

T.C.

FIRAT ÜNİVERSİTESİ

FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

**BAZI MOLEKÜLLERİN ELEKTRİK DİPOL MOMENTLERİNİN HARTREE
FOCK METODU İLE İNCELENMESİ**

Zülküf TÜNÇ

Yüksek Lisans Tezi

Anabilim Dalı: Fizik

Programı: Atom ve Molekül Fiziği

Danışman: Prof. Dr. Niyazi BULUT

NİSAN 2017

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

**BAZI MOLEKÜLLERİN ELEKTRİK DİPOL MOMENTLERİNİN HARTREE
FOCK METODU İLE İNCELENMESİ**

YÜKSEK LİSANS TEZİ

Zülküf TÜNÇ

(112114104)

Tezin Enstitüye Verildiği Tarih:

Tezin Savunulduğu Tarih:

Tez Danışmanı: Prof. Dr. Niyazi BULUT (Fırat Üni.)

Diğer Jüri Üyeleri:

Prof. Dr. Sinan AKPINAR (Fırat Üni.)

Yrd. Dr. Ezman KARABULUT (Bitlis Eren Üni.)

NİSAN 2017

ÖNSÖZ

“Bazı Moleküllerin Elektrik Dipol Momentlerinin Hartree Fock Metodu İle İncelenmesi” adlı yüksek lisans tezimi hazırladığım süre içerisinde bana yön veren, bilgilerini benimle paylaşan benden maddi ve manevi desteğini hiçbir zaman esirgemeyen çok değerli hocam ve danışmanım Prof. Dr. Niyazi BULUT’a ve değerli arkadaşım M.Hanifi KEBİROĞLU’na sonsuz saygılarımı ve teşekkürlerimi sunarım.



Zülküf TÜNÇ
ELAZIĞ – 2017

İÇİNDEKİLER

ÖNSÖZ	II
İÇİNDEKİLER	III
ÖZET	IV
SUMMARY	V
ŞEKİLLER LİSTESİ	VI
1. GİRİŞ	1
2. HARTREE FOCK METODU VE ENERJİNİN MİNİMİZE EDİLMESİ	2
2.1. Geometri Optimasyonu	7
2.2. Hartree Çarpımı	8
3. YÜK YOĞUNLUĞU	10
4. DİPOL MOMENTLER	12
5. SONUÇ VE TARTIŞMA	14
6. KAYNAKLAR	20
ÖZGEÇMİŞ	22

ÖZET

Bazı Moleküllerin Elektrik Dipol Momentlerinin Hartree Fock Metodu İle İncelenmesi

Bu tez çalışmasında su ve etan molekülü ele alınıp bu moleküllerin optimizesi yapıldı. Optimizasyondan sonra elektrik dipol momentleri ve infrared spektrumları elde edildi. Her iki molekül için de Hartree Fock metodu kullanılarak kuantum mekaniksel büyüklükler elde edilmiştir.

Anahtar kelimeler: Optimizasyon, Dipol moment, Hartree Fock.

SUMMARY

Calculation of Dipole Moments of Some Molecules by Using Hartree Fock Metod

In this thesis, the optimization of water and ethane molecule was done by using the Hartree - Fock method. After optimization, with the same basis set we have calculated dipole moments and infrared spectrums of the molecules that considered in this thesis. For all calculations Hartree-Fock method was used.

Key words: Optimization, Hartree-Fock, Dipole moments.

ŞEKİLLER LİSTESİ

	<u>Sayfa No</u>
Şekil 5.1. Su molekülünün optimize olmuş geometrisi.	14
Şekil 5.2. Etan molekülünün optimize olmuş geometrisi.	15
Şekil 5.3. Su molekülünün dipol momentin yönü.	15
Şekil 5.4. Su molekülü için FTIR spektrumu.....	16
Şekil 5.5. Etan molekülü için FTIR spektrumu.	16



1.GİRİŞ

Moleküler modelleme, moleküllerin üç boyutlu yapılarını ve özelliklerini bulmak için kullanılan süper güçlü bilgisayarlarla yapılan yöntemlerdir. Moleküler ve kuantum mekaniksel yöntemi iki başlık altında toplayabiliriz. Birincisi atomlar arası etkileşimleri klasik fizik ile ikincisi moleküler mekanik yöntemleri daha çok makro moleküllere uygulanır.

