ÖZET

Yüksek Lisans Tezi

ÇEŞİTLİ YAN GRUPLAR İÇEREN AROMATİK ORGANİK MOLEKÜLLERİN İKİNCİ VE ÜÇÜNCÜ MERTEBE ÇİZGİSEL OLMAYAN OPTİK ÖZELLİKLERİ

Tuba BÜYÜKCAM
Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü

Fizik Anabilim Dalı

Danışman: Doç. Dr. Aslı KARAKAŞ

2009, 77 Sayfa

Jüri: Prof. Dr. Hüseyin YÜKSEL
Prof. Dr. H. Şükür KILIÇ
Doç. Dr. Aslı KARAKAŞ

Bu yüksek lisans tez çalışmasında, çeşitli yan gruplar içeren aromatik organik moleküller tasarlanmıştır. Araştırılan moleküllerin elektrik dipol momentleri, çizgisel kutuplulukları, birinci yüksek kutupluluk ve ikinci yüksek kutuplulukları *ab-initio* kuantum mekaniksel metodlar kullanılarak hesaplanmıştır. Hesaplamalar sonucunda bulunan sıfırdan farklı elektrik dipol moment değerleri, araştırılan bileşiklerin kutuplu yapıda olduklarını ortaya çıkarmıştır. Moleküler orbital hesaplamalar ile çalışılan bileşiklerin mikroskobik ikinci- ve üçüncü-mertebe çizgisel olmayan optik davranışlarını ifade eden sıfırdan farklı yüksek kutupluluklara sahip oldukları gösterilmiştir.

Anahtar Kelimeler: çizgisel olmayan optik, birinci yüksek kutupluluk, ikinci yüksek kutupluluk, elektrik dipol moment, *ab-initio* hesaplamalar.

ABSTRACT

MS Thesis

SECOND AND THIRD ORDER NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES OF AROMATIC ORGANIC MOLECULES WITH VARIOUS SUBSTITUTION GROUPS

Tuba BÜYÜKCAM
Selçuk University

Graduate School of Natural and Applied Sciences

Department of Physics

Supervisor: Assoc. Prof. Dr. Aslı KARAKAŞ

2009, 77 Pages

Jury: Prof. Dr. Hüseyin YÜKSEL
Prof. Dr. H. Şükür KILIÇ
Assoc. Prof. Dr. Aslı KARAKAŞ

In this MS thesis study, aromatic organic molecules with various substitution groups have been designed. The electric dipole moments, first hyperpolarizability and second hyperpolarizability tensorial components of all the investigated molecules have been calculated using *ab-initio* quantum mechanical methods. The computational results revealed that the investigated compounds have polar structures due to nonzero electric dipole moment values. It has been shown by the *ab-initio* molecular orbital calculations that the studied compounds have nonzero hyperpolarizabilities, indicating microscopic second- and third-order nonlinear optical behavior.

Key Words: nonlinear optic, first hyperpolarizability, second hyperpolarizability, electric dipole moment, *ab-initio* calculations.

ÖNSÖZ

Bu çalışma, Selçuk Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı' na Yüksek Lisans Tezi olarak sunulmuştur.

Tez çalışmam süresince bilgi ve tecrübeleri ile bana her konuda ışık tutan, yol gösteren değerli danışman hocam sayın Doç. Dr. Aslı KARAKAŞ' a teşekkürlerimi sunuyorum.

Tez çalışmamda yardımlarını gördüğüm Selçuk Üniversitesi Fen Fakültesi Fizik Bölümü öğretim elemanlarına teşekkür ederim.

İÇİNDEKİLER

1. GİRİŞ…….....1
2. ÇİZGİSEL OLMAYAN OPTİK ALINGANLIK……..……...4
2.1. Harmonik Osilatör ve Çizgisel Optik Alınganlık...……..5
2.2. Anharmonik Osilatör ve Çizgisel Olmayan Optik Alınganlık……...7
2.3. İkinci-Harmonik Türetim……14
2.4. Üçüncü-Harmonik Türetim……..16
2.5. Mikroskobik Teori……...17
3. İKİNCİ- VE ÜÇÜNCÜ-MERTEBE YÜKSEK KUTUPLULUKLARIN HESAPLANMASINDA KULLANILAN METODLAR……..19
3.1. Modern Kuantum-Kimyasal Yaklaşımlar……19
3.1.1. Tepki hesaplamalarında kullanılan model Hamiltonien' ler…..21
3.2. Moleküler Çizgisel Olmayan Optik Tepkiler için *Ab-initio* Hesaplama Metodları…….....22
4. ORGANİK MOLEKÜLLERİN İKİNCİ- VE ÜÇÜNCÜ-MERTEBE ÇİZGİSEL OLMAYAN OPTİK DAVRANIŞLARI……...24
4.1. İkinci-Mertebe Çizgisel Olmayan Optik Özellikleri Etkileyen Faktörler…….....25
4.1.1. Verici ve alıcı grupların kuvvetliliği……..25
4.1.2. Yan grupların etkisi……....26
5. TEORİK ÇALIŞMALAR ……...27
5.1. Fenilazoheterosiklik (K), Bisazoheterosiklik (L), Siyanopiridin ve Siyanobenzen Türevleri (M), Nitropiridin Türevleri (N), Para-

disubstituebenzen (O) Bileşiklerinin Elektrik Dipol Moment ve İkinci-Mertebe Yüksek Kutupluluklarının Hesaplanması……...27
5.2. Fenilazoheterosiklik (K), Bisazoheterosiklik (L), Siyanopiridin ve Siyanobenzen Türevleri (M), Nitropiridin Türevleri (N), Para-disubstituebenzen (O) Bileşiklerinin Çizgisel Kutupluluk ve Üçüncü-Mertebe Yüksek Kutupluluklarının Hesaplanması……....29
5.3. Çalışılan Bileşiklerin Kimyasal Yapı Şekilleri……....31
6. *AB-INITIO* HESAPLAMA SONUÇLARI VE TARTIŞMA……..34
6.1. Fenilazoheterosiklik (K) Bileşiğinin *Ab-initio* Çalışması……....34
6.2. Bisazoheterosiklik (L) Bileşiğinin *Ab-initio* Çalışması……...35
6.3. Siyanopiridin ve Siyanobenzen Türevleri' nin (M) *Ab-initio* Çalışması…….36
6.4. Nitropiridin Türevleri' nin (N) *Ab-initio* Çalışması…….37
6.5. Para-disubstituebenzen (O) Bileşiğinin *Ab-initio* Çalışması……...38
6.6. *Ab-initio* Hesaplama Sonuçlarını Gösteren Tablolar……...39
7. KAYNAKLAR.....75