Journal of the Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University 38:4 (2023) 2241-2250



Mühendislik Mimarlık Fakültesi Dergisi Journal of The Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University

nik / Online ISSN: 1304 - 4915 / Printed ISSN: 1300 - 1884

An efficient integral equation method using interstitial currents for the analysis of electromagnetic scattering from multilayered periodic structures with complex inclusions

Nilüfer Aslıhan Özdemir* The Scientific and Technological Research Council of Turkey, Space Technologies Research Institute, 06800, Ankara, Türkiye

Highlights:

Graphical/Tabular Abstract

Purpose:

scattering Surface equivalence principle

• Electromagnetic

Layered dielectric media

Keywords:

- Surface integral equation
- Method of moments
- Block tridiagonal matrix
- Interstitial current
- Reflectivity

Article Info:

Research Article Received: 03.11.2021 Accepted: 23.10.2022

DOI:

10.17341/gazimmfd.998432

Correspondence:

Author: Nilüfer Aslıhan Özdemir e-mail: nilufer.ozdemir @tubitak.gov.tr phone: +90 538 932 2264 electromagnetic scattering from multilayered, doubly periodic arrays of penetrable objects that are either embedded in or located above layered dielectric media. The periods will be assumed the same in each layer, but the host medium in different layers, the thicknesses of the layers, and the shapes and material compositions of the inclusions in different layers can be different. **Theory and Methods:**

The present paper proposes an efficient surface integral equation-based method for the analysis of

The proposed surface integral equation-based method is based on the surface equivalence principle. The surface equivalence principle is applied to define electric and magnetic current densities on every interface between physical layers. Hence, the medium in a given layer can be treated as a homogeneous unbounded medium for which the computation and tabulation of the 2-D periodic Green's function is sufficient. Moreover, the method of moments interaction matrix becomes sparse thanks to the use of the surface equivalence on the interfaces. The resulting global method of moments interaction matrix has a blocktridiagonal form, inherited from the use of the surface equivalence on the interfaces.

Results:

The proposed method is validated for a multilayered, infinite doubly periodic array of core-shell nanoparticles above a silicon substrate. The reflectivity of the array is obtained in the frequency range that corresponds to free-space wavelength ranging from 300 nm to 700 nm in Figure A. A very good agreement between reflectivities obtained using the proposed method and Lumerical FDTD is observed.



Figure A. Reflectivity for an increasing number of layers of silver-silica core-shell nanoparticles above a silicon substrate.

Conclusion:

The main characteristics of the proposed method is the introduction of equivalent currents on the interfaces between layers, which allows decoupling of the electromagnetic interactions between non-adjacent layers. In this way, (i) the use of Green's function for layered media is avoided; (ii) the unknowns associated with the electromagnetic current density on the boundaries of the inclusions are eliminated from the final system of equations; (iii) the complexity of the solution of the final system of equations grows linearly with the number of layers.

Journal of the Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University 38:4 (2023) 2241-2250



Mühendislik Mimarlık Fakültesi Dergisi Journal of The Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University

Elektronik / Online ISSN: 1304 - 4915 Basılı / Printed ISSN: 1300 - 1884

Karmaşık objeler içeren çok katmanlı periyodik yapılardan saçılan elektromanyetik dalgaların analizi için katmanlar arası akımları kullanan verimli bir integral denklem yöntemi

Nilüfer Aslıhan Özdemir*[©] TÜBİTAK Uzay Araştırmaları Enstitüsü, 06800, Ankara, Türkiye

ÖNEÇIKANLAR

- Cok katmanlı, iki boyutlu periyodik yapılardan elektromanyetik saçılma
- Katmanlı dielektrik ortama gömülü iki boyutlu periyodik obje dizisi
- Yüzey integral denklem tabanlı sayısal analiz

Makale Bilgileri	ÖZ
Araştırma Makalesi	Bu makalede, katmanlı dielektrik ortamlara gömülü, üç boyutlu (3B), elektromanyetik (EM) dalgaların
Geliş: 03.11.2021	geçebildiği objelerden oluşan çok katmanlı ikili periyodik dizilerden saçılan EM dalgaları analiz etmek için
Kabul: 23.10.2022	yüzey integral denklem tabanlı, verimli bir yöntem önerilmektedir. Önerilen yöntemde, katmanlar arasında
	bulunan arayüzlerin üzerindeki eşdeğer elektrik ve manyetik akımları tanımlamak için yüzeysel eşdeğerlik
DOI:	ilkesi kullanılmaktadır. Bu sayede, literatürdeki benzer çalışmaların aksine, katmanlı dielektrik ortamlar için
10.17341/gazimmfd.998432	Green fonksiyonunu hesaplama gerekliliği ortadan kaldırılmaktadır. Arayüzler, fiziksel veya kurgusal
	olabilir. Arayüzlerin fiziksel olduğu durumda, belli bir katmandaki arka plan ortamı, sonsuz bir ikili
Anahtar Kelimeler:	periyodik dizi için Green fonksiyonu hesaplamasının yeterli olduğu homojen, iki boyutlu (2B) sınırsız bir
Momentler yöntemi,	ortam olarak kabul edilebilir. Elde edilen momentler yöntemi (MoM) etkileşim matrisi blok-tridiagonal bir
iki boyutlu periyodik Green	yapıya sahiptir; bu ise hem matris dolumu, hem de matris denklemi çözümü için katman sayısı bakımından
fonksiyonu,	doğrusal olan bir hesaplama karmaşıklığına yol açar. Literatürde doğrusal olmayan hesaplama karmaşıklığı
katmanlar arası akım,	göz önüne alındığında önerilen yöntem avantajlıdır. Önerilen yöntem yoluyla elde edilen sayısal sonuçlar,
blok tridiagonal matris,	FDTD (Zaman Alanında Sonlu Farklar) tabanlı ticari yazılım kullanılarak elde edilen sonuçlarla
yansıtırlık	karşılaştırılarak doğrulanmıştır.

An efficient integral equation method using interstitial currents for the analysis of electromagnetic scattering from multilayered periodic structures with complex inclusions

HIGHLIGHTS

- Electromagnetic scattering from layered doubly periodic structures
- Doubly periodic array of objects embedded in layered dielectric media
- Surface integral equation-based numerical analysis

Article Info	ABSTRACT
Research Article	In this article, an efficient surface integral equation-based method is proposed for the analysis of
Received: 03.11.2021	electromagnetic scattering from multilayered, doubly periodic arrays of three-dimensional (3D) penetrable
Accepted: 23.10.2022	objects which are either embedded in or located above layered dielectric media. In the proposed method, the
	surface equivalence principle is used to define the equivalent electric and magnetic currents on the interfaces
DOI:	between the layers, thus, as opposed to the similar studies in literature, eliminates the need to calculate the
10.17341/gazimmfd.998432	Green's function for layered dielectric media. Interfaces can be physical or fictional. In the case where the
17. 1	interfaces are physical, the background medium in a given layer can be treated as a homogeneous unbounded
Keywords:	medium for which the computation of the two-dimensional (2-D) periodic Green's function is sufficient. The
Method of moments,	resulting method of moments (MoM) interaction matrix has a block-tridiagonal form which leads to
2-D periodic Green's	computational complexity that is linear in the number of layers for both matrix filling and matrix equation
function,	solution. When the nonlinear computational complexity in literature is considered, the presented method is
interstitial current,	advantageous. The numerical results obtained through the proposed method are validated by comparison
block tridiagonal matrix,	with the results obtained using commercial software based on FDTD (Finite Differences in Time Domain).
reflectivity	

^{*}Sorumlu Yazar/Yazarlar / Corresponding Author/Authors : nilufer.ozdemir@tubitak.gov.tr / Tel: +90 538 932 2264

1. Giriş (Introduction)

Katmanlı dielektrik ortamlarda gömülü, gelişigüzel şekilli, elektromanyetik (EM) dalgaların geçebildiği objelerden saçılan EM dalgaların modellemesi ve analizi aktif ve önemli bir araştırma alanıdır [1, 2]. Bu önem, nanoteknolojiden jeobilimlere kadar, bu tür analizlerin kritik bir rol oynadığı hem bilim hem de mühendislik alanlarındaki çok çeşitli uygulamalardan kaynaklanmaktadır. Fotonik kristal tabakalarda biriken kuantum noktalarında ışığın saçılması [3], yüksek hızlı ara bağlantılarda sinyal yayılması [4], güç tesislerinin ve bunların topraklama sistemlerinin geçici analizi [5] ve yeraltı petrol ve gaz rezervuarlarında saçılma [6] bu tür uygulamalardan sadece birkaçıdır.

