epsilon_0 \vec{E}(t) \epsilon_r \end{aligned}$$

$$\epsilon_r(\omega) = 1 - \frac{Ne^2}{m_e \epsilon_0 (\omega^2 + i\omega\gamma)} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma} \quad (3.9)$$

(3.9) bağıntısı metaller için kompleks dielektrik sabitini vermektedir. Bu bağıntıda yer alan “ $\omega_p$ ” plazma frekansıdır.  $N(cm^{-3})$  birim hacimdeki elektron sayısı,  $e$  elektron yükü,  $m_e$  elektron kütlesi,  $\epsilon_0$  ortamın dielektrik sabiti olarak verilmektedir.

$$\omega_p = \sqrt{\frac{Ne^2}{m_e \epsilon_0}}$$

$\epsilon_r(\omega)$  dielektrik sabiti reel ve imajiner kısımlarına ayrılırsa (3.10) bağıntısı elde edilir.

$$\epsilon_r(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$$

$$\epsilon_r(\omega) = \left(1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2}\right) + i\left(\frac{\gamma\omega_p^2}{\omega(\omega^2 + \gamma^2)}\right) \quad (3.10)$$

Bu durumda kırılma indisi  $\tilde{n}(\omega)$  da komplekstir. Aşağıda verilen  $\kappa(\omega)$  soğurma katsayısıdır.

$$\tilde{n}(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega)$$

$$n(\omega) = \sqrt{\epsilon_1}$$

$$\kappa(\omega) = \sqrt{\epsilon_2}$$

Burada bazı yaklaşımlar yapılmaktadır:

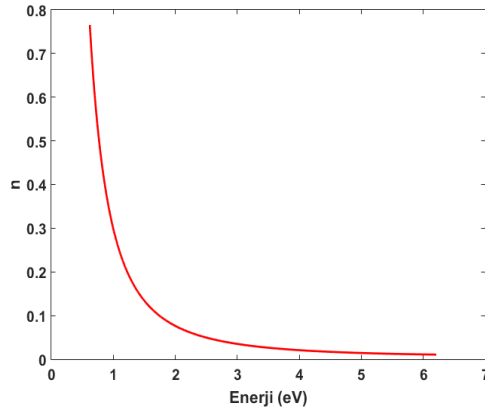
- Eğer  $\omega < \omega_p$  ise; metalik karakter korunur. Fakat  $\omega_p$  ye yakın yüksek frekans değerlerinde  $\omega/\gamma \gg 1$  dir. Bu durumda sönümleme faktörü ( $\gamma$ ) ihmal edilebilir.

$$\epsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

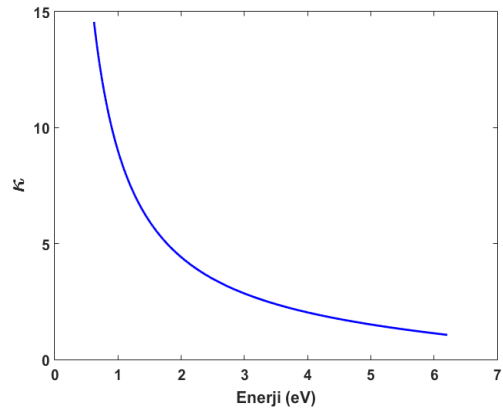
- Sistemi düşük frekanslarda değerlendirirsek; eğer  $\omega \ll \gamma$  kabul edilirse böylece  $\epsilon_2 \gg \epsilon_1$  olur ve kompleks kırılma indisinin reel ve imajiner kısımları kıyaslanabilir;

$$n \approx \kappa = \sqrt{\frac{\epsilon_2}{2}} = \sqrt{\frac{\omega_p^2}{2\omega\gamma}}$$

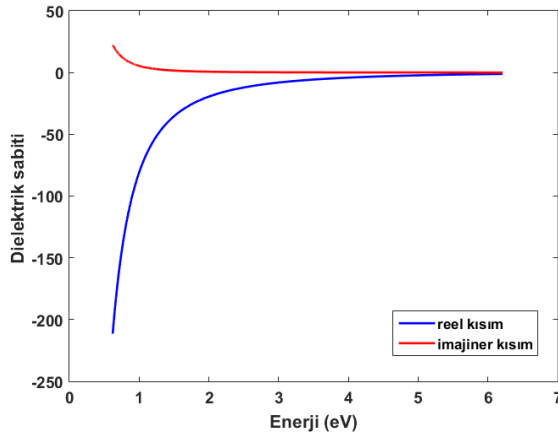
Oda sıcaklığında sönüm sabiti  $\gamma \cong 10^{14} \text{ s}^{-1}$  değerinde alınmaktadır.



(a)



(b)



(c)

**Şekil 2.5.** Altın metalinin kırılma indisi **a)** reel kısmı, **b)** imajiner kısmı, **c)** Au metali dielektrik sabitinin reel ve imajiner kısımları

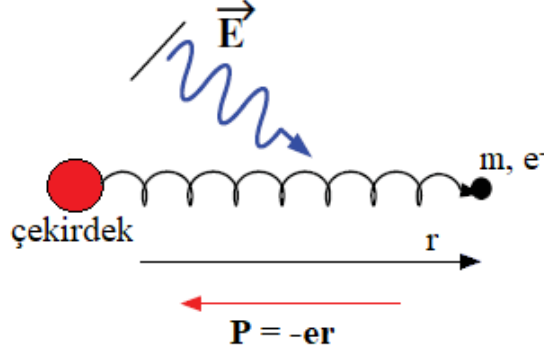
Metaller için Drude modeli kullanılarak elde edilen  $n$  ve  $\epsilon$  değerleri Au metali için 300-1100 nm aralığında dalgalılarına karşılık gelecek frekans aralığında hesaplanmıştır ve Şekil 2.5'de verilmiştir. Metaller kompleks dielektrik sabitine sahip oldukları için kırıcılık indisleri de kompleksdir. Şekil 2.5'de görüldüğü gibi düşük frekanslarda metal negatif kırılma indisine sahiptir. Bu sebeple, düşük frekanslara karşılık gelen dalgalılarına metaller çok iyi yansıtıcılığa sahiptirler. Bu dalgalılarına için metal içinde ilerleme derinlikleri de oldukça azdır. Metal plazma frekansının çok üstündeki değerlerde kırıcılık indisi pozitiftir. Bu sebeple çok yüksek frekanslarda yansıma katsayısı azalmaktadır. Bu modele göre metallerin özellikleri birim hacimdeki elektron sayısı tarafından belirlenir.

### 2.1.7. Lorentz modeli

Metal malzemeye elektromanyetik radyasyon gönderildiği zaman ışık-metal etkileşimi meydana gelmektedir. Bu etkileşim elektromanyetik dalga ile metal malzemedeki elektron ve nükleonlar arasında oluşmaktadır (Pedrotti vd. 2006).



Meydana gelen etkileşim klasik mekanikten yola çıkılarak basit bir modelleme ile açıklanabilmektedir. Basit harmonik osilatör modeli çeşitli parametreleri tanımlamak için uygun bir model olduğu için modern fiziğin birçok alanında kullanılmaktadır. Bu nedenle, Lorentz optikte de dielektrik sabitleri hesaplamak için bu model tercih edilmiştir. Şekil 2.6'da çekirdek-elektron sistemi şematik olarak gösterilmektedir. Dipol moment olmadan yani polar olmayan molekül sistemi göz önünde bulundurulmaktadır.



Şekil 2.6. Çekirdek-elektron sistemi şematik gösterimi

Tek elektron-çekirdek sisteminin diferansiyel formda  $m_e \ddot{r} + m\gamma \dot{r} + m_e \omega_0^2 r$  hareket denklemi aşağıda gösterilmiştir.

$$m_e \frac{d^2 \vec{r}}{dt^2} + m_e \gamma \frac{d\vec{r}}{dt} + m_e \omega_0^2 \vec{r} = q_e \vec{E}_0 e^{-i\omega t} \quad (3.11)$$

(3.11) denkleminde,  $\vec{r}$  elektron ile çekirdek arasındaki mesafe,  $\omega_0$  doğal salınım frekansıdır. (3.11) denkleminde yer alan ikinci terimle anlaşılacağı gibi sönüm sabiti enerji kaybını ifade etmektedir. Ayrıca üçüncü terim geri çağırıcı kuvveti ifade etmektedir. Bu ifade serbest elektronlar için sıfır alınmaktadır. Çünkü serbest elektronlar herhangi bir çekirdeğe bağlı değildir.  $\vec{E} = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$  elektrik alan vektörü olarak tanımlanmaktadır.

$\vec{r}(t) = \vec{r}_0 \exp(-i\omega t)$  denkleminde türevler alınarak (3.11) Denkleminin çözümü yapıldığı zaman  $\vec{r}$  yerdeğiştirme denklemi elde edilmektedir (Tanyeli 2011).

$$\vec{r}(\omega) = \frac{q_e}{m_e(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)} \vec{E}(\omega)$$

Birim hacimde tüm elektronların toplam polarizasyonu ise aşağıdaki denklem ile verilmektedir.

$$\vec{P} = N q_e \vec{r}(\omega) = \frac{N q_e^2}{m_e(\omega_0^2 - \omega^2 - i\gamma\omega)} \vec{E}(\omega)$$

Polarizasyon yoğunluğu diğer taraftan elektrik alınganlığı ile de ilişkilidir.

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \chi_e \vec{E}(\omega) = \varepsilon_0 (\varepsilon_r - 1) \vec{E}(\omega)$$

Sonuç olarak plazma frekansı denklemde yerine yazılarak dielektrik sabiti (3.12) denklemi elde edilmektedir;

$$\varepsilon(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\gamma} \quad (3.12)$$

dielektrik sabitinin reel ve imajiner kısımları ayrı ayrı yazılırsa aşağıdaki denklemler elde edilmektedir.

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2(\omega_0^2 - \omega^2)}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}$$

$$\varepsilon_2(\omega) = 1 + \frac{\omega_p^2\gamma\omega}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma^2\omega^2}$$

### 2.1.8. Lorentz- Drude modeli

Bağlı ve serbest elektronların her ikisi de metalik bir ortamın optik özelliklerine katkıda bulunmaktadır. Bu nedenle, kompleks dielektrik sabiti bant arası geçişleri ve serbest elektronları içeren Lorentz- Drude modeli özelleştirilmiştir. (3.13) denkleminde de görüleceği gibi birinci kısım bant içi geçişleri yani metaller için serbest elektronlar ile ilgilidir. İkinci kısım ise bant arası geçişler ile yani metallerdeki bağlı elektronların etkileri ile ilgilenmektedir. Kompleks dielektrik fonksiyonun, ilk iki terimi Drude modeli veya serbest elektron modeli olarak bilinir. Kalan son terimi ise Lorentz modeli ile ilgilidir.

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\omega\gamma_d} + \sum_{j=1}^K \frac{f_j \omega_j^2}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_j} \quad (3.13)$$

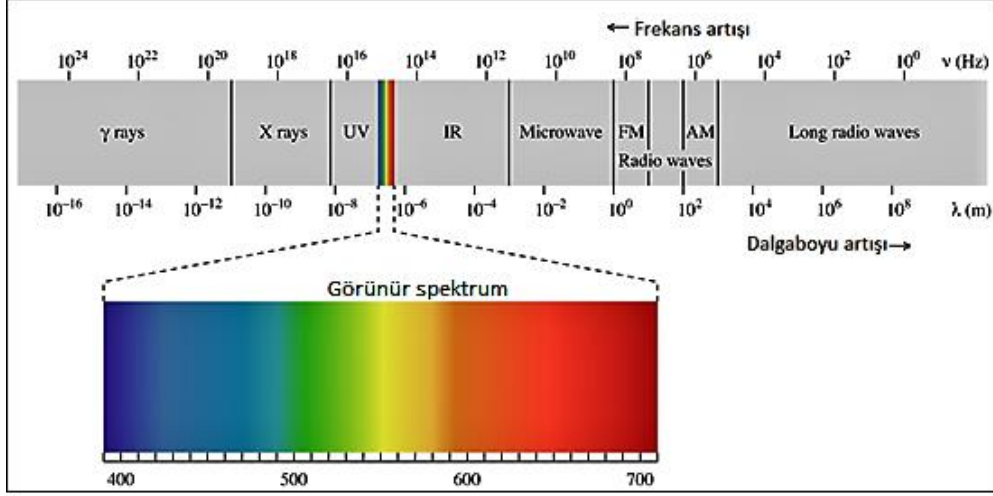
Bağıntı (3.13) te  $K$ ,  $\omega_j$  rezonans frekansına karşılık gelen yüksek enerjili toplam salınım sayısıdır.

Arabant geçişi rezonans dalgaboyundan çok daha büyük dalgaboyunda dielektrik geçirgenliği sıfırdan farklı asimtotik değere sahiptir. Asal metaller içinde, bağlı elektronların çeşitli bant yapılarına bağlı olarak genellikle çoklu bant geçişleri vardır.

### 2.2. Metal-Dielektrik Ara Yüzeyinde Yüzey Plazmon Polariton

Metallerin elektromanyetik alan ile etkileşimini inceleyen alan plazmonik veya nano-plazmonik olarak tanımlanmaktadır. Plazmonik alanında yapılan çalışmalarda temel amaç; optik radyasyonun nanometre mertebesinde kontrol edilmesidir. Işık-metal

etkileşiminin temel prensibi metallerin optik özelliklerinin değişimini frekansa bağlı olarak araştırmaktır.



**Şekil 2.7.** Elektromanyetik spektrum

Şekil 2.7’de elektromanyetik spektrum görülmektedir. Metaller düşük frekanslardan spektrumun görünür bölgesine kadar yüksek yansıtıcılık göstermektedirler. Yani elektromanyetik dalgaların içlerinden geçmelerine izin vermezler. Yüksek frekanslarda, yakın kızılötesi ve görünür bölgeye gidildikçe elektromanyetik alanın metalin içinden geçmesinde önemli ölçüde artma gerçekleşmektedir. Morötesi frekanslarda ise metaller dielektrik özellik kazanırlar ve elektromanyetik dalgaların ilerlemesine izin verirler.

Dolayısıyla metallerin optik özelliklerinin frekansa bağlı olarak incelenmesi gerekmektedir.

### 2.2.1. Dalga denklemi

Metal-dielektrik ara yüzeyinde ilerleyen elektromanyetik uyarılmalar yüzey plazmon polariton olarak adlandırılmaktadır. Yüzey plazmon polaritonların (SPPs) tek metal-dielektrik ara yüzeyinde fiziksel yapılarını incelemek için Maxwell denklemleri kullanılmaktadır.

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho_{ext}$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J}_{ext} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$

Elektromanyetik dalga denklemi (3.14) te verilmektedir.

$$\vec{\nabla} \times \vec{\nabla} \times \vec{E} = -\mu_0 \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2}$$

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{\epsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (3.14)$$

### Poynting Vektörü

Elektromanyetik dalga uzayda ilerlerken, enerji taşımaktadır. Enerji yoğunluğu daima elektrik alanlar ve manyetik alanlar ile ilişkilidir. Birim zamanda, birim alandan elektrik ve manyetik alanlar tarafından enerji aktarımı gerçekleşmektedir. Birim hacim başına düşen enerji akısının ölçüsü Poynting vektörü olarak adlandırılmaktadır.

$$\vec{S} = \frac{1}{\mu} (\vec{E} \times \vec{B}) \quad (3.15)$$

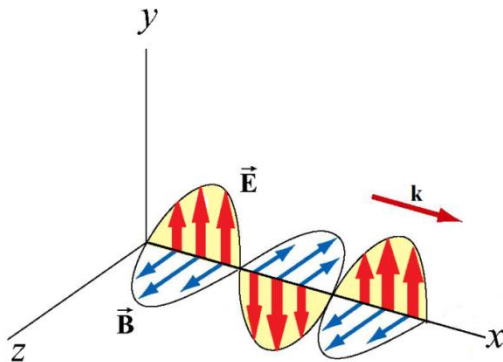
Poynting vektörü elektrik alan ve manyetik alan düzlemine diktir. Denklem (3.15) te bu durum fiziksel olarak açıklanmaktadır. Poynting vektörü, anlık enerji akışı yoğunluğu olarak da adlandırılır. Burada enerji transferini veren  $\vec{S}$ ,  $\vec{E}$  ve  $\vec{B}$  alanlarına diktir. Poynting vektörü, birim alan başına enerji transfer oranını temsil ettiğinden, birimi " $W/m^2$ " dir.

Poynting teoremi, elektrodinamiğin iş- enerji teoremi olarak tanımlanmaktadır.

- Hacimden ayrılan toplam güç = Depolanan elektromanyetik enerjinin düşme hızı - Yük hareketinden dolayı yayılan ohmik güç

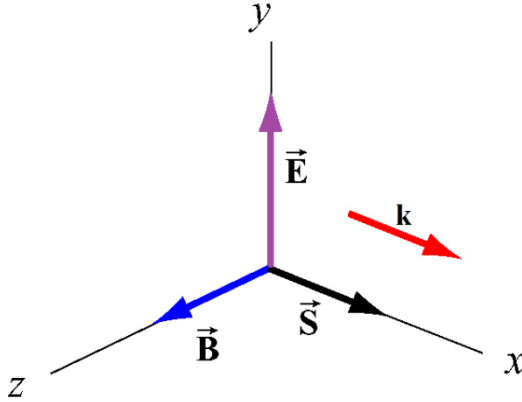
Böylece Poynting'in teoremi şu şekilde ifade edilebilmektedir;

- Alanların kaybettiği enerji = Parçacıklardan elde edilen enerji + Hacimden dışarıya doğru enerji akışı.



Şekil 2.8. Kartezyen koordinatlarda elektromanyetik dalganın yayılımı

Şekil 2.8'de  $\vec{k}$  yayılım vektörü olarak verilmiştir. Yayılım yönünün normaline dik doğrultuda elektrik ve manyetik alan vektörleri gösterilir. Şekil 2.9'da Poynting vektörünün basit bir şeması verilmiştir.



Şekil 2.9. Poynting vektör

Yayılan elektrik alan dalga denklemi, denklem (3.16) ile verilmektedir. Bu bağıntıda  $e^{i\beta x}$  dalganın ilerlemesini  $\vec{E}(z)$  ise sönümlenmeyi ifade etmektedir.

$$\vec{E}(x, y, z) = E(\vec{z})e^{i\beta x} \quad (3.16)$$

Bu denklem Helmholtz denklemi,  $\nabla^2 \vec{E} - k_0^2 \epsilon \vec{E} = 0$  da yerine yazılırsa;

$$\begin{aligned} E(z) \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{i\beta x} + e^{i\beta x} \frac{\partial^2 E(z)}{\partial z^2} \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} (E(z)e^{i\beta x}) = E(z) \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{i\beta x} \\ = -\beta^2 E(z)e^{i\beta x} \end{aligned}$$

$$\nabla^2 \vec{E} = e^{i\beta x} \frac{\partial^2 \vec{E}(z)}{\partial z^2} + E(z)(-\beta^2 e^{i\beta x})$$

Helmholtz denkleminde yerine yazılırsa;

$$\frac{\partial^2 \vec{E}(z)}{\partial z^2} + (k_0^2 \epsilon - \beta^2) \vec{E}(z) = 0$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad \text{ve} \quad \vec{\nabla} \times \vec{H} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t}$$

Denklemleri kullanılarak denklem (3.17) denklem sistemleri elde edilmektedir;

$$\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} = i\omega\mu_0 H_x$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} = i\omega\mu_0 H_y \quad (3.17)(a)$$

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} = i\omega\mu_0 H_z$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon E_x$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon E_y \quad (3.17)(b)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon E_z$$

x-ekseni boyunca ilerlemede  $e^{i\beta x}$  denkleminde  $\partial/\partial x = i\beta$  ve y-ekseninde  $\partial/\partial y = 0$  dir. Bu ifadeler (3.17)(a) ve (3.17)(b) denklemlerinde yerine yazılırsa;

$$\frac{\partial E_y}{\partial z} = -i\omega\mu_0 H_x$$

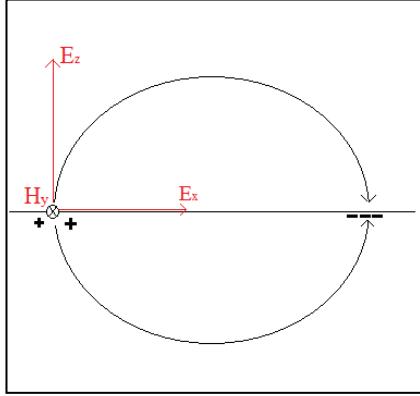
$$\frac{\partial E_x}{\partial z} - i\beta E_z = i\omega\mu_0 H_y \quad (3.18)(a)$$

$$\beta E_y = \omega\mu_0 H_z$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial z} = i\omega\varepsilon_0\varepsilon E_x$$

$$\frac{\partial H_x}{\partial z} - i\beta H_z = -i\omega\varepsilon_0\varepsilon E_y \quad (3.18)(b)$$

$$\beta H_y = \omega\varepsilon_0\varepsilon E_z$$



**Şekil 2.10.** Elektromanyetik dalganın metal-dielektrik ara yüzeyindeki p-modundaki polarizasyonu

Elektromanyetik dalganın iki tür çözüm şekli vardır. Bu çözüm şekilleri ilerleyen elektromanyetik dalganın iki türlü polarizasyona sahip olmasından kaynaklanmaktadır.

- Enine manyetik mod (TM mod/ p-mod)  $E_x, E_z, H_y \neq 0$
- Enine elektrik mod (TE mod/ s-mod)  $H_x, H_z, E_y \neq 0$

TM mod için (3.18)(b.1) denkleminde  $E_x, E_z, H_y \neq 0$  koşulları uygulanırsa

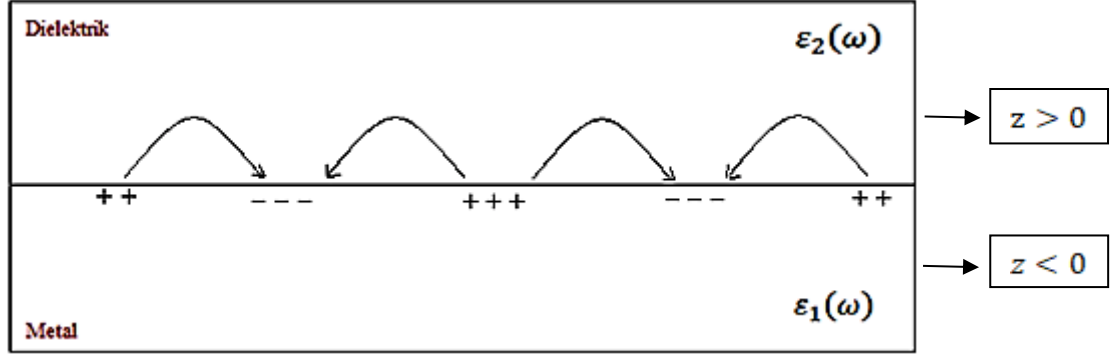
$$E_x = -i \frac{1}{\omega \epsilon_0 \epsilon} \frac{\partial H_y}{\partial z}$$

$$E_z = -\frac{\beta}{\omega \epsilon_0 \epsilon} H_y$$

TM modun meydana gelmesi için  $\vec{E}$  elektrik alanının dalganın ilerleme yönüne dik ve  $\vec{B}$  manyetik alanının ise paralel olması gerekmektedir. TM mod dalga denklemi aşağıda verilmektedir.

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

### 2.2.2. Tek yüzeyli sistemde yüzey plazmon polariton



Şekil 2.11. Metal-dielektrik ara yüzeyinde oluşan polarizasyon

Şekil 2.11’de metal/dielektrik arayüzeyi şema olarak verilmektedir.  $z > 0$  ve  $z < 0$  durumları üzerinden incelemeler yapılmaktadır.

Dielektrik ortam içerisinde ( $z > 0$  da) alan bileşenleri;

$$\vec{H}_y(z) = A_2 e^{i\beta x} e^{-k_{2,z}z}$$

$$\vec{E}_x(z) = iA_2 \frac{1}{\omega \epsilon_0 \epsilon_2} k_2 e^{i\beta x} e^{-k_{2,z}z}$$

$$\vec{E}_z(z) = -A_1 \frac{1}{\omega \epsilon_0 \epsilon_2} e^{i\beta x} e^{-k_{2,z}z}$$

$z < 0$ , metal ortam içinde alan bileşenleri;

$$\vec{H}_y(z) = A_1 e^{i\beta x} e^{-k_{1,z}z}$$

$$\vec{E}_x(z) = -iA_1 \frac{1}{\omega \epsilon_0 \epsilon_1} k_1 e^{i\beta x} e^{-k_{1,z}z}$$

$$\vec{E}_z(z) = -A_2 \frac{1}{\omega \epsilon_0 \epsilon_1} e^{i\beta x} e^{-k_{1,z}z}$$

Ara yüzeyde ( $z=0$ ) ve  $\epsilon_i, E_z, H_y$  sürekliliğinden  $A_1 = A_2$  dir.  $\vec{E}_x(z)$  denklemleri taraf tarafa bölünürse;

$$\frac{k_{2,z}}{k_{1,z}} = -\frac{\epsilon_2}{\epsilon_1}$$

$\text{Re}[\epsilon_1] < 0$  ve  $\epsilon_2 > 0$  durumunda yüzey dalgaları ara yüzeyde oluşurlar.



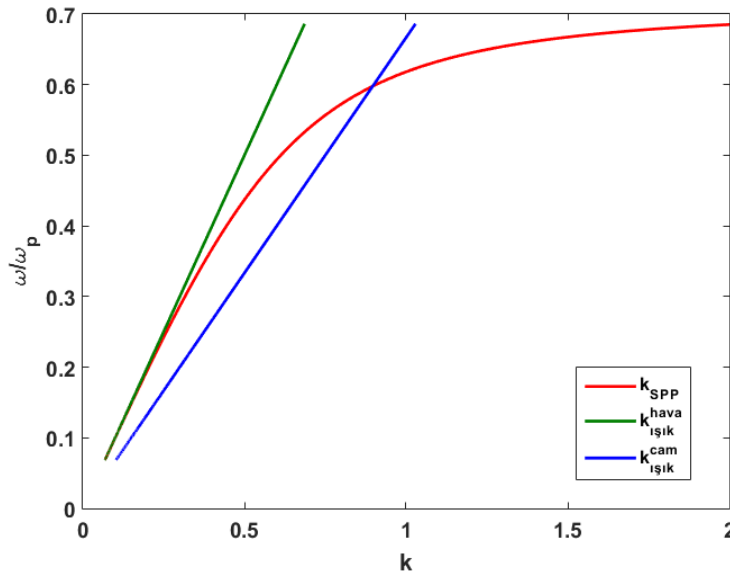
$$k_1^2 = \beta^2 - k_0^2 \varepsilon_1$$

$$k_2^2 = \beta^2 - k_0^2 \varepsilon_2$$

Sonuç olarak yüzey plazmon polaritonların dağılımı bağıntısı elde edilmektedir;

$$k_{SPP} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}} \quad (3.19)$$

Plazmon dalga boyu, boş uzayda ilerleyen ışığın dalga boyundan her zaman küçük olduğu için momentum eşleme kuralı bu koşullar altında gerçekleşmemektedir. Yani plazmonlar doğrudan beyaz ışık ile uyarılamazlar. Plazmonları uyarmak için özel düzenekler kurulmaktadır.



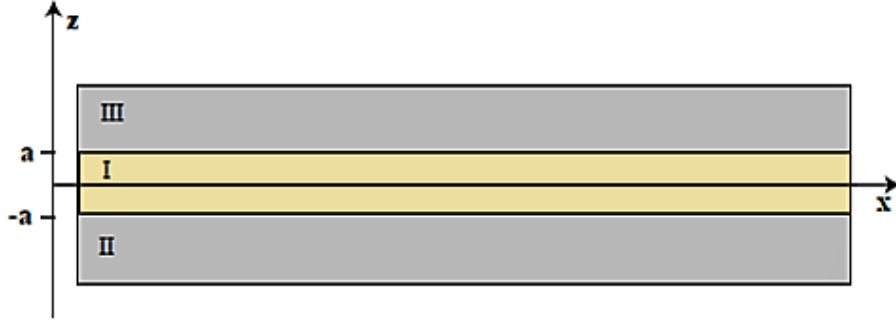
**Şekil 2.12.** Farklı ortamlarda ilerleyen ışık için hesaplanan dispersiyon bağıntıları

Şekil 2.12'de, boş uzayda ilerleyen ışık, cam içinde ilerleyen ışık ve yüzey plazmon polariton için elde edilen dağılım bağıntıları hesaplanarak gösterilmiştir. Grafikten görüldüğü üzere, boş uzayda ilerleyen ışık ile SPP dalga vektörü hiçbir zaman kesişmediğinden yüzey plazmonları doğrudan beyaz ışık ile uyarılmak mümkün değildir. Yüzey plazmonlarını uyarmak için momentum eşleme kuralı gerçekleşmesi gerektiğinden, bunun için bazı ekstra uyarım mekanizmaları geliştirilmiştir.

SPP uyarımının gerçekleşmesi enerji korunumu ve momentum korunumu yasalarının yardımı ile elde edilmektedir. Uyarımlar için kullanılan farklı metotlar bulunmaktadır. Bu metotlar ızgara ile eşleme ve Kretschmann metodu olarak tezin ilerleyen bölümlerinde ayrıntılı olarak açıklanacaktır.

### 2.2.3. Çok katmanlı sistemde yüzey plazmon polariton

İletken ve dielektrik ince filmlerden oluşan çok katmanlı sistemlerde SPP davranışları da incelenmektedir. Böyle bir sistemde, her bir arayüz bağlı SPP'leri sürdürebilir. Komşu arayüzler arasındaki ayırım, arayüz modunun sönümlenme doğrultusu  $\vec{z}$  ile karşılaştırılabilmekte veya daha küçük olduğunda, SPP'lar arasındaki etkileşimler birleştirilmiş modlara yol açmaktadır. Birleşmiş SPP'ların genel özelliklerini açıklamak için, Şekil 2.13'de gösterilen geometrinin iki spesifik üç katmanlı sistemini araştırmak gerekmektedir.



Şekil 2.13. Yüzey plazmonlar için multi-yüzey geometrisi

İlk olarak, iki adet dielektrik kaplama (II, III), bir dielektrik/metal/dielektrik (IMI) heteroyapısı arasına sıkıştırılmış ince bir metalik katman (I) oluşturulabilmektedir. İkinci durum ise iki metalik kaplama (II, III), bir metal/dielektrik/metal (MIM) heteroyapısı arasına sıkıştırılmış ince bir dielektrik çekirdek katmanı (I) göz önünde bulundurulmaktadır.

Burada sadece en düşük dereceli sınırlama modlarıyla ilgilendiğimiz için TM modlarının genel bir açıklaması ile başlanmaktadır.

- $z > a$  için alan bileşenleri;

$$H_y = A e^{i\beta x} e^{-k_3 z}$$

$$E_x = iA \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_3} k_3 e^{i\beta x} e^{-k_3 z} \quad (3.20)$$

$$E_z = -A \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_3} e^{i\beta x} e^{-k_3 z}$$

- $z < -a$  için;

$$H_y = B e^{i\beta x} e^{-k_2 z}$$

$$E_x = -iB \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} k_2 e^{i\beta x} e^{-k_2 z} \quad (3.21)$$

$$E_z = -B \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_2} e^{i\beta x} e^{-k_2 z}$$

Bu nedenle II ve III kaplamalarda üstel olarak sönümlenme olması beklenmektedir. Kolaylık sağlması açısından dalganın bileşenini arayüzlere dik vektör, sadece  $k_i \equiv k_{z,i}$  şeklinde alınmaktadır.

- Merkez  $-a < z < a$  bölgesinde, modlar altta ve üstte lokalizedir.

$$H_y = C e^{i\beta x} e^{k_1 z} + D e^{i\beta x} e^{-k_1 z}$$

$$E_x = -iC \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} k_1 e^{i\beta x} e^{k_1 z} + iD \frac{1}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} k_1 e^{i\beta x} e^{-k_1 z} \quad (3.22)$$

$$E_z = C \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} e^{i\beta x} e^{k_1 z} + D \frac{\beta}{\omega \varepsilon_0 \varepsilon_1} e^{i\beta x} e^{-k_1 z}$$

$z = a$ 'da süreklilik şartı uygulanırsa;

$$A e^{-k_3 a} = C e^{k_1 a} + D e^{-k_1 a}$$

$$\frac{A}{\varepsilon_3} k_2 e^{-k_3 a} = -\frac{C}{\varepsilon_1} k_1 e^{k_1 a} + \frac{D}{\varepsilon_1} k_1 e^{-k_1 a} \quad (3.23)$$

ve  $z = -a$  da;

$$B e^{-k_2 a} = C e^{-k_1 a} + D e^{k_1 a}$$

$$-\frac{B}{\varepsilon_2} k_2 e^{-k_2 a} = -\frac{C}{\varepsilon_1} k_1 e^{-k_1 a} + \frac{D}{\varepsilon_1} k_1 e^{k_1 a} \quad (3.24)$$

dört bağlı denklemden oluşan bir lineer sistemi ifade etmektedir. TM mod dalga denklemi;

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

$$i = 1,2,3 \text{ için; } k_i^2 = \beta^2 - k_0^2 \varepsilon_i$$

Bu lineer denklem sistemini çözmek, dispersiyon ilişkisi için kapalı bir ifade vermektedir.

$$e^{-4k_1 a} = \frac{\frac{k_1}{\varepsilon_1} + \frac{k_2 k_1}{\varepsilon_2 \varepsilon_1} + \frac{k_3}{\varepsilon_3}}{\frac{k_1}{\varepsilon_1} - \frac{k_2 k_1}{\varepsilon_2 \varepsilon_1} - \frac{k_3}{\varepsilon_3}} \quad (3.25)$$

- $a \rightarrow \infty$  sonsuz kalınlık için, (3.25) denklemi aşağıdaki denkleme indirgenmektedir.

