



T.C.
KONYA TEKNİK ÜNİVERSİTESİ
LİSANSÜSTÜ EĞİTİM ENSTİTÜSÜ



METAMALZEME TABANLI PLAZMONİK
NANOANTENLER İLE MÜKEMMEL
SOĞURUCU TASARIMI VE ANALİZİ

Vaqif ZEYNALOV

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Elektrik Elektronik Mühendisliği Anabilim Dalı

Eylül-2022
KONYA
Her Hakkı Saklıdır

TEZ KABUL VE ONAYI

Vaqif ZEYNALOV tarafından hazırlanan “**Metamalzeme Tabanlı Plazmonik Nanoantenler ile Mükemmel Soğurucu Tasarımı ve Analizi**” adlı tez çalışması 20/09/2022 tarihinde aşağıdaki jüri tarafından oy birliği / oy çokluğu ile Konya Teknik Üniversitesi Lisansüstü Eğitim Enstitüsü Elektrik Elektronik Mühendisliği Anabilim Dalı’nda YÜKSEK LİSANS TEZİ olarak kabul edilmiştir.

Jüri Üyeleri

İmza

Başkan

Prof. Dr. Muciz ÖZKAN

.....

Danışman

Doç. Dr. Seyfettin Sinan GÜLTEKİN

.....

Üye

Dr. Öğr. Üyesi Dilek UZER

.....

Yukarıdaki sonucu onaylarım.

Prof. Dr. Saadettin Erhan KESEN
Enstitü Müdürü

TEZ BİLDİRİMİ

Bu tezdeki bütün bilgilerin etik davranış ve akademik kurallar çerçevesinde elde edildiğini ve tez yazım kurallarına uygun olarak hazırlanan bu çalışmada bana ait olmayan her türlü ifade ve bilginin kaynağına eksiksiz atıf yapıldığını bildiririm.

DECLARATION PAGE

I hereby declare that all information in this document has been obtained and presented in accordance with academic rules and ethical conduct. I also declare that, as required by these rules and conduct, I have fully cited and referenced all material and results that are not original to this work.

İmza

Vaqif ZEYNALOV

Tarih: 04.11.2022

ÖZET

YÜKSEK LİSANS TEZİ

METAMALZEME TABANLI PLAZMONİK NANOANTENLER İLE MÜKEMMEL SOĞURUCU TASARIMI VE ANALİZİ

Vaqif ZEYNALOV

Konya Teknik Üniversitesi
Lisansüstü Eğitim Enstitüsü
Elektrik Elektronik Mühendisliği Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Seyfettin Sinan GÜLTEKİN

2022, 62 Sayfa

Jüri
Prof. Dr. Muciz ÖZKAN
Doç. Dr. Seyfettin Sinan GÜLTEKİN
Dr. Öğr. Üyesi Dilek UZER

Günümüzde nanoteknoloji alanında yapılan AR-GE çalışmaları ve araştırma merkezlerinin bu konuya ayırdığı ilgi alaka ve maddi destek artmaktadır. Kısa bir literatür taraması yapıldığında yüzeyi geliştirilmiş raman spektroskopisi (SERS), kızılötesi soğurma spektroskopisi (SEIRA) gibi spektroskopi yöntemleri, nanoantenler ve mükemmel soğurucularla ilgili araştırmaların yapıldığı ve araştırmalarında devam ettiği görülmektedir. Plazmonik nanoyapıların mühendisliği, son zamanlarda yüzey destekli algılama yoluyla biyoalgılama için güçlü bir zemin oluşturmuş ve moleküler çalışmalarda yeni uygulamaları teşvik etmiştir. Özellikle, tasarlanmış plazmonik nanoyapılara sahip SEIRA, uzak alan ölçümleriyle ince bir molekül katmanının farklı kızılötesi titreşim izlerini tespit etme konusunda benzersiz bir yeteneğe sahiptir.

Metamalzemeler, doğada bulunmayan yapay malzemelerdir. Nano boyuta sahip materyaller yapay şekilde elde edildiğinde metamalzeme olarak düşünülebilir. Bunlara örnek, nanoantenlerde kullanılan altın, gümüş, alüminyum gibi metaller verilebilir. Gümüş hem görünür hem yakın-kızılötesi, hem de diğer dalga boylarında akım malzemelerinin en düşük kayıplarını sergilediği bölgelerdir. Alüminyum, görünür dalga boylarında çok az bir avantaja sahiptir. Altın ise görünür ve yakın-kızılötesinde eşit derecede iyi performans gösterir. Alüminyumun hem gümüş hem de altın üzerinde, doğal ortamlarda kimyasal olarak kararlı olması, onu plazmonik biyosensörler için çok uygun hale getirme avantajı vardır. Bununla birlikte, ~470 nm’de bir bantlar arası geçiş, 600 nm’nin altındaki dalga boylarında altındaki kayıpları büyük ölçüde artırır. Alüminyum, ultraviyole rejiminde (<330 nm) en iyi plazmonik malzemedir.

Her biyosensör tabanlı nanoantenin sahip olduğu seçicilik, tekrarlanabilirlik, kararlılık, duyarlılık ve doğrusalılık gibi nitelikleri vardır. Bu tez çalışmasında bu özellikler dikkate alınarak, 3 farklı iletken (Altın, Gümüş ve Alüminyum) ve 3 farklı dielektrik (SiO_2 , MgF_2 ve Al_2O_3) malzeme kullanılarak, “Metamalzeme Tabanlı Plazmonik Nanoantenler ile Mükemmel Soğurucu Tasarımı ve Analizi” yapılmıştır. Tezin ilk giriş kısmında farklı kimyasal analiz örnekleri hakkında kısa bilgiler verilmiş ve yapılan çalışmaların amaçlarıyla birlikte analiz örnekleri belirtilmiştir. Kullanılan metallerin genel özellikleri verilmiş, yapılan mükemmel soğurucular birbiri ile kıyaslanmış ve en iyi soğurmaya sahip 3 nanoanten ile DNT ve PMMA moleküllerinin algılama bilirlilikleri ortaya konulmuştur. Yapılan deneyler sonucunda altın ve gümüş kullanılan nanoantende barın (yama) sağ ve sol uzunlukları artırıldığı zaman soğurulmanın arttığı, alüminyum kullanılan nanoantenlerde ise soğurulmanın azaldığı görülmüştür. Sonuç olarak en iyi soğurma AlSiO_2AL (Alüminyum Silika) yapısındaki MIM (Metal İnsulator Metal) nanoanten yapısında bulunmuş ve tasarlanan antenler kızılötesi spektroskopi için uygun görülmüştür. Yapılan tez çalışması gelecekteki çalışmalara yön verebileceği düşünülmektedir.

Anahtar Kelimeler: Bioalgılama, Plazmonik, Metamalzeme, Mükemmel Soğurucu, Nanoanten.

ABSTRACT

MS THESIS

PERFECT ABSORBER DESIGN AND ANALYSIS WITH METAMATERIAL-BASED PLASMONIC NANOANTENNAS

Vagif ZEYNALOV

**Konya Technical University
Institute of Graduate Studies
Department of Electrical Electronics Engineering**

Advisor: Assoc. Prof. Seyfettin Sinan GÜLTEKİN

2022, 62 Pages

Jury

Prof. Muciz ÖZCAN

Assoc. Prof. Seyfettin Sinan GÜLTEKİN

Asst. Prof. Dilek UZER

Today, the interest and financial support devoted to this subject by R&D studies and research centers in the field of nanotechnology is increasing. When a short literature review is made, it is seen that researches on spectroscopy methods such as surface-enhanced Raman spectroscopy (SERS), infrared absorption spectroscopy (SEIRA), nanoantennas and excellent absorbers have been made and researches continue. The engineering of plasmonic nanostructures has recently established a strong basis for biosensing via surface-assisted sensing and has spurred new applications in molecular studies. In particular, SEIRA with engineered plasmonic nanostructures has the unique ability to detect different infrared vibrational traces of a thin layer of molecules by far-field measurements.

Metamaterials are artificial materials that are not found in nature. When nano-sized materials are obtained artificially, they can be considered as metamaterials. Examples of these are metals such as gold, silver, aluminium used in nanoantennas. Silver is where it exhibits the lowest losses of current materials at both visible, near infrared, and other wavelengths. Aluminium has little advantage at visible wavelengths. Gold performs equally well in visible and near-infrared. Aluminium has the advantage over both silver and gold that it is chemically stable in natural environments, making it well-suited for plasmonic biosensors. However, an interband transition at ~470 nm greatly increases losses at wavelengths below 600 nm. Aluminium is the best plasmonic material in the ultraviolet regime (< 330 nm).

Each biosensor-based nanoantenna has properties such as selectivity, repeatability, stability, sensitivity, and linearity. In this thesis study, "Perfect Absorber Design and Analysis with Metamaterial Based Plasmonic Nanoantennas" was carried out by using 3 different conductors (Gold, Silver and Aluminium) and 3 different dielectric (SiO_2 , MgF_2 and AlO_2) materials, considering these properties. In the first introductory part of the thesis, brief information about different chemical analysis samples is given and analysis examples are given along with the aims of the studies. The general properties of the metals used were given, the excellent absorbers were compared with each other and the detectability of the 3 nanoantennas with the best absorption and DNT and PMMA molecules were revealed. As a result of the experiments, it has been observed that when the right and left lengths of the bar (patch) are increased in the nanoantenna using gold and silver, the absorption increases, and the absorption decreases in nanoantennas using aluminium. As a result, the best absorption was found in the MIM (Metal Insulator Metal) nanoantenna structure in AlSiO_2AL (Aluminium Silica) structure and the designed antennas were deemed suitable for infrared spectroscopy. It is thought that the thesis study can give direction to future studies.

Keywords: Biosensing, Plasmonic, Metamaterial, Perfect Absorber, Nanoantenna.

ÖNSÖZ

Onların yaptıkları karşısında, yapılan çalışmalarımın değeri nanoboyutlardan bile küçük olsa, bu tezi AZERBAYCAN ve TÜRKİYE halkının tüm ŞEHİTLERİNE ithaf ediyorum.

Çalışmalarımda değerli bilgi ve tecrübeleriyle bana yol gösteren, yardımlarını esirgemeyen, yüksek lisans tezim ile ilgili gerçekleştirdiğim çalışmalarda sonsuz sabır, hoşgörü ve ilmi ile yolumu aydınlatan danışmanım Konya Teknik Üniversitesi Elektrik-Elektronik Mühendisliği Bölümü öğretim üyesi Doç. Dr. Seyfettin Sinan GÜLTEKİN'e minnettarım.

Bu süreçte beni maddi, manevi destekleyen, başta babam İlgar ZEYNALOV olmakla, AİLEME ve akrabalarım, dualarını her zaman hissettiğim, kasabamdaki büyüklerime ve küçüklerime, okul zamanından bu güne kadar bana destek olan okul müdürüm Sevda Qocayeva'ya, her türlü yardımı benden esirgemeyen arkadaşlarıma ve özellikle Konya'da yanımda olan Ağamirze Ahmedov, Muhammed İsayev, Muhammed Mansimli'ye ve ağır trafik kazası geçirdikten sonra yanında bulunamadığım Samur Gülahmedov'a, 2019-2022 yılları tüm elektrik elektronik bölümü profesör, doçent ve araştırma görevlisi hocalarıma, özellikle, Ahmet Murat Erturan ve Ayşe Özge Çınar'a, kitap, e-kitap, ve rahat çalışma alanı ihtiyaçlarımı anında sağladıkları için KONYA TEKNİK ÜNİVERSİTESİ KÜTÜPHANE'si ailesine ve misafirperverliğinden dolayı tüm Konya halkına teşekkür ederim.

Rather than these, special thanks go to Alejandro Jiménez Sáez and Mihails Scepanskis.

Vagif ZEYNALOV
KONYA-2022

İÇİNDEKİLER

ÖZET	iv
ABSTRACT.....	v
ÖNSÖZ	vi
İÇİNDEKİLER	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR	ix
1. GİRİŞ	1
1.1. Farklı Tahlil Örnekleri	1
2. KAYNAK ARAŞTIRMASI	4
3. MATERYAL VE YÖNTEM.....	9
3.1. Metamalzemeler.....	9
3.1.1. Plazmonikler	9
3.1.2. Yüzey plazmon polaritonları	10
3.1.3. Metaller.....	10
3.2. Spektreskopi.....	13
3.2.1. Işık	13
3.2.2. Raman Spektroskopisi	15
3.2.3. Diğer spektroskopî	15
3.2.4. Raman Efektî Prensebi.....	15
3.2.5. Raman spektroskopîsinin uygulama alanları ve avantajları	17
3.2.6. SERS.....	19
3.2.7. SERS Prensebi	20
3.2.8. SEIRA	21
3.3. Nanomateryallerin Fotonsal Özellikleri.....	23
3.3.1. Fotonun soğrulması, yayınlanması ve saçılması.....	23
3.3.2. Fotonların Metallerden Geçmesi	24
3.3.3. Metal Parçacıkların Sönme Katsayısı	26
3.3.4. Renkler, Altın ve Gümüş Parçacıklarının Rolü	29
3.3.5. Yarı iletkenler	30
3.3.6. Nanoölçekli yarı iletkenlerin Band aralığını ayarlama	30
3.3.7. Nano parçacıkların özellikleri.....	30
4. NANOANENLER VE MODELLENMESİ	31
4.1. Terahertz frekansları	32
4.2. Terahertz frekanslarında metallerin özellikleri ve nanoanten modellemesi	33
4.3. MATLAB.....	37
4.4. ANSYS LUMERİCAL FDTD.....	38
5. ARAŞTIRMA VE SONUÇ	40

5.1 PMMA	40
5.2. DNT	41
5.3. Tasarlanan Nanoantenler	42
5.3.1. Altın Silika Altın.....	43
5.3.2. Altın MGF2 Altın	44
5.3.3. Altın Alümina Altın	46
5.3.4. Gümüş Silika Gümüş	47
5.3.5. Gümüş MGF2 Gümüş.....	48
5.3.6. Gümüş Alümina Gümüş	49
5.3.7. Alüminyum Silika Alüminyum	51
5.3.8. Alüminyum MGF2 Alüminyum	52
5.3.9. Alüminyum Alümina Alüminyum.....	53
5.4. Üzerine DNT koyulduktan sonra	55
5.4.1. Karşılaştırma	57
5.5. Üzerine PMMA koyulduktan sonra	58
5.5. Sonuçlar	60
KAYNAKLAR	61

SİMGELER VE KISALTMALAR

Simgeler

v_i	- i Ortamındaki Yayılma Hızı
ν	- Frekans (ilgili dalga boyunun)
λ_i	- i Ortamındaki dalga boyu
E_n	- İzin Verilen Dönme Veya Öteleme Titreşimi Enerji Seviyeleri Arasındaki Bir Enerji Sıçraması
E	- Dielektrik Değeri
γ	- Sönümleme katsayısı
h	- Plank Sabiti
n_e	- Serbest Elektronların Yoğunluğu
m	- Elektronun Etkin Kütlesi
C	- Sönme Tesir Kesiti
τ	- Taşıyıcı Ömrü
n_{eff}	- kırılma İndisi
α	- Soğrulma Katsayısı

Kısaltmalar

AR-GE	- Araştırma Geliştirme
ELİSA	- Enzim Bağlantılı İmmünosorbent Tahlilidir
SEIRS	- Spektroskopi Yüzeyle Güçlendirilmiş Kızılötesi Spektroskopi
SERS	- Yüzeyle Güçlendirilmiş Raman Spektroskopisi
CARS	- Yüzeyle Geliştirilmiş Tutarlı Anti-Stokes Raman Saçılması
TERS	- Uç İle Geliştirilmiş Raman Spektroskopisi
SEM	- Scanning Electron Microscopy
TEM	- Transmission Electron Microscopy
FIB	- Odaklanmış İyon Demeti; (Focused İon Beam)
AIF3	- Alüminyum Fluorür Üç Hidrat
GLAD	- Glancing Angle Deposition
DNA	- Deoxyribonucleic Acid
FDTD	- Finite-Difference Time-Domain
LC	- Resonant Circuit
COMSOL-CST	- Anten Simülasyonları için Yazılım
RT-Qpcr	- Quantitative Reverse Transcription PCR
PVC	- Polyvinyl Chloride
PMMA	- Polymethyl Methacrylate
DNT	- 2,4-Dinitrotoluene
EM	- Elektromanyetik
NP	- Nanoparçacık
LSPR	- Localized Surface Plasmon Resonance
SLR	- Surface Lattice Resonance
BIC	- Bound States in The Continuum
UV	- Ultraviole
THz	- Terahers

FTIR	- Fourier Transform İnfrared
TM	- Tek Modlu
EE	- Elektromanyetik Geliştirme
CE	- Kimyasal Geliştirme
LSP	- Localized Surface Plasm
REF	- Raman Geliştirme Faktörü
SP	- Surface Plasmon



1. GİRİŞ

Nanoteknoloji alanında yapılan AR-GE çalışmalarını ve araştırma merkezlerinin bu konuya ayırdığı ilgi ve kaynak miktarı hızla artmaktadır. Kısa bir araştırma yapıldığı zaman, Feynman'ın “Dibe Kadar Çok Yer Var” (Feynman, 1959) şeklindeki ifadesinden (bu ifade ve tarih Nanobilim'in başlangıç tarihi olarak görülüyor) sonra 2010'a (yaklaşık 50 yıl) kadar yayımlanan makale sayısının, 2010-2022 yılları arasında yayımlanan makale sayısından çok çok az olduğu görülür. Bu artan ilgi, nanoteknolojinin yaratacağı etkinin birinci sanayi devriminden daha fazla olacağı düşünülmüştür (Hall, 2004).

Kuantum fiziğinin yasalarına uygun olan nanoantenler, büyük ölçekli antenler gibi davranmazlar (Hess, 2003). Terahers mertebesinde çalışan bu yeni nesil antenler, ileri mikrodalga anten teorisinin gelişmesinden ortaya çıkmıştır.

Plazmonik nanoantenler ışığı kırılma sınırının ötesinde odaklamalarıyla bioalgılamada yeni fırsatlar sunmaktadırlar (Adato et al., 2009).

Oldukça hassas ve özel bir nanoanten tasarımına odaklanan bu tez çalışması yüzeyi geliştirilmiş titreşim spektroskopisi teoremine dayanır ve protein tespiti, hastalık teşhisi gibi uygulamalar için temel olabilecek bir çalışma arz eder.

1.1. Farklı Tahlil Örnekleri

1) Biokimyasal tahlil örnekleri:

a) İmmüno kimyasal prosedürlerle hedef proteinlerin hassas bir şekilde tespiti ve kalite kontrolü oldukça yaygındır. Bu yöntem Enzim bağlantılı immünosorbent tahlilidir (ELİSA). Burada hedef proteine bir antikör kullanılır (de la Chapelle & Pucci, 2013). ELİSA yöntemi Engvall ve Perlman tarafından teorik olarak ileri sürülmüş, Voller, Bidwell ve Barlett tarafından geliştirilerek uygulanmıştır (Voller, Bidwell, & Bartlett, 1976). Kullanım şekline örnek olarak, bağlı enzim bir floresan boyayla bağlanarak saptanır (de la Chapelle & Pucci, 2013).

b) Akrilamid jelleri gibi negatif yüklü proteinler, moleküller ağırlıklarına ve hareketliliklerine göre pozitif elektrottan negatif elektrota göç ederek elektroforez ile uzlamsal olarak ayrılabilir ve karakteristik şeritler verirler (bu şeritlerin yarattığı grafik, Batı grafiği olarak adlandırılır) (de la Chapelle & Pucci, 2013).

2) Gümüş veya altın yüzeylerde optik plazma rezonanslarının immunreaksiyonunun kombinasyonu ile protein tespiti

a) 1970'lerin başlarından kullanılan en eski ve en başarılı saf optik yöntemdir. Bu teknikle antikorları ve proteinleri bağlamak için hazırlanmış gümüş bir tabakanın arayüzünde elektromanyetik yüzey dalgalarını kullanır. Gümüş film bir prizma üzerinde hazırlanır. Prizma tarafından aydınlatma altında, yüzeysel plazmon polaritonları küçük bir açısız aralıkta rezonans haline gelir. Bu rezonans, yüksek hassasiyetle kaydedilebilen bir immün reaksiyon tarafından hafifçe kaydırılır.

b) Küçük altın kürelerdeki plazma rezonansları, immün reaksiyonları saptamak için umut verici bir yöntemdir. Çok ince bir cam tabaka ile korunan Raman spektrumlu moleküller küreler üzerinde soğruluyor. Küreler özel bir antikorla uygunlaştırılmıştır.

3) Proteinin etiketsiz algılanması

Proteinin etiketsiz tespiti herhangi bir immün reaksiyon olmadan kızılötesi veya Raman spektroskopisi ile bilinen spesifik titreşim spektrumlarını doğrudan gözlemleye biliyor. Metal nanoparçacıkların “sıcak taraflarındaki” plazmon rezonansları sonucu “sıcak taraflara” soğrulan küçük boyutlardaki proteinlerin kızılötesi veya Raman spektrumlarını artıracaktır. Bu tür spektroskopi yüzeyle güçlendirilmiş kızılötesi spektroskopisi (SEIRA) veya yüzeyle güçlendirilmiş Raman spektroskopisi (SERS) olarak adlandırılıyor. Yeni bir spektroskopi olan yüzeyle geliştirilmiş tutarlı anti-stokes Raman saçılması (CARS) son zamanlarda araştırılmaya başlanılmıştır (de la Chapelle & Pucci, 2013).

1970'lerde SERS'in keşfi birçok araştırmacını nanoparçacıklara yakın atom ve moleküllerinin radyasyonunu araştırmaya sevk etti (Ruppın, 1982) Uzun süre pratik ve teorik incelenmesine karşın, SERS'in açık bir şekilde anlaşılması mümkün olmamıştır (Chew, 1987). Bu konudaki temel zorluklar iyi tanımlanmış metalik nanoyapıların eksikliği, sinyalin molekülün pozisyonuna ve aydınlatma polarizasyonuna aşırı duyarlılığı, molekülün yönüne duyarlılık dalga boyuna ve olası yüzey plazmon rezonanslarına bağımlılık gösterilebilir (Agio & Alù, 2013).

Biyomolekül algılama hem biyolojik hem de tıbbi teşhis uygulamalarında büyük bir etkileşim sağlar. Kızılötesi spektroskopisi, soğrulma spektrumlarını doğrudan ölçerek parmakizlerinin belirlenmesine izin verdiği için biyomoleküllerin algılanması için yeni fırsatlar sunar. Bununla birlikte, sinyal-gürültü hususları nedeniyle geleneksel kızılötesi spektroskopisi ile düşük konsantrasyonlarda biyomoleküllerin tespiti zordur. Son zamanlarda yüzey geliştirilmiş kızılötesi spektroskopi adlı bir teknikle biyomoleküllerden gelen sinyalleri artırmak için nanoyapılı yüzeylerin kullanılması ilgi görmeye başlamıştır (Ye & Crozier, 2020).

Bu tez çalışmasında bioalgılamada kullanılabilecek proteinlerin etiketsiz tespit edebilen nanoantenler tasarlanıp incelenmiştir.

Her biyosensör tabanlı nanoantenin sahip olduğu belirli nitelikler vardır. Bu özelliklerin aşağıdaki gibi sıralanabilir:

Seçicilik

Seçicilik nanoantenin en önemli özelliklerinden biridir. Seçicilik, bir nanoantenin diğer katkı ve maddelerden etkilenmeden, belirli numuneni tespit etme yeteneğidir.

Tekrarlanabilirlik

Biyosensör tabanlı nanoantenin çok sayıda özdeş deneysel numuneye aynı tepkileri verme yeteneğidir. Tekrarlanabilirlik, bir nanoantendeki dönüştürücünün kesinliği ve doğruluğu ile karakterize edilir. Bu, nanoantenin aynı türden farklı numuneler her ölçüldüğünde aynı sonuçları verme yeteneğidir.

Kararlılık

Kararlılık, dış etkenlere karşı duyarlılık derecesidir. Dış faktörler, ölçüm süresi çıkış sinyallerinde bir kaymaya neden olabilir. Bu, nanoantenin kesinliğini ve doğruluğunu etkiler.

Duyarlılık

Tespit edilebilecek minimum madde miktarı, tespit limitinin ne olduğunu tanımlar. Bu özellik tıbbi konulardaki en önemli özelliklerden biridir.