EM dalgaların geçebildiği yapılardan saçılmanın sayısal analizinde yüzey integral denklem tabanlı yöntemler avantajlıdır; çünkü bu yöntemlerde ışınım koşulu Green fonksiyonu sayesinde sağlanır ve bilinmeyenler, parçalı homojen ortamlar arasındaki sınırlarda kalır. Olası yüzey integral denklem formülasyonları arasında, parçalı homojen ortamlar arasındaki sınırlar boyunca elektrik ve manyetik alanların teğetsel bileşenlerinin sürekliliğini sağlayan Poggio-Miller-Chang-Harrington-Wu-Tsai (PMCHWT) formülasyonu [7, 8] yaygın olarak kullanılmaktadır. PMCHWT formülasyonunun momentler yöntemi (MoM) [9] ile çözümü, farklı uygulamalarda EM dalgaların geçebildiği objelerden oluşan periyodik dizilere başarılı bir şekilde uygulanmıştır. Periyodik nanoplazmonik yapılar, periyodik Green fonksiyonunu ve gradyanını [10, 11] kullanan yüzey integral denklem yaklaşımı [12] ile analiz edilmiştir. Benzer bir formülasyon, periyodik Green fonksiyonunun Ewald yöntemine [13] göre hesaplandığı [14]'te de sunulmuştur. [15]'te, plazmonik nano-saçıcıların elektromanyetik analizi için PMCHWT formülasyonu, birleşik teğetsel alan (CTF) formülasyonu, Müller formülasyonu, birleşik normal alan formülasyonu (CNF), elektrik ve manyetik akım birleşik alan integral denklemi (JMCFIE) karşılaştırılmıştır. İkili periyodik, çok katmanlı ve kayıp içeren yapılar da periyodik sınır koşulları kullanılarak araştırılmıştır [16, 17].

Geleneksel olarak, bu tür problemlerin integral denklem tabanlı sayısal çözümü, katmanlı ortamlar için Green fonksiyonunun hesaplanmasını gerektirir [18, 19]. Fakat katmanlı ortamlar için analitik olarak ifade edilen spektral-alan Green fonksiyonundan uzamsal-alan periyodik Green fonksiyonunun elde edilmesi, Sommerfeld integrali veya toplamının hesaplanmasını gerektirir; Sommerfeld integrali tek bir kaynak için, Sommerfeld toplamı ise periyodik bir kaynak dizisi için hesaplanır. Sommerfeld integrali veya toplamının hesaplanması, integrand veya toplamın salınımlı ve azalarak sönen yapısından dolayı maliyetli bir işlemdir.

Son on yılda araştırmalar, çok katmanlı ortamlar için geliştirilen uzamsal alan Green fonksiyonlarının kapalı form ifadelerini elde etmeye yoğunlasmıştır. Sommerfeld integrallerinin hesaplanmasının hızlandırılması, araştırmaların ana odak noktası olmuştur. [20]'de, uzamsal alan Green fonksivonunun kapalı form ifadesi, en kücük kareler yöntemi ile elde edilen yakın alan terimlerinin ve Hankel fonksiyonlarının sonlu toplamının birleştirilmesiyle elde edilmiştir. Hölder ve Cèsaro ortalamalarının bir genellemesi olan genelleştirilmiş ağırlıklı ortalamalar algoritması daha özlü ve gürbüz bir formülasyon sunmaktadır [21]. [22]'de Michalski-Zheng karma potansiyel Green fonksiyonunun ekranlanmış katmanlı ortamlarda hesaplanması için gürbüz ve hesaplama açısından verimli bir yöntem önerilmiştir. Bu çalışmada, Green fonksiyonlarının bileşenlerinin spektrumlarını kutup-kalıntı formlarına dönüştürmek için spektral diferensiyal denklem yaklasımı yönteminin yüksek dereceli bir varyantı kullanılır; bu da Sommerfeld integrallerinin kapalı formda hesaplanmasına izin verir. [23]'te katmanlı ortamdaki homojen dielektrik objelerin modellenmesinde Galerkin olmayan yüzey integral denklem formülasyonları için yarı-karışık potansiyel katmanlı ortam Green fonksiyonu (QMP-LMGF) önerilmiştir. Bu yöntemde, katmanlı ortam Green foksiyonu, akım ve yük kaynaklarından alan bileşenlerini temsil etmek için sırasıyla ikili formda bir vektör potansiyel terimi ve vektör formunda bir skaler potansiyel terimi olmak üzere iki kısma ayrılır. İki potansiyelin özelliği araştırılarak önerilen QMP-LMGF'nin boş uzayda vektör ve skaler potansiyellerle uyumlu olduğu ortaya çıkarılmıştır. [24]'te katmanlı ortam Green fonksiyonunun verimli hesaplanması için yeni bir teknik sunulmuştur. Bessel fonksiyonlarının Taylor serisi açılımı kullanılarak, momentler yöntemi sırasında Sommerfeld integrallerinin hesaplanması basit cebirsel işlemlere indirgenmiştir. Dipol mod karmaşık görüntü (DMCI) yöntemi, substrat üzerine yerleştirilmiş düzlemsel katmanlı büyük plazmonik nanoparçacık dizilerini karakterize etmek için etkili bir analitik yöntem olarak [25]'te tanıtılmıştır. [26]'da, katmanlı ortam Green fonksivonundaki Sommerfeld integrallerinin hesaplanmasını hızlandırmak için ayrık karmaşık görüntü yöntemi (DCIM) benimsenmiştir. [27]'de, hava ve çok katmanlı topraktan olusan bir ortamdaki sonsuz küçük bir akım kaynağı için, spektral alan Green fonksiyonunun kapalı form ifadesi, skaler elektrik ve vektör manyetik potansiyelleri için her bir katmanda analitik olarak elde edilmiştir. [28]'de, Sommerfeld integralinin yakınsamasını hızlandırmak için yeni bir spektral alan tekillik çıkarma tekniği, elektriksel olarak iletken bir katman içeren düzlemsel katmanlı ortam için önerilmiştir. [29]'da, katmanlı ortam Green fonksiyonu (LMGF), enterpolasyon tekniğinin özyinelemeli matris yöntemi ile birleştirilmesiyle verimli bir şekilde hesaplanmıştır. [30]'da, spektral alan saçılmış alan cözümünün kutup-kalıntı formuna dönüstürülmesi, Sommerfeld integrallerinin analitik hesaplamasına, böylelikle Green fonksiyonlarının kapalı form uzamsal alan yakınlaştırmasına olanak sağlamıştır. [31]'de Green fonksiyonunun Laplacian temsilleri, yüzey elemanlarının çevresi üzerinde basit, tekil olmayan, düzgün değişen integrandlar içeren çift konturlu integraller üretmek için tanıtılmıştır. [32]'de, Sommerfeld tipi integrallerin davranışını düzenlemek için Green fonksiyonlarının asimptotik formlarının iki boyutlu Laplacian temsilleri, karışık potansiyel formülasyonunun integral çekirdeğinden çıkarılmıştır. Genel olarak, katmanlı ortam Green fonksiyonu Sommerfeld integralini içerdiğinden, tüm gözlem ve kaynak noktaları için katmanlı ortam Green fonksiyonunu hesaplamak çok zaman alır. Bu nedenle, enterpolasyon, katmanlı ortam Green fonksiyonunun hesaplanmasında CPU süresini azaltmak için önemli bir rol oynar [33]. Yüzey integral denklemi için sistem denklemleri, katmanlı ortam Green fonksiyonları üç boyutlu (3B) olarak enterpole edildiğinde ve Kummer asimptotik (tekillik) çıkarma yöntemi ile hızlandırıldığında verimli bir şekilde elde edilebilir [34].

Uygulamaların çoğunda, homojen olmayan saçıcılarla ilgili problemler, sonsuz genişlikte veya katmanlı bir yapıya sahip sahip bir arka plan ortamında formüle edilir. Bu durumlar için, Green fonksiyonu ya kapalı bir ifadeye sahiptir ya da spektral integraller cinsinden elde edilir. Homojen olmayan bir ortam içinde bir saçıcının yer aldığı daha karmaşık yapılarla da karşılaşilabilir. Herhangi bir kaynak-gözlem noktası için homojen olmayan bir bölgenin Green fonksiyonunun kapsamlı bir analizi [35]'te verilmiştir. Bu çalışmada, homojen olmayan bir bölgenin Green fonksiyonu, integral denklem yaklaşımıyla sayısal olarak elde edilmiştir. Bu, Green fonksiyonunun, ilkinin temel çözüm olduğu, kalan kısmının iyi konumlanmış integral denklemin çözümü olarak ifade edildiği iki kısma ayrılmasıyla gerçekleştirilmiştir.

Çok katmanlı periyodik yapılardan saçılan EM dalgaların, katmanlı ortamlar için Green fonksiyonunu kullanan integral denklem tabanlı analizinde iki büyük dezavantaj daha söz konusudur. Bunlardan ilki, matris dolumuna özgü hesaplama karmaşıklığının yapıdaki katmanların sayısının karesi ile orantılı olmasıdır. İkincisi ise, herhangi bir katmandaki her boyut ve malzeme bileşeni değişikliğinde tüm yapının yeniden analiz edilmesinin gerekli olmasıdır.

