

**T.C.
KAFKAS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI**

**2-FENİLFURAN MOLEKÜLÜ İLE KLORLU VE FLORLU
TÜREVLERİNİN YAPISAL PARAMETRELERİ, ELEKTRONİK VE
LİNEER OLMAYAN OPTİK ÖZELLİKLERİNİN TEORİK OLARAK
İNCELENMESİ**

Tufan ÖZTÜRK

YÜKSEK LİSANS TEZİ

**DANIŞMAN
Yrd.Doç.Dr. Güventürk UĞURLU**

HAZİRAN 2009

KARS

T.C.
KAFKAS ÜNİVERSİTESİ
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ
FİZİK ANABİLİM DALI

2-FENİLFURAN MOLEKÜLÜ İLE KLORLU VE FLORLU
TÜREVLERİNİN YAPISAL PARAMETRELERİ, ELEKTRONİK VE
LİNEER OLMAYAN OPTİK ÖZELLİKLERİNİN TEORİK OLARAK
İNCELENMESİ

Tufan ÖZTÜRK

YÜKSEK LİSANS TEZİ

DANIŞMAN
Yrd.Doç.Dr. Güventürk UĞURLU

HAZİRAN 2009

KARS

T.C. Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı Yüksek Lisans öğrencisi Tufan ÖZTÜRK' ün Yrd.Doç.Dr. Güventürk UĞURLU' nun danışmanlığında yüksek lisans tezi olarak hazırladığı “2-FENİLFURAN MOLEKÜLÜ İLE KLORLU VE FLORLU TÜREVLERİNİN YAPISAL PARAMETRELERİ, ELEKTRONİK VE LİNEER OLMAYAN OPTİK ÖZELLİKLERİNİN TEORİK OLARAK İNCELENMESİ” adlı çalışma, yapılan tez savunma sınavı sonunda jüri tarafından Lisansüstü Eğitim Yönetmeliği uyarınca değerlendirilerek oy birliği ile kabul edilmiştir.

15 / 06 / 2009

Adı ve Soyadı

imza

Başkan : Prof.Dr. Mevlüt KARABULUT

Üye : Yrd.Doç.Dr. Güventürk UĞURLU

Üye : Yrd.Doç.Dr. Kıvılcım ŞENDİL

Bu tezin kabulü, Fen Bilimleri Enstitüsü Yönetim Kurulunun / / 2009 gün ve / sayılı kararı ile onaylanmıştır.

Prof.Dr. Abdullah DOĞAN
Enstitü Müdürü

ÖNSÖZ

Bu çalışma Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim dalında yüksek lisans tezi olarak hazırlanmıştır.

Çalışmada 2-Fenilfuran Molekülü ile klorlu ve florlu türevlerinin yapısal parametreleri hesaplanmış, elektronik ve lineer olmayan optik özellikleri teorik olarak incelenmiştir. 2-Fenilfuran ve türevi moleküller organik sentezlerde ve ilaç sanayiinde yaygın olarak kullanılmaktadır. Bu sebeple, bu moleküllerin yapılarının ve özelliklerinin incelenmesi önemlidir.

Tez çalışmamda bilgi birikimi ve tecrübesiyle bana her zaman destek olan danışmanım ve değerli hocam Sayın Yrd.Doç.Dr. Güventürk UĞURLU'ya teşekkürlerimi sunarım. Yüksek Lisans programındaki çalışmalarında benden yardımlarını hiçbir zaman eksik etmeyen değerli hocam Sayın Yrd.Doç.Dr. Engin ATEŞER'e teşekkürlerimi sunarım. Tezimin alt yapısının oluşmasında değerli katkılarından dolayı Kafkas Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü Öğretim Üyelerine teşekkür ederim. Bu çalışmada, Gaussian 03W ve GaussView 3.1 paket programlarının kullanılmasına izin veren Sayın Prof.Dr. Ziya KANTARCI'ya teşekkür ederim.

Kars-2009

Tufan ÖZTÜRK

İÇİNDEKİLER

	<u>Sayfa No</u>
ÖNSÖZ	iv
ÖZET	vi
ABSTRACT	vii
SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ	viii
ÇİZELGELERİN LİSTESİ	x
ŞEKİLLERİN LİSTESİ	xi
1. GİRİŞ	1
2. TEMEL BİLGİLER	3
2.1. Hartree-Fock Metodu (HF)	3
2.2. Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT)	7
2.3. Molekül Geometrisi ve Optimizasyonu	12
2.4. Çizgisel Olmayan Optik Özellikler	15
2.5. Temel Setler	16
3. MATERYAL VE METOT	19
3.1. Metot	19
3.2. Materyal	20
4. HESAPLAMA SONUÇLARI	23
4.1. Yapısal Parametreler	23
4.2. Bağlı Enerji ve Torsiyon Potansiyeli	26
4.3. İndüklenmiş Dipol Moment	34
4.4. Polarizebilite	40
4.5. Hiperpolarizebilite	46
5. SONUÇ VE ÖNERİLER	53
KAYNAKLAR	55
ÖZGEÇMİŞ	60
EKLER	61

ÖZET

Bu çalışmada, 2-Fenilfuran molekülü ile Klorlu ve Florlu türevlerinin geometrik optimizasyon durumu için, yapısal parametreleri, elektronik ve çizgisel olmayan optik özellikleri ile Fenil ve Furan halkaları arasındaki dihedral açının bir fonksiyonu olarak elektronik ve çizgisel olmayan optik özellikleri teorik olarak incelenmiştir. Tüm hesaplamalar HF/6-31++G(d,p) ve DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) metodu ile GAUSSIAN 03W ve GAUSSIAN VIEW 3.1 paket programı kullanılarak yapılmıştır. Sonuç olarak, Orto-Klor ve Orto-Flor atomlarının enerji karakteristiğini değiştirdiği, Klor ve Flor atomlarının dipol moment değerini, Klor atomunun polarizebilite değerini arttırdığı, Para-Klor ve Para-Flor atomlarının hiperpolarizebilite değerinin davranışını değiştirdiği görülmüştür.

2009, 71 sayfa

Anahtar Kelimeler : 2-fenilfuran, Dipol moment, HF, DFT, B3LYP

ABSTRACT

In this study, 2-Phenylfuran molecule and its Chlorine and Fluorine derivatives' structural parameters, electronic and non-linear optical properties for geometrical optimization status and as a function of dihedral angle between phenyl and furan rings, electronic and non-linear optical properties are inspected theoretically. All calculations are performed by GAUSSIAN 03W and GAUSSIAN VIEW 3.1 software, using HF/6-31++G(d,p) and DFT/B3LYP++6-31G(d,p) methods. It is observed that Ortho-Clor and Ortho-Flor atoms change the characteristic of energy, Clor and Flor atoms increase the dipole moment value, Clor atom increases the polarizability value, Para-Clor and Para-Flor atoms changes the behavior of hyperpolarizability.

2009, 71 page

Keywords: 2-Phenylfuran, Dipole moment, HF, DFT, B3LYP

SİMGELER VE KISALTMALAR DİZİNİ

1. Simgeler

Å	Angstrom
E	Hamiltonyen işlemcisi özdeğeri
$E_{\text{elek.}}$	Toplam elektronik enerjisi
E_{HK}	Hohenberg-Kohn enerji fonksiyonu
E_{xc}	Değiş-tokuş ve korelasyon enerjisi
F_{ij}	Kuvvet sabiti
\hat{H}	Hamiltonyen işlemcisi
\hat{H}_e	Elektronik hamiltonyen işlemcisi
k	Kuvvet sabiti
T	Kinetik enerji fonksiyonu
V^{et}	Etkin potansiyel
α	Kutuplanabilirlik katsayısı
μ	Dipol moment
ρ	Elektron yoğunluğu
ϕ_μ	Atomik orbital
Φ	Slater determinantı dalga fonksiyonu
Ψ	Dalga fonksiyonu
ψ_e	Elektronik dalga fonksiyonu

2. Kısaltmalar

AO	Atomik orbital
B3LYP	LYP korelasyon enerjili 3 parametrelili Becke karma metodu
DFT	Yoğunluk fonksiyon teoremi
HF	Hartree-Fock

PES	Potansiyel enerji yüzeyi
LCAO	Atomik orbitallerin lineer kombinasyonu
LDA	Yerel yoğunluk fonksiyonu yaklaşımı
MM	Moleküler mekanik
MO	Moleküler orbital

ÇİZELGELERİN LİSTESİ

Çizelge	<u>Sayfa No</u>
Çizelge 4. 1 Denge durumları dihedral açıları, dipol moment ve elektronik enerji değerleri	24
Çizelge 4. 2 Denge durumları polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri	26
Çizelge 4. 3 Moleküllerin hesaplanan torsiyon bariyer yükseklikleri	27

ŞEKİLLERİN LİSTESİ

Şekil		<u>Sayfa No</u>
Şekil 2.1	İki boyutta potansiyel enerji yüzeyi	13
Şekil 2.2	Potansiyel enerji eğrisindeki maksimum ve minimum noktaların karakteristiği (Burada g gradyant, k kuvvet sabitidir.)	14
Şekil 3.1	2-fenilfuran molekülü, klorlu ve florlu türevlerinin adlandırılmasında kullanılan kimyasal ve geometrik yapı konfigürasyonu	20
Şekil 3.2	2-(2-klorofenil)furan molekülü konfigürasyonu	21
Şekil 3.3	2-(2-florofenil)furan molekülü konfigürasyonu	21
Şekil 3.4	2-(4-klorofenil)furan molekülü konfigürasyonu	22
Şekil 3.5	2-(4-florofenil)furan molekülü konfigürasyonu	22
Şekil 4.1	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	28
Şekil 4.2	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-klorofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	29
Şekil 4.3	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-florofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	29
Şekil 4.4	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-klorofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	30
Şekil 4.5	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-florofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	30
Şekil 4.6	DFT/B3LYP/6-31++ G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	31
Şekil 4.7	DFT/B3LYP/6-31++ G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-klorofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	31
Şekil 4.8	DFT/B3LYP/6-31++ G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-florofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	32

Şekil 4.9	DFT/B3LYP/6-31++ G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-klorofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	32
Şekil 4.10	DFT/B3LYP/6-31++ G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-florofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	33
Şekil 4.11	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	35
Şekil 4.12	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-klorofenil)furan molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	35
Şekil 4.13	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-florofenil)furan molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	36
Şekil 4.14	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan, 2-(4-klorofenil)furan molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	36
Şekil 4.15	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan, 2-(4-florofenil)furan molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	37
Şekil 4.16	DFT/B3LYP 6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	37
Şekil 4.17	DFT/B3LYP 6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-klorofenil)furan molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	38
Şekil 4.18	DFT/B3LYP 6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan, 2-(2-florofenil)furan molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	38
Şekil 4.19	DFT/B3LYP 6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-klorofenil)furan molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	39
Şekil 4.20	DFT/B3LYP 6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-florofenil)furan molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	39
Şekil 4.21	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	41
Şekil 4.22	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-klorofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	41
Şekil 4.23	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan, 2-(2-florofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	42

Şekil 4.24	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-klorofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	42
Şekil 4.25	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-florofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	43
Şekil 4.26	DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	43
Şekil 4.27	DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-klorofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	44
Şekil 4.28	DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-florofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	44
Şekil 4.29	DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-klorofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	45
Şekil 4.30	DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-florofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	45
Şekil 4.31	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	47
Şekil 4.32	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-klorofenil)furan molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	47
Şekil 4.33	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-florofenil)furan molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	48
Şekil 4.34	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-klorofenil)furan molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	48
Şekil 4.35	HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-florofenil)furan molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	49
Şekil 4.36	DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	49
Şekil 4.37	DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile 2-(2-klorofenil)furan molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi	50

- Şekil 4.38** DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-florofenil)furan molekölünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağılı olarak deęişimi 50
- Şekil 4.39** DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-klorofenil)furan molekölünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağılı olarak deęişimi 51
- Şekil 4.40** DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-florofenil)furan molekölünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağılı olarak deęişimi 51

1. GİRİŞ

Maddelerin özellikleri, o maddeyi oluşturan moleküllerin özelliklerine, moleküllerin özellikleri ise molekülleri oluşturan atomların ve atomları bir arada tutan kimyasal bağların özelliklerine bağlıdır. Bir molekülün özellikleri yapısında bulunan atomlara ve bağlara bağlı olduğuna göre, özellikler ile yapı birbiriyle bağlantılıdır. Bir maddenin yapısında değişiklik yapılarak, o maddenin özellikleri değiştirilebilir. Bu nedenle Fizik ve Kimya alanında çalışanlar maddelerin özelliklerini belirlemek adına sayısız çalışmalar yapmışlar ve iyi özellikleri tek bir malzeme üzerinde toplamaya çalışmışlardır. Araştırmacılar, malzeme biliminde yeni malzeme üretimi için polimerleri oluşturan dimer ve moleküller üzerinde yaptıkları substitüent etkileri veya doplama işlemleri ile bu moleküllerin elektriksel ve optiksel özelliklerinin değişebileceğini göstermişlerdir [1-2].

2-Fenilfuran ve türevi moleküller organik sentezlerde ve ilaç sanayisinde yaygın olarak kullanılmaktadır [3-4]. Bu sebeple bu moleküllerin yapılarının ve özelliklerinin incelenmesi önemlidir.

Bu moleküllerle ilgili literatürde deneysel çalışmalara rastlanmamıştır. R. Abu-Eittah, R. Hilal ve M. M. Hamed yaptıkları teorik çalışmada, 2-fenilfuran molekülünün denge geometrisini 0° olarak bulmuşlardır [5].

1981'de W. M. F. Fabien, yarı deneysel AM1 metodunu kullanarak yaptığı çalışmada denge geometrisini 0° olarak bulmuş, yine bu çalışmada 2-fenilfuran molekülünün 0° deki bariyer yüksekliğini 0 K. Joule/mol, 90° deki bariyer yüksekliğini ise 10,25 K. Joule/mol bulmuştur [6].

Bizim bu çalışmamızda, GAUSSIAN 03 paket programında, Hartree-Fock (HF) ve yoğunluk fonksiyonu teorisi (DFT) ile 6-31++g(d,p) temel setti kullanılarak 2-fenilfuran molekülünün kendisi, klorlu ve florlu türevleri, geometrik optimizasyon durumlarına getirilmiş ve yapısal parametre, elektronik enerji, dipol moment, polarizebilite, hiperpolarizebilite değerleri hesaplanmıştır. Hemen arkasından bu moleküllerin yapısını

oluşturan Fenil ve Furan halkalarının arasındaki denge dihedral açısı değeri 0° den 180° ye kadar periyodik olarak 10° lik arttırmalarla değiştirilerek her arttırmada moleküllere ait elektronik enerji değerleri hesaplanmıştır. Denge dihedral açısı, 0° den 180° ye kadar periyodik olarak 30° lik arttırmalarla değiştirilerek her arttırmada moleküllere ait dipol moment, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri hesaplanmıştır. Moleküllere ait elektronik ve çizgisel olmayan optik özellikler dihedral açının bir fonksiyonu olarak ifade edilmiştir.

2. TEMEL BİLGİLER

Kuantum teorisinin gelişmesiyle, kuantum kanunları, atom ve molekül sistemleri üzerine uygulanmaya başlanmıştır. Kuantum mekaniğiyle, bir molekül sisteminin enerjisini ve diğer özelliklerini hesaplamak için, bu sisteme ait Schrödinger denkleminin çözülmesi gerekmektedir. Ancak, Schrödinger denkleminin tam çözümü tek parçacıklı sistemler için mümkün olup, sadece Hidrojen atomu için tam çözümü mevcuttur. Çok parçacıklı sistemler için, Schrödinger denkleminin tam çözümü yapılamamaktadır. Bundan dolayı çok elektronlu sistemlerde Schrödinger denkleminin çözülebilmesi için matematiksel yaklaşımlar kullanılarak bazı yaklaşık çözüm metotları geliştirilmiştir. Bu yaklaşık çözüm metotları kullanılarak yapılan hesaplama sonuçlarındaki farklılıklar, yapılan farklı matematiksel yaklaşımlardan kaynaklanmaktadır. Bu yaklaşık metotlardan bazıları;

- 1- Moleküler mekanik metotlar
- 2- Yarı-deneysel (Semi-empirical) metotlar
- 3- Ab initio metotları'dır.

Bu metotlardan ab initio metotları, yaygın olarak kullanılmaktadır [7].

Ab initio metotlarında, diğer metotlardan farklı olarak, hesaplama yaptığı sistemlerde ışık hızı, Planck sabiti, elektronların kütlesi ve hızı gibi temel fiziksel değerler hariç, deneysel değerler kullanılmaz [7].

2.1. Hartree-Fock Metodu (HF)

Kuantum mekaniği ile bir sistemin enerjisini ve diğer fiziksel özelliklerini belirleyebilmek için, sisteme ait Schrödinger denkleminin ($H\Psi = E\Psi$) çözülmesi gerektiğini belirtmiştik. Burada; ψ Sisteme ait dalga fonksiyonu, H Hamilton işlemcisi, E Hamiltoniyen işlemcisinin enerji özdeğeridir. Hamiltoniyen işlemcisi, sistemin toplam potansiyel ve kinetik enerjilerinin toplamına karşılık gelir.

Bu sistem için, hamiltoniyen operatörü aşağıdaki şekilde yazılabilir:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2 - \sum_{\alpha=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \nabla_\alpha^2 + e^2 \left[\sum_{\alpha < \beta}^N \sum_{\alpha < \beta}^N \frac{Z_\alpha Z_\beta}{R_{\alpha\beta}} + \sum_{i < j}^n \sum_{i < j}^n \frac{1}{r_{ij}} - \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha=1}^N \frac{Z_\alpha}{r_{i\alpha}} \right] \quad (2.1)$$

Schrödinger denkleminin çözümünde kullanılan ilk yaklaşım, Born-Oppenheimer yaklaşımıdır [8]. Protonun kütesinin ($1,67 \times 10^{-27}$ kg), elektronun kütesinden ($9,1 \times 10^{-31}$ kg), 1840 kat daha fazla olması sebebiyle, elektronun hareketi çekirdeğin hareketinden çok daha hızlıdır. Bu yaklaşıma göre, bu iki hareketin birbirinden bağımsız olduğu kabul edilirse, çok elektronlu sistemlerin toplam dalga fonksiyonu olan Ψ , çekirdek ve elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı şeklinde yazılabilir.

$$\Psi = \Psi_\zeta \Psi_e \quad (2.2)$$

Born-Oppenheimer yaklaşımında, çekirdeğin kinetik enerjisi ihmal edilir ve Schrödinger denklemi,

$$\hat{H}_e \Psi_e = E_e \Psi_e \quad (2.3)$$

şeklinde yazılır.

Eş. 2.1 ile verilen hamiltoniyen ifadesi, Born-Oppenheimer yaklaşımı yapıldığında ayrı ayrı \hat{H}_0 , \hat{H}_1 ve \hat{H}_2 operatörleri olarak yazılır [9].

$$\hat{H}_0 = e^2 \sum_{\alpha < \beta}^N \sum_{\alpha < \beta}^N \frac{Z_\alpha Z_\beta}{R_{\alpha\beta}} \quad (2.4)$$

$$\hat{H}_1 = \sum_{i=1}^n \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \sum_{\alpha=1}^N \frac{e^2 Z_\alpha}{r_{\alpha i}} \right) = \sum_{i=1}^n \hat{h}_1(i) \quad (2.5)$$

$$\hat{H}_2 = \sum_{i < j} \sum \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (2.6)$$

Burada, \hat{H}_1 terimi sadece i. elektronun hamilton operatörüdür. Ancak, \hat{H}_2 teriminde hala iki elektronun birebir etkileşimi vardır. Dolayısıyla çok elektronlu sistemlerin hamiltoniyen operatörleri, tek elektron hamiltoniyen operatörlerinin toplamı olarak yazılamamakta ve sonuç olarak; Schrödinger denklemi değişkenlerine ayrılamamaktadır. Bu olumsuz durumu ortadan kaldırmak için, Hartree, bağımsız parçacık modelini öne sürmüştür. Bu modele göre her elektron, diğer elektronlarla birebir etkileşmemekte, çekirdeğin potansiyel alanı ve diğer elektronlardan kaynaklanan ortalama bir potansiyel etkisinde hareket etmektedir.

$$\sum_{i < j} \sum \frac{e^2}{r_{ij}} \longrightarrow \sum_i^n V_1^{et}(i) \quad (2.7)$$

Böylece, çok elektronlu sistemdeki her elektron, kendi dalga fonksiyonu ile tanımlanır ve çok elektronlu bir sistemin dalga fonksiyonunu, tek elektron dalga fonksiyonlarının çarpımı olarak verir.

$$\Psi(1, 2, 3, \dots, n) \rightarrow \phi_1(1)\phi_2(2)\dots\phi_n(n) \quad (2.8)$$

Buna Hartree çarpımı denilir.

Hartree toplam dalga fonksiyonu, elektron koordinatlarına göre anti simetrikliği içermemektedir. Bu durum ise, Pauli dışarlama ilkesiyle çelişir ve yetersiz bir dalga fonksiyonu olduğu sonucu çıkarılabilir.

Anti simetrikliğinde hesaba katılarak 1930'da Fock ve Slater tarafından, sistemin dalga fonksiyonu bir determinant (Eş. 2.9) şeklinde yazılarak yapılmıştır [10].

$$\Phi(r_1, r_2, \dots, r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(r_1)\phi_2(r_2)\dots\phi_N(r_N) \\ \phi_1(r_2)\phi_2(r_2)\dots\phi_N(r_2) \\ \vdots \\ \phi_1(r_N)\phi_2(r_N)\dots\phi_N(r_N) \end{vmatrix} \quad (2.9)$$

Sistemin anti-simetrik olan dalga fonksiyonlarına göre etkin potansiyel Eş. 2.10 ile verilmiştir.

$$V_1^{et}(i) = \sum_{j=1}^n \int \phi_j(j) \frac{e^2}{r_{ij}} (1 - \hat{P}_{ij}) \phi_j(j) d\tau_i = \sum_{j=1}^n \langle \phi_j(j) | (1 - \hat{P}_{ij}) \phi_j(j) \rangle \quad (2.10)$$

Etkin potansiyel terimindeki \hat{P}_{ij} elektronların koordinatlarını değiştiren operatördür ve Eş. 2.11 ile verilmiştir.

$$\hat{P}_{ij} [\phi_i(1)\phi_j(2)] = \phi_i(2)\phi_j(1) \quad (2.11)$$

Çok elektronlu sistemlerde enerjinin beklenen değeri Eş. 2.12 ile verilmiştir.

$$E = \langle \Phi | \hat{H} \Phi \rangle = \langle \Phi | \hat{H}_0 \Phi \rangle + \left\langle \Phi \left| \sum_{i=1}^n \hat{h}_1(i) \Phi \right. \right\rangle + \left\langle \Phi \left| \sum_{i<j}^n \sum_{i=1}^n \hat{h}_2(ij) \Phi \right. \right\rangle \quad (2.12)$$

Φ , tüm sistemin dalga fonksiyonu olup, elektronların dalga fonksiyonlarının çarpımının lineer kombinasyonudur. Buna göre, enerjinin beklenen değeri Eş. 2.13 ile verilir.

$$\begin{aligned} E &= E_0 + \sum_{i=1}^n \langle \phi_i(i) \hat{h}_1(i) \phi_i(i) \rangle + \sum_{i<j}^n \sum_{i=1}^n \langle \phi_i(i) \phi_j(j) \hat{h}_2(ij) \phi_i(i) \phi_j(j) \rangle \\ &\quad - \langle \phi_i(i) \phi_j(j) \hat{h}_2(ij) \phi_i(j) \phi_j(i) \rangle \\ &= E_0 + \sum_{i=1}^n \langle \phi_i(i) \hat{h}_1(i) \phi_i(i) \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i=j}^n \sum_{j=1}^n \langle \phi_i(i) \phi_j(j) | \hat{h}_2(ij) (1 - \hat{P}_{ij}) \phi_i(i) \phi_j(j) \rangle \end{aligned} \quad (2.13)$$

Eş. 2.13’de çift katlı toplam ifadesindeki ilk terim, Coulomb etkileşimini, ikinci terim ise değiş-tokuş etkileşimini gösterir. Sistemin taban durum enerjisine karşılık gelen dalga fonksiyonu, varyasyon prensibinden, dalga fonksiyonunun ortanormal olması Lagrange çarpımı yardımı ile yapılır. Bu işlemlerden sonra Hartree-Fock (HF) eşitliği;

$$\hat{F}(i)\phi_i = \sum_j \varepsilon_{ij}\phi_j \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.14)$$

şeklinde yazılır. Buradaki n , elektronların ve Fock operatörlerinin (F) sayısıdır. Bu ifadenin matris gösterimi aşağıdaki gibidir [10]:

$$\hat{F}\phi = \varepsilon\phi = (\phi_1\phi_2\dots\phi_n) \begin{bmatrix} \varepsilon_{11}\varepsilon_{22}\dots\varepsilon_{1n} \\ \varepsilon_{21}\dots\varepsilon_{2n} \\ \dots \\ \varepsilon_{n1}\dots\varepsilon_{nn} \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

2.2. Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi (DFT)

Yoğunluk Fonksiyonu Teorisi, elektron sisteminin taban durum elektronik enerjisinin, elektron yoğunlunun (ρ) bir fonksiyonu olarak yazılmasına dayanır.