Doğrusallık

Biyosensör tabanlı nanoantenin doğrusallığı, biyosensör tabanlı nanoantenin çözünürlüğü ve numune malzemesinin konsantrasyon aralığı ile ilgilidir. Biyosensör tabanlı nanoantenin çözünürlüğü, nanoanten yanıtında bir değişikliğe neden olmak için gereken madde konsantrasyonundaki en küçük değişiklik olarak tanımlanır. (Ziegler & Göpel, 1998)

2. KAYNAK ARAŞTIRMASI

Optik nanoanten üretimi ve SERS uygulamalarını araştıran, “Işınlanmış ve yüzeyi geliştirilmiş Raman spektroskopisi için optik nanoanten” başlıklı bu çalışmada, yüzeyi geliştirilmiş Raman spektroskopisi için optik nanoantenlere geniş şekilde bakılmış, teorik olarak optik nanoantenler ve onların üretilmesi, Raman saçılması, SERS, Sokes ve Anti-Stokes konuları geniş ele alınmıştır. Literatür taraması yapılarak farklı üretimli nanoantenlerin görüntüleri makaleye eklenmiştir. Bunlara örnek olarak, 20 ila 100 nm arasında değişen lineer altın nanoanten dizilerinin SEM görüntüsü; kimyasal indirgeme yöntemiyle üretilmiş altın nanoparçacıkların TEM görüntüsü; doğrudan odaklanmış iyon ışını tarafından üretilen mikro-makinelı GaAs membranı; doğrudan FIB litografisi ile üretilmiş çok katmanlı AlF_3 (50 nm kalınlığında)/GaAs üzerindeki ince çizgilerin; eğik kolonlar, zikzak kolonlar, sarmal kolonlar ve dikey kolonlar içeren GLAD yöntemiyle üretilmiş mikro yapıların görüntülerini sıralamak mümkündür. Makaleye özgü, merkezinde nokta bulanan dairesel şekilli nanoanten üretilmiş, nanoanteninin elektrik alan görüntüleri karanlık alan, yüzeyle güçlendirilmiş Raman saçılması (SERS) ve SEM görüntüleri, Fourier SERS görüntüsü; lineer olarak ortogonal polarizasyonlar için karanlık alan spektrumlarının resimleri makaleye ilave edilmiştir. Tasarlanan nanoantenin, raman yoğunluğu grafiklerine bakılmıştır (Awasthi, Goel, Agarwal, Rai, & Dubey, 2020).

“Etiketsiz Tek Moleküllü Yüzey-Geliştirilmiş Raman Spektroskopisi için Çok Yönlü DNA Origami Tabanlı Plazmonik Nanoanten” isimli bu çalışmada, SERS uygulamaları için yararlı 3D DNA origami nanoçatal şekilli nanoantenler tasarlanmıştır. Bu çalışma hem nanoparçacıkları hem de karmaşık analit molekülleri yüksek hassasiyetle birleştirmeye uygun nanoantenin tasarımının mümkün olduğunu göstermiştir. Nanoantenin uygun yapısal dinamikleri değerlendirilmiş ve en uygun köprü uzunluğu seçilmiştir. Nanoçatalın iki kolunu birbirine bağlayan DNA köprüsü, hedef analitin birleştirilmiş altın ve gümüş nanoparçacıkları arasında konumlandırılmasını sağlamıştır. Bu, birkaç nanometre boyutunda SERS sıcak noktaları üretmesi anlamına gelir ve 2.5nm civarında bile tek küçük moleküllerin ve hatta proteinlerin SERS yoluyla etiketsiz algılanmasının yapılması için yüksek bir alan geliştirilmesi sağlamıştır. Bu çalışmada da elektrik alan görüntülerine bakılmış, frekansın boşluk boyutuna ve yoğunluğun, raman kaymalarına oranları incelenmiştir (Tapio et al., 2021).

“Nano ölçekli ışık manipülasyonu için çeşitli optik nanoantenlerin aşındırma içermeyen yüksek verimli kesişimsel nanofabrikasyonu” adlı bu çalışmada, farklı şekillerde büyük ölçekli optik nanoantenler üretebilen çok yönlü bir nanofabrikasyon yöntemi sunulmuştur. Kuru aşındırma gerektirmeden kolloidal litografisinden üretilmiştir. Ayrıca hem metalik hem de tamamen dielektrik nanoantenler, yüksek verimli bir şekilde kolayca üretilir. Heteroyapının saçılma spektrumu, eksiton geçiş enerjisi ve plazmon rezonansı için hibrit sistemin enerjisi, bu iki modun ayırma enerjisi uygun formüllerle hesaplanmıştır. Nanodisklerin saçılma spektrumlarını ve yakın alan dağılımını Lumerical FDTD yazılımı ile modellenmiştir (Ma et al., 2022).

“Altın papyon şekilli nanoantenlerin nanolitografisi için elektron dozunun pozitif polimetil metakrilat direnci üzerine etkisi.” Başlıklı bu çalışmada Nanoantenler papyon şekillidir. Yüzey Geliştirilmiş Raman Spektroskopisi için düzenlenmiştir. Bu çalışmada, Raman Spektroskopisinde 532 nm dalga boyundaki lazer hattı ile kullanım için değişen geometrik aralıklara sahip birkaç papyonlu nanoanten üretilmiştir. Üretim, bir Raith Voyager cihazında, geliştirme, biriktirme ve metal kaldırma yapılarak, elektron ışını litografisi ile nanolitografiyi kullandı. Bu çalışma, 50 nm, 20 nm ve 10 nm olmak üzere 3 farklı boşluk boyutuna sahip 270 nm eşkenar kenar üçgen çiftlerinden oluşan özel bir papyon nanoanten geometrisini ve değişen elektron ışını dozlarının nanoantenin son yapısı üzerindeki etkisini araştırılmıştır (Campbell, Casey, & Triplett, 2022).

“Breathalyzer Tabanlı COVID-19 hızlı Testleri için Rezonans Metamalzeme Çipi ile Biyolojik Nanopartiküllerin Terahertz Empedans Spektroskopisi” adlı bu makalede covid testi için alternatif sunulmuştur. 1 dakikadan daha hızlı test yapabilen nanoantenler tasarlanmıştır. Yöntem biyolojik değildir ve terahertz spektroskopisi yapılırken virüslerin ve ilgili partiküllerin neden olduğu nano-mühendislikli bir indüktör-kapasitör (LC) rezonans metamalzeme çipinin rezonans frekansındaki bir kaymanın saptanmasına dayanır. Çip, bir dizi halinde düzenlenmiş ve plastik bir alkol ölçeği benzeri tek kullanımlık kapsül kiti içine yerleştirilmiş binlerce mikro antenden oluşuyor. Metamateryal tasarımı kullanarak sayısal simülasyonlar (COMSOL ve CST) ve deneysel sonuçlara ulaşıldıktan sonra, asemptomatik ve semptomatik koronavirüs hastaları ve sağlıklı bireylerle düşük ölçekli klinik denemeler yapıldı. Koronavirüs pozitif bireylerin, 0-1,5 GHz kayması gösteren sağlıklı bireylerin rezonans kaymasından tanısal olarak farklı olan yaklaşık 1,5 – 9 GHz iletim rezonans frekansında bir kayma gözlemlenmesi üzerine etkili bir şekilde tarandığı gösterilmiştir. Koronavirüs hastalarını taramanın ilk sonuçları, gerçek zamanlı kantitatif polimeraz zincir reaksiyonu (RT-qPCR)

sonuçlarıyla (nefes testi ile eş zamanlı olarak gerçekleştirilen) %88 uyum sağladı ve sonuç olarak pozitif tahmin edilen değer %87 ve negatif tahmin edilen değer 88% oldu (Sengupta, Khand, & Sarusi, 2022).

“Yüzeyi Geliştirilmiş Kızılötesi Spektroskopisi: Malzemelerin İşlevselliği” başlıklı bu makale derlemesinde aşırı yakın alan geliştirmelerine sahip plazmonik nanoantenlerden, ultra yüksek Q faktörlerine sahip fotonik ve dielektrik metarezonatörlere kadar, meta yüzey sensörleri için mevcut malzeme, geometri ve işlevsellik incelenmiştir. Bu çalışmada haç şekilli, dipol şekilli, papyon şekilli, u şekilli geometrilere sahip nanoantenler tasarlanmıştır. Tüm dielektrik rezonatörler benzer şekilde yüksek Q faktörlerine sahiptir. Ayrıca nanoantenlerin sönümleme katsayıları, ışımaları, yansımaları incelenip, karşılaştırılmıştır. E-alan dağılımları gözlemlenmiştir (John-Herpin et al.).

Artan diyabetli hasta sayısı nedeniyle insan kanındaki veya göz sıvısındaki glikoz konsantrasyonlarının tespiti ve ölçümü önem kazanmaktadır. “Rezonans Plazmonla Güçlendirilmiş SEIRA ve Temel Bileşen Analizi Kombinasyonu ile Karışık Şeker Çözeltilerinin Konsantrasyonlarını Tahmin Etme” isimli bu yayında plazmonik nanoanten tabanlı sensörlerin ayırt edici gücünün yanı sıra algılama sınırını da fizyolojik sınıra doğru çekilmesinden bahsediliyor. Plazmonik yüzeyi güçlendirilmiş kızılötesi soğrulma spektroskopisini fizyolojik olarak ilgili beş farklı sakkaritin, yani monosakkaritler glikoz, fruktoz ve galaktozun yanı sıra disakkaritler maltoz ve laktozun karışımlarının sulu çözeltilerini incelemek için kullanılmıştır. Elde edilen spektrumlar, bir makine öğrenme algoritması kullanılarak temel bileşen analizi yoluyla analiz edilmiştir. Sensörün yüksek performansı, temel bileşen analizinin gücü ile birlikte, 1 g/L’lik fizyolojik seviyelere kadar sulu mono ve disakkarit çözeltilerinin konsantrasyonlarını tespit edilmesini sağlamıştır. Ayrıca, aynı anda beş mono- ve disakkaritin tümünü içeren karışık çözeltilerdeki bileşimlerin yanı sıra sakkarit konsantrasyonlarının güvenilir şekilde ayırt edildiğini de gösterilmiştir (Pfezer, Karst, Hentschel, & Giessen, 2022).

Metayüzeyler, düşük radyasyon kayıpları ve fantastik optik rezonanslar üreten belirli bir sırayla düzenlenmiş alt dalga boyu saçıcılardan (örneğin meta-atomlar) oluşan ultra ince meta malzemelerdir. Bu çalışma da “Spektroskopik Tespit için Rezonans Metayüzey: Fizik ve Biyomedikal Uygulamalar” dan bahsetmektedir. Sonuç olarak, bu makale biyomedikal algılamada rezonans metayüzey tabanlı spektroskopik algılamadaki son gelişmeleri gözden geçirmekte ve okuyucuya bu yeni konuya ilişkin en son genel

bakışı sunmayı amaçlamaktadır. İlk olarak, spektroskopik algılama alanında, plazmonik ve dielektrik metayüzeyler için ana rezonans mekanizmaları LSPR, SLR'ler, Fano rezonans ve BIC'leri içerir. Kızılötesi algılama, SERS, SEIRA ve UV ila THz dalga boyunda kiral algılama dahil olmak üzere plazmonik ve dielektrik metayüzeylerin spektroskopik tespitindeki son gelişmeler listelenmiştir. Makale için içi boş halka şekilli nanoanten tasarlanmıştır (Liang, Lai, Lou, Duan, & Hu, 2022).

Protein A'nın Denatürasyonunun Yüzeyi Geliştirilmiş Kızılötesi Soğrulma Spektroskopisi ile İncelenmesi başlıklı bu makalede, SEIRA spektroskopisinde alt tabaka olarak bir plazmonik meta yüzey kullanılarak bir mükemmel soğurucu tek tabakasında meydana gelen denatürasyon sürecinin izlenmesi raporlanmıştır. Önerilen platform, çok rezonanslı pikseli bir tasarım sayesinde $1500\text{--}1700\text{ cm}^{-1}$ Amid spektral bölgesinin tamamının izlenmesine izin verir. Spesifik olarak, her piksel, tüm Metayüzey ~ 1200 ila 2200 cm^{-1} arasında geniş bir spektral aralığı kapsayarak farklı titreşim bantlarını algılayabilir durumdadır. Doğal ve denatüre durumların SEIRA spektrumlarını karşılaştırarak, FTIR spektrometrisi aracılığıyla mükemmel soğurucunun yüzeye bağlı tek katmanının gerçek zamanlı ve etiketsiz izlenmesini gösterilmiştir (Di Meo et al., 2022).

“Metamalzeme Mükemmel Emicilere Dayalı Hibrit SEIRA Yüzey ve Kırılma İndisi Sensörü ile PVC Algılama” isimli bu çalışmada, kırılma indisini algılamanın yanı sıra Fano rezonansı ile SEIRA algılama arayışında metamalzeme tabanlı iki işlevli bir sensör sunulmuştur. Her iki fonksiyon için de Metamalzeme tabanlı mükemmel soğurucuların simülasyonunu ve deneysel doğrulaması sağlanmıştır. İlk olarak, kırılma indisini algılama için diğer tüm modlarla birlikte çalışma frekansını yaklaşık 615 cm^{-1} 'de konumlandırmak için ayrık halka rezonatörümüzün boyutlarını belirlenmiştir. Simülasyonda, bir Lorentz osilatörü olarak bir PVC tabakası ile bir yansıma düşüşünden bir tepe noktasına geçiş gözlemlenmiştir. Ek olarak, y-polarizasyon için birinci ve üçüncü modların kırılma indisini duyarlılıkları sırasıyla 4045 ve 2361 nm/RIU olarak bulunmuştur. Deneylerde, önerilen Mükemmel soğurucu kırılma indisini algılama yeteneğini test etmek için PMMA kullanılmıştır. 3713 ve 1694 nm/RIU duyarlılıkları, farklı PMMA kalınlıkları ve etkin ortam teorisi tarafından tahmin edilen eşdeğer kırılma indisini elde edilmiştir. Son olarak, PVC'yi tespit etmek için numuneye farklı konsantrasyonlarda PVC uygulanmıştır. μ FTIR ölçümünde bir yansıma düşüşünden bir tepe noktasına geçişi gözlemlenmiştir. PVC konsantrasyonlarına ilişkin tepkiler (yani, $\Delta R/R_0$) doğrusal değildi ve bu nedenle pratik uygulamasını mümkün olmamıştır. Daha sonra, PVC

konsantrasyonlarını ölçülen rezonans dalga boyu ile ölçmek için rezonans dalga boylarını PVC konsantrasyon değişikliklerine göre incelenmiştir. Burada PVC'yi % 0,5 gibi düşük bir konsantrasyonla ayırt edebilen sonuç çıkmıştır(Lin, Yen, & Huang, 2021).



3. MATERYAL VE YÖNTEM

3.1. Metamalzemeler

Metamalzeme terimi, 1999 yılında Austin'deki Texas Üniversitesi'nden Rodger M. Walser tarafından kullanıldı ve orijinal olarak “en uygun hale getirilmiş bir kombinasyon üretmek için tasarlanmış sentetik, üç boyutlu, periyodik hücresel mimariye sahip doğada bulunmayan belirli uyarılmaya iki ve daha çok tepki veren makroskobik kompozitler olarak tanımlandı. Metamalzeme “özelliklerini doğrudan bileşiminden ziyade yapısından alan bir malzeme” olarak tanımlanmaktadır. Aslında, bir metamalzeme, işlevi hem hücresel mimariye hem de kimyasal bileşime bağlı olan periyodik veya periyodik olmayan yapının makroskobik bir bileşimidir (Cui, Liu, & Smith, 2010). Metamalzeme etkili bir medyum olarak kabul edilirse, hücre boyutunun alt dalga boyuna eşit veya daha küçük olması için ek bir gereklilik vardır. Nanoparçacıklarda bir nevi metamalzemelerdir.

Elektromanyetizmada elektrik geçirgenliği (ϵ) ve manyetik geçirgenlik (μ), bir ortamın EM özelliğini karakterize eden iki temel parametredir. Fiziksel olarak, geçirgenlik (geçirgenlik), bir elektrik (manyetik) alanın, bir malzemenin elektrik (manyetik) alana tepki olarak polarize olma yeteneği ile belirlenen bir ortamı nasıl etkilediğini ve bundan nasıl etkilendiğini açıklar (Liu & Zhang, 2011).

3.1.1. Plazmonikler

Işığı oda sıcaklığında tutabilen plazmonikler, bu işlemi materyaldeki elektron olan plazmonlar vasıtasıyla gerçekleştirmektedir.

Plazmonikler, moleküler boyutlara kadar aşırı alan sınırlamasını mümkün kılarak ve nanoölçekte gelişmiş ışık-madde etkileşimi sağlayarak gelişmiş etiketsiz algılama tekniklerini canlandırdı. Plazmonik nanoyapıların mühendisliği, son yıllarda yüzey destekli algılama yoluyla biyoalgılama için güçlü bir platform olarak ortaya çıkmış ve moleküler çalışmalarda yeni uygulamaları teşvik etmiştir. Özellikle, tasarlanmış plazmonik nanoyapılara sahip yüzeyle güçlendirilmiş kızılötesi soğrulma spektroskopisi, normal olay uzak alan ölçümleriyle ince bir molekül katmanının farklı kızılötesi titreşim imzalarını tespit etme konusunda benzersiz bir yeteneğe sahiptir. Kızılötesi titreşimli parmak izleri, tespit, tanımlama ve teşhis amaçları için lipitler veya proteinler gibi biyo-örneklerin moleküler yapıları hakkında atomik düzeyde bilgi sağlar. Yukarıdan aşağıya nano fabrikasyon teknikleriyle üretilen metalik nanoparçacıklar, zengin spektroskopik

bilgilerine yüksek oranda tekrarlanabilir bir şekilde erişmek için moleküllerin titreşimsel bantlarını hedeflemek üzere ayarlanabilen kızılötesi, orta kızılötesi ve uzak kızılötesi aralıklarda iyi tanımlanmış plazmonik rezonanslar sağlar (Maier, 2007).

3.1.2. Yüzey Plazmon Polaritonları

Yüzey plazmon polaritonları, bir dielektrik ve bir iletken arasındaki arayüzde yayılan ve dikey yönde geçici olarak sınırlandırılmış elektromanyetik uyarılardır. Bu elektromanyetik yüzey dalgaları, elektromanyetik alanların iletkenin elektron plazmasının salınımlarına bağlanması yoluyla ortaya çıkar. Dalga denklemini bir başlangıç noktası olarak alan bu bölüm, hem tek, düz arayüzlerde hem de metal/dielektrik çok katmanlı yapılarda yüzey plazmon polaritonlarının temellerini açıklar. Yüzey uyarıları, alan sınırlamasının nicelleştirilmesine ilişkin ayrıntılı bir tartışma ile birlikte dağılımları ve uzaysal profilleri açısından karakterize edilir (Etezadi et al., 2017).

3.1.3. Metaller

Altın

Tablo3.1. Altının genel özellikleri

Atom numarası	79	Atom kütlesi	196.967
Elektron dağılımı	Xe.5d ¹⁰ 6s ¹	Yoğunluk	19.281 g/cm ³
Yükseltgenme basamağı	+1, +3	Elektron ilgisi	+223kJ/mol
Erime noktası	1337 K	Kaynama noktası	3080K
İyonlaşma enerjisi	890	Elektronegatiflik	2.5
Atom yarı çapı	144pm	İyon ⁺³ yarı çapı	91pm

Doğada bulunuşu

Altın elektro-kimyasal anlamda bir soy metal olmasına karşın, tümüyle kimyasal tepkimelere ilgisiz değildir. Sıcaklık ne olursa olsun havadan etkilenmez ama, Klor ve bromla tepkimeye girer, cıva da çözünerek amalgam yapar. Saf altın, kırmızımsı sarı renkli, kolayca tel levha haline getirilebilen bir metaldir. Çok asal bir metal olan altın genellikle metalik halde, kısmen de gümüş ve tellüre bağlı olarak AgAuTe halinde bulunur. Metalik altın genellikle nehir kumları arasında bulunur. Deniz suyu da 0,01 mg/m³ altın içerir ki, bütün denizlerde toplam milyonlarca ton altın bulunur.

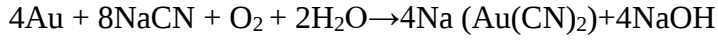
Elde edilmesi

Altın elde edebilmenin iki yolu vardır:

1) Malgalama

2) Siyanür

İlk yöntemde altın minerallerden Hg ile oluşturduğu malgama ile ayrılır Hg damıtılarak altın elde edilir. Kısa olarak formül böyledir:



Gümüş

Tablo3.2. Gümüşün genel özellikleri

Atom numarası	47	Atom kütlesi	107.868
Elektron dağılımı	Kr.4d ¹⁰ 5s ¹	İzotoplar	107,109
Erime noktası	960.8 C	Kaynama noktası	1950 C
Yükseltgenme basamağı	+1, +2, +3	İyonlaşma pot.	7.57
Yükseltgenme potansiyeli	-0.799V	Atom çapı	144

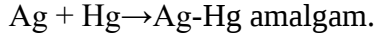
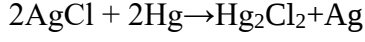
Doğada bulunuşu

Gümüş asal bir metal olduğundan doğada elementel ve mineralleri haline bulunur. Deniz suyunda ve bitki küllerinde de gümüşe rastlanır. Doğal gümüş bileşikleri, sülfürlü, arsenürlü, tellürlü, bizmutlu, halojenürlüdür. Doğal gümüş, elementel halde, gümüş ve bakır bileşikleri yanında bulunabilir. Gümüş tüm metallerin en beyazıdır. Son derece ışık yansıtıcı, parlak, paslanmaz değerli bir metaldir. Bu niteliğinden dolayı, böyle bir yüzeyden ışıyan, kaçan ısı son derece düşüktür. Gümüş altından sonra kolayca tel ve levha haline getirilebilen ikinci metaldir.

Elde edilmesi

Gümüş, gümüş minerallerinden, gümüş içeren diğer metal minerallerinden ve gümüş içeren diğer metallerden elde edilir. Gümüş elde edilmesinde en yaygın yöntem, filizin köpükle yüzdürülerek zenginleştirilmesidir. Diğer bir yöntem kurşunun hava oksijeni ile yükseltgenmesidir. Oksit haline geçen kurşun, PbO, daha kolay eridiğinden, gümüşten ayrılmış olur. Bu olaya kupelasyon denir.

En çok kullanılan eritme metodundan ayrı olarak, gümüş klorürün cıvayla indirgenmesi, meydana gelen amalgamdaki gümüş, sıkıştırılarak veya damıtılarak cıvadan ayrılır.



Alüminyum

Tablo3.3. Alüminyumun genel özellikleri

Atom numarası	13	Atom kütlesi	26.9815
Elektron dağılımı	(Ne)3s ² 3p ¹	İyon yarıçapı	52pm
Yükseltgenme sayısı	+3	Atom yarıçapı	125pm
İyonlaşma enerjisi	579	Elektrot potansiyeli	-1.67V
Erime noktası	659C	Kaynama noktası	2300C
İzotopları	27 (%100)		

Doğada Bulunuşu

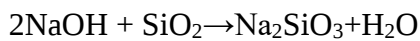
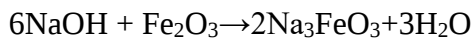
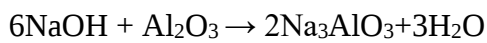
Alüminyum doğada, oksijen ve silisyumdan sonra en çok bulunan üçüncü elementtir. Yer kabuğunun %8 ini oluşturur. Oksit, oksit-hidrat, silikat bileşikleri halinde bulunur. Oksit mineralleri içinde en önemlisi Al₂O₃, korendon, hidroksitli olanı, Al₂O₃. 2H₂O, Boksittir. Alüminyum üretiminde kullanılan diğer bir mineralde, 3NaF.AlF₃ Kriyolittir.

Alüminyum metali, gümüş gibi parlak olmasına rağmen, üzerinde oluşan oksit tabakasından dolayı matlaşır. Isı ve elektriği iyi iletir. Manyetik özellik göstermez. Oldukça yumuşaktır. Kolay işlenir. Döküme ve mekanik işlenmeye elverişlidir. Hafif bir metaldir. Alüminyumun yükseltgenme potansiyeli, 1.66 V. değerinde yüksek olmasına karşın, birçok kimyasal maddeye ve havaya karşı dirençlidir. Alüminyum erir, fakat yanmaz.

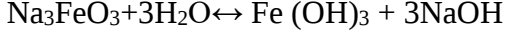
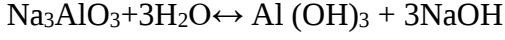
Elde Edilmesi

Boksitten alüminyum elde edebilmek için, boksit içinde bulunan yabancı maddelerin uzaklaştırılması, yani boksitin temizlenmesi gerekir.

Bayer yönteminde öğütülmüş boksit, derişik sodyum hidroksit çözeltisi ile, basınç altında, 160C da ısıtılırsa, sodyum alüminat, sodyum ferrit ve sodyum silikat oluşur.



Tepkime sonunda oluşan sodyum silikat çökerken, sodyum alüminat ve sodyum ferrit, bir dengeye kadar suda çözünürler.



Birinci denge sol tarafın lehine olurken, ikinci denge sağ tarafın lehinedir. Bu nedenle demir 3 hidroksit çöker ve süzülerek sodyum alüminat çözeltisinden ayrılır (Ramazan Tezcan, 2007).

3.2. Spektroskopi

Spektroskopi, elektromanyetik radyasyon kullanılarak bir madde ile elektromanyetik ışımanın incelenmesidir. Günümüzde, maddelerin kalite ve miktar yorumlamasında kullanılan birçok spektroskopik yöntemler bilinmektedir. Yöntemler analiz edilen türe (moleküler veya atomik spektroskopi), gözlemlenen madde-ışın etkileşiminin tipine (soğrulma, emisyon ve dağılma) ve analizde kullanılan elektromanyetik spektrumun bölgesine göre değişmektedir. Ultraviyole (UV), görünür bölge (Vis), kızılötesi ve radyo frekans aralıklarındaki (nükleer manyetik rezonans, NMR) ışımanın emisyonuna veya soğrulmasına dayanan spektroskopik yöntemlere en çok madde analizi, hasta doku teşhisi ve s.de karşılaşılmaktadır. Spektroskopide 3 ana başlık vardır: ışık, madde ve madde ile ışığın karşılıklı füzyonu (Ball, 2001).