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

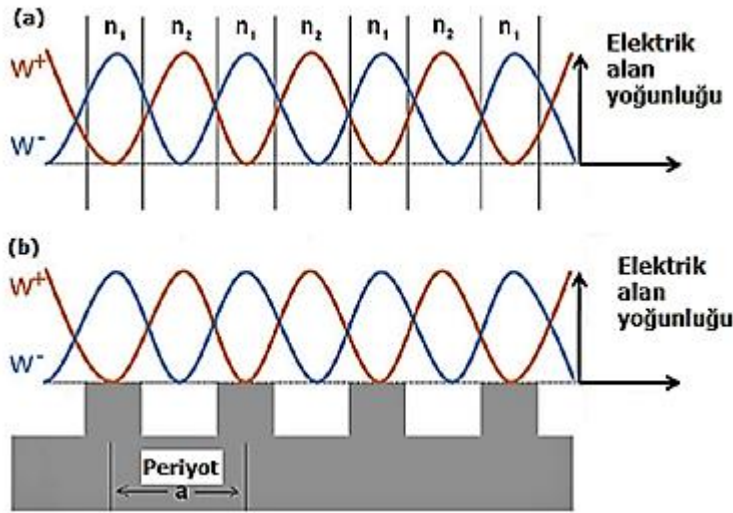
#### 2.2.4. Yayılan ve lokalize yüzey plazmonlar

- **Yayılan SPP;**

Katıhal fiziğinde, bir kristaldeki elektronların, atomların periyodikliğinden dolayı periyodik bir potansiyelde olduğu kabul edilmektedir. Enerji bant aralıkları elektronlar tarafından işgal edilemez ve yasak bant aralığı olarak adlandırılmaktadır. Fotonik kristallerde periyodik yapı iki yüzeyden oluşmaktadır. Bunlardan biri  $n_1$  diğeri  $n_2$  kırılma indisine sahip iki yüzeydir. Bragg koşulunun sağlanması koşuluyla şu elde edilir:

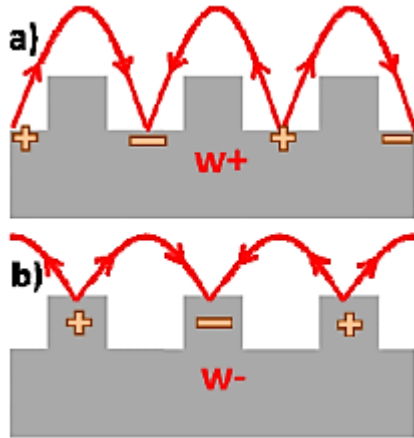
$$k_{SPP} = G/2$$

G karşılıklı kafes vektörü (reciprocal lattice vector) olarak adlandırılmaktadır. Bragg ışık saçılımı ileri geri hareket eden dalgalar ile kararlı dalga oluşturmaktadır. Plazmonik yapıya yapıcı olarak müdahale eden her bir arayüzeydeki ışık, farklı enerjilere sahip iki kararlı dalga profili oluşturmaktadır. Düşük kırılma indisli malzemede yüksek enerjili  $\omega^+$  duran dalga formunun maksimumu oluşur ve yüksek indeksli malzeme de düşük enerji  $\omega^-$  durağan dalganın maksimumu meydana getirmektedir.  $\omega^+$  ve  $\omega^-$  ışık arasındaki enerjiler yıkıcı olarak girişim yaparlar ve ışık yayılımına izin vermezler. Bu nedenle, fotonik bant boşluğu olarak bilinen bir bant aralığı oluşur. Plazmonik bant boşluğunun oluşumu fotonik durum ile aynı analogiye sahiptir. Bu durum Şekil 2.14'de görülmektedir.



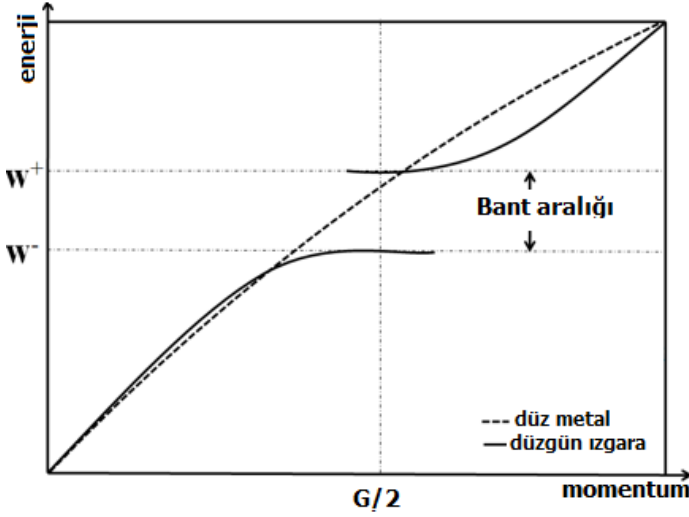
**Şekil 2.14.** Kararlı dalga profili **a)** fotonik kristal içinde ışık, **b)** periyodik yapıda SPP (Karabıyık 2010)

SPP'lar için, ızgara yüzeyindeki oluklar, dağılma merkezleri olarak işlev görmektedir ve plazmanın indeksi, ızgara boyunca ilerlerken periyodik olarak değişmektedir. Izzaraların periyodikliği SPP'ların saçılmasına sebep olmaktadır. SPP'ları aynı momentum ancak farklı enerjiler ile uyararak mümkündür. Farklı enerjilere sahip bant kenarlarında iki farklı elektrik alan dağılımı Şekil 2.15'de görülmektedir (Karabıyık 2010).



**Şekil 2.15.** Elektrik alan dağılımları **a)**  $\omega^+$  modu ve **b)**  $\omega^-$  modu (Karabıyık 2010)

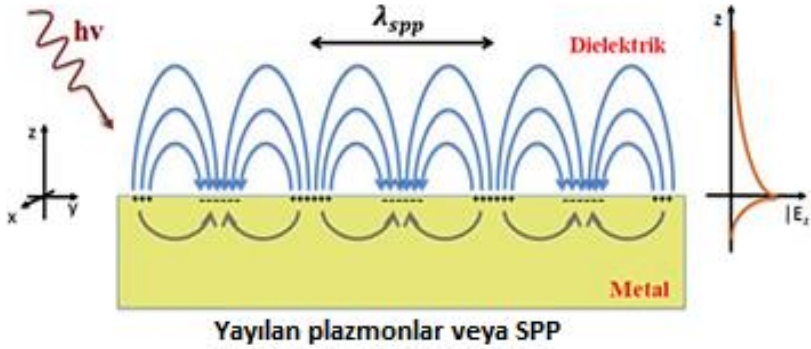
Şekil 2.15a'daki yüksek enerji konfigürasyonu için, yükler ve elektrik alanı oluklarda yer almaktadır. Şekil 2.15b'deki düşük enerji konfigürasyonu için, yükler ve elektrik alanı ızgara zirvelerinde lokalizedir. Bu durum fotonik davranışa çok benzemektedir.



**Şekil 2.16.** Düzgün metalik ızgara ve düzlemsel metal için SPP'lerin dağılım ilişkisinin şematik gösterimi (Karabıyık 2010)

Metalik ızgara için SPP'lerin dispersiyon ilişkisi Şekil 2.16'da gösterilmiştir. Bragg koşulunun karşılandığı momentumda bir bant aralığı oluşur ve aynı momentumda farklı enerjilere sahip iki plazmonik durum oluşur. Enerjileri  $\omega^+$  ve  $\omega^-$  olan iki plazmonik kararlı dalgadır ve Şekil 2.16'da gösterilen dağılım çizgisinin eğimi dalganın grup hızını tanımlar:

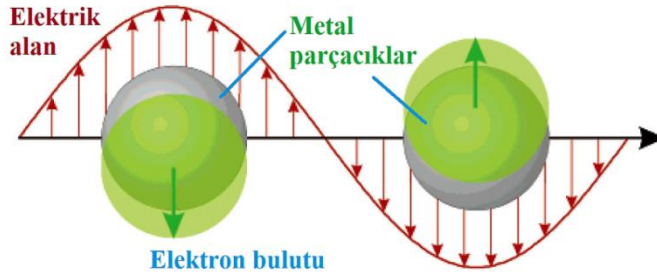
$$v_g = d\omega/dk$$



**Şekil 2.17.** Yayılan yüzey plazmon polaritonlar

- **Lokalize SPP;**

Periyodik metal nanoparçacıklar ile elektromanyetik alanın sınırlandırılmasıdır. Lokalize yüzey plazmonlarının (LSP) oluşması için gereken şart tasarlanan yapıda kullanılan nanoparçacıkların boyutunun ışığın dalgaboyunda olmasıdır.



**Şekil 2.18.** Lokalize yüzey plazmon polaritonlar

LSP, Şekil 2.18’de verildiği gibi, boyutu ışığın dalga boyunda veya dalga boyundan daha küçük olan metalik parçacığın elektronlarının ışık ile yaptıkları kollektif salınımlarıdır. Pozitif yüklü metal kafes ve parçacığa gelen elektromanyetik dalga tarafından yer değiştiren iletken elektron bulutu arasındaki çekim, muhtemelen rezonant davranışa yol açan hareket kuvveti görevi görmektedir. LSP’un elektromanyetik alanı, düzlemsel yüzeylerde SP’ların yayılmasından daha hızlı bir şekilde sönümlenmektedir. Ayrıca nüfuz etme derinliği, optik ve kızılötesi yakın frekanslarda soy metal nanoparçacıkları için birkaç nanometreden onlarca nanometreye kadar değişmektedir. Yayılan SPP lar sürekli frekanslara ve buna bağlı dalgalanmalara sahipken, LSP’lar ayrı modlardır. LSP modunun frekansı, metalin boyutuna, şekline ve türüne bağlıdır.

Yayılan SP lardan farklı olarak LSP lar özel eşleme kuralına ihtiyaç duymadan boş uzayda ilerleyen ışık ile eşleşme yapmaktadırlar. Yayılan SP'lara benzer şekilde, LSP'lar da kayıp modlardır (Jabloňkú 2017).

Ayrı metal nano yapıları, yayılmakta olan SP'ları destekleyemezler. Bunun yerine, metal nano yapılar içinde serbest elektronlar uyarılmaya maruz kalabilir ve toplu salınım yaratabilirler. Bu salınımlar nano yapının geometrik sınırları ile sınırlandırılmıştır. Bu salınımlar LSP olarak bilinir ve harici bir elektromanyetik alan tarafından uyarılabilmektedir.

LSP'lar herhangi bir momentum taşımadığı için, bu serbest anlamına gelen elektronları uyarmak için sadece enerjinin eşleştirilmesi gerekmektedir. Uyarma için fotonlar kullanılabilir ve momentum eşleştirilmesi gerekmez. Sonuç olarak, LSP'ların oluşturulması için oldukça basit optik ekipmanlar kullanılabilir.

Küçük metal nanoparçacıklar arasındaki etkileşim ilk olarak yaklaşık bir asır önce Gustav Mie tarafından ortaya konulmuştur. Bilim insanı Mie, Maxwell denklemlerini analitik olarak çözmüştür ve elektromanyetik alanla etkileşime giren homojen bir ortamda metal nanopartiküller için bir ifade elde etmiştir. Işığın dalga boyundan ( $2r \ll \lambda$ ) daha küçük boyutlarda küresel metal nanoparçacıklar için, optik sönme tesiri aşağıdaki ilişkiyle ifade edilebilmektedir.

$$\sigma_{ext}(\lambda) = \frac{24\pi^2 r^3 \varepsilon_d^{3/2} N}{\lambda n(10)} \frac{\varepsilon_i(\lambda)}{(\varepsilon_r(\lambda) + 2\varepsilon_d)^2 + (\varepsilon_i(\lambda))^2} \quad (3.26)$$

Yukarıdaki ifade de  $r$ , nanoparçacık yarıçapıdır.  $\varepsilon_d$  ortamın dielektrik sabiti,  $\varepsilon_r$  ve  $\varepsilon_i$  sırasıyla dielektrik sabitinin gerçek ve imajiner kısımlarıdır. Polarize edilebilirlik (3.27) bağıntısı ile verilmektedir.

$$\alpha(\lambda) = 4\pi r^3 \frac{\varepsilon(\lambda) - \varepsilon_d(\lambda)}{\varepsilon(\lambda) - 2\varepsilon_d(\lambda)} \quad (3.27)$$

Denklem (3.27) ye göre maksimum polarize edilebilirlik, paydadaki terim sıfıra yaklaştığında meydana gelmektedir, bu durumda  $\varepsilon(\lambda) \approx -2\varepsilon_d(\lambda)$  olmaktadır. Ortamın dielektrik sabiti ( $\varepsilon_d$ ) sabit ve reel bir parametre olarak dikkate alınmaktadır.

Metal nanoparçacık  $\varepsilon_r$ 'nin dielektrik fonksiyonundaki reel kısım, eğer dielektrik malzemenin imajiner parçası ise, güçlü polarizasyonun gerçekleşmesi için negatif bir değere sahip olması gerekmektedir. Denklem (3.26) dan da açıkça görüldüğü gibi, bu durum gerçekleştiğinde maksimum tükenme oluşmaktadır. Böylece plazmon rezonansı meydana gelmektedir.

$$\omega_{LSP} = \frac{\omega_p}{\sqrt{1 + 2\varepsilon_d}} \quad (3.28)$$

Ag ve Au nanoparçacıkları için bağıntı (3.28) deki bu frekans, spektrumun görünür bölgesinde yer almaktadır.

Plazmon rezonansı meydana geldiğinde, iletkenlik elektronları çekirdeğe göre yer değiştirerek onları denge konumlarından uzaklaştırmaktadırlar. Taşıyıcı elektronlar ve atom çekirdeği arasındaki Coulomb çekim kuvveti, serbest elektronlar üzerinde bir geri çekme kuvveti görevi görerek belirli bir frekansta salınımlı bir elektron hareketine yol açmaktadır (Martinsson 2014).

### 2.3. Yüzey Plazmonların Uyarımı

Bir iletken ile dielektriğin düz arayüzeyinde ilerleyen SPP'lar iki boyutlu elektromanyetik dalgalarıdır. Bu dalgaların ilerleme sabiti  $\beta$  nın ışığın dielektrikteki dalga vektörü olan  $\vec{k}$  dan büyük olduğu durumda doğrudan ışık hüzmesi ile uyarılması mümkün değildir. Bu nedenle ışığın momentumu ile plazmon momentumunun eşlenmesi için özel metotların kullanılması gerekmektedir.

#### 2.3.1. Prizma ile eşleme (Kretschmann-Otto)

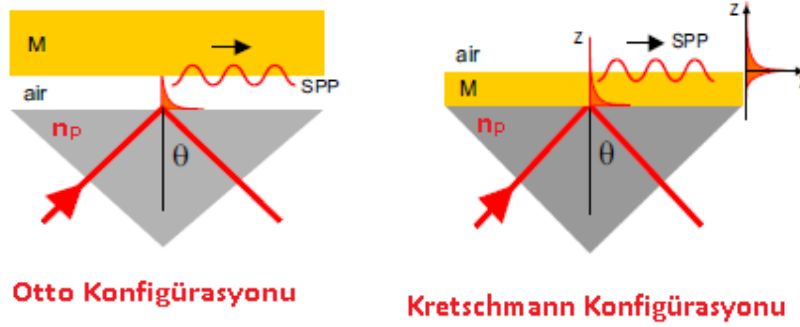
Yüzey plazmonları uyarmak için kullanılan özel uyarım sistemlerinin en yaygın olanı prizma ile eşleme yöntemidir. Kretschmann konfigürasyonunda iki adet dielektrik malzeme arasına yerleştirilmiş metal film ile üç katmanlı sistem oluşturulmaktadır. Bu metodun temel çalışma mantığı tam yansımadır. Şekil 2.19'da görüldüğü gibi elektromanyetik dalga bir  $\theta$  açısı ile kullanılan düzeneğe gönderilmektedir. Düzeneğe gelen elektromanyetik dalga tam yansıma gerçekleştirilmektedir. Tam yansıma olduğu



anda metal/prizma ara yüzey momentumu ile plazma dalga vektörü  $\beta$  eşleşmiş olmaktadır. Momentum eşleme kuralı denklem 3.26 da verilmektedir.

$$\beta = k_x = k\sqrt{\epsilon}\sin\theta \quad (3.26)$$

(3.26) denkleminde,  $\theta$  ışığın gelme açısı,  $\epsilon$  dielektrik sabiti olarak verilmektedir.

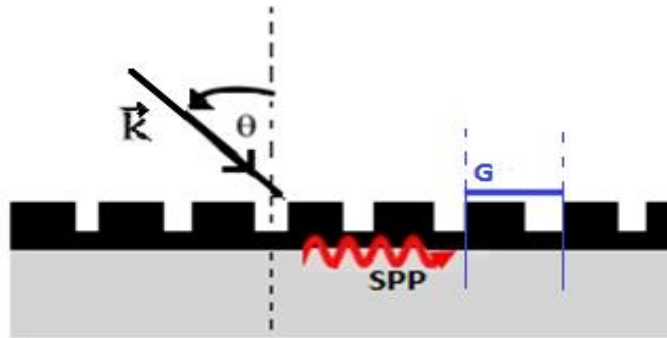


**Şekil 2.19.** Otto ve Kretschmann konfigürasyonu

Otto konfigürasyonunda bulunan aralık mesafesi, gelen ışığın dalgaboyu mertebesinde olduğu zaman söz konusu eşleme gerçekleşmektedir. Kretschmann konfigürasyonunda ise metal ince film ile prizma üzerine oluşturulmaktadır. Prizmada oluşan kaybolan dalgalar (evanescent wave) metal film yüzeyinde yüzey plazmon polaritonları uyarmaktadır.

### 2.3.2. Periyodik yapı ile eşleme

Yüzey plazmonların uyarımında kullanılmakta olan bir diğer metot ise periyodik (ızgara, grating) ile eşlemedir. Şekil 2.20’de metal nanoyapılar üzerine delikler veya oyuklar oluşturularak ışık/madde etkileşimi ile SPP’ları uyarımak mümkün olmaktadır. Metal nano yapıların şekilleri, boyutları ve çeşitleri değiştirilerek rezonans dalga boyu ayarlanabilmektedir.



**Şekil 2.20.** Periyodik yapı ile eşleme (Grating Coupling)

Momentum eşleme kuralı şöyledir;  $\frac{\omega}{c} \sin\theta + \frac{2\pi}{G} = \frac{\omega}{c} \sqrt{\frac{\epsilon_1 \epsilon_2}{\epsilon_1 + \epsilon_2}}$

Prizma ile eşleme tekniğine göre periyodik yapı ile eşlemede yüzey plazmon rezonans kontrolü çok daha rahat olmaktadır.

### 3. MATERYAL VE METOT

#### 3.1. Zaman Uzayında Sonlu Farklar Yöntemi (FDTD)

Zaman uzayında sonlu farklar yöntemi (Finite Difference Time Domain- FDTD) numerik hesaplama metodu, plazmonik yapıların incelenmesinde kullanılan yaygın bir hesaplama yöntemidir. 1966'da Kane Yee tarafından ortaya atılan bu metodun temeli, Maxwell denklemlerinin konum ve zaman türevlerinin sayısal olarak çözülmesine dayanmaktadır. Maxwell denklemlerinde zamana bağlı denklemler merkezi sonlu farklar açılımı ile elde edilen elektrik ve manyetik alan bileşenleri çözülerek zaman cevabı elde edilmektedir (Kunz ve Luebbers 1993).

FDTD çözümlerinin kendi içinde en temel dezavantajı zaman uzayında daha çok ızgaralamaya ihtiyaç duyulmasıdır. Bu hem bilgisayar hafızasının yüksek olmasını hem de çözüm zamanının uzun olmasına sebep olmaktadır. Bunun yanında bu metodun birçok avantajı bulunmaktadır. Örneğin bu metotta lineer cebir kullanılmamaktadır. Yani her bir zaman adımında matris vektör çarpımları gerçekleştirilmektedir. Böylece bilinmeyen sayısında üst sınır yoktur. Çözümler kontrol altındadır. Böylece doğruluğu kontrol edilebilmektedir. İstenilen aralıkta çözümleri elde etmek mümkündür. Bunun için Maxwell denklemlerinin zaman uzayında çözümü yeterli olmaktadır. Yapıların tasarımında kullanılan malzeme seçiminde geniş bir yelpazeye sahiptirler. Diğer taraftan 3-boyutlu çözümler kolaylıkla gerçekleştirilebilmektedir. Tasarlanan yapıya göre yeni formülasyonlar gerekmemektedir. Sadece ızgara yapısı üzerine çalışma yapılmalıdır. FDTD yöntemi tam dalga çözümleri vermektedir.

##### 3.1.1. FDTD modeli

Karmaşık sistemlerde Maxwell denklemlerinin çözümü oldukça karmaşıktır. Teknolojinin gelişmesi ile bu karmaşık problemlerin çözümü için sayısal yöntemler geliştirilmiştir. Bu yöntemler içerisinde yaygın olarak kullanılan yöntem FDTD yöntemidir. FDTD çözüm yönteminde denklem içerisindeki bilinmeyenler bilgisayar ortamında Taylor serisinde sonlu farklar açılımı ile bileşenlerine ayrılmaktadır. Sonuç olarak denklemler zamana ve konuma göre bileşenlere ayrılmış olmaktadır. Geri farklar, ileri farklar ve merkezi farklar olmak üzere üç yaklaşım yapılmaktadır. Gerekli yaklaşımlar yapılarak ayırma işlemleri gerçekleştirilmektedir.

Elektromanyetikteki problemleri çözmek için kullanılan tam dalga tekniklerinin uygulanması açısından FDTD metodu hem kavramsal hem de en basit olan yöntemdir. Çok çeşitli problemleri doğru bir şekilde çözebilmektedir. Çözümler büyük miktarda bellek ve hesaplama zamanı gerektirebilmektedir (Schneider 2017).

##### 3.1.2. FDTD modelinde Maxwell denklemleri

Plazmonik yapıların araştırılmasında elektromanyetik alan ile metal etkileşimlerinin Maxwell bağıntıları ile incelenmesi gerekmektedir. Elektromanyetik çalışmalarda FDTD yöntemi, Maxwell denklemlerinin zamanda ardışık olarak numerik hesaplamaların gerçekleştirildiği metottur. Hacim yük yoğunluğu sıfır olan ( $\rho = 0$ ) kayıplı bir ortam ( $\sigma \neq 0$ ) için Maxwell denklemleri aşağıdaki gibi verilebilmektedir.

$$\vec{\nabla} \times \vec{H} = \varepsilon \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \sigma \vec{E}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\mu \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = 0$$

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{H} = 0$$

FDTD metodunda Maxwell denklemlerini elde etmek için denklem (4.1a) ve (4.1b) de zamana bağlı rotasyonel ifadelerin açılımı yapılmaktadır;

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \vec{\nabla} \times \vec{E} \quad (4.1a)$$

$$\frac{\partial \vec{E}}{\partial t} = \frac{1}{\varepsilon} \vec{\nabla} \times \vec{H} - \frac{\sigma}{\varepsilon} \vec{E} \quad (4.1b)$$

Elektrik alan ve manyetik alan için aşağıdaki açılım yapılarak üçer bileşen elde edilir.

$$\vec{\nabla} \times \vec{A} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \partial/\partial x & \partial/\partial y & \partial/\partial z \\ A_x & A_y & A_z \end{vmatrix} = \vec{i} \left( \frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z} \right) + \vec{j} \left( \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x} \right) + \vec{k} \left( \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y} \right)$$

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

$$\frac{\partial \vec{H}}{\partial t} = -\frac{1}{\mu} \left[ \vec{i} \left( \frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) + \vec{j} \left( \frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) + \vec{k} \left( \frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) \right]$$

Elde edilen altı kısmi diferansiyel denklem 3-boyutta FDTD algoritmasının denklemleri olacaktır. Bu denklemler skaler olarak aşağıda verilmiştir.

$$\begin{aligned}\frac{\partial H_x}{\partial t} &= \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial H_y}{\partial t} &= \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_z}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial z} \right) \\ \frac{\partial H_z}{\partial t} &= \frac{1}{\mu} \left( \frac{\partial E_x}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial x} \right)\end{aligned}\tag{4.2a}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_x}{\partial t} &= \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} - \sigma E_x \right) \\ \frac{\partial E_y}{\partial t} &= \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} - \sigma E_y \right) \\ \frac{\partial E_z}{\partial t} &= \frac{1}{\varepsilon} \left( \frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} - \sigma E_z \right)\end{aligned}\tag{4.2b}$$

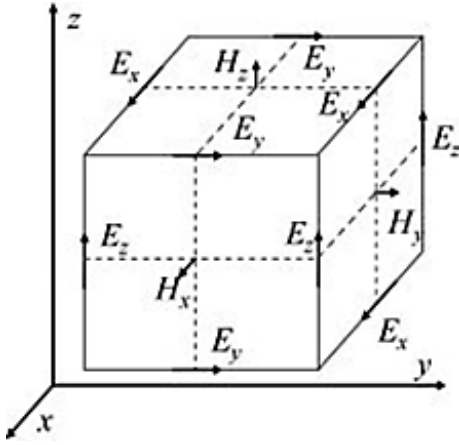
(4.2a) ve (4.2b) denklem takımından da anlaşılacağı üzere uzayın herhangi bir noktasında elektrik ve manyetik alanın bileşenleri birbirlerine bağlıdır. Ayrıca ortamın  $\mu, \varepsilon, \sigma$  değerlerine bağlıdır (Erol 2001).

### 3.1.3. Yee Hücresi

İlk olarak 1966 yılında Kane Yee tarafından önerilen FDTD algoritmasında ikinci dereceden merkezi farklar kullanılmaktadır. Algoritma şu şekilde özetlenebilir:

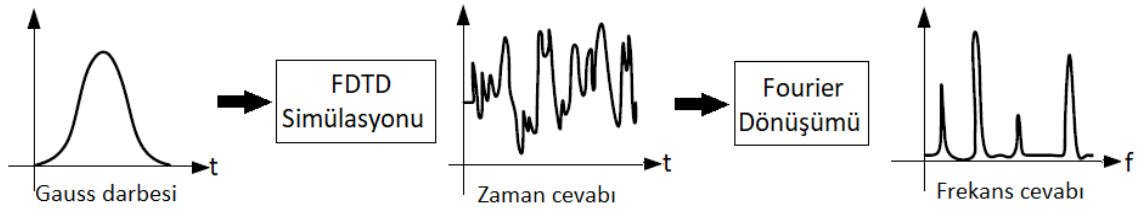
- Amper'in ve Faraday'ın yasalarındaki tüm türevleri sonlu farklarla değiştirilir. Elektrik ve manyetik alanların hem uzayda hem de zamanda katlanması için uzay ve zaman ayrılır.
- (Bilinmeyen) gelecek alanları (bilinen) geçmiş alanlar açısından ifade eden "güncelleme denklemleri" elde etmek için ortaya çıkan fark denklemleri çözülür.
- Manyetik alanlar bir zaman-adım olarak geleceğe doğru değerlendirilir, böylece bilinen parametre yani etkin bir şekilde geçmiş alanlar haline gelirler.
- İstenen süre boyunca alanlar elde edilene kadar önceki iki adım tekrarlanır (Schneider 2017).

FDTD metodunda  $\vec{E}$  ve  $\vec{H}$  bileşenleri 3-boyutta Yee hücresi üzerine yerleştirilerek çözüm gerçekleştirilmektedir.



**Şekil 3.1.** Yee Hücresi

Şekil 3.1’de görüldüğü gibi Yee hücresinde kübün kenarlarında elektrik alan, kübün yüzeylerinde ise manyetik alan tanımlanmaktadır. Bu yaklaşımda öncelikle hesaplamaların yapılacağı sistem Yee hücrelerine bölünerek zaman ve uzay kesikli hale getirilmiş olmaktadır. Sonuç olarak elde edilen değerler yakınsayınca kadar devam etmektedir. Burada FDTD metodu Fourier dönüşümü aracılığıyla frekans çözümünün elde edilmesine olanak sağlamaktadır. Böylece ışığın geçirgenliği, yansımaları gibi değerler hesaplanabilmektedir. Bu durum Şekil 3.2’de gösterilmektedir.



**Şekil 3.2.** FDTD metodu çalışma şeması

### 3.1.4. Ayrıklaştırma

Bilgisayar ortamında Maxwell denklemlerinin çözülebilmesi için Taylor serisinden yararlanılmaktadır. FDTD yönteminde, uzay ve zaman yaklaşımları olarak sonlu farklar açılımı kullanılmaktadır. Maxwell’in denklemlerinde görünen türevler (özellikle Ampere’in ve Faraday’ın yasaları)  $f(x)$  fonksiyonu  $x_0$  civarında  $\pm \delta/2$  de Taylor seri açılımı yapılırsa şu bulunur;

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

$$f(x_0 - \delta/2) = f(x_0) - \delta/2 f'(x_0) + 1/2! (\delta/2)^2 f''(x_0) - 1/3! (\delta/2)^3 f'''(x_0) + \dots$$

Birinci denklemden ikinci denklem çıkarılırsa aşağıdaki denklem elde edilir;

$$f(x_0 + \delta/2) - f(x_0 - \delta/2) = \delta f'(x_0) + 2/3! (\delta/2)^3 f'''(x_0) + \dots$$

denkleminde her iki taraf  $\delta$  ifadesine bölünür ardından birinci dereceden türev yalnız bırakılır.

$$\frac{f(x_0 + \delta/2) - f(x_0 - \delta/2)}{\delta} = f'(x_0) + \frac{1}{3!} \frac{\delta^2}{4} f'''(x_0) + \dots$$

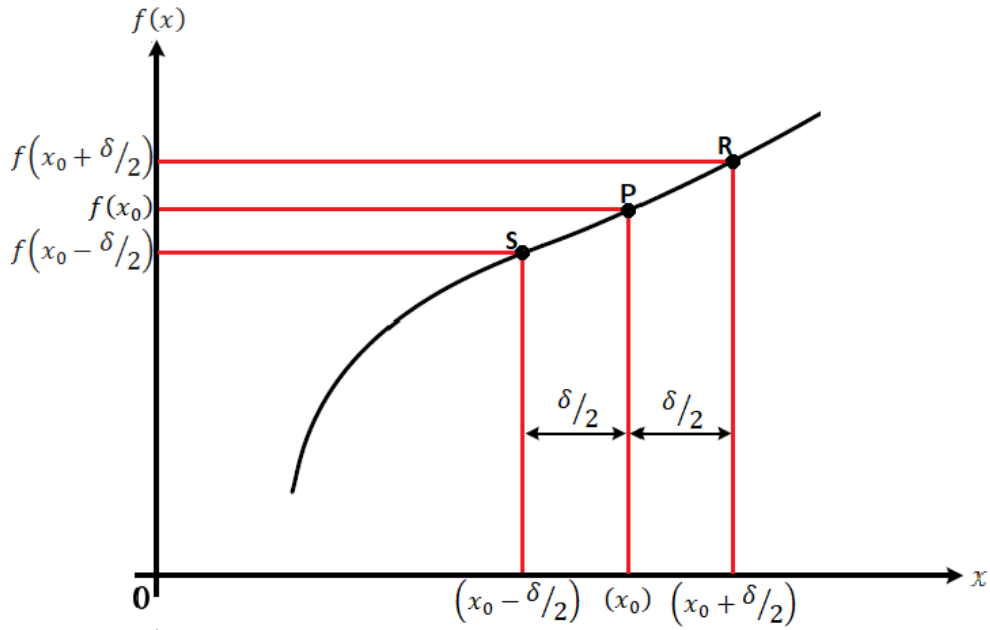
$$\left. \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right|_{x=x_0} = f'(x) = \frac{f(x_0 + \delta/2) - f(x_0 - \delta/2)}{\delta} - O(\delta^2)$$

$O(\delta^2)$  terimi, açıkça gösterilmeyen tüm terimleri ve parantez içindeki değeri temsil etmektedir. Yani  $\delta^2$ , bu gizli terimlerin en düşük basamağını göstermektedir.  $\delta$  yeterince küçük ise, türev için olası bir yaklaşım, tüm şartları basitçe ihmal ederek elde edilebilmektedir. Böylece, merkezi fark yaklaşımı (4.3) bağıntısı elde edilmektedir.

$$\left. \frac{\partial f(x)}{\partial x} \right|_{x=x_0} \approx \frac{f(x_0 + \delta/2) - f(x_0 - \delta/2)}{\delta} \quad (4.3)$$

Merkezi farkın fonksiyonun  $x_0$ 'daki türevine bir yaklaşım sağladığını, ancak fonksiyonun aslında orada örneklenmediğini unutmamak gerekmektedir. Aslında fonksiyonun türevi  $x_0 + \delta/2$  ve  $x_0 - \delta/2$  komşu noktaların birleşimiyle oluşturulan doğrunun eğimine eşit olmaktadır (Erol 2007).

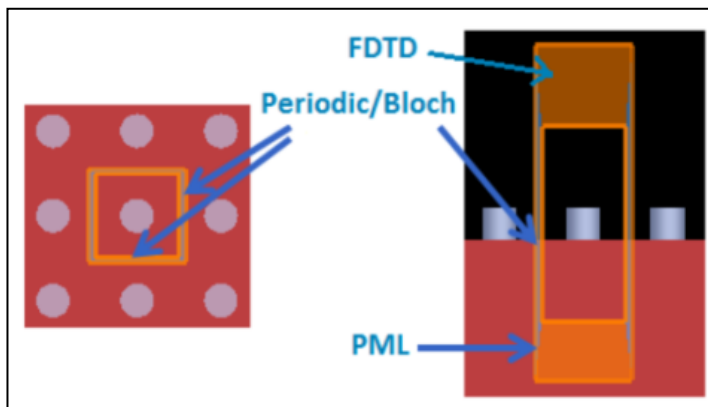
Şekil 3.3'e bakıldığı zaman P noktasında  $f(x)$  fonksiyonunun türevi yaklaşık olarak S ve R noktalarını birleştiren doğru eğimine eşit olmaktadır. Aşağıdaki grafikte merkezi farklar açılımının  $x_0$  noktasında  $f(x)$  fonksiyonunun yaklaşık olarak türevini vermektedir.



Şekil 3.3. Merkezi fark yaklaşımı- Türev hesabı

### 3.1.5. FDTD denklemleri

“FDTD Solutions” bir bilgisayar yazılımıdır. FDTD şematik gösterimi Şekil 3.4’de verilmektedir. Bu yazılım ile çözümü yapılacak yapı, Yee hücreleri, ışık kaynağı, monitörler ile modelleme yapılarak simülasyon hazırlanmaktadır. Çalışılan modelleme iki veya üç boyutlu olabilmektedir. Burada uygulanacak sınır koşulları büyük önem taşımaktadır. Özellikle PML (Perfectly Matched Layer), sınır koşulu kayıplı ortamlar için uygulanmaktadır. Yapılan modelleme de sınıra ulaşan dalganın tüm frekans ve geliş açısında ilerleyen elektromanyetik dalgaların problem uzayına geri yansımalarının en aza indirilmesi amaçlanarak 1994 yılında J. P. Berenger tarafından geliştirilmiştir.