Genelleştirilmiş Saçılma Matrisi (GSM) [36] tekniği bahsedilen iki soruna çözüm önermektedir. Bu teknik, her bir katman için yansıma ve iletim katsayısını saçılma matrisi aracılığıyla ifade edip, çok katmanlı yapı için genel bir saçılma matrisi elde etmek için basamaklı bir işlem kullanır. Bu amaçla, gelen EM alana ait olası tüm Floquet harmoniklerine karşılık gelen iletim ve yansıma katsayıları hesaplanır. Uygulamada, gereken en yüksek Floquet harmonik derecesi, 2B dizinin periyoduna ve katmanların kalınlığına bağlıdır. Saçılma matrisinin elemanlarını hesaplamak için Momentler Yöntemi (MoM) [37] ve Zaman Alanında Sonlu Farklar (FDTD) yöntemi [38] gibi çeşitli sayısal yöntemler kullanılmıştır.

Bu makalede, katmanlı dielektrik ortama gömülü veya katmanlı dielektrik ortamın üzerine yerleşik olan, EM dalgaların geçebildiği objelerden oluşan çok katmanlı, ikili periyodik dizilerden EM saçılma analizi yapmak için yüzeysel integral denklem tabanlı, verimli bir yöntem önerilmektedir (Şekil 1). Önerilen yöntemin sağladiği avantajlar: (i) katmanlı ortamlar için Green fonksiyonunun kullanımının önüne geçilmektedir; (ii) nihai denklemler sisteminde obje sınırları üzerindeki EM akım yoğunluğu ile ilişkili bilinmeyenler elimine edilmektedir; (iii) nihai denklemler sisteminin çözümündeki karmaşıklığın, katman sayısına bağlı olarak doğrusal artması sağlanmaktadır.

Bu yöntemde, her katmandaki periyodun aynı olduğu varsayılacaktır; ancak farklı katmanlardaki arka plan ortamı, katmanların kalınlığı ve yine farklı katmanlardaki objelerin malzeme bileşimi farklı olabilir. Literatürde kısaca açıklanmış olan yöntem [39, 40], yüzeysel eşdeğerlik ilkesine dayalıdır [41]. Çok katmanlı periyodik yapıda yüzeysel eşdeğerlik ilkesinin kullanılması, arayüzlerin tek bir birim hücreye karşılık gelen çok küçük bir alana sahip açık yüzeylerle sınırlandırılmasına olanak sağlamaktadır.

Öncelikle fiziksel katmanlar arasındaki her arayüzde, yani farklı ortamlarla doldurulan iki katman arasındaki arayüzde, elektrik ve manyetik akım yoğunluklarını belirlemek için yüzeysel eşdeğerlik ilkesi uygulanır. Dolayısıyla belli bir katmandaki ortam, 2B periyodik Green fonksiyonunu hesaplama ve tablolamanın yeterli olduğu homojen, 2B sınırsız bir ortam olarak kabul edilir. Ayrıca arayüzler üzerinde yüzeysel eşdeğerliğin kullanılması sayesinde MoM etkileşim matrisi seyrekleşir. İkinci olarak, belli bir fiziksel katmanın birden fazla periyodik obje dizisi içermesi, yani obje dizilerinin dikey yönde rasgele bir mesafeyle ayrılması durumunda, yüzeysel eşdeğerlik ilkesi, söz konusu katmanı her biri bir obje içeren kurgusal katmanlara ayıran kurgusal arayüzler üzerinde uygulanır. Bu prosedür, bilinmeyen sayısında hafif bir artışa neden olsa da, MoM etkileşim matrisinin seyrekliğini arttırır. Arayüzlerin düzlemsel olmasının gerekmediğine ve objelerin arayüzle neredeyse temas ettiği durumda, doğruluğu arttırmak için geometrik örgüyü bölgesel olarak iyileştirmenin mümkün olduğuna dikkat edilmelidir.

Elde edilen genel MoM etkileşim matrisi, arayüzler üzerinde yüzeysel eşdeğerlik ilkesinin kullanılmasından dolayı blok-tridiagonal bir forma sahiptir. Objeler üzerindeki EM akım yoğunluğu ile ilişkilendirilen bilinmeyen katsayıların elimine edilmesiyle çoğu zaman bilinmevenlerin savısı ciddi ölcüde azalır. Buradan valnızca arayüzler üzerindeki eşdeğer akım yoğunlukları ile ilişkilendirilen bilinmeyenleri içeren, indirgenmiş bir denklemler sistemi kolaylıkla oluşturabilir. Ayrıca denklemler sisteminin çözümünün sayısal karmaşıklığı, yapıdaki katmanların sayısıyla birlikte doğrusal olarak artar. Önerilen yöntemin GSM yöntemine [36] göre en büyük avantajı, belirlenmesi gereken bilinmeyenlerin ve kullanılacak sayısal araçların minimum düzeyde olmasıdır. Esasen burada yalnızca geleneksel bir periyodik MoM çözücüsüne ihtiyaç duyulmaktadır. MoM hesaplamalarındaki bilinmeyenlerin sayısını azaltmak için, alternatif olarak, [42]'de LU ayrıştrma prosedürü uygulanmıştır. Bu prosedürde, ilk olarak, simülasyon spesifikasyonlarından, eş zamanlı olarak adım adım ikili alt matrisler ve LU bloklarının satırları ve sütunları oluşturulur. İkinci olarak, toplam elektrik alan şiddetini bulmak için geriye doğru LU algoritması uygulanır.

Mevcut yöntem; (i) kurgusal katmanlar tanımlanarak denklemler sistemi çözümünün sayısal karmaşıklığının azaltılması; (ii) objelerin sınırlarındaki EM akım yoğunluğu ile ilişkili bilinmeyenlerin *a posteriori* elde edilmesi, bu sayede yöntemin karmaşıklığının daha da azaltılması sebebiyle periyodik soğurucular üzerine çalışmaları içeren [16, 17]'nin genelleştirilmiş hali olarak kabul edilebilir.

Bu makalenin geri kalan kısmı akabindeki gibi düzenlenmiştir. 2. Bölümde önerilen sayısal yöntemin ayrıntıları açıklanmıştır. 3.



Şekil 1. Periyodik obje dizisi içeren katmanlı yapının genel görünüşü, X_s : arayüzler üzerindeki eşdeğer akım; X_t : objeler üzerindeki eşdeğer akım

(Generic illustration of layered structure with periodic array of inclusions. X_s : equivalent current on interfaces, X_t : equivalent current on objects)

Bölümde silikon bir alt katman üzerine yerleşen küresel gümüş-silika çekirdek-kabuk nanoparçacıklardan oluşan çok katmanlı, sonsuz ikili periyodik dizilerin [43] yansıtırlığına dair sayısal sonuçlar sunulmuştur. İkinci örnek, dielektrik sabitleri $\varepsilon_r = 16$ ve $\epsilon_r = 1$ olan ve 2. Bölümde incelenen değişken dielektrik ortam katmanlarına gömülü gümüş küresel nanoparçacık dizileri ile ilgilidir. Elde edilen sayısal sonuçlar, Lumerical FDTD programı [44] kullanılarak elde edilen sayısal sonuçlarla karşılaştırılarak doğrulanmıştır. 4. Bölümde çalışmanın sonuçları kısaca özetlenmiş ve önerilen sayısal yönteme ilişkin araştırmaların ne yönde ilerleyebileceğine dair görüşler belirtilmiştir.

2. Formülasyon (Formulation)

Çok katmanlı yapının genel görünümü Şekil 1'de verilmiştir. Asağıdan yukarıya 0'dan N-1'e kadar numaralandırılmış olan N sayıda arayüz ve arayüzler arasında 1'den N-1'e kadar numaralandırılmış olan N-1 katman vardır. n katmanı, n arayüzünün hemen altında olup, çok katmanlı yapıların altında ve üzerindeki homojen yarı sonsuz ortamlar 0 ve N katmanları olarak kabul edilir. 2B periyodik yapının birim hücresinde, her katman birden çok bağlantısız objeden oluşan objeler kümesi içerebilir. Her katmanda objelerin parçalı homojen malzemelerden oluştuğu ve arka plan ortamının da homojen olduğu varsayılır. Ancak farklı katmanlardaki arka plan ortamlarının sabitleri, katmanların kalınlığı ve ayrıca ardışık dielektrik katmanlardaki objelerin şekilleri ve malzeme bileşimleri farklı olabilir. Bu bölümde verilen formülasyonun uygulanabilmesi için arayüzlerin düzlemsel olması gereklidir. Bu bölümde sunulan formülasyon, yüzeysel eşdeğerlik ilkesine dayalıdır. Başka bir ifadeyle, kimi zaman "süreklilik formülasyonu" [45] olarak da adlandırılan PMCHWT formülasyonu [7] kullanılacaktır. PMCHWT formülasyonunda, eşdeğer elektrik ve manyetik akım yoğunlukları parçalı homojen ortamlar arasındaki sınırlar üzerinde tanımlanmaktadır. Bu bölümde, formülasyon EM dalgaların geçebildiği homojen bir obje için verilecek olup, ekte formülasyon parçalı homojen malzemelerden oluşan objeleri içerebilecek şekilde genişletilmektedir.