3.2.1. Işık

Işık, dalga benzeri özellikleriyle boşlukta hareket eden enerji parçacıkları olarak düşünülebilir. Işığın bu görüntüsü, ışık ışını ile ilişkili enerjinin dalgaının ilgili elektrik ve manyetik alanları boyunca boşlukta sürekli dağılım göstermediğini ancak ışığın ayrık paket halinde yoğunlaştığı izlenimi uyandırmaktadır. Bu nedenle ışığın ikili bir yapısı, parçacıklı ve dalga benzeri, olduğu ifade edilir. Işığın yayılımıyla ilgili olan girişim, dağılma ve kırılma gibi olaylar elektromanyetik ışımanın dalga teorisiyle daha kolay açıklanmaktadır. Bununla birlikte soğrulma ve emisyon spektroskopisinin temeli olan ışığın madde ile etkileşimi belki de ışığın tanecikli doğasıyla en iyi şekilde anlaşılabilir. Işık hem dalga benzeri özelliklere hem de tanecik özelliklerine sahip olma bakımından tek değildir. Örneğin; maddenin elektron, proton ve nötron gibi temel parçacıklarının da dalga benzeri bir davranış sergilediği bilinmektedir.

Elektromanyetik ışımanın dalga özellikleri dalganın frekansı, uzunluğu ve genişliği ile tanımlanmaktadır. Dalgayı oluşturan her biri bir düzlemle sınırlanmış elektrik ve manyetik alanların titreştiği düzlemde dalga kutuplaşıyor. Bir dalganın frekansı (ν , Yunan alfabesinde küçük nu harfi) bir dalganın belirli bir noktada saniyede yapacağı titreşimlerin sayısı olarak ifade edilmektedir. Bu, sabit bir noktayı tam bir salınım yaparak geçmek için gereken zaman anlamına gelen dalga periyodunun (p) tersidir. Dalga boyu (λ) verilen bir dalgada bir tam salınımın uzunluğunu gösterir. Dalga boyunun ifade edilmesinde kullanılan birimler analizde kullanılan elektromanyetik ışımanın bölgesine bağlı olarak değişmektedir. Spektroskopik veriler bazen dalga boyunun tersi ve birimi cm^{-1} olan dalga sayıları ile ifade edilir. Dalga sayılarıyla en çok kızılötesi spektroskopide karşılaşılmaktadır. Belirli bir "i" ortamındaki elektronun yetik dalganın yayılım hızı (v_i , uzaklık/s), dalganın frekansı ile (devir / s) o ortamdaki dalga boyunun çarpımıyla hesaplanabilir.

$$v_i = \nu \lambda_i \quad (3.1)$$

Burada,

v_i = i ortamındaki yayılma hızı

ν = frekans (ilgili dalga boyunun)

λ_i = i ortamındaki dalga boyu

Elektromanyetik dalganın frekansı ışıma kaynağına göre belirlenmekte ve dalga başka bir ortama geçtiğinde sabit kalmaktadır. Ancak bir dalganın yayılım hızı ışığın yayıldığı ortama bağlı olarak çok az değişmektedir. Işımanın dalga boyu 3.1 numaralı eşitlikte tanımlandığı gibi dalga hızındaki değişikliklerle orantılı olarak değişmektedir. Dalganın yüksekliği dalga maksimumundaki elektrik vektörünün büyüklüğünü göstermektedir. Bir radyasyon ışınının ışıma gücü ve ışıma yoğunluğu, o ışımayı oluşturan dalgaların büyüklüğünün karesi ile orantılıdır. Dalgalar, ilgili alan gücünde, sabit bir pozisyonda zamanla meydana gelen değişiklikleri veya sabit bir zamanda uzaklığa bağlı olarak meydana gelen değişiklikleri gösterir. Dalgaların manyetik ve elektriksel bileşenleri, uzunlukları ilgili alanın büyüklüğü ile orantılı olan vektör serisi olarak ifade edilir. Titreşimsel elektriksel alan; soğrulma, geçirgenlik ve kırılma gibi spektroskopik olguların en önemlisidir. Ancak manyetik alandan bağımsız olarak sadece bir elektriksel alanın varlığı imkansızdır (Nielsen, 2020).

3.2.2. Raman Spektroskopisi

Raman spektroskopisi ışığın esnek olmayan saçılımına dayanır ve genliği indüklenen dipol momentine, yani polarize edilebilirliğe bağlıdır. Teknik olarak, Raman spektroskopisi genellikle standart ışık kaynaklarından, optiklerden ve algılama teknolojilerinden kolayca erişilebilen dalga boylarına sahip ultraviyole, görünür veya yakın kızılötesi radyasyon kullanılarak gerçekleştirilir. Daha da önemlisi, biyomedikal titreşim spektroskopisi için dalga boylarının minimum su soğrulmasına yakın olacak şekilde seçilebilmesidir. Bununla birlikte, bu avantajlı olarak düşük su soğrulması, Raman spektroskopisinin düşük enine kesiti, bir sinyal arka planı olarak floresansın ortaya çıkması ve yüksek ışık yoğunlukları ile numunede olası foto-indüklenmiş hasar ile kısmen engellenebilir (de la Chapelle & Pucci, 2013).

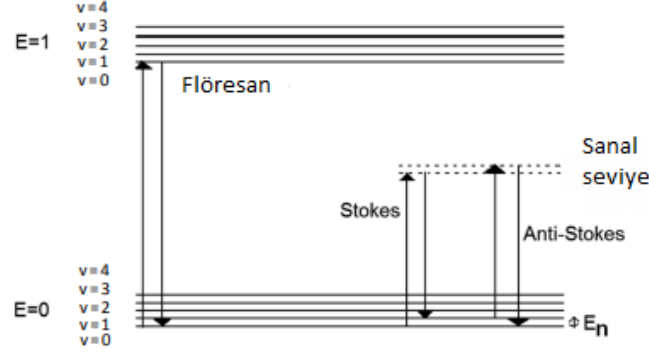
3.2.3. Diğer spektroskopi

Biyomoleküllerin titreşimlerinin spektroskopisi için çok sayıda başka teknik mevcuttur. Bunlar arasında yakın kızılötesi spektroskopisi, zayıflatılmış toplam yansıma spektroskopisi ve daha yakın zamanda terahertz spektroskopisi bulunmaktadır. Buna ek olarak, Raman spektroskopisinde ve yüzey geliştirilmiş Raman veya kızılötesi spektroskopisi, tutarlı anti-Stokes Raman spektroskopisi (CARS) ve uç ile geliştirilmiş Raman spektroskopisi (TERS) dahil olmak üzere orta kızılötesi spektroskopisinde iyileştirmeler yapılmıştır.

3.2.4. Raman Efekti Prensibi

Genel olarak her bir spektroskopide olduğu gibi Raman spektroskopisinde de madde ışık radyasyonu ile uyarılarak incelenir ve gözlemlenir. Güçlü bir monokromatik ışık yani lazer kaynağı tarafından sanal bir enerji düzeyine yükseltile malzeme, radyasyonu yeniden yayar ve daha sonra yeterli bir dedektör tarafından toplanır ve analiz edilir. Bu radyasyon iki tür sinyal salgılar. Sinyaller daha çok Rayleigh saçılmasına karşılık geldiği gözlemlenmektedir. Rayleigh saçılması zamanı, dalga boyu değişmeden, elastik ve enerjisiz olarak iletilir. Bazen istisnai durumlarda fotonlar madde ile etkileşime girebilir. Bu madde ya gelen fotonun enerjisini emer ya da enerjini ona aktarır. Enerjini emdiği zaman Stokes, enerjini aktardığı zaman ise Anti-Stokes radyasyonu meydana çıkar. Fotondaki bu enerji değişimleri, üzerinde inceleme yaptığımız maddenin frekansı ve dönmenin enerji seviyeleri hakkında yararlı bilgiler sağlar. Raman spektroskopisinde,

fotonlarla kıyasladığımız zaman, ilgilendiğimiz dönme enerjisinin ve frekansın çok düşük seviyelerde olduğunu görüyoruz. Aşağıdaki şekildeki gibi, gelen fotonların



Şekil 3.1. Anti-Stokes radyasyonu çıkışı

enerjisi, iki enerji seviyesi arasında doğrudan bir sıçramaya karşılık gelmez. Bunun sonucu olarak, Raman teorisini anlamak için, bazı sanal enerji seviyelerinin olduğunu varsayabiliriz. Bunun yansıra, bir madde, ancak uyarılmış durumun enerjisi, molekülün mevcut enerji seviyesi ile başka bir 'izin verilen' seviye arasındaki boşluğa karşılık geliyorsa, bir fotonu emerek daha uyarılmış bir duruma geçebilir. Bu enerji seviyelerinin ölçülebilmesi sistemidir. Aynı zamanda, bu durumda, maddenin, olası bir enerji seviyesine atlamaya yetecek kadar, gelen radyasyonun bir kısmını emdiğini gözlemliyoruz. Bunu yalnızca kuantum fiziği ile açıklamak mümkündür bunun için Heisenberg'in belirsizlik ilişkisinin kullanabiliriz:

$$\Delta E \times \Delta t \geq \frac{h}{2\pi} \quad (3.2)$$

Enerjide çok büyük belirsizlik vardır çünkü, maddenin gereken enerjini elde ettiği süre çok kısadır. Bu sebepten dolayı, madde gelen enerjilerin sadece küçük bir kısmını kullanabilmektedir. Foton, enerjisinin bir miktarını kaybettikten sonra $h\nu - E_n$ enerjisine sahiplenir, burada E_n , izin verilen dönme veya öteleme titreşimi enerji seviyeleri arasındaki bir enerji sıçramasını bildirir. Ve bundan sonra daha küçük bir titreşim ile (Stokes çizgileri) ile karakterize edilir. Anti-Stokes çizgileride benzer şekilde karakterize edilebilir. Molekülün fotona enerji verebilmesi için, tam uyarılmış şekilde olması gerekmez. Böylece foton enerjisi $h\nu + E_n$ olur. Bu gerçek, Stokes çizgilerine göre simetrik olan spektral çizgilerin ortaya çıkmasına neden olur. Ancak genlikleri Stokes

doğrularından daha düşüktür çünkü Boltzmann dağılım yasasına göre bu uyarılmış durumların popülasyonu çok düşüktür.

3.2.5. Raman spektroskopisinin uygulama alanları ve avantajları

Raman spektroskopisi, çok sayıda ilginç bilgi üretmek için farklı kimyasal veya biyolojik numunelere uygulanabilir:

- Faz geçişleri ve kimyasal bileşik tanımlama.
- Malzeme karakterizasyonu.
- Moleküler yapı tayini.
- Amorf ve kristal sistemlerin incelenmesi.
- Biyolojik bir ortamda kimyasal reaksiyonların ilerleyişinin doğrudan belirlenmesi.
- Karmaşık ortamda proteinleri içeren farklı reaksiyon kinetiklerinin ölçümü.
- Çalışılan mekanizmaları anlamada büyük önem taşıyan fizikokimyasal parametrelerin belirlenmesi: reaksiyon Gibbs serbest enerjisi, protein açılmasının Gibbs serbest enerjisi, konformasyonel Gibbs serbest enerjisi.
- Açılmalarına eşlik eden biyomoleküllerin konformasyonel değişikliklerinin tanımlanması.

Raman spektroskopisi aynı anda farklı türde bilgiler sağlayabilir. Bir bileşiğin Raman spektrumu örneğin hem bağ tipini hem de kristal yapıyı gösterebilir. Raman spektroskopisinin bazı çok önemli özelliklerinin aşağıdakilerdir:

- Uygulaması kolaydır.
- Numuneyi bozmaz. Yöntem tahribatsız ve müdahaleci değildir ve gerçek sistemlere uygulanabilir.
- Çeşitli numuneleri incelemek için kullanılabilir (heterojen malzemeler, yönlendirilebilen veya yönlendirilemeyen yapıya sahip numuneler).
- Diğer analitik yöntemlerle birleştirilebilir ve yerinde ölçümler yapabilir.
- Çok küçük boyutlu katı numunelerde kullanılabilir.
- Çok yüksek sıcaklıklar, radyoaktif ortamlar veya kontrollü atmosfer gibi zor ortamlarda çalışabilir.
- Küçük yapılara duyarlıdır, amorf sistemlerin tanımlanmasına ve bazen kırınım yöntemlerinin uygulanmasının zor olduğu ince filmlerin analizine olanak tanır.

Diğer çeşitli tekniklerle karşılaştırıldığında, Raman spektroskopisinin birçok avantajı vardır:

- Raman etkisi, kullanılan uyarma dalga boyundan bağımsızdır. Böylece, uygun bir dalga boyu seçilerek, flüoresans bozulması veya renkli maddelerin ayrışması gibi bazı istenmeyen fenomenleri ortadan kaldırmak mümkündür.
- Moleküllerin kalıcı polarizasyonuna gerek yoktur, bu da onu eşnükleer iki atomlu molekülleri ölçmek için verimli bir yöntem haline getirir.
- Raman etkisindeki su Emilimi zayıf olduğu için suyun varlığı sorun oluşturmaz. Böylece su çözücü olarak kullanılabilir.
- Cam, ilgili spektral bölgelerde şeffaf olduğu ve Raman spektrumu çok zayıf olduğu için cam hücreleri kullanmak mümkündür.
- Numuneler seyreltilmeden veya herhangi bir biçimde değiştirilmeden kullanılabilir.

Bununla birlikte, bu avantajlar, bazı fenomenlerin neden olduğu dezavantajlara da sahiptir:

- Siyah cisim emisyonu (numuneyi ısıtarak).
- Floresans (Raman etkisinden çok daha yoğundur, ancak dalga boyu değiştirilerek önlenabilir).
- Fotokimyasal reaksiyonlar (renkli maddelerin ayrışması vb.).
- Çoklu foton reaksiyonları.
- Numunelerin ısıtılarak ayrıştırılması.

Raman spektroskopisi kullanılarak incelenebilecek çok önemli bir husus, biyomolekül yapılarının karakterizasyonudur. Gerçekten de Raman spektroskopisi, hücre ve dokulardaki biyomoleküller arasındaki kimyasal bileşim, moleküler yapı ve moleküler etkileşimler hakkında bilgi sağlar. Bu nedenle proteinler, lipidler, karbonhidratlar ve nükleik asitlerle ilgili biyokimyasal bilgiler elde edilerek dokunun sağlığı ve patolojisi hakkında bilgi sağlanır. Ayrıca polarize Raman spektroskopisi, dokulardaki moleküllerin hizalanması ve oryantasyonu hakkında bilgi verebilir.

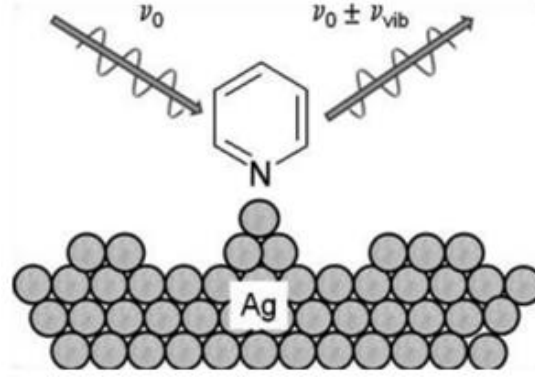
Proteinler, su hariç bir hücrenin kütlelerinin yarısından fazlasını temsil eder. Bu makromoleküller organizmaların işleyişinde çok önemli bir rol oynar. Doğal veya doğal olmayan yapıları veya karmaşık biyolojik ve kimyasal çevre ile etkileşimleri hakkında bilgi, organizmalardaki ve daha kesin olarak hücrelerdeki rollerini anlamak için

önemlidir. Uygulamasından itibaren Raman spektroskopisi, proteinlerin yapılarını ve çevre ile etkileşimlerini analiz etmek için birçok araştırma grubu tarafından yaygın olarak kullanılmıştır. Proteinler ve birleşimleri üzerinde Raman ölçümleri yapmak kolay bir iş değildir. Raman spektroskopisi organik ve inorganik, doğal ve sentetik kimyasal bileşikler üzerinde başarıyla kullanılmasına rağmen, proteinler söz konusu olduğunda işler biraz daha karmaşıktır. Proteinlerin büyük, karmaşık biyolojik sistemler (10 kDa ÷ 150 kDa) olduğu düşünüldüğünde bu şaşırtıcı değildir (de la Chapelle & Pucci, 2013).

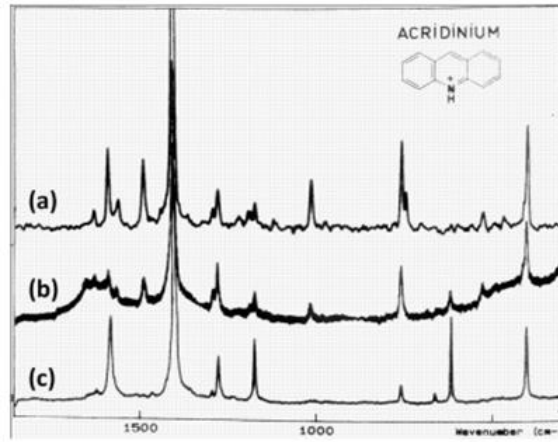
3.2.6. SERS

SERS etkisi, 1974 yılında Fleishman ve diğerleri (Southampton Üniversitesi, İngiltere) tarafından tesadüfen keşfedildi. Yazarlar, pürüzlü bir gümüş alt tabaka üzerinde beklenmedik bir yüksek sinyal-gürültü oranı ile soğrulma elde edilmiş piridin moleküllerinin Raman sinyalinde büyük bir artış gözlemlediler. Başlangıçta ana fikir, yüzey alanını ve dolayısıyla piridin moleküllerinin Raman sinyalini arttırmak için pürüzlü bir metal yüzey kullanmaktı (Şekil 3.2). 1977'de Van Duyne ve Jeanmaire (Northwestern Üniversitesi, ABD) ve Albrecht ve Creighton (Kent Üniversitesi, İngiltere), SERS için alt tabaka olarak gümüş kolloidleri kullanarak benzer sonuçlar bildirdiler. Her iki grup da soğrulmuş moleküllerin çok yüksek Raman sinyalinin, Raman saçılma verimliliğinin gerçek bir şekilde arttırılmasıyla üretildiğini gösterdi. Etkiye SERS adı verildi. İlk SERS spektrumları bir elektrokimyasal sistemden (pürüzlendirilmiş gümüş elektrot) elde edildi, ancak birçok çeşit metalik alt tabaka var. SERS elde etmek için en yaygın olarak kullanılan alt tabakalar, kümelenmiş metal kolloidler, metal ada filmler ve altın ve gümüş kolloidal tek tabakalar dahil düzensiz ortamlardır. Şekil 3.2'de, SERS'in kolloidal gümüş partiküllerinde çok düşük konsantrasyonlarda moleküler bileşikler tespit etmedeki güçlü potansiyelini göstermektedir.

Şekil 3.3a, katı haldeki (toz) akridinyumun Raman spektrumunu yaklaşık olarak karakteristik Raman bantları ile gösterilmektedir. Halka gerilme titreşimlerinden 1400 ve 1570 cm^{-1} . 10^{-2} M sulu akridinyum çözeltisinde, sinyal/gürültü oranı beklendiği gibi çok daha düşüktür. Bununla birlikte, moleküler prob, 10^{-6} M'lik bir konsantrasyona sahip bir gümüş kolloidal solüsyona sokulduğunda, moleküler probun konsantrasyonu dört büyüklük sırası daha az olmasına rağmen, bu oran çok daha yüksektir. SERS, keşfinden bu yana, metalik nanoparçacıklar (NP) üzerine soğrulma edilen moleküllerin kimyasal analizi için en güçlü ve hassas araçlardan biri olarak kabul edildi. Bu teknik, analitik kimya ile biyolojik ve optik uygulamalarda büyük bir potansiyele sahiptir.



Şekil 3.2. Gümüş üzerine soğurulmuş piridin ile bir SERS deneyinin, gelen lazeri ve Raman saçılan ışığı gösteren, yoğunluklarının her ikisi de yüzey plazmon uyarımlarından kaynaklanan gümüş yüzeyindeki gelişmiş alandan etkilenen şematik bir temsili.



Şekil 3.3. a) Yakın-Kızılötesi Furre dönüşümü Akridinyumun (toz) Raman spektrumu; b) Sulu çözelti içinde Akridinyumun Raman spektrumu (konsantrasyon 10^{-2} M); c) Gümüş Kolloidal bir çözelti içinde Akridinyumun (10^{-6} M) SERS'leri.

SERS'e dahil olan mekanizmaların birçok yönü, son yirmi yılda makul bir dereceye kadar tanımlanmış ve çözülmüştür. Ancak, şu an bile, SERS topluluğu hala yeni zorluklarla ilgilenmektedir. En dikkat çekici olanlardan biri, tek moleküllerin (TM'ler) veya TM-SERS'in SERS tarafından gözlemlenmesidir. TM-SERS ilk kez 1997 yılında Kneipp ve ark. Yakın zamanda Le Ru ve arkadaşları tarafından sözde bi-analit yöntemi kullanılarak gösterilmiştir. Mekanizmaların elektromanyetik ve kimyasal katkılara bölünebileceği artık iyi bilinmektedir.

3.2.7. SERS Prensibi

SERS fenomenine yol açan iki mekanizma vardır: bir elektromanyetik geliştirme (EE) ve bir kimyasal geliştirme (CE) mekanizması. Elektromanyetik etki, esas olarak SERS etkisinin kökenindedir. Klasik bir deneyde, Raman kazancı (RG) tipik olarak 10^5 -

10^6 'dır. Bu EE, metalik NP'ler tarafından sürdürülen lokalize yüzey plazmonunun (LSP) uyarılmasından kaynaklanır. Bununla birlikte, bir kimyasal etki katkıda bulunabilir, ancak bir veya iki büyüklük mertebesinde. CE, yük transferi uyarılmış durumlar gibi kimyasal etkilerden dolayı polarize edilebilirliğin artması yoluyla analitin kemisorpsiyonundan dolayı soğrulan elektronik durumlarındaki değişiklikleri içerir.

SERS etkisi esas olarak üç metalle ilişkilidir: gümüş, altın ve bakır. SERS'in keşfinden bu yana başka metaller de keşfedilmiştir, ancak bunlar daha az verimlidir. Örneğin, katalizör bağlamında ilginç olan platin gibi metaller için SERS'in gözlemlenebildiğine dair kanıtlar vardır. SERS etkisinin elde edilmesi için iki ana özellik aşağıda gibidir:

SERS, lazer çizgisi dalga boyunun maksimum LSP rezonansına yakın olması koşuluyla, metalik parçacıkların (esas olarak gümüş, altın ve bakır) yüzeyine yakın moleküller için gerçekleşir. Özellikle, birinci yüzey tabakasında soğrulma elde edilen moleküller en büyük Raman geliştirme faktörü (REF) gösterir. REF'ler ayrıca birkaç on nanometreye kadar uzun menzilli bir etkiye sahiptir.

REF metalik parçacık boyutuna ve şekline bağlıdır, NP boyutunun tipik aralığı 10 nm ile 200 nm arasındadır (de la Chapelle & Pucci, 2013).

3.2.8. SEIRA

Yüzey Geliştirilmiş Kızılötesi Soğurma Spektroskopisi (SEIRA), moleküler bir tabakanın titreşim bantlarını geliştirmek için nano yapıları metal filmlerin elektromanyetik özelliklerinden yararlanan, kesinlikle yüzeye duyarlı bir tekniktir. SEIRA'nın katı yüzeye bağlı biyolojik moleküllere deneysel gerçekleştirilmesinin ve uygulanmasının kendine özgü temel özellikleri vardır.

Nanoteknolojide, protein-yüzey etkileşimleri, sensörler, aktivatörler ve biyolojik/elektronik bağlantıdaki diğer fonksiyonel bileşenler gibi arayüzey protein yapılarının montajı için çok önemlidir. Protein-yüzey etkileşiminin ayrıntılı bir mekanik anlayışı, bu alanlar için son derece değerli olacaktır ve spesifik protein-yüzey etkileşimlerini uyarılma yeteneği, nano ölçekli malzemeler ve biyo-nano montaj teknolojilerine fayda sağlayacaktır. Yüzey geliştirilmiş kızılötesi soğrulma spektroskopisi, moleküler düzeyde tek tabakalı analiz için faydalı bir yaklaşımdır. Yüzeye bağlı moleküllerin titreşim bantları, nano ölçekli pürüzlü bir metal yüzeyde soğrulma yaptığında yaklaşık 100 kat artar. SEIRA kesinlikle yüzeye duyarlıdır ve uygun

bir yüzey işlemiyle birleştirildiğinde, teknik, protein yapısının ve fonksiyonunun tek bir tek tabaka düzeyinde analizi için çok yönlü bir araç sunar.