Bu da yoğunluk fonksiyonu teorisinin (DFT) temelini teşkil eder. Burada bir molekül, çevresini elektron bulutu saran, sabitleştirilmiş çekirdek kümesi olarak düşünülür. Çekirdekler, sanki elektron gazına gömülmüş gibi düşünülür. Çekirdeğin elektron bulutu üzerine etkisi, bir dış potansiyel olarak bilinir. Enerjinin beklenen değeri, elektron yoğunluğunun bir fonksiyonu olarak Eş. 2.16 ile verilir.

$$\begin{aligned} E &= \langle \Psi[\rho] \hat{H} \Psi[\rho] \rangle \\ &= \langle \Psi[\rho] \hat{T} \Psi[\rho] \rangle + \langle \Psi[\rho] V_{ee} \Psi[\rho] \rangle + \langle \Psi[\rho] V_{ne} \Psi[\rho] \rangle \\ &= T[\rho] + V_{ee}[\rho] + V_{ne}[\rho] \end{aligned} \quad (2.16)$$

Burada dış potansiyelin enerji katkısı V_{ne} , elektron yoğunluğu kullanılarak ifade edilebilir.

$$V_{ne} = -\sum_{i=1}^n \sum_{\alpha=1}^N \frac{Ze^2}{r_{i\alpha}} = \sum_{i=1}^n v(r_i) \quad (2.17)$$

$$V_{ne}[\rho] = \int \Psi^*(1, \dots, n) \Psi(1, \dots, n) \sum_i v(r_i) dr_1 \dots dr_n = \int \rho(r) v(r) dr \quad (2.18)$$

Sistemdeki tüm elektronlar aynı dış potansiyelin $V(r)$ etkisindedirler. Toplam elektronik enerji fonksiyonu Eş. 2.19 ile verilir.

$$E[\rho] = F[\rho] + \int \rho(r) v(r) dr \quad (2.19)$$

Buradaki $F[\rho] = T[\rho] + V_{ee}[\rho]$ ifadesi, Hohenberg-Kohn fonksiyoneli olarak tanınır [11-12]. Elektron yoğunluğu, minimizasyon (İkinci Hohenberg-Kohn teoremi) prensibi kullanılarak belirlenebilir. Bu, elektron yoğunluğu için varyasyon prensibinin temelidir. Herhangi bir $\rho \neq \rho_0$ deneme yoğunluğu için enerji fonksiyoneli $E_{HK}[\rho] > E_0$ olur. Burada $\rho_0(r)$ yoğunluk ve E_0 temel durumdaki enerjidir. Bu $E[\rho_0] = E_0$ için de doğrudur. Enerji fonksiyonunu minimize etmek için ;

$$\delta [E_{HK}[\rho] - \mu (\int \rho(r) - n)] = 0 \quad (2.20)$$

ifadesi kullanılır. Bu ifadedeki $\mu = \frac{\delta F[\rho]}{\delta \rho(r)} + v(r)$ belirsiz Lagrange çarpanıdır.

$E_{HK}[\rho]$ içindeki $F[\rho] = T[\rho] + V_{ee}[\rho]$ ifadesinde, $T[\rho]$ tam olarak hesaplanabilmektedir. Ancak $V[\rho]$ için yaklaşık çözümler kullanmak gerekmektedir.

DFT'nin pratik uygulamaları, Kohn ve Sham tarafından sunulan bir prosedürle mümkün hale getirildi. Elektronların birbirleri ile etkileşmediği bir sistem düşünüldü. Bu sistemde, Schrödinger denklemi, bir elektron denklemine ayrılabilir olsun. Tek-elektron denklemleri elektron yoğunluğunu ifade edebilmek için kullanıldı.

$$\rho = \sum_{i=1}^n |\phi_i|^2 \quad (2.21)$$

Bu sistemde, kinetik enerji fonksiyonu aşağıdaki forma sahiptir:

$$T_s[\rho] = \sum_{i=1}^n \langle \phi_i | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi_i \rangle \quad (2.22)$$

Bu, etkileşmeyen sistemin enerji fonksiyonudur. Gerçek sistem için;

$$E_c = T_s[\rho] - T[\rho] \quad (2.23)$$

Bu fark, elektronların korelasyon enerjisini içerir. Değiş-tokuş enerjisi ile birleştirilerek;

$$F[\rho] = T_s[\rho] + J[\rho] + E_{xc}[\rho] \quad (2.24)$$

$J[\rho]$ Coulomb terimi, E_{xc} elektron değiş-tokuş ve korelasyon terimidir. Eş. 2.24,

$$\frac{\delta T_s[\rho]}{\delta \rho(r)} + V^{et}(r) = \mu \quad (2.25)$$

formunu alır. Burada ;

$$V^{et}(r) = v(r) + \frac{\delta J[\rho]}{\delta \rho(r)} + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(r)} \quad (2.26)$$

Burada; $T_s[\rho]$, $J[\rho]$ 'nin klasik elektrodinamikteki değeri için hesaplanabilir. Problem artık E_{xc} 'nin belirlenmesine indirgenmiştir.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V^{et}(r) \right] \phi_i = \sum_{j=1}^n \varepsilon_{ij} \phi_j \quad (2.27)$$

Enerjinin beklenen değerinin minimum olabilmesi için varyasyon prensibinde kullanılan V^{et} tek-elektron fonksiyonu değiştirilerek, en uygun olanı seçilir. Buradan Kanonik Kohn-Sham denklemi aşağıdaki şekilde yazılır:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V^{et}(r) \right] \phi_i = \varepsilon_i \phi_i \quad (2.28)$$

Sonuç olarak; burada SCF prosedürü kullanılarak Kohn-Sham orbitalleri elde edilebilir.

E_{xc} değerini hesaplayabilmek için bu terim E_x ve E_c şeklinde iki kısma ayrılır. Yerel yoğunluk yaklaşımı metotlarında (LDA), bu fonksiyonlar sadece elektron yoğunluğuna bağlıdır. Gradyan-düzeltilmeli fonksiyonlarda ise, hem elektron yoğunluğuna hem de yoğunluğun gradyantına bağlıdır. Bir LDA fonksiyoneli tekdüze gaz modelinden şu şekilde verilmektedir:

$$E_x^{LDA} = -\frac{3}{2} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{1/2} \int \rho^{4/3} dr \quad (2.29)$$

Bu ifade, tekdüze elektron gazı için değiş-tokuş enerjisidir. Bu değiş-tokuş ifadesi 1988 yılında Becke tarafından geliştirilerek aşağıdaki şekilde formüle edilmiştir:

$$E_x^{B88} = E_x^{LDA} - b \int \frac{\rho^{4/3} x^2}{(1 + 6b \sinh^{-1} x)} dr \quad (2.30)$$

Buradaki b Becke tarafından deneysel olarak 0,0042 a.u. bulunmuştur. Becke fonksiyonu LDA deęiş-tokuş fonksiyonuna bir düzeltmedir [13].

Lee-Yang-Parr (LYP), Perdew (P86) ve Perdew-Wang (PW91) tarafından geliştirilmiştir ve içinde hem yoğunluk hem de yoğunluk gradyantını içeren fonksiyonlar bu konuda en iyi bilinen fonksiyonlardır.

Gelişmiş DFT fonksiyonları, hem deęiş-tokuş hem de korelasyon terimlerinin beraber kullanılması sonucu elde edilmişlerdir. Bunlardan en yaygın olarak kullanılanı, Beck'nin deęiş-tokuş terimini (Eş. 2.30) ve LYP korelasyon fonksiyonunu kullanan BLYP (Beck-Lee-Yang-Parr) fonksiyoneliidir [14-15].

HF teorisinin kinetik enerji için uygun sonuç vermesi, ancak; deęiş-tokuş enerjisi ve korelasyon enerjisini iyi hesaplayamaması, DFT modelinin ise deęiş-tokuş enerjisi ve korelasyon enerjisini iyi hesaplaması sebebiyle, tam enerji ifadesi için saf HF veya saf DFT modelleri yerine; bu modellerin enerji ifadelerinin toplam elektronik enerji ifadesinde kullanılmaları sonucu, karma (hibrit,melez) modeller türetilmiştir.(Eş. 2.31).

$$E_{xc}^{hyb} = c_{HF} E_x^{HF} + c_{DFT} E_{xc}^{DFT} \quad (2.31)$$

Bu karma modellerde, en iyi sonuç verenlerden biri 1993 yılında geliştirilen Beck'nin 3 parametrelili fonksiyonudur (Eş. 2.32).

$$E_{xc}^{B3PW} = E_x^{LSDA} + c_0 (E_x^{HF} - E_{xc}^{LSDA}) + c_x E_x^{B88} + E_c^{VWN} + c_c \Delta E_c^{PW} \quad (2.32)$$

Burada c_0 , c_x ve c_c katsayıları deneysel deęerlerden türetilmiş sabitlerdir. Eş. 2.32'de PW91 yerine, Lee-Yang-Parr fonksiyoneli kullanıldığında B3LYP metodu elde edilir [10].

2.3. Molekül Geometrisi ve Optimizasyonu

Moleküldeki atomların uzaydaki yerleşimleri ve molekülün yapısı, Molekülün Geometrisi'ni oluşturur. Molekülün minimum enerjisine karşılık gelen, moleküldeki atomların uzay yerleşimlerini bulmaya geometrik optimizasyon denir. Bunun için genel program algoritması [16];

- i) Moleküldeki atomların başlangıç koordinatları verilir.
- ii) Molekülün enerjisi ve moleküldeki her bir atom üzerine etki eden net kuvvet hesaplanır.
- iii) Eğer moleküldeki her bir atom üzerine etki eden net kuvvet sıfır ($\sim 10^{-6}$) ise geometrik optimizasyon tamamlanır.
- iv) Eğer moleküldeki her bir atom üzerine etki eden net kuvvet sıfır değilse, moleküldeki atomların koordinatları, atomlar üzerine etki eden kuvveti azaltacak şekilde değiştirilir ve basamak ii)'ye dönülür.

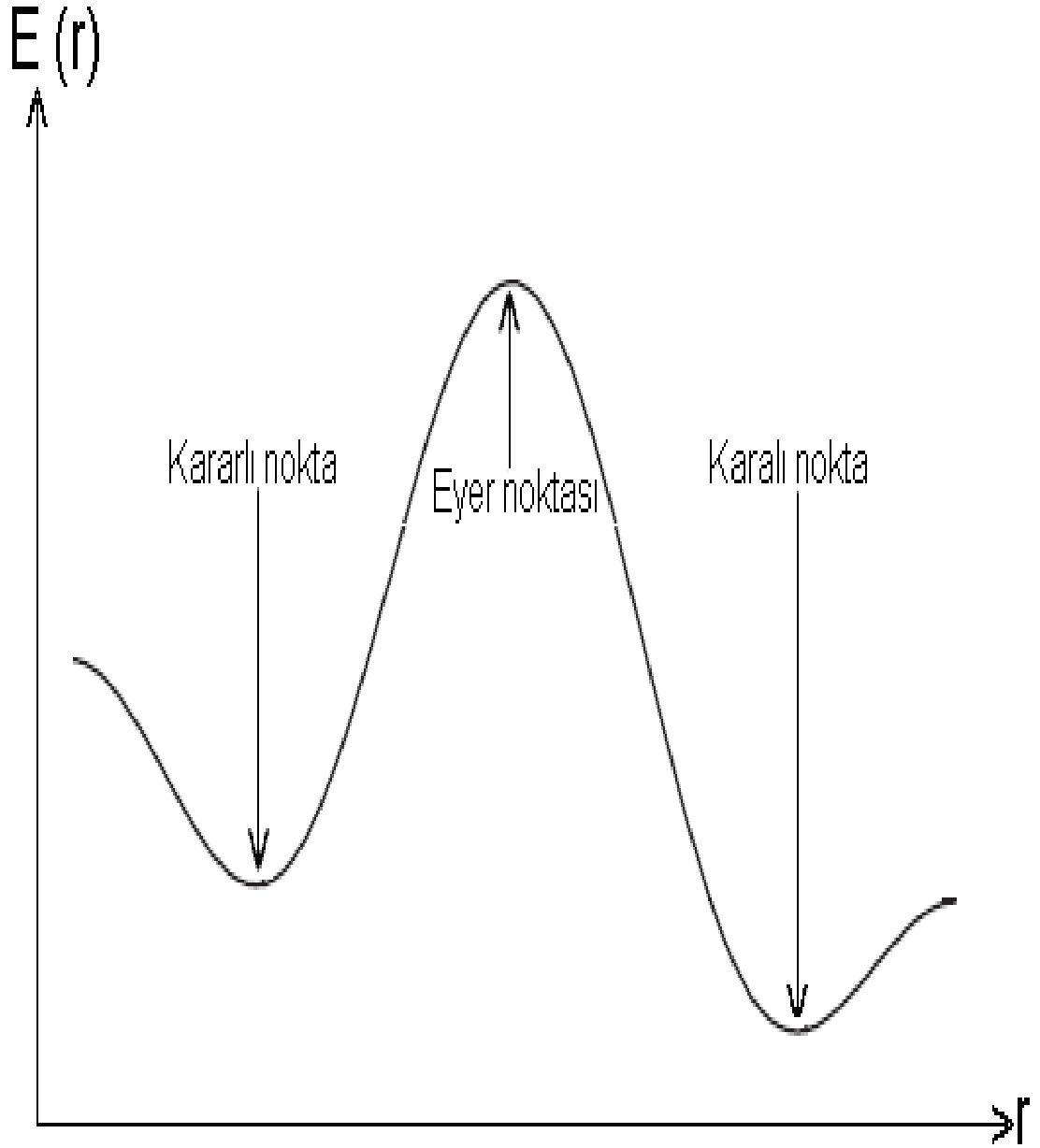
Burada, moleküler sistemin toplam enerjisinin birinci türevi (gradyant) ve ikinci türevi (Hessian Matrisi) hesaplanarak, sistemin minimum enerjideki yapısı tespit edilir [17]. Bu algoritmada geçerli grid olarak (75,302) kullanılır [18]. Grid ifadesindeki birinci sayı; atomdan itibaren radyal kabuk sayısını, ikincisi ise; her bir kabuktaki grid nokta sayısını belirtir.

Molekülün yapısındaki küçük değişikliklere karşı, sistemin enerjisinin koordinata bağımlılığına potansiyel enerji yüzeyi (PES) denir. Bir molekül için potansiyel enerji yüzeyi bilinirse, denge durumundaki geometriye karşılık gelen minimum enerjili nokta bulunabilir.

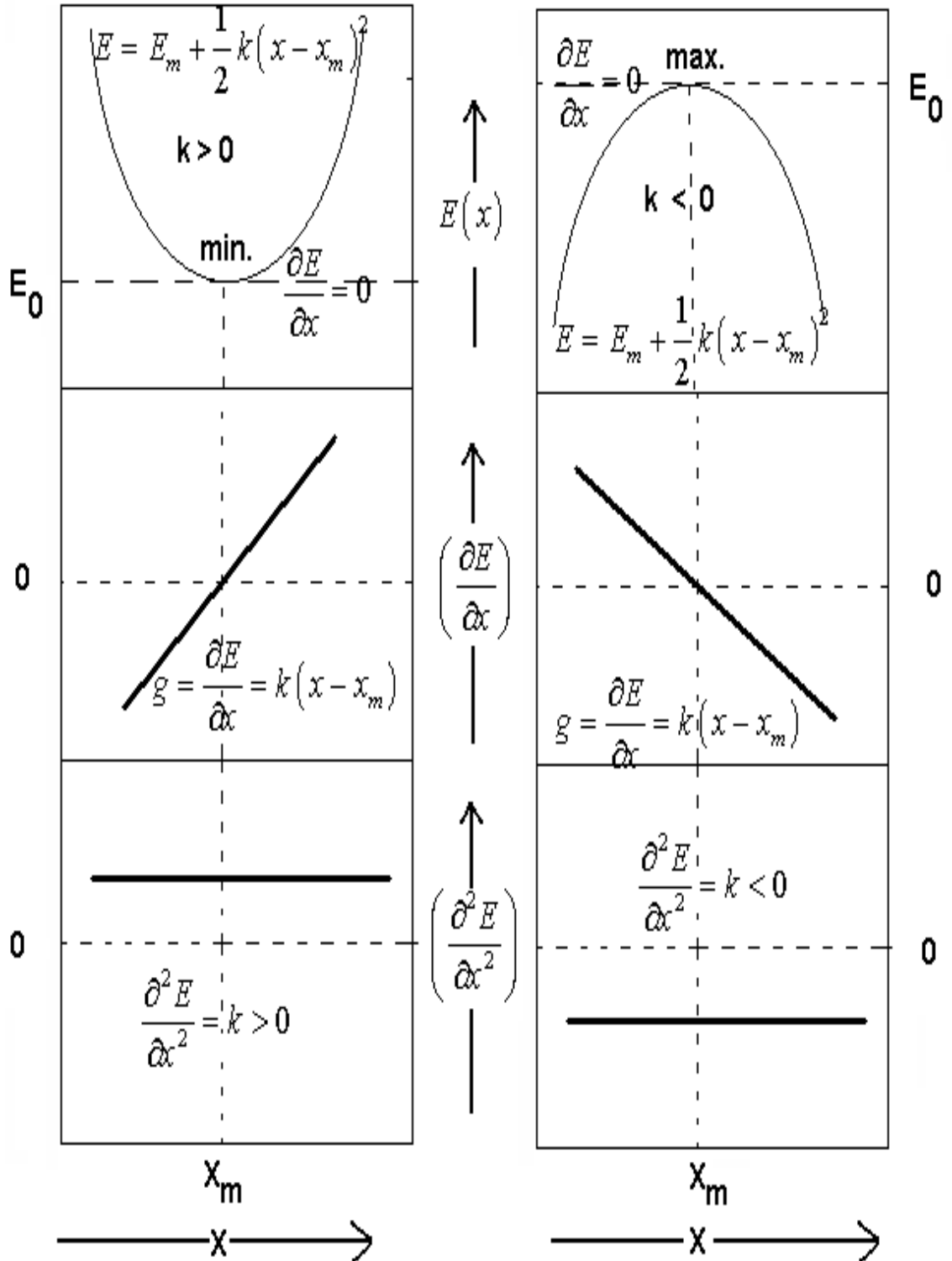
Bir molekül için potansiyel enerji yüzeyinde Şekil 2.1'de görüldüğü gibi birden fazla maksimum, minimum veya eyer noktaları olabilir.

Bu noktalar, moleküler yapıların kararlı olduğu durumlar olarak bilinir ve bu noktalar enerjinin birinci ve ikinci türevi ile belirlenir. Bu noktalarda enerjinin birinci türevi yani gradyenti sıfırdır. Kuvvet, gradyentin negatifi olduğundan bu noktada kuvvet de sıfır

olur. Enerjinin ikinci türevi kuvvet sabitini verir. Kuvvet sabitleri bu noktalardaki yüzeyin eğriliğini tanımlar ve bir sonraki aşama hakkında bilgi verir [19-20]. İkinci türevlerin tamamı pozitif ise, o noktaya yerel minimum, tamamı negatif ise, yerel maksimum sadece bir tanesi negatif ise eyer noktası denir (Şekil 2.2).



Şekil 2.1 İki boyutta potansiyel enerji yüzeyi [21].



Şekil 2.2 Potansiyel enerji eğrisindeki maksimum ve minimum noktaların karakteristiği (Burada g gradyant, k kuvvet sabitidir.)

2.4. Çizgisel Olmayan Optik Özellikler

Organik metaryaller hızlı bilgi erişimi ve optiksel depolama uygulamaları için önemli metaryallerdir. Çizgisel olmayan organik metaryeller, içerisinde elektromanyetik dalgaların etkileşebildiği metaryallerdir [22]. Organik materyallerde optik özellikler, polarizebilite ile belirlenir. Bir atom veya molekülün polarizebilitesi, çekirdek ve elektronların kararlı durumlarından ne kadar kolayca yer değiştirebildiklerinin bir ölçüsüdür.

Bir atom veya molekülde kolaylıkla yer değiştiren elektronlar, çekirdekten en uzakta olan valans elektronlarıdır. Bu nedenle valans elektronlarının polarizebiliteye katkısı çok büyüktür. Bir molekül, dış bir E elektrik alanına konulduğunda, molekülde yeni bir yük düzenlenmesi meydana gelir ki bu molekülün dipol momenti μ_e nin

$$\mu_e = \mu_e(\xi = 0) + (1/2)\alpha\xi + (1/6)\beta\xi^2 + \dots \quad (2.33)$$

denklemine göre değişmesine neden olur [23-24]. Burada, $\mu_e(\xi = 0)$ elektrik alan bulunmadığı durumdaki molekülün dipol momentini, α dipol polarizebilitesini, β ikinci derece polarizebilite veya birinci derece hiperpolarizebiliteyi gösterir.

α (polarizebilite) özelliği bir ξ elektrik alanı etkisi altında moleküler elektronik dağılımla birleştirilen çizgisel optik özellik olarak düşünülürken; β ise çizgisel olmayan optik özellik olarak düşünülür. Sistemin toplam enerjisinin Taylor seri açılımı [24-25]

$$E = E(0) - \mu_i\xi_j - (1/2)\alpha_{ij}\xi_i\xi_j - (1/6)\beta_{ijk}\xi_i\xi_j\xi_k + \dots \quad (2.34)$$

şeklinindedir. Burada, $E(0)$ sistemin elektrik alan olmadığı durumdaki toplam enerjisidir. Alt indisler Kartezyen koordinatları belirtir ve çarpımlar bu kartezyen koordinatlar (x,y,z) üzerinden yapılır.

Zayıf elektrik alanlar için lineer α polarizebilite özelliği moleküler materyalleri karakterize eder. Büyük elektrik alanlar için çizgisel olmayan etkiler önemlidir ve materyaller β çizgisel olmayan optik özellikleriyle karakterize edilirler.

Yön değiştiren (osilasyon yapan) alanlar için (elektromanyetik radyasyon gibi) bu özellikler frekansa bağlıdır ve dinamik özellikler olarak bilinir. Frekansın sıfıra gitmesi limiti ($\lim_{\omega \rightarrow 0}$) durumunda, bu özellikler statik özellikler olarak bilinir.