Kuantum mekaniksel yöntemi Yoğunluk Fonksiyonu Kuramı, Yarı Deneysel yöntemler ve *ab initio* metodu olarak üçe ayrılabiliriz. *ab initio* metodunda, deneysel parametreleri kullanılmaz sadece Hartree Fock Öz Uyumlu Alan (HF-ÖUA) hesaplamalarında kullanılır. Hartree Fock Öz Uyum Alan hesaplamalarda elektron-elektron etkileşimleri içerisinde ortalama bir potansiyel esas alınır. Korelasyon enerjisi göz ardı edilir. Yoğunluk Fonksiyonu Kuramında ise moleküler enerji elektron yoğunluğu fonksiyonu olarak hesaplanır. Elektron korelasyonu önemli olması nedeniyle moleküler hesaplamalarda en iyi sonuçlar alınır. Yarı Deneysel yöntemde ise *ab initio* metoduna benzerdir ama bazı hesaplamalarda matematiksel ifadeler edilir ve deneysel veriler parametrelerde kullanılır. Bu yüzden, *ab initio* yöntemine göre daha hızlı gerçekleşir [1].

2. HARTREE FOCK METODU VE ENERJİNİN MİNİMİZE EDİLMESİ

Hartree Fock metodunda Moleküler Orbitaler (MO) [17] dalga fonksiyonu bazlı

$$\psi_i = \sum_{K=1}^N c_{iK} \chi_K(r) \quad (2.1)$$

olarak yazılabilir. Enerjinin en minimum değerine karşılık gelen c_{iK} katsayısı bulunmaya çalışılır. Bu yüzden varyasyon hesabı kullanılır. Dalga fonksiyonu ile kompleks eşleniğinin çarpımı ile

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.2)$$

eşitliği elde edilir. Burada δ_{ij} , kroneker deltasıdır. $i = j$, ise 1 dir, $i \neq j$, ise de 0 değerini alır. $|\Psi_0\rangle = |\chi_1 \chi_2 \dots \chi_a \chi_b \dots \chi_N\rangle$, verilen determinantın enerjisidir. Taban durum enerjisi

$$E_0 = \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle \quad (2.3)$$

Hartree Fock eşitliği üretilirken $E_0[\{\chi_a\}]$, enerjisi spin yörüngelere göre minimum hale getirilir [2].

$$\int dx_1 \chi_a^*(1) \chi_b(1) = \langle a | b \rangle = \delta_{ab} \quad (2.4)$$

olmak üzere,

$$\langle a|b\rangle - \delta_{ab} = 0 \quad (2.5)$$

$E_0, |\Psi_0\rangle$, tek bir determinantın beklenen değeri,

$$L[\{\chi_a\}] = E_0[\{\chi_a\}] - \sum_{a=1}^N \sum_{b=1}^N \varepsilon_{ba} \langle a|b\rangle - \delta_{ab} \quad (2.6)$$

enerjinin beklenen değeri,

$$E_0[\{\chi_a\}] = \sum_{a=1}^N \langle a|h|a\rangle + \frac{1}{2} \sum_{a=1}^N \sum_{b=1}^N \langle a|b\rangle - \langle ab|ba\rangle \quad (2.7)$$

ε_{ba} , Lagrange çarpan setinden oluşur. L , reel olduğundan Lagrange çarpanı bir Hermitian matris elemanları olmasıdır.

$$\varepsilon_{ba} = \varepsilon_{ab}^* \quad (2.8)$$

varyasyona göre,

$$\delta L = 0 \quad (2.9)$$

δ , bir türev operatörü gibi davranır. Buna göre $\chi_a \rightarrow \chi_a + \delta\chi_a$, dönüşümü yapılır ve L , ise varyasyon sıfıra alınır [3],

$$\delta L = \delta E_0 - \sum_{a=1}^N \sum_{b=1}^N \varepsilon_{ba} \delta \langle a | a \rangle = 0 \quad (2.10)$$

denklem (2.10)'te δ , uygulanır, sonrasında düzenlemeler yapılırsa,

$$\begin{aligned} \delta L = & \sum_{a=1}^N \langle \delta \chi_a | h | \chi_a \rangle + \sum_{a=1}^N \sum_{b=1}^N \langle \delta \chi_a \chi_b | \chi_a \chi_b \rangle - \langle \delta \chi_a \chi_b | \chi_b \chi_a \rangle \\ & - \sum_{a=1}^N \sum_{b=1}^N \varepsilon_{ba} \langle \delta \chi_a | \chi_b \rangle + \text{complex conjugate} = 0 \end{aligned} \quad (2.11)$$

denklem (2.11) eşitliğinde coulomb ve değişim etkileşimi göz önüne alınır sade forma elde edilir.