SEIRA Mekanizması

Gözlenen yüzey gelişimini açıklamak için iki teori tartışılmaktadır (Osawa 2002). Nano yapılı metal yüzeyin yüzey plazma polaritonu (SPP) uyarımı yoluyla yerel elektromanyetik (EM) alan geliştirmesi çoğunlukla özellikle görünür bölgedeki yüzey iyileştirmesini açıklamak için kullanılırken (örneğin, yüzey geliştirilmiş Raman saçılması: SERS), metal/soğrucu tabakası (karışık etkili ortam) tarafından soğrulmanın geliştirilmiş demodülasyonu SEIRA'da eşit derecede önemli bir rol oynar. EM alanı, SPP uyarımı ile yakın ve orta-kızılötesi bölgede güçlendirilse de rastgele yönlendirilmiş bir nanoparçacık altın filmi kullanılırsa, geliştirme derecesi sadece yaklaşık 10 olarak hesaplanır. Ancak bu teorik sonuç, yaklaşık 100 olan deneysel olarak belirlenmiş geliştirme faktörü ile çelişmektedir (Osawa 2002). Dahası, Pt, Ni, Ir, Pd veya Zn gibi Yüzeyi Geliştirilmiş Kızılötesi Soğrulma Spektroskopisi geçiş metalinin ince filmlerinde gözlemlenen güçlü SEIRA etkisi, tek EM katkısına karşı ek kanıt sağlamaktadır, çünkü bu geçiş metallerinin SPP uyarımı görünür ila orta IR aralığında mümkün değildir. Etkili ortam teorisi, SEIRA aktif metal yüzeyinin pürüzlülüğünü hesaba katar. IR radyasyonunun dalga boyu yüzey yapılarının boyutundan (50-200 nm) çok daha uzun (2500–10,000 nm) olduğundan, metal/soğrulma edilmiş molekül/çevreden oluşan kompozit bir ortam incelenir. Böyle etkili bir ortam, metal yüzeyinin kaba yapı düzeyi nedeniyle orta IR aralığında geniş bir soğrulma yapar. Kompozit ortam IR radyasyonu ile uyarıldığında, yüzeye soğrulan molekülün salınan dipolü, metalin indüklenen dipolü ile birleşir. Sonuç olarak, metalin dielektrik fonksiyonu değişir ve etkin ortamın soğrulması, soğrulma titreşim frekansında daha güçlüdür. Metal tabakanın daha yüksek soğrulmaları ve hacim oranı, etkili ortam soğrulmasının yüzey iyileştirmesine baskın katkısına yol açar. Metal nano yapının yapı düzeyinin SEIRA tarafından gözlemlenen iyileştirmeye önemli ölçüde katkıda bulunuluyor. Literatürde, periyodik bir Au nano çubuk dizisinin 10^4 - 10^5 mertebesinde sinyal geliştirmeleri ürettiği hesaplanmıştır (Adato ve diğerleri 2009). Bu hassasiyet, zeptomol (10^{21} M) seviyesine kadar soğrulma konsantrasyonlarının belirlenmesine izin verir. SEIRA spektrumları, iletim spektrumları ile karşılaştırıldığında, bağlı bant yoğunluklarında genellikle farklı görünmektedir. Bu fark, dipol momentleri yüzey düzlemine dik olan moleküllerin titreşim bantlarının kuvvetle arttığını belirten yüzey seçim kuralı (Osawa 2002) ile ilgilidir. Yüzey düzlemine paralel olarak salınan bu

titreşim modları, SEIRA spektrumlarında zayıftır veya tamamen yoktur. Yüzey seçim kuralı, moleküler dipol momentleri ortogonal olan iki titreşim bandının göreceli yoğunluklarını karşılaştırarak soğrulma elde edilen moleküllerin yüzey oryantasyonunu belirlemede çok faydalıdır.

3.3. Nanomateriyallerin Fotonsal Özellikleri

Nanomateriyallerin fotonsal özelliklerine baktığımız zaman, onların elektronik özelliklerinin bir benzeri olduğunu görürüz. Materiyallerin atomsal kuruluşu ve elektronlarının enerji düzeyleri, onların fotonlarla etkileşim kurallarını oluşturur. Her bir iletken, yarı iletken ve yalıtkanlar fotonlarla etkileşecek biçimdedir. Bundan dolayı nanoboyutlardaki maddelerin elektronik özellikleri, maddenin fotonsal özellikleri incelenirken göz önünde bulundurulmalıdır (Fevzi Köksal, 2014).

3.3.1. Fotonun soğrulması, yayınlanması ve saçılması

Yalıtkanlar ve yarı iletkenlerde yasak enerji bandı, tamamen dolu değerlik bandı ile tamamen boş iletkenlik bandını birbirinden ayırır. Eğer fotonun enerjisi, yasak band aralığını aşarsa soğurma olur, bu da bandlar arası soğurma olarak biliniyor. Aynı zamanda fotonların enerjileri yasak bandtan küçük olursa, yalıtkanlar ve yarı iletkenler şeffaf olurlar. Ve görünür ışıktaki soğrulmadan geçmesinin sağlar. Yalıtkanlarda yasak band aralığı, büyük olduğundan bandlar arası geçişler çok nadir oluşur. Bunun aksine iletkenlerde ise bandlar arası soğurma, elektronlar dolu veya kısmen dolu bandlardan dolmamış yüksek enerji bandlarına atladığı zaman olabilir. Bunun yansıma, iletkenlerde iletkenlik ve değerlik bandları çakışır ve yasak band aralığı sıfıra eşittir. İletkenlerin dış yörüngelerinde bir elektron denizi vardır. Çünkü, bir iletkende bütün uygun durumlar kısmen dolu değerlik bandındadır ve değerlik bandı elektronları da düşük enerji soğurabilir. Elektronlar bulundukları bandlardan, boş bandlara doğru küçük atlamalar yapabilir. Buna, band içi soğurma denir. İşte bu olay, metalleri, görünür ve kızılötesi dalga boylarında yüksek soğurucu ve yansıtıcı yapar. Daha uzun dalga boylu, yani düşük enerjili foton elektronu hem değerlik, hem de iletkenlik bandının aynı bandda olduğu durumu içerir. Özel koşulların sağlanması şartıyla, band içi geçişler yarı iletkenlerde de oluşabilir. Bu özel şartlara yarıiletkenin katılınması, yüksek sıcaklık gösterilebilir. Eğer yarıiletken yüksek sıcaklıkta ise, sahip olduğu sıcaklıksal enerji, band aralığından büyükse, o zaman kısmen dolu iletkenlik bandında bazı serbest elektronlar bulunabilir.

Bu durumda yarıiletken, iletken gibi davranır ve band içi geçişler aynı iletkenler gibi olabilir (Erkoç, 2007).

En sonunda artık enerjilerini bırakan, uyarılan elektronlar taban durumuna dönerler. Daha çok elektron bir foton soğurduktan 100ns sonra bir fotonun yayınlanması ile olan bu olaya kendiliğinden yayınlanma denir yani yansımış ışık kendiliğinden yayımlanan ışık gibi düşünülebilir. Bir foton uyarılmış durumda da bir elektronla karşılaşabilir. Bu durumda gelen foton elektronun aynı evrede ve geldiği yönde bir foton yayınlamasına neden olur. Buna indüklenmiş (uyartılmış) yayınlama denir. Uyarılmış elektron bazen enerjisini etrafındaki sayısız atom titreşimlerine ve çarpışmalarına verir ve foton yayınlanmaz.

Soğrulma ve yayınlamadan başka, saçılmada, fotonun madde ile etkileşmesine ait edilebilir. Foton maddeye çarptığı zaman doğrultusunu değiştirirse saçılma oluşur. Bu esnek saçılma adlanır. Ve madde ile foton arasında enerji değiş tokuşu olmaz. Bu tür çarpışmalar zamanı iki farklı olay gözlemlenir, ya fotonun enerjisinin bir kısmı ısı biçiminde maddeye geçer, ya da maddeden fotona enerji geçer. Foton soğurmada olduğu gibi ortadan kaybolmaz. Eğer foton enerji kaybederse daha düşük bir frekansla yeni bir doğrultuda gider bunun aksine enerji kazanırsa daha yüksek bir frekansla yeni bir doğrultuda gider (Fevzi Köksal, 2014).

3.3.2. Fotonların Metallerden Geçmesi

Fotonların materyallerde hareket etmesi ve materyallerin içinde fotonun yayılması geçirgenlik olarak algılanıyor. Geçirgenlik, maddenin içinde elektrik alanının hangi kuvvetle geçirildiğinin bir ölçüsüdür. Yaygın olarak bilindiği üzere, serbest uzayın geçirgenliği $\epsilon_0 = 8.854 \times 10^{-12} \text{ F/m}$ 'dir. Bir maddenin geçirgenliğini bulmak için onun boş uzayinkine göre geçirgenliğini, boş uzay geçirgenliğine çarpmak gerekiyor:

$$\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0 \quad (3.3)$$

Aşağıdaki tabloda, bazı materyallerin geçirgenliklerini verilmiştir. Bu değerler durgun elektrik alanlarına karşılık gelir. Bir yükü depolamak için ise yüksek geçirgenliği olan materyaller daha iyidir.

Tablo3.4 Bazı materyellerin dielektrik değerleri

Materyelin adı	Dielektriği
Alümina	9.3-11.5
Silika	7.5-10.5
Magnezium florid	5.45-10
Boş uzay	1
Hava	1.0006
Su	80
Baryum Titanat	100

Bunun yanı sıra eğer alan zamanla değişmiyorsa materyalin geçirgenliği onun kutuplanmasına bağlıdır. Bir foton titreşen elektrik ve manyetik alan dalgalarından ibarettir. Bu dalgalar materyal ile karşılaştığında, materyalin içindeki kutupluklar, kuvvetli alan kurur. Bu durumda geçirgenliğin gerçek ve sanal kısımları vardır, bunlar alanın frekans fonksiyonunu tayin ederler:

$$\varepsilon(v) = \varepsilon'(v) - i\varepsilon''(v) \quad (3.4)$$

Burada ε'' , madde içinde dalgalar hareket ettikçe enerji kaybını ifade eder. Gerçek kısım ε' ise, dalganın ileri hızı ile maddenin hacmi arasındaki bağlantıyı ifade eder. Gerçek kısmın pozitif olması, maddenin dielektrik olması anlamına gelir. Bunun aksine gerçek kısım negatifse, madde bir metaldir. Böylelikle, bir metalde serbest elektronlarla, geçirgenlik arasındaki bağlantıyı, ve metal-foton bağlantısının nano ölçülerde nasıl farklılık yarattığını görebiliriz (Fevzi Köksal, 2014).

Geçirgenlik ve serbest elektron plazması

Bir metalin geçirgenliğini onun serbest elektronları belirler. Serbest elektronların geçirgenliği,

$$\varepsilon = 1 - v_p^2 / v^2 + i\gamma v \quad (3.5)$$

Bu ifadeye gerçek ve sanal kısımlar olarak bakarsak:

$$\varepsilon' = 1 - v_p^2 / v^2 + \gamma^2 \quad \text{ve} \quad \varepsilon'' = 1 - v_p^2 / v(v^2 + \gamma^2) \quad (3.6)$$

yazabiliriz. Burada uygun olarak v elektrik alanının frekansı ve γ serbest elektronların çarpışmaları arasındaki zamanın tersinden bulunan yavaşlatma frekansıdır. Bu formüllerde, serbest elektronları birlikte ele alınmıştır, bu da bir çeşit plazma olması anlamına geliyor. Daha geniş tanım yapılacak olursa plazma yüksek ölçüde iyonlaşmış gazdır. Nötr parçacıklar, iyon ve elektronlardan oluşur. Plazma v_p frekansında titreşir:

$$v_p = \sqrt{\frac{n_e e^2}{m \epsilon_0}} \quad (3.7)$$

Burada, n_e serbest elektronların yoğunluğu e elektronun yükü, m ise elektronun etkin kütlesidir. Bu ifade birçok nanoölçekli metaller için geçerli sonuçlar vermektedir.

Metallerin fotonsal özelliklerini büyük ölçüde etkileyen plazma frekansını açıklamak için kuantum fiziğine gerek yoktur, klasik fizikle açıklanabilir. Plazmalarda v_p frekansa sahip küçük fotonlar yansıtılır, hızlı titreşen elektronlar yüksek enerjili olduğundan ekranı daha yavaş titreştirir. Elektronlar elektrik alanından enerji kaçırarak kadar çabuk cevap vermediğinden, düşük enerjili elektrik alanında frekansı büyük olan fotonlar geçer. Yukarıdaki denklemde $v \gg v_p$ olduğunda geçirgenlik pozitifdir demektir. Böylece bu materyalin dielektrik olması anlamına gelir. Bu durumda, sanal kısım çok küçüktür sonuç olarak, maddede elektromanyetik alan hareket ettiğinde minimum enerji kaybı olur. Bunun aksi olduğunda ($v \ll v_p$) gerçel kısmın negatif olması anlamına gelir ve madde bir metaldir. Sanal kısım büyük olduğundan, elektromanyetik alan maddeye çok işleyemez. Fotonlar ya enerjilerini derin elektron plazmasına bırakırlar ya da yüzeye yakın serbest elektronlarla geri yansıtılır.

Çoğu metallerde, plazma frekansı, mor ötesi bölgededir ve görünür ışıktaki metal parlaklığı ile görünürler. Bununla birlikte, bakır ve gümüş gibi belli metaller için plazma frekansı görünür bölgededir. Bu, kırmızı ışıktan, mavi ışıktan daha çok yansımaları sağlar ve bunlar altın gibi parlaklık verir (Fevzi Köksal, 2014).

3.3.3. Metal Parçacıkların Sönme Katsayısı

Bu garip fotonsal özellikler nanoboyutlardaki materyaller için doğrudur. Mesela, elektron plazmasının titreşimi sınırlardan etkilenmeyecek yani sınırsız şekilde göz önüne alınır. Bu varsayım ise nanoboyutlardan büyük ölçülerde geçerlidir, burada cisimler elektronla karşılaştırıldığında dev gibidir, böylece, yüzey etkileşimleri çok rol oynamaz. Nanoboyutlarda ise bu tamamen farklıdır. Cisim küçüldükçe onun yüzeyinin hacmine

olan oranı artar. Bunun için artık nanoboyut parçacıklarda elektronların yüzeyinin ve sınırlarının olduğunu varsaymalıyız.

Elektronlar her zaman birbiriyle çarpışma halindeler ve bu çarpışmalar zamanı, çarpışmalar arasındaki uzaklık ortalama serbest yol adımı alır ve λ ile gösterilir. Bir nanoparçacık elektronların ortalama serbest yolundan daha küçük olabilir. Bu nanoparçacıkta, elektronlar parçacık yüzeyinde, büyük bir parçacıktan daha çok çarpışırlar. Büyük boyutlarda serbest elektronların çarpışmaları arasındaki zamanın tersi ile belirlenen yavaşlatma frekansı, nanoboyutlarda değiştirilerek aşağıdaki gibi bulunabilir:

$$\gamma_{parç.} = \gamma + \frac{v_F}{\lambda_{düz}} \quad (3.8)$$

Burada γ nanoboyutta olmayan metalin yavaşlatma frekansı, v_F Fermi enerjisinde elektronların hızı ve $\lambda_{düz}$ düzeltilmiş ortalama serbest yoldur. Çapı, cüsseli katının ortalama serbest yolundan küçük parçacıklar için $\lambda_{düz}$ genellikle parçacıkların yarıçapı ile değiştirilir:

$$\lambda_{düz} = \frac{4r_p}{3} \quad (3.9)$$

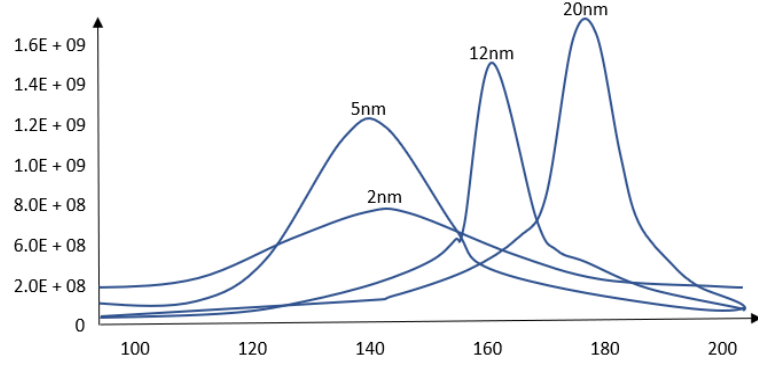
Buna göre, yarıçap azalırken parçacığın yavaşlatma frekansı artar. Şimdi, bir takım nanoboyutlu parçacıkların foton demetleri yoluna konulduğunu varsayalım, parçacıkların üzerine gelen elektromanyetik enerjinin şiddeti (yani fotonların sayısı) I_1 ve akıntı yönünde bir başka parçacık topluluğu üzerine düşen şiddeti I_2 olsun. Burada Fotonlara 3 şey olur:

- 1) Baz fotonlar engellenmeden parçacıklar arasından geçer
- 2) Bazı fotonlar soğurulurlar ve parçacıklar da elektronları uyarırlar
- 3) Bazı fotonlar ise saçılır

Parçacıkların fotonları soğurması ve saçması nedeniyle $I_2 < I_1$ dir. Parçacıklar gelen foton demeti üzerinde bir sönme oluşturur. Fotonların x doğrultusunda birim uzunlukta kaybolan kesri, sönme katsayısı (sönme tesir kesiti) olarak bilinir. Ve $C_{sön}$ ile gösterilir. Metal parçacıklar için bu katsayı,

$$C_{sön} = \frac{24\pi^2 r_p^3 \epsilon_m^{3/2}}{\lambda} \frac{\epsilon''}{[\epsilon' + (2 + \frac{12}{5}x^2)\epsilon_m]^2 + (\epsilon'')^2} \quad (3.10)$$

olarak hesaplanır. Burada r_p parçacıkların yarıçapı, ϵ_m parçacıkları saran ortamın relatif geçirgenliği, λ fotonların dalga boyu, ϵ' ve ϵ'' karşılıklı olarak metalin geçirgenliğinin gerçek ve sanal kısımları ve $x = \frac{2\pi N \tau_p}{\lambda}$ dir. Burada N ortamın kırılma indisidir.



Şekil 3.4. Alüminyum parçacıkların parçacık büyüklüğünün sönme katsayısına etkisi. Parçacık hacmine göre normalleştirilmiş sönme katsayısı ($C_{sön}/V_{parç}$) foton dalga boyuna göre 2 – 20 nm yarıçaplı parçacıklar için çizilmiştir. Parçacıklar havadadır ve hava için $\epsilon_m=1.006$, kırılma indisi $N = 1.0008$ dir. Gerçek ϵ' ve sanal ϵ'' kısımlarını hesaplamak için: serbest elektron plazma frekansı $\nu_p=3.6 \times 10^{15}$ Hz, yavaşlatma frekansı $\gamma = 1.94 \times 10^{15}$ Hz ve Fermi hızı $\nu_F= 2 \times 10^6$ ms⁻¹ dir.

Örneği incelemiş olursak, dört parçacığın artan yüzey etkilerini kapsayan $\gamma_{parç}$ kullanılarak sönme katsayısının, foton dalga boyuna bağlı olduğunu görüyoruz. Burada parçacıkların yarı çapı 2, 5, 12, 20 nm'dir. Grafik hacme göre normalleştirilmiş yani $C_{sön}/V_{parç}$ dir. 20nm yarıçaplı parçacığa baktığımız zaman, sönmenin tepe noktası 180 nm'dir. Parçacığın büyüklüyü azalırken iki şey olur.

- 1) Sönmenin maksimumu sola doğru, yani kısa dalga boylarına kayar. Daha küçük parçacıklar, daha küçük dalga boylarını soğurur.
- 2) Parçacık büzüldükçe tepe yüksekliği de onunla büzülür ve eğri genişler

Daha küçük parçacıklar, elektron plazmasının parçacık yüzeyi ile etkileşmesinin artması yüzünden, sönmeyi artırır. Bu etki denklem 3.10'a uygun olarak, grafikte de kendini gösterir. Bu etkiler bizim tez çalışmamızda da simülasyon sonuçlarında kendisini kanıtlamıştır.

Nanoboyutlardaki çubuğa benzer metal parçacıklar hem boyuna, hem de enine plazma frekansına sahiptir. Bu nedenle sönme katsayısı üzerinde iki tepe vardır. Genel olarak enine frekans parçacığın frekansı kadardır, boyuna frekans ise daha küçüktür.

3.3.4. Renkler, Altın ve Gümüş Parçacıklarının Rolü

Yukarıdaki alüminyum örneğinde soğrulan ışığın dalga boyu 400-750nm'den yani görünür ışıktan küçüktür. Eğer sönme katsayısı eğrileri görünür bölgede maksimuma ulaşıydılar, o zaman nanoparçacıkların soğurduğu renge göre parçacıl büyüklüyü ayarlanabilirdi. Materyallerin çoğu nanoboyutlarda rengini değiştirebilirler. Bu metallerin serbest elektron plazmalarını daha küçük parçacıklara sıkıştırdıkça, parçacıkların yüzey etkileşmelerinin yüksek olması nedeniyle elektronların ortalama yolları sınırlanır, böylece fotonların davranışı değişir ve parçacıkların renkleri de değişmiş olur.

Çapları 6-20nm olan altın parçacıklar mavi ve sarı ışığın daha kısa dalga boylarında soğurup, fakat kırmızını daha uzun dalga boylarında soğurmuyordur. Bunun için kırmızı rengi alır. Çaplar 20-25nm olunca, soğurma tepeleri genişlediğinden, uzun dalga boylarına doğru kayma olur. Bu durum Alüminyum parçacıklarında, olduğu gibidir. Altının rengi yakut kırmızısından mora dönüşür, sonra menekşe sonra ise 160nm çaplı nanoparçacıklar için dönük mavi olur. 160 nm'den büyük yarıçaplarda ise yeniden rengi altının normal rengi olur.

Gümüş nanoparçacıklarda altına benzer şekilde renk değiştirirler. Çapları 10nm olan gümüş parçacıkları, açık sarı, 130nm'nin üzerine çıktığı zaman menekşe, kırmızı, kapalı ve açık mavi, mor, sonra gri yeşil ve yeniden gümüşün normal boyutlardaki rengine geri döner.

“Renkli metal parçacıklarının biyolojik uygulamaları vardır. Bir uygulamada, biyolojik doku boyanır ve biyolojik maddede olan özel biyolojik süreçler belirlenir. Metal parçacıklar özel bir molekülle kaplanır ve molekül de hedef molekülle bağlanır. Bu, fonksiyon yapıcı hedef molekülün olduğu çevreye verilir ve renk değişiklikleri izlenir veya renkli parçacıkların sonlandığı yerin izi izlenir ve sonlandıkları yerde parçacıklar algılanır, belirlenir ve her çeşit molekülün izi bulunur. Örneğin, birçok altın parçacığı birbirinin yakınına getirildiğinde (kolloidde olduğu gibi, yani kolloidde parçacıklar, ortalama parçacık çapından daha küçük bir uzaklıkla ayrılır) parçacıklardaki elektronların plazma frekansları, birbiriyle bağlaşmaya ve yüksek enerjiye doğru kaymaya meyillidir (kolloid kırmızından maviye döner). Eğer altın parçacıkları, ufak DNA parçasıyla kimyasal olarak kaplanırsa ve parçacıkları bilinmeyen DNA içeren çözeltiye eklenirse, diziler

eşlenir ve noktalar toplanırsa, çözelti kırmızıdan maviye döner. Aksi durumda çözelti kırmızı kalır. Bu özel DNA dizilerini algılamak, genetik ve virüslü hastalıkları teşhis için önemlidir.”

3.3.5. Yarı iletkenler

Bir yarı iletkenle karşılaşan, tam enerjili bir foton, elektronu değerlik bandından, iletkenlik bandında boş duruma çıkarır. Bu geçiş band aralığı ile temsil edilen özel bir enerji gerektirir. Böylelikle, band aralığını ayarlayarak fotonun hangi maddeyle etkileşebileceğinin kontrol edilebilir.

3.3.6. Nanoölçekli yarı iletkenlerin Band aralığını ayarlama

Bir maddenin enerji bandlarının yayılıp ve kesikli enerji düzeylerine ayrılması için, düşük düzeyde atomlara düşürülür. Bu zaman band aralığı genişler. Bunun olanaklı olduğu yarı iletken parçacıkların büyüklük ölçeği, kuantum noktası olarak bilinir. Kuantum noktası küçüldükçe band aralığı büyür. Buda bizim maddenin band aralığını ayarlamamıza yardımcı olur.

Fotonun enerjisi elektronun geçişte kaybettiği enerjiye eşit olursa, uyarılmış elektronun iletkenlik bandından değerlik bandına geri düştüğü anlamına gelir. Yani, bu enerji band aralığı enerjisi kadardır. Buna göre, maddenin büyüklüğünü değiştirerek band aralığı enerjisini değiştirirsek, yayınlanan fotonların enerjisini yani elektromanyetik enerjinin dalga boyunu değiştirmiş oluruz. Yani, bu aynı zamanda, fotonun soğurduğu enerjiyi değiştirildiği anlamına gelir. Fotonun enerjisi E ve dalga boyu λ arasında aşağıdaki bağlantı vardır: Burada h - Plank sabitidir (6.626176×10^{-34})

$$\lambda = \frac{hc}{E} \quad (3.11)$$

3.3.7 Nano parçacıkların özellikleri

Bilindiği gibi bir metal (Altın, Demir, Alüminyum vb.) 10cm, ya da daha fazla olsada aynı manyetik, mekanik ve kimyasal özelliklere sahiptir. Bu özellikler 100 atom büyüklüğünden küçük olduğu zaman değişir ve nanometre boyutlarda farklılıklar gösterir (Fevzi Köksal, 2014).

4. NANOANENLER VE MODELLENMESİ

Antenler geleneksel olarak birçok mikrodalga uygulaması için önemli bir rol oynamaktadır (Shegai et al., 2011). Son zamanlardaki gelişmeler, yakın kızılötesi ve optik bölgelerdeki antenlerin, daha iyi manipülasyon, emisyon kontrolü ve ışık dalgalarının boş alana yayılmasının mümkün olmasını, bununla birlikte farklı yönlerde gelişimin olduğunu gösteriyor. Son yıllarda, yakın-kızılötesi, uzak-kızılötesi ve görünür menzilde çeşitli uygulamalar için nano ölçekli optik antenler önerilmiştir. Örneğin, nanoantenler saçılma, algılama, foto-algılama, ısı transferi, çipler arası veya çip içi optik iletişim, enerji hasadı vb. alanlarda verimli ve gelecek vaat eden unsurlar olarak kabul edilmiştir. Ayrıca, optik nanoanten hayati bir rol oynayabilir. Güç tüketimini azaltmada rol oynar ve çip üzerinde optik ara bağlantılar için daha yüksek hıza izin verir (Anker et al., 2010) (Schuller, Taubner, & Brongersma, 2009).