Çizgisel olmayan optik özellikler hesaplanırken;

Polarizebilite için:

$$\alpha_{ort} = \frac{1}{3}(\alpha_{ii} + \alpha_{jj} + \alpha_{kk}) \quad (2.35)$$

Hiperpolarizebilite için:

$$\beta_{top} = \left[(\beta_{iii} + \beta_{ijj} + \beta_{ikk})^2 + (\beta_{jjj} + \beta_{jkk} + \beta_{jii})^2 + (\beta_{kkk} + \beta_{kii} + \beta_{kij})^2 \right]^{1/2} \quad (2.36)$$

ifadeleri kullanıldı.

2.5. Temel Setler

Bu kısımda, hesaplamalarda kullanılan atomik setler ile ilgili temel bilgiler verilecektir. Temel setler, atomik orbitallerin (AO) matematiksel olarak ifade edilmesidir. Bilinmeyen bir moleküler orbital (MO); moleküllerin atomlardan oluşması ve aynı cins atomların farklı cins moleküllerde benzer özellikler göstermeleri nedeniyle atomik orbitallerin çizgisel toplamları olarak yazılabilir. (Eş. 2.37) [26].

$$\psi_i = \sum_{\mu=1}^n c_{\mu i} \phi_{\mu} \quad (2.37)$$

Burada, ψ_i moleküler orbitali ϕ_{μ} atomik orbitalleri $c_{\mu i}$ ise moleküler orbital açılım katsayısını ifade eder. Fakat molekülleri oluşturan atomların, atomik orbitallerinde

büyüklik, şekil veya yük bakımından önemli değişiklikler olur. Bu da bazı tanımlamalar gerektirir. Bunun için, temel sete polarize ve difüz fonksiyonlar eklenerek genişletilmiş temel set tanımlanmıştır. Genişletilmiş temel setler, molekülün yüksek dereceden orbitallerini hesaba katarak moleküler yük dağılımındaki, komşu atomların etkileşmesinden kaynaklanan şekil ve boyut değişikliklerini tanımlar.

Atomlar birbirine yaklaştırıldığında diğer çekirdeklerin etkisiyle elektronik yoğunluk bozular. Yük dağılımının yeniden yapılanması, kutuplanma etkisine sebep olur. Bunu gidermek için eklenen temel fonksiyonlara polarize fonksiyonlar denir.

Uyarılmış ve iyonik moleküllerde elektron yoğunluğu, molekülün temel durumuna göre daha dağınıktır. Bu durumu matematiksel olarak modellemek için dağınık fonksiyonlar (difüze) kullanılır. Temel setlere eklenen bu fonksiyonlara difüze fonksiyonlar denir. Literatürde değişik şekillerde gösterilen veya program verilerinde bulundurulmuş çok sayıda temel set vardır.

$k-nlmG$ temel set split-valans tipi temel set olarak bilinir. Bu gösterimde k orbital veya iç kabuktaki elektronların kaç tane ilkel gaussian tipi fonksiyon ile temsil edildiğini gösterir. nlm ise hem valans orbitallerinin kaç yarıldığını hem de bunların kaç tane ilkel gaussian fonksiyonu ile temsil edildiğini gösterir. Eğer gösterimde sadece (nl) var ise ikili yarıma, (nlm) var ise üçlü yarıma dikkate alınır. Temel set gösteriminde G den önce difüze fonksiyonlar için $+$ veya $++$ gösterimi kullanılır. $+$ ağır atomlar için p -fonksiyonunu, $++$ ise Hidrojen atomu için s -fonksiyonunu tanımlar. Polarize fonksiyonları belirtmek için G den sonra parantez içinde ağır atomlar için d , df ve Hidrojen atomu için p , pd harfleri kullanılır.

Genelde atomik orbitali tam ifade edebilmek için çok sayıda temel fonksiyona ihtiyaç duyulur. Kullanılan temel fonksiyon sayısı arttıkça, orbital daha iyi tanımlanır. Bunun için molekül sisteminin elektriksel özellikleri (dipol moment, polarizebilite, vb.) hesaplanırken, temel setlere difüze ve polarize fonksiyonlar eklenerek doğruluğu artırılır. Örneğin $6-31+G(d)$, $6-31++G(d)$, $6-31++G(d, p)$ ve $6-311++G(d, p)$ vb.

Temel fonksiyon sayısı fazlaştıkça, daha fazla hesaplama süresi ve daha fazla bilgisayar hafızası gerekir. Bu nedenle, yapılacak bir hesaplamada amaçlanan sonuca uygun temel set seçilmelidir.

3. MATERYAL VE METOT

3.1. Metot

Bu çalışmada, 2-fenilfuran molekülü ve bu molekülden türetilen 2-(2-klorofenil)furan, 2-(2-florofenil)furan, 2-(4-klorofenil)furan ve 2-(4-florofenil)furan moleküllerinin giriş dosyaları Gauss View 03 paket programında oluşturulmuş, tüm hesaplamalar HF ve DFT/B3LYP metotlarında, 6-31++g(d,p) temel seti kullanılarak Gaussian 03W paket programında yapılmıştır [27-28]. Yapılan hesaplamalar sonucunda elde edilen yapısal parametre değerleri EK-1, EK-2, EK-3, EK-4 ve EK-5 'de verilmiştir.

Moleküllerin geometrik optimizasyonları, HF ve DFT/B3LYP metotlarında, hiçbir sınırlama konulmadan yapılmıştır. Geometrik optimizasyonları sonucu, moleküllerin denge durumlarına ait yapısal parametreleri, bağ uzunlukları (Å), bağ açıları (°), dihedral açıları (°), elektronik enerjileri (a.u.)^{*} ve dipol momentleri (Debye) elde edilmiştir.

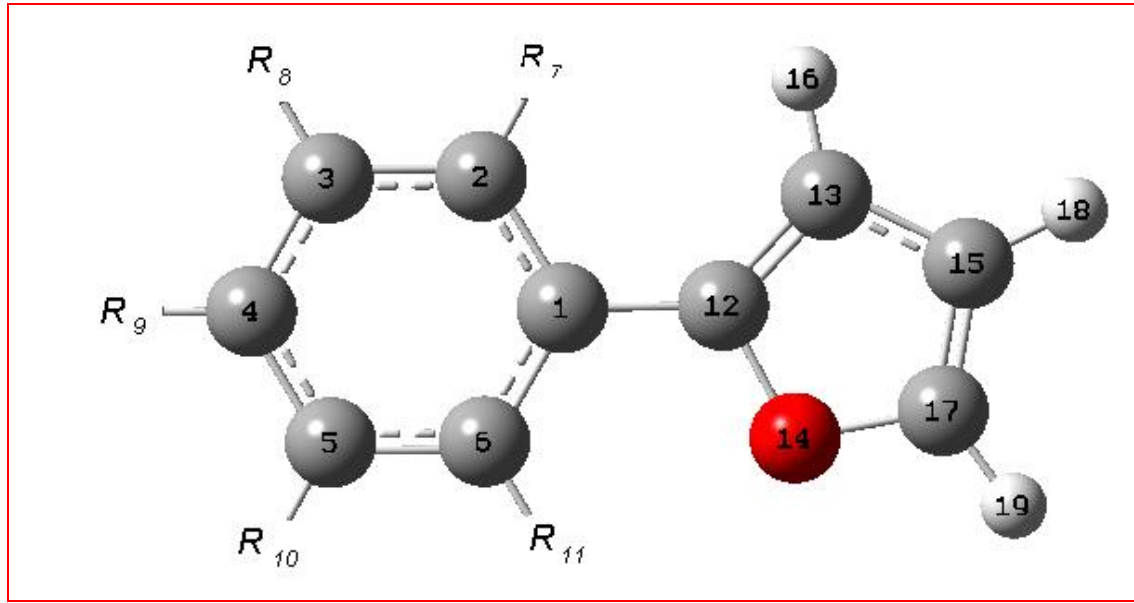
Moleküllerin, elektronik enerjileri, dipol momentleri, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri, bu molekülleri oluşturan Fenil ve Furan halkalarının arasındaki dihedral açı değişiminin bir fonksiyonu olarak hesaplanmıştır.

Moleküler özelliklerin sonuçları, grafiksel hale getirilmiş ve molekül üzerindeki flor ve klor atomlarının konumuna göre değişimleri yorumlanmıştır.

* a.u.=627,51530 kcal/mol

3.2. Materyal

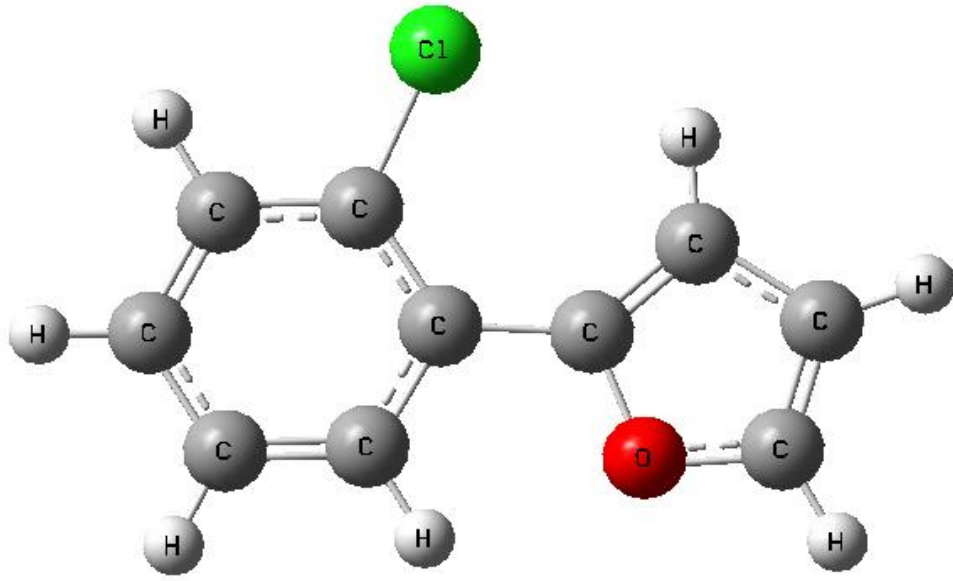
Bu çalışmada incelenen moleküllerin adlandırılmasında kullanılan sistematik, Şekil 3.1'de, kimyasal ve geometrik yapı konfigürasyonları, Şekil 3.2, Şekil 3.3, Şekil 3.4 Şekil 3.5'de ve adlandırılmaları, çizelge 3.1'de verilmiştir.



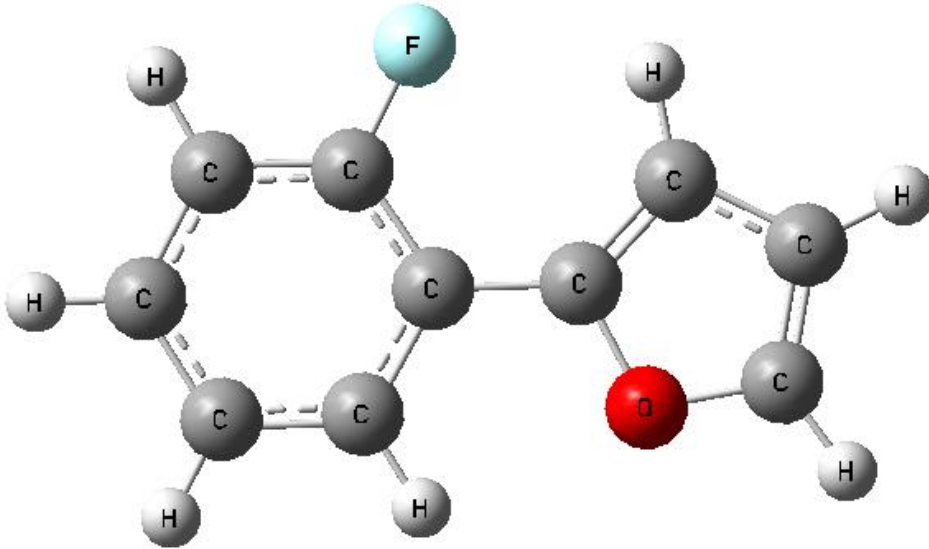
Şekil 3.1 2-fenilfuran molekülü, klorlu ve florlu türevlerinin adlandırılmasında kullanılan kimyasal ve geometrik yapı konfigürasyonu

Çizelge 3. 1 2-fenilfuran molekülü, klorlu ve florlu türevlerinin adlandırılması

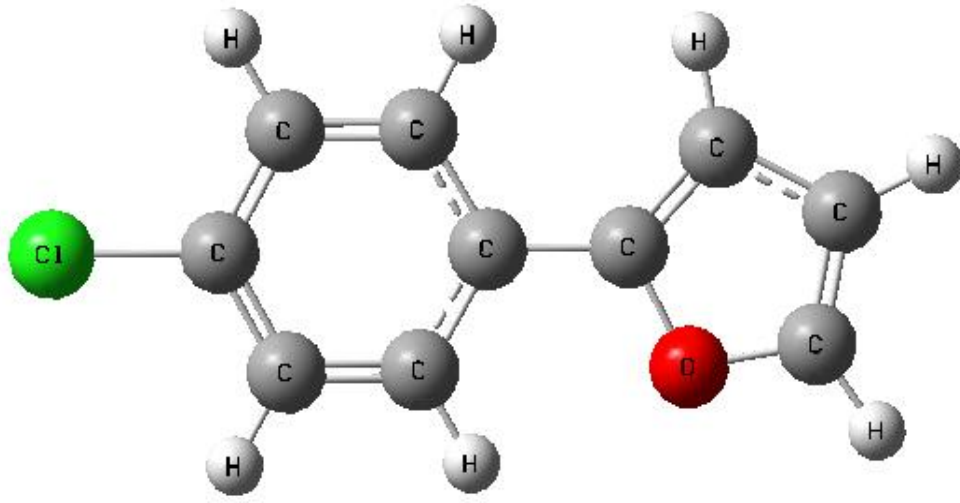
MOLEKÜL	R				
	R7	R8	R9	R10	R11
2-fenilfuran	H	H	H	H	H
2-(2-klorofenil)furan	Cl	H	H	H	H
2-(2-florofenil)furan	F	H	H	H	H
2-(4-klorofenil)furan	H	H	Cl	H	H
2-(4-florofenil)furan	H	H	F	H	H



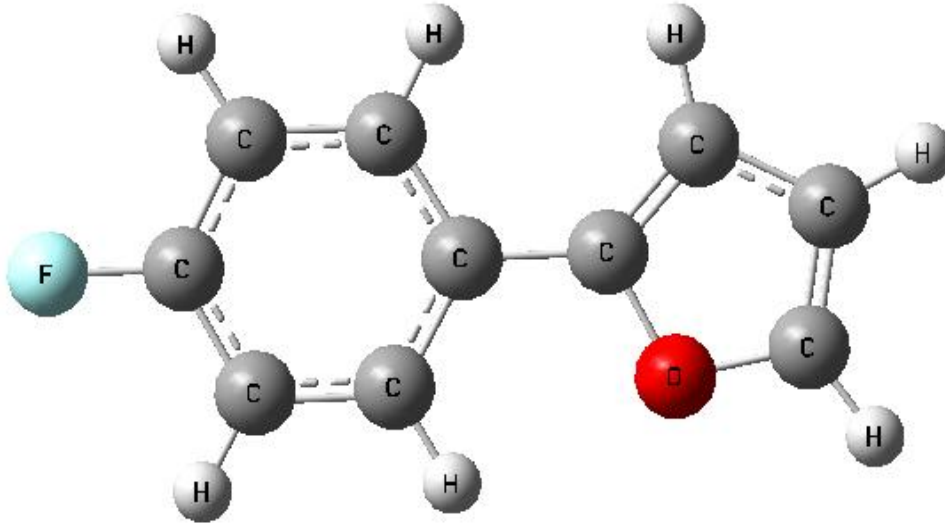
Şekil 3.2 2-(2-klorofenil)furan molekülü konfigurasyonu



Şekil 3.3 2-(2-florofenil)furan molekülü konfigurasyonu



Şekil 3.4 2-(4-klorofenil)furan molekülü konfigurasyonu



Şekil 3.5 2-(4-florofenil)furan molekülü konfigurasyonu

4. HESAPLAMA SONUÇLARI

Bölüm 3 de belirtilen metot ve yöntemler kullanılarak, üzerinde çalıştığımız moleküllere ait yapısal parametreler, dipol moment, elektronik enerji, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri hesaplanmıştır.

4.1. Yapısal Parametreler

Molekülü oluşturan fenil ve furan halkaları üzerinde bulunan π -elektronları etkileşimi, halkaları düzlemsel tutma eğilimindedir [29]. Halkalar üzerinde orto pozisyonunda bulunan atomların sterik etkileşimleri ise halkaları düzlemsellikten ayırma eğilimindedir. Molekül geometrisinde önemli bir faktör olan denge dihedral açısı, bu iki etkileşim sonucu oluşmaktadır ve moleküllerin birçok fiziksel özelliklerini etkilemektedir [30]. Bizim üzerinde çalıştığımız moleküllerde denge dihedral açısı, fenil halkası düzlemi ile furan halkası düzlemi arasındaki açıdır.

Çizelge 3.1 de belirtilen moleküllerin geometrik optimizasyonları, hiçbir sınırlama yapılmadan HF/6-31++G(d,p) ve DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modelleri kullanılarak hesaplanmıştır. Molekülün denge durumuna ait yapısal parametreler (bağ uzunlukları, bağ açıları ve dihedral açılar) EK-1, EK-2, EK-3, EK-4 ve EK-5’de verilmiştir.

2-fenilfuran için (C1-C12), 2-(2-klorofenil)furan için (C1-C11), 2-(2-florofenil)furan için (C1-C12), 2-(4-klorofenil)furan için (C1-C10), 2-(4-florofenil)furan için (C1-C11) merkez karbon atomları arasındaki bağ uzunlukları hariç, moleküllerdeki diğer bütün bağ uzunluklarını, DFT/B3LYP modelinin HF modeline göre, ortalama 0,01 Å daha büyük hesapladığı görülmüştür. Merkez karbon atomları arasındaki bağ uzunluklarını ise DFT/B3LYP modelinin HF modeline göre ortalama 0,009 Å daha küçük hesapladığı görülmüştür. Bu durum literatürde üzerinde çalışılan farklı moleküllerin geometrik optimizasyonlarında da görülmüştür [31-32].

DFT/B3LYP modelindeki hesaplamalarda bağ uzunluğunun, HF modeline göre büyük olması beklenen durum olup, bunun nedeni; HF modelinin elektron korelasyon enerjisini hesaba katmamasıdır. Merkez karbon atomları arasındaki bağ uzunlukların

tam tersi çıkmasının nedeni ise; halkalar üzerinde bulunan π -elektronlarının etkileşimidir [31].

HF ve DFT/B3LYP modelleri ile hesaplanan denge durumu dihedral açıları, elektronik enerjileri ve denge durumu dipol moment değerleri çizelge 4.1 de, denge durumu polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri çizelge 4.2 de verilmiştir.

Çizelge 4. 1 Denge durumları dihedral açıları, dipol moment ve elektronik enerji değerleri

MOLEKÜLÜN ADI	HF 6-31++ G(d,p)			DFT/B3LYP 6-31++G(d,p)		
	DİHEDRAL AÇI (derece)	DİPOL MOMENT (Debye)	ELEKTRONİK ENERJİ (a.u)	DİHEDRAL AÇI (derece)	DİPOL MOMENT (Debye)	ELEKTRONİK ENERJİ (a.u)
2-FENİLFURAN	0	0,6061	-458,210434	0	0,6483	-461,115548
2-(2-KLOROFENİL)FURAN	27,3	1,3074	-917,10141	8,06	1,0895	-920,705003
2-(2-FLOROFENİL)FURAN	0	0,9181	-557,063267	0	0,8122	-560,35539
2-(4-KLOROFENİL)FURAN	0	2,499	-917,107588	0	2,4554	-920,709883
2-(4-FLOROFENİL)FURAN	0	2,1133	-557,063691	0	2,1776	-560,355668

2-fenilfuran molekülünün yapısal parametreleri üzerinde, klor ve flor atomlarının konumlarının etkili olduğu hesaplama sonuçlarından görülmektedir. Fenilfuran molekülünün fenil halkasındaki orto ve para pozisyonunda bulunan Hidrojen Atomu yerine, Klor ve Flor atomlarının sırasıyla bağlanmasıyla oluşturulan türev moleküllerden 2-(2-klorofenil)furan molekülü orto pozisyonunda bulunan klor atomu etkisiyle, fenil ve furan halkaları arasındaki denge dihedral açısı, ilk duruma göre değişmiştir. Diğer türev moleküllerde ise ilk duruma göre denge dihedral açılarında değişiklik görülmemiştir.

Literatürde bu moleküllerden yalnız 2-fenilfuran molekülünün denge durumu teorik yapı parametreleri bulunmakta olup, R. Abu-Eittah, R Hilal ve M.M Hamed tarafından gerçekleştirilen çalışmada, 2-fenilfuran molekülünün denge durum dihedral açısının 0°

olduđu grlmřtr [16]. Bizim alıřmalarımızda da HF/6-31++G(d,p) modeliyle 0°, DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeliyle 0° bulunmuřtur. Her iki hesaplama sonucunda elde edilen denge durumu dihedral aılarının, yapılan teorik alıřmalarla uyum iinde olduđu grlmektedir.

2-(2-klorofenil)fulan moleklnn dipol moment deđerinin, ilk duruma gre, arttıđı grlmřtr. 2-(2-florofenil)fulan moleklnn dipol moment deđerinin 2-fenilfulan ve 2-(2-klorofenil)fulan molekllerine ait dipol moment deđerleri arasında olduđu grlmřtr. 2-(4-klorofenil)fulan moleklnn dipol moment deđerinin, diđer molekllerin dipol moment deđerlerinden daha byk olduđu grlmřtr. 2-(4-florofenil)fulan moleklnn dipol moment deđerinin, 2-(4-klorofenil)fulan moleklnn dipol moment deđerinden kk ve diđer molekllerin dipol moment deđerlerinden byk olduđu grlmřtr.

Trev molekllerin elektronik enerjilerinde ilk duruma gre artıřlar grlmřtr. Bunun en nemli nedeni, Hidrojen atomu yerine, daha fazla enerjiye sahip klor ve flor atomlarının bađlı olmasıdır. Klorlu molekln enerjisi, floru molekln enerjisinden daha fazla olup, enerji deđerinin, klor ve flor atomlarının orto veya para konumunda bulunmalarından fazla etkilenmediđi grlmřtr. Molekllerin enerjilerinde klor ve flor atomlarının konumlarının fazla etkili olmadıđı, klor ve flor atomlarının cinslerinin daha etkili olduđu grlmřtr.

Çizelge 4. 2 Denge durumları polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri

MOLEKÜLÜN ADI	HF 6-31++ G(d,p)		DFT/B3LYP 6-31++G(d,p)	
	POLARİZEBİLİTE (a.u)	HİPER POLARİZEBİLİTE (a.u)	POLARİZEBİLİTE (a.u)	HİPER POLARİZEBİLİTE (a.u)
2-FENİLFURAN	112,9	333,6	125,1	653,9
2-(2-KLOROFENİL)FURAN	123,1	359,9	137,2	782,7
2-(2-FLOROFENİL)FURAN	112,4	461,1	125,4	833,7
2-(4-KLOROFENİL)FURAN	125,6	70,8	141,2	140,5
2-(4-FLOROFENİL)FURAN	111,2	86,1	124,6	44,5

Türev moleküllerin polarizebilite değerlerinde, klor ve flor atomlarının pozisyonlarının fazla etkili olmadığı ve klor atomunun polarizebiliteye etkisinin flor atomunun etkisinden daha fazla olduğu görülmüştür.

Türev moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin, klor ve flor atomlarının orto pozisyonundaki durumlarında en yüksek değerlerini aldıkları, para pozisyonundaki durumlarında ise en küçük değerlerini aldıkları görülmüştür.