Eşdeğer elektrik ve manyetik akım yoğunluk vektörleri sırasıyla $\vec{J} = \hat{n} \times \vec{H}$ ve $\vec{M} = -\hat{n} \times \vec{E}$ olarak ifade edilir; \hat{n} , EM dalgaların geçebildiği homojen objeden dışarı uzanan birim normal vektör; \vec{H} ve \vec{E} ise sırasıyla manyetik ve elektrik alan şiddet vektörleridir. Eşdeğer akım yoğunlukları, obje yüzeyinde EM alanların teğetsel bileşenlerinin sürekliliğini sağlamak suretiyle belirlenir. \vec{E} ve \vec{H} 'den oluşan EM alanın teğetsel bileşenlerinin sürekliliği, arayüzler üzerinde de empoze edilecektir. Formülasyonu basitleştirmek için, belli bir arayüz üzerinde tanımlanan eşdeğer elektrik ve manyetik akım yoğunlukları ile ilişkili bilinmeyenler Eş. 1'de tek bir **x** vektörü ile ifade edilmiştir:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{J} \\ \mathbf{m} \end{bmatrix} \tag{1}$$

J ve **m**, eşdeğer elektrik ve manyetik akım yoğunluklarının temel fonksiyonlara göre katsayılarını içeren sütun vektörleridir. Elektrik ve manyetik akım yoğunluklarını ayrıklaştırmak için aynı temel fonksiyon kümeleri kullanılacaktır. Bunun yanı sıra, temel fonksiyonlar kümesi aynı zamanda test fonksiyonları kümesine karşılık geldiği için Galerkin testi kullanılmış olacaktır.

 S_2 yüzeyindeki \mathbf{x}_2 katsayılı temel fonksiyonlar kümesi ile genişletilen eşdeğer akım yoğunlukları tarafından yayılan ve S_1 yüzeyinde tanımlanan temel fonksiyonlar kümesi ile test edilen elektrik ve manyetik alan şiddet vektörleri $\mathbf{y}_1 = \mathbf{Z} \cdot \mathbf{x}_2$ olarak elde edilir. **Z** Eş. 2'de verilmiştir:

$$\mathbf{Z} = \begin{bmatrix} \frac{\eta \mathbf{Z}^{EJ}}{jk} & \mathbf{Z}^{EM} \\ -\mathbf{Z}^{EM} & \frac{\mathbf{Z}^{EJ}}{jk\eta} \end{bmatrix}.$$
 (2)

Eş. 2'de η ve k, sırasıyla temel fonksiyon ve test fonksiyonunun etkileşimde bulunduğu ortama ait empedans ve dalga sayısıdır. \mathbf{Z}^{EJ} ve \mathbf{Z}^{EM} matris blokları Eş. 3 ve Eş. 4'te formüle edilmekte olup,

$$\mathbf{Z}_{k,l}^{EJ} = \int_{S_1} \int_{S_2} G(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \begin{pmatrix} k^2 \vec{F}_k(\vec{r}_1) \cdot \vec{F}_l(\vec{r}_2) - \\ -\nabla \cdot \vec{F}_k(\vec{r}_1) \nabla \cdot \vec{F}_l(\vec{r}_2) \end{pmatrix} dS_2 dS_1,$$
(3)

$$\mathbf{Z}_{k,l}^{EM} = \int_{S_1} \int_{S_2} \nabla_2 G(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \times \vec{F}_k(\vec{r}_1) \cdot \vec{F}_l(\vec{r}_2) \, dS_2 dS_1; \tag{4}$$

 \vec{F}_l ve \vec{F}_k , sırasıyla S_2 kaynak alanındaki l temel fonksiyonu ve S_1 gözlem alanındaki k temel fonksiyonudur. G ise, temel fonksiyon ile test fonksiyonunun etkileşimde bulunduğu ortamın özelliklerine bağlı olan Green fonksiyonudur. $\nabla_2 G$, kaynak koordinatlarına göre Gfonksiyonunun gradyanıdır. G fonksiyonu, etkileşim ortamının objenin iç kısmına karşılık geldiği durumlar hariç olmak üzere, her durumda ilgili ortamdaki 2B periyodik Green fonksiyonuna karşılık gelir. 2B periyodik Green fonksiyonunun ve gradyanının hızlı hesaplamaları [11]'de açıklandığı gibi uygulanmıştır. Periyodik Green fonksiyonuna ait alternatif formülasyonların listesi [40]'da verilmiş olup bunlarla sınırlı değildir.

Etkileşim matrislerinin hesaplamasında kullanılan S_1 ve S_2 yüzey çiftlerine bağlı olarak, Z matrisi farklı sembollerle (A'dan E'ye) gösterilecektir: (i) S_2 ve S_1 'in her ikisi de arayüz olduğunda $\mathbf{Z} = \mathbf{A}$; (ii) S_2 objenin yüzey sınırı, S_1 arayüz olduğunda $\mathbf{Z} = \mathbf{B}$; (iii) S_2 arayüz, S_1 objenin yüzey sınırı olduğunda $\mathbf{Z} = \mathbf{C}$; (iv) S_2 ve S_1 , katmanı dolduran ortamda objenin yüzey sınırı olduğunda $\mathbf{Z} = \mathbf{D}$; (v) S_2 ve S_1 , objeyi dolduran ortamda objenin yüzey sınırı olduğunda $\mathbf{Z} = \mathbf{E}$ (bu durumda periyodik olmayan Green fonksiyonu kullanılmaktadır). Bu noktadan sonra yukarıda belirtilen matrislere uygulanan iki üstindis, sırasıyla S_1 ve S_2 yüzeyiyle ilişkili indislere karşılık gelecektir (Şekil 1). Hem S_1 , hem de $S_2 n$ arayüzüne karşılık geldiği durumda, *n* katmanı veya n + 1 katmanına ait arka plan ortamı aracılığıyla etkileşim gerçekleşebilir; altindis bu durumda hangi katmanın göz önünde bulundurulması gerektiğini gösterecektir. \mathbf{x}_{s}^{n} ve \mathbf{x}_t^n bilinmeyen vektörleri sırasıyla, *n* arayüzü üzerindeki eşdeğer akım yoğunluğu vektörüne ve n katmanındaki objenin yüzey sınırındaki eşdeğer akım yoğunluğu vektörüne karşılık gelecektir.

Önceki paragrafta belirtilen matrisler kullanılarak, ilk ve son arayüzler hariç tutulduğunda ($n \neq 0$ ve $n \neq N - 1$), Eş. 5 arayüz üzerindeki EM alan şiddetlerinin teğetsel bileşenlerinin sürekliliğini sağlar.

$$\mathbf{A}_{n+1}^{n,n} \mathbf{x}_{s}^{n} - \mathbf{A}_{s}^{n,n+1} \mathbf{x}_{s}^{n+1} + \mathbf{B}_{s}^{n,n+1} \mathbf{x}_{t}^{n+1} = -\mathbf{A}_{n}^{n,n} \mathbf{x}_{s}^{n} + \mathbf{A}^{n,n-1} \mathbf{x}_{s}^{n-1} + \mathbf{B}^{n,n} \mathbf{x}_{t}^{n}$$
(5)

n katmanındaki objenin yüzey sınırı üzerindeki EM alan şiddetlerinin teğetsel bileşenlerin sürekliliği ise Eş. 6 ile sağlanır:

$$-\mathbf{C}^{n,n}\mathbf{x}_s^n + \mathbf{C}^{n,n-1}\mathbf{x}_s^{n-1} + \mathbf{D}^{n,n}\mathbf{x}_t^n = -\mathbf{E}^{n,n}\mathbf{x}_t^n \tag{6}$$

Eş. 6'ya bakıldığında, *n* katmanındaki objenin yüzeyindeki eşdeğer akım yoğunluklarına karşılık gelen \mathbf{x}_t^n bilinmeyenlerinin sadece \mathbf{x}_s^{n-1} ve \mathbf{x}_s^n bilinmeyenlerine bağlı olduğu görülecektir. Dolayısıyla Eş. 5 sadece arayüz üzerindeki bilinmeyenleri içeren bir denkleme dönüştürülebilir. Bu durumda birkaç basit cebirsel işlemle Eş. 7 elde edilebilir.

$$\mathbf{A}_{1}^{n}\mathbf{x}_{s}^{n-1} + \mathbf{A}_{2}^{n}\mathbf{x}_{s}^{n} + \mathbf{A}_{3}^{n}\mathbf{x}_{s}^{n+1} = 0; \ n \neq 0 \text{ and } n \neq N-1.$$
(7)