Metalik nanoyapıların plazmon rezonansları tarafından sağlanan geniş kesitler ve güçlü sınırlama bu sistemleri nanoantene uygulamak için ideal bir platform haline getirir. Makroskobik benzerleri gibi, nanoantenler de derin alt dalga boyu yayıcılar ve serbest radyasyon arasındaki bağlantıyı güçlendirerek aynı zamanda artan bir yönlülük sağlar (Sanders & Manjavacas, 2020).

Farklar çoğunlukla, optik frekanslarda metallerin mükemmel iletkenler olmamasından, ancak serbest elektron gazı olarak tanımlanan güçlü korelasyonlu plazmalardan kaynaklanmaktadır (Alda, Rico-García, López-Alonso, & Boreman, 2005). Örneğin, radyasyonun metallere nüfuz etmesi artık ihmal edilemez. Elektromanyetik tepki, güçlü bir şekilde eşleşmiş plazmanın özelliği olan toplu elektron salınımları (yüzey plazmonları, SP) tarafından belirlenir (Ross & Lee, 2009). Bu toplu salınımlar, geleneksel anten tasarımlarının doğrudan küçültülmesini imkansız hale getirir. Bu nedenle, optik frekanslarda bir anten artık dış dalga boyuna değil, malzeme özelliklerine bağlı olarak daha kısa etkili dalga boyuna tepki verir (Novotny, 2007).

Bununla birlikte, THz kızılötesi ve görünür alanlarda çalışma dalga boylarına sahip optik nanoantenler, malzeme dağılımının optik nanoantenlerin geometrisi ve boyutundan daha fazla olmasa da eşit derecede önemli olması nedeniyle daha karmaşıktır. Bu dalga boylarında metalin geçirgenliği çalışma frekansına bağlıdır ve bu nedenle plazmonik etkiler bu tür nanoantenlerin tasarımında önemli faktörlerden biri olarak düşünülmelidir (Alu & Engheta, 2013).

Nanoantenler üç ana bölümden oluşur: yer düzlemi, optik rezonans boşluğu ve anten. Anten elektromanyetik dalgayı emer, yer düzlemi ışığı antene geri yansıtmak görevini yapar ve optik rezonans boşluğu bükülür ve ışığı yer düzlemi yoluyla antene doğru yoğunlaştırır (Kumar, Tanwar, & Sharma, 2016).



Şekil 4.1 Nanoanten yapısı

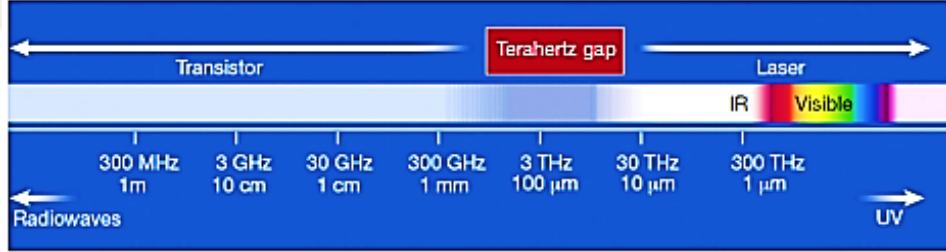
Nanoantenlerin hazırlanma şekli, aslında yapı olarak normal antenlerle aynıdır. Anten üzerine gelen ışık, antendeki elektronların gelen ışıkla aynı frekansta ileri geri hareket etmesine neden olur. Bu, gelen elektromanyetik dalganın salınan elektrik alanından kaynaklanır. Elektronların hareketi, anten devresinde alternatif bir akımdır. Bunu DC gücüne dönüştürmek için, tipik olarak bir tür diyotla yapılan AC akımının düzeltilmesi gerekir. Ortaya çıkan DC akımı daha sonra harici bir yüke güç sağlamak için kullanılabilir (Kumar et al., 2016).

4.1. Terahertz frekansları

Terahertz radyasyonu elektromanyetik spektrumda kızılötesi radyasyon ve mikrodalga radyasyonu arasında yer alır ve bunların her biri ile bazı özellikleri paylaşır. Kızılötesi ve mikrodalga radyasyonu gibi, terahertz radyasyonu da bir görüş hattında hareket eder ve iyonlaştırıcı değildir. Mikrodalga radyasyonu gibi, terahertz radyasyonu da çok çeşitli iletken olmayan malzemelere nüfuz edebilir. Terahertz radyasyonu giysilerden, kâğıttan, kartondan, ahşaptan, duvardan, plastikten ve seramikten geçebilir. Penetrasyon derinliği tipik olarak mikrodalga radyasyonundan daha azdır. Terahertz radyasyonu sis ve bulutlardan sınırlı nüfuz eder ve sıvı su veya metalden geçemez. Fizikte, milimetre altı radyasyon, terahertz dalgaları, terahertz ışığı, T-ışınları, T-dalgaları, T-ışığı, T lux veya THz olarak da adlandırılan terahertz radyasyonu, 0,3 ila 10 terahertz frekanslarındaki elektromanyetik dalgalardan oluşur. Terim, milimetre dalga bandının yüksek frekans kenarı olan 300 GHz ile uzak kızılötesi ışık bandının düşük frekans kenarı olan 3000 GHz arasındaki frekanslara sahip elektromanyetik radyasyon için geçerlidir. Bu banttaki radyasyonun karşılık gelen dalga boyları 1 mm ila 0,1 mm (veya 100 mm) arasında değişir. Terahertz radyasyonu 1 mm dalga boyunda başlayıp

daha kısa dalga boylarına doğru ilerlediği için bazen milimetre-altı bandı ve radyasyonu milimetre-altı dalgalar olarak bilinir.

Dünyanın atmosferi, belirli su buharına sahip olduğundan soğrulma bantlarında güçlü bir terahertz radyasyon emicidir, bu nedenle terahertz radyasyon aralığı, uzun mesafeli iletişimde yararlılığını etkileyecek kadar sınırlıdır. Bununla birlikte, ~10 m'lik mesafelerde bant, yüksek bant genişliğine sahip kablosuz ağ sistemlerinin, özellikle iç mekan sistemlerinin görüntülenmesi ve inşasında birçok faydalı uygulamaya hala izin verebilir. Ayrıca, tutarlı terahertz radyasyonunun üretilmesi ve saptanması, pahalı olmayan ticari kaynaklara rağmen teknik olarak zor olmaya devam etmektedir. Artık 300-1000 GHz aralığında (spektrumun alt kısmı), jirotronlar, geri dalga osilatörleri ve rezonans tünelleme diyotları da dahil olmak üzere mevcuttur.



Şekil 4.2. Frekans aralığı

Terahertz Spektroskopi, Tutarlı THz frekans radyasyonu üretmek için femtosaniye lazerlerin ilk kullanımından bu yana, daha yüksek güç kaynakları ve daha geniş bant genişliğine sahip sistemler geliştirmeye yönelik bir itici güç olmuştur. Toplu elektro-optik doğrultma, yüzey alanı üretimi ve fotoiletken yayıcıların ultra hızlı geçişi dahil olmak üzere bir dizi teknik araştırılmıştır. Bu farklı yöntemlerden, fotoiletken yayıcıların, görünür/kızılötesine yakın darbeleri THz radyasyonuna dönüştürmek için en etkili teknik olduğu kanıtlanmıştır ve THz spektroskopisi ve görüntüleme için yaygın olarak kullanılmıştır. Bu teknikte, bant üstü aralıklı bir femtosaniye darbesi kullanan bir yarı iletken kristal ve bu foto uyarılı taşıyıcılar daha sonra uygulanan bir elektrik alanı ile hızlandırılır elektron deliği çiftleri oluşturulur. Foto uyarılı taşıyıcılar, Maxwell denklemlerine göre THz radyasyonu yayan bir geçici akım darbesi oluşturur.

4.2. Terahertz Frekanslarında Metallerin Özellikleri ve Nanoanten Modellemesi

THz frekanslarda çalışan nanoantenleri doğru şekilde tasarlamak ve modellemek için, ilk önce bir metalin artık mükemmel bir iletken gibi davranmadığını ve bu zaman

onun elektromanyetik özelliklerini tanımlayabilmemiz gerekir (Biagioni, Huang, & Hecht, 2012). Paul Drude tarafından geliştirilen ve iletken malzemeyi sabit pozitif iyonların bir arka planında hareket eden serbest elektronların ideal bir gazı olarak gören basit bir model aracılığıyla bir iletkenin optik özelliklerini elde etmek mümkündür. Bu teoriye göre, kurucu atomların değerlik elektronları, iletkenlik elektronları haline gelir ve malzemenin hacminde serbestçe hareket edebilir. Metalin karmaşık dielektrik işlevi, bu nedenle, gelen radyasyonun elektrik alanı ile bu elektron toplusunun etkileşimini tanımlayan basit bir model aracılığıyla elde edilebilir ve bu, aşağıdaki ifadeye yol açar (Dressel & Grüner, 2002) :

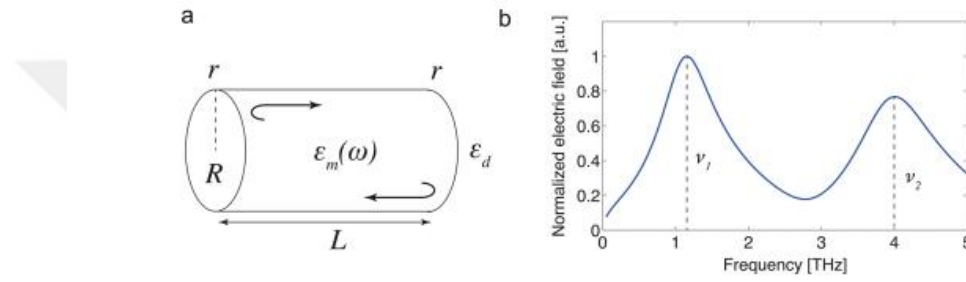
$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + \gamma^2} + i \frac{\omega_p^2 \gamma}{(\omega^2 + \gamma^2)\omega} \quad \omega_p^2 = \frac{e^2 N}{m \varepsilon_0} \quad (4.1)$$

burada ε_∞ yüksek frekanslardaki dielektrik sabitidir, ω_p plazma frekansıdır (N taşıyıcı konsantrasyonu, e elektron yükü, m elektron kütlesi ve ε_0 vakumda dielektrik sabitidir) ve $\gamma = 1/\tau$ Drude saçılma oranı (τ taşıyıcı ömrüdür). Görüldüğü gibi, bu modelde, karmaşık dielektrik fonksiyonu ve sonuç olarak diğer tüm optik parametreler (yani, kırılma indisi ve iletkenlik), tamamen malzeme plazma frekansı ve saçılma oranı ile karakterize edilir. Asil metallerin plazma frekansı görünür UV bölgesinde (örneğin altın ve gümüş için 2067 THz ve 2321 THz), THz frekanslarında ($\omega \ll \omega_p$) bulunduğundan geçirgenliğin gerçek kısmı, modülde negatif ve önemli ölçüde büyük olur. Sonlu ve negatif ε_1 in, bir iletken ve bir yalıtkan arasındaki arayüzde bir yüzey dalgasının (optik frekanslarda yüzey plazmon polarizasyonu) varlığı için temel bir gerekliliktir. Klasik Drude modeli, taşıyıcıların kuantum doğasını incelemek için Drude-Sommerfeld modeli geliştirilebilir. Metallerin geçirgenliğinin türetilmesinde bu modelin ana sonucu, uygulanan bir elektrik alanı altında, taşıyıcıların malzeme içinde etkin bir kütle m_{eff} ile hareket etmesidir. Son olarak, taşıyıcılar ve iyonlar arasında bir geri yükleme kuvvetinin varlığını varsayan Drude-Lorenz modelini kullanarak bağlı elektronların geçirgenliğe katkılarını hesaba katmak mümkündür. En genel senaryoda, k sayısı gerçek elektronik geçişleri göz önünde bulundurarak, denklem 4.1'deki karmaşık dielektrik fonksiyona eklenebilir.

$$\omega_p^2 \sum_k f_k / (\omega_{0,k}^2 - \omega^2 - i\omega\gamma_{0,k}) \quad (4.2)$$

Burada f_k , $\omega_{0,k}^2$, $\gamma_{0,k}$ sırasıyla güç, merkez frekansı ve sönümleme oranıdır.

Bir metalin elektromanyetik tepkisinin ve uzantılarının Drude açıklamasından yararlanarak, metalik bir nanoantenin rezonans özelliklerini tahmin edebilen bir model geliştirebiliriz. Bu basitleştirilmiş model, aynı zamanda, bu tür nanocihazların optik tepkisine yol açan fiziksel mekanizmanın daha iyi anlaşılmasını sağlar. En basit nanoanten geometrisini, sabit yarıçaplı R ve L uzunluğunda silindirik bir teli ele alınmıştır (hesaplamaları basitleştirmek için).



Şekil 4.3. a) bir Fabry-Perot rezonatörü olarak bir tel nanoantenin modellenmesi için gösterim. b) Denk.4 kullanılarak elde edilen nanoantenin ucundaki normalleştirilmiş elektrik alan genliği (Ref.'den alınan THz frekanslarında altının geçirgenliği)

Sade olması için, yalnızca temel yüzey modu TM₀ (enine manyetik, eksenel simetrik mod) karmaşık dielektrik fonksiyonu $\epsilon_m(\omega)$ olan ince bir metal tel boyunca yayılmasını incelenebilir. Telin, sabit geçirgenliğe ϵ_d sahip bir dielektrik ortam ile çevrelendiğini varsayılmaktadır. Temel yüzey modu anten boyunca yayılır ve uçlarından yansıtılır, böylece geleneksel bir Fabry-Perot rezonatöründe olduğu gibi belirli frekanslarda duran dalgalar (ilişkili rezonanslar) oluşur bu rezonanslar, anten uzunluğu dalga boyunun yarısının katlarına yakın olduğunda meydana gelir ve özellikle aşağıdaki ilişki sağlandığında en düşük dereceli rezonans ortaya çıkar:

$$\lambda_{\text{res}}/2n_{\text{eff}} = L + 2\delta \quad (4.3)$$

Burada n_{eff} yayılan yüzey modunun etkin indeksidir ve δ anten uçlarının reaktansı nedeniyle anten uzunluğundaki görünür artışı hesaba katmak için tanıtılır. Silindirik bir tel için karmaşık etkin kırılma indisi n_{eff} , aşağıdaki denkleme yol açan dielektrik metalik

silindir arayüzünde uygun sınır koşulları uygulanarak Maxwell denklemlerinden bakılabilir:

$$\frac{\varepsilon_m I_1(\gamma_m R)}{k_m I_0(\gamma_m R)} + \frac{\varepsilon_d K_1(\gamma_d R)}{k_d K_0(\gamma_d R)} = 0 \quad (4.4)$$

Burada I_j ve K_j değiştirilmiş Bessel fonksiyonlarıdır.

$$\gamma_{m,d} = k_0 \sqrt{n_{eff}^2 - \varepsilon_{m,d}} \quad (4.5)$$

$K_0 = \omega/c$ c, vakumda ışık hızı

$$k = \sqrt{n_{eff}^2 - \varepsilon_{m,d}} \quad (4.6)$$

Antenin uçlarındaki karmaşık yansımaya katsayısı r (genlik ve faz dahil). Temel olarak, antenin dışındaki elektrik ve manyetik alanlar, (sorunun simetrisini korumak için) rotasyonel olarak değişmez olan serbest uzay modları cinsinden genişletilir. Daha sonra, yansımaya katsayısını almak için enine elektrik ve manyetik alanlar arayüzde (antenin ucunda) eşleştirilir. Son olarak, bir Fabry Perot boşluğu için kullanılan tipik prosedür izleyerek ve normal geliş için telin sadece tek modlarının uyarılabileceğini göz önünde bulundurarak tel antenin uçlarındaki elektrik alanını hesaplayabiliriz.

$$E_{tip} = E_0 \frac{(1-re^{i\varphi})(1-e^{i\varphi})}{1-r^2 e^{2i\varphi}} \quad \varphi = k_0 n_{eff} L \quad (4.7)$$

Burada E_0 nanoantenin uçlarında birleşen alan, φ yarı dönüşte yayılan yüzey modu tarafından tel boyunca biriken fazdır. Şekilde 100µm uzunluğunda altın tel nanoantenin (80nm çap) vakuumda rezonans özellikleri gösteriliyor. Burada nano antenin

$$\lambda_1 \approx 2n_{eff}L \left(v_1 = \frac{c}{\lambda_1} \right) \text{ ve } \lambda_2 \approx 2n_{eff}L/3 \left(v_2 = \frac{c}{\lambda_2} \right) \quad (4.8)$$

koşullarına uygun gelen ilk iki mod açıkça görülüyor.

4.3. MATLAB

MATLAB, MATrix LABoratory kelimelerinden üretilmiş olup ilk defa 1985 yılında, Moler tarafından matematik işlemlerinin bilgisayar ortamında kolayca yapılabilmesini sağlamak için geliştirilmiştir. İlk başta FORTRAN dili ile yazılmış olan MATLAB, sonralar C programlama dili ile yazılmıştır. Hazırlandığı altyapı dillerinde de yorumlama yapabilen ve bu dillerde yazılmış kodları yorumlayabilen bir derleyici olarak da kullanılabilir. MATLAB'ı ileri seviye bir hesap makinesi olarak düşünebiliriz. Tüm hesaplamalarında matris altyapısını kullanmaktadır. MATLAB, bilinen matris altyapısına programlama yetenekleri yaklaşıp onu bilinen, matris mantığının biraz ilerisine taşımış ve bu yeteneğini Nümerik Analiz, Simülasyonlar, Data Analizi, Sinyal Analizi, İstatistik Hesaplamalar vb. Birçok alanda kullanılabilecek yapıları da bize sunmuştur. MATLAB modüler yapıdadır ve birçok pakete sahiptir. Bu sayede genel amacı olan hesaplamadan daha çok özelleşmiş programlama yöntemlerini de kullanmamıza olanak sağlamaktadır. Bu tez çalışması için yalnızca hesaplama kısmı yeterli olmuştur (Kılıç, 2020).

Tablo4.1. MATLAB yazılımının genel özelliklerinin karşılaştırılması

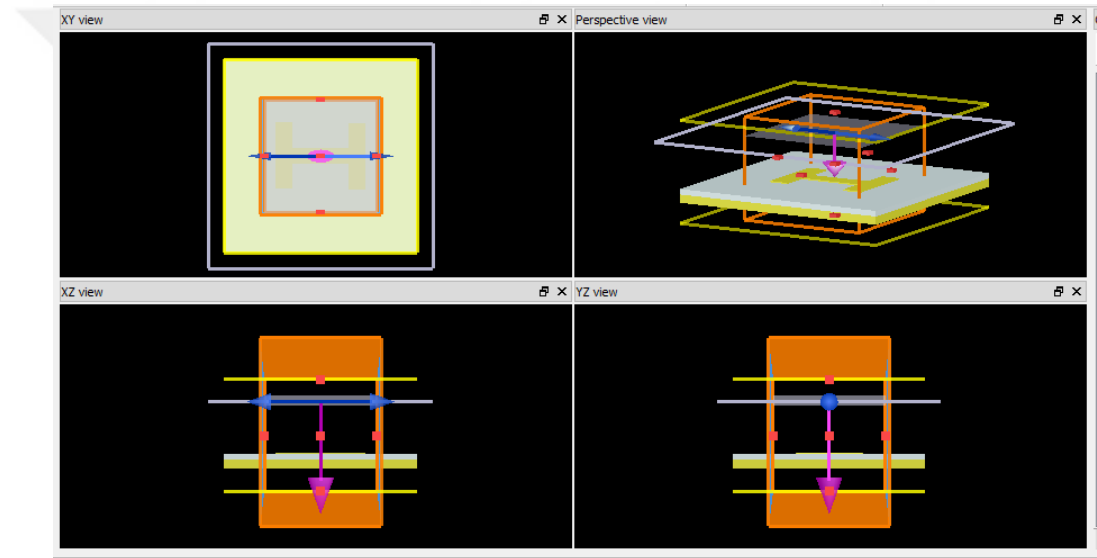
İşlem	Genel yaklaşım	MATLAB
Açık Kaynak Kodu	Hem evet hem hayır	Hayır
Hız Optimizasyonu	Çoğunlukla hızlı	Oldukça hızlı
Kolay Yazılım Hazırlığı	Çoğunlukla karmaşık	Oldukça basit
Kütüphane Bolluğu	Bulması zor, karışık ama çoğunlukla sürekli gelişiyor	Kendi kütüphaneleri var ve sürekli geliştiriliyor
Dil tipi	Çeşitli	Yüksek seviye dil
Paylaşım ve Gelişim	Çeşitli	Sadece Matlab tarafından

MATLAB'da problem çözme süreci 5 adımdan meydana gelir;

- Problemin tanımlanması
- Matematiksel bir metot belirlenmesi
- Problemin çözümü için bir hesaplama yönteminin geliştirilmesi
- Hesaplama metodunun uygulanması
- Sonuçların test edilmesi ve değerlendirilmesi

4.4. ANSYS Lumerical FDTD

Lumerical FDTD programı, nanoantenlerin, mükemmel soğurucuların, metamateryallerin tasarımı, ölçümü ve optimizasyonu için bir programdır. İlk sürümleri merkezi Kanada olan bir Lumerical şirketi tarafından hazırlansa da şu anda ANSYS şirketi tarafından geliştirilmektedir. Bu program üretimini yapacağımız nanoantenin önceden bir modelini hazırlayıp, simüle etmeye bize yardımcı oluyor. Böylece, maliyet açısından kazanılmasına neden olur. Program Windows, Linux, Mac işletim sistemlerini desteklemektedir. Programda fotonik görüntüleme, aydınlatma, fotovoltaiik, biyofotonik gibi uygulamalardan yararlanabiliriz. Şekil 4.4’de tasarımın gerçekleştiği 4 pencerenin arayüzü verilmiştir.



Şekil 4.4. FDTD programı arayüzü

Bir nanoanten tasarımını gerçekleştirmek için en basit 4 aşama gerçekleştirilmesi gerekiyor:

- 1) Design (Tasarım)
- 2) Source (Kaynak)
- 3) Monitör
- 4) Boundry (Sınır)

Design kısmı nanoantenin ölçülerinin belirlendiği, tasarlandığı kısımdır. Bu tasarım dahili modellerden veya dışarıdan aktarılan modellerle yapılabilir. FDTD zengin kütüphaneye sahip olmasına rağmen bu tez için, DNT-2.4 ve PMMA materyallerinin

dataalarını dışarıdan aktarılmış olup, uygunluk testi yapıldıktan sonra, programda kullanılmıştır.

Source kısmı kaynak kısmıdır. Bu genel olarak ışıma olarak da düşünülebilir. İsteğe bağlı olarak yukarıdan aşağıya veya aşağıdan yukarıya doğru kaynak seçilebilir. Kaynak seçenekleri olarak dipol, düzlem dalga kaynağı, saçılmış alan, toplam alan kaynakları, Gauss kaynağı gibi seçenekler vardır. Tezde kullanılan kaynak düzgün düzlem kaynağı olmuştur.

Monitör sonuçları elde etmek içindir. Alan dağılımını izlemek ve iletim, yansıma gibi bilgileri gösteren monitör seçenekleri vardır.

Boundry simülasyon sınırı ve alanını belirler. Bölgeler tanımlanır. Ağ seçilir. Simülasyon doğruluğunu artırmak için tasarıma uygun sayıda ağ belirlemek gerekir. Simülasyon sonuçlarının doğrulukları artırmak için diğer yöntem alt kısım bölgeni daha ince ağı sahip olacak şekilde ayarlanmaktadır. Programımızda en yaygın sınır koşulları PML, metal, periyodik, blok, simetrik ve anti-simetriktir. Tez çalışmasında sınır koşulu olarak periyodik ve PML olarak belirlenmesi uygun görülmüştür.

5. ARAŞTIRMA VE SONUÇ

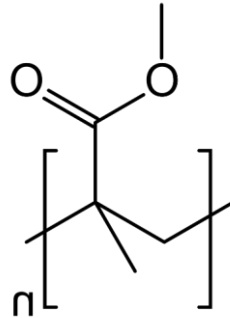
Bu tezin araştırma kısmı iki bölümden oluşmaktadır. İlk kısım PMMA ve DNT materyallerinin literatür taraması yaparak parametrelerinin bulunmasından sonra yeniden Lorenz ve Drude-Lorenz modeli ile matematiksel modellenmesi yapılmıştır.

5.1 PMMA

Ticari adları Acrylite, Crylux, Plaxiglas olan mühendislik plastikleri adı ile tanınan, şeffaf bir termoplastik bir grup malzemedir. Kimyasal ismi Polimetil metakrilat kısaca PMMA'dır. Genellikle hafif ve kırılmaya karşı dayanıklı olduğu için cama alternatif olarak kullanılıyor. Bundan dolayı silisyum bazlı olmasa da, diğer termoplastikler gibi, teknik olarak bir cam türü olarak sınıflandırılır. Kimyasal içeriğine bakarsak PMMA, sentetik polimerdir.