Şekil 3.4. FDTD modeli

Ayrıklaştırma işlemi (3.4.1)- (3.4.6) denklem dizisinde verilmiş olan kartezyen koordinatlarda Maxwell denklemleri kullanılarak konuma ve zamana bağlı olarak



gerçekleşmektedir. Taylor serisinden faydalanılarak merkezi sonlu farklar açılımı yapılmaktadır.

$u(i, \Delta x, j, \Delta y, k, \Delta z) = u_{i,j,k}^n$  gözönüne alınarak, konuma ve zamana bağlı ayrıklaştırmalar şöyledir:

$$\partial u / \partial x = \frac{u^n \left( i + \frac{1}{2}, j, k \right) - u^n \left( i - \frac{1}{2}, j, k \right)}{\Delta x} \quad \text{konuma bağlı}$$

$$\partial u / \partial t = \frac{u^{n+\frac{1}{2}}(i, j, k) - u^{n-\frac{1}{2}}(i, j, k)}{\Delta t} \quad \text{zamana bağlı}$$

Yukarıdaki eşitlikler kullanılarak manyetik alan ve elektrik alan denklemlerine konum ve zamanda ayırma işlemi yapılmaktadır;

$$\begin{aligned} & \frac{H_x^{n+1/2}(i, j, k) - H_x^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta t} \\ &= \frac{1}{\mu} \left[ \frac{E_y^n \left( i, j, k + \frac{1}{2} \right) - E_y^n \left( i, j, k - \frac{1}{2} \right)}{\Delta z} - \frac{E_z^n \left( i, j + \frac{1}{2}, k \right) - E_z^n \left( i, j - \frac{1}{2}, k \right)}{\Delta y} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{H_y^{n+1/2}(i, j, k) - H_y^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta t} \\ &= \frac{1}{\mu} \left[ \frac{E_z^n \left( i + \frac{1}{2}, j, k \right) - E_z^n \left( i - \frac{1}{2}, j, k \right)}{\Delta x} - \frac{E_x^n \left( i, j, k + \frac{1}{2} \right) - E_x^n \left( i, j, k - \frac{1}{2} \right)}{\Delta z} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{H_z^{n+1/2}(i, j, k) - H_z^{n-1/2}(i, j, k)}{\Delta t} \\ &= \frac{1}{\mu} \left[ \frac{E_x^n \left( i, j + \frac{1}{2}, k \right) - E_x^n \left( i, j - \frac{1}{2}, k \right)}{\Delta y} - \frac{E_y^n \left( i + \frac{1}{2}, j, k \right) - E_y^n \left( i - \frac{1}{2}, j, k \right)}{\Delta x} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{E_x^{n+1}(i,j,k) - E_x^n(i,j,k)}{\Delta t} \\ &= \frac{1}{\varepsilon} \left[ \frac{H_z^{n+1/2}\left(i, j + \frac{1}{2}, k\right) - H_z^{n+1/2}\left(i, j - \frac{1}{2}, k\right)}{\Delta y} \right. \\ & \quad \left. - \frac{H_y^{n+1/2}\left(i, j, k + \frac{1}{2}\right) - H_y^{n+1/2}\left(i, j, k - \frac{1}{2}\right)}{\Delta z} \right] - \frac{\sigma}{\varepsilon} \left[ E_x^{n+1/2}(i,j,k) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{E_y^{n+1}(i,j,k) - E_y^n(i,j,k)}{\Delta t} \\ &= \frac{1}{\varepsilon} \left[ \frac{H_x^{n+1/2}\left(i, j, k + \frac{1}{2}\right) - H_x^{n+1/2}\left(i, j, k - \frac{1}{2}\right)}{\Delta z} \right. \\ & \quad \left. - \frac{H_z^{n+1/2}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) - H_z^{n+1/2}\left(i - \frac{1}{2}, j, k\right)}{\Delta x} \right] - \frac{\sigma}{\varepsilon} \left[ E_y^{n+1/2}(i,j,k) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \frac{E_z^{n+1}(i,j,k) - E_z^n(i,j,k)}{\Delta t} \\ &= \frac{1}{\varepsilon} \left[ \frac{H_y^{n+1/2}\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) - H_y^{n+1/2}\left(i - \frac{1}{2}, j, k\right)}{\Delta x} \right. \\ & \quad \left. - \frac{H_x^{n+1/2}\left(i, j + \frac{1}{2}, k\right) - H_x^{n+1/2}\left(i, j - \frac{1}{2}, k\right)}{\Delta y} \right] - \frac{\sigma}{\varepsilon} \left[ E_z^{n+1/2}(i,j,k) \right] \end{aligned}$$

Şeklinde verilen 6 adet denklemde gerekli düzenlemeler yapılırsa aşağıdaki manyetik alan ve elektrik alan bileşenleri elde edilmektedir.

$$\begin{aligned} H_x^{n+1/2}(i,j,k) &= H_x^{n-1/2}(i,j,k) \\ &+ \frac{\Delta t}{\mu} \left[ \frac{E_y^n\left(i, j, k + \frac{1}{2}\right) - E_y^n\left(i, j, k - \frac{1}{2}\right)}{\Delta z} - \frac{E_z^n\left(i, j + \frac{1}{2}, k\right) - E_z^n\left(i, j - \frac{1}{2}, k\right)}{\Delta y} \right] \end{aligned} \quad (4.4a)$$

$$\begin{aligned} H_y^{n+1/2}(i,j,k) &= H_y^{n-1/2}(i,j,k) \\ &+ \frac{\Delta t}{\mu} \left[ \frac{E_z^n\left(i + \frac{1}{2}, j, k\right) - E_z^n\left(i - \frac{1}{2}, j, k\right)}{\Delta x} - \frac{E_x^n\left(i, j, k + \frac{1}{2}\right) - E_x^n\left(i, j, k - \frac{1}{2}\right)}{\Delta z} \right] \end{aligned} \quad (4.4b)$$

$$H_z^{n+1/2}(i, j, k) = H_z^{n-1/2}(i, j, k) + \frac{\Delta t}{\mu} \left[ \frac{E_x^n(i, j + \frac{1}{2}, k) - E_x^n(i, j - \frac{1}{2}, k)}{\Delta y} - \frac{E_y^n(i + \frac{1}{2}, j, k) - E_y^n(i - \frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} \right] \quad (4.4c)$$

$$E_x^{n+1}(i, j, k) = \left( \frac{2\varepsilon - \sigma\Delta t}{2\varepsilon + \sigma\Delta t} \right) E_x^n(i, j, k) + \left( \frac{2\Delta t}{2\varepsilon + \sigma\Delta t} \right) \left[ \frac{H_z^{n+1/2}(i, j + \frac{1}{2}, k) - H_z^{n+1/2}(i, j - \frac{1}{2}, k)}{\Delta y} - \frac{H_y^{n+1/2}(i, j, k + \frac{1}{2}) - H_y^{n+1/2}(i, j, k - \frac{1}{2})}{\Delta z} \right] \quad (4.5a)$$

$$E_y^{n+1}(i, j, k) = \left( \frac{2\varepsilon - \sigma\Delta t}{2\varepsilon + \sigma\Delta t} \right) E_y^n(i, j, k) + \left( \frac{2\Delta t}{2\varepsilon + \sigma\Delta t} \right) \left[ \frac{H_x^{n+1/2}(i, j, k + \frac{1}{2}) - H_x^{n+1/2}(i, j, k - \frac{1}{2})}{\Delta z} - \frac{H_z^{n+1/2}(i + \frac{1}{2}, j, k) - H_z^{n+1/2}(i - \frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} \right] \quad (4.5b)$$

$$E_z^{n+1}(i, j, k) = \left( \frac{2\varepsilon - \sigma\Delta t}{2\varepsilon + \sigma\Delta t} \right) E_z^n(i, j, k) + \left( \frac{2\Delta t}{2\varepsilon + \sigma\Delta t} \right) \left[ \frac{H_y^{n+1/2}(i + \frac{1}{2}, j, k) - H_y^{n+1/2}(i - \frac{1}{2}, j, k)}{\Delta x} - \frac{H_x^{n+1/2}(i, j + \frac{1}{2}, k) - H_x^{n+1/2}(i, j - \frac{1}{2}, k)}{\Delta y} \right] \quad (4.5c)$$

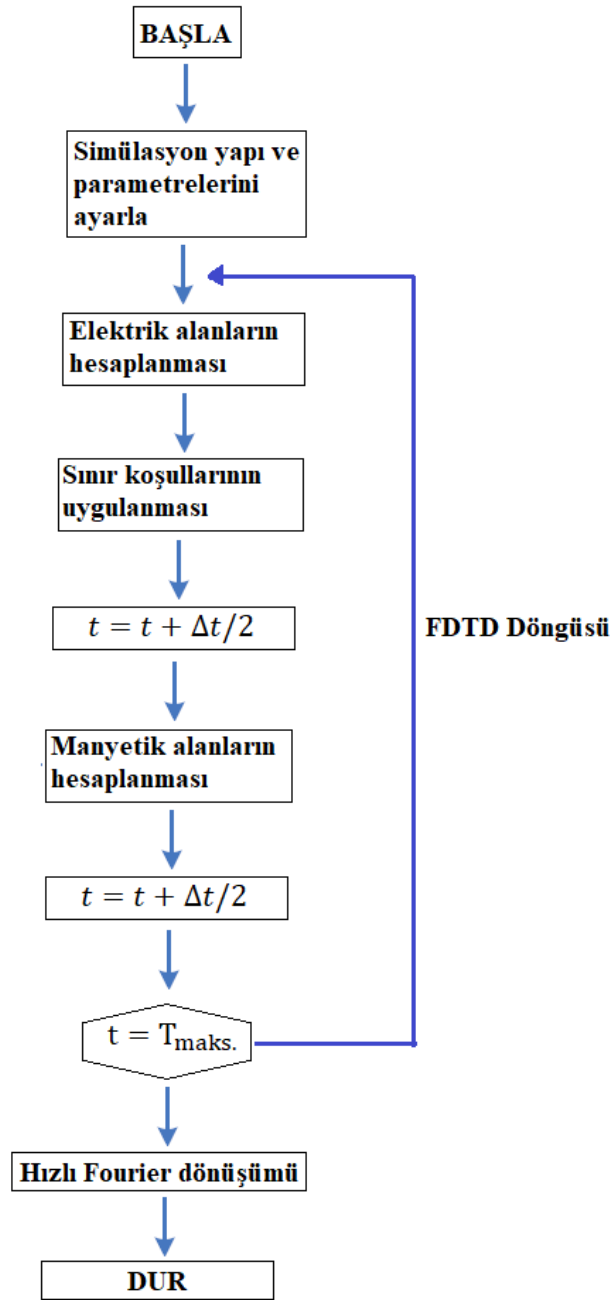
şeklinde gerçekleşmektedir. Kayıplı bir ortam için 3-boyutta FDTD denklemleri elde edilmiş olmaktadır (Gülsu 2011).

### 3.1.6. FDTD algoritması

Analizi yapılmak istenen bir yapıda simülasyon zamana ve konuma bağlı olarak gerçekleşmektedir. Modellenen yapı  $x$ ,  $y$ ,  $z$  eksenleri boyunca  $N_x \times N_y \times N_z$  adet boyutları  $(\Delta x) \times (\Delta y) \times (\Delta z)$  olan küçük hücrelere bölünmektedir. Ardından uygun koşullarda Yee hücrelerine bölünerek analiz başlatılmaktadır. Yapının hücre sayısı, seçilen Yee hücresinin boyutlarına ve modellenen problemin boyutuna bağlı olarak değişmektedir. Hücre sayısı bu parametrelere göre binlerce veya milyonlarca olabilmektedir. Ele alınan tasarımda kullanılacak malzemenin  $\varepsilon, \mu$  ve  $\sigma$  değerleri ayrılaştırılmış denklemler ile belirlenerek başlangıç değeri atanmaktadır. İstenen cevap elde edilinceye kadar denklemler iteratif (tekrarlayan) olarak çözülmektedir.

Simülasyon boyunca hesaplamalar zaman uzayında gerçekleştirilmektedir. Burada hesaplanmakta olan elektrik ve manyetik alanlar  $E(t)$  ve  $H(t)$  şeklinde zamana bağlı elde edilmektedir. Elektrik ve manyetik alan bileşenlerinin Yee hücresi içerisine farklı konumlara yerleştirilmesi nedeniyle hesaplama zamanları arasında  $\Delta t/2$  kadar fark bulunmaktadır.

$$E_x^{n+1}(i, j, k) = \left( \frac{2\varepsilon - \sigma\Delta t}{2\varepsilon + \sigma\Delta t} \right) E_x^n(i, j, k) + \left( \frac{2\Delta t}{2\varepsilon + \sigma\Delta t} \right) \left[ \begin{array}{c} \frac{H_z^{n+1/2} \left( i, j + \frac{1}{2}, k \right) - H_z^{n+1/2} \left( i, j - \frac{1}{2}, k \right)}{\Delta y} \\ - \frac{H_y^{n+1/2} \left( i, j, k + \frac{1}{2} \right) - H_y^{n+1/2} \left( i, j, k - \frac{1}{2} \right)}{\Delta z} \end{array} \right] \quad (4.5a)$$



Şekil 3.5. FDTD algoritması akış şeması

Şekil 3.5’de görülmekte olan aradaki  $t = t + \Delta t/2$  kadarlık fark manyetik alan ve elektrik alan bileşenlerinin hangi anlarda belirleneceğini göstermektedir. Burada elektrik alan bileşenleri  $t = \Delta t/2, 3\Delta t/2, 5\Delta t/2 \dots$  şeklinde, manyetik alan bileşenleri ise  $t = 0, \Delta t, 2\Delta t \dots$  şeklinde hesaplanmaktadır. Bu döngü maksimum zaman adımı tamamlanıncaya kadar devam etmektedir (Erol 2007).

### 3.1.7. İteratif denklemlerin kararlılık kriteri

Ayrılmış FDTD denklemlerinden görüldüğü gibi herhangi bir noktadaki elektrik alan bileşeninin değeri, bir zaman adımı önceki alan bileşeni değerine ve komşu manyetik alan bileşenlerine bağlı olmaktadır. İteratif, başka bir deyişle ardışık denklemler açık denklem sistemi oluşturdukları için her zaman sonlu çözüm vermeyebilmektedirler. Burada çözüm kararlılığını garanti etmek için kullanılması gereken “Courant kararlılık kriteri” olmaktadır. Bu kıstas kısaca şöyle belirtilmektedir; belirlenen hücre boyutları  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$  ile herbir zaman adımı sabit  $\Delta t$  değeri arasında ilişki sağlanmalıdır. Courant kararlılık kriteri bağlantı (4.6) da görülmektedir.

$$\Delta t \leq \frac{1}{v_{maks} \sqrt{(1/\Delta x)^2 + (1/\Delta y)^2 + (1/\Delta z)^2}} \quad (4.6)$$

$v_{maks}$  elektromanyetik dalganın maksimum hızını göstermektedir. (4.6) denkleminde göre çözümün kararlı olması için belirli bir zaman aralığında dalganın maksimum ilerlemesi hücrenin boyutunu geçmemelidir. Yani zaman adımı öyle küçük seçilmelidir ki dalga hareketi bir zaman adımında hücre içerisinde kalmalıdır.

$v$  dalga hızından yola çıkılarak (4.7) bağıntısından da görüleceği üzere elektromanyetik dalganın yayılma hızı ortamın manyetik geçirgenliğine ve dielektrik sabitine bağlıdır.

$$v = \frac{1}{\sqrt{\mu\epsilon}} = \frac{c}{\mu_r \epsilon_r} \text{ m/sn} \quad (4.7)$$

Hücre boyutu küçültülünce zaman adımı da küçülmektedir. Burada küçültme ne kadar artar ise simülasyon süresi ve hafıza gereksinimi de o kadar artmaktadır. Bu nedenle hücreler arasındaki mesafelerin modellenen yapıya özel olarak seçilmesi tavsiye edilmektedir (Erol 2007).

### 3.1.8. Sınır koşulları

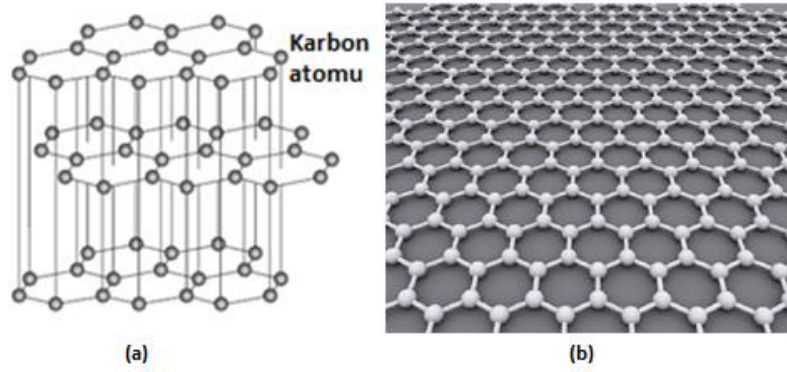
Elektromanyetik problemlerin çözümünde genellikle açık yapılar ile çalışılmaktadır. Ancak FDTD çözüm uzayını sonsuz seçmek mümkün değildir. Bu yüzden yapı üzerinde uygun sınır koşullarında çözüm alanını belirlemek gerekmektedir (Sadiku 2000).

Sınırlarda soğurucu sınır koşulları (Absorbing Boundary Condition-ABC) uygulanarak çözüm uzayı içerisinde ilerleyen elektromanyetik radyasyonun sınırlardan geçerken yansımaması sağlanmaktadır. Buna ilaveten dalganın boş uzayda ilerliyormuş gibi hesap uzayında etki göstermesi sağlanmaktadır (Kunz ve Luebbers 1993). ABC sınır koşullarının iyileştirilmesine yönelik önemli bir adım ilk kez 1994 yılında J. P. Berenger tarafından Mükemmel Uyumlu Katman (Perfectly Matched Layer-PML) ile geliştirilmiştir (Berenger 1994).

PML sınır koşulu kayıplı ortamlar için uygulanmaktadır. Burada en önemli özellik sınıra gelen dalganın tüm frekans ve geliş açısında gelen elektromanyetik dalganın çözüm uzayına geri yansımalarının en az dereceye indirilmesidir.

### 3.2. Grafen

Şekil 3.6’da grafit kristali ile grafen yapısı görülmektedir. Grafit yapısı bal peteği olarak adlandırılan altıgen şeklinde dizilmiş karbon atomlarının katmanlar halinde dizilmesi ile oluşmaktadır. 2004 yılında Andre Geim ve Kostya Novoselov adlı iki bilim insanı, üst üste dizilmiş bu altıgen katmanları ayırarak tek katman grafit elde etmişlerdir. Elde ettikleri tek katmandan oluşan grafit yapıya “Grafen” adı verilmiştir.



Şekil 3.6. a) Grafit ve b) Grafen

Grafenin diğer kristallerden en büyük farkı, atomların tek katman boyunca sıralanmalarıdır. Burada açıkça görüldüğü üzere grafen iki boyutlu bir malzemedir. Bu iki boyutlu yapı, grafene özgü yapısal, elektronik ve optik özellikler kazandırmaktadır. Mevcut malzemeler içinde en ince olanıdır ve yalnızca bir atom kalınlığındadır. Işığın %2,3’ ünü soğurduğu için son derece şeffaf bir malzemedir.

Grafen yüksek iletkenlik özelliğine sahiptir. Bunu sağlayan durumlardan biri içerisindeki elektronların atom örgüsü ile olan etkileşimlerinden dolayı grafenin kütleli gibi davranabilmesidir. Bir diğer sebep ise grafenin elektronik bant yapısıdır. Grafenin yüksek iletkenlik özelliği, başka bir malzeme üzerine konularak kullanıldığı için düşmektedir. Ayrıca grafen esnek olmasına rağmen çok dayanıklıdır. Grafenin birçok uygulama alanında kullanımı bulunmaktadır. Bunlardan bazıları; yüzey kaplama, sensörler, tıp, elektronik, enerji depolama, havacılık olarak verilebilir. Grafen, iki boyutlu sık kafes yapısı ile en küçük atomları bile geçirmeyen ayrıca ısıyı çok iyi iletebilen bir malzemedir.

### 3.2.1. Grafenin optik özellikleri

Optik iletkenliğin herhangi bir malzeme parametresinden bağımsız olmasıdır.

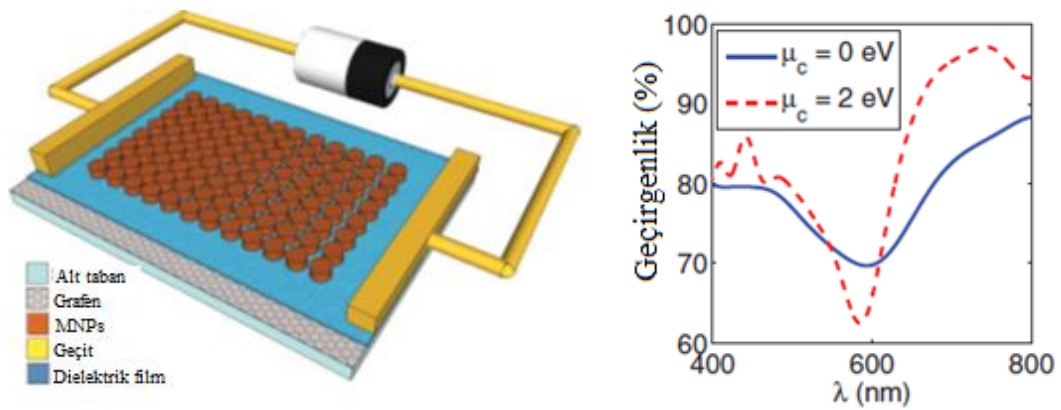
$$\sigma_{uni} = \pi e^2 / (2h)$$

$e$  elektron yükü,  $h$  Plank sabitidir. Bu nedenle, optik absorpsiyon sadece ince yapı sabitine bağlıdır  $\pi\alpha \approx 2.3\%$ . Bu tür basit davranışların, sıfır sıcaklıktaki katlanmamış örnekler için beklenir. Doping, optik özellikler üzerinde çok güçlü bir etkiye sahiptir: Pauli engelleme,  $2E_F$ 'den düşük enerjili fotonların absorplanmasını engellemektedir (Grigorenko vd. 2012).

İki boyutlu tek atom kalınlığına sahip grafen, tek başına görünür dalga boylarında geçirgen bir malzemedir. Grafenin sahip olduğu elektriksel ve mekanik özellikleri ile aktif plazmonik uygulamalarda, foto-detektörlerde, plazmon dalga kılavuzlarında ve sensörlerde uygulama alanları bulunmaktadır. Grafenin bu noktada en önemli özelliği, iletkenliğin uygulanan potansiyel ile kızılötesi bölgeden THz bölgeye kadar geniş bir dalga boyu aralığında dinamik olarak ayarlanabilir olmasıdır. Bu da onu yüksek derecede ayarlanabilir aktif plazmonik sensörlerin modellenmesi için kullanılabilir bir malzeme yapmaktadır.

### 3.2.2. FDTD modelinde grafen

Yapılan bir çalışmada görünür dalgaboylarında grafen ile yapılan modellemede öncelikle grafenin kimyasal potansiyeli sıfır alınmıştır. Ardından kimyasal potansiyel  $\mu_c = 2$  eV olarak ayarlanmıştır. Şekil 3.7'de geçirgenlik dalgaboyu grafiği görülmektedir.

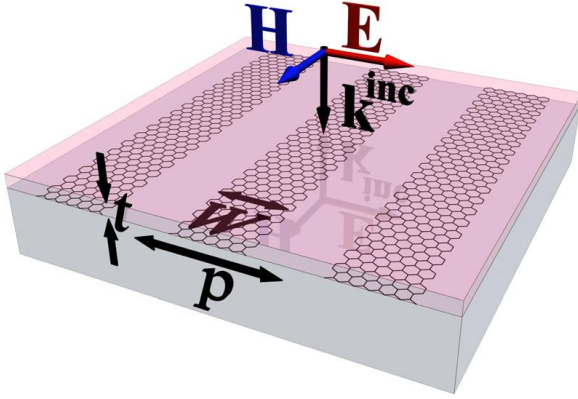


**Şekil 3.7.** Grafen malzemenin kimyasal potansiyeli değişiminde geçirgenlik-dalga boyu grafiği

Şekil 3.7'de yapılan modellemenin şeması verilmiştir. Burada sırasıyla cam örnek, grafen levha, dielektrik malzeme üst üste konulmuştur. Burada en üste metal nanoparçacıklar belirlenen periyotlarla yerleştirilmiştir. Grafen malzemeye voltaj uygulandığında oluşan rezonans grafikte görülmektedir. Uygulanacak farklı voltajlar ile rezonans dalgaboyu değiştirilebilmektedir (Simsek, 2013).



Yapılan bir diğer çalışmada ise Borislav Vasic ve arkadaşları, kızılötesi frekanslarda grafen şeritler ile Şekil 3.8’de gösterildiği gibi modelleme yapmışlardır. Grafen şeritlerin görünür dalgaboylarında metal nano-parçacıkların sahip olduğu hassasiyetle karşılaştırılabilir hassasiyet değerlerine ulaşabildiğini gözlemlemişlerdir.



**Şekil 3.8.** Grafen şeritler ile modelleme

$$k_{SPP} = \frac{i(\varepsilon_{med} + \varepsilon_{sub})\varepsilon_0 c}{\sigma(\omega)} k_0 \quad (4.8)$$

(4.8) bağıntısında  $k_{SPP}$  grafen için yüzey plazmon polaritonların dalga vektörü,  $k_0$  boş uzayın dalga vektörü,  $\varepsilon_{med}$  ortamın dielektrik sabiti ve  $\varepsilon_{sub}$  malzemenin dielektrik sabiti olarak verilmektedir. Burada Drude modeline göre;

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2 E_F}{\pi \hbar} \frac{i}{\omega + i/\tau} \quad (4.9)$$

Denklem (4.9) da  $e$  elektron yükü,  $\tau$  durulma süresi (relaxation time),  $E_F$  Fermi enerjisi olarak verilmiştir.

$$\lambda_{SPR} = \frac{2\pi \hbar c}{e} \sqrt{\frac{W(\varepsilon_{med} + \varepsilon_{sub})\varepsilon_0}{E_F}} \quad (4.10)$$

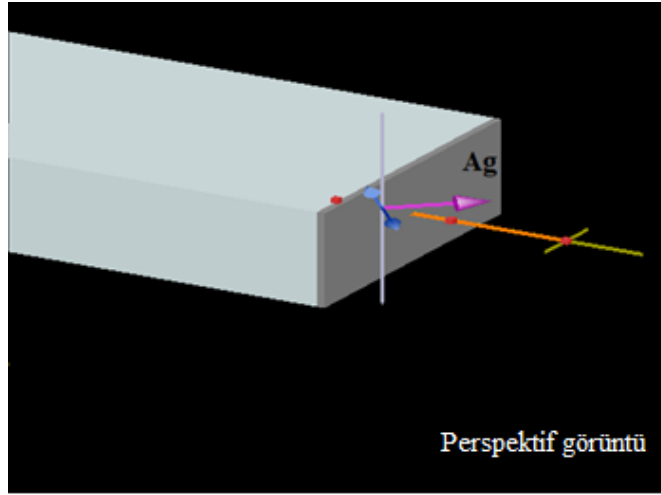
(4.10) bağıntısından görüldüğü gibi grafenin optik özellikleri  $E_F$  Fermi enerjisi ile değiştirilebilmektedir. Yani grafenin kimyasal potansiyeli değiştirilerek optik özellikleri üzerinde çalışmalar yapılabilmektedir (Vasic, 2013).

## 4. BULGULAR VE TARTIŞMA

### 4.1. Plazmonik Tabanlı Uygulamalar

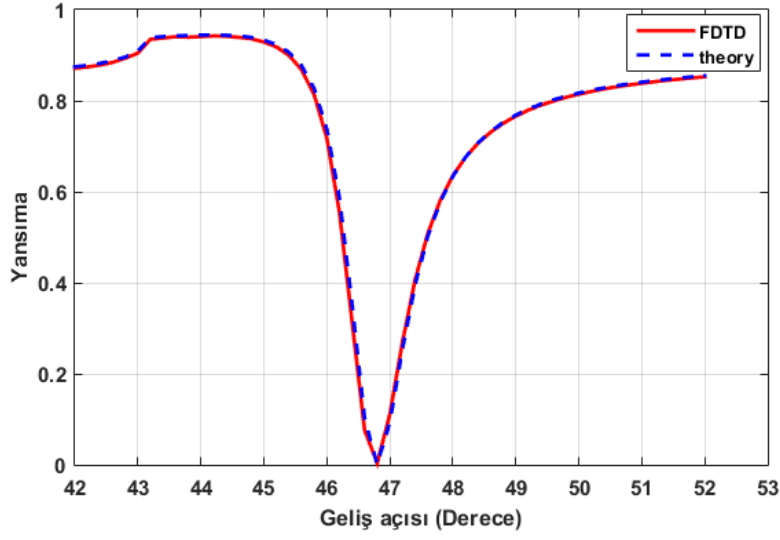
#### 4.1.1. Kretschmann yöntemi

Kretschmann yönteminde, SPP'lerin uyarımı işlemi, iki farklı dielektrik sabitine sahip yalıtkan arasına yerleştirilmiş metal filmden oluşan üç katmanlı bir sistem aracılığı ile gerçekleştirilmektedir. Bu yöntem aynı zamanda sönümlü tam yansıma yöntemi olarak bilinmektedir. Kretschmann konfigürasyonunda, bir ışık kaynağı metalle rezonans açısı yapacak şekilde yapı üzerine gönderilmektedir. Altın (Au)-cam ara yüzeyinde meydana gelen kaybolan dalgaların (evanescentwave) Au-hava ara yüzeyindeki plazmonları uyarması sağlanmaktadır. Bu rezonans açısı, yansıyan ışığın şiddetinin belli bir açıda dip yapması ile belirlenmektedir.



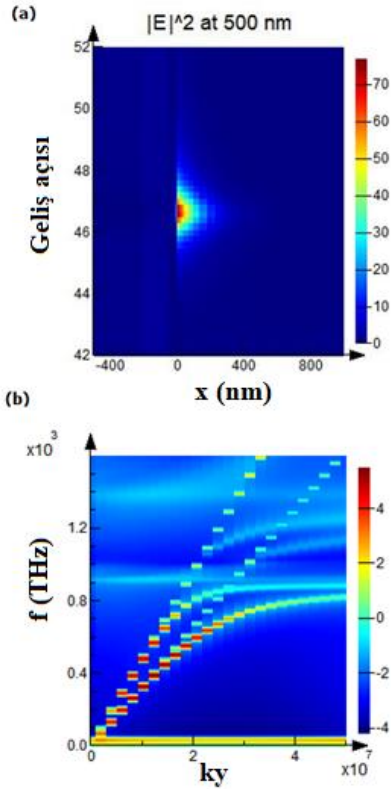
**Şekil 4.1.** Yapının FDTD tasarımı (Cam yüzeyine 50 nm Ag film)

Şekil 4.1'de, tasarlanan Kretschmann konfigürasyon yapısı görülmektedir. Burada öncelikle cam örneğinin üzerine Gümüş (Ag) film yerleştirilmiştir. Daha sonra yapı üzerine belirli açılarda elektromanyetik dalga gönderilmesi için düzlemsel ışık kaynağı tasarıma eklenmiştir. Gerekli ölçümlerin alınması, yapıya eklenen monitör ile gerçekleştirilmiştir.



**Şekil 4.2.** Işık geliş açısına bağlı yansıma grafiği

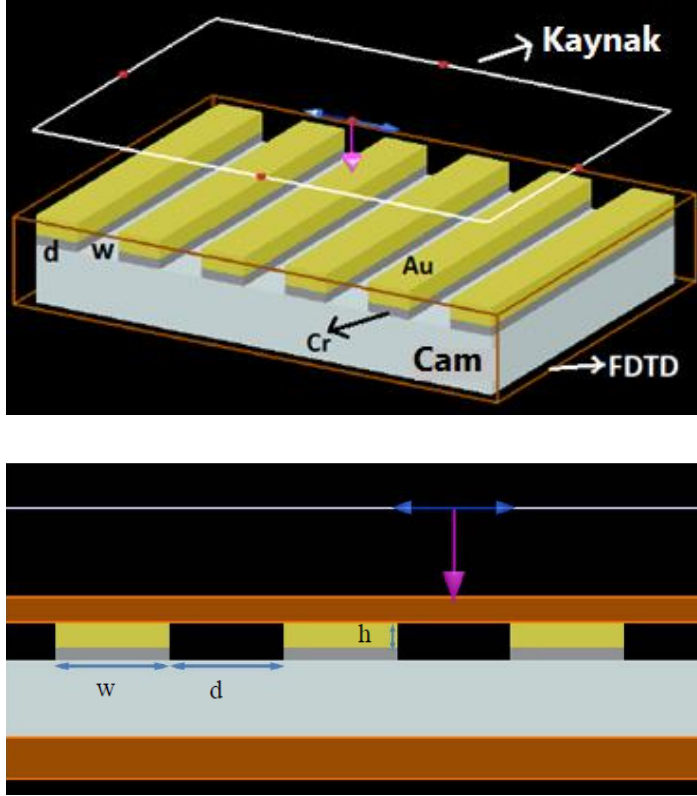
Şekil 4.2’de simüle yansıma spektrumunu, kaynak açısının bir fonksiyonu olarak gösterir. Hem analitik çözümü hem de FDTD simülasyonu için rezonans açısı yaklaşık 47 derecede bulunur.