Eş. 7'deki A_1^n , A_2^n ve A_3^n sırasıyla Eş. 8, Eş. 9 ve Eş. 10'da verilmektedir:

$$\mathbf{A}_{1}^{n} = -\mathbf{A}^{n,n-1} - \mathbf{B}^{n,n}\mathbf{F}^{n},\tag{8}$$

 $\mathbf{A}_{2}^{n} = \mathbf{A}_{n+1}^{n,n} + \mathbf{A}_{n}^{n,n} + \mathbf{B}^{n,n+1}\mathbf{F}^{n+1} + \mathbf{B}^{n,n}\mathbf{G}^{n},$ (9)

$$\mathbf{A}_{3}^{n} = -\mathbf{A}^{n,n+1} - \mathbf{B}^{n,n+1}\mathbf{G}^{n+1}$$
(10)

Ayrıca, $\mathbf{F}^{n} = \mathbf{Y}^{n} \mathbf{C}^{n,n-1}$, $\mathbf{G}^{n} = \mathbf{Y}^{n} \mathbf{C}^{n,n}$, $\mathbf{Y}^{n} = -[\mathbf{E}^{n,n} + \mathbf{D}^{n,n}]^{-1}$.

n = 0 ve n = N - 1 özel durumlarında $\mathbf{A}^{0,-1} = 0$, $\mathbf{B}^{0,0} = 0$, $\mathbf{A}^{N-1,N} = 0$ ve $\mathbf{B}^{N-1,N} = 0$ olarak kabul edilir. Yukarıdaki şekilde elde edilen ışıma yalnızca N - 1 arayüzünde sağlanması gereken sınır koşulunu etkiler; bunun içinse Eş. 5'in sol tarafına **e** terimi ilave edilir. Eş. 11'de verilen **e** vektörü, N - 1 yüzeyini ışıtan EM alan vektörünün test edilmiş halidir.

$$\mathbf{e} = \begin{bmatrix} \mathbf{t}^e \\ \mathbf{t}^h \end{bmatrix} \tag{11}$$

 $\mathbf{t}^{e}(k) = \int_{S} \vec{F}_{k} \cdot \vec{E}^{inc} dS; \vec{E}^{inc}$ gelen elektrik alanı şiddeti, \vec{F}_{k} ise n = N - 1 arayüzünde tanımlanan k test fonksiyonudur. Gelen manyetik alan şiddetini içeren benzer bir ifade $\mathbf{t}^{h}(k)$ için elde edilir.

Eş. 8-Eş. 10, Eş. 12'de görüldüğü üzere blok-tridiagonal bir denklemler sistemini tanımlamaktadır:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{2}^{2} & \mathbf{A}_{3}^{2} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{A}_{1}^{1} & \mathbf{A}_{2}^{1} & \mathbf{A}_{3}^{1} & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{A}_{1}^{N-2} & \mathbf{A}_{2}^{N-2} & \mathbf{A}_{3}^{N-2} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{A}_{1}^{N-1} & \mathbf{A}_{2}^{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{s}^{0} \\ \mathbf{x}_{s}^{1} \\ \vdots \\ \mathbf{x}_{s}^{N-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \vdots \\ -\mathbf{e} \end{bmatrix}$$
(12)

Eş. 12'de, ilk olarak, objelerle ilişkili bilinmeyenlerin elimine edildiğini, bu sayede denklemler sisteminin boyutunun ciddi ölçüde küçüldüğünü fark etmekteyiz. Bu durum; gelişigüzel şekilli, parçalı homojen objelerin sınırlarının doğru gösterilmesi için çok sayıda temel fonksiyon (dolayısıyla da çok sayıda bilinmeyen) gerektirebileceği için, denklem sisteminin çözümünde çok büyük bir zaman tasarrufu sağlamaktadır. İkincisi, Eş. 12'deki empedans matrisinin, arayüzler üzerinde yüzeysel eşdeğerlik ilkesinin kullanılmasından kaynaklanan blok-tridiagonal bir yapısı vardır. Blok-tridiagonal matrisler için özel çözücüler kullanılabilir [46]. Bu çözücülerin N ile orantılı bir karmaşıklığı vardır; N arayüzlerin sayısıdır. Dolayısıyla doğrudan çözüme ulaşmak için, çözüm sürecinin karmaşıklığı $M^3N^{3'}$ den M^3N' e düşürülmüştür; M herhangi bir arayüzdeki bilinmeyenlerin sayısıdır. Objeler üzerindeki eşdeğer akım yoğunlukları, Eş. 6'da \mathbf{x}_t^n 'yi izole etmek suretiyle arayüzler üzerindeki eşdeğer akım yoğunluklarıyla ilişkili bilinmeyenler kullanılarak *a posteriori* elde edilebilir.

Şekil 2'de silika kabuğun gümüş bir çekirdek içerdiği durumda olduğu gibi ikincil objenin birincil objeye gömülü olduğu durumda Eş. 6'nın genelleştirilmesi gerekmektedir. İkincil objenin dış yüzeyindeki eşdeğer akım ile ilişkili katsayıları \mathbf{x}_i^n ile, sırasıyla birincil ve ikincil objeleri çevreleyen yüzeyleri S_t ve S_i ile ifade edersek, Eş. 13 ve Eş. 14 elde edilir:

$$-\mathbf{C}^{n,n}\mathbf{x}_s^n + \mathbf{C}^{n,n-1}\mathbf{x}_s^{n-1} + \mathbf{D}x_t^n = -\mathbf{E}\mathbf{x}_t^n + \mathbf{M}_{t,i}\mathbf{x}_i^n,$$
(13)

$$-\mathbf{M}_{i,t}\mathbf{x}_{t}^{*}+\mathbf{M}_{i,i}\mathbf{x}_{i}^{*}=-\mathbf{N}\mathbf{x}_{i}^{*}.$$
(14)

Eş. 13'te $\mathbf{M}_{t,i}$, S_t ve S_i arasındaki ortam aracılığıyla etkileşen S_i yüzeyi üzerindeki temel fonksiyonlarla S_t yüzeyi üzerindeki test fonksiyonları arasındaki EM etkileşimi temsil eden **Z**-tipi bir matristir. **N** matrisinin tanımı, yüzeyinin ikincil obje olması ve ilgilenilen ortamın ikincil obje içerisindeki ortam olması dışında, **E** matrisinin tanımıyla aynıdır. Diğer matrisler 2. Bölümde tanımlanmıştır. İşaretlendirmeyi basitleştirmek için belli bir arayüz veya objenin kendi kendine etkileşimini temsil eden matrislerden *n*, *n* üstindisleri çıkarılmıştır. İkincil nesne üzerindeki EM akım yoğunluğuyla ile ilişkili vektör (x_i^n) Eş. 13 ve Eş. 14'den elimine edilerek ve **E** matrisi için yeni bir tanım oluşturularak Eş. 6 ile birebir aynı formda bir denklem elde edilebilir.

3. Sayısal Sonuçlar (Numerical Results)

Sayısal sonuçlar bölümünde, silikon bir alt katman üzerine yerleşik gümüş çekirdek-silika kabuk nanoparçacıklardan oluşan çok katmanlı, sonsuz ikili periyodik bir dizi için önerilen sayısal yöntemin doğrulamasını gerçekleştireceğiz. Sözü edilen dizi, yeni geliştirilmiş



Şekil 2. Dizi yapısına ilişkin geometrik ayrıntılar, çekirdek-kabuk nanoparçacıklardan oluşan 3 katmanlı, sonsuz ikili periyodik dizi için verilmiştir.

(The geometric details of the array configuration are given for the 3-layer, infinite doubly periodic array of core-shell nanoparticles.)

kendinden kurulum (self-assembly) teknolojisinden faydalanılarak düşük endeksli metamalzemeler geliştirmek üzere üretilmiştir [43]. Burada dizi, -z yönünde yayılan x – kutuplu bir düzlem dalgayla uyarılır. Dizinin yansıma katsayısı, havada 300 nm ila 700 nm arasında değişen dalga boyuna karşılık gelen frekans aralığında elde edilir. Benzetim veya ölçüm sonuçlarıyla karşılaştırmak için ticari benzetim programlarından elde edilen referans sonuçları sağlamak yaygın bir uygulamadır. Mikrodalga frekanslarında ticari benzetim programı olarak CST Microwave Studio [47] kullanılırken [48-50] optik frekanslarda Lumerical FDTD Solutions [44] tercih edilir.