$$\begin{aligned} \delta L = & \sum_{a=1}^N \int dx_1 \delta \chi_a^*(1) \left[h(1) \chi_a(1) + \sum_{b=1}^N (j_b(1) - K_b(1)) \chi_a(1) - \sum_{b=1}^N \varepsilon_{ba} \chi_b(1) \right] \\ & + \text{complex conjugate} = 0 \end{aligned} \quad (2.12)$$

denklem (2.10)' deki $\delta \chi_a^*$, keyfi olduğundan parantez kısmı sıfır olmalıdır.

$$\left[h(1) + \sum_{b=1}^N j_b(1) - K_b(1) \right] \chi_a(1) = \sum_{b=1}^N \varepsilon_{ba} \chi_b(1) \quad (2.13)$$

Denklem (2.13)'de parantez içindeki Fock operatörü denir ve f ile gösterilir. Aynı denklemdeki kavramları karşılaştırdık. Coulomb ve değişim etkileşmesidir. Coulomb etkileşme $|\psi_a(r_1)|^2$ ve $|\psi_b(r_2)|^2$ arasındaki klasik etkileşmesine iki elektron integrali veya coulomb integralidir [4].

$$j_{ij} = \int dr_1 dr_2 \psi_i^*(r_1) \psi_j^*(r_2) r_{12}^{-1} \psi_j(r_2) \quad (2.14)$$

paralel spinli elektronlar arasında deęişim vardır, anti paralel spinli elektronlar arasında etkileşim yoktur.

$$K_{ij} = \int dr_1 dr_2 \psi_i^*(r_1) \psi_j^*(r_1) r_{12}^{-1} \psi_i(r_2) \psi_j(r_2) \quad (2.15)$$

Sade şeklini de yazabiliriz,

$$f|\chi_a\rangle = \sum_{b=1}^N \varepsilon_{ba} |\chi_b\rangle \quad (2.16)$$

$\{\chi_a\}$, spin yörünge setinde bir matris dönüşümü ile elde edilen $\{\chi'_a\}$ spin yörünge seti ön plana alınır. Matrisler, ters adjointine eşittir [6].

$$U^+ = U^- \quad (2.17)$$

A bir matris olmak üzere,

$$A' = AU \quad (2.18)$$

Böylece,

$$\det(A') = \det(U) \det(A) \quad (2.19)$$

Dalga fonksiyonu denklem (2.19)'a benzer,

$$|\Psi'_0\rangle = \det(U)|\Psi_0\rangle \quad (2.20)$$

$U^+U = 1$, olduğunda,

$$\begin{aligned} \det(U^+U) &= \det(U^+)\det(U) = (\det(U))^* \det(U) \\ &= |\det(U)|^2 = \det(1) = 1 \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\det(U) = e^{i\phi} \quad (2.22)$$

Spin yörüngelerin keyfi dönüşümüne alternatif, tek bir determinant dalga fonksiyonun beklenen değeri invaryant olur. Toplam enerji düzenli yapan spin yörüngeleri tek değil de ona özel bir fiziksel anlamı da sahip değildir. Yerel ya da yerel olmayan spin yörüngelerden daha iyi bir fiziksel anlama sahip değildir [5].

İlk durum ile sonraki durum özdeşdir. Bu yüzden dolayı Fock operatörü kendi spin yörüngelere üniter dönüşümüne karşı invaryant kalır. Lagrange çarpımı etkisi belirlemek için denklem (2.16)' deki $\langle \chi_c |$ ile çarpılır.

$$\langle \chi_c | f | \chi_a \rangle = \sum_{b=1}^N \varepsilon_{ab} \langle \chi_c | \chi_b \rangle = \varepsilon_{ca} \quad (2.23)$$

Bu nedenle,

$$\begin{aligned}
\varepsilon'_{ab} &= \int dx_1 \chi'_a(1) f(1) \chi'_b(1) \\
&= \sum_{cd} U_{ca}^* U_{db} \chi_c^*(1) f(1) \chi_d(1) \\
&= \sum_{cd} U_{ca}^* \varepsilon_{cd} U_{db}
\end{aligned} \tag{2.24}$$

veya matris formatında [8],

$$\varepsilon' = U^+ \varepsilon U \tag{2.25}$$

ε , Hermitian olduğunu, ε 'yi köşegen yapan U matrisi $\{\chi_a\}$ setini $\{\chi'_a\}$ setine dönüştürür.

$$f|\chi'_a\rangle = \varepsilon'_a |\chi'_a\rangle \tag{2.26}$$

Böylece Hartree Fock denklemlerinin kanonik formu,

$$f|\chi_a\rangle = \varepsilon_a |\chi_a\rangle \tag{2.27}$$

olarak elde edilir [9].