**Şekil 4.3.** a) Elektrik alan yoğunluğu, b) yüzey plazmon rezonansın dispersiyon ilişkisinin FDTD ile hesaplaması

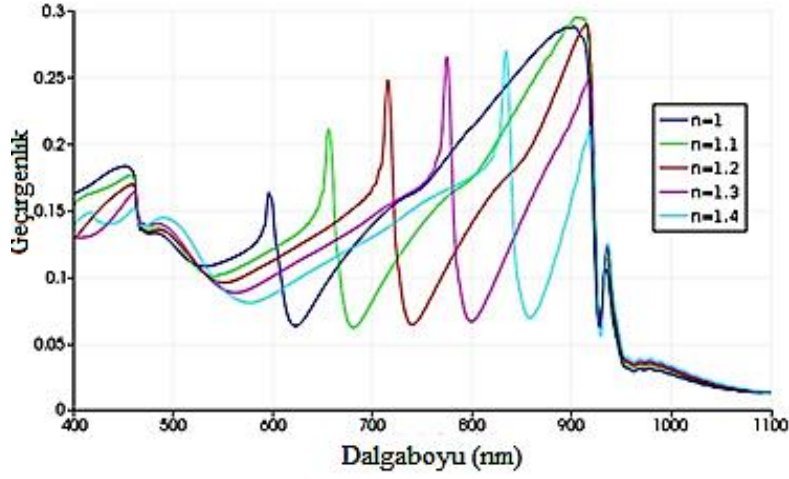
Şekil 4.3a’da,  $\vec{E}$  elektrik alan yoğunluğunu tüm geliş açıları için  $x$  yönünün bir fonksiyonu olarak gösterilmektedir. Şekil 4.3b’de ise SPR’ın dispersiyon ilişkisi FDTD ile hesaplanmıştır.

#### 4.1.2. Izgara yöntemi

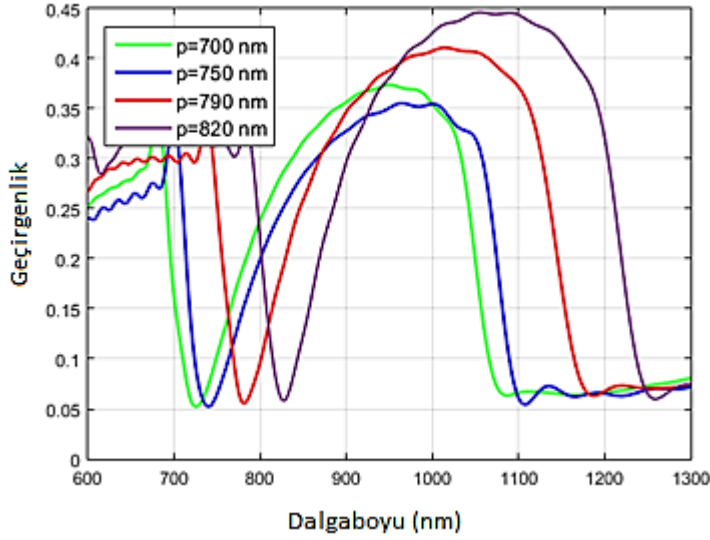


Şekil 4.4. Cam/Cr/Au ızgaralama yöntemi FDTD modeli görüntüsü

SPP’ları uyarım yöntemlerinden birisi olan ızgara yöntemi literatürde “Grating coupling” olarak bilinmektedir. Yapılan çalışmalardan bir tanesinde cam üzerine metal nano-çubuklar yerleştirilmiştir. Bu çalışmanın FDTD gösterimi Şekil 4.4’de verilmektedir. Metal ızgaralar cam örnek üzerine farklı periyotlar, farklı kalınlıklar ile ele alınmıştır. Diğer taraftan ortam kırılma indisleri de değiştirilerek hesaplamalar gerçekleştirilmiştir. Oluşturulan yapı tasarımında, altın nano çubukların aralarındaki mesafe 100 nm, yapı periyodu 600 nm, krom kalınlığı 10 nm, altın kalınlığı 30 nm olarak ayarlanmıştır. Ortamın kırılma indisi değişimine karşılık geçirgenlik grafiği Şekil 4.5’de verilmektedir.



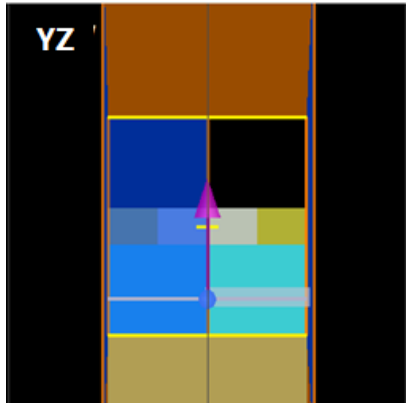
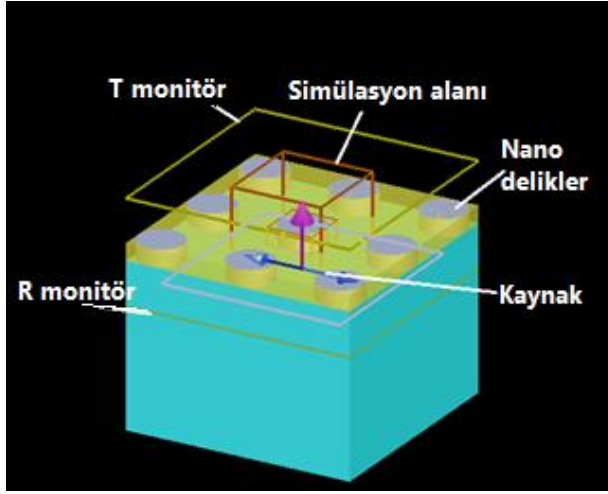
Şekil 4.5. Farklı kırılma indisine sahip ortamlarda geçirgenlik-dalgaboyu grafiği



Şekil 4.6. Farklı periyotlar için geçirgenlik-dalgaboyu grafiği

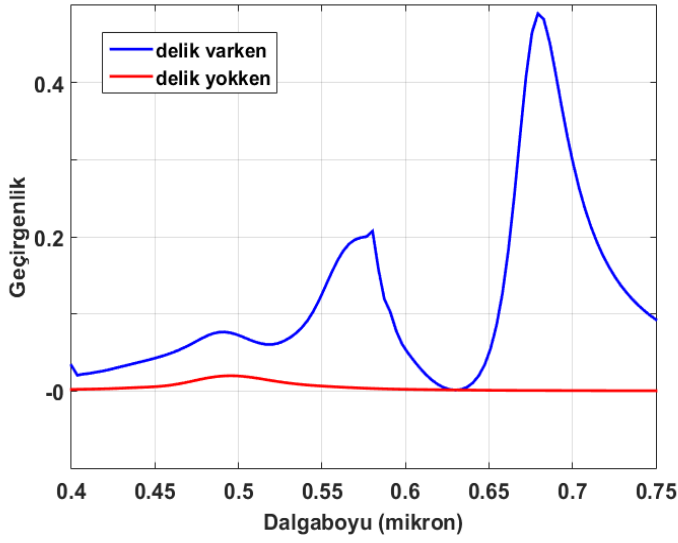
Şekil 4.6'da ise tasarlanan ızgara yapının farklı periyotlarda geçirgenlik-dalgaboyu grafiği gösterilmektedir. Grafikten görüldüğü gibi yapının periyodu arttırıldığı zaman rezonans dalgaboyu sağa doğru kaymaktadır.

#### 4.1.3. Sıradışı geçirgenlik

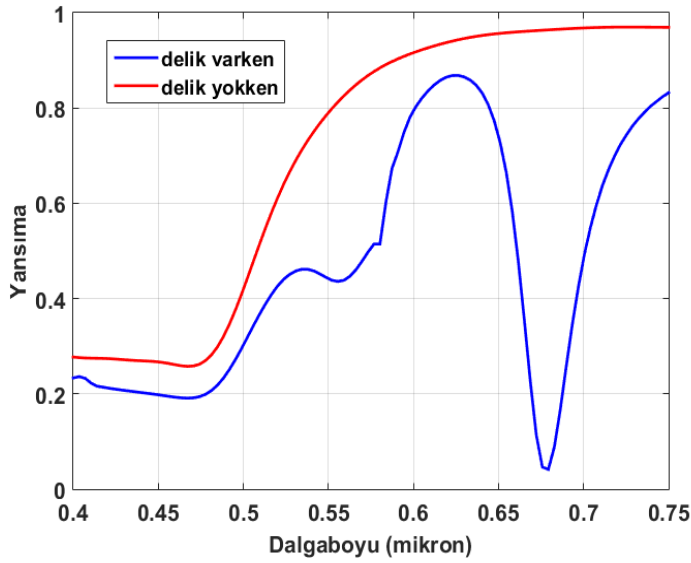


**Şekil 4.7.** Sıradışı geçirgenlik için tasarlanan yapının FDTD modeli görüntüsü

Şekil 4.7’de verildiği gibi simülasyon tasarımında 100 nm kalınlığındaki Au film, cam örneği üzerine yerleştirilmiştir. Ardından periyot 400 nm olacak şekilde 100 nm çapında delikler Au film üzerinde oluşturulmuştur. Tasarlanan yapıda, düzlemsel dalga kaynağının dalgaboyu aralığı 400-750 nm olarak ayarlanmıştır.



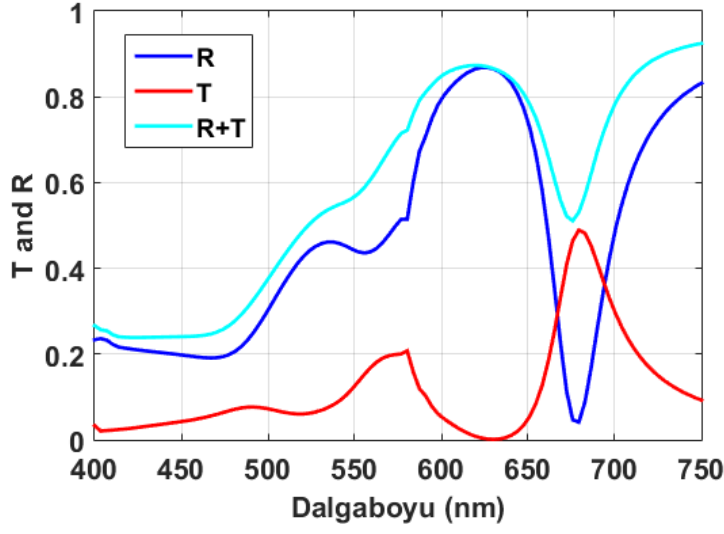
(a)



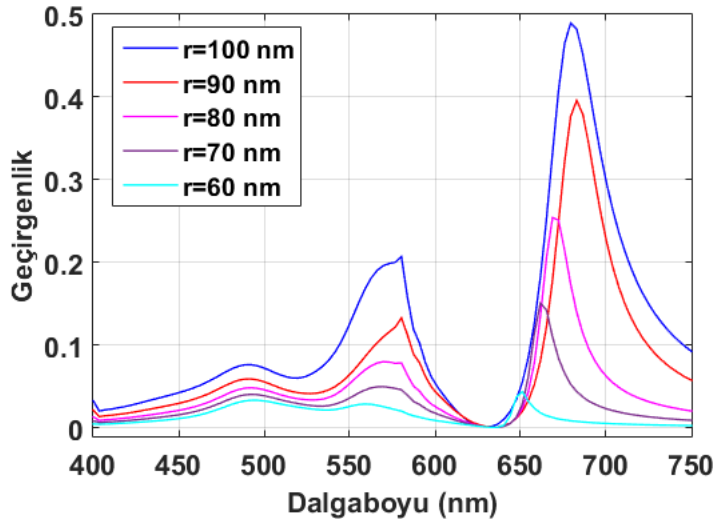
(b)

**Şekil 4.8.** Nanodelikler varken ve yokken; **a)** geçirgenlik-dalgaboyu grafiđi, **b)** yansırma-dalgaboyu grafiđi

Sıradıřı geçirgenlik alıřmasında, 100 nm Au film zerine delikler yerleřtirilmesiyle elde edilen geçirgenlik-dalgaboyu ve yansırma-dalgaboyu grafikleri Şekil 4.8'de verilmektedir. Bu alıřmada delikler kaldırılarak Au film ile geçirgenlik-dalgaboyu ve yansırma-dalgaboyu grafikleri izilerek iki durumun karřılařtırılması yapılmıřtır. Sonu olarak nano delikler yokken yansırma ok iyidir. Nano delikler varken Şekil 4.8b'de elde edilen yansırma-dalgaboyu grafiđinden de grldđ gibi bir dip elde edilmiřtir. Bu dip noktası sıradıřı geçirgenliđi gstermektedir. Yaklařık 675 nm'de en kuvvetli olan rezonansların olduđu Şekil 4.8'de grlmektedir.



(a)

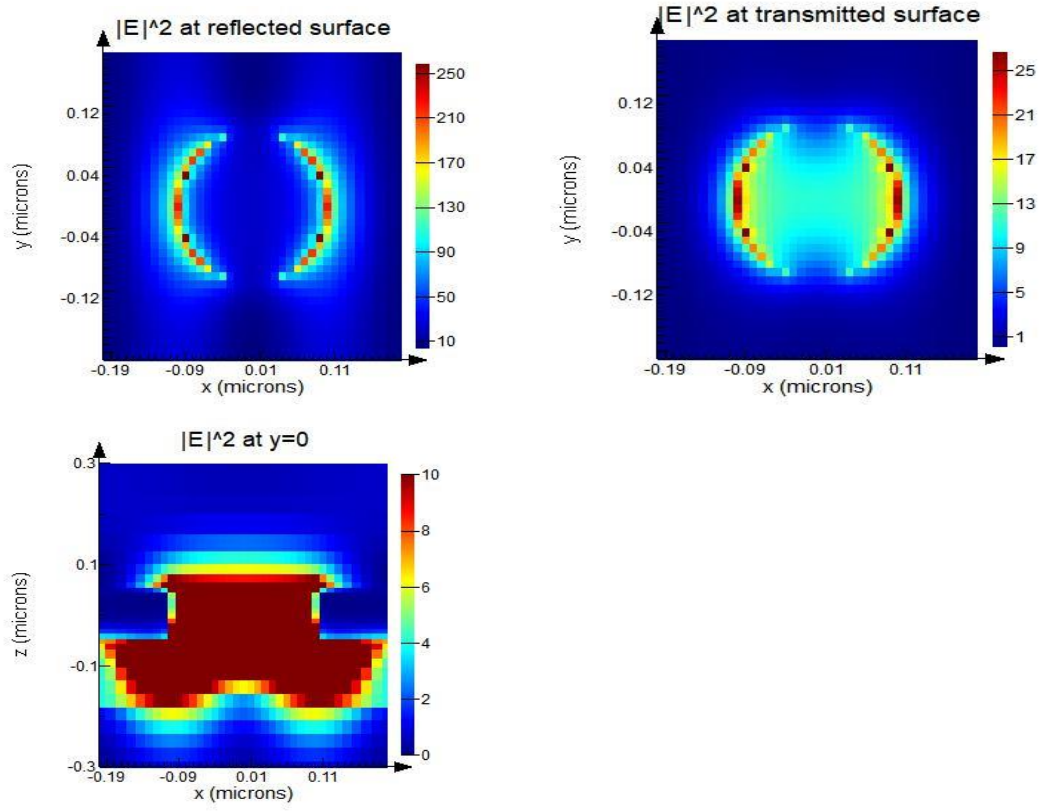


(b)

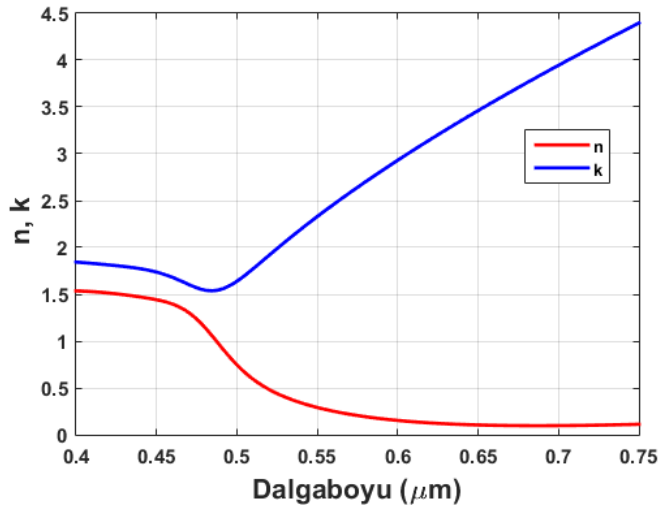
**Şekil 4.9.** a) Geçirgenlik ve yansımanın dalgaboyuna bağlı grafiği, b) Farklı hole yarıçaplarında geçirgenlik dalgaboyu grafiği

Geçirgenlik ve yansımanın aynı grafikte gösterimi Şekil 4.9a'da gösterilmektedir. Diğer taraftan yapı üzerine yerleştirilen nanodeliklerin yarıçapları değiştirilerek geçirgenlik-dalgaboyu grafiği Şekil 4.9b'de görülmektedir.





Şekil 4.10. Nano deliklerin geçirgenlik ve yansıma şiddetleri



Şekil 4.11. Kullanılan Au metalinin kırılma indisi teorik hesabı

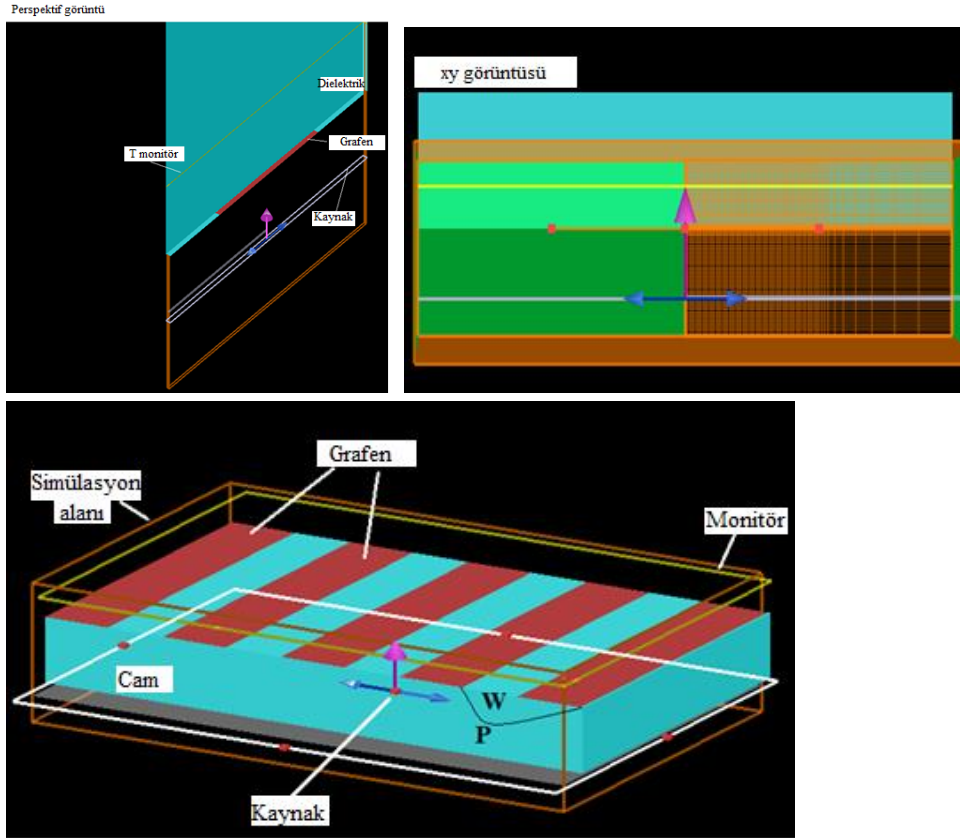
Yapılan çalışmada nano deliklerin yansıma ve geçirgenlik şiddetleri de simülasyona dâhil edilmiştir. Şekil 4.10'da sıradışı geçirgenliğin şiddeti görülmektedir.

FDTD simülasyon çalışmasında kullanılan malzemenin tüm dalga boyu aralığında istenen özelliklere sahip olduğunu doğrulamak bazen yararlı olabilmektedir. Şekil 4.11'de simülasyonda kullanılan Au malzemenin indeksini dalga boyunun bir fonksiyonu olarak göstermektedir.

#### 4.1.4. Grafen tabanlı uygulamalar

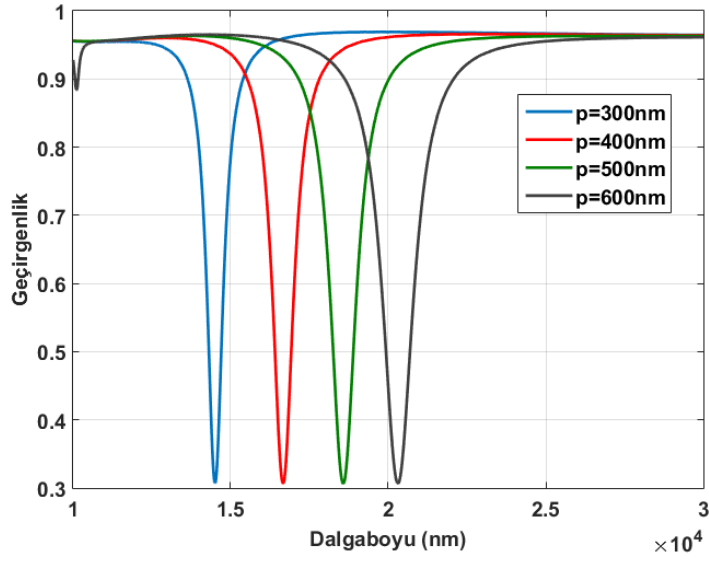
##### ✓ Grafen ızgara

THz frekans aralığında grafen ızgara yapı üzerinde çalışmalar yapılmıştır. Burada cam örneğin üzerine grafen şeritler yerleştirilmiştir. Yapılan çalışmada bazı parametreler değiştirilerek çalışmalar tamamlanmıştır. İlk olarak grafen şeritler farklı katman sayılarında ayarlanmıştır. Daha sonra grafen şeritlerin kimyasal potansiyeli değiştirilmiştir. Son olarak ise farklı yapı periyotlarında rezonans durumları araştırılmıştır. Şekil 4.12'de modellenen yapının perspektif ve  $xy$  düzlem görüntüsü verilmiştir.

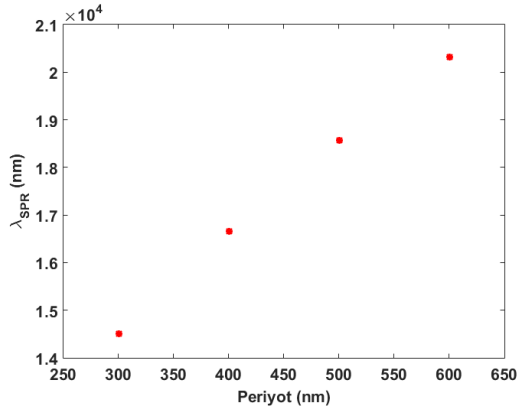


Şekil 4.12. FDTD modelleme görüntüsü

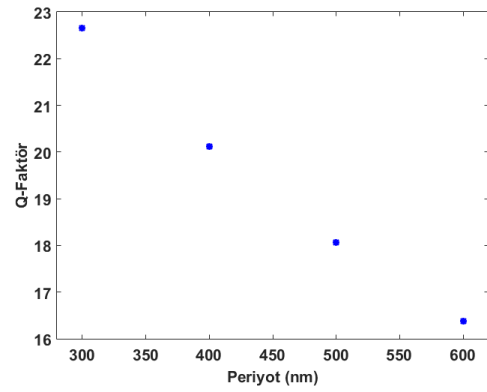
Grafenin kimyasal potansiyeli 0,3 eV alınarak, tek katman grafen şeritler ile yapının periyodu değiştirilerek geçirgenlik-dalgaboyu grafiği çizilmiştir. Burada  $W = P/2$  dir.



(a)



(b)

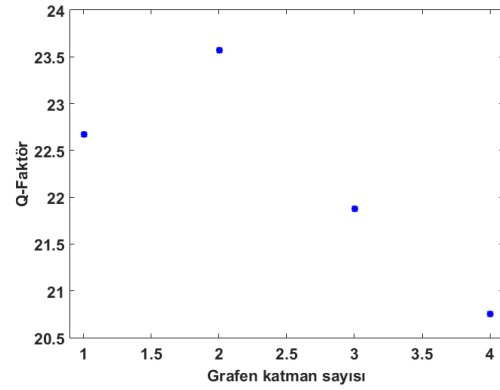
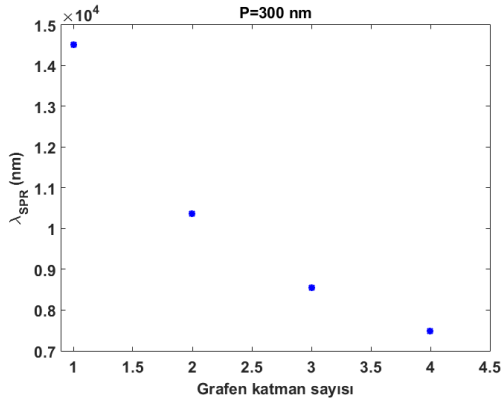
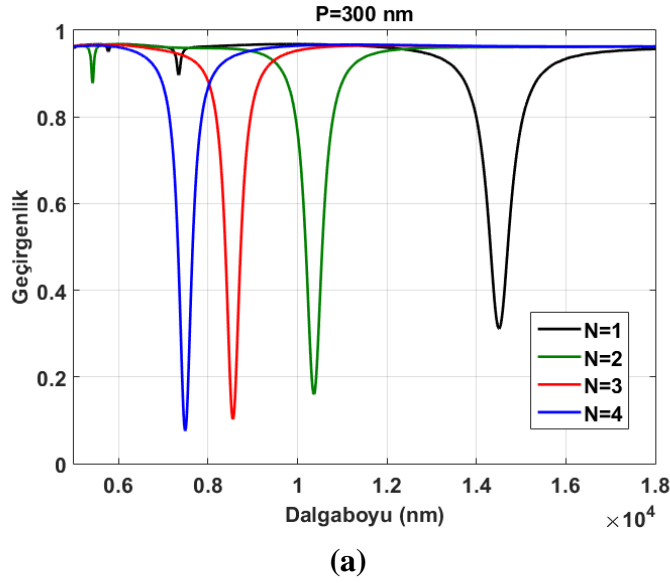


(c)

**Şekil 4.13.** a) Farklı periyotlarda geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, b) Periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalga boyu grafiği, c) Periyoda bağlı kalite faktör grafiği

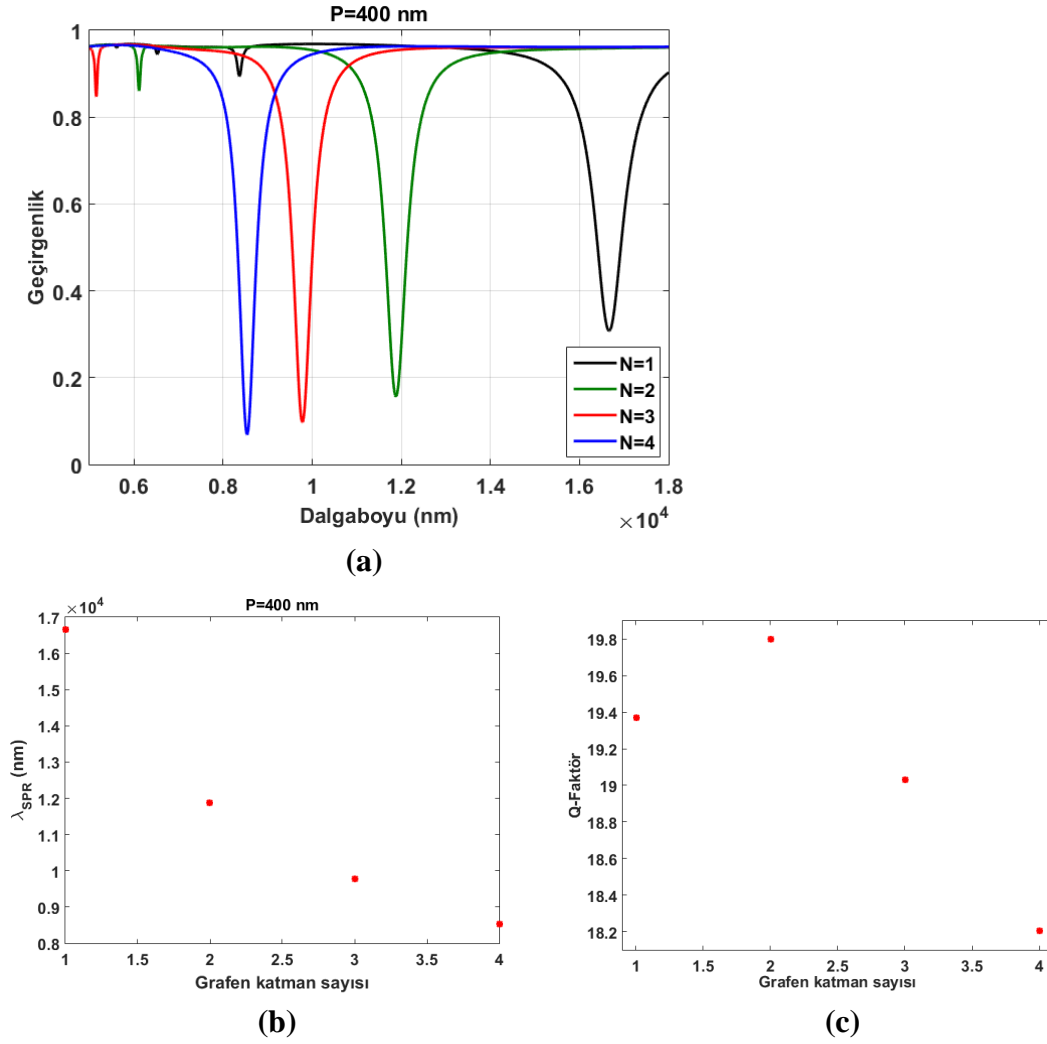
Şekil 4.13a'da görüldüğü gibi tasarlanan yapının periyodu arttırıldıkça rezonans dalga boyu sağa doğru kayma göstermektedir. 4.13b grafiğinde rezonans dalgaboylarının periyotlara bağlı grafiği çizilmiştir. Rezoanans dalgaboylarından yola çıkılarak Q-kalite faktörleri hesaplanmıştır ve Şekil 4.13c'de verilmiştir.

Tasarlanan yapının periyodu 300 nm alınarak grafen şeritlerin katman sayısı değiştirilmiştir. Şekil 4.14a'da geçirgenlik-dalgaboyu grafiğinde görüldüğü gibi grafen şeritlerin katman sayısı arttıkça rezonans dalgaboyu sola doğru kaymaktadır. Hesaplanan rezonans dalgaboylarının grafen katman sayısına bağlı grafiği Şekil 4.14b'de verilmektedir. Buradan hesaplanan kalite faktörü grafiği Şekil 4.14c'de verilmektedir.

**P=300 nm için;**

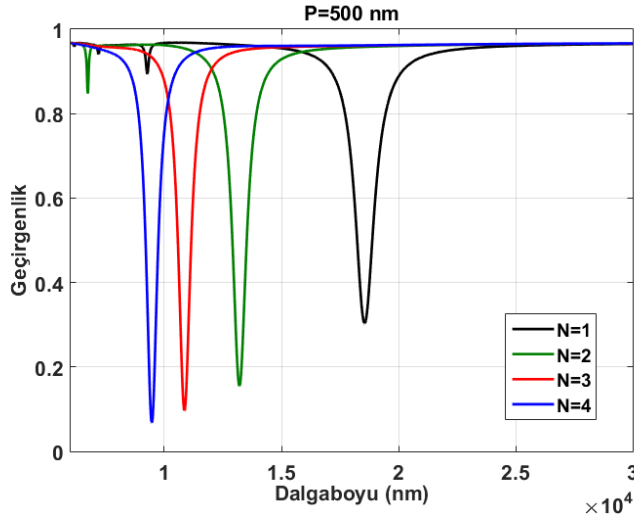
**Şekil 4.14. a)** 300 nm periyotta farklı Grafen katman sayılarında geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, **b)** Periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalga boyu grafiği, **c)** Periyoda bağlı kalite faktör grafiği

Tasarlanan yapının periyodu 400 nm alınarak grafen şeritlerin katman sayısı değiştirilmiştir. Şekil 4.15a'da geçirgenlik-dalgaboyu grafiğinde görüldüğü gibi grafen şeritlerin katman sayısı arttıkça rezonans dalgaboyu sola doğru kaymaktadır. Hesaplanan rezonans dalgaboylarının grafen katman sayısına bağlı grafiği Şekil 4.15b'de verilmektedir. Buradan hesaplanan kalite faktörü grafiği Şekil 4.15c'de verilmektedir.

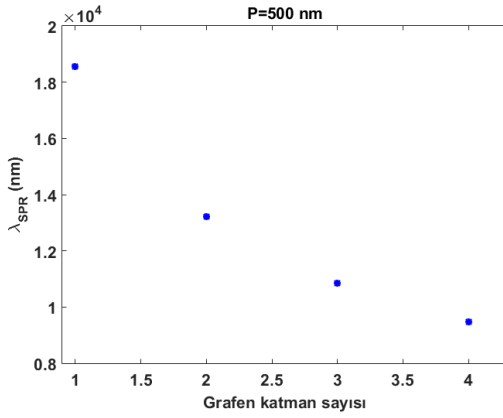
**P=400 nm için;**

**Şekil 4.15. a)** 400 nm periyotta farklı Grafen katman sayılarında geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, **b)** Periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalga boyu grafiği, **c)** Periyoda bağlı kalite faktör grafiği

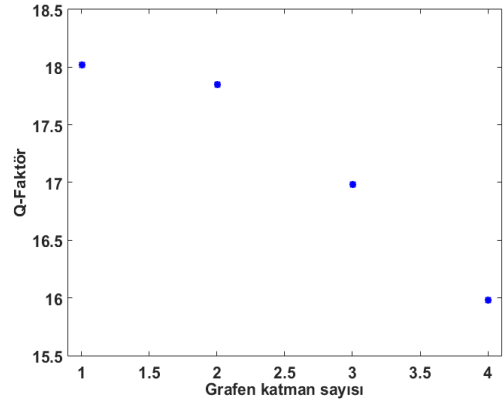
Tasarlanan yapının periyodu 500 nm alınarak grafen şeritlerin katman sayısı değiştirilmiştir. Şekil 4.16a'da geçirgenlik-dalgaboyu grafiğinde görüldüğü gibi grafen şeritlerin katman sayısı arttıkça rezonans dalgaboyu sola doğru kaymaktadır. Hesaplanan rezonans dalgaboylarının grafen katman sayısına bağlı grafiği Şekil 4.16b'de verilmektedir. Buradan hesaplanan kalite faktörü grafiği Şekil 4.16c'de verilmektedir.