Şekil 2'de dizi yapısının geometrik ayrıntıları gösterilmektedir. Bu yapıda en alt katman (bir başka ifadeyle 0 katmanı) silikondan oluşan yarı uzay olarak alınırken, üst katman (bir başka ifadeyle N katmanı) havadan oluşur; ayrıca N - 1 ara katmanın tümünün arka plan ortamı da havadan oluşmaktadır. Silikon ve kaynaşık silikanın kırılma indisleri sırasıyla [51] ve [52]'den alınmıştır. Gümüşün kırılma indisi ise Palik'in düzeltme terimli ölçümlerine dayalıdır [53]. Belirtilen kırılma indisleri, karmaşık bağıl geçirgenliğin 1,0 olduğu varsayılarak karmaşık dielektrik sabite dönüştürülür. Silikon ve hava olmak üzere iki arka plan ortamı seçilmiştir ve çekirdek-kabuk yapısındaki objeler hem geometri, hem de malzeme bileşimi açısından belli bir karmaşıklık düzeyine sahiptir. Bu sebeple söz konusu yapı, önerilen sayısal yöntemi doğrulamak için ilginç bir örnek teşkil eder.

Hem gümüş çekirdeğin, hem de silika kabuğun yüzeyleri, 486 RWG [54] temel fonksiyonuna bölünür. Silikon alt katman ile hava arasındaki arayüzün birim hücresi, 392 çatı şekilli (rooftop) temel fonksiyona bölünür. Hava katmanları arasındaki arayüzlerin birim hücreleri, 72 çatı şekilli (rooftop) temel fonksiyona bölünür. Referans sonuçları elde etmek için Lumerical FDTD Solutions [44] programı kullanılmıştır. Lumerical programında, geometrik örgü doğruluk parametresi (mesh accuracy parameter) yüksek seçilir ve minimum geometrik örgü adımı (mesh step) da 1 nm olarak seçilir. Önerilen yöntem ve FDTD ile elde edilen sonuçlar arasında daha iyi bir karşılaştırma yapılabilmesi için malzeme parametrelerinin daha yakından incelenmesi gerekir. Lumerical paket programında deneysel dağılım profillerine (experimental dispersion profiles) daha uygun olan çok katsayılı modeller (multi-coefficient models) kullanılır. Bu çalışmada önerilen yöntemle elde edilen sonuçların doğruluğunu göstermek için, Lumerical programında kullanılan kırınım modelinde en yüksek sayıda katsayı seçilmiştir ve buna karşılık gelen model simülasyonlarda kullanılmıştır.

[300-700] nm dalga boyu aralığındaki yansıtırlık sonuçları, yani katsayılarının karelerinin-büyüklükleri Şekil 3'te yansıma gösterilmiştir. Kısaca bir, dört ve yedi katmanlı diziler için elde edilen sonuçlar sunulmuştur. Önerilen yöntem ile Lumerical FDTD programı kullanılarak elde edilen yansıtırlıklar arasında, tüm frekanslarda ve tüm katman sayılarında çok iyi bir uyum olduğu görülmüştür. Katman sayısı üçten büyük olan diziler ve yüksek yansıtırlık değerleri için ($|\Gamma|^2$ 'in yaklaşık 0,15'ten daha büyük olması durumunda), burada önerilen yaklaşımla tahmin edilen yansıtırlık, Lumerical FDTD ile tahmin edilen yansıtırlıktan çok az yüksek olma eğilimi sergiler ve 0,02 düzeyinde bir sapma görülür. Buna karşın bazı alt bantlarda neredeyse hiç sapma olmadığından sistematik bir sapma gözlendiği söylenemez. Hem önerilen yöntem, hem de FDTD simülasyonları üzerinde yaptığımız değerlendirmeler, ölçümler yapılamadığından hangi sonuç grubunun daha doğru olduğunu belirlememiz için yeterli olmamıştır. FDTD sonucu referans alınarak hata fonksiyonu Eş. 15'teki gibi tanımlanabilir.

hata =
$$\|\Gamma_{\text{FDTD}} - \Gamma_{\text{yöntem}}\|_2 / \|\Gamma_{\text{FDTD}}\|_2$$
 (15)

 Tablo 1. Farklı katman sayılarına karşılık gelen hata değerleri.

 (Error corresponding to different number of layers.)

Katman sayısı	Hata	Hata artış oranı	
1	0,0578		
4	0,1060	0,0482	
7	0,1157	0,0097	



Şekil 3. Silikon alt katman üzerinde yerleşik gümüş-silika çekirdek-kabuk nanoparçacık katmanları için yansıtırlık. Nanoparçacıkların üst katmanı, normal açıda gelen düzlem dalgayla uyarılmıştır. (Reflectivity for an increasing number of layers of silver-silica core-shell nanoparteles above a silicon substrate. The top layer of nanoparticles is illuminated at normal incidence.)

Tablo 1'de katman sayısı arttıkça hatada artış görülmekle beraber katman sayısı arttıkça hatadaki artış oranı azalmaktadır.

Bu paragrafta, 3,5 GHz saat hızı olan i7-4770K Intel Core işlemcili bir bilgisayarda gerçekleştirilen simülasyonlar için gerekli hesaplama zamanları verilecektir. Bu bilgisayarda, Lumerical FDTD programı 8 işlemci kullanırken önerilen yöntemin yazılımı tek bir işlemci kullanmaktadır; bunun nedeni, önerilen yöntemin kodunun henüz paralelleştirilmemiş olmasıdır. Dolayısıyla karşılaştırma yapmak amacıyla hesaplama zamanları tek işlemci için eşdeğer zamanlara dönüştürülecektir; bir başka ifadeyle, hesaplama zamanları FDTD hesaplamaları için 8 ile çarpılırken önerilen yöntem hesaplamaları için olduğu gibi bırakılacaktır. 8 ile çarpma işleminin altında Lumerical FDTD programının ideal bir paralelleştirme ölçeği olduğu varsayımının yattığı belirtilmelidir. Önerilen yöntemin çözümünde frekans süpürmesi, 2. Bölümde verilen Z matrisinin farklı türlerinin frekansa göre aradeğerlemesi kullanılarak güçlü bir şekilde hızlandırılabilir [55]. Bu ise, zamandan ciddi ölçüde tasarruf edilmesini sağlar; çünkü yedi katman için dahi hesaplama zamanında matris dolumu ağır basmaktadır. Burada, ilgili frekans bandında, 101 frekanstan sadece 11'inde farklı Z matrisleri hesaplanmıştır; diğer frekanslarda ise, anlamlı bir doğruluk kaybı olmaksızın ikinci derece aradeğerleme kullanılmıştır. Tablo 2'de hesaplama zamanları üç sütunda verilmiştir: (i) 11 frekansta doğrudan matris dolumu için gerekli zaman, (ii) önerilen yöntemin çözümüne dahil olan diğer hesaplamaların tamamı (aradeğerleme ve çözüm) için gerekli zaman, (iii) tek çekirdekte FDTD çözümü (8 çekirdekte paralel hesaplamayla gözlemlenen çözüm süresinin 8 katı).

Tablo 2'de önerilen yöntem hesaplamalarının FDTD hesaplamalarına oranla 10 kattan hızlı (daha açık bir ifadeyle sırasıyla 1, 2 ve 7 katmanlı dizi için 15,8, 14,2 ve 19,4) tamamlandığı görülmektedir. Dahası, önerilen yöntem hesaplama zamanında matris dolum zamanı ağır basmakta olup, bu hiçbir zaman iki katman için gerekenden fazla değildir. Ayrıca, yansıtırlığın hesaplandığı 101 frekans düşünüldüğünde yedi katman için gereken toplam hesaplama zamanı, iki katman için gereken toplam hesaplama zamanından yalnızca 28 saniye (yani yaklaşık %2) daha fazladır. Son olarak, farklı frekanslar için matris dolumuna dahil olan hesaplamaların aynı zamanda birkaç işlemciye dağıtılması da mümkündür. Matris dolumunda gereken sürenin nispeten fazla olması, periyodik Green fonksiyonu ve temel fonksiyonlar arasındaki etkileşimlerinin hesaplanma hızının arttırılması ile ilgili daha fazla araştırma yapılması gerektiğinin altını çizmektedir.

Tablo 2. [300-700] nm dalgaboyu aralığında çekirdek-kabuk şekilli nanoparçacıklardan oluşan çok katmanlı, 2B periyodik dizilerinin yansıtırlığının çözümü için gerekli hesaplama zamanı. Saniye cinsinden hesaplama zamanları: (i) matris dolumu, (ii) diğer tüm hesaplamalar (aradeğerleme ve çözüm) ve (iii) FDTD çözümünde tek bir işlemci için simülasyon süresi.

(Solution of reflectivity by multilayered, 2-D periodic array of core-shell nanoparticles from 300 nm to 700 nm. Computation times in seconds: MoM matrix filling, all other computations (interpolation and solution), and FDTD solution assuming only one processor.)