2.1. Geometri Optimasyonu

Fonksiyonun kararlı haldeki noktaları bulma işlemine optimasyon denir. Potansiyel enerji yüzeyi (PEY) üzerinden minimum enerjili noktaları ve moleküler koordinatları bulma yöntemine geometrik optimasyonu denir. Geometri optimasyonu ilk başlangıç geometrisinden başlayarak süreç boyunca yoğunluk enerji yüzeyi tarar ve minimum

bulmaya çalışır. Enerji minimum olduğu değere karşılık gelen uygun değer geometridir [2].

2.2. Hartree Çarpımı

Bir elektron topluluğunun dalga fonksiyonu öneren kişi Hartree olmuştur. $h(i)$, elektronun potansiyel ve kinetik enerjisi için, N , elektron topluluğudur [15].

$$H = \sum_{i=1}^N h(i) \quad (2.2.1)$$

Denklem (2.2.1)'deki $h(i)$, elektron-elektron etkileşmesini içeren tek bir elektron Hamiltonyenidir [10].

$$h(i) \chi_j(x_i) = \varepsilon_j \chi_j(x_i) \quad (2.2.2)$$

H 'ye özgün öz fonksiyonun her bir elektronun spin yörüngeleri ile çarpımıdır.

$$\Psi^{HP}(x_1, x_2, \dots, x_N) = \chi_i(x_1) \chi_j(x_2) \chi_k \dots (x_N) \quad (2.2.3)$$

Çarpım, Hamiltonyenin öz fonksiyonudur.

$$H\Psi^{HP} = E\Psi^{HP} \quad (2.2.4)$$

E , ve Ψ^{HP} 'de her spinin enerjisinin toplamı öz değerdir [11].

$$E = \varepsilon_i + \varepsilon_j + \dots + \varepsilon_k \quad (2.2.5)$$

Tanımlanan dalga fonksiyonu Hartree Çarpımı olarak diyebiliriz. Ancak elektronlar birbirini zıt itici coulomb kuvveti etkileşmesi içindedir ve anti-simetrik olması gerekliliğini sağlamaz [16].

.



3. YÜK YOĞUNLUĞU

$\psi_a(r)$, bir dalga fonksiyonu olarak tanımlanır, dr hacminde ve r konumu bulunma olasılığı, $|\psi_a(a)|^2 dr$ 'dir ve olasılık yoğunluğu dağıtım fonksiyonudur. Kapalı kabuk sistemde iki elektron bulunduğu sistemde yük yoğunluğudur [12].

$$\rho(r) = 2 \sum_a^{N/2} |\psi_a(r)|^2 \quad (3.1)$$

İntegrali alınarak toplam elektron bulunur.

$$\int dr \rho(r) = 2 \sum_a^{N/2} \int dr |\psi_a(r)|^2 = 2 \sum_a^{N/2} 1 = N \quad (3.2)$$

Bu eşitlik, toplam yük yoğunluğunun, ayrı elektronların yük yoğunluğu toplamı olduğunu ve (3.1) açılımı ile yük yoğunluğu bond-order matrisi tanımlanır [13].

$$\begin{aligned} \rho(r) &= 2 \sum_a^{N/2} \psi_a^*(r) \psi_a(r) \\ &= 2 \sum_a^{N/2} \sum_v C_{va}^* \phi_v^*(r) \sum_v C_{\mu a} \phi_\mu(r) \\ &= 2 \sum_{\mu v} \left[\sum_a^{N/2} C_{va}^* C_{\mu a} \right] \phi_v^*(r) \phi_\mu(r) \\ &= \sum_{\mu v} P_{\mu v} \phi_v^*(r) \phi_\mu(r) \end{aligned} \quad (3.3)$$

Denklem (3.3)' de görüleceği gibi açılım katsayıları ile yük yoğunluğu arasında,

$$P_{\mu\nu} = 2 \sum_a^{N/2} C_{\mu a} C_{\nu a}^* \quad (3.4)$$

ilişkisi olup kapalı kabuk Fock hesaplamalarda $C_{\mu i}$ ile $P_{\mu\nu}$ karakterize edilir.