**P=500 nm için;**

(a)



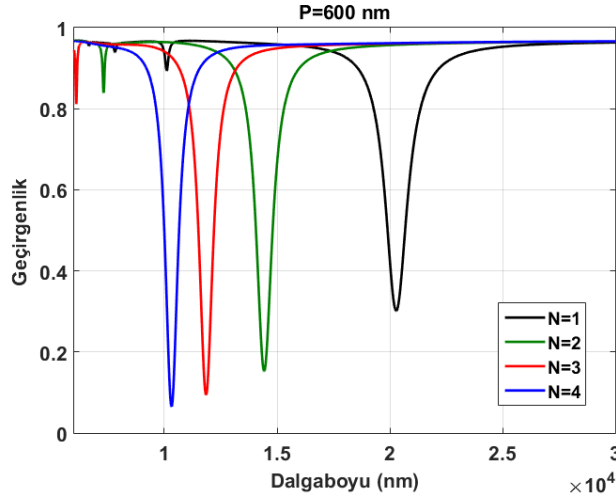
(b)



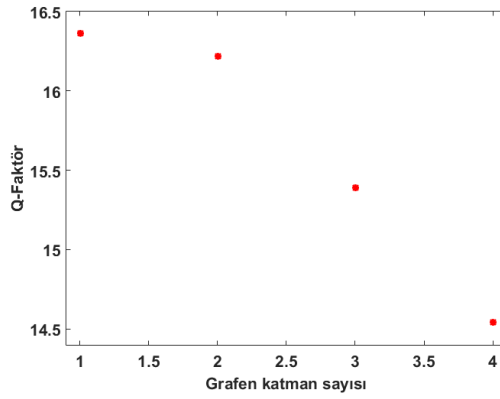
(c)

**Şekil 4.16. a)** 500 nm periyotta farklı Grafen katman sayılarında geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, **b)** Periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalga boyu grafiği, **c)** Periyoda bağlı kalite faktör grafiği

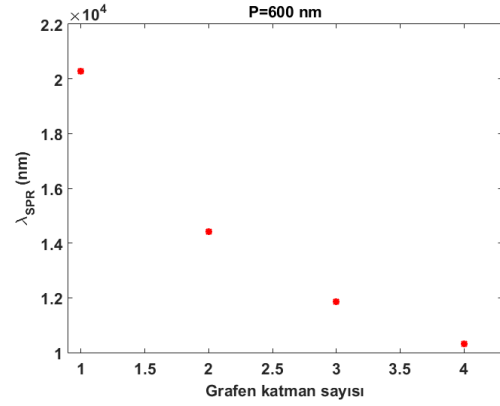
Tasarlanan yapının periyodu 600 nm alınarak grafen şeritlerin katman sayısı değiştirilmiştir. Şekil 4.17a'da geçirgenlik-dalgaboyu grafiğinde görüldüğü gibi grafen şeritlerin katman sayısı arttıkça rezonans dalgaboyu sola doğru kaymaktadır. Hesaplanan rezonans dalgaboylarının grafen katman sayısına bağlı grafiği Şekil 4.17b'de verilmektedir. Buradan hesaplanan kalite faktörü grafiği Şekil 4.17c'de verilmektedir.

**P=600 nm için;**

(a)



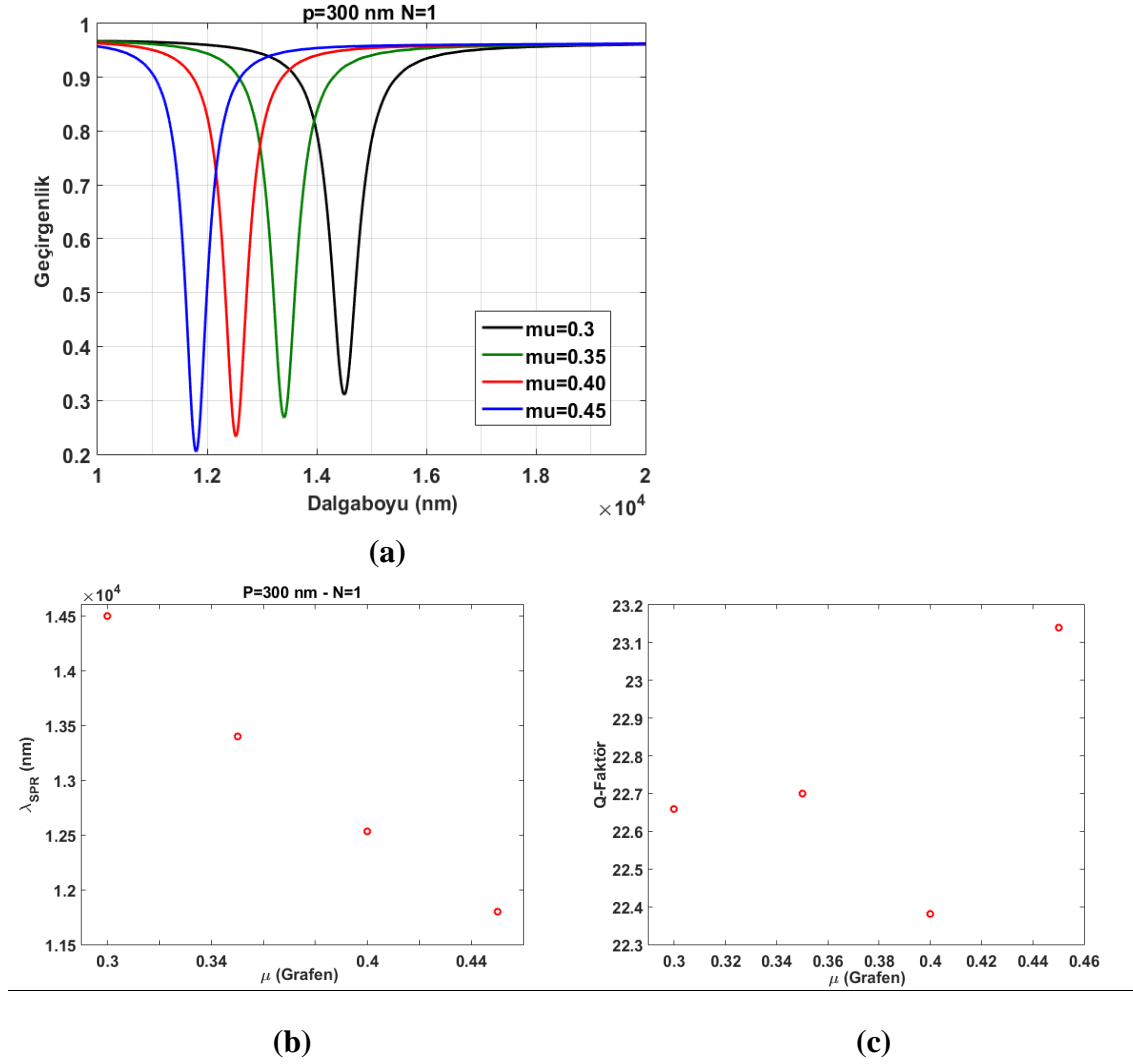
(b)



(c)

**Şekil 4.17. a)** 600 nm periyotta farklı Grafen katman sayılarında geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, **b)** Periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalga boyu grafiği, **c)** Periyoda bağlı kalite faktör grafiği

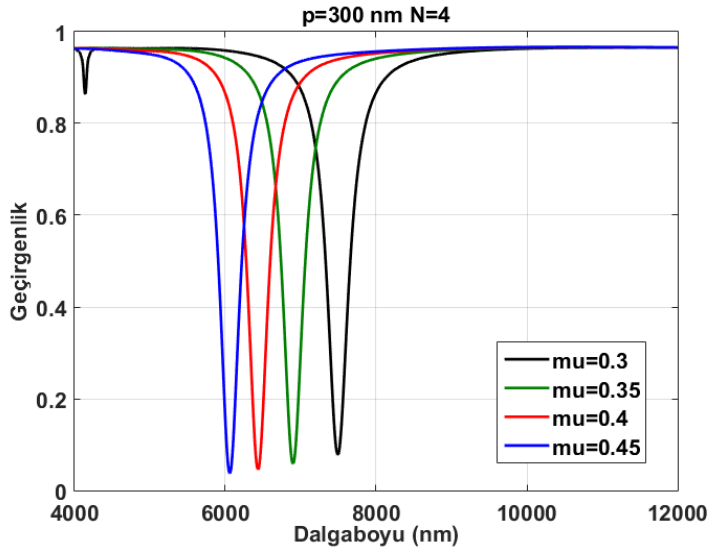
Tasarlanan yapının periyodu 300 nm ve grafen tek katman alınarak grafen şeritlerin kimyasal potansiyel değerleri değiştirilerek dalgaboyu-geçirgenlik grafiği Şekil 4.18a'da verilmektedir. Grafen şeritlerin kimyasal potansiyeli arttıkça rezonans dalgaboyu sola doğru kaymaktadır. Hesaplanan rezonans dalgaboylarının grafen kimyasal potansiyel değerlerine bağlı grafiği Şekil 4.18b'de verilmektedir. Buradan hesaplanan kalite faktörü grafiği Şekil 4.18c'de verilmektedir.

**P=300 nm, N=1 için;**

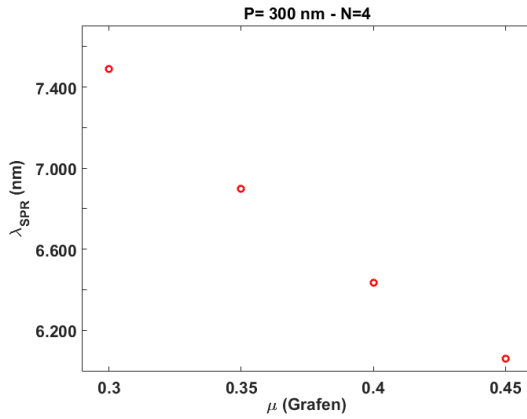
**Şekil 4.18.** a) 300 nm periyotta, tek katmanda, farklı kimyasal potansiyelerde geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, b) Periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalga boyu grafiği, c) Periyoda bağlı kalite faktör grafiği

Tasarlanan yapının periyodu 300 nm ve grafen katman sayısı  $N=4$  alınarak grafen şeritlerin kimyasal potansiyel değerleri değiştirilerek dalgaboyu-geçirgenlik grafiği Şekil 4.19a'da verilmektedir. Grafen şeritlerin kimyasal potansiyeli arttıkça rezonans dalgaboyu sola doğru kaymaktadır. Hesaplanan rezonans dalgaboylarının grafen kimyasal potansiyel değerlerine bağlı grafiği Şekil 4.19b'de verilmektedir. Buradan hesaplanan kalite faktörü grafiği Şekil 4.19c'de verilmektedir.

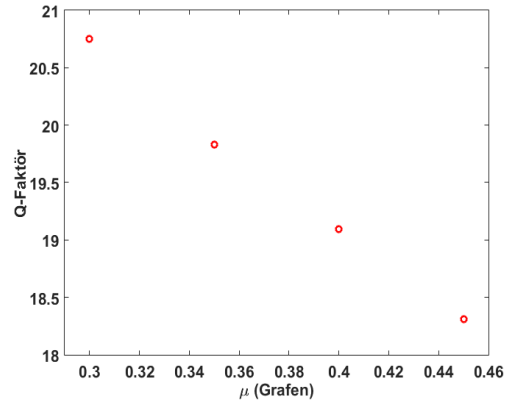


**P=300 nm, N=4 için;**

(a)



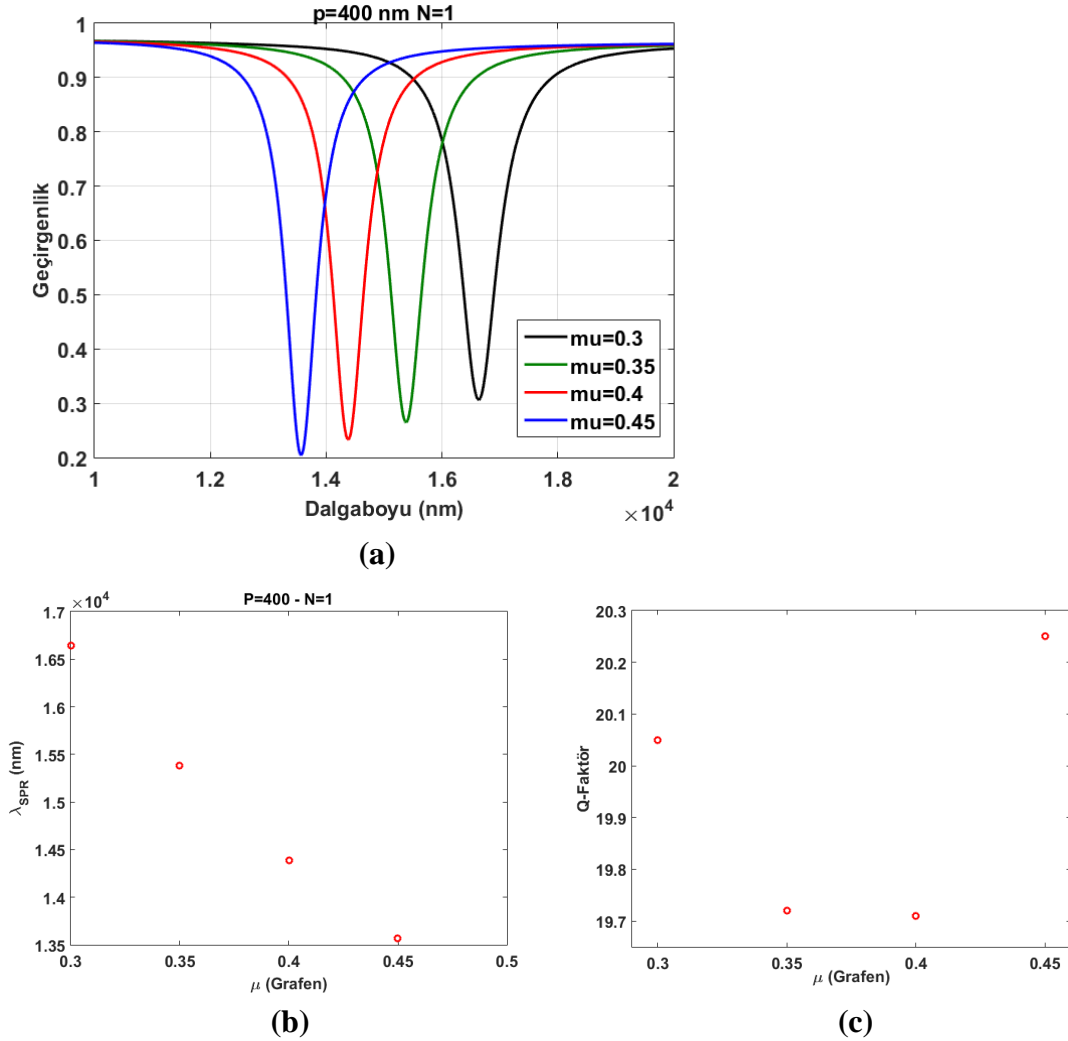
(b)



(c)

**Şekil 4.19.** a) 300 nm periyotta, 4-katmanlı grafen ile farklı kimyasal potansiyellerde geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, b) Periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalga boyu grafiği, c) Periyoda bağlı kalite faktör grafiği

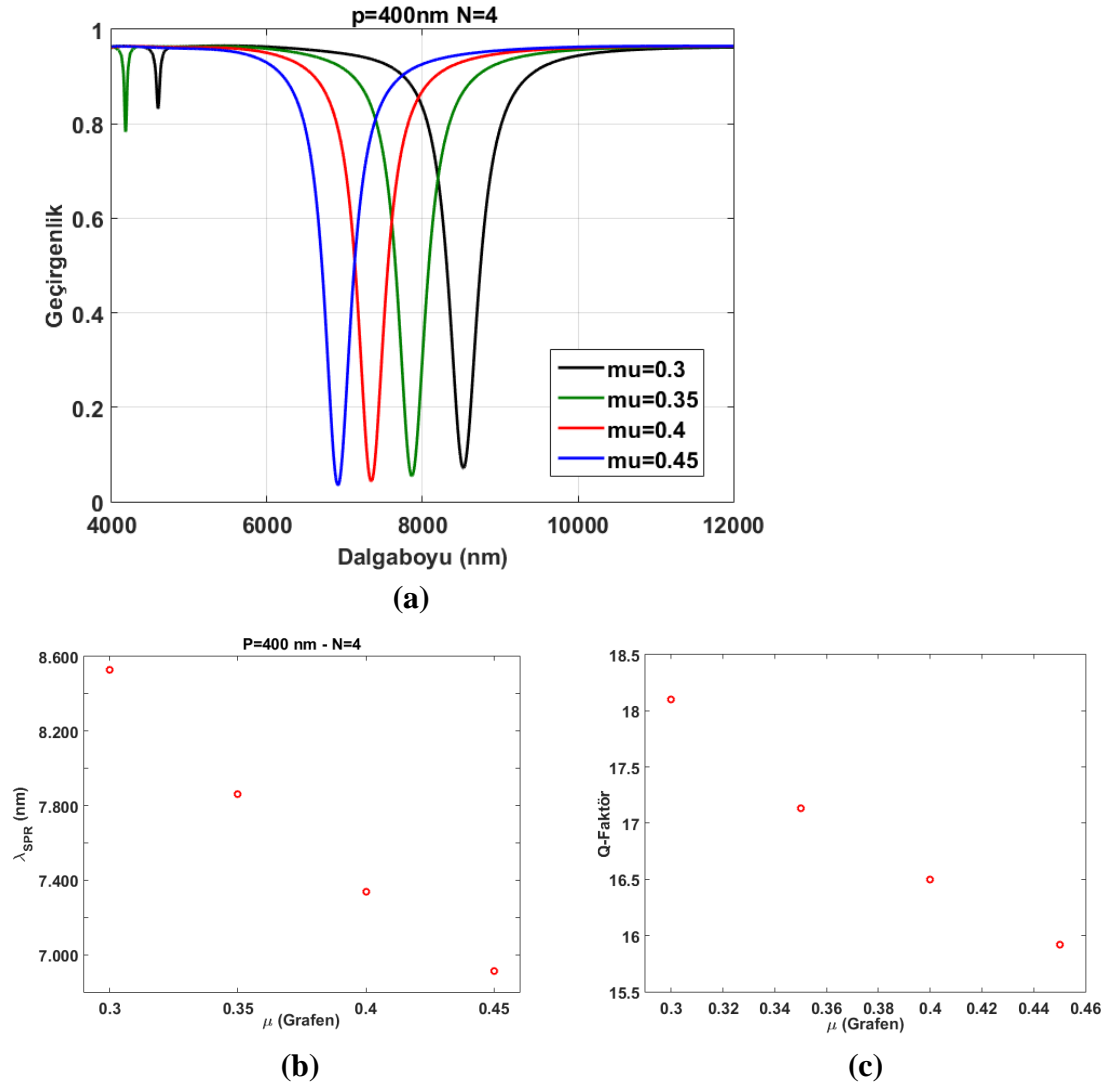
Tasarlanan yapının periyodu 400 nm ve grafen katman sayısı  $N=1$  alınarak grafen şeritlerin kimyasal potansiyel değerleri değiştirilerek dalgaboyu-geçirgenlik grafiği Şekil 4.20a'da verilmektedir. Grafen şeritlerin kimyasal potansiyeli arttıkça rezonans dalgaboyu sola doğru kaymaktadır. Hesaplanan rezonans dalgaboylarının grafen kimyasal potansiyel değerlerine bağlı grafiği Şekil 4.20b'de verilmektedir. Buradan hesaplanan kalite faktörü grafiği Şekil 4.20c'de verilmektedir.

**P=400 nm, N=1 için;**

**Şekil 4.20.** a) 400 nm periyotta, tek katmanlı grafen ile farklı kimyasal potansiyellerde geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, b) Periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalga boyu grafiği, c) Periyoda bağlı kalite faktör grafiği

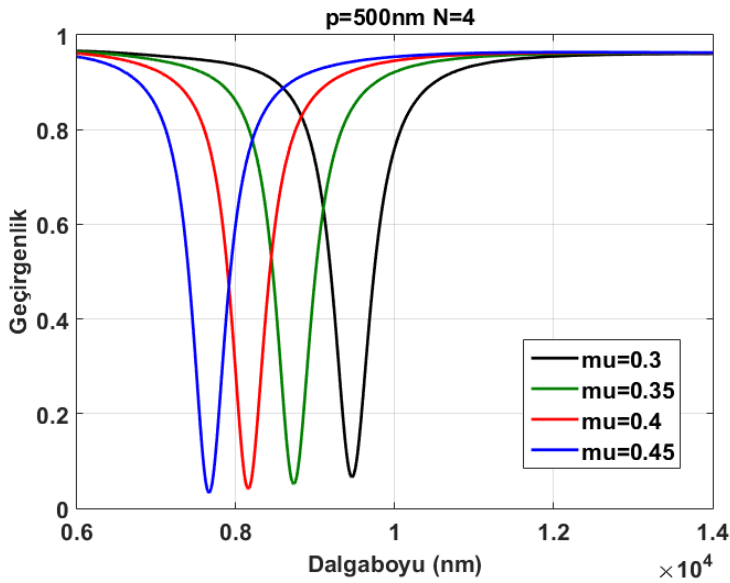
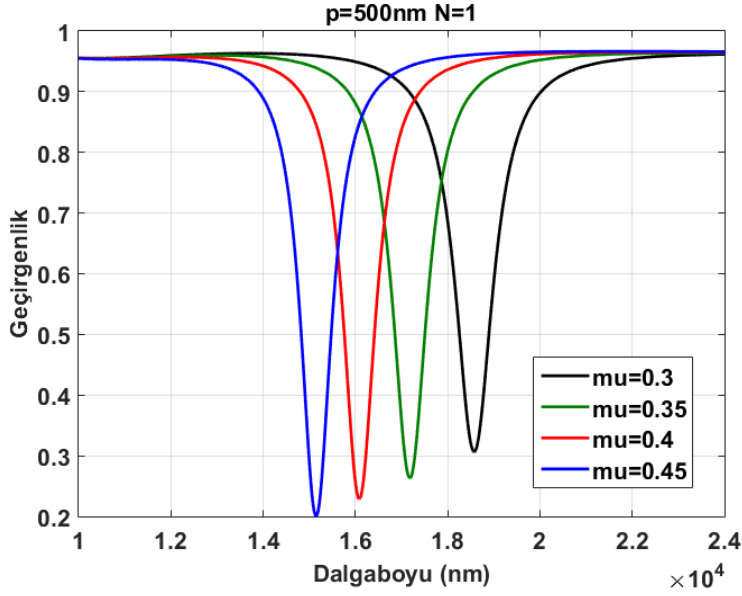
Tasarlanan yapının periyodu 400 nm ve grafen katman sayısı  $N=4$  alınarak grafen şeritlerin kimyasal potansiyel değerleri değiştirilerek dalgaboyu-geçirgenlik grafiği Şekil 4.21a'da verilmektedir. Grafen şeritlerin kimyasal potansiyeli arttıkça rezonans dalgaboyu sola doğru kaymaktadır. Hesaplanan rezonans dalgaboylarının grafen kimyasal potansiyel değerlerine bağlı grafiği Şekil 4.21b'de verilmektedir. Buradan hesaplanan kalite faktörü grafiği Şekil 4.21c'de verilmektedir.

**P=400 nm, N=4 için;**



**Şekil 4.21.** a) 400 nm periyotta, 4-katmanlı grafen ile farklı kimyasal potansiyellerde geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, b) Periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalga boyu grafiği, c) Periyoda bağlı kalite faktör grafiği

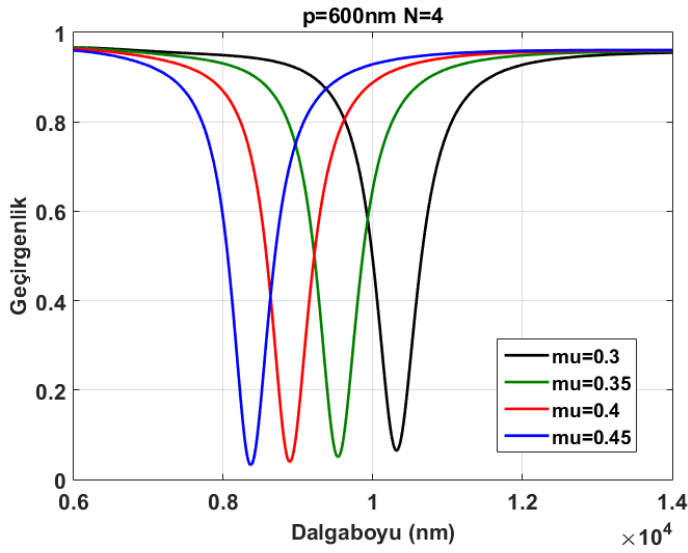
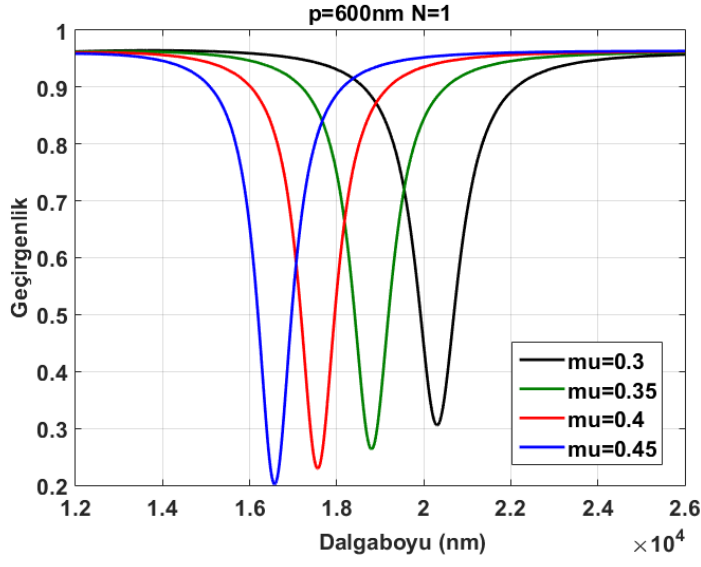
Tasarlanan yapının periyodu 500 nm ve grafen katman sayısı  $N=1$  alınarak Şekil 4.22a'da dalgaboyu-geçirgenlik grafiği görülmektedir. Grafen şeritlerin kimyasal potansiyeli arttıkça rezonans dalgaboyu sola doğru kaymaktadır. Aynı şekilde yapının periyodu 500 nm ve grafen katman sayısı  $N=4$  alınarak Şekil 4.22b'de dalgaboyu-geçirgenlik grafiği görülmektedir.

**P=500 nm için;**

**Şekil 4.22.** 500 nm periyotta, **a)** tek katmanlı grafen ile **b)** 4-katmanlı grafen ile farklı kimyasal potansiyellerde geçirgenlik-dalgaboyu grafiği

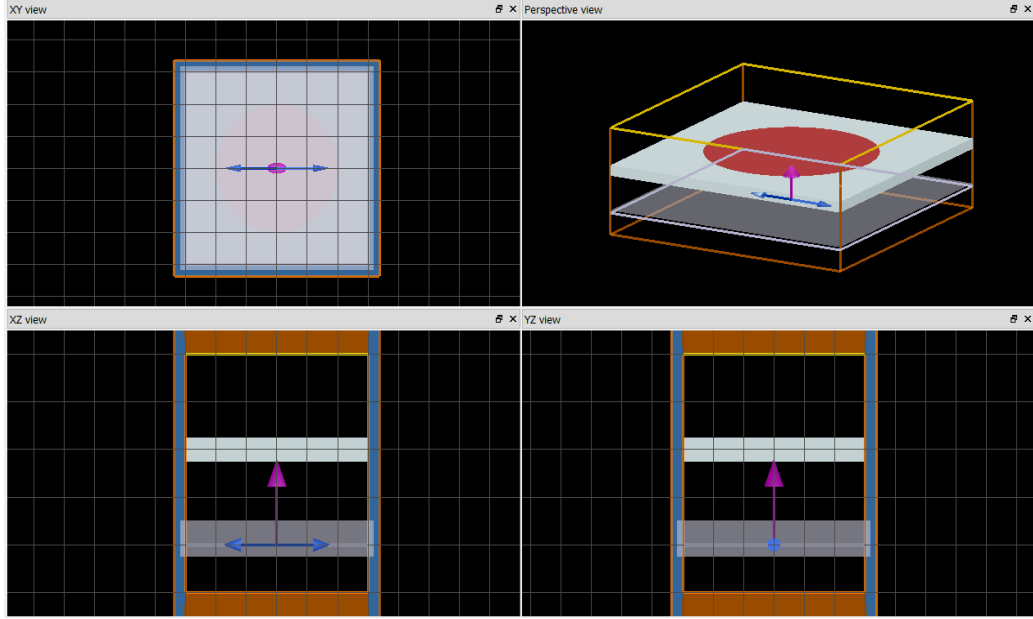
Tasarlanan yapının periyodu 600 nm ve grafen katman sayısı  $N=1$  alınarak Şekil 4.23a'da dalgaboyu-geçirgenlik grafiği görülmektedir. Grafen şeritlerin kimyasal potansiyeli arttıkça rezonans dalgaboyu sola doğru kaymaktadır. Aynı şekilde yapının periyodu 600 nm ve grafen katman sayısı  $N=4$  alınarak Şekil 4.23b'de dalgaboyu-geçirgenlik grafiği görülmektedir.

**P=600 nm için;**



**Şekil 4.23.** 600 nm periyotta, **a)** tek katmanlı grafen ile **b)** 4-katmanlı grafen ile farklı kimyasal potansiyellerde geçirgenlik-dalgaboyu grafiği

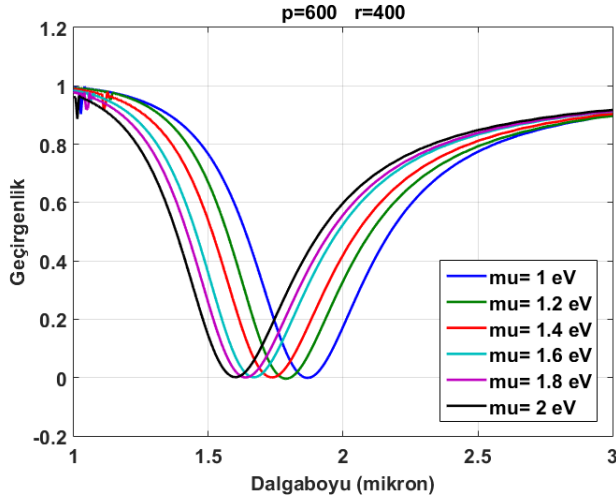
## ✓ Tek katmanlı grafen nanodisk



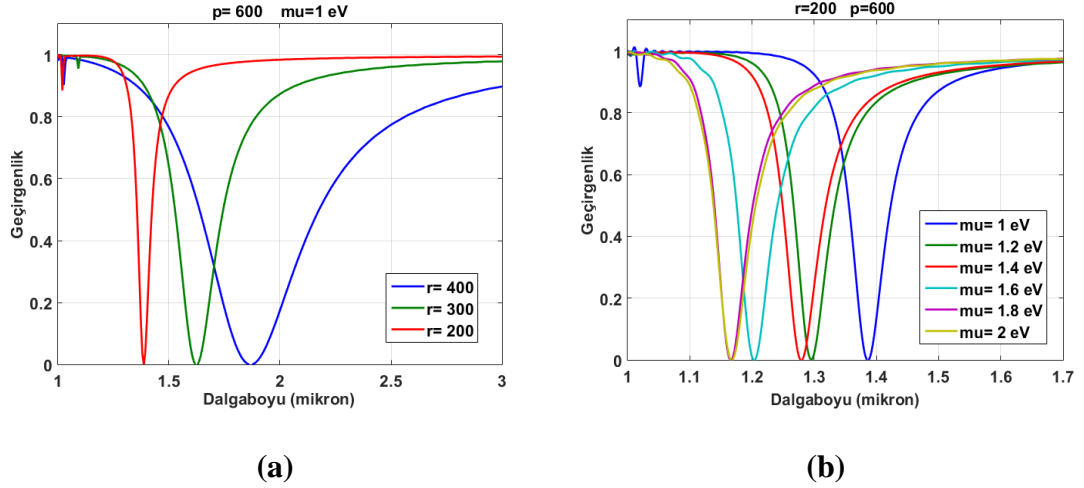
Şekil 4.24. FDTD metodu grafen nanodisk tasarımı

Şekil 4.24’de FDTD metodu için tasarlanan yapının görüntüleri verilmiştir. Bu çalışmada grafen disklerin kalınlığı 0,34 nm, yarıçap 200 nm alınmıştır. Ayrıca yapının periyodu 600 nm olarak ayarlanmıştır.

Grafen disklerin kimyasal potansiyeli 1 eV ila 2 eV arasında değiştirilerek hesaplamalar yapılmıştır. Geçirgenlik-dalgaboyu grafiği Şekil 4.25’de verilmiştir. Burada değişen kimyasal potansiyel ile rezonans noktasının kaydığı görülmektedir.



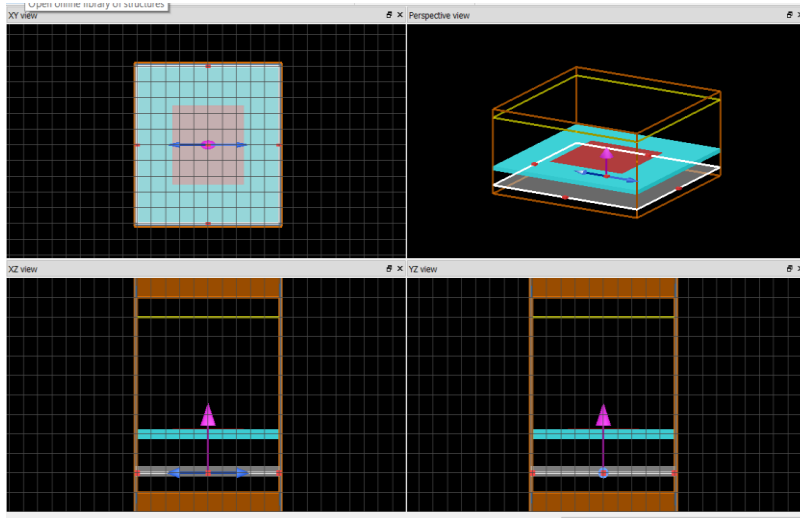
Şekil 4.25. Farklı kimyasal potansiyel değerlerinde geçirgenlik-dalgaboyu grafiği



Şekil 4.26. a) 1 eV kimyasal potansiyelde farklı yarıçaplara sahip grafen nanodisklerin ve b) 200 nm yarıçapta farklı kimyasal potansiyellerde geçirgenlik-dalgaboyu grafikleri

Daha sonra grafen disklerin çapları değiştirilerek, 600 nm yapı periyodunda, grafenin kimyasal potansiyeli 1 eV değerinde alınarak hesaplamalar yapılmıştır. Şekil 4.26a'da görüldüğü gibi grafen diskin çapı azaldıkça rezonans noktası sola doğru kaymaktadır. Ayrıca, kalite faktörü 200 nm çapta daha yüksektir. Bu sebeple 4.26b'de görülen hesaplamada, disk çapı 200 nm alınarak kimyasal potansiyel değiştirilmiştir. Kimyasal potansiyel arttıkça rezonans noktasının sola kaydığı görülmektedir.