4.2. Bağlı Enerji ve Torsiyon Potansiyeli

Moleküllerin enerjileri, molekülün yapısını karakterize eden değişik parametrelerin karışık bir fonksiyonu olarak ifade edilebilir. Moleküllerin enerjilerinin minimum olduğu durumlarda, molekül fiziksel olarak denge durumuna geldiğinden, molekülün enerji fonksiyonunun minimum değerleri bu parametrelerle ifade edilmelidir. Moleküllerin denge durumunda molekül içi etkileşmeler ve moleküller arası etkileşmeler oldukça etkilidir.

Günümüzde belli yaklaşımlar kullanılarak bu istenilen çözümlere bilgisayar sistemlerinde ulaşılabilmektedir. Molekül sel sistemlerde, σ -bağı etrafında grupların

dönmesinden meydana gelen geçici molekül şekline, molekülün konformasyonları, grupların σ -bağı etrafında dönmeleri sonucu molekülün uğradığı enerji değişiminin analizine de konformasyon analizi denir [33].

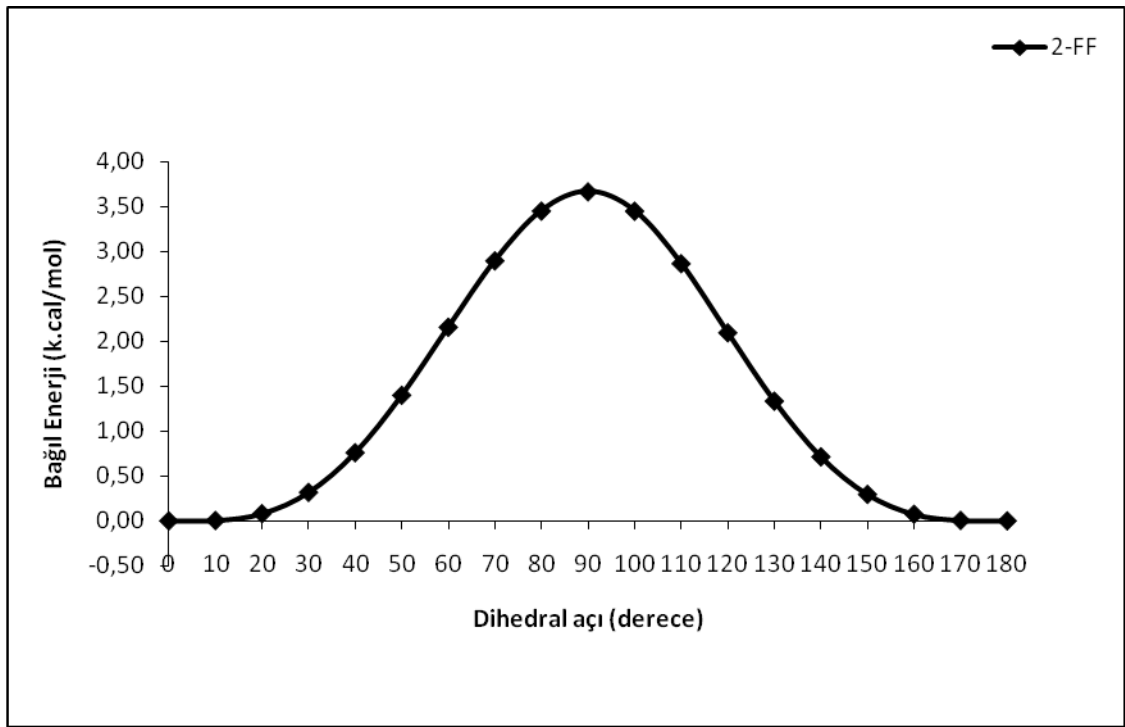
Bu çalışmada HF ve DFT/B3LYP modelleri kullanılarak moleküllerin iç enerjileri, Fenil ve Furan halkaları arasındaki dihedral açının fonksiyonu olarak hesaplanmıştır. Halkalar arasındaki dihedral açı 0° den 180° ye kadar 10° lik arttımlarla değiştirilerek, her arttıma karşılık gelen enerji değerleri hesaplanmış ve tüm moleküller için bu arttımlara karşılık gelen en küçük enerji değerleri sıfır kabul edilerek moleküllerin bağıl enerjileri hesaplanmıştır. Klor ve flor atomlarının bağıl enerji üzerine etkileri incelenmiştir. Bu bağıl enerjilerin dihedral açığa göre değişim grafikleri HF modeli için Şekil 4.1, Şekil 4.2, Şekil 4.3, Şekil 4.4 ve Şekil 4.5 de, DFT/B3LYP modeli için Şekil 4.6, Şekil 4.7, Şekil 4.8, Şekil 4.9 ve Şekil 4.10 da verilmiştir.

Moleküllerde, 0° deki bariyer yüksekliği (ΔE_0), ortogonal (90°) durumdaki bariyer yüksekliği (ΔE_{90}) ve 180° deki bariyer yüksekliği (ΔE_{180}) değerleri hesaplanmış ve çizelge 4.3 de verilmiştir. Denge durumunda düzlemsel durumda bulunan moleküllerin 0° deki enerjisi aynı zamanda molekülün denge durum enerjisi olduğundan 0° deki bariyer yüksekliği (ΔE_0), daima sıfır olmaktadır.

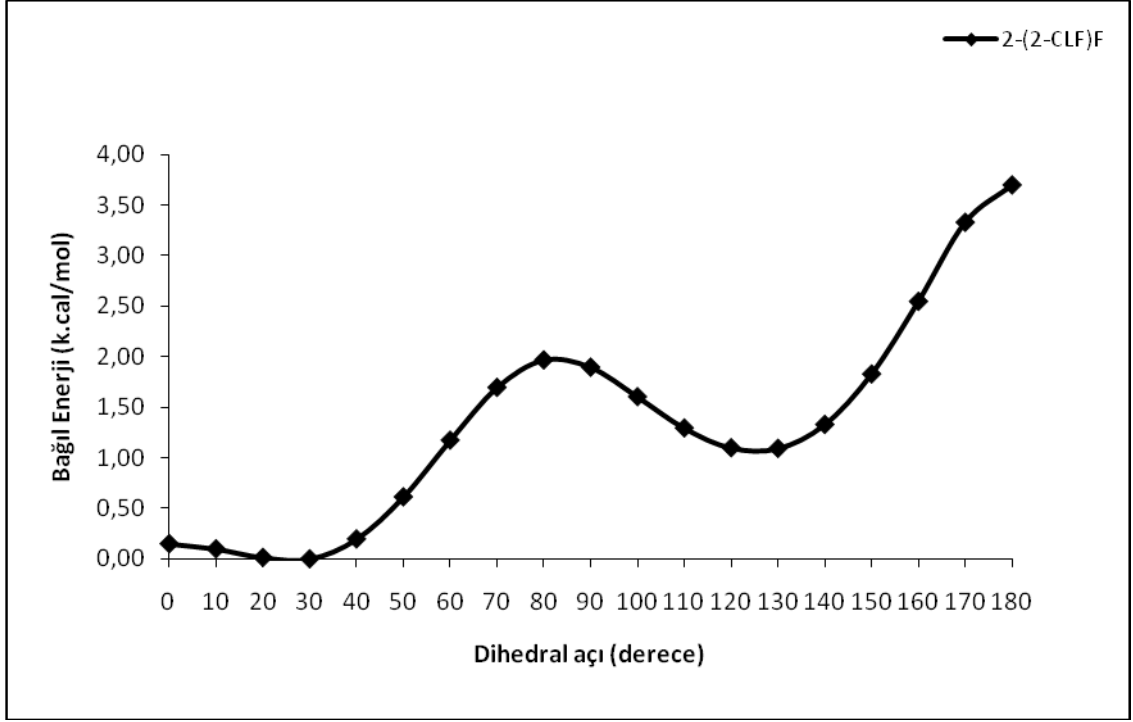
Çizelge 4. 3 Moleküllerin hesaplanan torsiyon bariyer yükseklikleri

MOLEKÜLÜN ADI	HF 6-31++ G(d,p)			DFT/B3LYP 6-31++G(d,p)		
	ΔE_0 (k.cal/mol)	ΔE_{90} (k.cal/mol)	ΔE_{180} (k.cal/mol)	ΔE_0 (k.cal/mol)	ΔE_{90} (k.cal/mol)	ΔE_{180} (k.cal/mol)
2-FENİLFURAN	0	3,66	0	0	4,67	0
2-(2-KLOROFENİL)FURAN	0,17	1,91	3,71	0,002	3,3	3,07
2-(2-FLOROFENİL)FURAN	0	4,2	3,77	0	5,31	3,66
2-(4-KLOROFENİL)FURAN	0	3,72	0	0	4,76	0
2-(4-FLOROFENİL)FURAN	0	3,36	0	0	4,4	0

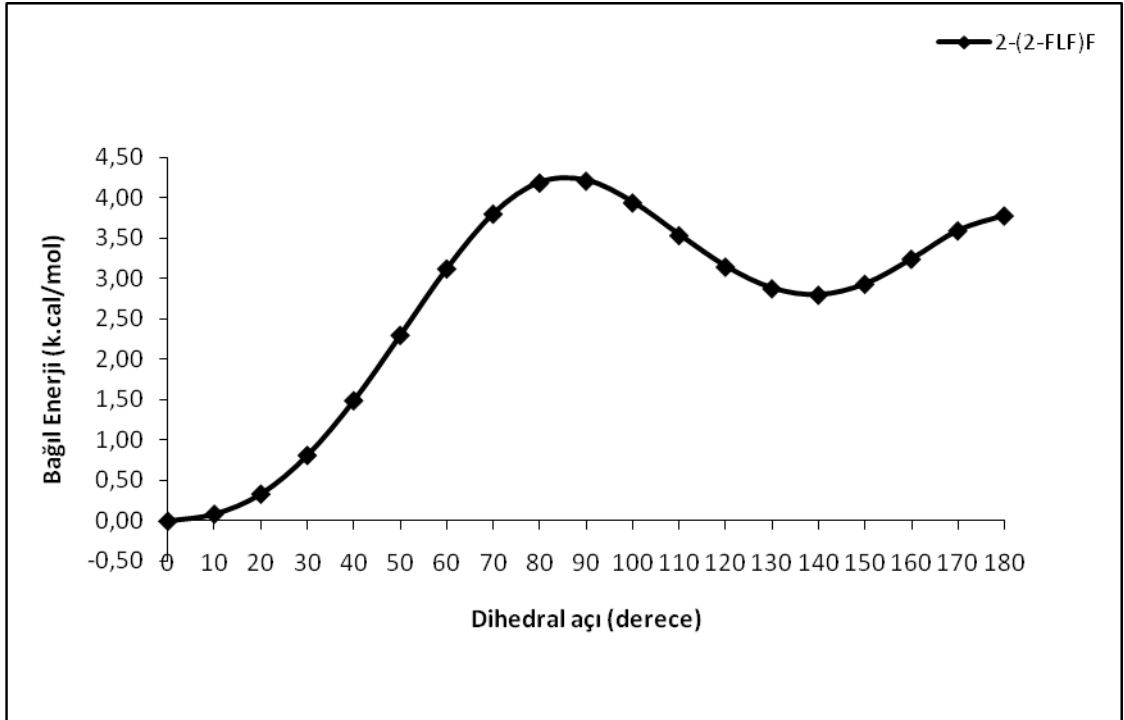
W.M.F Fabian, 1981 yılında yaptığı çalışmada, 2- fenilfuran'a ait denge durum dihedral açısını 0 derece bulmuştur. Yine bu çalışmada, 0 derece ve 90 derece arasındaki enerji farkı 10,25 k.joule/mol bulunmuştur [17]. 2007 yılında yaptığı diğer bir çalışmada, 2- fenilfuran'a ait denge durum dihedral açısını 0,33 derece bulmuştur. Yine bu çalışmada 0 derece ve 90 derece arasındaki enerji farkı 15,47 k.joule/mol bulunmuştur [34]. Literatürdeki bu sonuçlarla, bizim hesaplama sonuçlarımız birbirini desteklemektedir.(3,66 k.cal/mol=15,3 k.joule/mol)



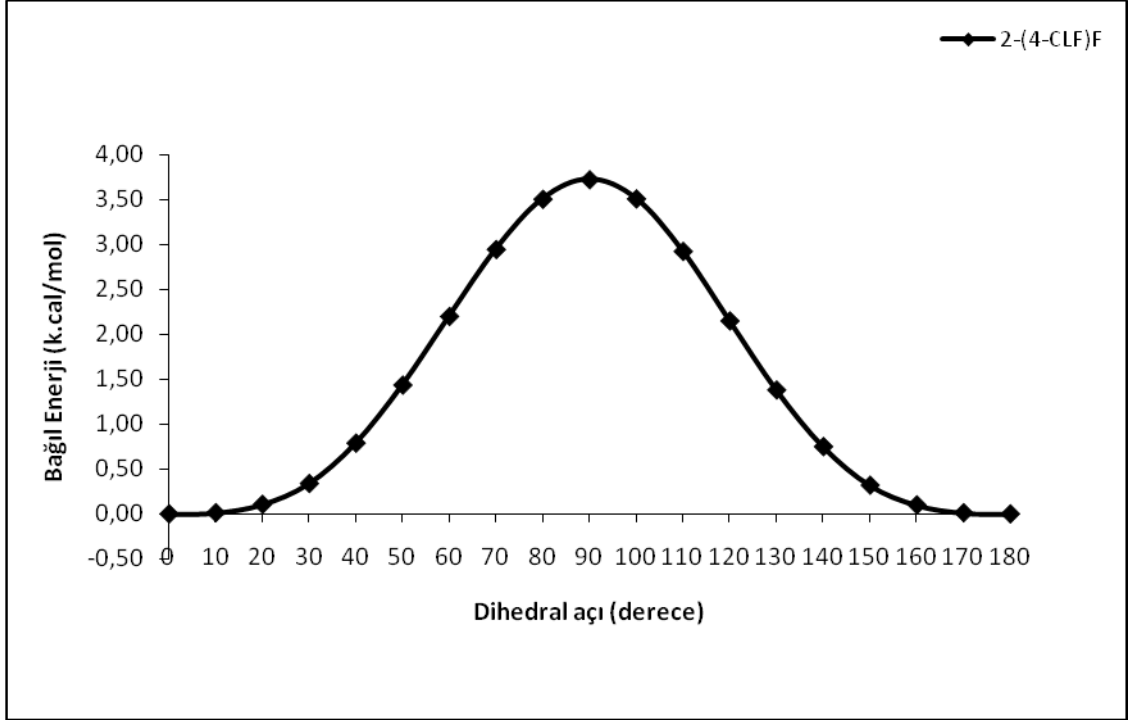
Şekil 4.1 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



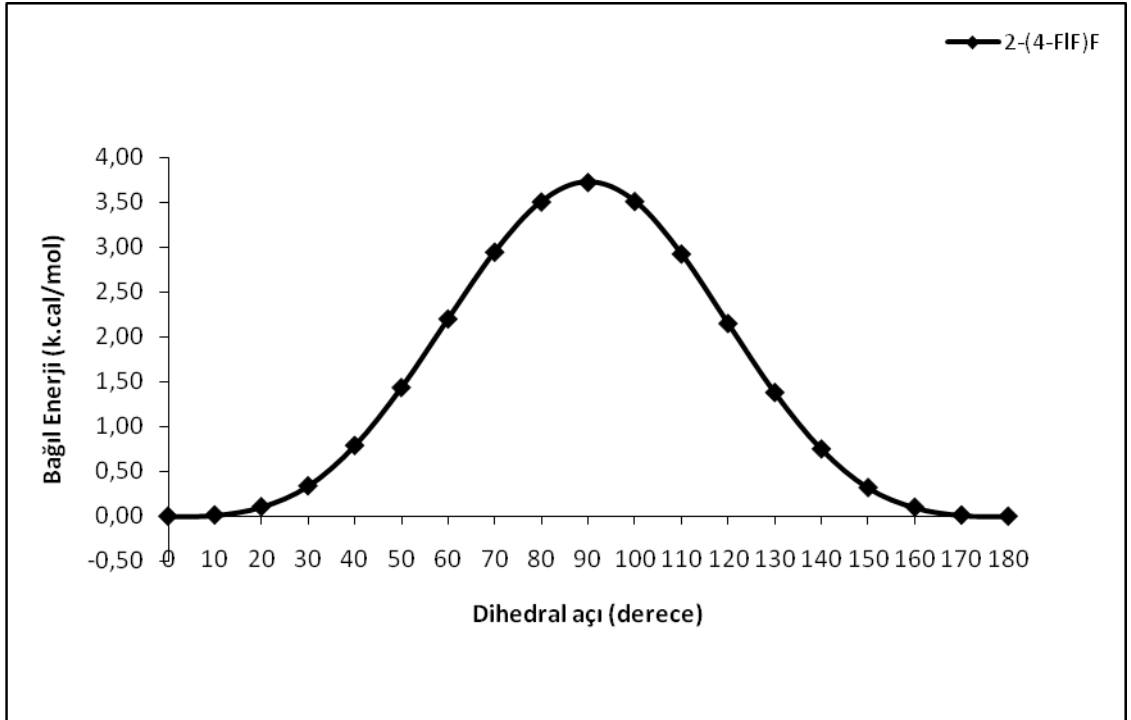
Şekil 4.2 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-klorofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



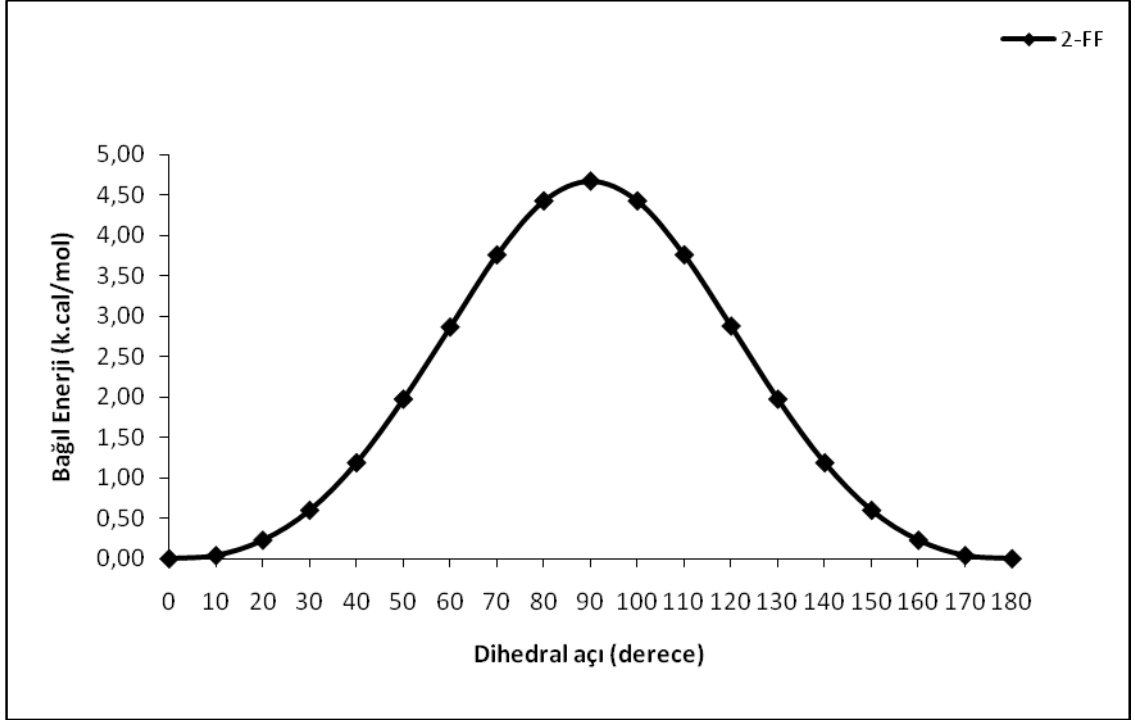
Şekil 4.3 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-florofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.4 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-klorofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



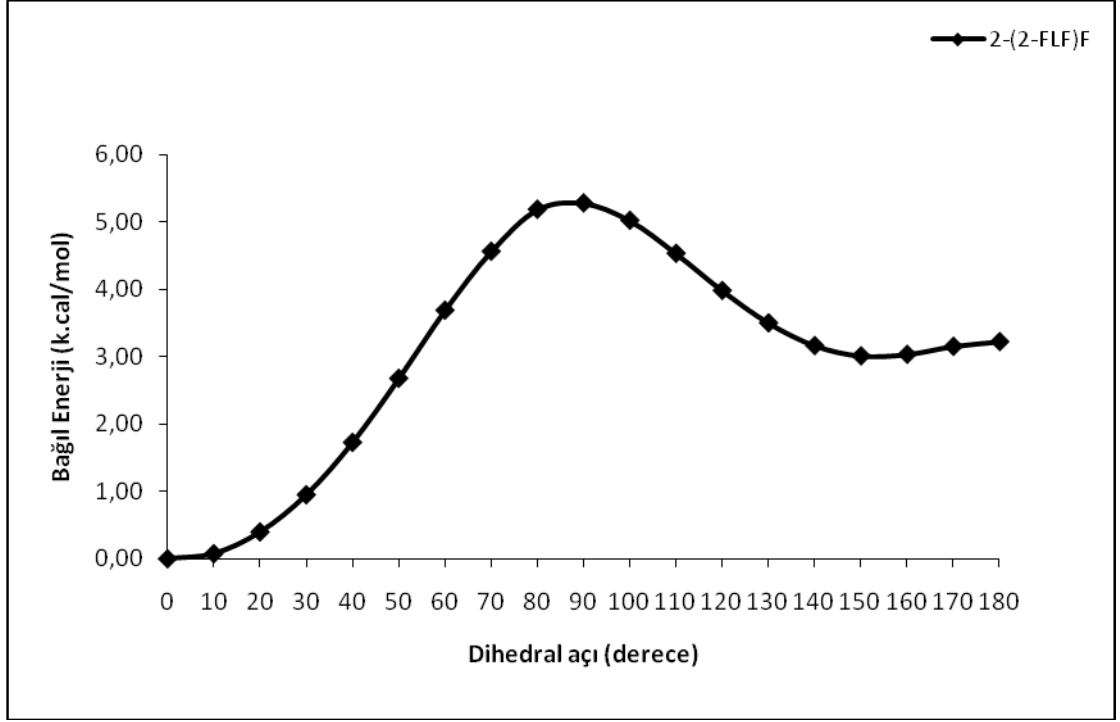
Şekil 4.5 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-florofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



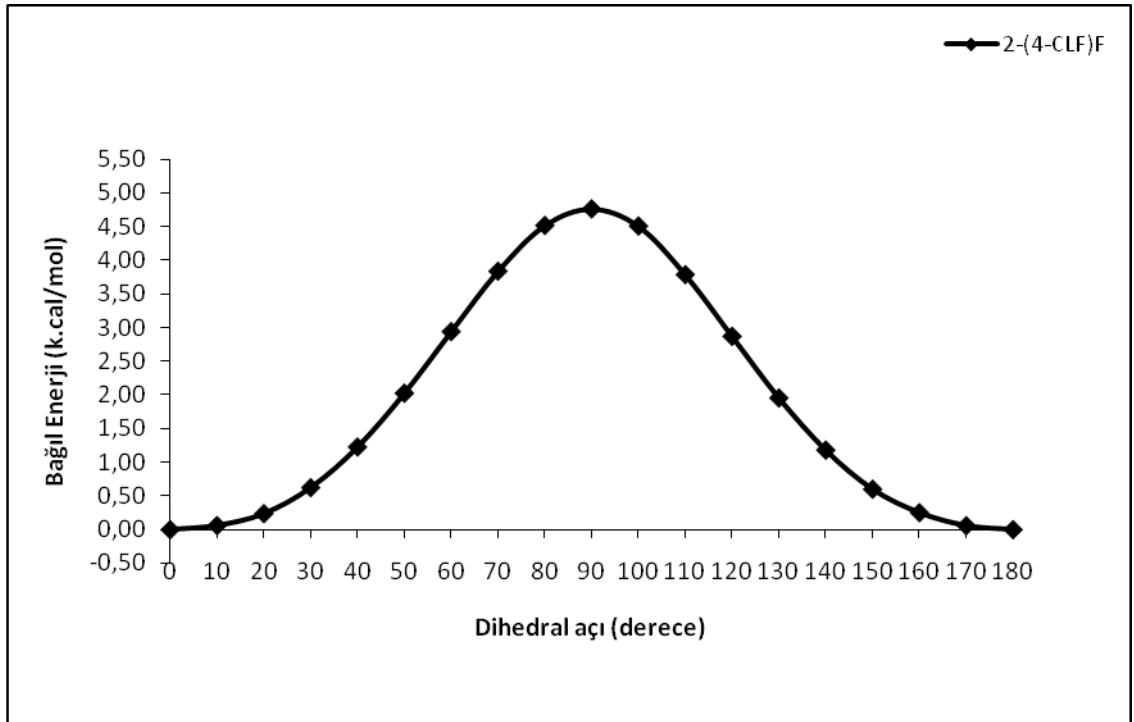
Şekil 4.6 DFT/B3LYP/6-31++ G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