4. DİPOL MOMENTLER

Elektro-kovalent ve kovalent bileşik arasında bir bağ vardır. Örneğin HCl molekülünü temel alırsak Cl atomu ortak olan elektron çifti H atomuna göre daha fazla kuvvetli çeker ve böylece Cl' a göre yakın olur. HCl molekülünü elektrik alanın içinde olursa Cl yönü pozitif levhaya, H yönü ise de negatif levhaya doğru yönelir. Bu tür moleküller arasındaki bağlandığı bağa polar bağ denilir ve polar moleküle dipol adı verilir. q , elektrik yükü ile r , yüklerin arasındaki uzaklık ile çarpımı ise dipol momentini ve birimi ise cm cinsinden debyedir [14].

Momentin, en temel basit biçimiyle bir noktanın belli bir mesafesinin üst alma işleminde tutulması sonrasında kuvvetin yük gibi çarpımıdır.

$$\mu_n = r^n Q(r) \quad (4.1)$$

Q , fiziksel nicelik gösterir. Şayet bir noktaya doğru yoğunlaşırsa momentin uzaydaki yoğunluğun bir integralini gösterir.

$$\mu_n = \int r^n \rho(r) dr \quad (4.2)$$

ρ , yükün kütlesi veya niceliğinin yoğunluğunun dağılımı gösterir. Denklem (4.2)' deki momentin esas özelliğini kısaca belirtmek gerekirse $r^n \rho(r)$, eşitliği ifade eder. Her bir n , birden fazla momenti vardır ve r , aralarındaki uzaklık azaldığı ve referans değere bağımlıdır. Bazen bağımlılıklar yok olursa momentin referans noktası bağımsız hale gelir [15]. Eğer $n=1$, birinci momente bazen de dipol moment ifade ederiz. $n=0$, sıfırıncı momenti ya da monopol moment diyebiliriz. $n=2$, ikinci moment veya quadrupol moment denilir.

Sonu ve belli alan ile sınırlandırarak yoğunluk fonksiyonu örnek verirse, alan dışında $\frac{1}{r}$, potansiyeli küresel harmoniktir.

$$\Phi(r) = \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} d^3r' = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(\frac{4\pi}{2l+1} \right) q_{lm} \frac{Y_{lm}(\theta, \phi)}{r^{l+1}} \quad (4.3)$$

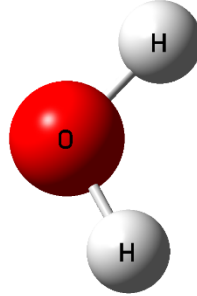
q_{lm} , multipol momentini temsil eder.

$$q_{lm} = \int (r')^l \rho(r') Y_{lm}^*(\theta', \phi') d^3r' \quad (4.4)$$

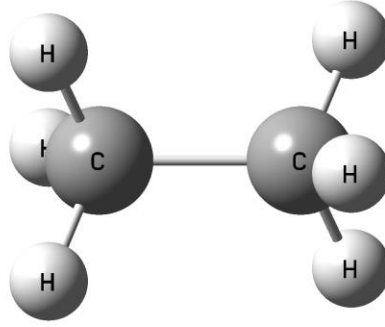
r' , küresel koordinatı temsil eder ve (r', ϕ', θ') , integrasyon değişkeni ifade eder. ρ , elektrik yükün yoğunluğu ve q_{lm} , elektrik yükün momentin projeksiyonudur; q_{00} , monopol moment, q_{1m} , dipol moment ve son olarak q_{2m} , quadropol momentin projeksiyonudur [16].

5. SONUÇ VE TARTIŞMA

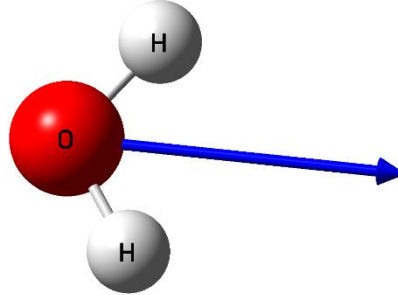
Yukarıda metot ve teorileri verilen yöntemler kullanılarak su ve etan molekölü için geometrik yapılar, dipol momentleri ve infrared spektrumları hesaplanıp elde edilmiştir. Bunun için ilk önce moleküllerin optimize edilmiş yapıları elde edildi. Şekil 5.1 ve Şekil 5.2’de bu moleküllerin optimize olmuş geometrileri görölmektedir. Hartree Fock metodu kullanılarak her bir sistem için dipol momentler ve FTIR spektrumları elde edildi. Elde edilen dipol momentler moleküllerin pozitif ve negatif yüklerinden kaynaklanmaktadır. Su molekölü için elde edilen dipol momentinin büyüklüğünün yönü Şekil 5.3 gösterilmiştir. Su molekölü için dipol momentinin yönü + eksenı doğrultusundadır. Çünkü merkezde bulunan oksijen atomu ile kendisine bağılı bulunan hidrojen atomları simetrik olduğundan toplam dipol momentı bu şekilde çıkması beklenir.