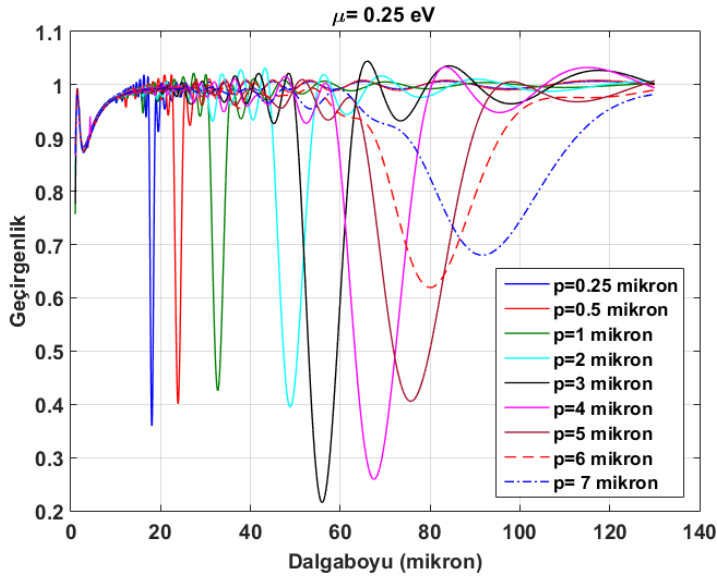
### ✓ Grafen kare disk



Şekil 4.27. FDTD metodu grafen kare disk tasarımı

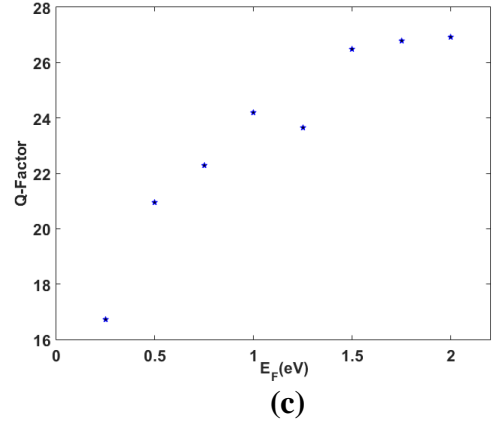
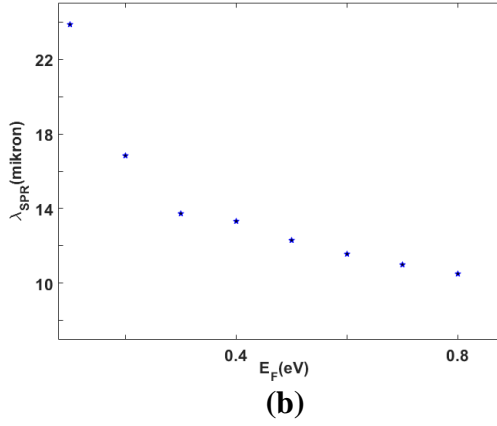
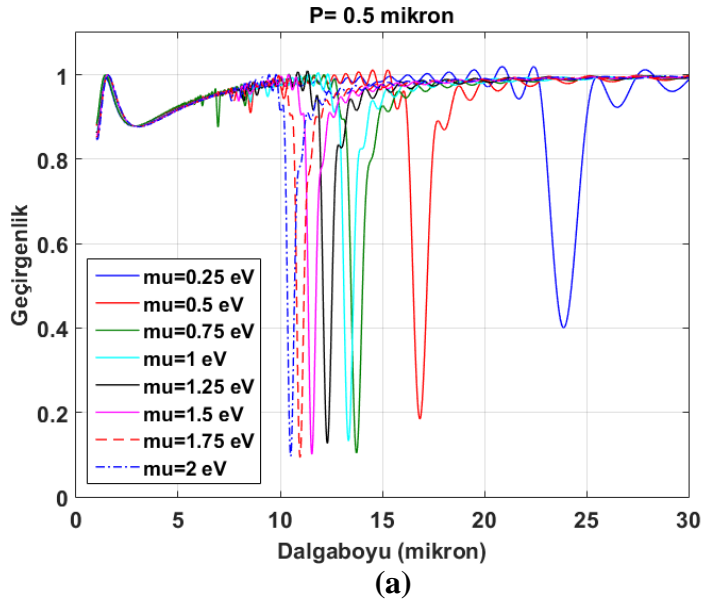
Yapılan bu çalışmada alt taban olarak 500 nm kalınlığında ve “kırılma indisi 1,45” olan örnek kullanılmıştır. Bu örnek üzerine “2-boyutta tek katman grafen” kullanılmıştır. Yapının periyodu x ve y yönü boyunca 0,25 micron ve 0,5 micron alınmıştır. Aynı zamanda yapı periyodu 1-10 micron arası 1’er micron arttırılarak hesaplamalar yapılmıştır. Çalışmanın şematik gösterimi Şekil 4.27’de verilmektedir.

İlk olarak SLG nin kimyasal potansiyeli 0,25 eV alınarak periyotlar Şekil 4.28’de verildiği şekilde değiştirilerek hesaplamalar gerçekleştirilmiştir. Yapılan hesaplamaların geçirgenlik-dalgaboyu grafiği Şekil 4.28’de verilmiştir. Sınır koşulları; x ve y yönünde periyodik, z yönünde ise PML seçilmiştir.



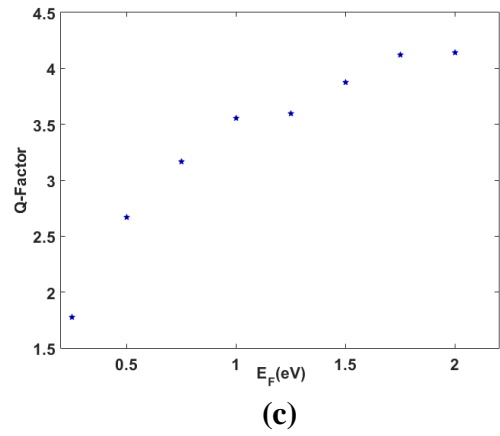
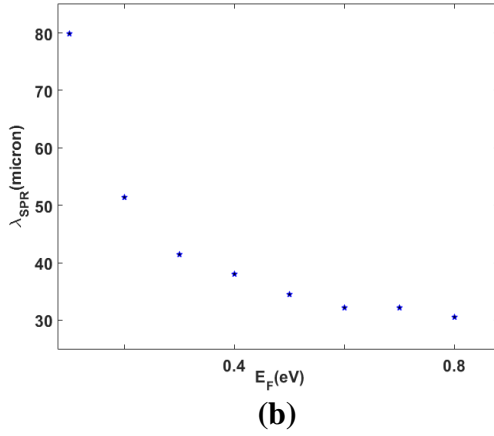
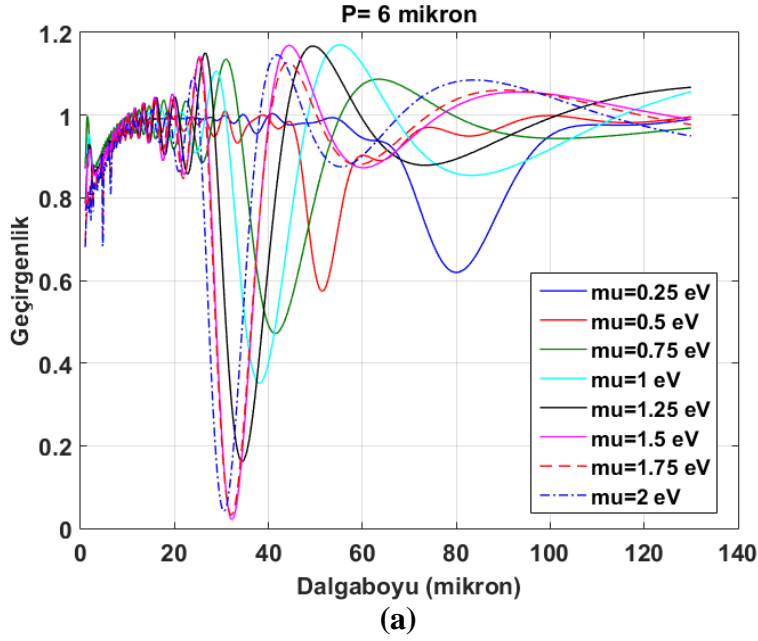
Şekil 4.28. “0,25 eV” kimyasal potansiyelde farklı periyotlarda geçirgenlik- dalgaboyu grafiği





**Şekil 4.29.** “0,5 micron” periyotta farklı kimyasal potansiyellerde **a)** geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, **b)** Periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalga boyu grafiği, **c)** Periyoda bağlı kalite faktör grafiği

Son olarak periyotları 0,5 ve 6 micron olan yapılarda, 2-boyutta SLG kimyasal potansiyel değeri 0,25 eV tan 2 eV değerine 0,25 artış ile hesaplamalar yapılmıştır. Geçirgenlik-dalgaboyu grafikleri Şekil 4.29a ve 4.30a’da verilmektedir. Yapılan hesaplamalar ile SPR dalga boyları bulunarak buradan Q-kalite faktörleri hesaplanmıştır. Şekil 4.29 ve Şekil 4.30 grafiklerinde sonuçlar görülmektedir.



**Şekil 4.30.** “6 micron” periyotta farklı kimyasal potansiyellerde **a)** geçirgenlik-dalgaboyu grafiği, **b)** Periyoda bağlı yüzey plazmon rezonans dalga boyu grafiği, **c)** Periyoda bağlı kalite faktör grafiği

## 4.2. Güneş Pilleri

Güneş pilleri, üzerlerine gelen güneş ışınlarını doğrudan elektrik enerjine çeviren cihazlardır. Fotovoltaik ilkeye dayanan çalışma mekanizmaları bulunmaktadır. Bu sebeple güneş pilleri fotovoltaik diyotlar olarak da adlandırılmaktadır. Fransız asıllı fizikçi Alexandre Edmon Becquerel 1839 yılında, elektrolit içerisine elektrotlar daldırılmış ve bunlar arasında oluşan gerilimin elektrolite gönderilen ışığa bağlı olarak değişim gösterdiğini tespit etmiştir (Prevenslik 2003). Böylece fotovoltaik olay ilk kez gözlemlenmiştir. Bu çalışmanın ardından 1876 yılında G.W. Adams ve R.E. Day ilk defa katılar üzerinde çalışmalar yaparak selenyum kristalleri üzerinde fotovoltaik olayı göstermişlerdir (Smith 1873).

Charles Fritts 1883 yılında, çok ince bir altın tabakası ile kapladığı selenyumdan (Se) % 1,1 verime sahip ilk fotovoltaik hücreyi üretmiştir. Katı maddelerdeki fotovoltaik etkiler ilerleyen yıllarda ince film yapıları olan bakır-bakır oksitte (Cu-CuO) de gözlemlenmiştir (Würfel 2005).

Fotovoltaik etki ile ilgili en kapsamlı teorik çalışma 1904 yılında Albert Einstein tarafından yapılmıştır. Albert Einstein bu çalışma ile 1921 yılında Nobel ödülünü kazanmıştır. Robert Millikan 1916 yılında Einstein'ın bu teorik çalışması üzerine çalışmalar yapmıştır. Böylece 1932 yılında Cd-Se yapısında fotovoltaik etkinin oluşturulduğu ortaya konulmuştur.

İlk silikon fotovoltaik hücre, 1954 yılında Chapin, Person ve Fuller adlı bilim insanları tarafından yapılmıştır. Bu hücre önceki fotovoltaik hücrelerden altı kat daha fazla olan % 6'lık verim ile fotovoltaik hücre teknolojisi için bir dönüm noktası olarak kabul edilmektedir (Würfel 2005).

#### 4.2.1. Güneş Pillerinin Çalışma Prensibi

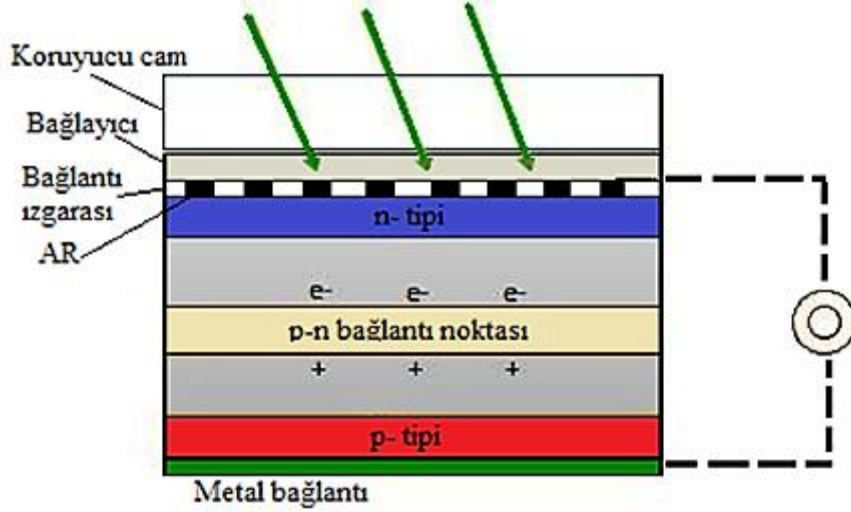
Yarı iletken maddelerin güneş pili olarak kullanılabilmesi için  $n$  ya da  $p$  tipi katkılanmaları gerekmektedir. Bir yarı iletkeninin  $n$  ya da  $p$  tipi olması katkı maddesine bağlıdır. En yaygın güneş pili maddesi olarak kullanılan silisyumdan,  $n$  tipi silisyum elde etmek için silisyuma periyodik cetvelin 5. grubundan bir element olan fosfor katkılanabilmektedir. Silisyum'un dış yörüngesinde 4 elektron, fosforun ise dış yörüngesinde 5 elektron bulunduğundan fosfor fazla olan tek elektronu kristal yapıya verir. Bu sebeple V. grup elementlerine "*verici*" veya "*n tipi*" katkı maddesi denir.  $P$  tipi silisyum elde etmek için ise 3. gruptan bir element (alüminyum, indiyum, bor) ile katkılama yapmak gerekmektedir. 3. grup elementlerinin son yörüngesinde 3 elektron bulunduğu için kristalde bir elektron eksikliği oluşur. Eksik olan elektrona hol veya boşluk denir ve pozitif yük taşıdığı varsayılır. Bu tür maddelere de "*alıcı*" veya "*p tipi*" katkı maddeleri denir.

Şekil 5.31'de görüldüğü gibi  $p$  ve  $n$  tipi yarı iletkenler bir araya getirilerek  $p-n$  eklemi oluşturmaktadır. Burada oluşan eklem de  $n$  tipindeki çoğunluk taşıyıcısı olan elektronlar,  $p$  tipi yarı iletkene doğru akım oluştururlar. Bu olay her iki tarafta da yük dengesi oluşana kadar devam eder.  $p-n$  tipi maddenin eklem bölgesinde,  $p$  bölgesi tarafında negatif,  $n$  bölgesi tarafında pozitif yük birikir. Bu eklem bölgesine "*geçiş bölgesi*" ya da "*yükten arındırılmış bölge*" denir. Yarı iletken eklemine güneş pili olarak çalışabilmesi için eklem bölgesinde fotovoltaik dönüşümün sağlanması gerekmektedir. Bu dönüşüm iki türlü gerçekleşmektedir. İlk olarak, bölgedeki elektrik alan yardımıyla birbirlerinden ayrılır, ikinci olarak eklem bölgesine ışık düşürülerek elektron-boşluk çiftleri oluşturulur. Yarı iletkenler, valans bandı ve iletkenlik bandı adında iki enerji bandından oluşur. İletim bandı ve valans bandı arasında ise yasak enerji aralığı bulunur.

Yasak enerji bant aralığı 1,4 eV ve 1,6 eV arasında olan yarı iletkenler fotovoltaik çevrime en uygun malzemelerdir. Yasak enerji aralığı 1,4 eV ve 1,6 eV aralığına eşit veya daha büyük enerjili bir foton, yarı iletken tarafından soğurulduğunda enerjisini valans banttaki bir elektrona verir ve elektronun iletkenlik bandına çıkmasını sağlar. Bu şekilde, elektron-boşluk çifti oluşur. Bu olay,  $p-n$  eklem güneş pilinin ara yüzeyinde meydana gelmiş ise elektron-boşluk çiftleri buradaki elektrik alan tarafından

birbirlerinden ayrılır. Bu şekilde güneş pili, elektronları  $n$  bölgesine, boşlukları da  $p$  bölgesine iten bir pompa gibi çalışır (Yıldırım vd 1995).

Güneş pillerinin çalışma mekanizması Şekil 4.31’de görülmektedir. Birbirlerinden ayrılan elektron-boşluk çiftleri, güneş pilinin uçlarında yararlı bir güç çıkışı oluştururlar. Bu süreç yeniden bir fotonun pil yüzeyine çarpmasıyla aynı şekilde devam eder. Yarı iletkenin iç kısımlarında da, gelen fotonlar tarafından elektron-boşluk çiftleri oluşturulmaktadır. Fakat gerekli elektrik alan olmadığı için tekrar birleşerek kaybolmaktadırlar.



Şekil 4.31. Güneş pili çalışma mekanizması

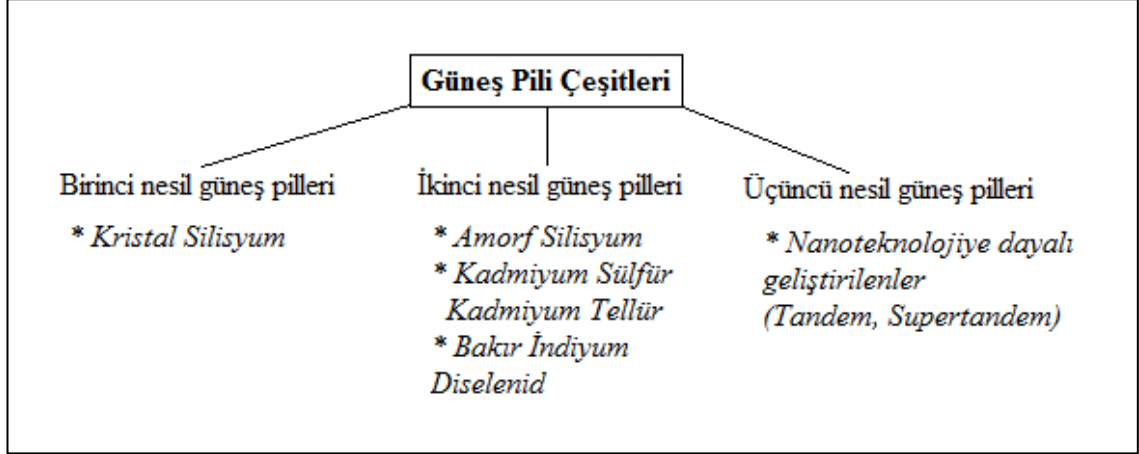
#### 4.2.2. Güneş Pillerinin Özellikleri

Yüzeylerine gelen güneş ışığını doğrudan elektrik enerjisine dönüştüren yarı iletken maddeler güneş pilleri olarak adlandırılmaktadır. Kare, daire, dikdörtgen şeklinde yüzeyler halinde şekillendirilebilen güneş pillerinin alanları  $100 \text{ cm}^2$  civarında, kalınlıkları özellikle en yaygın olan silisyum güneş pillerinde  $0,2 - 0,4 \text{ mm}$  arasında olmaktadır.

Güneş pilleri fotovoltaik ilkeye dayalı olarak çalışmaktadırlar. Güneş pillerinin uçlarında gerilim oluşması için üzerine ışık gelmesi gerekmektedir. Bu durumda elektrik gerilimi oluşmaktadır. Pillerin verdiği elektrik enerjisinin kaynağı, yüzeyine gelen güneş enerjisidir. Birçok güneş pili birbirine paralel ya da seri bağlanarak bir yüzey üzerine monte edilerek güç çıkışı artırılabilir. Bu yapıya güneş pili modülü yada fotovoltaik modül adı verilir. fotovoltaik bir dizi oluşturabilmek için de bu modüller birbirlerine seri ya da paralel bağlanabilmektedir (Karamanav 2007).

### 4.2.3. Güneş pili çeşitleri

Güneş pillerinin keşfedilmesinin ardından 1954 yılından bu yana birçok çalışma yapılmıştır. Her çalışma da bir önceki çalışmanın dezavantajlarını azaltmak ve avantajlarını arttırmak hedef alınmıştır. Bu nedenle güneş pilleri teknolojik gelişmelere bağlı olarak sınıflandırıldığı zaman Şekil 4.32'deki gibi tanımlanmaktadır (Ünlü 2017).



Şekil 4.32. Güneş pili çeşitleri şematik gösterimi

**Birinci nesil güneş pilleri:** p-n eklemının her iki tarafında da aynı cins yarı iletken yer alıyorsa bu tür güneş pilleri birinci nesil güneş pilleridir. Tek veya çok kristalli olabilmektedirler. En yaygın tercih edilen yarı iletkenler Silisyum (Si), Galyum Arsenik (GaAs) tir. Silisyumun tercih edilmesinin sebepleri üretim teknolojilerindeki ilerlemelerin yanı sıra optik ve elektrik özelliklerinin sabit tutulabilmesi olarak söylenebilmektedir (Küpeli 2005).

Birinci nesil güneş pilleri verimlilikleri yaklaşık %12- %16 arasında olmaktadır. Bu piller ticari olarak kullanılmaktadır. Ancak yüksek üretim maliyetleri ve kullanılan maddelerin insan sağlığına olan zararları nedeniyle büyük dezavantajları bulunmaktadır.

Monokristal (SiN veya c-Si) ve polikristal (mc-Si) olmak üzere iki grupta incelenebilmektedir.

#### a) Monokristal güneş pilleri

- Güneş pilleri arasında en yüksek verimliliğe sahip olan çeşittir.
- Homojen yapıya sahiplerdir.
- Verimlilikleri %15 ila %18 seviyelerinde seyretmektedir.
- Maliyetleri yüksek olmasına rağmen verimlilikleri yüksek olduğu için uzun dönemli yatırımlar için tercih edilmektedir.

**b) Polikristal güneş pilleri**

- Birçok monokristalin birleştirilmesinden oluşmaktadır. Monokristal güneş pillerinin aksine homojen yapıya sahip değillerdir.
- Verim miktarı %12 ila %15 seviyelerinde seyretmektedir.
- En çok tercih edilen güneş pilleri arasında yer almaktadır.
- Maliyeti düşüktür. Çünkü homojen bir yapıya sahip değillerdir. (Başol 2016)

**İkinci nesil güneş pilleri:** İnce film teknolojisi ile üretilen güneş pilleridir. Amorf Silisyum, Kadmiyum Tellür gibi çeşitli maddeler kullanılmaktadır. İnce film güneş pilleri istenilen yüzeyde kullanılabilir olması avantaj sağlamaktadır. %7 ila %14 arası verimlilik oranları bulunmaktadır. Bu sebepten dolayı pazar payları oldukça düşüktür.

**(a) Amorf Silisyum (a-Si)**

- Verim miktarı (%5-%8) diğer güneş pillerine oranla oldukça düşüktür.
- Üretim sürecinde yüksek maliyetli maddeler kullanılmaktadır. Buna rağmen üretim sürecinin maliyeti düşük olduğu için bu pillere tercih artmıştır.

**(b) Kadmiyum Tellür (CdTe)**

- Verim miktarı yaklaşık olarak %11 dir.
- Üretim maliyetleri düşüktür ancak yalnızca rijit cam ile birlikte kullanılabilirler.

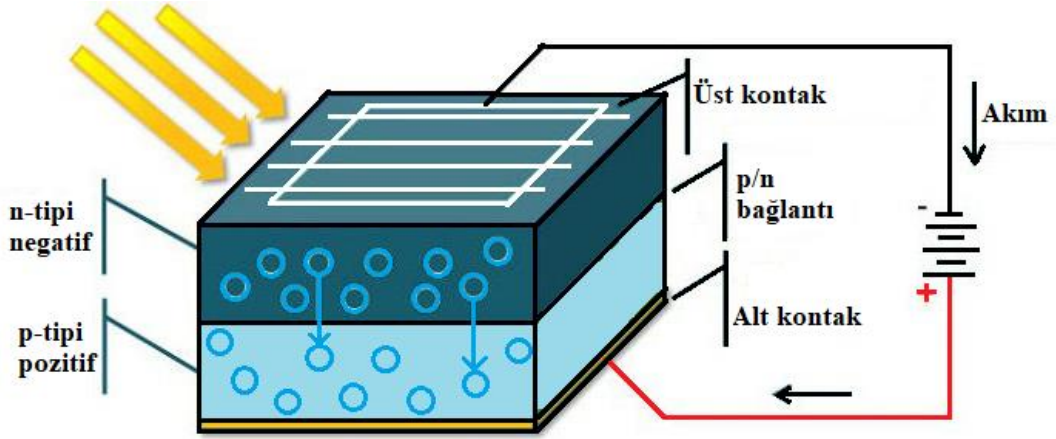
**(c) Bakır İndiyum diselenid (CIGS)**

- Son derece ince bir yapıya sahiptirler.
- Verim miktarı yaklaşık olarak %11-%14 dür.
- Düşük maliyetlidirler.

**Üçüncü nesil güneş pilleri:** Nanobilim ve nanoteknolojinin gelişimi ile birlikte, yenilenebilir enerji alanındaki çalışmalarda da ilerlemeler sağlanmıştır. Nano yapıları malzemeler güneş pillerinde de kullanılmaya başlanmıştır. Güneş enerjisi dönüşümünde  $TiO_2$  gibi nano-gözenekli malzemeler ve nano-kompozitlerin kullanımı oldukça fazladır. Bu alanda çalışmakta olan araştırmacıların birçoğu nanoteknolojideki gelişmelerin güneş pillerine uygulanmasının çok faydalı olacağını düşünmektedir. (Badawy 2015).

Yarıiletken nanoyapılar kolaylıkla sentez edilmeleri, ayarlanabilir ışık emilimlerinin olması, dağınık ışıklara duyarlılıkları ve farklı şekillerde, esnek güneş pillerinde kullanılabilir olmalarından dolayı oldukça popüler malzemelerdir (Kamat 2013).

#### 4.2.4. Güneş pili uygulamalar



Şekil 4.33. Güneş pili çalışma prensibi

Plazmonik güneş pilleri, plazmonları kullanarak ışığı elektrığe çeviren cihazlar olarak tanımlanmaktadır. Kalınlıkları bir iki mikrometre kalınlığında olmaktadır. Plazmonik güneş pillerinde alt taban olarak cam, plastik veya çelik gibi maliyeti silikondan düşük olan malzemeler kullanılmaktadır. Bu piller diğer tip güneş pillerine kıyasla ışığı çok fazla soğuramamaktadır. Plazmonik güneş pilleri ışığı yakalamak için önemli metotlara sahiptir. Bu tip güneş pilleri ince film güneş pillerinin geliştirilmesi için kullanılmaktadırlar. Kullanılan metal nano parçacıklar sayesinde plazmon rezonans meydana getirerek soğurma gücünü arttırmaktadırlar. Bu sayede çok katmanlı diğer tür güneş pillerinin yaptığını sadece metal nano parçacıklar ile gerçekleştirmektedirler (Anonim 1). İnce film güneş pilleri, azaltılmış malzeme maliyetlerinin avantajını sunar, ancak emici tabakalar incelendiğinde, iletim kayıpları artar ve hücre performansını azaltır. Absorbsiyona katkıda bulunmak amacı ile aktif tabaka içindeki ışığı sınırlamak için kullanılabilen ışık yakalama, yüksek verim elde etmek için daha da önemli hale gelmektedir. Örneğin yaklaşık 50 nm yarıçaplı Ag nanopartiküller yüksek dağılma verimliliği seçilebilir ve SPR yerel dielektrik ortamı optimize ederek istenen spektral aralığa ayarlanır (Beck 2009).

Herhangi bir sistemin uzun süreli sürdürülebilir olması için ekonomik olarak uygulanabilir ve yüksek verimli olması gerekmektedir. Standart bir silikon güneş hücresinde bant aralığı yaklaşık olarak 1,8 eV değerindedir. Burada güneş ışımalarının % 50'den fazlası hücre tarafından kullanılmamaktadır (Anonim 2). İnce film güneş pilleri, fotovoltaiklerin maliyetini önemli ölçüde azaltma potansiyeline sahiptir. Bununla birlikte, ışık emilimini arttırmak, yani dönüşüm verimliliğini arttırmak için güneş hücresindeki ışığı yakalamak çok önemlidir. Bu amaçla, dokulu yüzey ve yüzeyde nano parçacık birikmesi gibi nano boyutlu yapılar önerilmiştir (Anonim 3).

Mie teorisi simülasyonlarında çalışmalar yapılırken, gelen ışının dalgaboyu küresel nanoparçacığın çapından küçük yahut eşit olması gerekmesine rağmen genellikle çeşitli şekillerde plazmonik nanoparçacıkların davranışına dair kaba bir gösterge almak için kullanılırlar.  $\lambda$  dalgaboyuna sahip gelen ışığın metal nanoparçacık ile etkileşime girmesi metalde elektron salınımlarının rezonans uyarılması nedeniyle

sönme davranışı gözlenir. Sönümlenme davranışı nanoparçacıkların büyüklük ve şekil değişikliklerine bağlı olarak saçılma ve soğurma kesitlerinin birleşimidir. MNP (metal nanoparçacık) kompleks dielektrik sabitine sahiptir. Geçirgenliğin reel kısmı, bir malzemenin harici bir elektrik alanı tarafından ne kadar güçlü bir şekilde polarize edildiğini açıklar. İmajiner kısım, polarizasyon ve omik kayıplardan dolayı malzemedeki kayıpları tanımlar (Radder 2018).

Güneş pilleri üzerine veya içine yerleştirilmiş metal nano parçacıklar tarafından foto-akım geliştirmeyi açıklamak için ışık saçılımı ve ışığın yakın alan konsantrasyonu olarak iki ana temel mekanizma önerilmektedir. Her mekanizmanın katkısı, büyük ölçüde parçacık boyutuna, yarı iletkenin ne kadar güçlü emdiğine ve güneş pilinin elektriksel tasarımına bağlıdır.

- **Metal parçacıklar tarafından ışık saçılması**

Metal nanoparçacıklar, plazmon rezonansının yakınında dalga boylarında güçlü ışık saçılması yapmaktadırlar. Bu olay metaldeki iletken elektronların kollektif salınımindan kaynaklanmaktadır. Işığın dalga boyunun çok altında çaplara sahip parçacıklar için, bir nokta dipol modeli, ışığın emilimini ve saçılmasını açıklamaktadır. Saçılma ve soğurma kesitleri bağıntı (4.11) de verilmektedir.

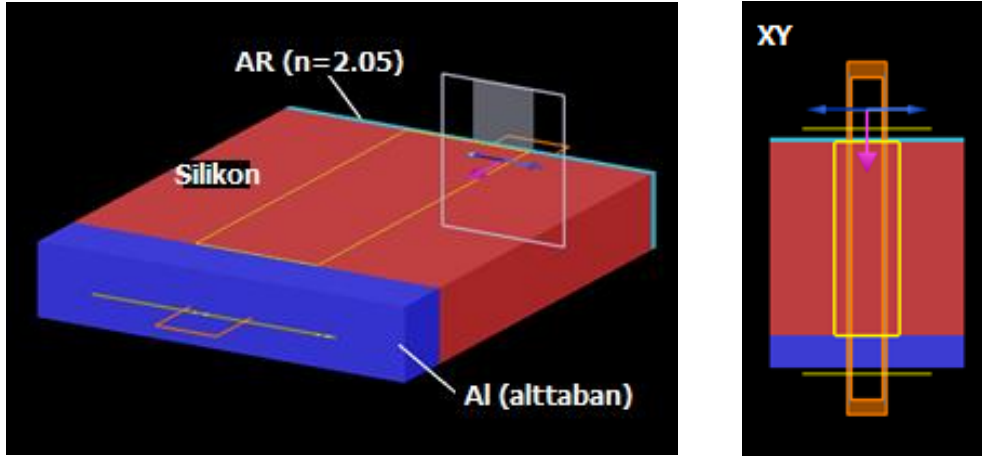
$$c_{scat} = \frac{1}{6\pi} \left( \frac{2\pi}{\lambda} \right)^4 |\alpha|^2, \quad c_{abs} = \frac{2\pi}{\lambda} \text{Im}[\alpha] \quad (4.11)$$

$$\alpha = 3V \left[ \frac{\varepsilon_p/\varepsilon_m - 1}{\varepsilon_p/\varepsilon_m + 2} \right] \quad (4.12)$$

$\alpha$ , parçacığın polarize edebilirliği (4.12) bağıntısı ile verilmektedir. Burada  $V$  parçacık hacmi,  $\varepsilon_p$  parçacığın dielektrik fonksiyonu,  $\varepsilon_m$  ortamının dielektrik fonksiyonudur.  $\varepsilon_p = -2\varepsilon_m$  olduğu zaman parçacığın polarize özelliği çok büyük olacaktır. Bu durum yüzey plazmon rezonans olarak bilinmektedir (Catchpole 2008).