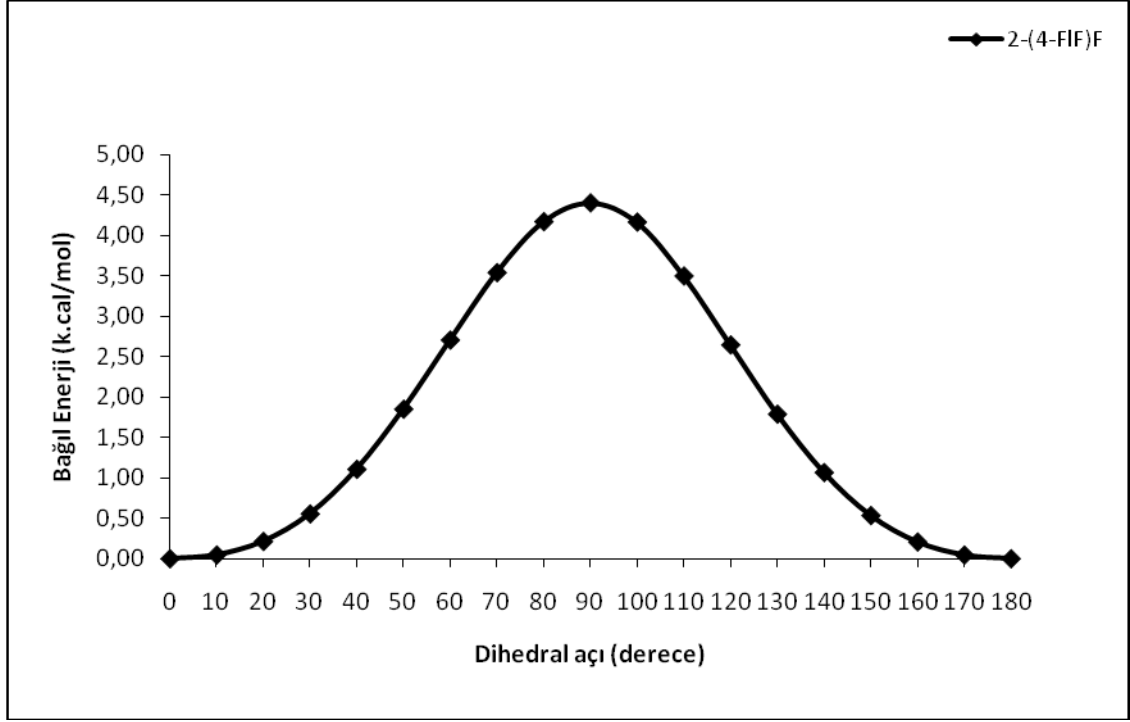
Şekil 4.7 DFT/B3LYP/6-31++ G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-klorofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.8 DFT/B3LYP/6-31++ G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-florofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.9 DFT/B3LYP/6-31++ G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-klorofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.10 DFT/B3LYP/6-31++ G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-florofenil)furan molekülünün bağıl enerjisinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi

Dihedral açının fonksiyonu olarak moleküllere ait bariyer yükseklikleri incelendiğinde, her iki model ile yapılan hesaplamalarda bariyer yükseklik grafiklerinin benzer davranışlar gösterdikleri, ancak HF modelinin DFT/B3LYP modeline göre bariyer yüksekliklerini daha küçük hesapladığı görülmüştür. Düzlemsel moleküllerin, 0° deki bariyer yüksekliklerinin sıfır olduğu, ortogonal durumdaki (90°) bariyer yüksekliğinin ise maksimum olduğu görülmüştür. 180° deki bariyer yüksekliğinde, klor ve flor atomlarının konumlarının çok etkili oldukları görülmüştür. Moleküllerin bariyer yükseklikleriyle ilgili daha önceki çalışmalarda da bu durumlar görülmüştür [35].

Para pozisyonunda bulunan Klor ve Flor atomlarının, moleküllerin bariyer yüksekliği üzerinde etkileri az olmasına rağmen, orto pozisyonundaki Flor atomu molekülün tüm açı değerlerinde bariyer yüksekliğini arttırdığı görülmüştür. Orto pozisyonundaki Klor atomunun ise 180° ye yakın durumlar hariç, bariyer yüksekliklerini azalttığı görülmüştür. Orto pozisyonundaki Flor ve Klor atomlarının 180° deki bariyer yüksekliğini arttırması, bu atomların bu durumda Furan halkasındaki Oksijen

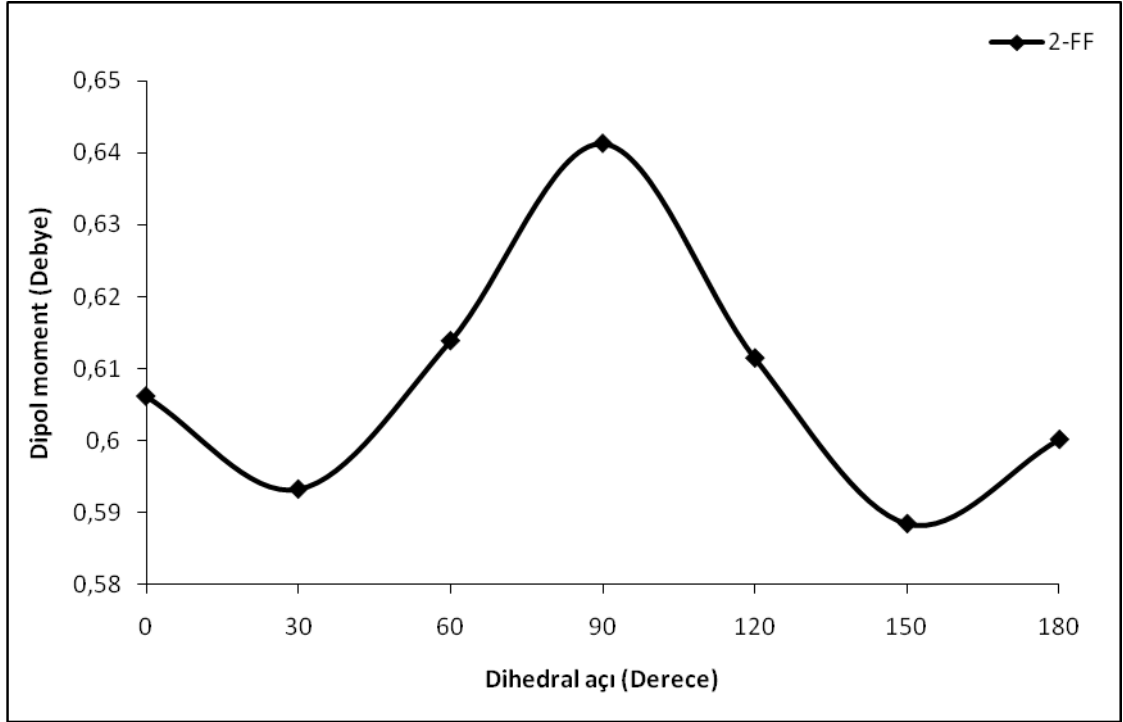
atomuyla aynı tarafta ve yakın durumda bulunmalarından oluşan sterik etkiler olarak yorumlanmıştır.

4.3. İndüklenmiş Dipol Moment

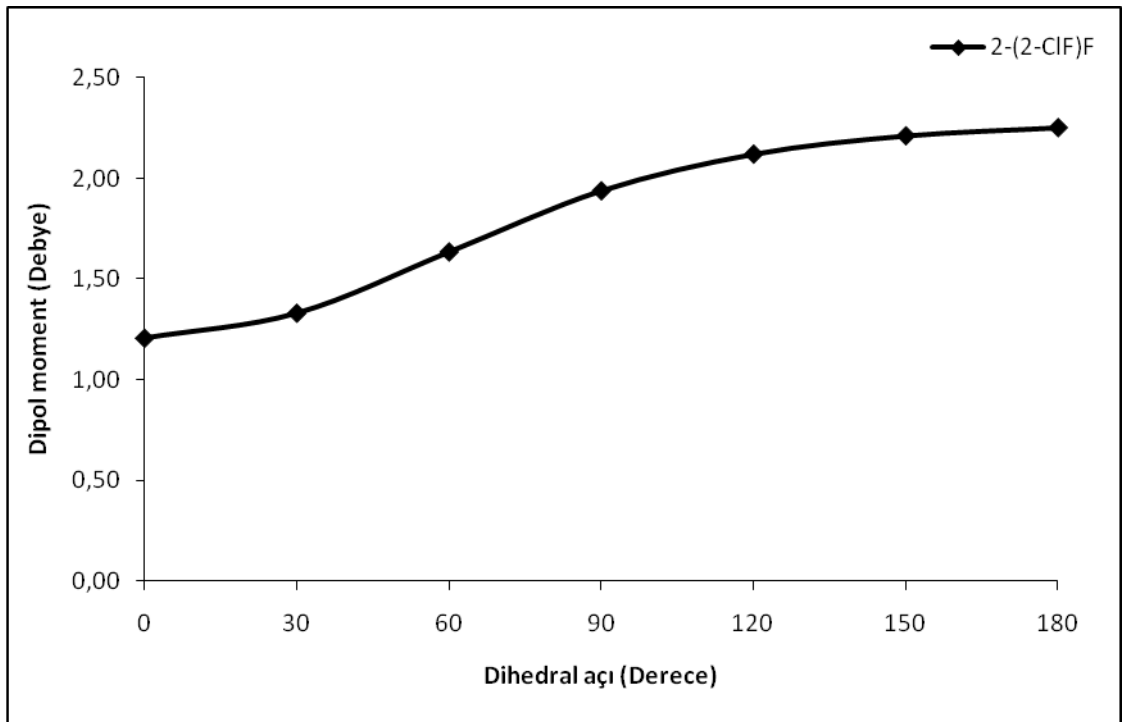
Moleküler sistemlerde dipol moment, moleküldeki bireysel dipol momentlerin vektörel toplamına eşittir. Elektronegatiflikleri farklı atomların kovalent bağ yaparken ortaklaşa kullandıkları elektronlara bağ elektronları denir. Bu bağ elektronlarını, elektronegatifliği büyük olan atom kendine daha fazla çeker. Bu yüzden; elektronegatifliği büyük olan atoma yakın bölgede kısmî negatif yük (δ^-), elektronegatifliği küçük olan atoma yakın bölgede kısmî pozitif yük (δ^+) oluşarak bağda polarlaşma meydana gelir. Hidrojen ve karbon atomlarının yaptıkları kovalent bağlar daha az polar olurlar ve bundan dolayı, moleküllerin dipol momentleri üzerinde klor ve flor atomunun etkisi daha baskındır. Bu etki Liu ve arkadaşlarının Florlu phenylbisiklohexzan molekülü ile yaptıkları çalışmada verilmiştir [36].

Bu çalışmada, HF ve DFT/B3LYP modelleri kullanılarak moleküllerin Fenil ve Furan halkaları arasındaki dihedral açı değeri 0° den 180° ye kadar 30° lik arttırmalarla değiştirilerek, her arttırmaya karşılık gelen dipol moment değerleri hesaplanmış ve dipol moment değerleri dihedral açının fonksiyonu olarak elde edilmiştir. Klor ve flor atomlarının dipol moment üzerine etkileri incelenmiştir.

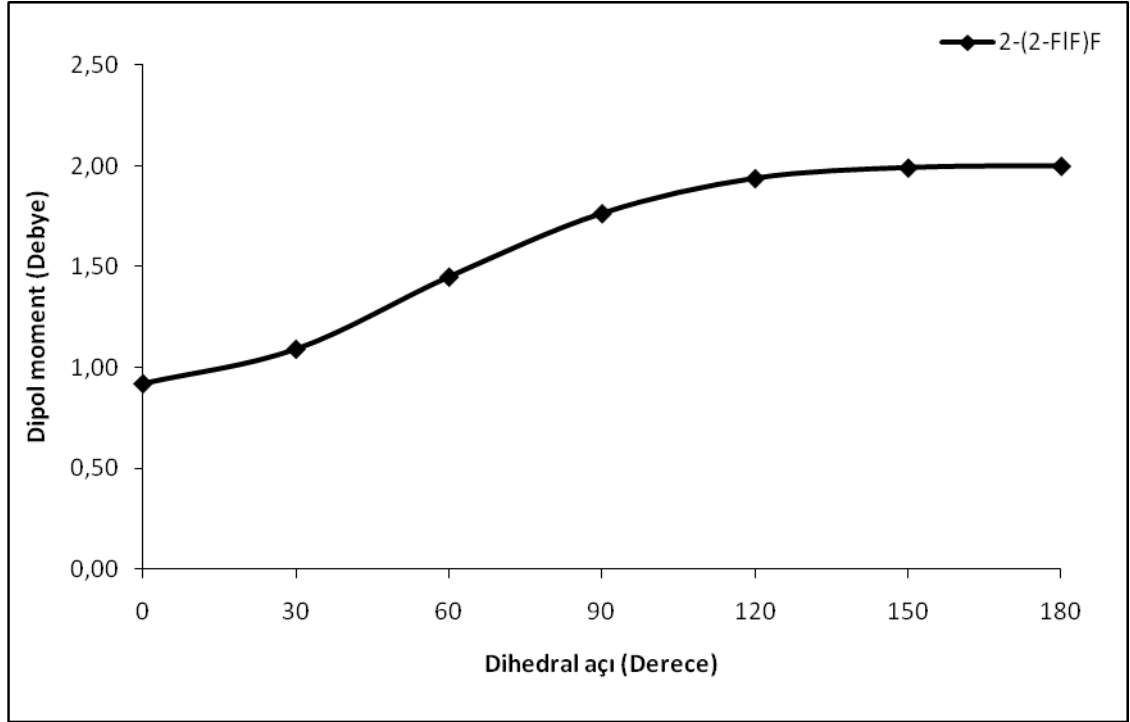
2-fenilfuran, 2-(2-klorofenil)furan, 2-(2-florofenil)furan, 2-(4-klorofenil)furan, 2-(4-florofenil)furan moleküllerinin dipol moment değerinin dihedral açıya bağlı olarak değişiminin, her iki hesaplama modelinde de aynı eğilimde olduğu görülmüştür. Bu dipol moment değerlerinin dihedral açıya göre değişim grafikleri, HF modeli için Şekil 4.11, Şekil 4.12, Şekil 4.13, Şekil 4.14 ve Şekil 4.15 de, DFT/B3LYP modeli için Şekil 4.16, Şekil 4.17, Şekil 4.18, Şekil 4.19 ve Şekil 4.20 de verilmiştir.



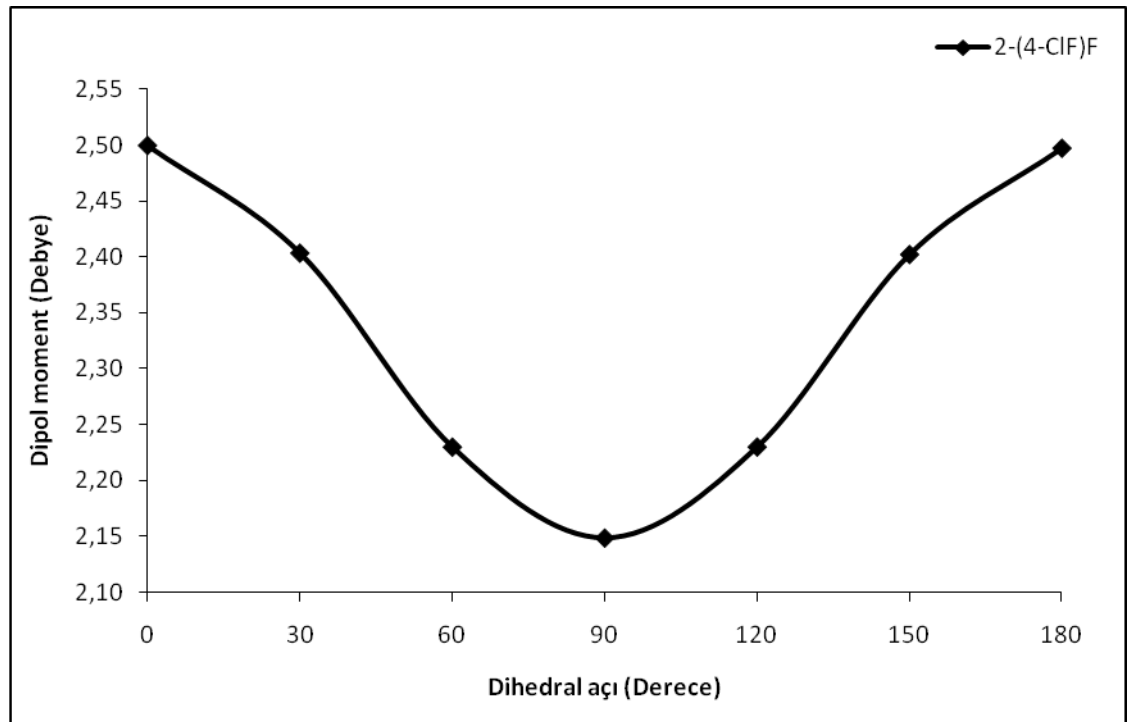
Şekil 4.11 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



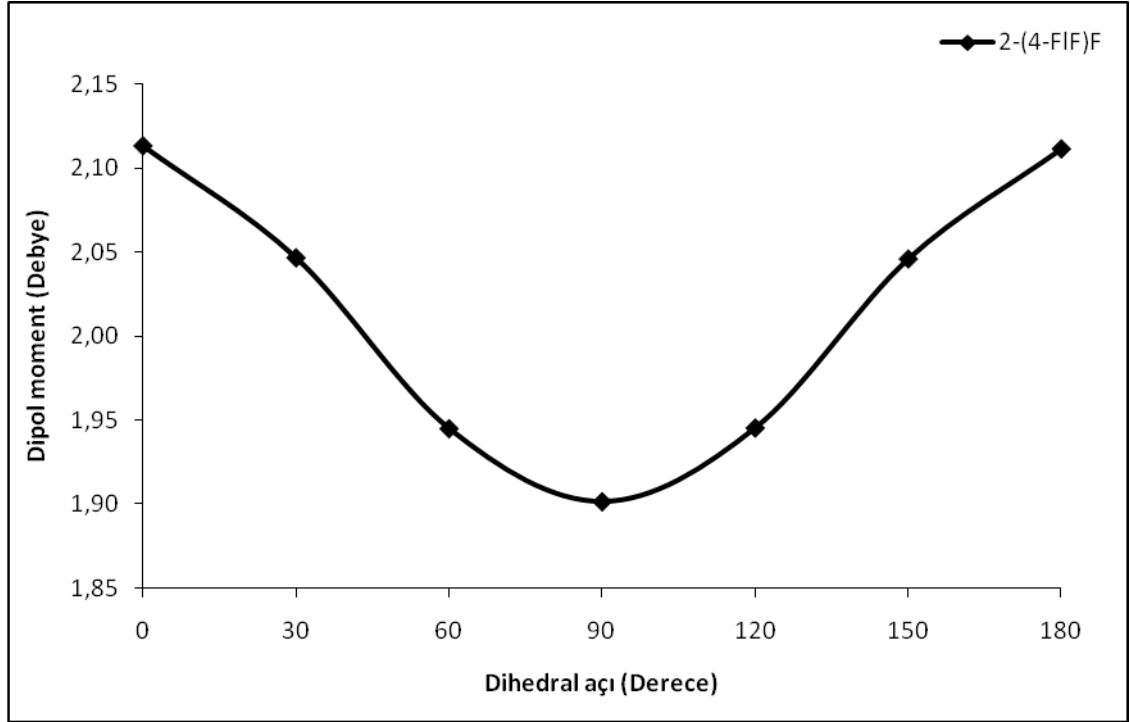
Şekil 4.12 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-klorofenil)furan molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



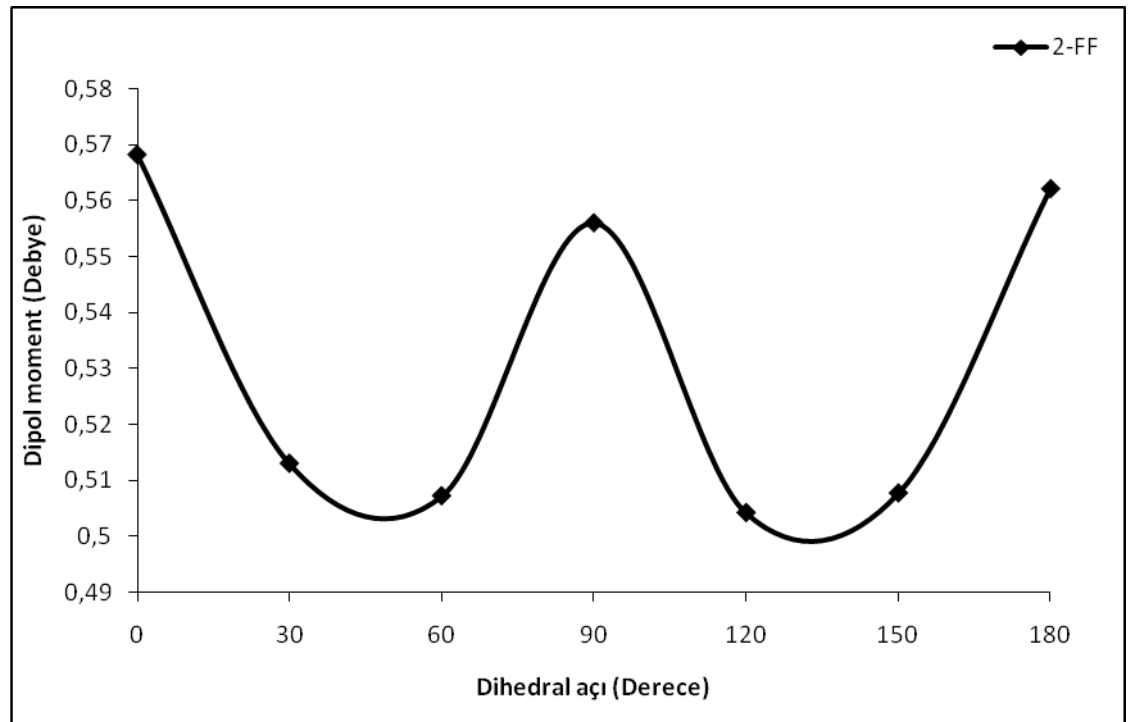
Şekil 4.13 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-florofenil)furan molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