Şekil 5.1. Su molekölünün optimize olmuş geometrisi.

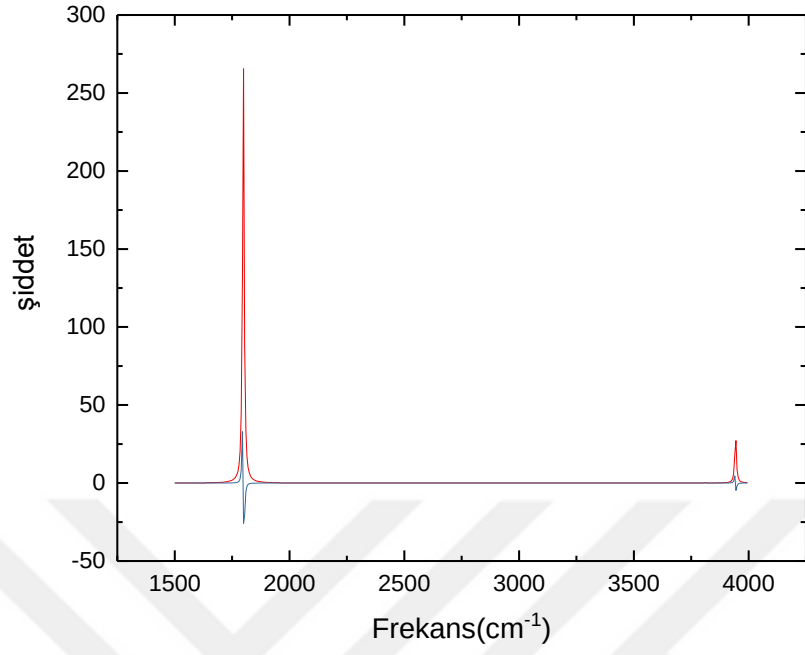


Şekil 5.2. Etan molekülünün optimize olmuş geometrisi.

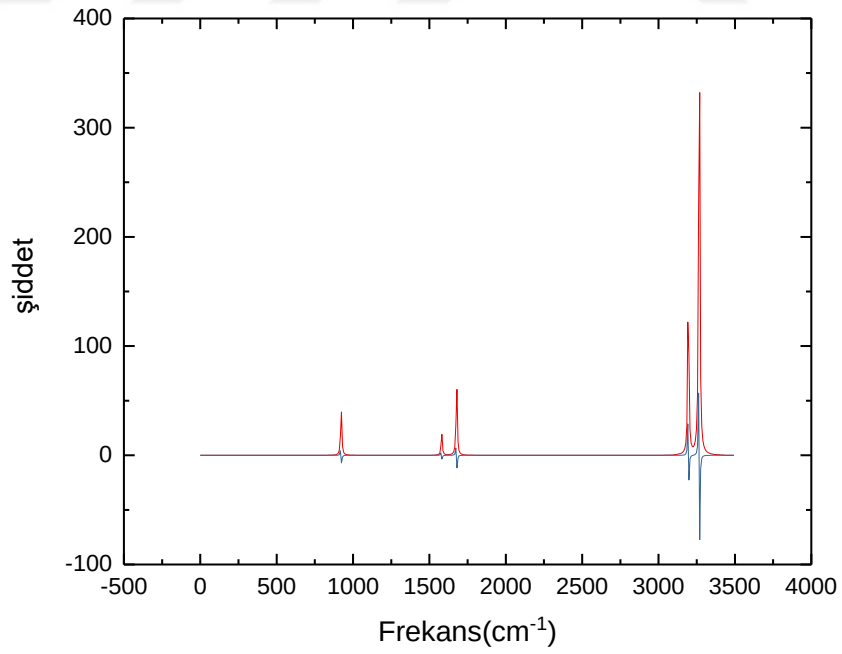


Şekil 5.3. Su molekülünün dipol momentin yönü.