✓ **Düzlemsel güneş pili uygulaması**



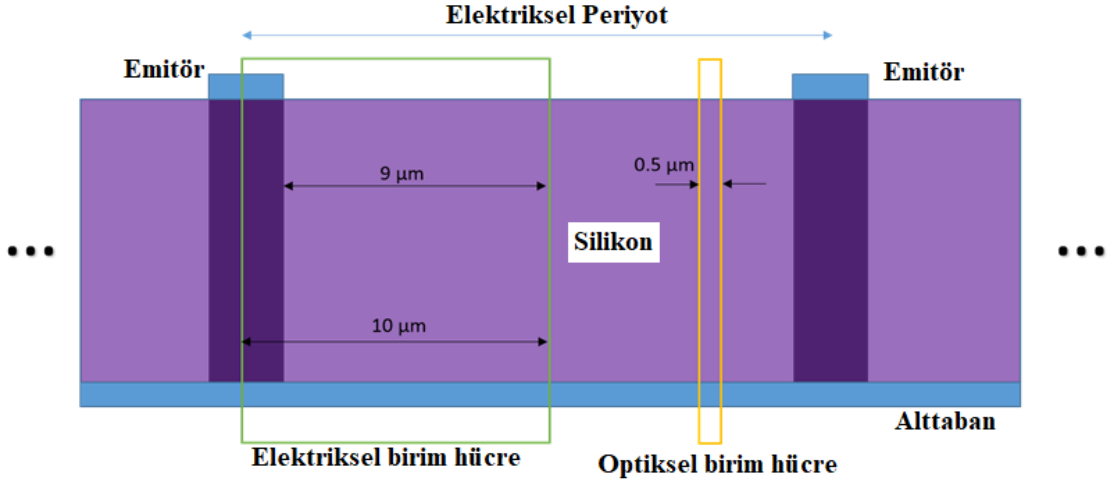
**Şekil 4.34.** FDTD yönteminde düzlemsel güneş pili tasarımı

Düzlemsel güneş pili simülasyon çalışmasında z yönünde değişim olmadığı için 2-boyutta xy düzleminde kurulmuştur. İdeal olarak, güneş pilinin periyodik yapısı kullanılabilmekte ve x ekseninde boyunca periyodik sınır koşullarını kullanan yapının bir elektrik periyodu (iki kontak arasındaki mesafe, 20 mikron) Şekil 4.34’de görüldüğü gibi simüle edilebilmektedir. Bununla birlikte, ilk yaklaşım olarak, kontaktların çevreleyen alanlarındaki etkisi (örneğin; gölgeleme efekti) ihmal edilebilmektedir ve güneş pilinin çok daha küçük bir genişliği (bu örnekte, 0,5 mikron) simüle edilebilmektedir. Daha sonra periyodik sınır koşulları kullanılarak tüm yapı için hesaplama yapılabilmektedir. Burada periyodik sınır koşulları kullanılmıştır. Ayrıca, ek bir yansımaya önleyici (AR) kaplamanın etkisi de incelenmiştir.

Bu çalışmada simülasyon bölgesinin alt sınırı metal tabanın altına yerleştirilmiştir. Bunun amacı, metal tabakanın altına bir monitör yerleştirmek ve güneş pili boyunca iletilen ışık miktarını kontrol edebilmektir. Normal şartlarda, alt sınırı metalin içine yerleştirilerek simülasyonu daha hızlı yapmak için metal sınır koşullarını uygulamak öncelikli tercih olmaktadır. Düzlem dalga kaynağı 300 nm ile 1100 nm dalga boyu aralığında ayarlanmıştır. Bu, silikonun güneş ışığını emdiği kullanışlı dalga boyu aralığıdır. Sistem lineer olduğundan sonuçlar güneş spektrumu ile çarpılır.

Daha önce belirtildiği gibi, x ekseninde boyunca sınır koşulu, güneş pilinin küçük bir bölümünün simüle edilebileceği şekilde periyodik olarak seçilmiştir. y ekseninde için, simülasyon sınırlarından istenmeyen yansımaları önlemek için PML sınır koşulu kullanılmıştır.

Bununla birlikte, elektriksel simülasyon için “Device programı” kullanılmıştır. Bunun için elektrik temasların simülasyon bölgesine dahil edilmesi gerekmektedir. Bu nedenle elektrik periyodunun yarısını, yani 10 mikron (elektrik temasının ortasından silikonun ortasına kadar) simüle edilmiştir. Bu 0,5 mikron genişliğinde (x ekseninde) optik simülasyondan elde edilen üretim hızının tüm elektriksel simülasyon bölgesini kapsayacak şekilde kopyalanması gerektiği anlamına gelmektedir.

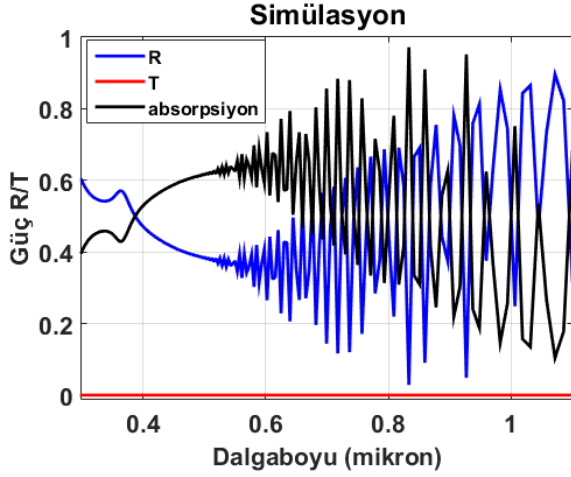


**Şekil 4.35.** Optiksel ve elektriksel birim hücre

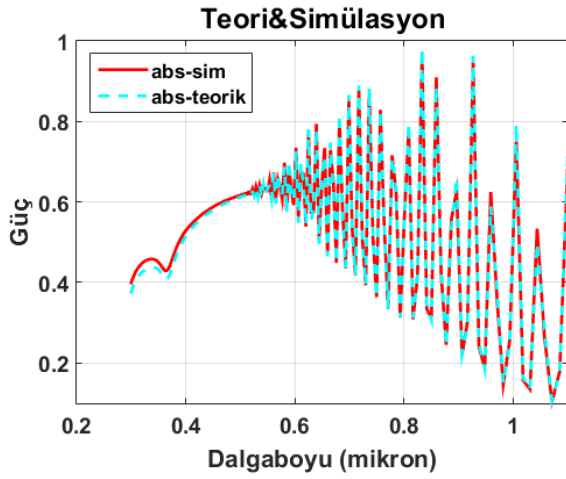
#### *Geçirgenlik ve yansıma*

İlk olarak, silikon levhanın üstünde ve altında bulunan monitörler tarafından hesaplanan veriler kullanılarak silikon levhanın yansıması, iletimi ve soğurması şekil 4.36a’da verilmektedir. Ayrıca alttaki metal teması nedeniyle iletim değerinin sıfır olduğuna dikkat edilmelidir. Şekil 4.36b simülasyon sonuçlarının teori ile uyduğuna göstermektedir.

Şekil 5.35’te görülmekte olan dalgalanmalar Fabry-Perot etkisinden kaynaklanan rezonanslardır. Grafiklerin çözünürlüğünün kısa dalga boylarında daha iyi olduğuna dikkat etmek gerekmektedir. Bunun nedeni, zaman alanı sonuçlarının Fourier dönüşümünü hesaplarken, FDTD’nin düzgün bir frekans aralığı kullanmasıdır.



(a)

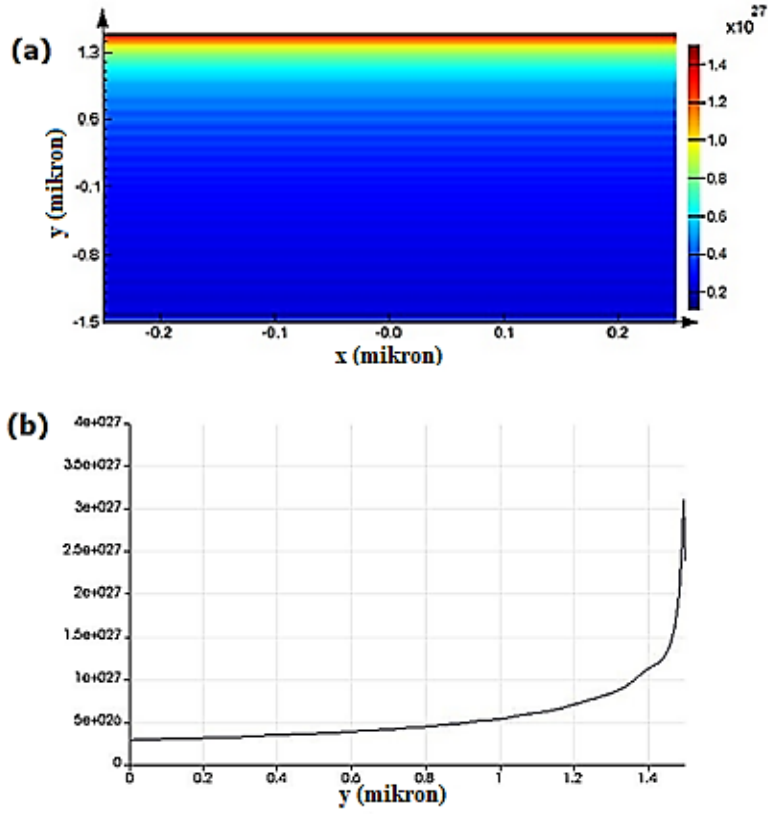


(b)

**Şekil 4.36. a)** Silikon levhanın yansıma, geçirgenlik ve absorpsiyon değerlerinin dalga boyuna bağlı grafiği, **b)** absorpsiyon değerinin teorik hesaplama ile simülasyon karşılaştırması

### Üretim Oranı

Şekil 4.37a'da yer verildiği gibi absorpsiyon olayını gerçekleştiren fotonların (elektron delik çiftleri) nerede yoğunlaştığını gösterir. Ayrıca, y eksenini boyunca üretim oranının bir çizgi grafiği yapmayı da seçebiliriz. Şekil 4.37b'deki grafikten görülebileceği gibi, soğurma silikon filmin üst yüzeyinde yüksektir ve daha sonra filme derinlemesine giderken üssel olarak düşer. Bu, foto üretilen elektron deliği çiftinin sayısındaki düşüş, güneş ışığının silikon filmi boyunca ilerlediği için optik sinyalin emiliminden kaynaklanmaktadır.



**Şekil 4.37. a)** Elektron-delik çiftlerinin nerede yoğunlaştığını gösteren simülasyon, **b)** Absorpsiyonun y eksenı boyunca yoğunlaşma miktarı

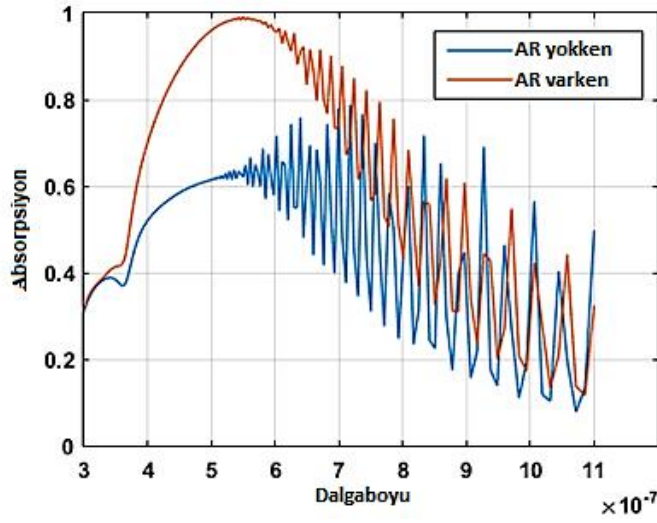
#### *Kısa devre akımı*

Analiz grubu ayrıca ideal kısa devre akım yoğunluğunu hesaplamaktadır. Bu, foton üretilen elektron deliđi çiftlerinin hepsinin gerçek fotoakımına katkıda bulunduđu varsayımı altında hesaplanmaktadır.

Kısa devre akımının sonucu;  $J_{SC} = 200 \text{ A/m}^2$

#### *Sođrulan güç ( $P_{abs}$ )*

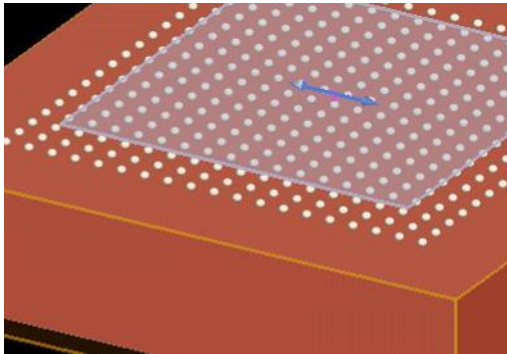
Sođurma miktarını arttırmak için, ön yüzeydeki yansıma önleyici kaplama tabakası kullanılabilir. Örneđin, ortalama kırılma indeksi 2,05 olan  $\text{Si}_3\text{N}_4$  kullanılarak, Şekil 4.38'den anlaşılacağı gibi, daha kısa dalga boyu bölgesinde absorpsiyon önemli ölçüde geliştirilebilir.



**Şekil 4.38.** Absorpsiyonu artırmak için kullanılan malzeme varken ve yokken kıyaslaması

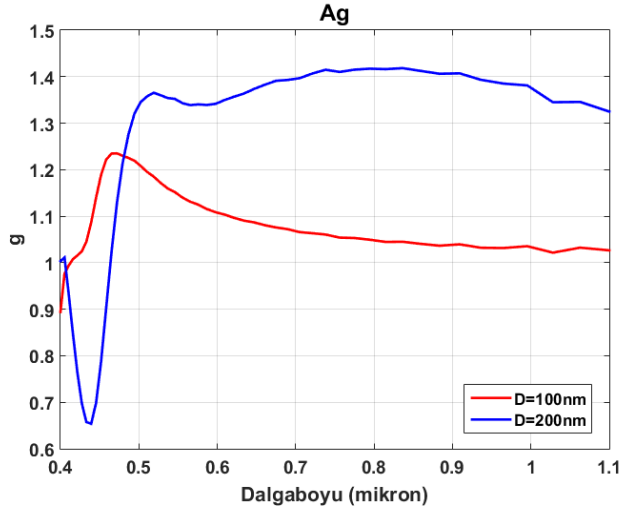
#### ✓ Metal nanoparçacıklı güneş pili uygulaması

Bu örnekte, Şekil 4.39’da gösterildiği gibi yüzeyinde dağılmış nano boyutlu metal (gümüş veya altın) parçacıkları olan n / p eklemli silikon ince film güneş pili tasarımı gösterilmiştir. FDTD çözümleri kullanılarak ışık emiliminin nasıl simüle edileceğini açıklanmıştır. Parçacıkların periyodik olarak lokalize durumu Şekil 4.39’da görülmektedir.

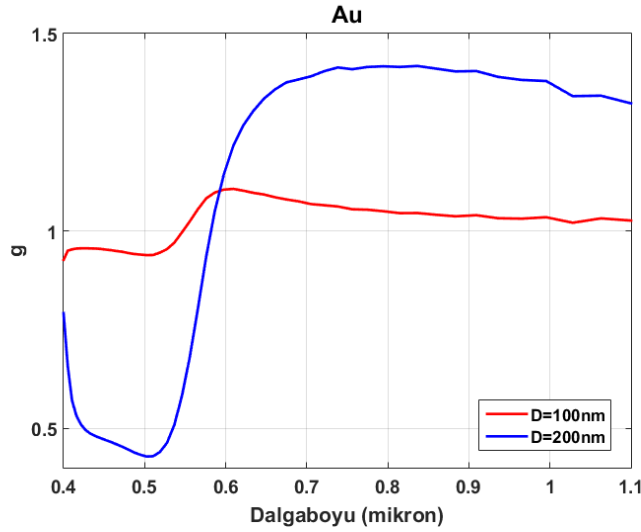


**Şekil 4.39.** FDTD metodu ile tasarlanan periyodik nano parçacıklı güneş pili

Şekil 4.39, yapının periyodunun 400 nm olmasını sabitleyen  $D = 100$  nm ve  $D = 200$  nm çaplı nano parçacıklar için soğurma artırma  $g(\lambda)$  sonuçlarını göstermektedir. Hem altın hem de gümüş parçacıkları için, Lim ve arkadaşlarının yaptıkları çalışmada tartıştıkları gibi, sırasıyla yüzey plazmon rezonans frekansının altında ve üstünde ışık soğurması artırılır (Lim 2007).



(a)



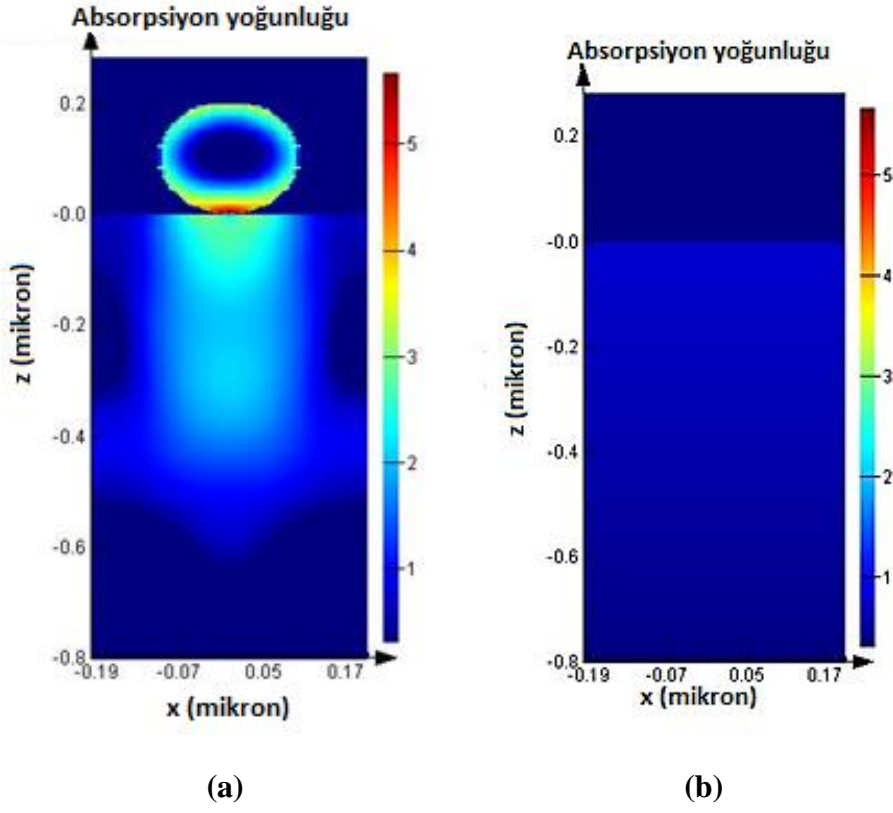
(b)

**Şekil 4.40.** “Absorbsiyon artışı  $g$ ” nin farklı yarıçaplı nanoparçacıklarda **a)** Gümüş için, **b)** Altın için dalgaboyuna bağlı grafikleri

Her bir yapılandırmada, soğrulan güç hesaplanır ve  $g(\lambda)$  artışı için birleşik sonuçlar Şekil 4.40’da gösterildiği gibi çizilir. Gümüş nano parçacıklar için geliştirme önemli (% 20’ye kadar) iken, Au nano parçacıklar için geliştirme oldukça küçüktür. Aslında,  $D = 200$  nm için Au parçacıklar güneş pilinin entegre kuantum verimini düşürür. Gümüşün daha yüksek verimliliğinin nedeni, bu malzeme için  $g(\lambda)$  tepe dalga boyunun, Şekil 4.40a’da gösterildiği gibi yaklaşık 500 nm’lik güneş spektrumu tepe noktasına yakın olmasıdır.

Son olarak, Şekil 4.41, gümüş nano parçacıkları olan ve olmayan ( $D = 200$  nm) 0,62 mikron dalga boyunda birim hacim başına optik absorpsiyon profilini göstermektedir. İki yapılandırma arasındaki karşılaştırmayı kolaylaştırmak için aynı renk skalasını kullanarak emme yoğunluğunun logaritması çizilmiştir. Parçanın, yüzey

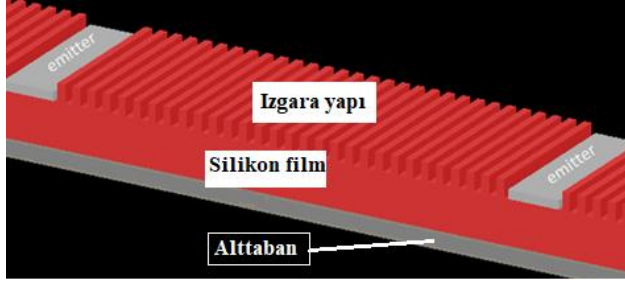
plazmon rezonansına bağı olarak ileri saçılmayı artırarak silikon malzemesinin emilimini arttırdığı açıktır.



**Şekil 4.41.** a) Plazmonik güneş pilinin ve b) düzlem güneş pilinin profili

Simülasyon sonuçlarına göre, gümüş nano parçacıklar, güneş spektrumu aralığında emilimini yaklaşık % 20 artırabilir.

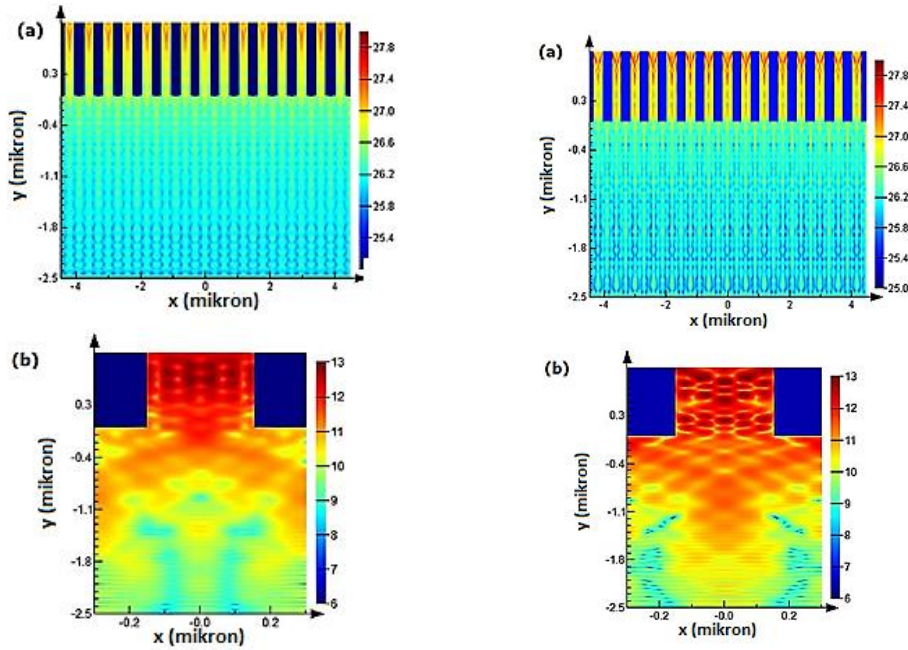
✓ Silikon ızgara yapıli güneş pili uygulaması



Şekil 4.42. 2-boyutta ızgara yapıli güneş pili simülasyon görüntüsü

Güneş pillerinin tasarlanmasındaki en büyük zorluklardan biri verimliliği en üst düzeye çıkarmaktır. Yaygın bir uygulama, hava yarı iletken arayüzündeki güneş hücrelerinin üst yüzeyinden gelen güneş ışınlarının büyük geri yansımalarını en aza indirmek için alttaban üzerine bir ızgara tabakası ilave etmektir. Yapının esasen x yönünde sonsuz olduğunu hesaba katarak, periyodik sınır koşulları x yönünde kullanılır.

Bir silikon güneş pilinde ilgilenilen frekans aralığını açıklamak için 300 nm ila 1100 nm dalga boyu aralığında bir düzlem dalga kaynağı kullanılmaktadır. Elde edilen spektrum daha sonra sistem doğrusal olduğu için Güneş' in spektrumu ile çarpılır.



Şekil 4.43. Sıfır polarizasyon açısı; Doksan derece polarizasyon açısı

0 ve 90 derece polarizasyonları için ideal kısa devre akımının sırasıyla 13 ve 14  $\text{mA}/\text{cm}^2$  civarında olduğu bulunmuştur. Bunları bir araya getirerek polarize olmayan güneş ışığının yaklaşık  $27 \text{ mA}/\text{cm}^2$  olması için ideal kısa devre akımını elde ederiz.



### 4.3. Raman Saçılması

Işığın saçılması olayı; molekül içinde uyarıcı radyasyonun elektromanyetik alanı tarafından indüklenen dipollerin osilasyonu ile üretilen elektromanyetik radyasyon olarak adlandırılmaktadır (Bozkurt 2018).

Molekül ya da atom üzerine gönderilen fotonlar genellikle elastik saçılma yapmaktadırlar. Fotonların yaptığı bu elastik saçılmaya Rayleigh saçılması adı verilmektedir. Rayleigh saçılmasında malzeme üzerine gönderilen fotonlar ile saçılan fotonların enerjileri aynıdır. Eğer foton inelastik saçılma gerçekleştirirse bu olaya Raman saçılması denilmektedir. İlk kez 1923 yılında bilim insanı Smekal fotonların inelastik saçılmaları ile ilgili fikirlerini ortaya atmıştır. Daha sonra 1928 yılında bu olayı deneysel çalışmaları ile bilim insanları Chandrasekhara Venkata Raman ve Kariamannickam Srinivasa Krishnan ortaya koymuşlardır (Zhu vd. 2011).

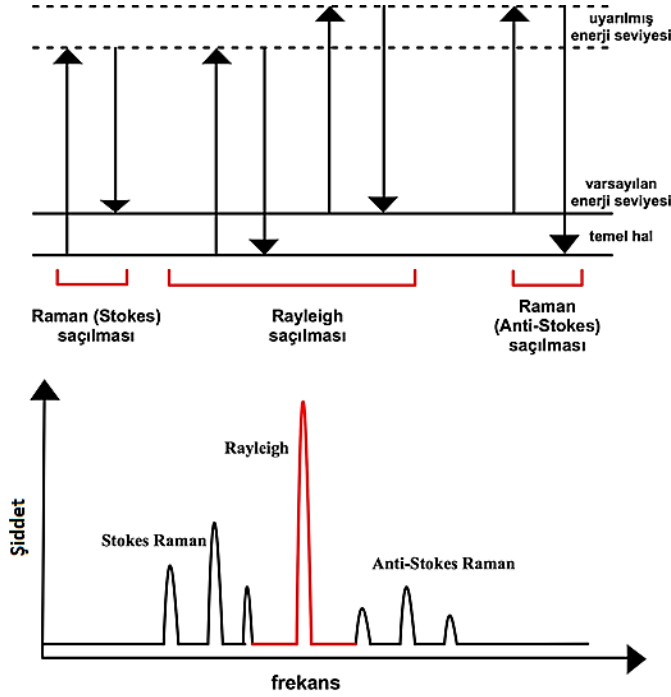
Raman spektrumunun en önemli avantajı suyun spektrumu engellememesidir; Raman spektrumu sulu çözeltilerden elde edilebilir. Ayrıca, cam veya kuvarz hücreler kullanılabilir (Şimşek 2014).

Molekül veya atom üzerine foton gönderildiği zaman saçılan fotonların büyük çoğunluğu Rayleigh saçılması, küçük bir kısmı da Raman saçılması yapmaktadır. Moleküllerdeki titreşimleri tespit etmek için kullanılan başlıca spektroskopiler kızılötesi absorpsiyon ve Raman saçılımına dayanmaktadır (Şimşek 2014).

#### 4.3.1. Raman Spektroskopisi prensibi

Bilim insanı Raman yaptığı çalışmalarında vardığı sonuçları yeni bir tür radyasyon olarak tanımlamıştır. Çalışmalarının çoğunu çıplak gözle gerçekleştirmiş ve elastik olmayan saçılmaların var olduğunu ispat etmiştir. Yıllar ardından bu sonuçlar Raman etkisi olarak adlandırılmıştır. Bu etkinin sebep olduğu sinyallerin ölçülmesinde ve hesaplamalar yapılmasında kullanılmak üzere Raman spektroskopisi ortaya çıkmıştır (Yılmaz 2014).

Raman spektroskopisinin temel prensibi, örnek üzerinden saçılan fotonların Raman etkisi takibi için ölçülmesine dayanmaktadır. Burada örnek üzerine monokromatik lazer ışın demeti gönderilmektedir. Molekül ve foton arasında oluşan etkileşim ile fotonların bir kısmı saçılmaktadır. Saçılma yapan fotonların birçoğu Rayleigh saçılması yapmaktadır ve dalgaboyları uyaran lazer dalgaboyu ile olmaktadır. Raman saçılması yapan fotonların küçük bir kısmının frekansı ise uyaran lazer frekansından farklı olmaktadır. Bu olay fotonların titreşim yapan moleküllerle etkileşim yapmasının ardından inelastik saçılma yapması olarak açıklanmaktadır. Frekansta meydana gelen bu değişimler, kullanılan örnekteki enerji geçişleri sebebiyle oluşmaktadır. Raman spektroskopisi de zaten bu moleküller titreşimleri temel almaktadır. İnelastik saçılma yapan ışın Raman spektrumu meydana getirmektedir (Settle 1998).

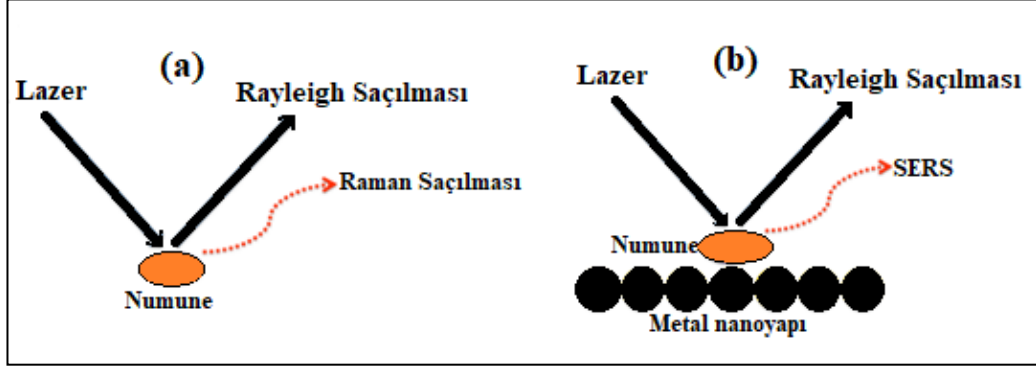


**Şekil 4.44.** Raman saçılmasının molekülün titreşim düzeyleri ile olan ilişkisi (Temiz 2013)

Şekil 4.44'den de görüldüğü gibi molekül üzerine gönderilen fotonun frekansı saçılmaya uğrayan fotonun frekansından küçükse anti-Stokes bantları oluşmaktadır. Tam tersine gelen fotonun frekansı saçılmaya uğrayan fotonun frekansından büyükse Stokes bantları oluşmaktadır. Stokes bantları düşük enerjili titreşim seviyesinden yüksek enerji seviyesine yapılan geçişleri içermektedir. Bunlar yüksek sinyal şiddetine sahiptirler. Konveksiyonel Raman spektroskopisi ile ölçülebilmektedirler. Anti-Stokes bantları floresans veren numuneler için ölçümü alınmaktadır. Şekilde Rayleigh ve Raman saçılımları için kuantum enerji geçişlerinin diyagramı olan Jablonski Diyagramı verilmiştir (Bozkurt 2018).

#### 4.3.2. Yüzey zenginleştirilmiş Raman spektroskopisi (SERS)

Yüzey zenginleştirilmiş Raman spektroskopisi konusunda ilk gözlem 1974 yılında yapılmıştır. Fleischmann ve ark. 1974 yılında pürüzlendirilmiş gümüş yüzeyi üzerinde yer alan piridin Raman spektrumu ölçümleri alınmıştır. Bunun üzerine 1977 yılında keşfin gerçekleşmesi ile çalışmalar hızla artmıştır ve günümüze kadar gelmiştir (Şimşek 2014).

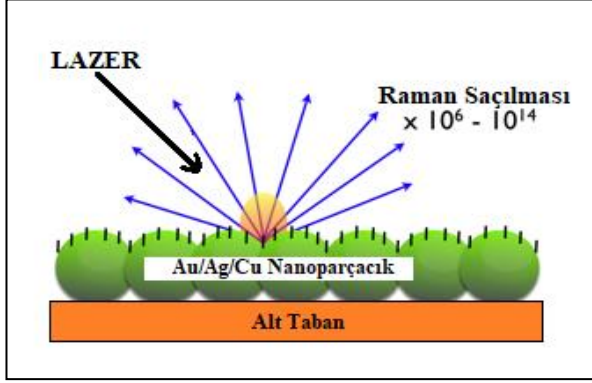


Şekil 4.45. Raman saçılması ve SERS şeması

Raman sinyal şiddetinin artırılması prensibine dayalı teknik, Yüze Zenginleştirilmiş Raman Spektroskopisi (SERS) olarak adlandırılmaktadır. Sinyal şiddetindeki bu artış metal-elektromanyetik radyasyon arasındaki etkileşimler ile ortaya çıkan plazmonik rezonanslar ile gerçekleşmektedir. SERS olayının gerçekleşmesi için molekül yüzeye çok yakın ( $10\text{ nm}$ ) olmalı yahut katkılanmış olmalıdır.

- ✓ Yüze (S): yüze temelli bir spektroskopik yöntem olan SERS'te analizi yapılacak örneklerin (molekül veya atom) metal yüzeye en fazla  $10\text{ nm}$  uzaklıkta tutulması ya da yüzeye adsorplanması gerekmektedir.
- ✓ Zenginleştirme (E): saçılmanın ardından oluşan sinyal şiddetinin artırılması, kullanılan metal yüzeyde oluşacak plazmon rezonanslar ile gerçekleşmektedir.
- ✓ Raman (R): SERS yöntemi Raman etkisinin analizine ve ölçülmesine dayanmaktadır.
- ✓ Saçılma ya da Spektroskopi (Scattering/Spectroscopy, S): SERS kısaltmasının sonunda yer alan "S" harfinin neyi vurgulamak istendiğine göre anlamı değişmektedir. Yöntemin kendisi vurgulanmak istendiğinde spektroskopi, optik etki vurgulanmak istendiğinde saçılma (scattering), (spectroscopy) terimi kullanılmaktadır (Yılmaz 2014).

Yüze zenginleştirilmiş Raman spektroskopisi bir molekülün Raman saçılım sinyallerinin metalik yüzeyler yardımı ile artırılmasına dayanmaktadır. SERS güçlendirme faktörü, metal nano yapı yüzeylerin kullanılması ve kullanılmaması durumunda elde Raman sinyallerinin birbiri ile oranı olarak tanımlanmaktadır. Burada güçlendirme faktörü kullanılan nano yapıların tasarımına (şekil ve boyut) doğrudan bağlıdır.