PMMA'nın şeffaflığı, cilalanabilirlik, KV toleransının, çekme ve eğilme mukavemeti iyi olduğundan, ısı direnci ve kimyasal direncin öneminin az olduğu durumlarda polikarbonata iyi bir alternatif olarak görülebilir. Polikarbonatta zararlı bisfenol-A maddesinin olması da PMMA'nı daha kullanışlı hale getirir. Düşük maliyeti ve kolay işlenmesi artı yönlerindendir.

1.17–1.20 g/cm³ yoğunluğa sahip, sert ve hafif bir malzemedir. Bu yoğunluk, camın yoğunluğunun yarsından azdır ama hem camdan hem polistrenden daha dayanıklıdır. Bu materyel 460 C'de tutuşur. karbondioksit, su, karbon monoksit ve formaldehit gibi bileşiklerden oluşturur. PMMA, görünür ışığın %92'sine kadar (3 mm kalınlık) iletir ve kırılma indeksi nedeniyle (589.3 nm'de 1.4905) her bir yüzeyinden yaklaşık %4'lük bir yansıma sağlar. Yaklaşık 300 nm'nin altındaki dalga boylarında ultraviyole (UV) ışığı filtreler (sıradan pencere camına benzer). Bazı üreticiler 300–400 nm aralığında Emilimi artırmak için PMMA'ya kaplamalar veya katkı maddeleri ekler.



Şekil 5.1. PMMA

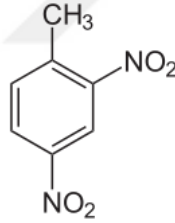
PMMA, 2.800 nm'ye kadar kızılötesi ışığı geçirir ve 25.000 nm'ye kadar daha uzun dalga boylarındaki KÖ'yi engeller. Renkli PMMA çeşitleri, görünür ışığı engellerken belirli kızılötesi dalga boylarının geçmesine izin verir (örneğin, uzaktan kumanda veya ısı sensörü uygulamaları için).

PMMA, ağırlıkça %0,3–0,4'lük bir maksimum su emme oranına sahiptir. Artan su emilimi ile çekme mukavemeti azalır. Termal genleşme katsayısı $(5-10) \times 10^{-5} \text{ }^{\circ}\text{C}^{-1}$ 'de nispeten yüksektir.

5.2. Dnt-2.4

2,4-Dinitrotoluen (DNT) veya dinitro, $\text{C}_7\text{H}_6\text{N}_2\text{O}_4$ formülüne sahip organik bir bileşiktir. Bu soluk sarı kristalin katı, trinitrotoluenin (TNT) öncüsü olarak iyi bilinir, ancak esas olarak toluen dizosiyanatın öncüsü olarak üretilir.

DNT için altı farklı izomer turu mevcuttur. En yaygın olanı 2,4-dinitrotoluendir. Toluenin nitrasyonu sırayla mononitrotoluen, DNT ve son olarak TNT verir. 2,4-DNT, dinitrasyondan elde edilen ana üründür, diğer ana ürün yaklaşık %30 1,3-DNT'dir. 4-nitrotoluenin nitrasyonu 2,4-DNT verir.



Şekil 5.2. 2,4-DNT

Çoğu zaman DNT, esnek poliüretan köpükler üretmek için kullanılan toluen diizosiyanat üretiminde kullanılır. DNT, 2,4-toluenediamin üretmek için hidrojene edilir ve bu da toluen diizosiyanat vermek için fosjenlenir. Böylelikle, 1999 yıllarından sonra yılda takriben 1,4 milyar kilogram üretilmektedir. Patlayıcı endüstrisi de sık kullanılan endüstri alanları arasında bulunmaktadır. Üretiminin bir kısmı TNT'ye dönüştürülse de tek başına patlayıcı gibi kullanılmaz.

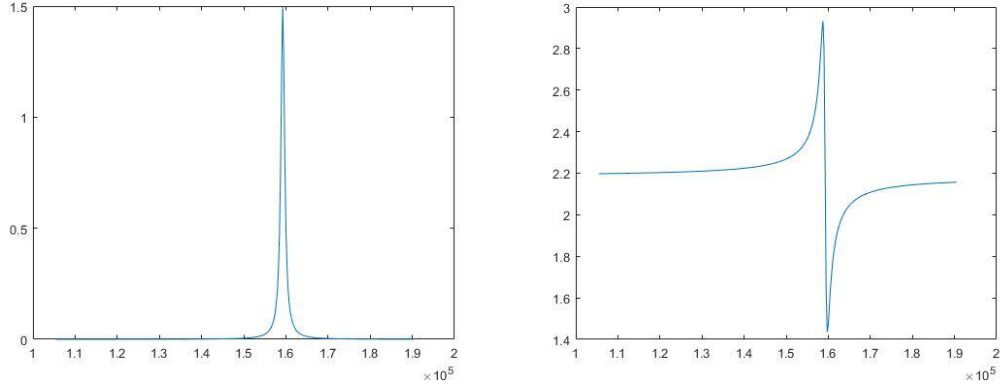
DNT, genellikle, plastikleştirici, caydırıcı kaplama, dumansız barutlar veya iticilerde ve yanma hızı değiştirici olarak kullanılır. Kanserojen ve toksik olduğu için, modern formülasyonlar kullanımından kaçınma eğilimindedir. Bu uygulamada genellikle dibütil ftalat ile kullanılır.

İkinci kısım ise Nanoantenlerin tasarımıdır. Nümune için Drude Lorenz modeli ile DNT molekulunun titreşim dalga boyunun grafik ve datalarının modellenip alınması gösterilmiştir:

```

23 |
24 - dalg= [ 5.249829201e-06:0.01e-06:9.487989505e-06];
25 - frek = 299792458./dalg;
26 - omega = 2*pi*frek
27
28 - E= k+A*w1^2./((w1^2-omega.^2)-i*omega.*y1);
29 - figure
30 - plot(1./dalg,real(E))
31 - figure
32 - plot(1./dalg,imag(E))

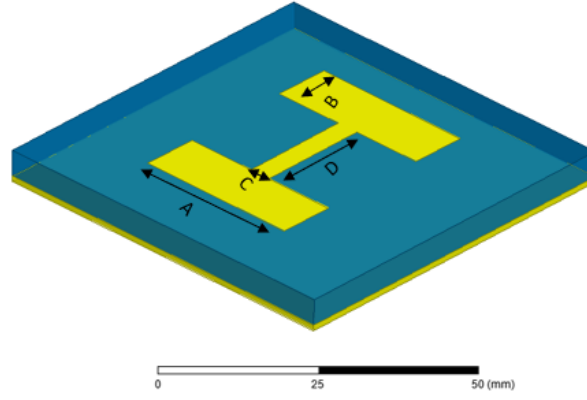
```



Şekil 5.3. a) MATLAB kodu, b) DNT imajiner kök c) DNT reel kök

5.3. Tasarlanan Nanoantenler

Bu kısmın temel odak noktası farklı metallerle ve dielektrik malzemelerle, istediğimiz dalga boylarını rahat şekilde değiştirebileceğimiz nanoantenler tasarlamaktır. Farklı geometrik (V, M, S, Z, T) şekillerde denemelerden sonra nanoantenin H şekilli olmasına karar verilmiştir. Aşağıdaki şekilde tasarlanan antenin 3 boyutlu modeli görülebilir:



Şekil. 5.4. Nanoantenin geometrisi

Burada dielektrik ve metallerin değiştirilerek soğrulmanın artırılması araştırılmıştır. Aynı zamanda H barın sağ ve sol taraflarının uzunluklarının değiştirilmesinin soğrulmanın maksimum olduğu dalga boylarına nasıl etki ettiği gözlemlenmiştir.

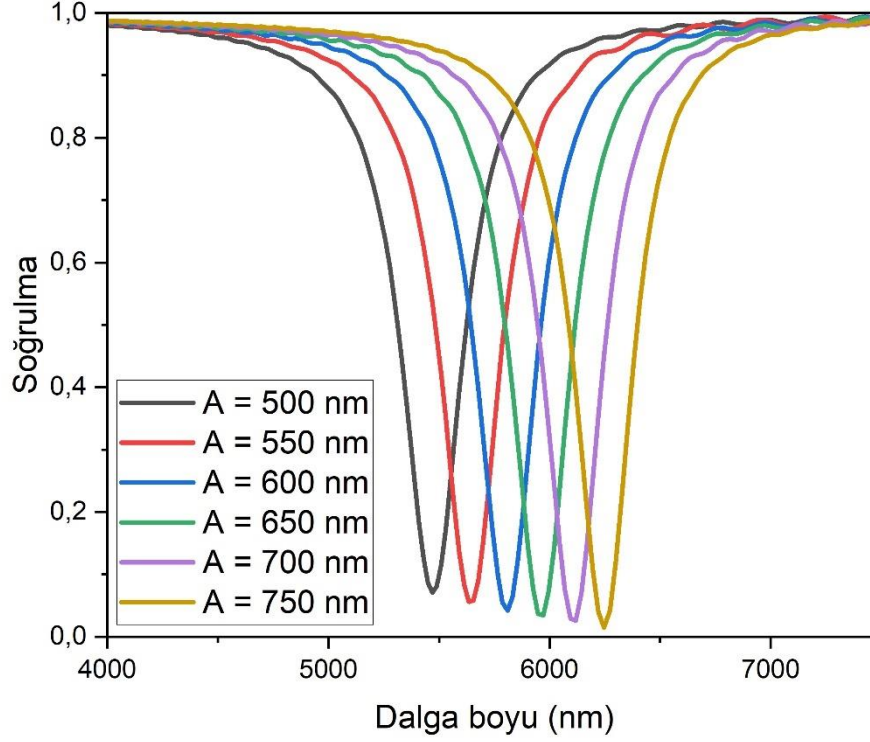
5.3.1. Altın Silika Altın

İlk tasarlanan anten Altın Silisyum Altın şeklindedir. Soğrulma sonuçları aşağıdaki şekilde gibidir. Burada altının sönmleme katsayısı 2.9278, refraktif indeksi ise 0.27732'dir. Silikanın refraktif indeksi ise 1.4585, sönmleme katsayısı 3.9046, dielektrik sabiti $\epsilon_1 = -15.243$ $\epsilon_2 = 0.40284$, soğrulma katsayısı $\alpha = 8.3503e+5 \text{ cm}^{-1}$, kromatik dağılım $dn/d\lambda = 0.28818 \mu\text{m}^{-1}$ grup indeksi $n_g = -0.11775$ eşittir. Silikanın reaktif indeksi 1.4585, Abbe numarası 67.82, kromatik dağılımı $dn/d\lambda = -0.035209 \mu\text{m}^{-1}$, grup indeksi $n_g = 1.4792$, grup hızı dağılımı $GVD = 57.540 \text{ fs}^2/\text{mm}$ $D = -313.91 \text{ ps}/(\text{nm km})$, dağılım fonksiyonu ise

$$n^2 - 1 = \frac{0.6961663\lambda^2}{\lambda^2 - 0.0684043^2} + \frac{0.4079426\lambda^2}{\lambda^2 - 0.1162414^2} + \frac{0.8974794\lambda^2}{\lambda^2 - 9.896161^2}. \quad (5.1)$$

Uygun olarak ölçüler sırasıyla B=200nm, C=200nm, D=300nm gibidir. Dielektrik 140nm, üst barın ölçüsü 30nm'dir. Daha detaylı yazarsak 500nm bar uzunluğunda 0.076 soğrulma, 550nm bar uzunluğunda 0.055 soğrulma, 600nm bar uzunluğunda 0.042 soğrulma, 650nm bar uzunluğunda 0.034 soğrulma, 700nm bar uzunluğunda 0.026 soğrulma, 750nm bar uzunluğunda 0.014 soğrulma elde edilmiştir. Bu soğrulma sonuçlarının hepsi spektroskopide kullanmak için geçerli bir sonuçtur. Gerekli dalga boyu

6000 nm olduğu için bu dalga boyunu 650nm bar uzunluğunda yakalanmıştır. Bunun için bu nanoanten için soğrulmanın 0.034 olduğunu söylenebilir. Altın barlı nanoanten için daha iyi sonuç elde edildiği için bu nanoantenden DNT teşhisi için kullanılmamıştır. Bunun içinde diğer parametrelerin sonuçlarına bakılmasına gerek duyulmamıştır.

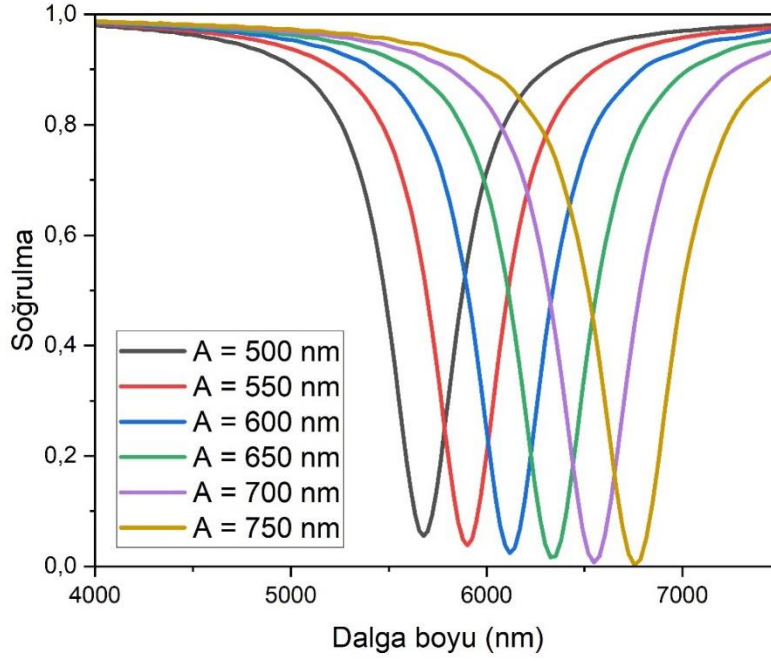


Şekil. 5.5. Altın silika altın kuruluşlu tasarlanan nanoantenin simülasyon sonuçlarının karşılaştırılması. Uygun olarak sonuçları siyah çizgi ile gösterilen nanoanten barının ölçüleri 500 nm, kırmızı ile gösterilen 550 nm, mavi ile gösterilen 600nm, yeşil ile gösterilen 650 nm, morla gösterilen 700nm, sarıyla gösterilen 750 nm'dir.

5.3.2. Altın MgF₂ Altın

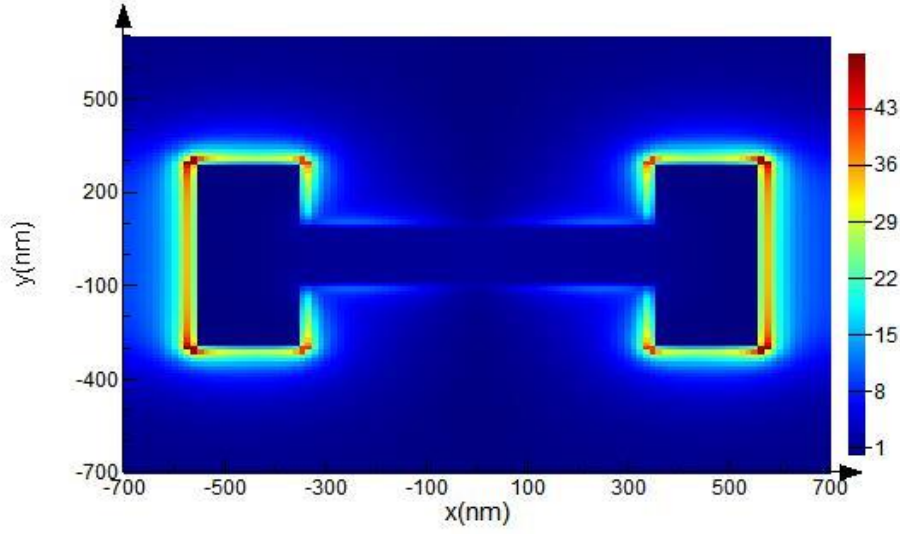
İkinci Altın barlı antenin dielektrik kısmı Magnezyum Floritten hazırlanmıştır. MgF₂'nin refraktif indeksi 1.3777, abbe numarası 106.22, kromatik dağılımı $dn/d\lambda = -0.018522 \mu\text{m}^{-1}$, grup indeksi 1.3886, grup hızı dağılımı $GVD = 30.538 \text{ fs}^2/\text{mm}$ $D = -166.60 \text{ ps}/(\text{nm km})$. Dispersiyon formülüne bakacak olursak,

$$n^2 - 1 = \frac{0.48755108\lambda^2}{\lambda^2 - 0.04338408^2} + \frac{0.39875031\lambda^2}{\lambda^2 - 0.09461442^2} + \frac{2.3120353\lambda^2}{\lambda^2 - 23.793604^2} \quad (5.2)$$



Şekil. 5.6. Altın MGF2 altın kuruluşlu tasarlanan nanoantenin simülasyon sonuçlarının karşılaştırılması. Uygun olarak sonuçları siyah çizgi ile gösterilen nanoanten barının ölçüleri 500 nm, kırmızı ile gösterilen 550 nm, mavi ile gösterilen 600nm, yeşil ile gösterilen 650 nm, morla gösterilen 700nm, sarıyla gösterilen 750 nm'dir.

Uygun olarak ölçüler sırasıyla B=200nm, C=200nm, D=300nm gibidir. Dielektrik 140nm, üst barın ölçüsü 30nm'dir. Burada 500nm bar uzunluğunda 0.054 soğrulma, 550nm bar uzunluğunda 0.037 soğrulma, 600nm bar uzunluğunda 0.023 soğrulma, 650nm bar uzunluğunda 0.016 soğrulma, 700nm bar uzunluğunda 0.006 soğrulma, 750nm bar uzunluğunda 0.002 soğrulma elde edilmiştir. Bu sonuçlarında hepsi spektroskopide kullanmak için geçerli nanoantenlerdir, Ayrıca altın barlı antenler için en iyi sonuç Magnezyum Florit dielektriği kullanılan nanoantenler olmuştur. Bunun için istenilen dalga boyunda, DNT-2.4 ve PMMA analizi bu antenle yapılacaktır. Aynı zamanda bar uzunluğunun değişiminin soğrulamaya ve soğrulmanın maksimum olduğu dalga boylarına etkisine bakılmıştır. Ek olarak elektrik alan dağılımında bakılmıştır.



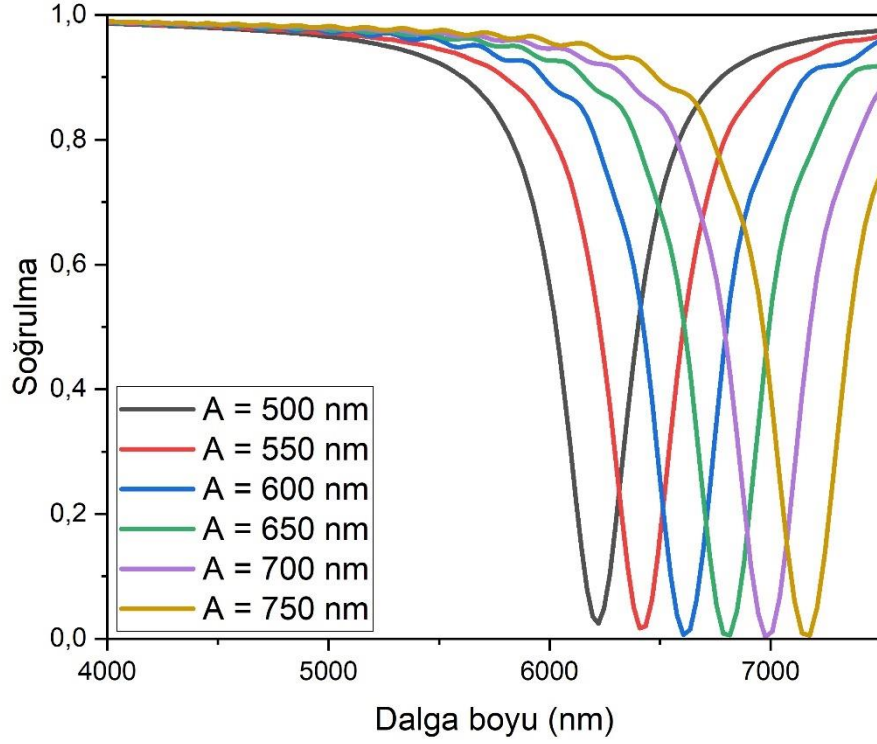
Şekil. 5.7. Elektrik alan yoğunluğu

5.3.3. Altın Alümina Altın

Alümina dielektriğinin kullanıldığı üçüncü nanoantenin Silikadan iyi, Magnezyum Florid'den aşağı soğrulması elde edilmiştir. Uygun olarak ölçüler sırasıyla B=200nm, C=200nm, D=300nm gibidir. Dielektrik 140nm, üst barın ölçüsü 30nm'dir. Alüminanın genel karakterisyonuna bakılacak olursa, refraktif indeksi 1.7682, Abbe numarası 72.31, kromatik dağılımı $dn/d\lambda = -0.055289 \mu\text{m}^{-1}$, grup indeksi 1.8007, grup hızı dağılımı $GVD = 91.175 \text{ fs}^2/\text{mm}$ $D = -497.41 \text{ ps}/(\text{nm km})$, Dispersiyon formülü ise aşağıdaki gibidir:

$$n^2 - 1 = \frac{1.4313493\lambda^2}{\lambda^2 - 0.0726631^2} + \frac{0.650544713\lambda^2}{\lambda^2 - 0.1193242^2} + \frac{5.3414021\lambda^2}{\lambda^2 - 18.028251^2} \quad (5.3)$$

Nanoantende, 500nm bar uzunluğunda 0.028 soğrulma, 550nm bar uzunluğunda 0.016 soğrulma, 600nm bar uzunluğunda 0.006 soğrulma, 650nm bar uzunluğunda 0.005 soğrulma, 700nm bar uzunluğunda 0.002 soğrulma, 750nm bar uzunluğunda 0.005 soğrulma elde edilmiştir. Bu sonuçlar spektroskopide kullanılabilir olsa da Altın tabanlı nanoantenlerde Magnezyum Florit dielektrik kullanılan nanoantenlerde daha iyi sonuç elde edildiğinden spektroskopide o nanoantenler kullanılmıştır. Aşağıdaki şekilde nanoanten bar ölçülerinin değişiminin karşılaştırılması verilmiştir:



Şekil. 5.8. Altın alümina altın kuruluşlu tasarlanan nanoantenin simülasyon sonuçlarının karşılaştırılması. Uygun olarak sonuçları siyah çizgi ile gösterilen nanoanten barının ölçüleri 500 nm, kırmızı ile gösterilen 550 nm, mavi ile gösterilen 600nm, yeşil ile gösterilen 650 nm, morla gösterilen 700nm, sarıyla gösterilen 750 nm'dir.

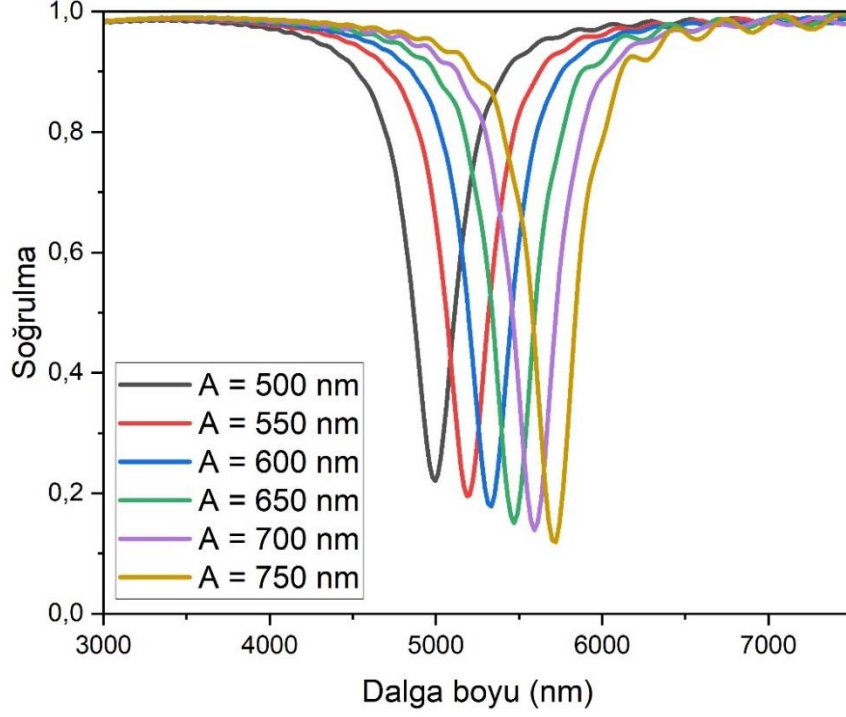
5.3.4. Gümüş Silika Gümüş

Nanoantenlerin tasarımında kullanılan, ikinci metal gümüştür. Gümüşün refraktif indeksi 0.051585, sönümleme katsayısı 3.9046, dielektrik sabiti $\epsilon_1 = -15.243$ $\epsilon_2 = 0.40284$, soğrulma katsayısı $\alpha = 8.3503e+5 \text{ cm}^{-1}$, kromatik dağılım $dn/d\lambda = 0.28818 \mu\text{m}^{-1}$ grup indeksi $n_g = -0.11775$ eşittir. Silikanın reaktif indeksi 1.4585, Abbe numarası 67.82, kromatik dağılımı $dn/d\lambda = -0.035209 \mu\text{m}^{-1}$, grup indeksi $n_g = 1.4792$, grup hızı dağılımı $GVD = 57.540 \text{ fs}^2/\text{mm}$ $D = -313.91 \text{ ps}/(\text{nm km})$, dağılım fonksiyonu ise;

$$n^2 - 1 = \frac{0.6961663\lambda^2}{\lambda^2 - 0.0684043^2} + \frac{0.4079426\lambda^2}{\lambda^2 - 0.1162414^2} + \frac{0.8974794\lambda^2}{\lambda^2 - 9.896161^2} \quad (5.4)$$

Uygun olarak ölçüler sırasıyla B=200nm, C=200nm, D=300nm gibidir. Dielektrik 140 nm, üst barın ölçüsü 30nm'dir. Burada 500nm bar uzunluğunda 0.220 soğrulma, 550nm

bar uzunluğunda 0.194 soğrulma, 600nm bar uzunluğunda 0.178 soğrulma, 650nm bar uzunluğunda 0.150 soğrulma, 700nm bar uzunluğunda 0.138 soğrulma, 750nm bar uzunluğunda 0.118 soğrulma elde edilmiştir. Bu sonuçlar her 3 nanoantenin soğrulmasından düşük olsa da spektroskopide kullanılmaya uygun sonuçlardır.