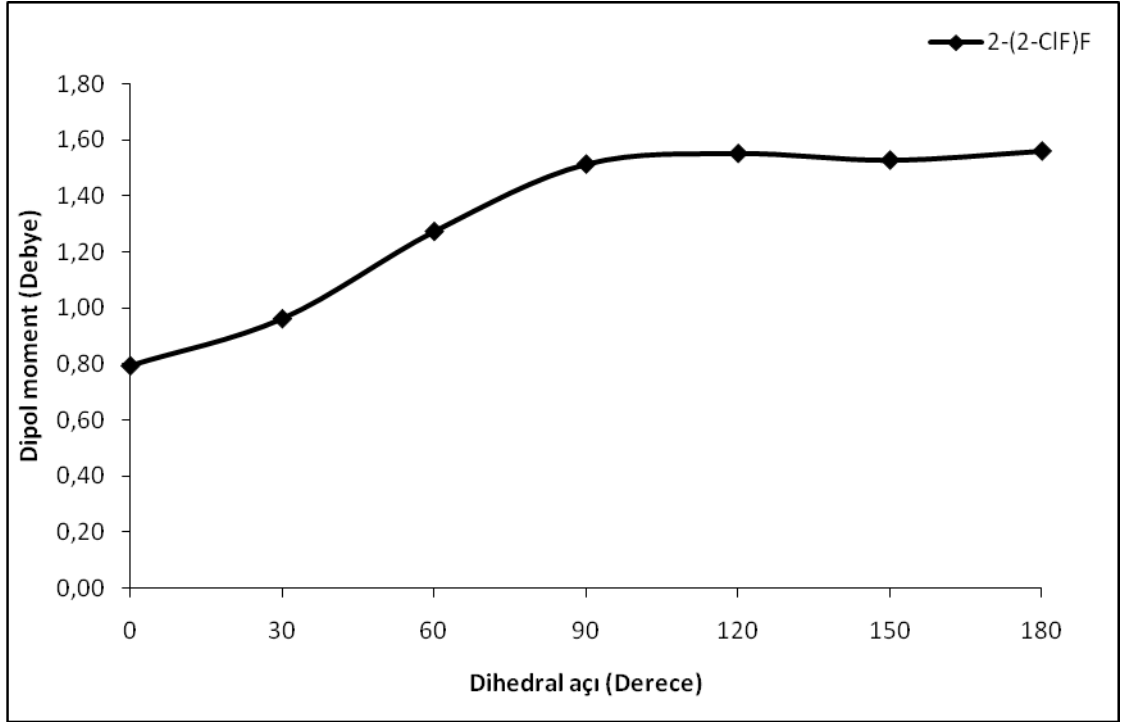
Şekil 4.14 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan, 2-(4-klorofenil)furan molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



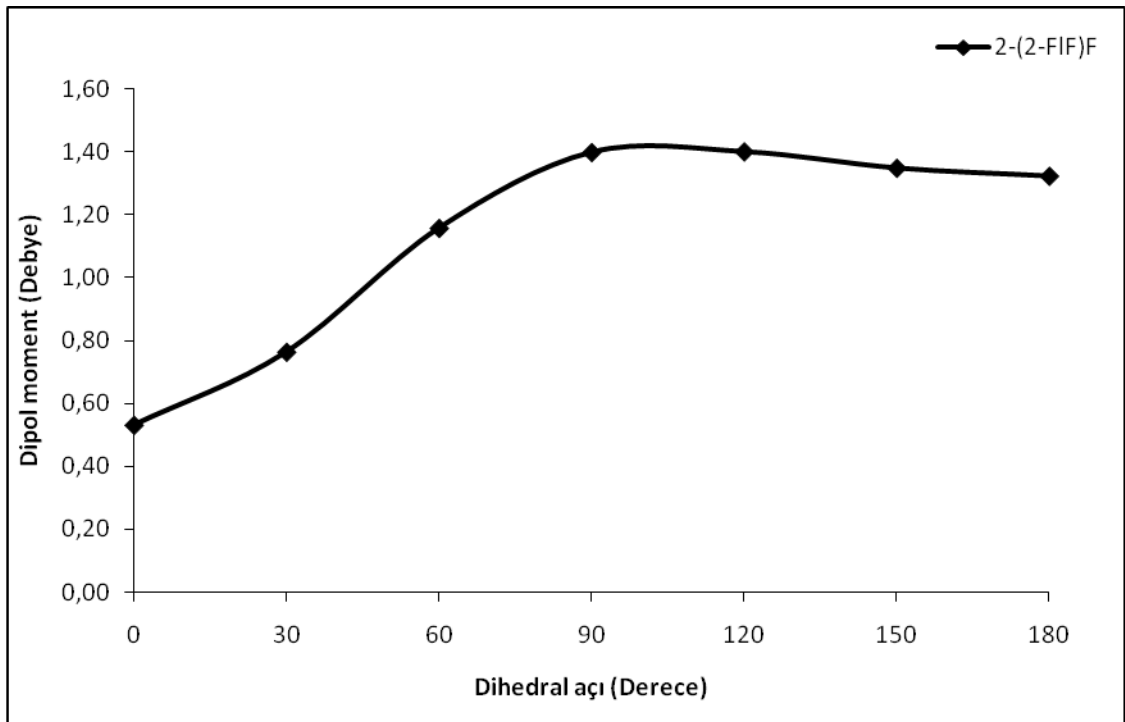
Şekil 4.15 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan, 2-(4-florofenil)furan molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



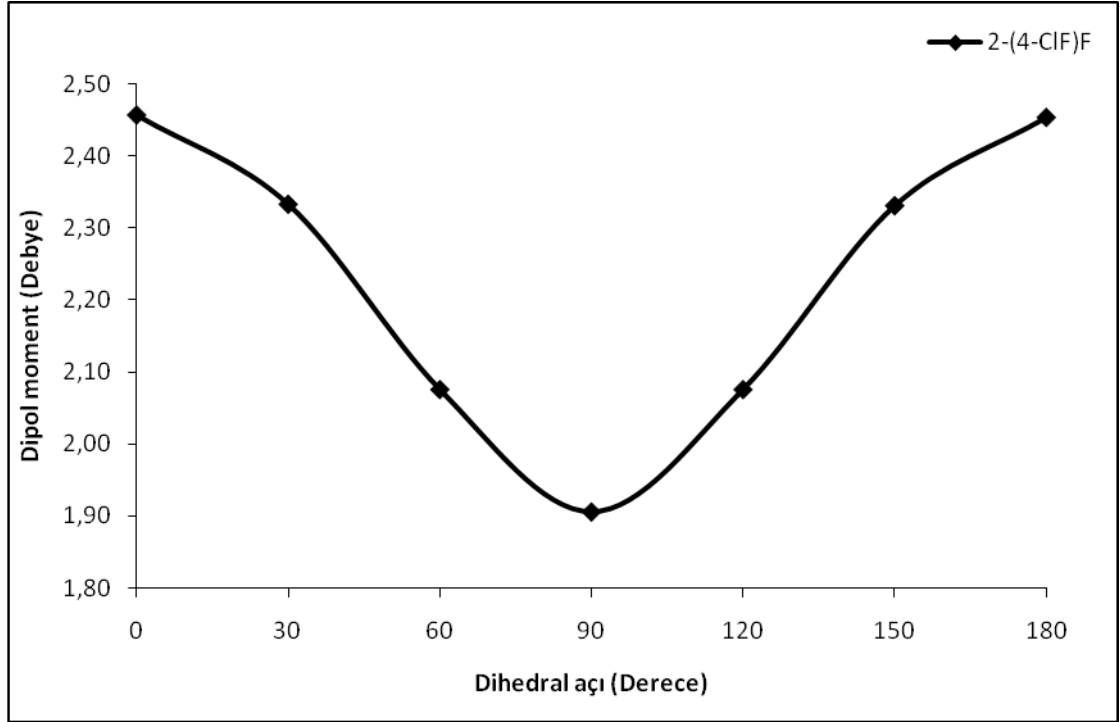
Şekil 4.16 DFT/B3LYP 6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün dipol momentinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



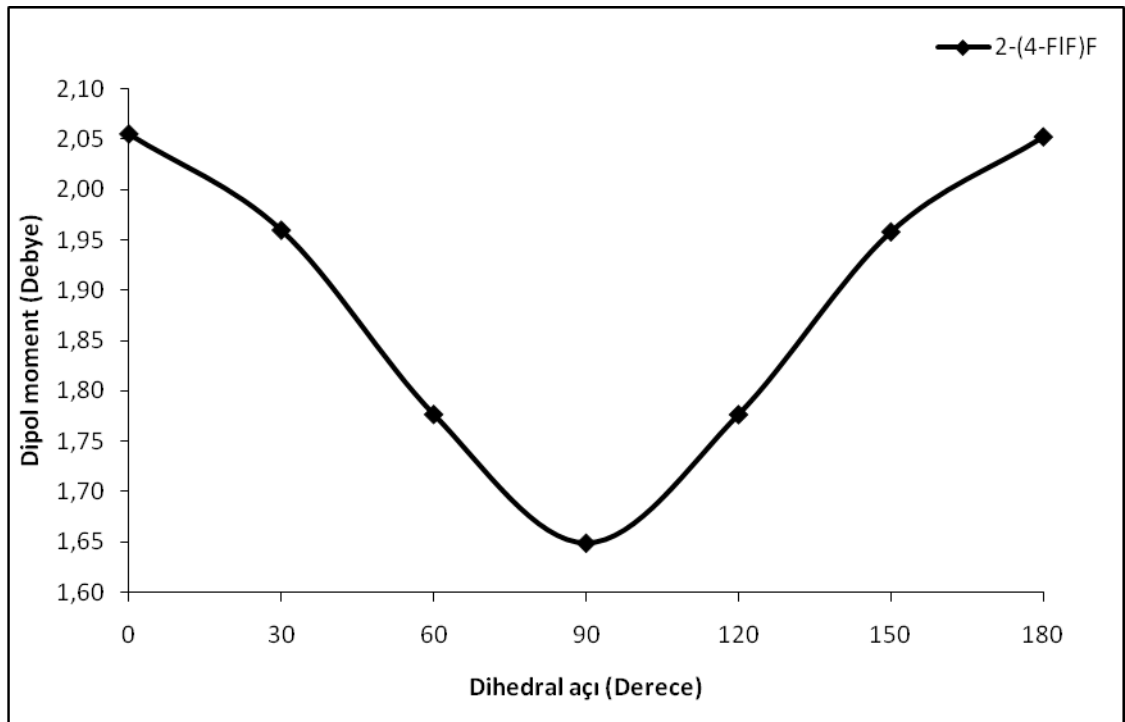
Şekil 4.17 DFT/B3LYP 6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-klorofenil)füran molekülünün dipol momentinin dihedral açıya baęlı olarak deęiřimi



Şekil 4.18 DFT/B3LYP 6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan, 2-(2-florofenil)füran molekülünün dipol momentinin dihedral açıya baęlı olarak deęiřimi



Şekil 4.19 DFT/B3LYP 6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-klorofenil)furan molekülünün dipol momentinin dihedral açıya baęlı olarak deęiřimi



Şekil 4.20 DFT/B3LYP 6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-florofenil)furan molekülünün dipol momentinin dihedral açıya baęlı olarak deęiřimi

Klor ve Flor atomlarının orto pozisyonunda bulunduğu moleküller olan 2-(2-klorofenil)furan, 2-(2-florofenil)furan moleküllerinde dipol moment değerlerinin, aynı eğilimde olduğu ve 2-fenilfuran molekülünün dipol momentine göre daha büyük olduğu görülmüştür. Bu moleküllerin dipol moment değerlerinin 0° durumunda en düşük seviyede olduğu ve 180° durumda daha yüksek seviyelerde olduğu görülmüştür.

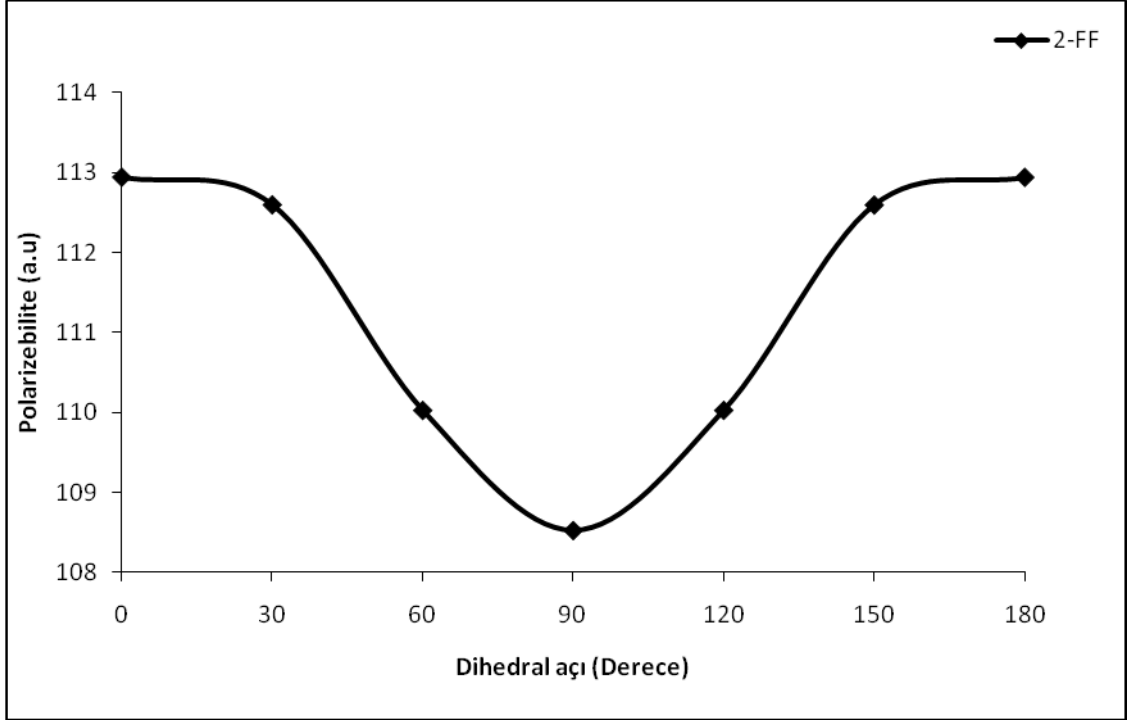
Klor ve Flor atomlarının para pozisyonunda bulunduğu moleküller olan 2-(4-klorofenil)furan ve 2-(4-florofenil)furan moleküllerinde polarlanmaya geometrik şekillerinin de etkisiyle dipol momentlerin en yüksek değerleri aldıkları ve aynı eğilimde oldukları görülmüştür. 2-(4-klorofenil)furan ve 2-(4-florofenil)furan moleküllerinin dipol moment değerlerinin 0° ve 180° durumunda maksimum, ortogonal (90°) durumda ise minimum olduğu görülmüştür.

4.4. Polarizebilite

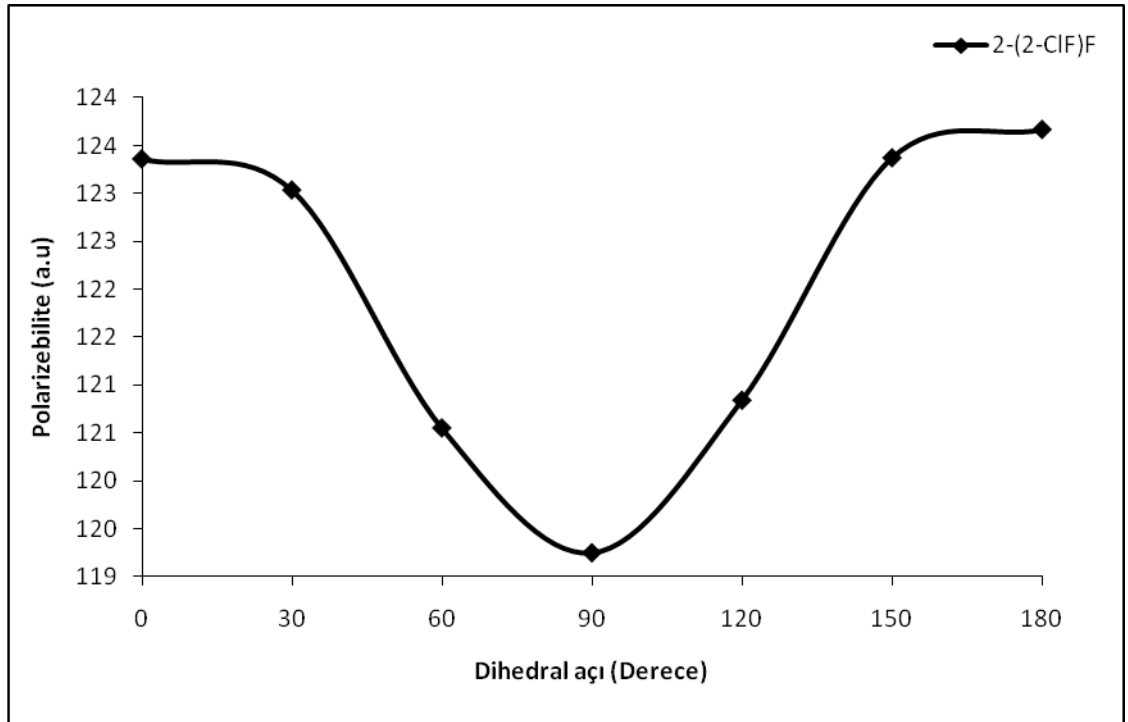
Bir molekülün polarizebilitesi, bir elektrik alan uygulanan molekülün dipol momentinin, bu elektrik alana gösterdiği doğrusal tepki olarak tanımlanır. Polarizebilite, moleküler optik ve spektroskopide kullanılan önemli bir niceliktir. Elektrik alan uygulanan bir molekülün şeklindeki değişim polarizebilite ile belirlenir.

Bu çalışmada HF ve DFT/B3LYP modelleri kullanılarak moleküllerin Fenil ve Furan halkaları arasındaki dihedral açı değeri 0° den 180° ye kadar 30° lik arttırmalarla değiştirilerek, her arttırmaya karşılık gelen polarizebilite değerleri hesaplanmış ve polarizebilite değerleri dihedral açının fonksiyonu olarak elde edilmiştir. Klor ve flor atomlarının polarizebilite üzerine etkileri incelenmiştir.

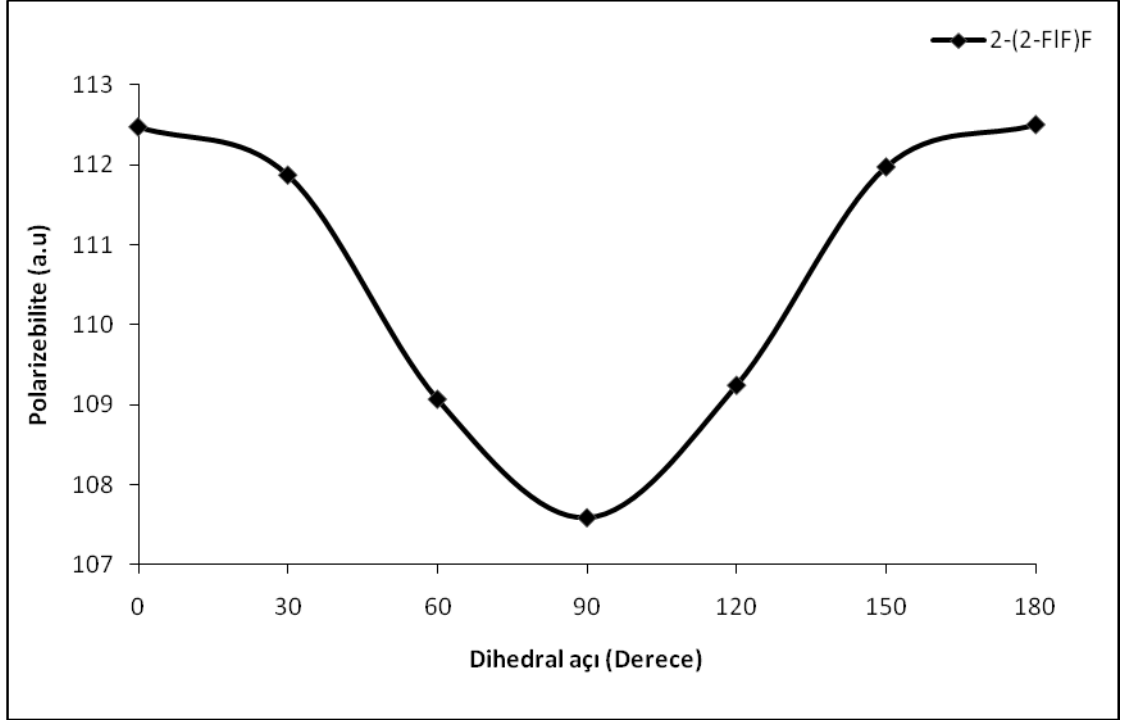
2-fenilfuran, 2-(2-klorofenil)furan, 2-(2-florofenil)furan, 2-(4-klorofenil)furan, 2-(4-florofenil)furan moleküllerinin polarizebilite değerinin dihedral açıya bağlı olarak değişimlerinin, her iki hesaplama modelinde de, aynı eğilimde olduğu görülmüştür. Bu polarizebilite değerlerinin dihedral açıya göre değişim grafikleri, HF modeli için Şekil 4.21, Şekil 4.22, Şekil 4.23, Şekil 4.24 ve Şekil 4.25 de, DFT/B3LYP modeli için Şekil 4.26, Şekil 4.27, Şekil 4.28, Şekil 4.29 ve Şekil 4.30 da verilmiştir.