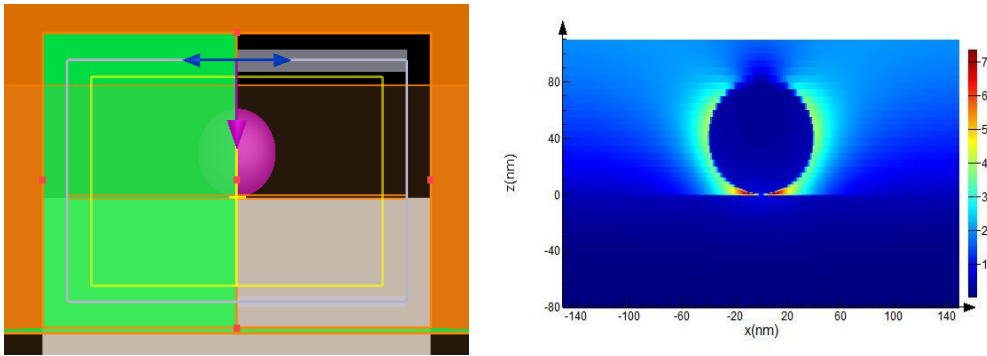
**Şekil 4.46.** Yüzeysel zenginleştirilmiş Raman spektroskopisi

Şekil 4.46’da görüldüğü gibi SERS mekanizmalarında genellikle bakır, altın veya gümüş kullanılmaktadır. Bunun sebebi ise Cu, Ag, Au metallerinin son yörüngelerinde serbest elektronlar bulundurmalarıdır.

Yüzeysel plazmonlarının nano boyutlu metal substratlarda lokalize elektrik alan artımına neden olmasını ve saçılma şiddet artışının artırılabilir. Yapılan çalışmaların neticesinde SERS Raman spektroskopisine göre  $10^6$ - $10^{14}$  sinyal artışı gözlenmiştir. Lokalize elektromanyetik radyasyonun çok fazla artışta bulunduğu bölgelere “SERS sıcak noktaları” (hotspots) adı verilmektedir. Yüzeysel plazmon temelli model SERS ile ilgili birçok deneysel sonucu açıklanmaktadır. Ancak hepsi için kullanılmamaktadır.

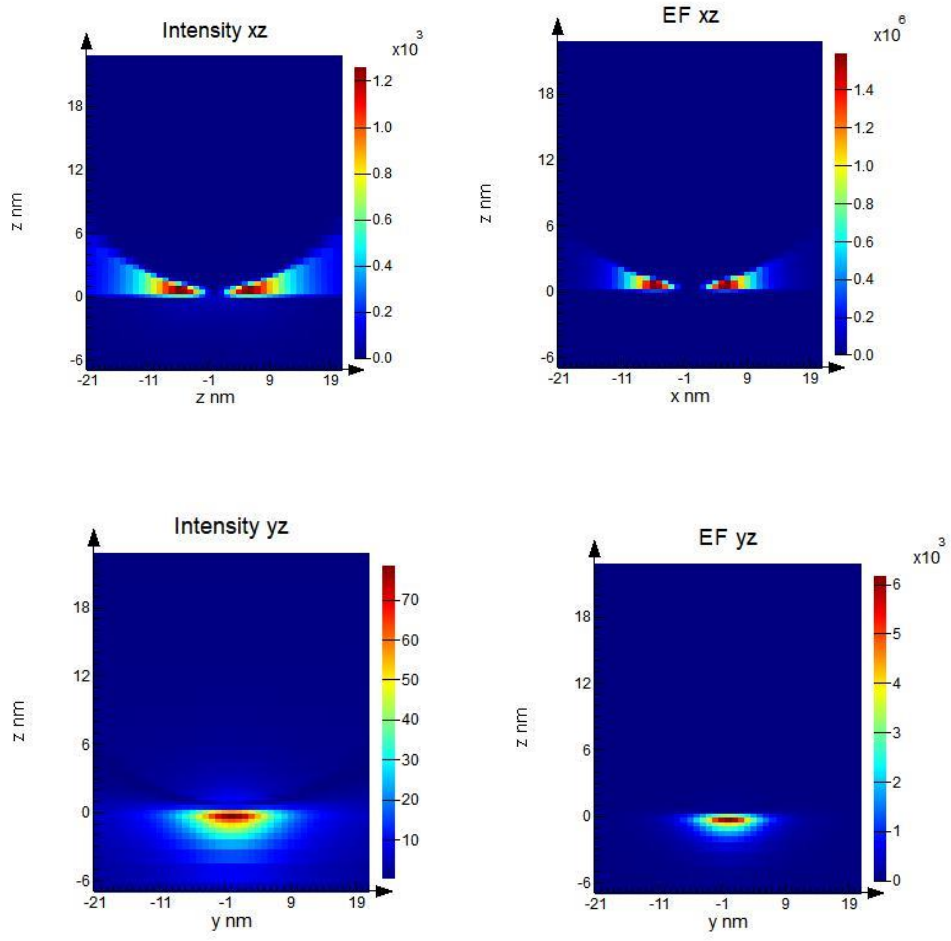
### 4.3.3. SERS uygulaması

Uygun koşullar altında, hem metalik nanoparçacık hem de lokalize yüzeysel plazmonu ve yüzeysel plazmon polaritonu (SPP) üretebilmektedir. İki geometrik malzeme çok yakın, ancak temas halinde değilken, yüzeysel plazmonları arasındaki yapıcı girişim, boşluk içindeki "sıcak nokta" (hot spot) da büyük alan yoğunluğu yaratabilmektedir.



**Şekil 4.47.** FDTD metodu ile SERS uygulaması

Bu örnekte, Pt parçacığı, 40 nm'lik bir yarıçapa sahiptir. Parçacık, gümüş bir substrattan 1 nm yukarıda bulunur. Parçacık ve yüzeysel plazmon arasındaki etkileşim, parçacığın neredeyse yüzeysel plazmonu geliştirmesi oluşturur.



Şekil 4.48. Sıcak nokta (hot spot) şiddetleri

## 5. SONUÇLAR

Son yıllarda oldukça geniş bir çalışma yelpazesine sahip olan plazmonik alanı son derece ilgi çekici bir platformdur. Bu alandaki gelişmeler ile yüksek hassasiyete sahip sensörler, iletişim teknolojileri ve görüntü sistemleri gibi çeşitli alanlarda gelişmeler kaydedilmiştir.

Sensörleri geliştirmek adına yapılan birçok teorik ve deneysel çalışma bulunmaktadır. Teorik çalışmalar nümerik hesaplamalar ile desteklenmektedir. Nümerik hesaplamalardan en çok tercih edilen FDTD (Zaman uzayında sonlu farklar) yöntemidir. Bu tez kapsamında FDTD yöntemi hakkında bilgiler verilmiştir. FDTD yönteminin fiziksel temeli detaylı şekilde açıklanmıştır. Burada her uygulama örneklendirilerek açıklanmıştır.

Diğer taraftan sensör çalışmalarında temel malzeme olarak grafen kullanılmıştır. Grafenin optik ve elektriksel özellikleri açıklanmıştır. Tezin amacı olan grafen tabanlı rezonans frekansı aktif ayarlanabilen sensör çalışması için yapılan simülasyon çalışmalarına yer verilmiştir. Bu çalışmalarda farklı yapı tasarımlarına değinilmiştir. Yapılan tasarımlarda grafen malzemesinin kimyasal potansiyeli değiştirilerek aktif ayarlanabilen sensör çalışmaları yapılmıştır. Bu çalışmaların sonucunda rezonans noktalarının grafenin kimyasal potansiyele bağlı olarak değiştiği gösterilmiştir. Yalnızca kimyasal potansiyel ile değil yapı periyodu değişimi, dış ortamın kırılma indisine bağlı olan değişimlerde yapılan çalışmalar ile gösterilmiştir.

FDTD metodu ile yapılan çalışmalar sadece sensör çalışmaları ile sınırlı kalmamıştır. Güneş pili, SERS ve sıradışı geçirgenlik konularında da çalışmalar yapılmıştır. Bu alanların teorik açıklamaları simülasyon örnekleri ile desteklenmiştir. Bazı katnaklardan alıntılar yapılarak simülasyon çalışmaları ile deneysel çalışmaların uyumlu oldukları gösterilmiştir.

Nano delikler ile yapılan sıradışı geçirgenlik çalışmasında; nanodelikler varken/yokken geçirgenlik ve yansımanın dalgaboyuna bağlı grafikleri elde edilmiştir. Burada Au filminin nano delikler yokken geçirgenlik göstermediği ancak nanodelikler, belli periyotlarda Au yapı üzerine yerleştirilince rezonans noktası elde edilmiştir.

Plazmonları uyarım yöntemlerinden biri olan Kretschmann yöntemi, tez çalışmalarında FDTD metodu ile örneklendirilmiştir. Cam örnek üzerine 50 nm kalınlığında Ag film yerleştirilerek, belli açı değerlerinde elektromanyetik radyasyon sistem üzerine gönderilmiştir. Burada sistemin rezonans açısı belirlenmiştir. Son olarakta elektrik alan yoğunluğu ve yüzey plazmon rezonansın dispersiyon ilişkisinin FDTD ile hesaplaması yapılmıştır.

Bir diğer plazmon uyarım yöntemi olan ızgara yöntemi ile FDTD çalışması yapılmıştır. Cam örnek üzerine Au ızgaralar yerleştirilmiştir. Au ızgara ile cam örnek arasına yerleştirilen Cr film, sistemde plazmonların daha iyi tutunması sağlanmıştır. Ortamın kırılma indisi değiştirilerek SPR noktalarındaki kaymalar incelenmiştir. Ayrıca farklı yapı periyodları ile SPR kaymaları elde edilmiştir.

Grafen tabanlı sensör çalışmaları, tezin temel amacı olan çalışmalardır. Bu kapsamda; grafen ızgara yapıları, grafen nano disk ve grafen kare disk çalışmaları

gerçekleştirilmiştir. Grafen ızgalar ile yapılan çalışmada cam örnek üzerine grafen şeritler belli periyotlarda yerleştirilmiştir. Grafenin kimyasal potansiyeli sabit tutularak yapının periyodu değiştirilmiştir. Sonuç olarak yapının periyodu arttıkça rezonans frekansının sağa kaydığı kaydedilmiştir. Diğer taraftan kalite faktörü dalgaboyuna bağlı olarak hesaplanmıştır. Daha sonra grafen katman sayısına bağlı değişim hesaplamaları yapılmıştır. Grafenin katman sayısı arttıkça rezonans frekansı sola doğru kaymaktadır. Son olarak grafenin kimyasal potansiyeline bağlı değişim grafikleri elde edilmiştir. Kimyasal potansiyel arttıkça, rezonans frekansı sola doğru kaymaktadır.

Grafen nano disk ve kare disk çalışmalarında, tasarlanan yapının periyodu 600 nm alınarak kimyasal potansiyel değiştirilmiştir. Kimyasal potansiyel arttıkça rezonans frekansının sola doğru kaydığı gözlemlenmiştir.

Sadece kimyasal potansiyel değiştirilerek sensör için rezonans noktası değişiminin mümkün olduğu gösterilmiştir. Bu sayede, hem zamandan hem de malzeme kullanımından tasarruf edilebilecek olması yönüyle bu çalışmaların deneysel olarak çalışma yapacaklara yeni fikirler kazandıracağına inanılmaktadır.

## 6. KAYNAKLAR

- Adamson, P. 2017. A sensitive reflection method for optical diagnostics of graphene layers. *Optic*, 138: 180–191.
- Afridi A., 2016. Design and analysis of plasmonic nanoantennas with ground plane and impedance matching. Yüksek Lisans tezi, Koç Üniversitesi, İstanbul, 61 p.
- Alaee, R., Farhat, M., Rockstuhl, C., and Lederer, F. 2012. A perfect absorber made of a graphenemicro-ribbon metamaterial. *Optics Express*, Vol. 20, No. 27.
- Andryieuski, A. and Lavrinenko, A.V. 2013. Graphene metamaterials based tunable terahertz absorber: effective surface conductivity approach, *Optics*, Vol. 21, No. 7.
- Balcı, S., Balcı, O., Kakenov, N., Atar, F.B., and Kocabas C. 2016. Dynamic tuning of plasmon resonance in the visible using graphene, *Optics Letters*, 41(6): 1241-1244.
- Barnes, W.L., Dereux, A. and Ebbesen, T.W. 2003. Surface plasmon subwavelength optics, *Nature* 424: 824-830.
- Başol D., 2016. Güneş Pili, modelleri ve grafikleri için asp.net tabanlı web arayüzü tasarımı. Yüksek lisans tezi, Düzce Üniversitesi, Düzce, 51 s.
- Bozkurt, A.G. 2018. Yüzeyde güçlendirilmiş raman spektroskopisi (sers) temelli platformların geliştirilmesi ve biyoanalizlerde kullanımı. Doktora Tezi, Hacettepe Üniversitesi, Ankara, 118 s.
- Brongersma, M.L., Hartman J.W. and Atwater, H.H. 1999. Plasmonics: electromagnetic energy transfer and switching in nanoparticle chain-arrays below the diffraction limit. *Symposium H – Molecular Electronics*, Vol 582.
- Badawy, W.A. 2015. A review on solar cells from Si-single crystals to porous materials and Quantum dots. *J. Adv. Res.*, 6: 123–132.
- Beck F.J., Polman A., and Catchpole K.R. 2009. Tunable light trapping for solar cells using localized surface plasmons. *J. Appl. Phys*, 105: 114310 (1-7).
- Berenger J.P. 1994. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of Computational Physics* 114: 185-200.
- Blake, P., Hill, E.W., Castro Neto, A.H., Novoselov, K.S., Jiang, D., Yang, R., Booth, T.J. and Geim, A.K. 2007. Making graphene visible. arXiv:0705.0259v3.
- Bohren, C.F., Huffman, D.R. 2008. Absorption and scattering of light by small particles. Wiley-VCH Verlag GmbH& Co. KGaA.
- Catchpole K.R. and Polman, A. 2008. Plasmonic solar cells. *Optics Express* 21793, Vol. 16, No. 26.
- Chorsi, H.T. and Gedney, S.D. 2017. Tunable plasmonic optoelectronic devices basedon graphene metasurfaces. *Ieee Photonics Technology Letters*, Vol. 29, No. 2.
- Chu H., and Gan, C.H. 2013. Active plasmonic switching at mid-infrared wavelengths with graphene ribbon arrays. *Appl. Phys. Lett.* 102, 231107.



- Cunningham, S.L., Maradudin, A.A., and Wallis, R.F. 1974. Effect of a charge layer on the surface-plasmon-polariton dispersion curve. *Phys. Rev. B* 10: 3342.
- Ding, L., Xu, C., Xia, Z., Xu, B., Huang, J. 2017. Controlling polarization-dependent optical absorption of graphene through its thickness. *Optic* 137: 59–64.
- Ebbesen, T.W., Lezec, H.J., Ghaemi, H.F., Thio, T. and Wolff, P.A. 1998. Extraordinary optical transmission through subwavelength hole arrays. *Letters to Nature* (London) 391: 667–669.
- Erol, Y., 2001. İki boyutlu mikrostrip hatların zaman domeninde sonlu farklar (FDTD) metodu ile analizi. Yüksek lisans tezi, Fırat Üniversitesi, Elazığ, 66 s.
- Erol, Y., 2007. FDTD ile mikrodalga devre analizine yeni bir yaklaşım: öz yinelemeli alt ızgaralama. Doktora tezi, Fırat Üniversitesi, Elazığ, 113 s.
- Falkovsky, L.A. 2008. Optical properties of graphene. *Journal of Physics: Conference Series* 129.
- Fan, Y.S., Guo, C.C., Zhu, Z.H., Xu, W., Wu, F., Yuan X.D. and Qin, S.Q. 2017. Monolayer-graphene-based perfect absorption structures in the near infrared. *Optics Express*, 25(12): 13079-13086.
- Faraday, M. 1857. Experimental relations of Gold (and other metals) to light. Fullerman Prof. Chem. Royal Institution, Foreign associate of the Acad. Sciences, 145-181.
- Fleischmann, M., Hendra, P.J. and McQuillan, A.J. 1974. Raman spectra of pyridine adsorbed at a silver electrode. *Chem. Phys. Lett.* 26: 163-166.
- Garnett J.C.M. 1904. Colours in metal glasses and in metallic films, *Philos. Trans. A.*, 203: 385-420.
- Grande, M., Vincenti, M.A., Stomeo, T., Bianco, G.V., de Ceglia, D., Aközbek N., Petruzzelli, V., Bruno, G., De Vittorio, M., Scalora vd. 2014. Graphene-based absorber exploiting guided mode resonances in one-dimensional gratings. *Optics express*, Vol. 22(25): 31511-31519.
- Grigorenko, A.N., Polini, M. and Novoselov, K.S. 2012. Graphene plasmonics-optics in flatland. *Nature Photonics*, 6: 749–758.
- Griffiths D. J. 2005. Elektromanyetik Teori. Gazi kitabevi, Ankara 581 s.
- Gülsu, M.S., 2011. 2-Boyutlu fotonik kristallerde yüzey plazmonlarının FDTD yöntemi ile simülasyonu. Yüksek lisans tezi, Gebze Yüksek Teknoloji Enstitüsü, Gebze, 57 s.
- Hashemi, M., Farzad, M.H., Mortensen, N. A. and Xiao, S. 2013. Enhanced absorption of graphene in the visible region by use of plasmonic nanostructures. *Journal of Optics*, 35(5): 5pp.
- Holland R. 1977. THREDE: A free-field EMP coupling and scattering code. *IEEE Trans. Nucl.Sci.*, 24(6): 2416–2421.
- Holland, R., Simpson, L., and Kunz, K.S. 1980. Finite-difference analysis of EMP coupling to lossy dielectric structures. *IEEE Trans. Electromagn. Compat.*, vol. EMC-22: 203–209.

- Hopfield J.J. 1958. Theory of the contribution of excitons to the complex dielectric constant of crystals, *Phys. Rev.*, 112(5): 1555-1567.
- Huang Z., Dai Y., Su G., Yan Z., Zhan P., Liu F., Wang Z. 2017. Dynamically Tunable Electromagnetically Induced Transparency in Graphene and Split-Ring Hybrid Metamaterial. *Plasmonics*, DOI 10.1007/s11468-017-0530-4
- John D. J., 1998. Classical Electrodynamics, U.S., Wiley & Sons., 661 s.
- Johnson, P.B. and Christy, R.W. 1972. Optical constants of the noble metals. *Phys. Rev. B*, 6(12): 4370–4379.
- Jabloňkú J., 2017. Plasmonic biosensing on the microscale and nanoscale, PhD Thesis, Charles University, Prag, 31 p.
- Jiang, L., Wang, F., Liang, R. Wei, Z., Meng H., Dong, H., Cen H., Wang, L., Qin S. 2017. Tunable terahertz filters based on graphene plasmonic all-dielectric metasurfaces. *Plasmonics* DOI 10.1007/s11468-017-0539-8
- Kamat P.V. 2013. Quantum dot solar cells. The next big thing in photovoltaics. *J. Phys. Chem. Lett.*, 4: 908-918.
- Karabıyık M., 2010. Fabrication, characterization and simulation of plasmonic cavities. Yüksek lisans tezi, Bilkent Üniversitesi, Ankara, 65 s.
- Karamanav M., 2007. Güneş enerjisi ve güneş pilleri. Sakarya Üniversitesi, Yüksek lisans tezi, Sakarya Üniversitesi, Sakarya, 76 s.
- Kunz, K.S. and Luebbers, R.J. 1993. The finite-difference time-domain method for electromagnetics, *CRC Press*, 448 s.
- Küpelı A.Ö. 2005. Güneş pilleri ve verimlilikleri. Yüksek lisans tezi, Osmangazi Üniversitesi, Eskişehir, 175s.
- Kreibig, U., Zacharias, P. 1970. Surface plasma resonances in small spherical silver and gold particles. *Z. Physik* 231: 128-143.
- Kretschmann, E. and Raether, H. 1968. Radiative decay of non-radiative surface plasmons excited by light, *Z Naturf.* 23A, 2135.
- Li X., Lin L., Wu L., Yin, W., and Mao, J. 2017. A bandpass graphene frequency selective surface with tunable polarization rotation for THz applications. *IEEE Transactions on Antennas And Propagation*, 65(2): 662-672.
- Lim S.H., Mar W., Matheu P., Derkacs D. and Yu E.T.2007. Photocurrent spectroscopy of optical absorption enhancement in silicon photodiodes via scattering from surface plasmon polaritons in gold nanoparticles. *Journal of Applied Physics*, 101: 104309, 1-7.
- Lin, H., Pantoja, M.F., Angulo, L.D., Alvarez, J., Martin, R.G. and Garcia S.G. 2012. Fdtd modeling of graphene devices using complex conjugate dispersion material model, *Ieee Microwave and Wireless Components Letters*, 22(12): 612-614.
- Liu, C., Lu, Y., Jiang H., Zhang C., Wang P., Ming H. 2013. Comparative investigations of surface plasmon polaritons on dielectric and metallic gratings. *Optics Communications*, 55–60.

- Lu, H., Zhao, J. and Gu, M. 2016. Nanowires-assisted excitation and propagation of mid-infrared surface plasmon polaritons in graphene. *Journal of Applied Physics* 120: 163106.
- Maier S.A. 2007. Plasmonics: fundamentals and applications. Springer, 221 s.
- Martinsson E., 2014. Nanoplasmonic sensing using metal nanoparticles. Doktora tezi, Linköping University, Sweden, 65 s.
- Mie G. 1908. Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen, *Ann. Phys. (Leipzig)* 25: 377.
- Miloua, R., Kebbab, Z., Chiker, F., Khadraoui, M., Sahraoui, K., Bouzidi, A., Medles, M., Mathieu, C., Benramdane, N. 2014. Peak, multi-peak and broadband absorption in graphene-based one-dimensional photonic crystal. *Optics Communications*, 330: 135–139.
- Niu, J., Shin, Y.J., Lee, Y., Ahn, J.H. and Yang, H. 2012. Graphene induced tunability of the surface plasmon resonance. *Applied Physics Letters*, 440-746.
- Otto, A. 1968. Excitation of nonradiative surface plasma waves in silver by the method of frustrated total reflection, *Z. Phys.* 216: 398-410.
- Prevenslik, T.A., 2003. Cavitation induced Becquerel effect, *Ultrasonics*, 41: 323-327.
- Pedrotti F.L., Pedrotti L.M., Pedrotti L.S. 2006. Introduction in Optics, U.S., Prentice-Hall International, 653 s.
- Pendry, J.B. 2000. Negative refraction makes a perfect lens, *Phys. Rev. Lett.*, 85: 3966-3969.
- Pines D. 1956. Collective energy losses in solids, *Rev. Mod. Phys.* 28(3): 184-198.
- Radder C., Satyanarayana B.S. 2018. FDTD based plasmonic light trapping analysis in thin film hydrogenated amorphous silicon solar cells. *International Journal of Renewable Energy Research*, 8(1): 514-522.
- Ritchie R.H. 1957. Plasma losses by fast electrons in thin films, *Phys. Rev.*, 106: 874.
- Ritchie, R.H., Arakawa, E.T. Cowan, J.J. and Hamm, R.N. 1968. Surface-plasmon resonance effect in grating diffraction, *Phys. Rev. Lett.*, 21: 1530–1532.
- Rodrigo D., Limaj O., Janner D., Etezadi D., García de Abajo, F.J., Pruneri V., Altug H. 2016. Mid-infrared plasmonic biosensing with graphene.
- Sadiku, M.N.O. 2000. Numerical techniques in electromagnetics, *CRC Pres*, 743p.
- Sakurai J.J. 1994. Modern Quantum Mechanics, Addison-Wesley Publishing Company, USA. 89 p.
- Sarker, P.C., Rana, M., Sarkar, A.K. 2017. A simple FDTD approach for the analysis and design of graphene based optical devices, *Optik*, 144: 1–8.
- Schneider J.B. 2017. Understanding the Finite-Difference Time-Domain Method, 403 p. (<https://www.eecs.wsu.edu/~schneidj/ufdtd/ufdtd.pdf>)
- Settle F. 1998. Handbook of instrumental techniques for analytical chemistry, *Journal of Liquid Chromatography & Related Technologies*, 21: 3072-3076.

- Simsek E., 2013. Improving tuning range and sensitivity of localized SPR sensors with graphene. *IEEE Photonics Technology Letters*, 25(9), 867-870.
- Singh V., Joung D., Zhai L., Das S., Khondaker S.I., Seal S. 2011. Graphene based materials: Past, present and future. *Progress in Materials Science*, 1178–1271.
- Smith, W. 1873. Effect of light on selenium during the passage of an electric current. *Nature*, 7: 303-310.
- Smith E., Geoffrey, D. 2005. *Modern Raman Spectroscopy – A Practical Approach*, Wiley John.
- Şimşek A. 2014. Grafen alan etkili transistörlerde litografik kalıntıların SERS yöntemiyle incelenmesi, Yüksek Lisans Tezi, Bozok Üniversitesi, Yozgat.
- Taflove, A. 1988. Review of the formulation and applications of the finite-difference time-domain method for numerical modeling of electromagnetic wave interactions with arbitrary structures. *Wave Motion*, 10(6): 547–582.
- Taflove, A. and Brodwin, M.E. 1975. Numerical solution of steady- state electromagnetic scattering problems using the time-dependent Maxwell's equations, *IEEE Trans. Microwave Theory Tech.*, 23(8): 623–630.
- Takahara, J., Yamagishi, S., Taki, H., Morimoto, A, and Kobayashi, T. 1997. Guiding of a one-dimensional optical beam with nanometer diameter, *Opt. Lett.*, 22: 475-478.
- Tang, L., Shi H., Yang J., Dub C., Gao, F., Zhu J., Duan, J. 2015. Complete optical absorption in graphene by using nano-gratings to excite graphene surface plasmons *Microelectronic Engineering*, 58–61.
- Tanyeli İ., 2011. Effect of substrate type on structural and optical properties of metal nanoparticles for plasmonic applications. Yüksek lisans tezi, Ortadoğu Teknik Üniversitesi, Ankara.
- Temiz H. T. 2013. Yüzeyde güçlendirilmiş raman spektroskopisi kullanılarak ağır metal tayinine yönelik yeni sistemlerin geliştirilmesi. Yüksek Lisans Tezi, Hacettepe Üniversitesi, Ankara.
- Tudos, A.J. and Schasfoort B.M. 2008. *Handbook of Surface Plasmon Resonance*. Cambridge, UK. The Royal Society of Chemistry, 403 p.
- Ünlü B., 2017. Boya duyarlı güneş pilleri için ditizon metal kompleks boyalar geliştirilmesi. Yüksek lisans tezi, Sakarya Üniversitesi, Sakarya, 61 s.
- Vakil, A. and Engheta, N. 2011. Transformation optics using graphene. *Reports*, 332(10): 1291-1294.
- Vaughan M.P., 2014. *Optics*. University Collage Cork., 280 p.
- Vasic B., Isic G., Gajic R., 2013. Localized surface plasmon resonances in graphene ribbon arrays for sensing of dielectric environment at infrared frequencies. *Journal of Applied Physics*, 113: 013110.

- Wang, D., Zhao, W., Gu, X., Chen W. and Yin, W. 2015. Wideband modeling of graphene-based structures at different temperatures using hybrid FDTD method. *IEEE Transactions on Nanotechnology*,14(2).
- Wood, R. W. 1902. On a remarkable case of uneven distribution of light in a diffraction grating spectrum. *Proceedings of the Physical Society of London*, 269-275.
- Würfel, P., 2005. *Physics of solar cells: from principles to new concepts*, WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 3-527-40428-7.
- Yanggian Li, 2017. *Plasmonic optics: Theory and Application*. SPIE Press Book, 250 p.
- Yee, K.S. 1966. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Trans. Antennas Propagat.*, 14: 302–307.
- Yıldırım, B., Akkoyunlu T., Sezer A. 1995. Bir binanın güneş pili destekli güneş kolektörleriyle ısıtılması, Bitirme Tezi, Süleyman Demirel Üniversitesi, Isparta.
- Yılmaz, M. 2014. Yüzey zenginleştirilmiş raman spektroskopisi (Sers) için nano-yaklaşım temelli platformların geliştirilmesi ve tanı amaçlı uygulanması. Doktora Tezi, Hacettepe Üniversitesi, Ankara.
- Yu, R., Pruneri, V.F., Abajo, J.G. 2016. Active modulation of visible light with graphene-loaded ultra thin metal plasmonic antennas, *Scientific repost* 6:32144 | DOI: 10.1038/srep32144.
- Zheng, G., Chen, Y., Xu, L., Lai, M. 2013. Optical characteristics of subwavelength metallic grating coupled porous film surface plasmon resonance sensor with high sensitivity. *Optik*, 4725– 4728.
- Zhu, G., Zhu, X., Fan, Q., and Wan, X. 2011. Raman spectra of amino acids and their aqueous solutions. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 78, 1187-1195.
- Zhu, J., Wenju, X., Qin, L., Song, S. 2016. Period fold structure of graphene SPP waveguide. *Optik*, 127: 4601–4604.
- Zia, R., Schuller, J.A., Brongersma, M.L. 2006. Plasmonics: the next chip-scale Technology. *Materials Today*, 9: 20-27.
- Anonim 1: [https://en.wikipedia.org/wiki/Plasmonic\\_solar\\_cell](https://en.wikipedia.org/wiki/Plasmonic_solar_cell) [Son erişim tarihi: 20.05.2019 ]
- Anonim 2: <https://www.lumerical.com/> [Son erişim tarihi: 20.05.2019]
- Anonim 3: Dr. Serkan Aksoy, 2018. Finite Difference Time Domain (FDTD) <http://abl.gtu.edu.tr/dosya/102/~saksoy/Dersler/Finite%20Difference%20Time%20Domain/Zaman%20Uzay%C4%B1nda%20Sonlu%20Farklar.html>

## ÖZGEÇMİŞ

**Ad-Soyad:** Gülten ONAY

**E-mail:** gultenonay5@gmail.com



## ÖĞRENİM BİLGİLERİ

Doktora 2014-2019	Akdeniz Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü, Fizik Anabilim Dalı, Antalya
Yüksek Lisans 2011-2014	Süleyman Demirel Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı, Isparta
Lisans 2007-2011	Süleyman Demirel Üniversitesi Fen-Edebiyat Fakültesi, Fizik Bölümü, Isparta

## ESERLER

### Ulusal Toplantıda poster, sözlü sunum ve gösterim

Bezir N. Ç., Onay, G., Yıldırım, G., Özkorucuklu, S., P., 2013. "Elektrokimyasal Depolama Yöntemi ile FTO Camlar Üzerine Kaplanmış TiO<sub>2</sub> İnce Filmlerin XRD Özelliklerinin İncelenmesi". XIII. Ulusal Spektroskopi Kongresi, 15-18 Mayıs 2013, Burdur, 167. (Uluslararası katılımlı)

Onay, G., Bezir N. Ç., Yıldırım, G., Özkorucuklu, S., P., 2013. “Elektrokimyasal Depolama Yöntemi ile İletken Camlar Üzerine Kaplanan TiO<sub>2</sub> İnce Filmlerin UV Spektroskopisi ile İncelenmesi”. XIII. Ulusal Spektroskopi Kongresi, 15-18 Mayıs 2013, Burdur, 165. (Uluslararası katılımlı)

### **Uluslararası toplantıda poster, sözlü sunum ve gösterim**

G. Onay, N.Çiçek Bezir, S. Perçin Özkorucuklu “Solar Cell produced by Electrochemical deposition Method”, Uluslararası Katılımlı Elektrokimya Çalıştayı, 23-28 Haziran 2013, Muğla.

N. Çiçek Bezir, Kaleli M., Evcin A., Karıpcin F., Oktay A., Onay G. “The Applicability of TiO<sub>2</sub> /Azo Dye Composite Particles For A Dye-Cencitized Solar Cells” SOLARTR2-2012 (7-9 NOVEMBER), Antalya.

Bezir, N., Ç., Evcin, A., Okçu, H., Oktay, A., Onay, G., Diker, R., 2012. “Gümüş Katkılı TiO<sub>2</sub> İnce Filmlerin Karakterizasyonu”. Türk Fizik Derneği 29. Uluslararası Fizik Kongresi, 5-8 Eylül 2012, Bodrum, 500.

Bezir, N., Ç., Evcin, A., Okçu, H., Oktay, A., Onay, G., Diker, R., 2012. “Seryum Katkılı TiO<sub>2</sub> İnce Filmlerin Karakterizasyonu”. Türk Fizik Derneği 29. Uluslararası Fizik Kongresi, 5-8 Eylül 2012, Bodrum, 501.

Bezir, N., Ç., Onay, G., Yıldırım, G., Özkorucuklu, S. P., 2012. “Elektrokimyasal Depolama Yöntemi ile Oluşturulan TiO<sub>2</sub> İnce Filmlerin Optik Özelliklerinin İncelenmesi”. Türk Fizik Derneği 29. Uluslararası Fizik Kongresi, 5-8 Eylül 2012, Bodrum, 505.

Bezir, N., Ç., Özkorucuklu, S., P., Kaleli, M., Evcin, A., Onay, G., 2012. “Elektrokimyasal Depolama Yöntemi ile Kaplanmış Boyar Maddeli Güneş Pili Yapımı”. VIII. Uluslararası Katılımlı Seramik Kongresi, 22-24 Kasım 2012, Afyon, 93.

Bezir, N., Ç., Onay, G., Özkorucuklu, S., P., 2012. “Elektrokimyasal Depolama Yöntemi ile Kaplanmış Azo-Boya Katkılı TiO<sub>2</sub> İnce Filmlerin Karakterizasyonu”. VIII. Uluslararası Katılımlı Seramik Kongresi, 22-24 Kasım 2012, Afyon, 94.

### **Üniversite Bilim Dergilerinde Yayınlanan Ulusal Makaleler**

Bezir, N., Ç., Onay, G., Yıldırım, G., Özkorucuklu, S., P., Kaleli, M., 2014. “Elektrokimyasal Depolama Yöntemi ile Kaplanmış Boyar Maddeli Güneş Pili Yapımı”, Afyon Kocatepe Üniversitesi Fen ve Mühendislik Bilimleri Dergisi. Cilt:14, Sayı:3.

Onay G., Şahin R., 2017. "Optical properties of the electron and gamma-ray irradiated soda-lime glass samples", Sakarya University Journal of Science. Vol. 22, no 6.

#### **ÇALIŞMA ALANLARI**

- Fotonik
- Optik
- Malzeme Fiziği
- Güneş Pilleri
- FDTD (Zaman Alanında Sonlu Farklar) metodu
- Plazmonik
- Sensörler