Şekil 5.2’de görülen ve optimize olmuş etan molekülü için ise toplam dipol momentinin sıfır olması beklenir. Çünkü geometrinin sağ ve solunda bulunan karbon atomları üzerinde eşit miktarda hidrojen atomu vardır ve her bir karbon gurubunun dipolu toplam dipole eklendiğinde sıfır olacağı açıktır. Fakat bu sistem ile ilgili quadrapol momentleri ise sıfırdan farklı olduğu aşağıdaki değerlerde verilmiştir. Her iki sistem için elde edilen toplam dipol momentlerinin büyüklükleri su için 2.3867 Debye ve etan için ise 0.0 olarak hesaplandı.



Şekil 5.4. Su molekülü için FTIR spektrumu.



Şekil 5.5. Etan molekülü için FTIR spektrumu.

Şekil 5.4 ve 5.5 su ve etan molekülü için kızılötesi spektrumunu vermektedir. Bu spektrumlar molekülün titreşim modlarından kaynaklanan spektrumlardır. Etan molekülünde daha fazla atom olduğu için titreşim mod sayısı suya göre daha fazladır ve grafikten de görüldüğü gibi pik sayısı sudan daha fazladır [12]. Bu grafiklerdeki her bir pik, moleküldeki atomları farklı salınımlarına denk gelmektedir. Su molekülünde 1750 cm^{-1} civarında görülen pik su molekülünün bükülme (bending) hareketine karşı gelmektedir. 4000 cm^{-1} civarındaki pik ise molekülün gerilme (stretching) hareketine denk gelmektedir. Etan molekülü için ise bu yorumları yapmak daha da karmaşıktır. Etan molekülü 1000 ile 3500 cm^{-1} frekans aralığında birkaç titreşim moduna sahiptir. En büyük pik değeri $3000\text{--}3500\text{ cm}^{-1}$ aralığındadır. Bu ara değerde molekülün içindeki atomlar arasındaki titreşim hareketi diğer modlara göre daha büyüktür.

Etan molekül için elde edilen FTIR spektrumundaki pik sayısı su molekülünde görülen pik sayısından fazladır. Bu da bize, bir moleküldeki atom sayısı arttıkça titreşim mod sayısının artacağını gösterir. Bu durumda spektrumdaki tüm pikleri yorumlamak daha da karmaşık hale gelir [14].

Bir molekülün yük dağılımı ve şekli molekülün polaritesini belirler. Bir moleküldeki herhangi bir iki atom arasında oluşabilecek bağlardan birisi kovalent bağ olabilir. Kovalent bağlar iki atomun bir çift elektronu ortaklaşa kullandığı ile oluşur. Polarlıktan söz edebilmek için molekülü oluşturan atomların aynı cins atomlar olmaması gerekir. Moleküldeki atomlar farklı cinsten ise yanı aynı atomlardan oluşmamış ise iki zıt yük belli bir mesafe ile ayrıldığı zaman bir birbirlerini çekerek bir dipol oluştururlar. Dipolün büyüklüğü ise dipol momenti ile ölçülür.

Etan molekülünü başlangıçta C-H elektronegativiteleri birbirinden farklı iki atom olması nedeniyle bu molekülün bir polar molekül olması beklenir. Bu elektronegativite farkı bağ elektronlarının karbon atomuna doğru kaymasına ve bağ momenti oluşmasına neden olur. Fakat bu iki bağ momenti molekülün hem sağ hem de sol tarafı için eşit büyüklükte ve zıt yönde olduklarından birbirlerini yok ederler ve sonuçta molekülün momenti sıfır olur. Bu hesaplamalardan da sıfır olarak elde edilmiştir. H_2O molekülü ise polar bir moleküldür. Polar bir molekülün yapısı ise doğrusal değildir. Oksijen atomu üzerindeki bağ yapmayan elektronlar bulunmaktadır. Bağ elektronlar hem çekirdek tarafından hem de bağlı atomlar tarafından çekilir. Bağ yapmayan elektronlar ise sadece çekirdek tarafından çekildiği için boşluğa daha rahat yayılırlar. Bu nedenle de bağ

elektronları, bağ yapmayan elektronlar tarafından itildiği için bağ açıları beklenenden küçük olur.

Elektrik dipol momentlerini hesaplamak için öncelikle her bir atom üzerindeki yük miktarlarının hesaplanması gerekir. Bu tez çalışmasında her bir sistem üzerinde yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen numerik değerler aşağıdaki gibidir [17].