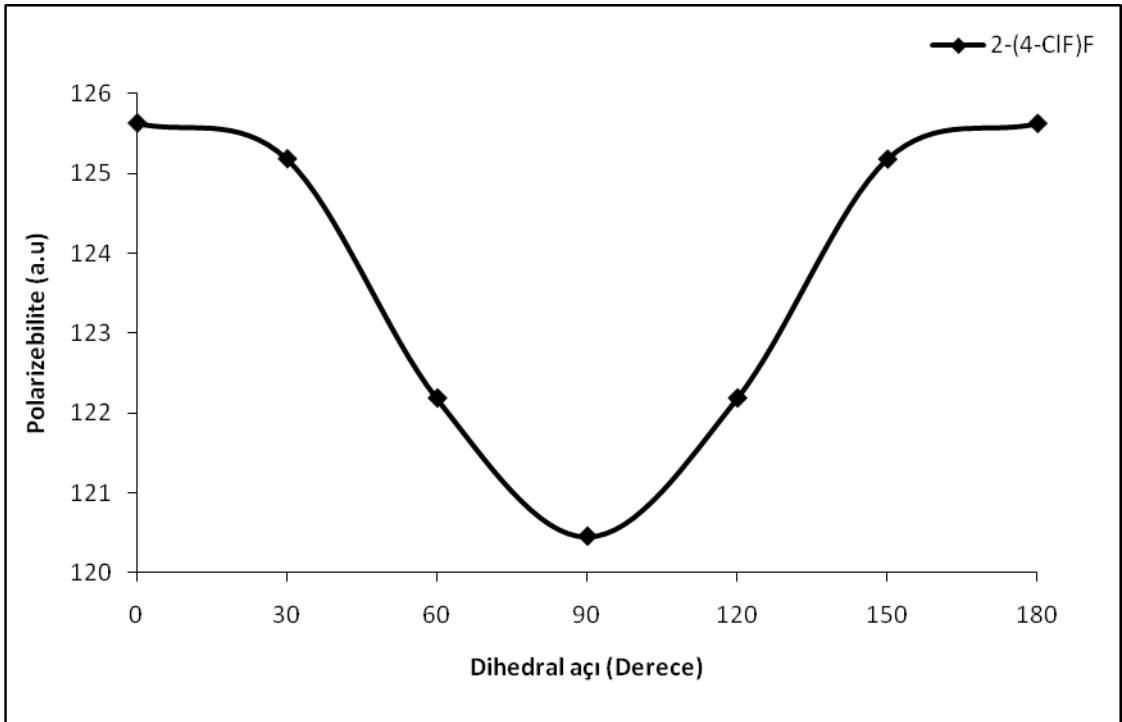
Şekil 4.21 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



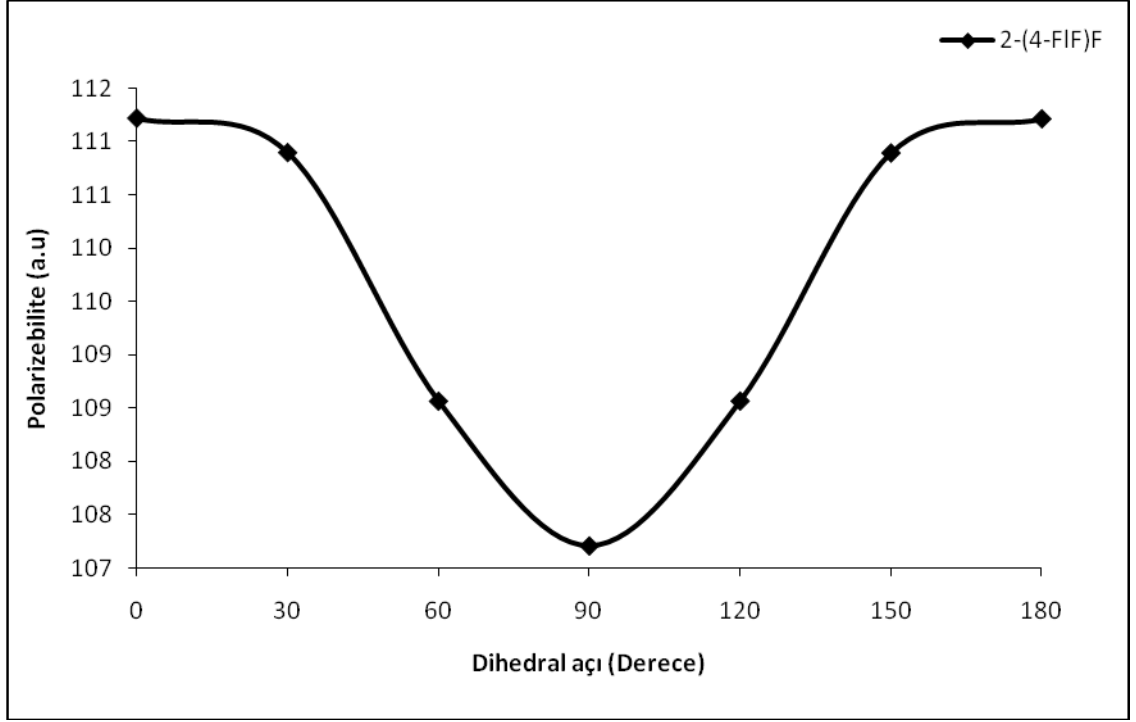
Şekil 4.22 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-klorofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



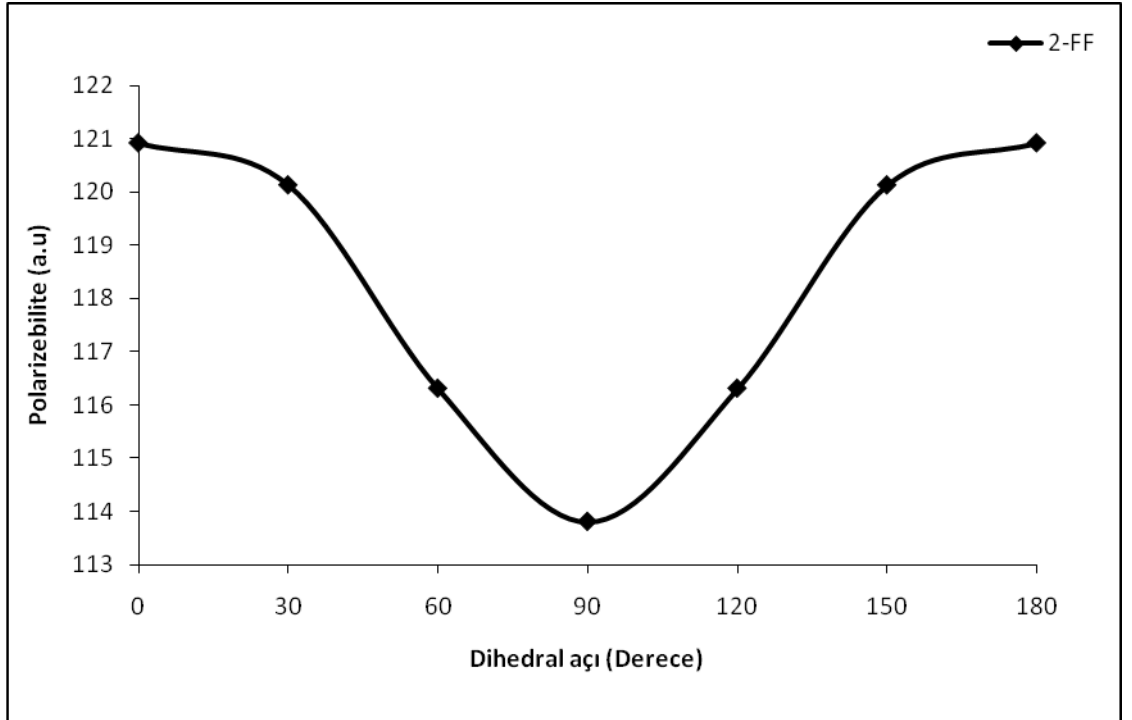
Şekil 4.23 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan, 2-(2-florofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



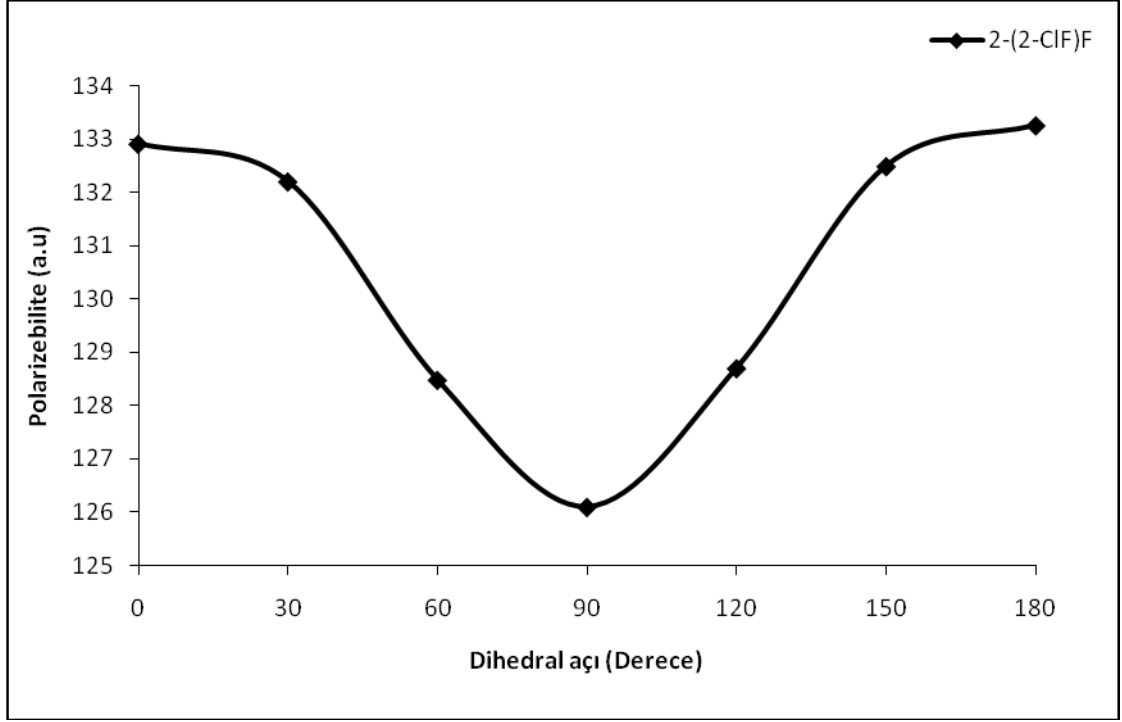
Şekil 4.24 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-klorofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



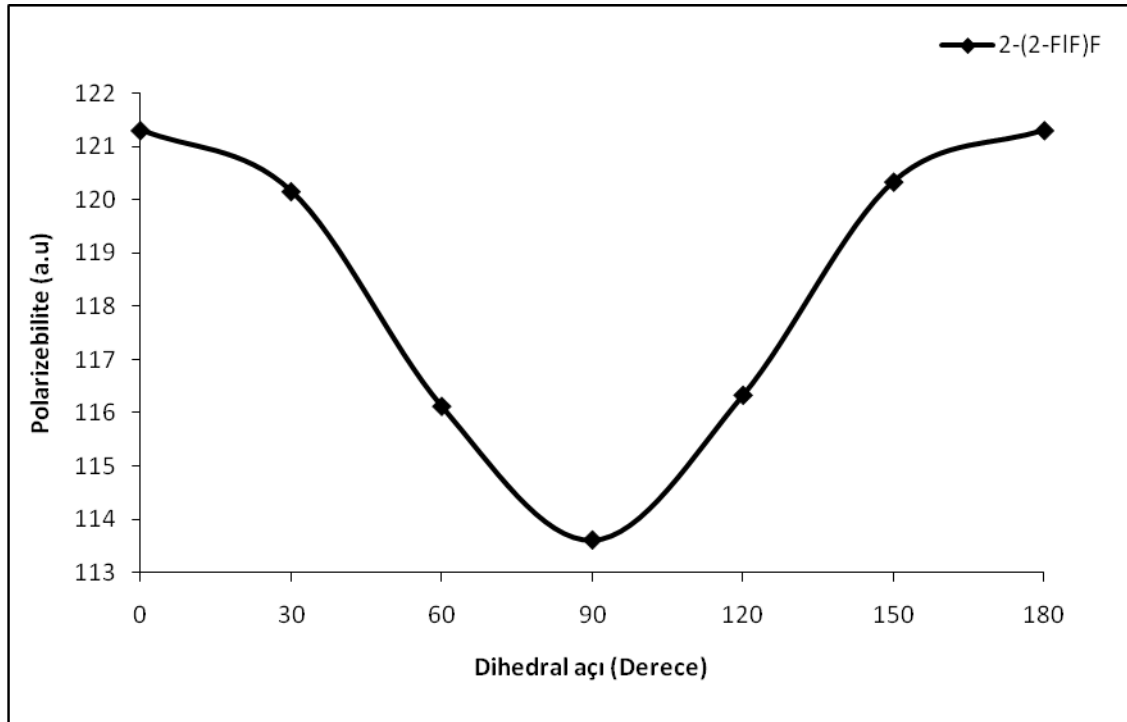
Şekil 4.25 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-florofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



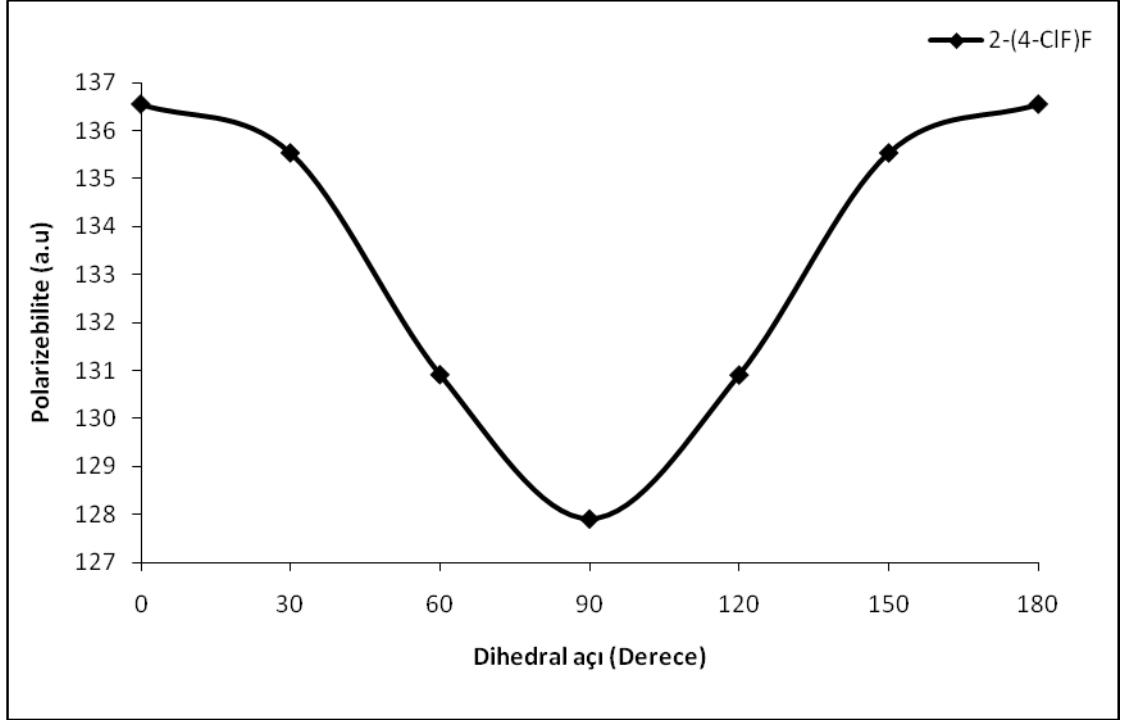
Şekil 4.26 DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



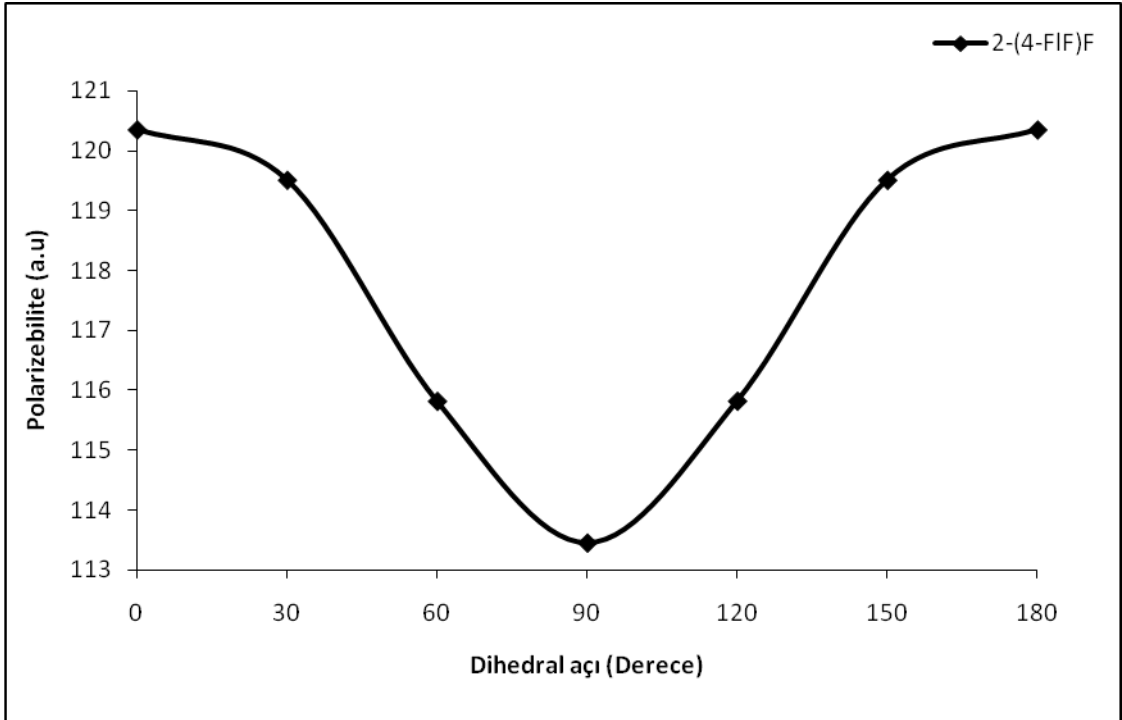
Şekil 4.27 DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-klorofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.28 DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-florofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.29 DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-klorofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.30 DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-florofenil)furan molekülünün polarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi

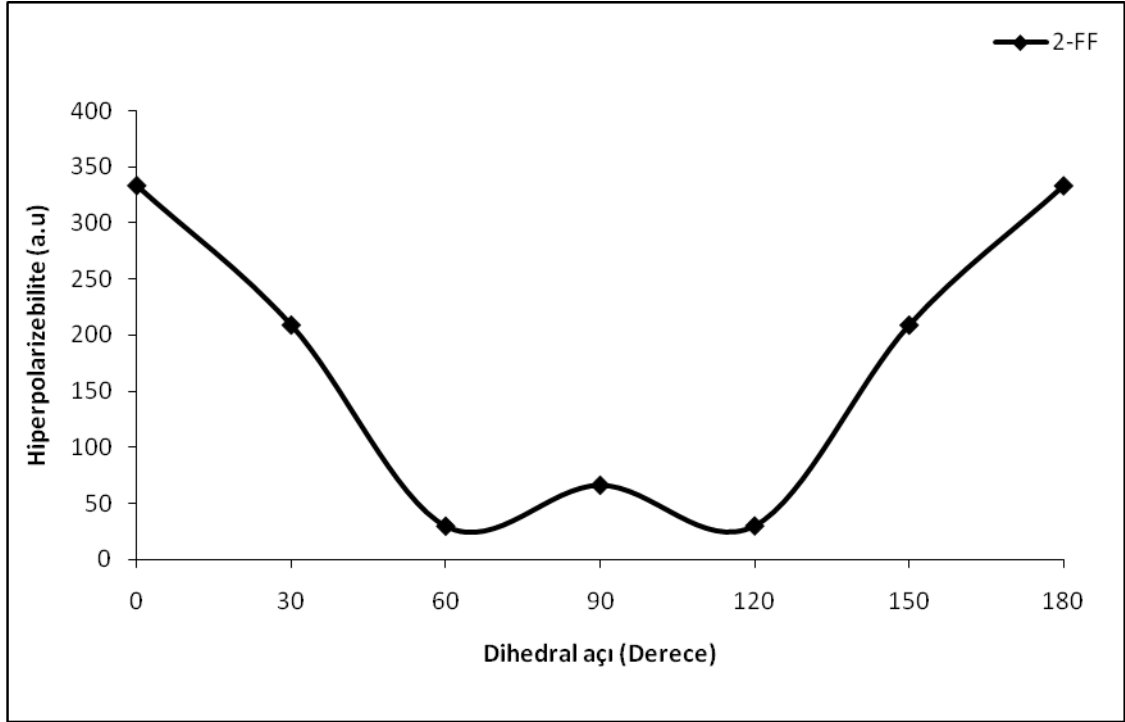
Bu moleküllerin polarizebilite değerlerinin, 0° ve 180° durumda maksimum, 90° (ortogonal) durumda minimum olduğu ve ortogonal duruma göre simetrik yapıda oldukları görülmüştür. Para veya orto durumunda bulunan klor atomunun polarizebilite değerini yükselttiği, Para veya orto durumunda bulunan flor atomunun ise polarizebilite değerini düşürdüğü ve klor atomunun flor atomuna göre polarizebilitede daha etkili olduğu görülmüştür.

4.5. Hiperpolarizebilite

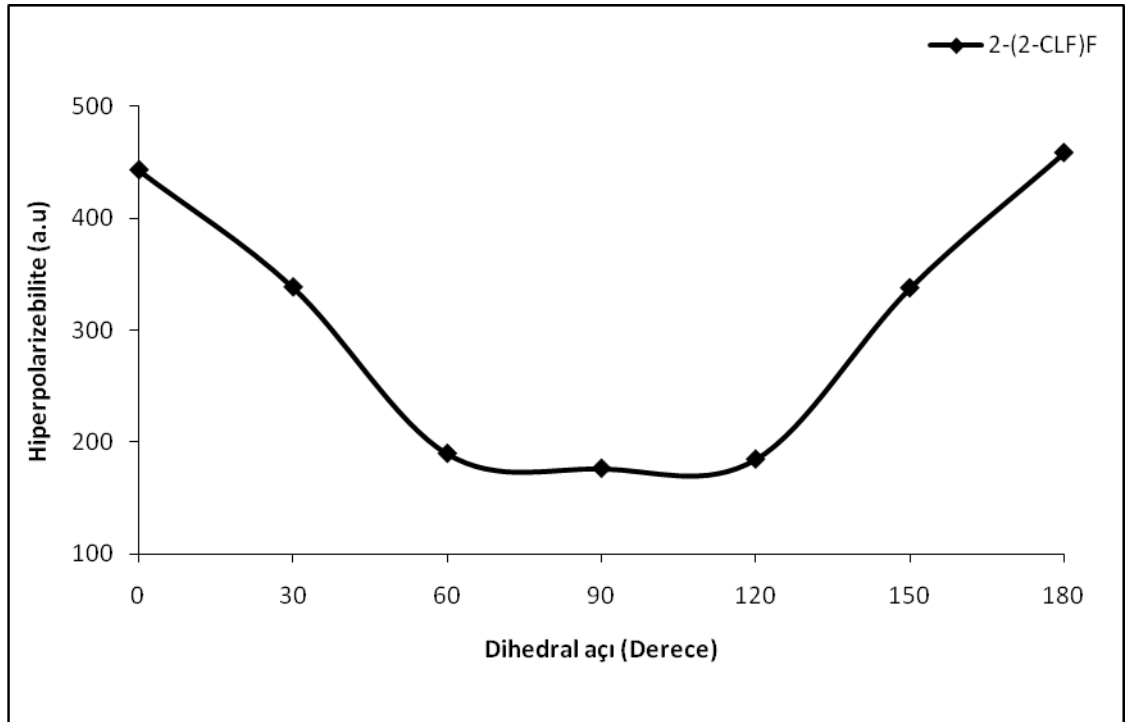
Bir molekülün hiperpolarizebilitesi, bir elektrik alan uygulanan molekülün dipol momentinin bu elektrik alana karşı gösterdiği doğrusal olmayan tepkinin bir ölçüsüdür.

Bu çalışmada HF ve DFT/B3LYP modelleri kullanılarak moleküllerin Fenil ve Furan halkaları arasındaki dihedral açı değeri 0° den 180° ye kadar 30° lik arttırmalarla değiştirilerek, her arttırmaya karşılık gelen hiperpolarizebilite değerleri hesaplanmış ve hiperpolarizebilite değerleri dihedral açının fonksiyonu olarak ifade edilmiştir. Klor ve flor atomlarının hiperpolarizebilite üzerine etkileri incelenmiştir.

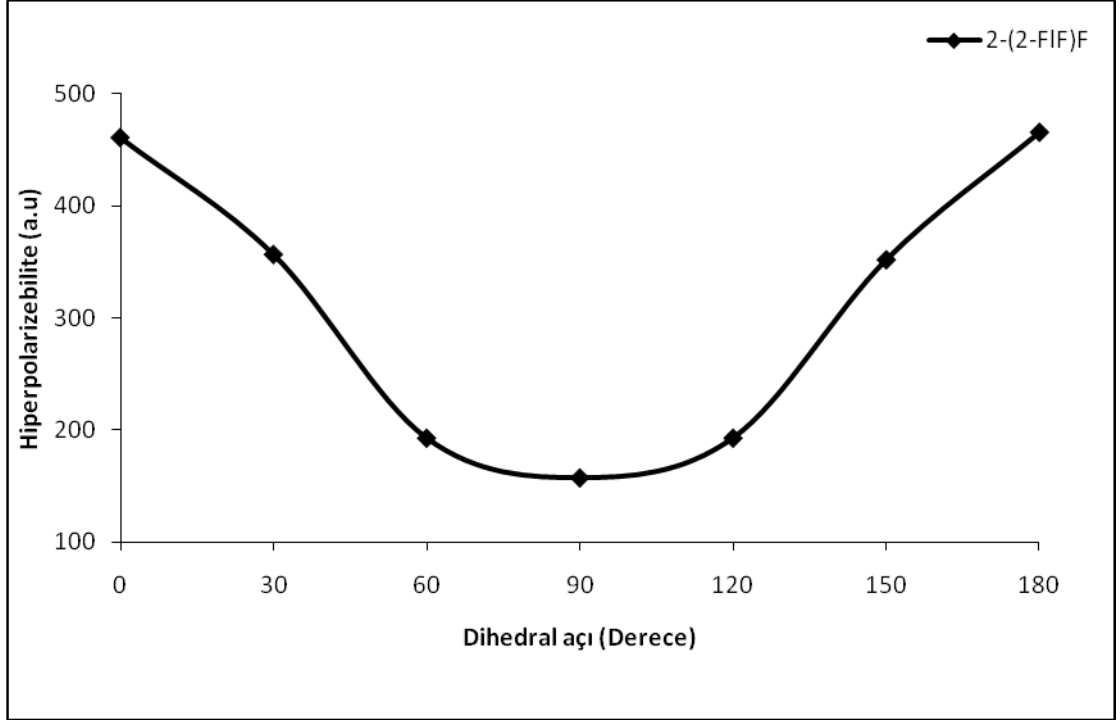
2-fenilfuran, 2-(2-klorofenil)furan, 2-(2-florofenil)furan, 2-(4-klorofenil)furan, 2-(4-florofenil)furan moleküllerinin hiperpolarizebilite değerinin dihedral açığa bağlı olarak değişimlerinin, her iki hesaplama modelinde de, aynı eğilimde olduğu görülmüştür. Bu hiperpolarizebilite değerlerinin dihedral açığa göre değişim grafikleri, HF modeli için Şekil 4.31, Şekil 4.32, Şekil 4.33, Şekil 4.34 ve Şekil 4.35 de, DFT/B3LYP modeli için Şekil 4.36, Şekil 4.37, Şekil 4.38, Şekil 4.39 ve Şekil 4.40 da verilmiştir.