#	Matris dolumu	Aradeğerleme ve çözüm	FDTD
1 katman	1060	66	17760
2 katman	1285	70	19200
3 katman	1285	79	19200
5 katman	1285	90	21220
7 katman	1285	98	26880

Bu paragrafta, önerilen yöntemin farklı ortamlarla doldurulmuş fiziksel katmanlarda da etkili olduğunu göstereceğiz. Silikon alt katman üzerinde dielektrik katsayısı $\varepsilon_r^d = 16$ olan dielektrik malzeme ve havadan oluşan katmanlar üst üste yığılmış durumdadır. Katmanların kalınlığı eşit ve 84 nm'dir. Silikon alt katman üzerindeki ilk katman hava ile doldurulmuştur. Her katman, 26 nm çapı olan gümüş kürelerden oluşan ikili periyodik diziyi içerir. Bu yapının önerilen yöntemle tahmin edilen yansıtırlığı, Lumerical FDTD ile elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmış olup, bu karşılaştırıma sonuçları Şekil 4'te gösterilmiştir. Önerilen yöntem ve Lumerical FDTD eğrileri arasındaki uyum mükemmeldir. Yüksek frekanslarda gözlenen küçük sapmalar, kürelerin rezonanslı yapısından kaynaklanmaktadır. Simülasyonlar sırasında gözlendiği gibi, gümüşün yüksek frekanslardaki dielektrik sabitinde küçük bir değişiklik, yansıtırlıkta



Şekil 4. Silikon alt katman üzerine yığılan hava ve dielektrik katmanların içine gömülü gümüş nanoparçacıklardan oluşan ikili periyodik diziler için yansıtırlık. En üst katman, normal açıda gelen düzlem dalgayla uyarılmıştır

(Reflectivity for an incresing number of layers of silver nanoparticles in alternating air and dielectric layers above a silicon substrate. The top of nanoparticles is illuminated at norman incidence.)

gözle görülür bir değişime yol açabilir. Genel olarak önerilen yöntem kullanılarak elde edilen sonuçlarda hafif mavi bir kayma gözlenebilir. Önerilen yöntem sonuçlarında, iki veya daha fazla katman için $\lambda_o =$ 307 nm'de belirgin bir minimum görülmektedir. Bu özellik önerilen yöntem simülasyonlarına özgüdür. Bu denli belirgin bir minimum, fiziksel nedenlerden kaynaklanıyor olabilir ve yapı içerisindeki yüksek dereceli yüzey modlarının uyarılmasına bağlı olabilir [56]. Ortamda kürelerin olmadığı durumda ilk yüzey modu teorik olarak $\lambda_o = 314,1 \text{ nm'de gözlenir.}$ Bu nedenle $\lambda_o = 307 \text{ nm'deki}$ minimum, dielektrik katmanda gümüş kürelerin bulunmasından dolayı hafif değişime uğrayan yüzey modlarının uyarılmasından kaynaklanabilir. Bu modlarla ilişkili EM alanın dielektrik katmanlarda sınırlı kalmasından ötürü bu modlarda saçılan enerji ağırlıklı olarak küreler içinde harcanmaktadır. Ayrıca bu sınırlamadan ötürü, bir katmandaki modların diğer katmanlardaki yüzey modlarıyla etkileşme olasılığının da çok düşük olması beklenmektedir. Yansımada gözlenen ilk minimum, birinci dielektrik katmanın (ikinci katman) varlığıyla örtüştüğü ve gerçekleştiği frekansın katmanların sayısına bağlı olmadığı söylenebilir. Ancak bu minimum Lumerical programı kullanılarak elde edilen sayısal sonuçlarda gözlenmemiş olup, bu modların gerçekte var olup olmadığını ve bu modların Lumerical sonuçlarında neden gözlenmediğini açıklamak için daha fazla araştırma yapılması gerekmektedir.

4. Sonuçlar (Conclusions)

Katmanlı dielektrik ortamlarda gömülü, EM dalgaların geçebildiği objelerden oluşan ortak periyotlu ikili dizilerden EM saçılma simülasyonu için yeni bir yöntem ortaya konulmuştur. Yöntem, sonsuz homojen ortamda 2B periyodik Green fonksiyonu kullanılarak temel fonksiyonlar ve test fonksiyonları arasındaki elektrik ve manyetik etkileşimlerin hesaplanmasını gerektirmektedir. Yöntemin başlıca özelliği, katmanlar arasındaki arayüzler üzerinde eşdeğer akımların dahil edilmesi, bu sayede bitişik olmayan katmanlar arasındaki EM etkileşimlerin ayrılmasının sağlanmasıdır. Bunun sonucunda, çok katmanlı Green fonksiyon kullanan integral denklem çözücülerin aksine (i) katmanlı ortamlar için Green fonksiyonunun kullanımının önüne geçilmiştir; (ii) nihai denklemler sisteminde obje sınırları üzerindeki EM akım yoğunluğu ile ilişkili bilinmeyenler elimine edilmistir; (iii) nihai denklemler sisteminin cözümündeki karmaşıklığın, katman sayısına bağlı olarak doğrusal artması sağlanmıştır.

Bu çalışmada (i) silikon bir alt katman üzerine yerleşik çekirdekkabuk nanoparçacıklardan oluşan çok katmanlı, ikili periyodik dizilerin ve (ii) hava ve dielektrik katmanlarına gömülü gümüş nanokürelerden oluşan ikili periyodik dizilerin yansıtırlığı için sayısal sonuçlar sunulmuştur. Elde edilen sayısal sonuçlar, FDTD tabanlı ticari program kullanılarak elde edilen sonuçlarla oldukça uyumludur. Bununla birlikte önerilen yöntem, hesaplama zamanını FDTD hesaplama zamanına kıyasla 1/10'dan fazla kısaltmıştır. Geleceğe yönelik olarak, 2B sonsuz ortamlardaki ikili periyodik yapılar için önerilen yöntemdeki matris elemanlarının hesaplamasının hızının arttırılmasına yönelik daha fazla çalışma yapılmalıdır. Ayrıca düzlemsel olmayan arayüzler içeren uygulamalara ilişkin çalışmalar da yapılmalıdır. Arayüzler üzerinde, özellikle de objelere aşırı yakın bölgelerde uyarlamalı (adaptive) geometrik örgü geliştirmeye yönelik çalışmalar da yapılabilir.

Kaynaklar (References)

- Chew, W.C., Waves and Fields in Inhomogeneous Media, Wiley-IEEE Press, New York, A.B.D., 1999.
- Michalski A. and Zheng D., Electromagnetic scattering and radiation by surfaces of arbitrary shape in layered media. Part I: Theory, IEEE Trans Antennas Propag., 38 (3), 335-344, 1990.

- Kristensen P., Mork J., Lodahl P., and Hughes S., Decay dynamics of radiatively coupled quantum dots in photonoc crystal slabs, Phys. Rev. B, Art. no. 075305, 83 (7), 2011.
- Okhmatovski V., Yuan M, Jeffrey I., Phelps R., A three-dimensional precorrected FFT algorithm for fast method of moments solutions of the mixed-potential integral equation in layered media, IEEE Trans. Microw. Theory Technol., 57 (12), 3505-3517, 2009.
- 5. Baba Y. and Rakov V., Electromagnetic models of the lightning return stroke, J. Geophys. Res., 112, 1-7, 2007.
- Firoozy N. et al., A controlled experiment on oil release beneath thin sea ice and its electromagnetic detection, IEEE Trans. Geosci. Remote Sens., 56 (8), 4406-4419, 2018.
- Mautz J. R., Harrington R.F., Electromagnetic scattering from a homogeneous material body of revolution, Arch. Elektr. Uebertrag., 33, 71-80, 1979.
- Rao S.M., Wilton D. R., E-Field, H-Field, and combined field solution for arbitrarily shaped three dimensional dielectric bodies, Electromagnetics, 10, 407-421, 1990.
- 9. Harrington R. F., Field Computation by Moment Method, Wiley-IEEE Press, Piscataway, NJ, USA, 1993.
- Dardenne X. and Craeye C., Method of moments simulation of infinitely periodic structures combining metal with connected dielectric object, IEEE Trans. Antennas Propag., 56 (8), 2372-2380, 2008.
- Guerin N., Craeye C., and Dardenne X., Accelerated computation of the free space Green's function gradient of infinite phased arrays of dipole, IEEE Trans. Antennas Propag., 57 (10), 3430-3434, 2009.
- Ozdemir N. A. and Craeye C., An efficient integral equation-based analysis of finite periodic structures in the optical frequency range, J. Opt. Soc. Am. A, 30 (12), 2510-2518, 2013.
- Eibert T., Volakis J., Wilton D., and Jackson D., Hybrid FE/BI modeling of 3D doubly periodic structures utilizing triangular prismatic elements and an MPIE formulation accelerated by the Ewald transformation, IEEE Trans. Antennas Propag., 47 (5), 843-850, 1999.
- Gallinet B., Kern A. M., and Martin O. J. F., Accurate and versatile modeling of electromagnetic scattering on periodic nanostructures with a surface integral approach, J. Opt. Soc. Am. A, 27 (10), 2261-2271, 2010.
- Araujo M. G., Tabaoda J. M., Solis D. M., Rivero J., Landesa L., and Obelleiro F., Comparison of surface integral equation formulations for electromagnetic analysis of plasmonic nanoscatterers, Opt. Express, 20 (8), 9161-9171, 2011.
- Marly N., Baekelandt B., De Zutter D., and Pues H. F., Integral equation modeling of the scattering and absorption of multilayered doubly-periodic lossy structures, IEEE Trans. Antennas Propag., 43 (11), 1281-1287, 1995.
- Trintinalia L. C. and Ling H., Integral equation modeling of multilayered doubly periodic lossy structures using periodic boundary condition and a connection scheme, IEEE Trans. Antennas Propag, 52 (9), 2253-2261, 2004.
- Aksun M. I. and Mittra R., Derivation of closed-form Green's functions for a general microstrip geometry, IEEE Trans. Microw. Theory Tech., 40 (11), 2055-2062, 1992.
- Michalski K. A., Extrapolation methods for Sommerfeld integral tails, IEEE Trans. Antennas Propag., 46 (10), 1405-1418, 1998.
- Boix R. R., Mesa F., and Medina F., Application of total least squares to the derivation of closed-form Green's functions for planar layered media, IEEE Trans. Microw. Theory Tech., 55 (2), 268-280, 2007.
- **21.** Mosig J. R., The weighted averages algorithm revisited, IEEE Trans. Antennas Propag., 60 (4), 2011-2018, 2012.
- 22. Li X., Zheng S., Jeffrey I., Okhmatovski V. I., Closed-form evaluation of mixed potential shielded layered media Green's functions with spectral differential equation approximation method, IEEE Trans. Microw. Theory Tech., 70 (5), 2553-2565, 2022.
- Ren Y. et al., A quasi-mixed-potential layered medium Green's function for non-Galerkin surface integral equation formulations, IEEE Trans. Antennas Propag., 70 (3), 2070-2081, 2022.
- 24. Sharma S., Patel U. R., Ham S. V., Triverio P., A complete surface integral method for broadband modeling of 3D interconnects in stratified media, arXiv:1810.04030v2.
- 25. Tajdini M. M. and Mosallaei H., Characterization of large array of plasmonic nanoparticles on layered substrate: dipole mode analysis integrated with complex image method, Opt. Express, 19 (2), 173-193, 2011.