Su Molekülü:

Mulliken yükleri:

1 O -0.732881

2 H 0.366441

3 H 0.366441

Toplam Mulliken yükleri = 0.00000

Dipol moment (Debye):

X= 0.0000 Y= 0.0000 Z= -2.3867 Tot= 2.3867

Quadrupole moment (Debye-Ang):

XX= -6.8384 YY= -3.9696 ZZ= -5.8833

XY= 0.0000 XZ= 0.0000 YZ= 0.0000

Etan Molekülü:

Mulliken yükleri:

1 C -0.600847

2 C -0.600847

3 H 0.200283

4 H 0.200282

5 H 0.200282

6 H 0.200282

7 H 0.200282

8 H 0.200282

Toplam Mulliken yükleri = 0.00000

Dipol moment (Debye):

X= 0.0000 Y= 0.0000 Z= 0.0000 Tot= 0.0000

Quadrupole moment (Debye):

XX= -15.0315 YY= -15.0397 ZZ= -15.4957

XY= -0.0011 XZ= 0.0086 YZ= 0.0624

Sonuç olarak; bu tez çalışmasında Su ve Etan molekülü ele alınarak elektrik dipol momentleri yukarıdaki bölümlerde verilen metot ve denklemler kullanılarak hesaplandı. Dipol momentler ve FTIR hesaplamaları yapılmadan önce her iki molekül için ayrı ayrı optimize işlemleri gerçekleştirildi. Optimizedeki amaç en uygun geometriyi elde etmektir. Bütün kuantum mekaniksel hesaplamalar için elde edilen optimize yapılar kullanılmıştır.

6. KAYNAKLAR

- [1]. Lewars, E. 2003. *Computational Chemistry*. Kluwer Academic Publishers, 471s, Dordrecht
- [2]. Jensen, F. 2007. Introduction to computational chemistry. John Wiley and Sons, 2. Baskı, 599 s, London.
- [3]. Dewar, M.J.S., Zoebisch, E., Healy, E.F., Stewart, J.J.P., 1985. AM1: A new general purpose quantum mechanical molecular model. Journal of the American Chemical Society, 107(13), 3902–3909.
- [4]. Levine, I. N., 1991. Quantum Chemistry. Allyn and Bacon, 739s, Boston, MA
- [5]. Foresman, J. B., Frisch, E., 1996. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods. Gaussian, Inc., Pittsburgh PA, 305 s, USA.
- [6]. Hanna, M. W., 1981. Quantum Mechanics in Chemistry. Benjamin/Cummings Pub. Co., 3. Baskı, 151s-155s, Massachusetts.
- [7]. Born M., Oppenheimer R., 1927. Zur Quantentheorie der Molekeln. Annalen der Physik. 389(20), 457-484.
- [8]. Roothaan C. C. J., (1951) New developments in molecular orbital theory. Reviews of Modern Physics, 23(2) 69-89.
- [9]. Leach, A.R., 2001. Molecular Modelling Principles and Applications. Pearson Education Limited, 2. Baskı, 744s, Harlow-England.
- [10]. Hartree D. R., The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I: Theory and methods. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 24(1) (1928) 89-110
- [11]. Slater J. C., Note on Hartree's Method. Physical Review, 35 (1930) 210-211.
- [12]. Roothaan, C.C.J., Self-consistent field theory for open shells of electronic systems. Reviews of Modern Physics, 32(2) (1960) 179-185.
- [13]. Atkins, P.W., Friedman, R.S., 2005. Molecular Quantum Mechanics. Oxford University Press Inc., 588 s, New York.
- [14]. Slater, J.C., Molecular energy levels and valence bonds. Physical Review, 38(6) (1931) 1109-1144.

- [15]. Hohenberg, P., Kohn, W., 1964. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review*, 136(3B), B864-B871.
- [16]. Cramer, C. J., 2004. *Essentials of Computational Chemistry*. John Wiley and Sons, 2. Baskı, 596 s, London.
- [17]. Politzer, P., Murray, J.S., Concha, M.C., The complementary roles of molecular surface electrostatic potentials and average local ionization energies with respect to electrophilic processes. *International Journal of Quantum Chemistry*, 88(1) (2002) 19-27.



ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Adı Soyadı: Zülküf TÜNÇ

Doğum Yeri: ELAZIĞ

Doğum Tarihi: 1988

Uyruk: T.C.

Tel: +90 531 731 01 85

E-Posta: zlkf_tnc_1988@hotmail.com