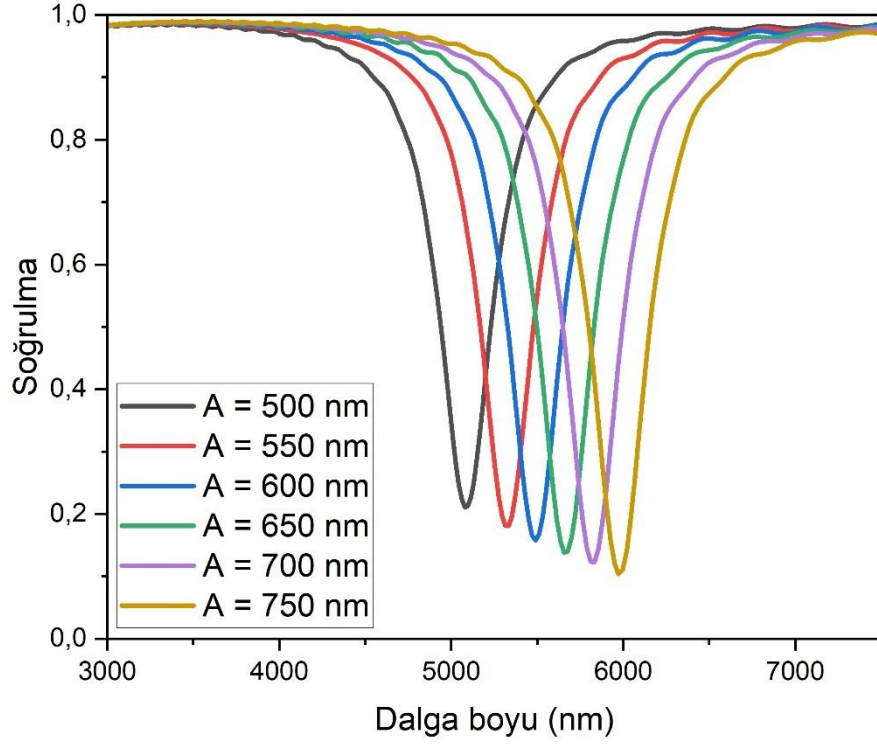


Şekil. 5.9. Gümüş silika gümüş kuruluşlu tasarlanan nanoantenin simülasyon sonuçlarının karşılaştırılması. Uygun olarak sonuçları siyah çizgi ile gösterilen nanoanten barının ölçüleri 500 nm, kırmızı ile gösterilen 550 nm, mavi ile gösterilen 600nm, yeşil ile gösterilen 650 nm, morla gösterilen 700nm, sarıyla gösterilen 750 nm'dir.

5.3.5. Gümüş MgF₂ Gümüş

Gümüş barla tasarlanan ikinci nanoantenin dielektriği Magnezyum Florit olarak seçilmiştir. MgF₂'nin refraktif indeksi 1.3777, abbe numarası 106.22, kromatik dağılımı $dn/d\lambda = -0.018522 \mu\text{m}^{-1}$, grup indeksi 1.3886, grup hızı dağılımı $GVD = 30.538 \text{ fs}^2/\text{mm}$ $D = -166.60 \text{ ps}/(\text{nm km})$. Dispersiyon formülüne bakılırsa,

$$n^2 - 1 = \frac{0.48755108\lambda^2}{\lambda^2 - 0.04338408^2} + \frac{0.39875031\lambda^2}{\lambda^2 - 0.09461442^2} + \frac{2.3120353\lambda^2}{\lambda^2 - 23.793604^2} \quad (5.5)$$



Şekil. 5.10. Gümüş MgF_2 gümüş kuruluşlu tasarlanan nanoantenin simülasyon sonuçlarının karşılaştırılması. Uygun olarak sonuçları siyah çizgi ile gösterilen nanoanten barının ölçüleri 500 nm, kırmızı ile gösterilen 550 nm, mavi ile gösterilen 600nm, yeşil ile gösterilen 650 nm, morla gösterilen 700nm, sarıyla gösterilen 750 nm'dir.

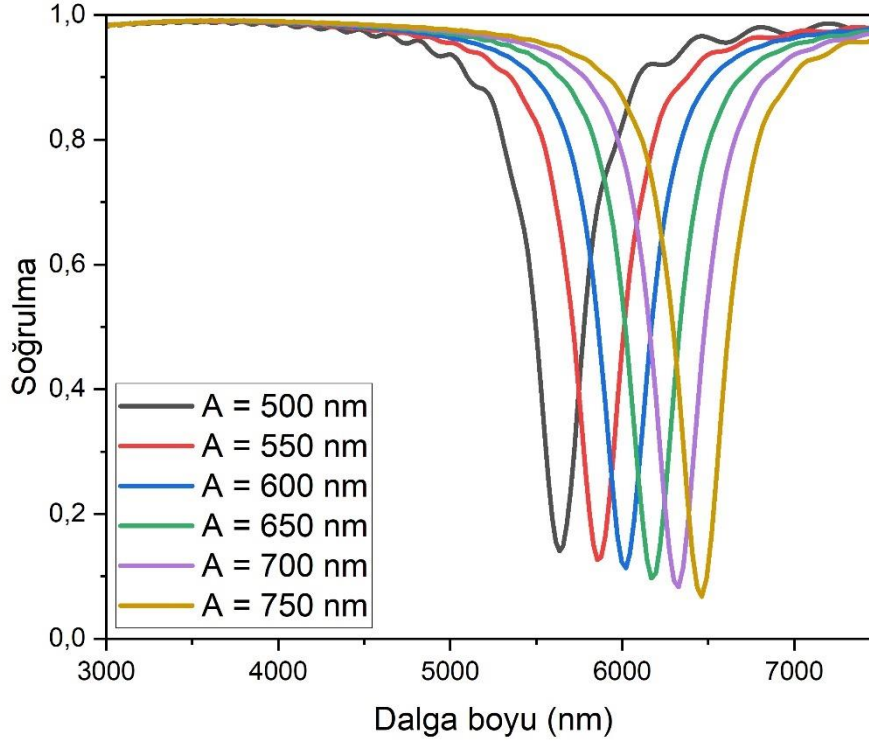
Uygun olarak ölçüler sırasıyla $B=200nm$, $C=200nm$, $D=300nm$ gibidir. Dielektrik 140nm, üst barın ölçüsü 30nm'dir. Bu nanoanten 500nm bar uzunluğunda 0.210 soğrulma, 550nm bar uzunluğunda 0.181 soğrulma, 600nm bar uzunluğunda 0.157 soğrulma, 650nm bar uzunluğunda 0.137 soğrulma, 700nm bar uzunluğunda 0.122 soğrulma, 750nm bar uzunluğunda 0.103 soğrulma elde edilmiştir. Soğrulma dielektriği silika olan, gümüş nanoantenden iyi olsada tüm altın nanoantenlerden düşük soğrulma elde edilmiştir. Buna rağmen bu nanoanten de spektroskopi için uygun soğrulmalara sahiptir.

5.3.6. Gümüş Alümina Gümüş

Gümüş tabanlı nanoantenlerden tasarım sonucu en iyi sonuç alınan Alümina dielektrikli nanoantendir. Alüminanın genel karakterisyonuna bakılırsa, refraktif indeksi

1.7682, Abbe numarası 72.31, kromatik dağılımı $dn/d\lambda = -0.055289 \mu\text{m}^{-1}$, grup indeksi 1.8007, grup hızı dağılımı $GVD = 91.175 \text{ fs}^2/\text{mm D} = -497.41 \text{ ps}/(\text{nm km})$, Dispersiyon formülü ise aşağıdaki gibidir:

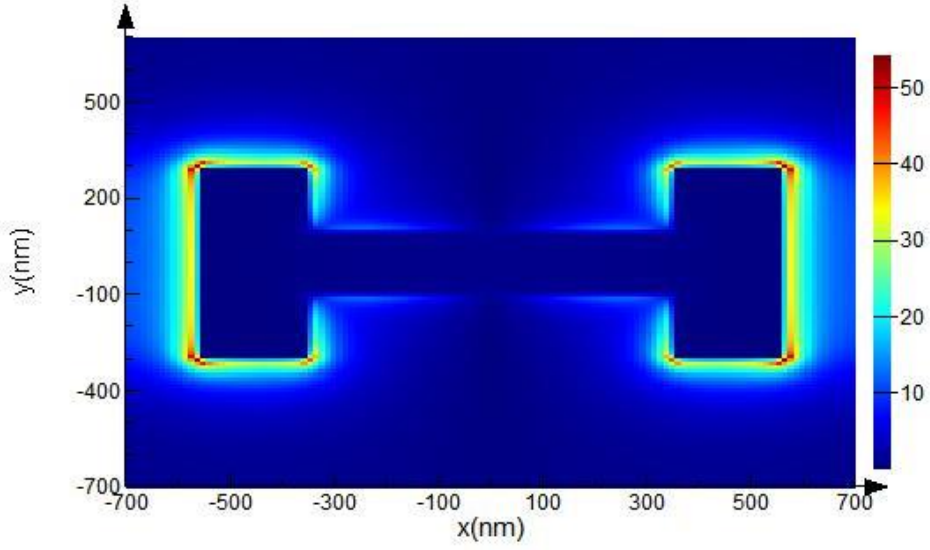
$$n^2 - 1 = \frac{1.4313493\lambda^2}{\lambda^2 - 0.0726631^2} + \frac{0.650544713\lambda^2}{\lambda^2 - 0.1193242^2} + \frac{5.3414021\lambda^2}{\lambda^2 - 18.028251^2} \quad (5.6)$$



Şekil. 5.11. Gümüş Alümina gümüş kuruluşlu tasarlanan nanoantenin simülasyon sonuçlarının karşılaştırılması. Uygun olarak sonuçları siyah çizgi ile gösterilen nanoanten barının ölçüleri 500 nm, kırmızı ile gösterilen 550 nm, mavi ile gösterilen 600nm, yeşil ile gösterilen 650 nm, morla gösterilen 700nm, sarıyla gösterilen 750 nm'dir.

Bu antenin ölçüleri sırasıyla $B=200\text{nm}$, $C=200\text{nm}$, $D=300\text{nm}$ gibidir. Dielektrik 140nm , üst barın ölçüsü 30nm 'dir. Uygun olarak 500nm bar uzunluğunda 0.140 soğrulma, 550nm bar uzunluğunda 0.126 soğrulma, 600nm bar uzunluğunda 0.112 soğrulma, 650nm bar uzunluğunda 0.096 soğrulma, 700nm bar uzunluğunda 0.082 soğrulma, 750nm bar uzunluğunda 0.067 soğrulma elde edilmiştir. Spektroskopi için uygun görülmüştür.

Elektrik alan dağılımı aşağıdaki resimdeki gibidir.



Şekil. 5.12. Elektrik alan yoğunluğu

Soğrulma antenin kenar kısımlarında gerçekleşmiştir.

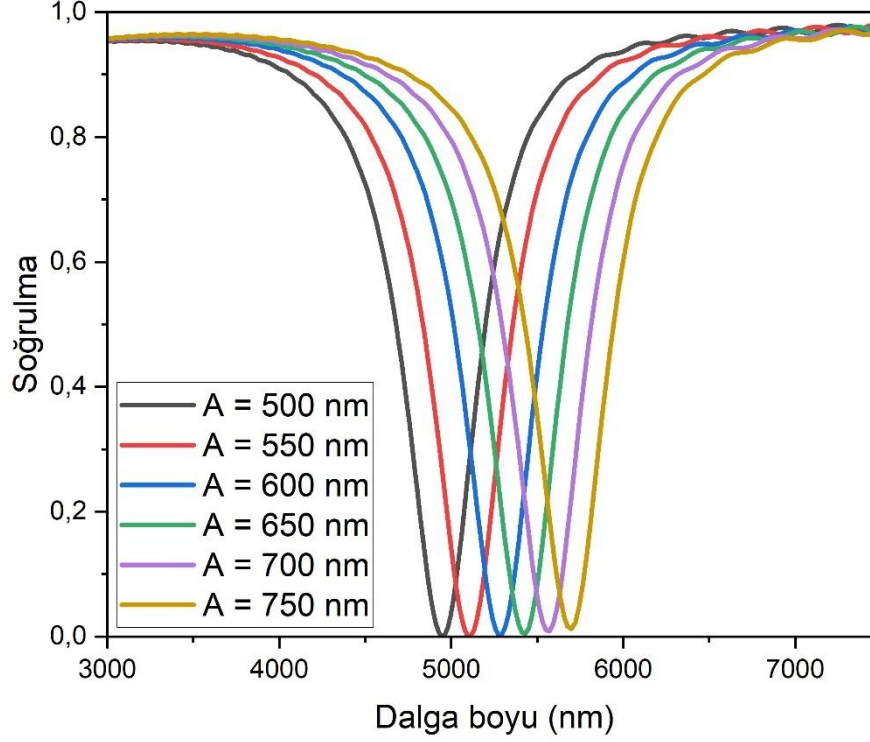
5.3.7. Alüminyum Silika Alüminyum

Tasarımın üçüncü metali alüminyumdur. Alüminyumun refraktif indeksi 1.1978, sönümlleme katsayısı 7.0488, dielektrik sabitleri $\epsilon_1 = -48.251$, $\epsilon_2 = 16.886$, soğrulma katsayısı $\alpha = 1.5075e+6 \text{ cm}^{-1}$, kromatik dağılımı $dn/d\lambda = 5.2023 \mu\text{m}^{-1}$, grup indeksi $ng = -1.8590$. . Silikanın reaktif indeksi 1.4585, Abbe numarası 67.82, kromatik dağılımı $dn/d\lambda = -0.035209 \mu\text{m}^{-1}$, grup indeksi $ng = 1.4792$, grup hızı dağılımı $GVD = 57.540 \text{ fs}^2/\text{mm}$ $D = -313.91 \text{ ps}/(\text{nm km})$, dağılım fonksiyonu ise

$$n^2 - 1 = \frac{0.6961663\lambda^2}{\lambda^2 - 0.0684043^2} + \frac{0.4079426\lambda^2}{\lambda^2 - 0.1162414^2} + \frac{0.8974794\lambda^2}{\lambda^2 - 9.896161^2} \quad (5.7)$$

Bu antenin ölçüleri sırasıyla B=200nm, C=200nm, D=300nm gibidir. Dielektrik kalınlığı 140nm, üst barın ölçüsü 30nm'dir. Uygun olarak 500nm bar uzunluğunda 0.000 soğrulma, 550nm bar uzunluğunda 0.001 soğrulma, 600nm bar uzunluğunda 0.002 soğrulma, 650nm bar uzunluğunda 0.004 soğrulma, 700nm bar uzunluğunda 0.008 soğrulma, 750nm bar uzunluğunda 0.012 soğrulma elde edilmiştir. Yalnızca Alüminyum barlı antenler içinde değil, tasarlanan tüm antenler arasında en iyi soğrulma elde edilen nanoanten AL SiO₂ AL kuruluşlu olan nanoantenlerdir. Ama tasarlanan antenlerin hiçbiri

6000 nm dalga boyunda olmadığı için genel olarak spektroskopide kullanılmaya yararlı olsa bile bu çalışmadaki materyallerin teşhisi için yararlı değildir.



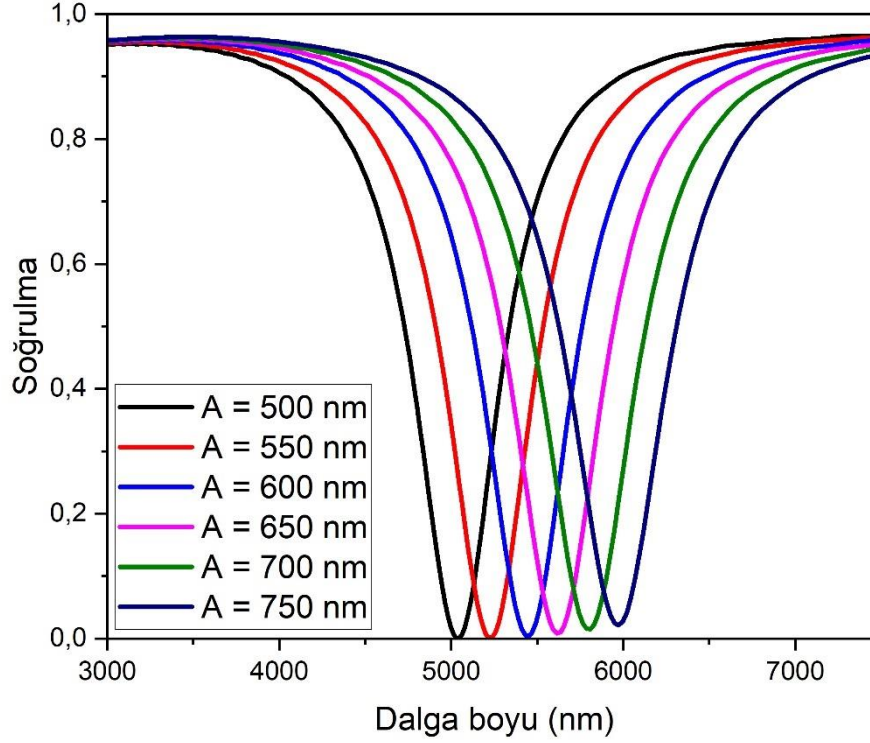
Şekil. 5.13. Alüminyum silika alüminyum kuruluşlu tasarlanan nanoantenin simülasyon sonuçlarının karşılaştırılması. Uygun olarak sonuçları siyah çizgi ile gösterilen nanoanten barının ölçüleri 500 nm, kırmızı ile gösterilen 550 nm, mavi ile gösterilen 600nm, yeşil ile gösterilen 650 nm, morla gösterilen 700nm, sarıyla gösterilen 750 nm'dir.

5.3.8. Alüminyum MgF₂ alüminyum

Dielektriği Magnezyum Flörit olan Alüminyum barlı nanoantende soğrulma sonuçları spektroskopi uygulamaları için uygundur. MgF₂'nin refraktif indeksi 1.3777, abbe numarası 106.22, kromatik dağılımı $dn/d\lambda = -0.018522 \mu\text{m}^{-1}$, grup indeksi 1.3886, grup hızı dağılımı $GVD = 30.538 \text{ fs}^2/\text{mm}$ $D = -166.60 \text{ ps}/(\text{nm km})$. Dispersiyon formülüne bakılırsa,

$$n^2 - 1 = \frac{0.48755108\lambda^2}{\lambda^2 - 0.04338408^2} + \frac{0.39875031\lambda^2}{\lambda^2 - 0.09461442^2} + \frac{2.3120353\lambda^2}{\lambda^2 - 23.793604^2} \quad (5.8)$$

Bu antenin ölçüleri sırasıyla B=200nm, C=200nm, D=300nm gibidir. Dielektrik kalınlığı 140 nm, üst barın ölçüsü 30nm'dir. Uygun olarak 500nm bar uzunluğunda 0.000 soğrulma, 550nm bar uzunluğunda 0.000 soğrulma, 600nm bar uzunluğunda 0.003 soğrulma, 650nm bar uzunluğunda 0.008 soğrulma, 700nm bar uzunluğunda 0.014 soğrulma, 750nm bar uzunluğunda 0.021 soğrulma elde edilmiştir.

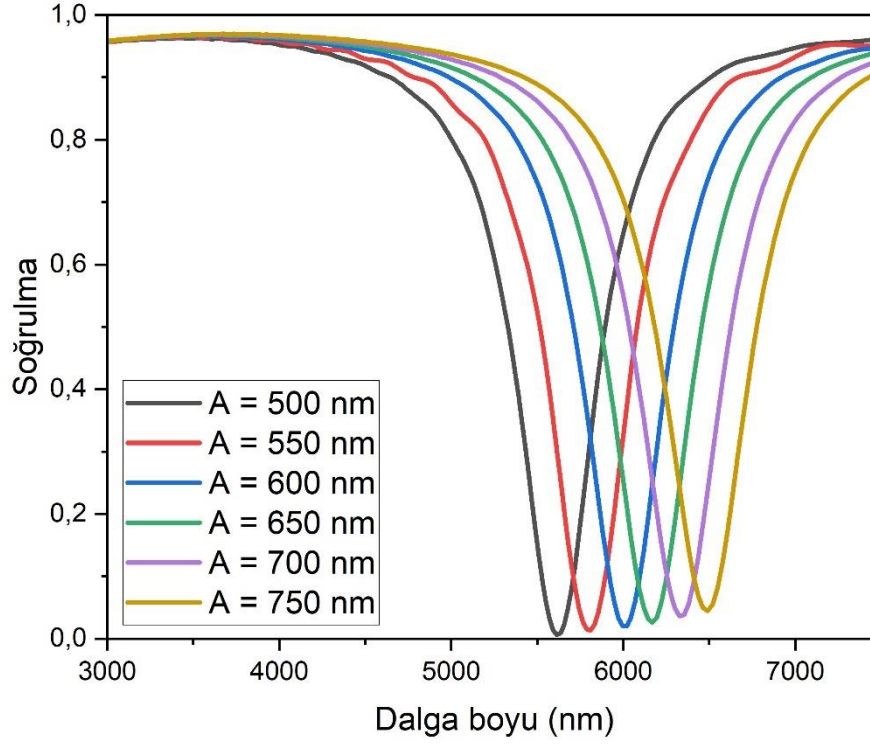


Şekil. 5.14. Alüminyum MgF₂ alüminyum kuruluşlu tasarlanan nanoantenin simülasyon sonuçlarının karşılaştırılması. Uygun olarak sonuçları siyah çizgi ile gösterilen nanoanten barının ölçüleri 500 nm, kırmızı ile gösterilen 550 nm, mavi ile gösterilen 600nm, mor ile gösterilen 650 nm, yeşil gösterilen 700nm, lacivertle gösterilen 750 nm'dir.

5.3.9. Alüminyum Alümina Alüminyum

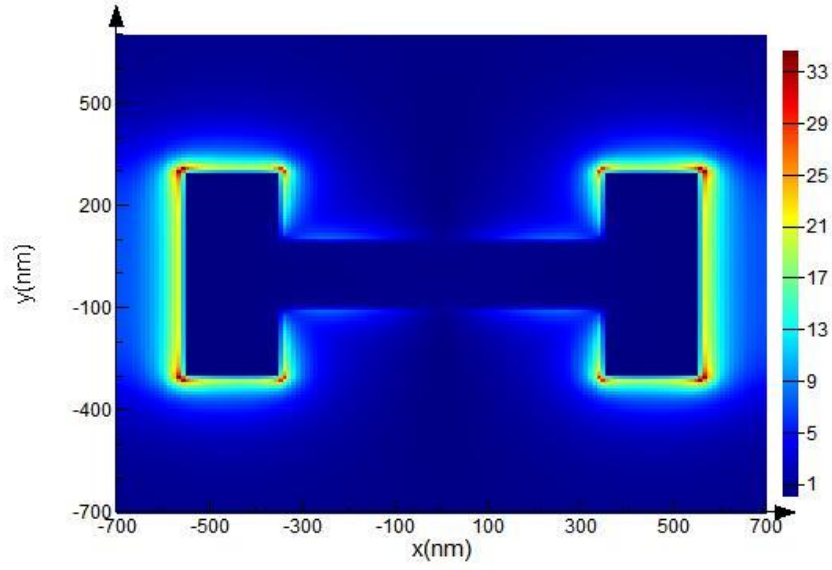
Bu antenin ölçüleri sırasıyla B=200nm, C=200nm, D=300nm gibidir. Dielektrik kalınlığı 140nm, üst barın ölçüsü 30nm'dir. Alüminanın genel karakterisyonuna bakılacak olursa, refraktif indeksi 1.7682, Abbe numarası 72.31, kromatik dağılımı $dn/d\lambda = -0.055289 \mu\text{m}^{-1}$, grup indeksi 1.8007, grup hızı dağılımı $GVD = 91.175 \text{ fs}^2/\text{mm}$ $D = -497.41 \text{ ps}/(\text{nm km})$, Dispersiyon formülü ise aşağıdaki gibidir:

$$n^2 - 1 = \frac{1.4313493\lambda^2}{\lambda^2 - 0.0726631^2} + \frac{0.650544713\lambda^2}{\lambda^2 - 0.1193242^2} + \frac{5.3414021\lambda^2}{\lambda^2 - 18.028251^2} \quad (5.9)$$



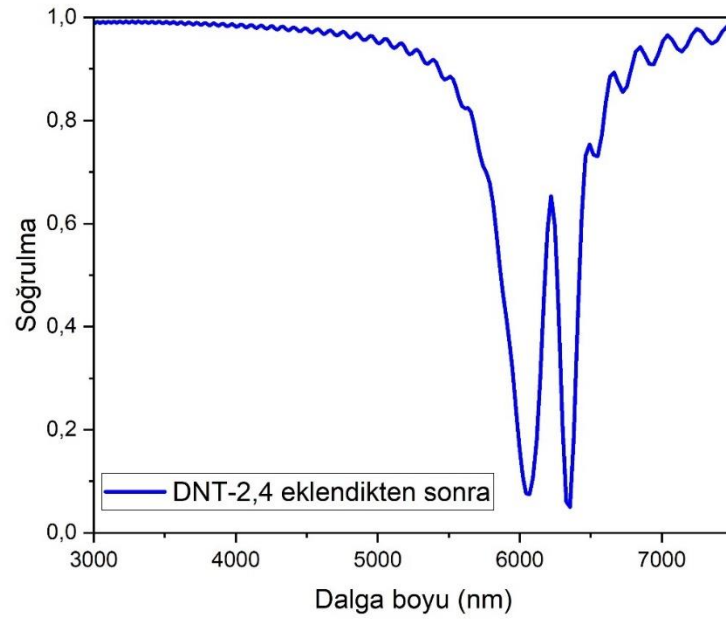
Şekil. 5.15. Alüminyum Alümina Alüminyum kuruluşlu tasarlanan nanoantenin simülasyon sonuçlarının karşılaştırılması. Uygun olarak sonuçları siyah çizgi ile gösterilen nanoanten barının ölçüleri 500 nm, kırmızı ile gösterilen 550 nm, mavi ile gösterilen 600nm, yeşil ile gösterilen 650 nm, morla gösterilen 700nm, sarıyla gösterilen 750 nm'dir.