- 26. Chen Y. P., Sha W. E. I., Choy W. C. H., Jiang L., and Chew W. C., Study on spontaneous emission in complex multilayered plasmonic system via surface integral equation approach with layered medium Green's function, Opt. Express, 20 (18), 20210-21, 2012.
- Vujevic S., Krolo I., and Lovric D., Closed-form spectral-domain Green's functions for infinitesimal current source in multilayer soil, IEEE Trans. Electromagn. Compat., 62 (6), 2814-2822, 2020.
- Yang H. and Yilmaz A. E., A generalized singularity subtraction method for evaluating layered medium Green's functions, USNC/URSI Radio Science Meeting, Boston, MA, A.B.D., 81-82, 8-13 Temmuz, 2018.
- 29. Jia Y., Yu Z., Dai J., and Liu Q. H., Fast simulation of scattering problem for magnetodielectric materials with general anisotropy in layered media, IEEE Trans. Antennas Propag., 64 (11), 4785-4793, 2016.
- 30. Li. X and Okhmatovski V., Uniformly accurate electrostatic layered medium Green's function approximation via scattered field formulation, IEEE 20th Conference on Electrical Performance of Electronic Packaging and Systems (EPEPS), San Jose, CA, USA, 5-7 Ekim, 2020.
- Blezynski E. H., Blezynski M. K., Jaroszewicz T., Johnson W. A., Rivero J., Vipiana F., and Wilton D., Analytical treatment of the nearfield term of the Green fuction of planarly stratified media, 2018 International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA), Cartagena, Kolombiya, 683-686, 10-14 Eylül, 2018.
- 32. Blezynski E. H., Blezynski M. K., Jaroszewicz T., Johnson W. A., Rivero J., Vipiana F., and Wilton D., Nonsingular Laplacian representation of the asymptotic part of the layered medium Green function in the mixed potential formulation, 2019 International Conference on Electromagnetics in Advanced Applications (ICEAA), Granada, İspanya, 1080-1083, 9-13 Eylül, 2019.
- 33. Yang H. and Yilmaz A. E., A log-scale interpolation method for layered medium Green's functions, IEEE International Symposium on Antennas and Propagation & USNC/URSI National Radio Science Meeting, Boston, MA, A.B.D., 2495-2496, 8-13 Temmuz, 2018.
- Li D., Wilton D. R, Jackson D. R., Chen J., and Wang H., Efficient computation of Green's functions for lossy uniaxial anisotropic layered media, Radio Sci. 54 (3), 196-214, 2019.
- Arici E. K. and Yapar A., Numerical calculation of 2-D inhomogeneous media Green's function and some applications in electromagnetic scattering problems, IEEE Trans. Antennas Propag., 67 (1), 369-377, 2019.
- Hall R. C., Mittra R., and Mitzner K. M., Analysis of multilayered periodic structures using generalized scattering matrix theory, IEEE Trans. Antennas Propag., 36 (4), 511-517, 1998.
- Khali A. I. and Steer M. B., A generalized scattering matrix method using the method of moments for electromagnetic analysis of multilayered structures in waveguide, IEEE Trans. Antennas Propag., 47 (11), 2151-2157, 1999.
- ElMahgoub K., Yang F., and Elsherbeni A. Z., FDTD/GSM analysis of multilayered periodic structures with arbitrary skewed grid, IEEE Trans. Antennas Propag., 59 (12), 3264-3271, 2011.
- **39.** Ozdemir N. A., Craeye C., Ehrhardt K., and Aradian A., Efficient integral equation approach for metamaterials made of core-shell

nanoparticles at optical frequencies, 7th European Conference on Antennas and Propagation (EUCAP 2013), Gothenburg, İsveç, 1840-1842, 8-11 Nisan, 2013.

- 40. Ozdemir N. A., Tihon D., and Craeye C., Efficient analysis of high impedance metasurface with an interstitial-currents approach, V International Conference on Metamaterials and Nanophotonics (METANANO 2020), AIP Conference Proceedings 2300, 020094, 14-18 Eylül, 2020.
- **41.** Harrington R. F., Time-Harmonic Electromagnetic Fields, Wiley-IEEE Press, Piscataway, NJ, USA, 2001.
- **42.** Sefer A., Uslu M. A., and Sevgi L., Matlab-based 3-D MoM and FDTD codes for the RCS analysis of realistic objects, IEEE Antennas Propag.Mag., 57 (4), 122-148, 2015.
- 43. Malassis L., Masse P., Treguer-Delapierre M., Mornet S., Weisbecker P., Kravets V., Grigorenko A., and Barois P., Bottom-up fabrication and optical characterization of dense films of meta-atoms made of coreshell plasmonic nanoparticles, Langmuir, 29 (5), 1551-1561, 2013.
- 44. LUMERICAL Solutions Inc., https://www.lumerical.com/tcadproducts/fdtd/.
- 45. Craeye C., Radu X., Schuchinsky A., and Capolino F., Fundamentals of method of moments for artificial materials, Metamaterials Handbook, Editor: Capolino F., Taylor and Francis, New York, A. B. D., 2009.
- Press W., Teukolsky S., Vetterling W., Flannery B., Numerical Recipes in C, Cambridge University Press, Cambridge, Ingiltere, 2007.
- Dassault Systems, https://www.3ds.com/productsservices/simulia/products/cst-studio-suite/.
- 48. Bodur H., Çimen S., Single layer reflectarray antenna design with variable size patches for X-band applications, Journal of the Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University, 34 (4), 1861-1869, 2019.
- 49. Özgönül M.C., Seçmen M., Size-reduced printed log-periodic dipole antenna for wireless communication applications, Journal of the Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University, 35 (3), 1631-1645, 2020.
- **50.** Uçar M.H.B., Uras E., Numerical analysis, prototype implementation and in-vitro measurement of MICS/ISM band microstrip implant antennas for medical implant communication systems, Journal of the Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University, 37 (4), 2177-2191, 2022.
- 51. SOPRA database, http://www.sopra-sa.com.
- Bass M., De Cusatis C., Enoch J., Lakshminarayanan V., Li G., MacDonald C., Maha-jan V., Van Stryland E., Handbook of Optics, McGraw-Hill, New York, A. B. D., 2009.
- Palik E. D., Handbook of Optical Constants of Solids, Academic Press, Cambridge, A. B. D., 1991.
- Rao S., Wilton D., and Glisson A., Electromagnetic scattering by surfaces of arbitrary shape, IEEE Trans. Antennas Propag., 30 (3), 409-418, 1982.
- Newman E., Generation of wide-band data from the method of moments by interpolating the impedance matrix [EM problems], IEEE Trans. Antennas Propag., 36 (12), 1820-1824, 1988.
- Pozar D. M. and Schaubert D. H., Scan blindness in infinite phased arrays of printed dipoles, IEEE Trans. on Antennas and Propag., 32 (6), 602-610, 1984.