Uygun olarak 500nm bar uzunluğunda 0.005 soğrulma, 550nm bar uzunluğunda 0.013 soğrulma, 600nm bar uzunluğunda 0.020 soğrulma, 650nm bar uzunluğunda 0.025 soğrulma, 700nm bar uzunluğunda 0.036 soğrulma, 750nm bar uzunluğunda 0.044 soğrulma elde edilmiştir.

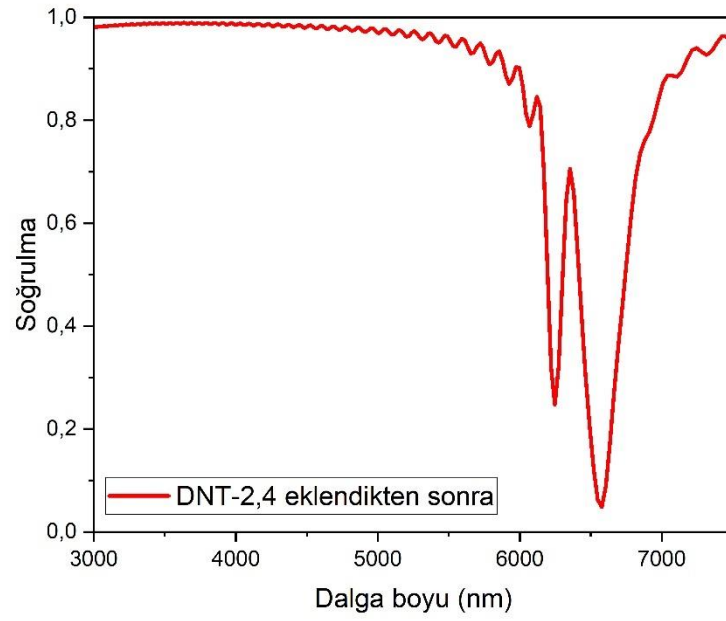


Şekil. 5.16. Elektrik alan dağılımı

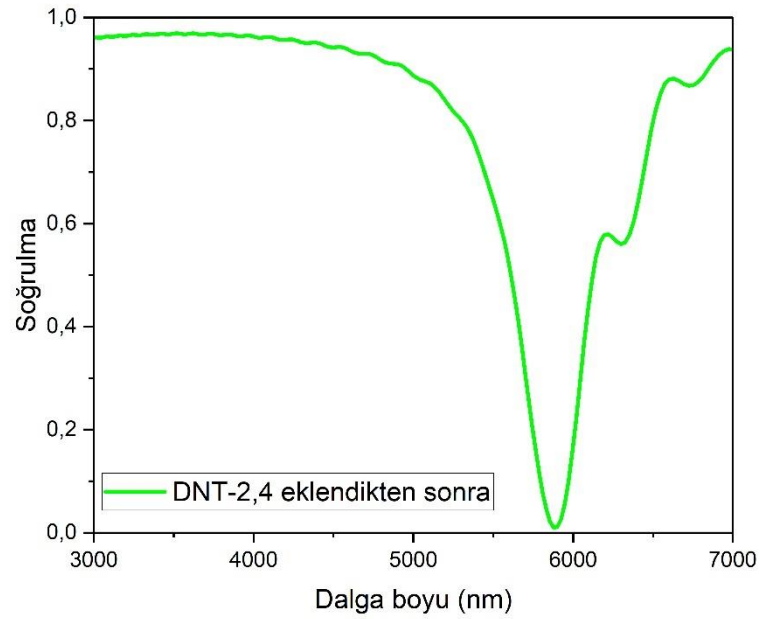
5.4. Üzerine DNT koyulduktan sonra



Şekil. 5.17. Altın MgF_2 Altın kuruluşlu nanoanten üzerine DNT-2.4 molekülü eklendikten sonra soğrulmanın değişimi.

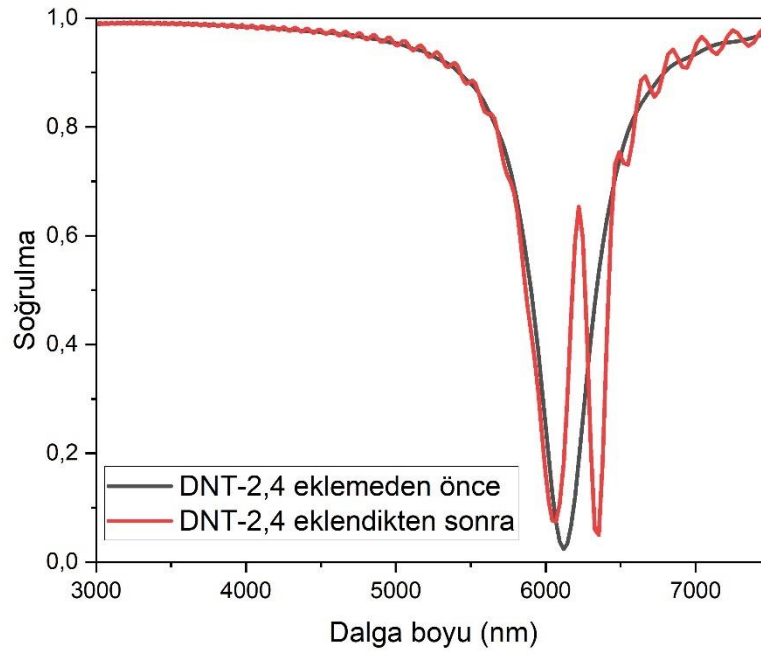


Şekil. 5.18. Gümüş Alümina Gümüş kuruluşlu nanoanten üzerine DNT-2.4 molekülü eklendikten sonra soğrulmanın değişimi.

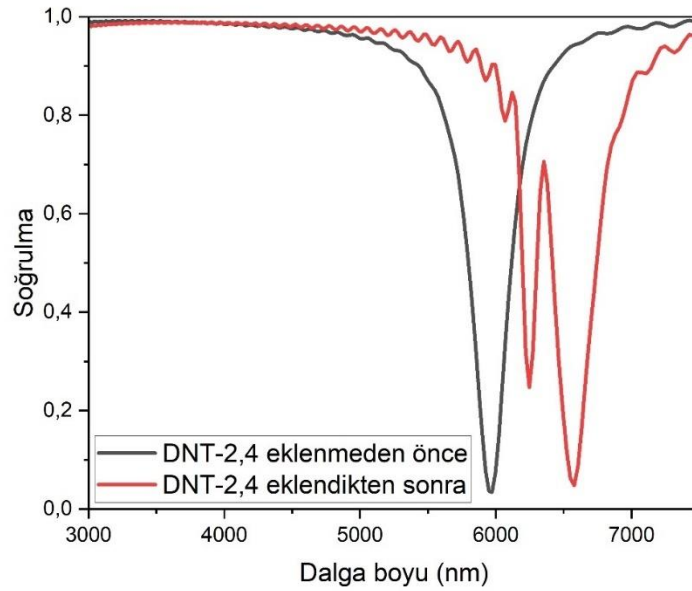


Şekil. 5.19. Alüminyum Alümina Alüminyum kuruluşlu nanoanten üzerine DNT-2.4 molekülü eklendikten sonra soğrulmanın değişimi.

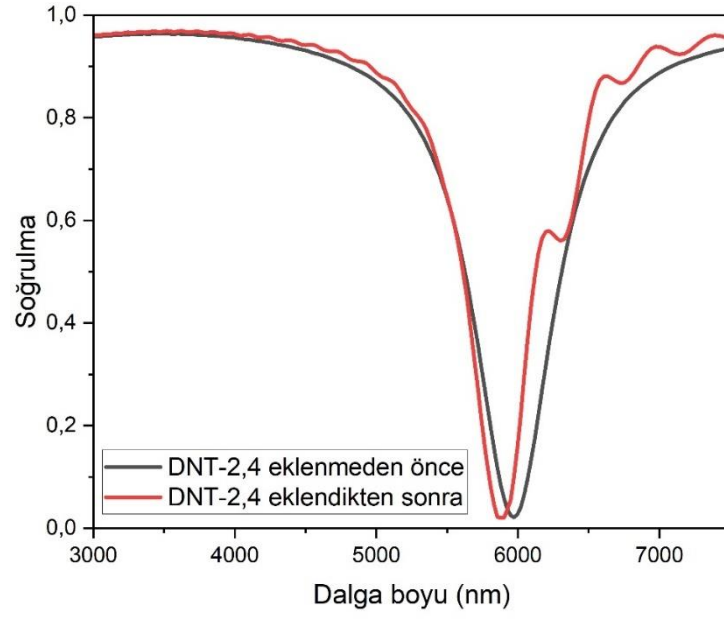
5.4.1. Karşılaştırma



Şekil. 5.20. Altın MgF₂ Altın kuruluşlu nanoanten üzerine DNT-2.4 molekülü eklenmeden önce ve eklendikten sonra soğrulmanın karşılaştırılması.

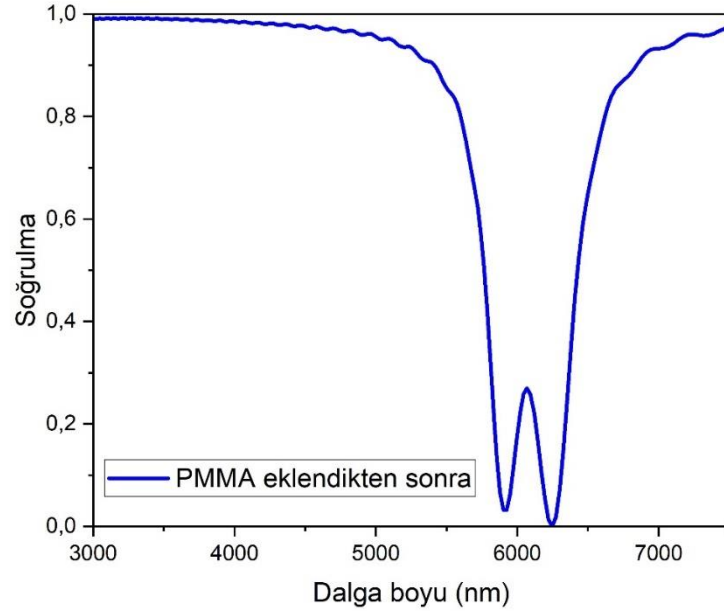


Şekil 5.21 Gümüş Alümina Gümüş kuruluşlu nanoanten üzerine DNT-2.4 molekülü eklenmeden önce ve eklendikten sonra soğrulmanın karşılaştırılması.

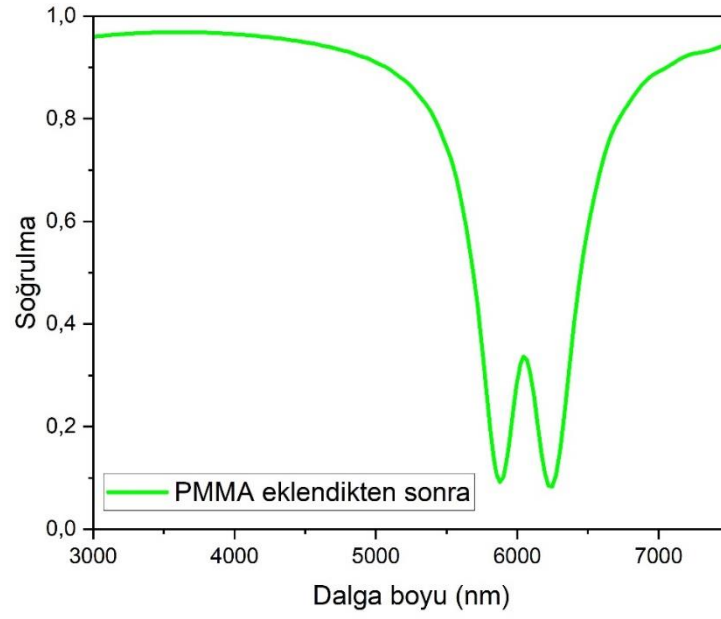


Şekil 5.22. Alüminyum Alümina Alüminyum kuruluşlu nanoanten üzerine DNT-2,4 molekülü eklenmeden önce ve eklendikten sonra soğrulmanın karşılaştırılması.

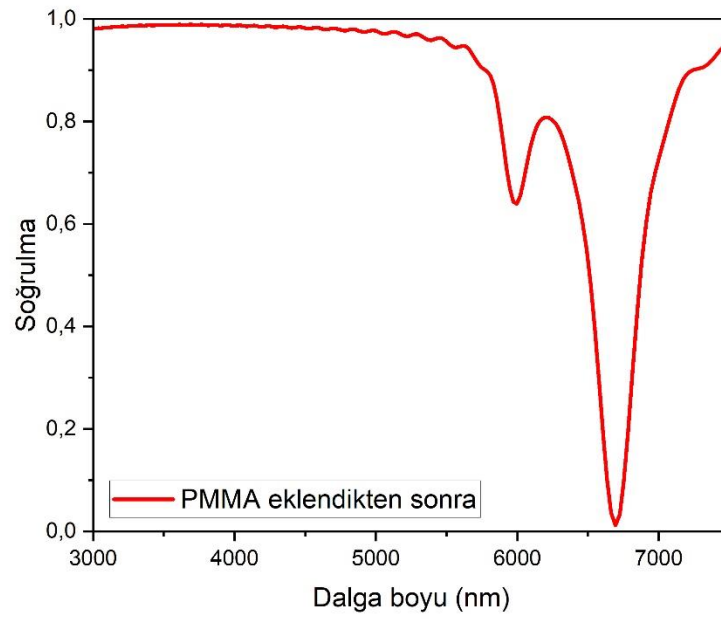
5.5. Üzerine PMMA koyulduktan sonra



Şekil 5.23. Altın MgF₂ Altın kuruluşlu nanoanten üzerine PMMA molekülü eklendikten sonra soğrulmanın değişimi.



Şekil. 5.25. Alüminyum Alümina Alüminyum kuruluşlu nanoanten üzerine PMMA molekülü eklendikten sonra soğrulmanın değişimi.



Şekil. 5.24. Gümüş Alümina Gümüş kuruluşlu nanoanten üzerine PMMA molekülü eklendikten sonra soğrulmanın değişimi.

5.5. Sonuçlar

Tablo 5.1. Nanontenlerin soğrulma sonuçları

	AuSiO ₂	AuMgF ₂	AuAl ₂ O ₃	AgSiO ₂	AgMgF ₂	AgAl ₂ O ₃	AlSiO ₂	AlMgF ₂	AlAl ₂ O ₃
500nm	0.076	0.054	0.028	0.220	0.210	0.140	0.000	0.000	0.005
550nm	0.055	0.037	0.016	0.194	0.181	0.126	0.001	0.000	0.013
600nm	0.042	0.023	0.006	0.178	0.157	0.112	0.002	0.003	0.020
650nm	0.034	0.016	0.005	0.150	0.137	0.096	0.004	0.008	0.025
700nm	0.026	0.006	0.002	0.138	0.122	0.082	0.008	0.014	0.036
750nm	0.014	0.002	0.005	0.118	0.103	0.067	0.012	0.021	0.044

Nanoteknoloji geliştikçe daha ucuz maliyetli yapılara ihtiyaç artmaktadır. Bu çalışmada DNT-2.4 malzemesinin algılanması için 9 farklı nanoanten tasarlanmış, daha düşük maliyetle, daha yüksek soğrulma performansına sahip nanoanten tespit edilmiştir. Nanoanten çalışmasında gerekli olan dalga boyunu yakalamak için H şekilli barın, sağ ve sol uzunlukları 50nm olarak 5 defa artırılmıştır. Yapılan denemeler zamanı altın ve gümüş kullanılan nanoantende barın sağ ve sol uzunlukları artırıldığı zaman soğrulmanın artması, bunun tam tersi alüminyum kullanılan nanoantenlerde soğrulmanın azalması gözlemlenmiştir. Sonuç olarak en iyi soğrulma tablo 5.1'deki gibi Al SiO₂ Al kuruluşlu MIM (Metal İzulator Metal) nanoantende bulunmuştur. Fakat istenilen dalga boyunu yakalanamadığı için bu nanoantenlerde spektroskopi gerçekleştirilmemiştir. Diğer Altın nanoantende ara malzemesi MgF₂ kullanılan zaman daha iyi sonuç alınmasına karşın, gümüş nanoantenlerde ara malzemesi olarak Al₂O₃ kullanıldığında soğrulma daha da artmıştır. Maliyet açısından sıralanmış olursa bu nanoanten (Al Al₂O₃ AL) 9 nanoanten arasından en düşük maliyetli nanoantendir.

KAYNAKLAR

- Adato, R., Yanik, A. A., Amsden, J. J., Kaplan, D. L., Omenetto, F. G., Hong, M. K., . . . Altug, H. (2009). Ultra-sensitive vibrational spectroscopy of protein monolayers with plasmonic nanoantenna arrays. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 106(46), 19227-19232.
- Agio, M., & Alù, A. (2013). *Optical antennas*: Cambridge University Press.
- Alda, J., Rico-García, J. M., López-Alonso, J. M., & Boreman, G. (2005). Optical antennas for nano-photonic applications. *Nanotechnology*, 16(5), S230.
- Alu, A., & Engheta, N. (2013). Theory, modeling and features of optical nanoantennas. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 61(4), 1508-1517.
- Anker, J. N., Hall, W. P., Lyandres, O., Shah, N. C., Zhao, J., & Van Duyne, R. P. (2010). Biosensing with plasmonic nanosensors. *Nanoscience and Technology: A Collection of Reviews from Nature Journals*, 308-319.
- Awasthi, V., Goel, R., Agarwal, S., Rai, P., & Dubey, S. K. (2020). Optical nanoantenna for beamed and surface-enhanced Raman spectroscopy. *Journal of Raman Spectroscopy*, 51(11), 2121-2145.
- Ball, D. W. (2001). *The basics of spectroscopy* (Vol. 49): Spie press.
- Biagioni, P., Huang, J.-S., & Hecht, B. (2012). Nanoantennas for visible and infrared radiation. *Reports on Progress in Physics*, 75(2), 024402.
- Campbell, C., Casey, A., & Triplett, G. (2022). The effect of electron dose on positive polymethyl methacrylate resist for nanolithography of gold bowtie nanoantennas. *Heliyon*, e09475.
- Chew, H. (1987). Transition rates of atoms near spherical surfaces. *The Journal of Chemical Physics*, 87(2), 1355-1360.
- Cui, T. J., Liu, R., & Smith, D. R. (2010). Introduction to metamaterials. In *Metamaterials* (pp. 1-19): Springer.
- de la Chapelle, M., & Pucci, A. (2013). *Nanoantenna*: CRC Press.
- Di Meo, V., Moccia, M., Sanità, G., Crescitelli, A., Lamberti, A., Galdi, V., . . . Esposito, E. (2022). Probing Denaturation of Protein A via Surface-Enhanced Infrared Absorption Spectroscopy. *Biosensors*, 12(7), 530.
- Dressel, M., & Grüner, G. (2002). Electrodynamics of solids: optical properties of electrons in matter. In: American Association of Physics Teachers.
- Erkoç, Ş. (2007). *Nanobilim ve nanoteknoloji*. Ankara: ODTÜ Yayıncılık.
- Etezadi, D., Warner IV, J. B., Ruggeri, F. S., Dietler, G., Lashuel, H. A., & Altug, H. (2017). Nanoplasmonic mid-infrared biosensor for in vitro protein secondary structure detection. *Light: Science & Applications*, 6(8), e17029-e17029.
- Fevzi Köksal, R. K. (2014). *Nanobilim ve nanoteknoloji*. Ankara: Nobel Akademik Yayıncılık.
- Feynman, R. (1959). Quantum computing, nanotechnology, as in molecular machines. In: By A Chen.
- Hall, J. S. (2004). Nano Gelecek.
- Hess, K. (2003). Handbook of NANOSCIENCE, ENGINEERING, and TECHNOLOGY.
- John-Herpin, A., Tittl, A., Kühner, L., Richter, F., Huang, S. H., Shvets, G., . . . Altug, H. Metasurface-Enhanced Infrared Spectroscopy: An Abundance of Materials and Functionalities. *Advanced Materials*, 2110163.
- Kılıç, F. (2020). *Temel Matlab*. Ankara: Nobel Bilimsel Eserler.
- Kumar, S., Tanwar, S., & Sharma, S. (2016). Nanoantenna—a review on present and future perspective. *Int. J. Sci. Eng. Technol.*, 4, 240.

- Liang, C., Lai, J., Lou, S., Duan, H., & Hu, Y. (2022). Resonant Metasurfaces for Spectroscopic Detection: Physics and Biomedical Applications. *Advanced Devices & Instrumentation*, 2022.
- Lin, C.-T., Yen, T.-J., & Huang, T.-Y. (2021). PVC detection through a hybrid SEIRA substrate and refractive index sensor based on metamaterial perfect absorbers. *Coatings*, 11(7), 789.
- Liu, Y., & Zhang, X. (2011). Metamaterials: a new frontier of science and technology. *Chemical Society Reviews*, 40(5), 2494-2507.
- Ma, C., Zhao, F., Zhou, F., Li, M., Zheng, Z., Yan, J., . . . Chen, K. (2022). Etching-free high-throughput intersectional nanofabrication of diverse optical nanoantennas for nanoscale light manipulation. *Journal of Colloid and Interface Science*, 622, 950-959.
- Maier, S. A. (2007). *Plasmonics: fundamentals and applications* (Vol. 1): Springer.
- Nielsen, S. S. (2020). *Gıda Analizi : laboratuvar el kitabı ile birlikte* (K. N. Turhan Ed.). Ankara: Nobel Akademik Yayıncılık.
- Novotny, L. (2007). Effective wavelength scaling for optical antennas. *Physical review letters*, 98(26), 266802.
- Pfezer, D., Karst, J., Hentschel, M., & Giessen, H. (2022). Predicting Concentrations of Mixed Sugar Solutions with a Combination of Resonant Plasmon-Enhanced SEIRA and Principal Component Analysis. *Sensors*, 22(15), 5567.
- Ramazan Tezcan, H. T. (2007). *Metaller kimyası*.
- Ross, B. M., & Lee, L. P. (2009). Comparison of near-and far-field measures for plasmon resonance of metallic nanoparticles. *Optics letters*, 34(7), 896-898.
- Ruppin, R. (1982). Decay of an excited molecule near a small metal sphere. *The Journal of Chemical Physics*, 76(4), 1681-1684.
- Sanders, S., & Manjavacas, A. (2020). Nanoantennas with balanced gain and loss. *Nanophotonics*, 9(2), 473-480.
- Schuller, J. A., Taubner, T., & Brongersma, M. L. (2009). Optical antenna thermal emitters. *Nature Photonics*, 3(11), 658-661.
- Sengupta, R., Khand, H., & Sarusi, G. (2022). Terahertz Impedance Spectroscopy of Biological Nanoparticles by a Resonant Metamaterial Chip for Breathalyzer-Based COVID-19 Prompt Tests. *ACS Applied Nano Materials*, 5(4), 5803-5812.
- Shegai, T., Chen, S., Miljković, V. D., Zengin, G., Johansson, P., & Käll, M. (2011). A bimetallic nanoantenna for directional colour routing. *Nature communications*, 2(1), 1-6.
- Tapio, K., Mostafa, A., Kanehira, Y., Suma, A., Dutta, A., & Bald, I. (2021). A Versatile DNA Origami-Based Plasmonic Nanoantenna for Label-Free Single-Molecule Surface-Enhanced Raman Spectroscopy. *ACS nano*, 15(4), 7065-7077.
- Voller, A., Bidwell, D., & Bartlett, A. (1976). Enzyme immunoassays in diagnostic medicine: theory and practice. *Bulletin of the World Health Organization*, 53(1), 55.
- Ye, M., & Crozier, K. B. (2020). Metasurface with metallic nanoantennas and graphene nanoslits for sensing of protein monolayers and sub-monolayers. *Optics Express*, 28(12), 18479-18492.
- Ziegler, C., & Göpel, W. (1998). Biosensor development. *Current opinion in chemical biology*, 2(5), 585-591.