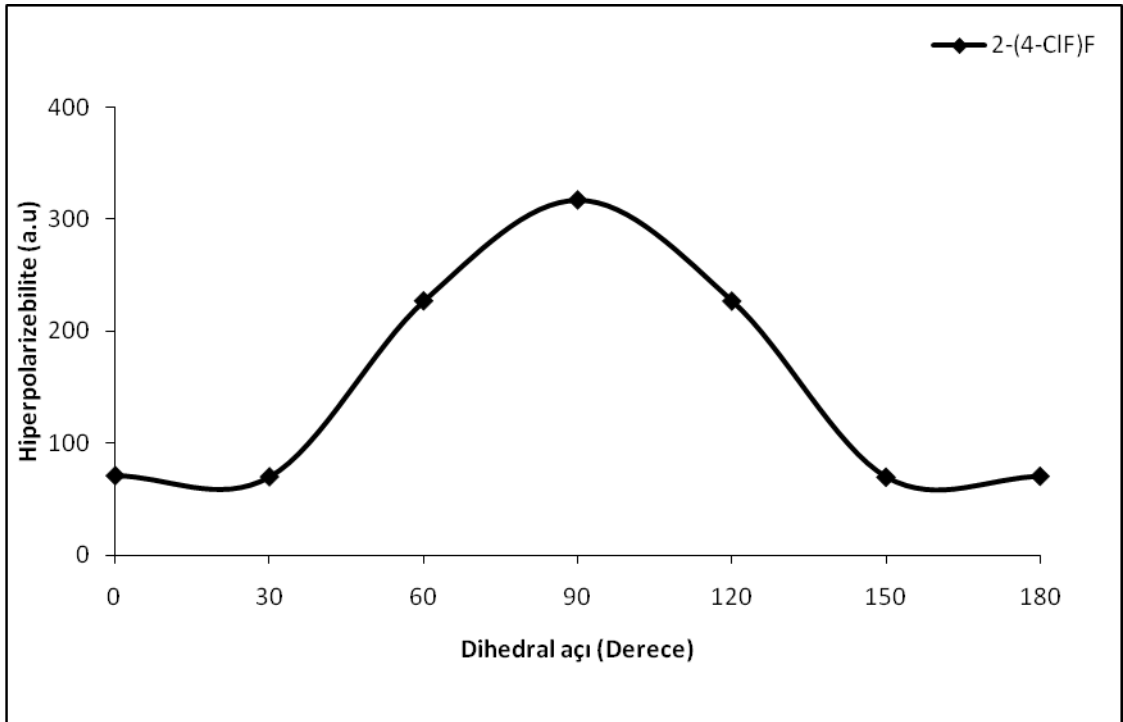
Şekil 4.31 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



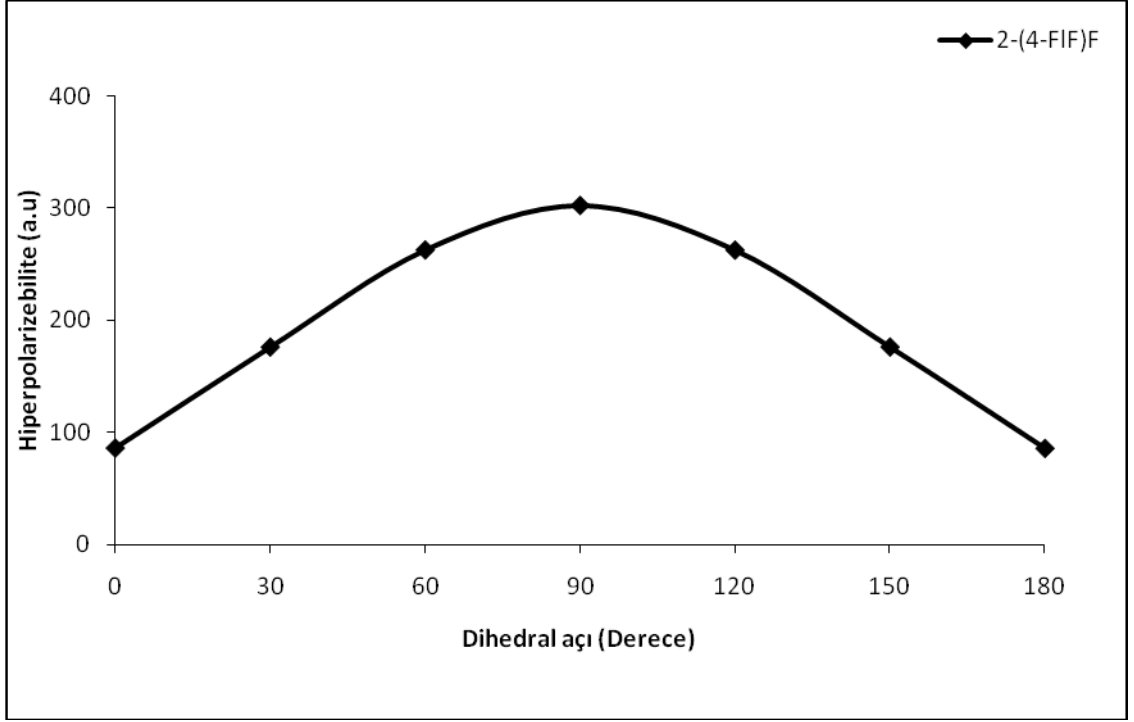
Şekil 4.32 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-klorofenil)furan molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



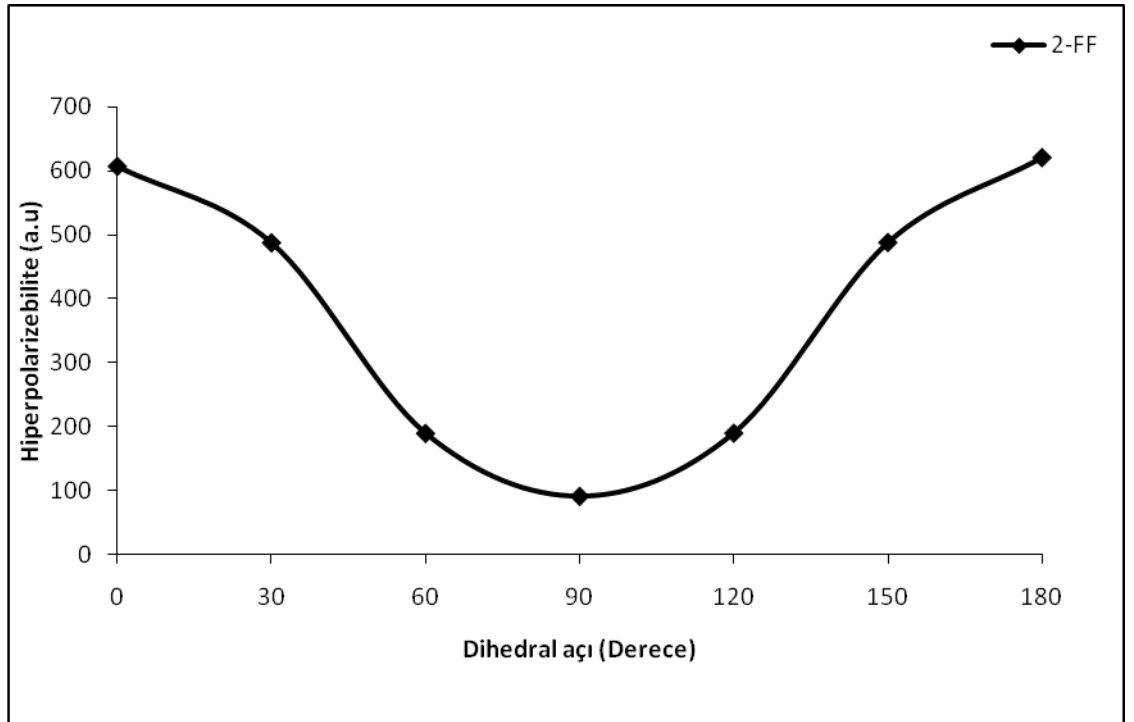
Şekil 4.33 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-florofenil)furan molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



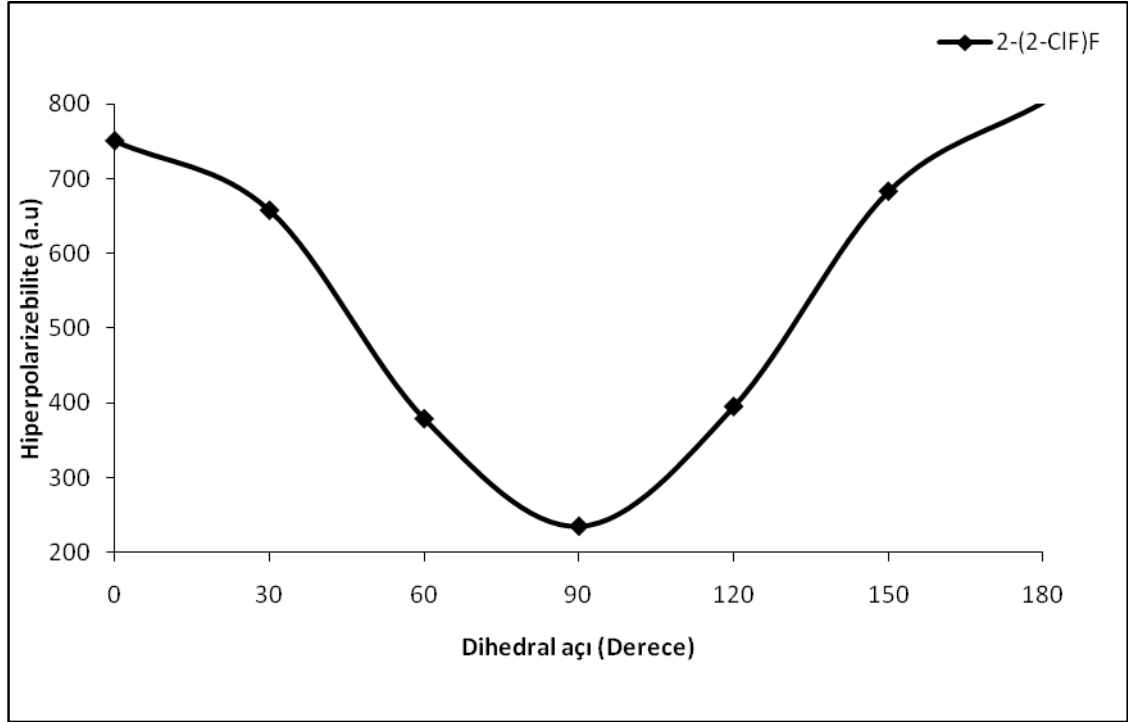
Şekil 4.34 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-klorofenil)furan molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



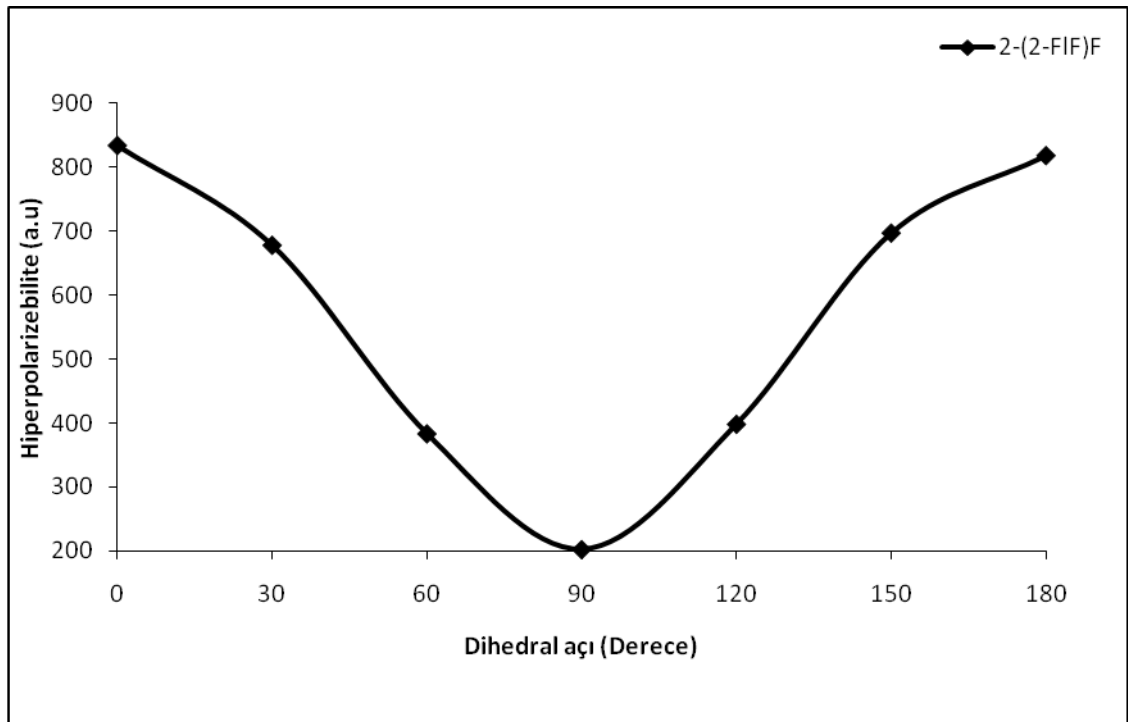
Şekil 4.35 HF/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-florofenil)furan molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



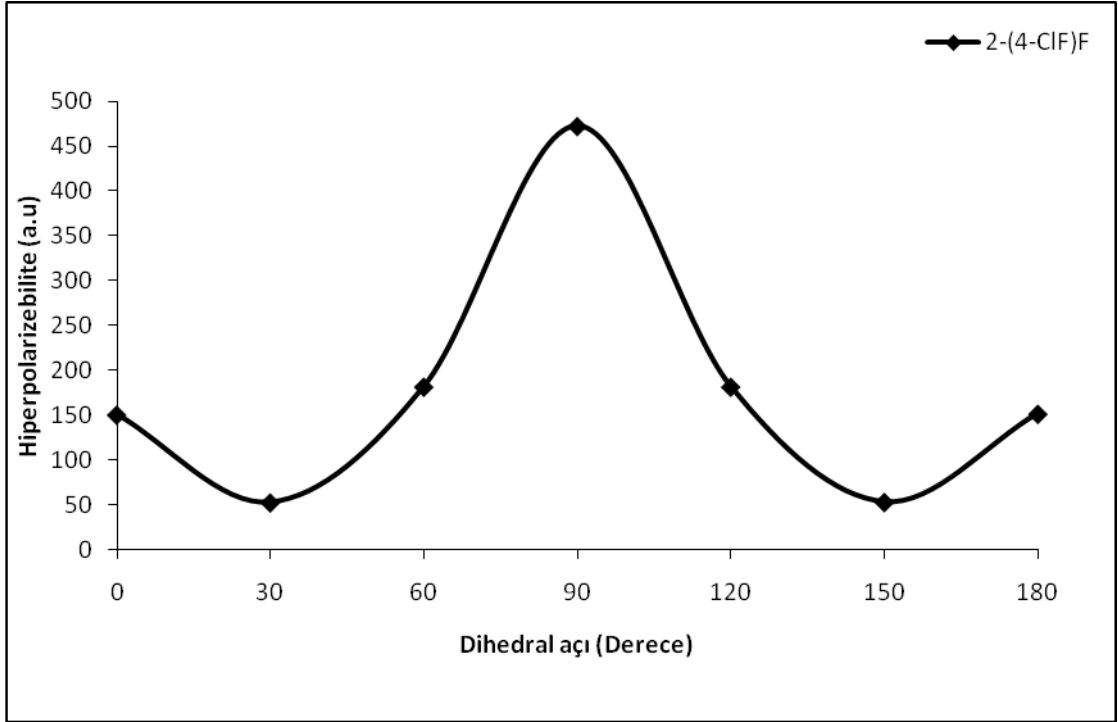
Şekil 4.36 DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-fenilfuran molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



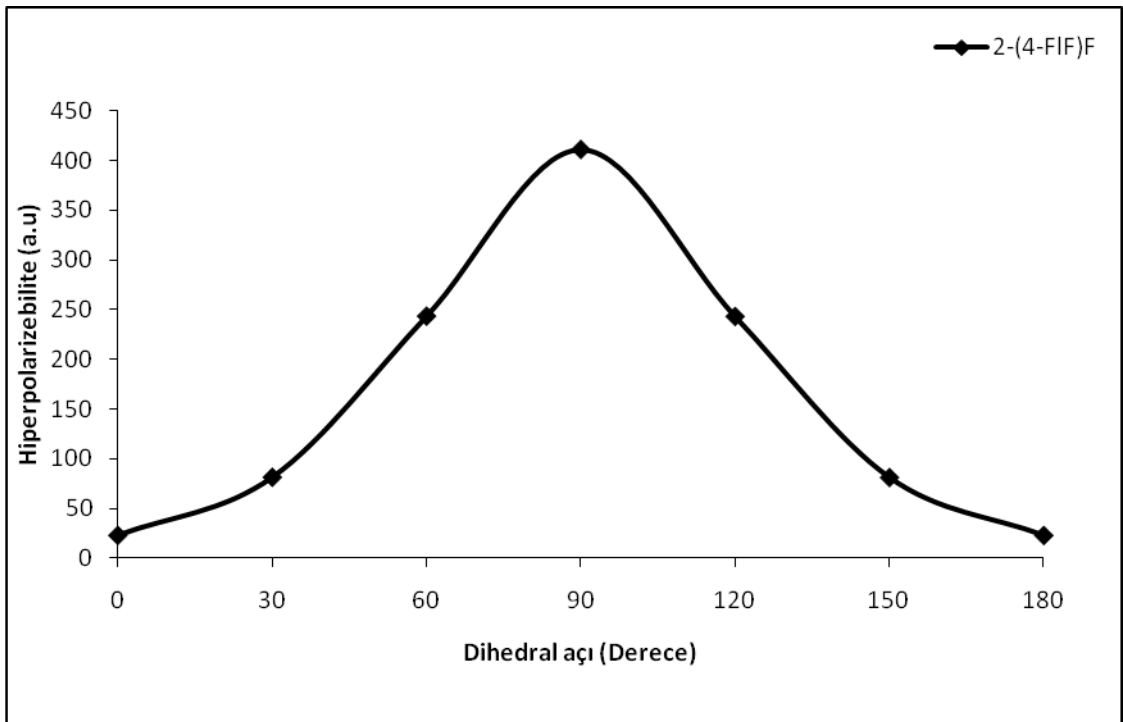
Şekil 4.37 DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile 2-(2-klorofenil)fulan molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.38 DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(2-florofenil)fulan molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.39 DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-klorofenil)furan molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi



Şekil 4.40 DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modeli ile hesaplanan 2-(4-florofenil)furan molekülünün hiperpolarizebilitesinin dihedral açığa bağlı olarak değişimi

Tüm moleküllerin hiperpolarizebilite değerlerinin, ortogonal duruma göre simetrik oldukları gözlenmiş, HF modelinde 2-fenilfuran, 2-(2-klorofenil)furan, 2-(2-florofenil)furan moleküllerinin hiperpolarizebilite değerlerinin düzlemsel durumda maximum, ortalama 70° ve 110° de minimum değerlerde olduğu görülmüştür.

2-(4-klorofenil)furan ve 2-(4-florofenil)furan moleküllerinin hiperpolarizebilite değerlerinin ortogonal durumda maksimum olduğu görülmüştür. 2-(4-florofenil)furan molekülünün hiperpolarizebilite değerinin düzlemsel durumunda minimum olduğu, 2-(4-klorofenil)furan molekülünün hiperpolarizebilite değerinin ise ortalama 30° ve 150° lerde minimum seviyelerde olduğu görülmüştür.

DFT/B3LYP modelinde 2-fenilfuran, 2-(2-klorofenil)furan ve 2-(2-florofenil)furan moleküllerinin hiperpolarizebilite değerleri için 70° ve 110° de minimumlar görülememiştir.

5. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada, 2-fenilfuran molekülünün fenil halkasında bulunan orto ve para pozisyonundaki hidrojen atomu, sistematik olarak klor ve flor atomlarıyla değiştirilerek oluşturulan, 2-(2-klorofenil)furan, 2-(2-florofenil)furan, 2-(4-klorofenil)furan ve 2-(4-florofenil)furan moleküllerinin yapısal ve elektronik özellikleri, HF/6-31++G(d,p) ve DFT/B3LYP/6-31++G(d,p) modelleri ile hesaplandı. Bu moleküllerin denge durumları yapısal parametreleri hesaplandıktan sonra, moleküllerin elektronik enerjileri, indüklenmiş dipol momentleri, polarizebilite ve hiperpolarizebilite değerleri, dihedral açının fonksiyonu olarak incelendi.

Para-klor ve para-florlu moleküllerin her iki hesaplama modelinde de, torsiyon potansiyellerinin 0° ile 180° de minimum ve birbirine eşit olduğu görülmüştür. Para-klor ve para-florlu moleküllerin torsiyon potansiyel eğrilerinin, ortogonal duruma göre simetrik olduğu ve torsiyon potansiyel enerjilerini etkilemediği görülmüştür.

Orto klor ve orto florlu moleküllerinin her iki hesaplama modelinde de torsiyon potansiyellerinde sterik etkiler sonucu geçiş durumlarının olduğu görülmüştür. Moleküllerin torsiyon potansiyel eğrilerinin ortogonal duruma göre simetrikliğini kaybettikleri görülmüştür. Orto-klorlu yapının torsiyon potansiyelini yükselttiği, orto-florlu yapının torsiyon potansiyelini düşürdüğü görülmüştür. 0° deki torsiyon potansiyel enerjilerinin, 180° deki torsiyon potansiyel enerjilerinden küçük olduğu görülmüştür. Orto-flor yapıları hariç, diğer moleküllerin ortogonal durumlarında torsiyon potansiyel enerjilerinin, 0° ve 180° durumdan daha yüksek olduğu görülmüştür [35].

Para-klor ve para-florlu moleküllerde, her iki hesaplama modelinde de dipol moment değerlerinin, en yüksek değerleri aldıkları ve ortogonal duruma göre simetrik olduğu görülmüştür.

Orto klor ve orto florlu moleküllerde her iki hesaplama modelinde de dipol moment değerlerinin ortogonal duruma göre simetrik olmadıkları ve 180° durumda daha yüksek oldukları görülmüştür.

Klor atomunun, moleküllerin polarizebilitelerini yükselttiği, flor atomlarının ise moleküllerin polarizebilitelerini düşürdüğü ancak klor atomu kadar etki etmediği görülmüştür. Moleküllerin polarizebilite değerlerinin ortogonal duruma göre simetrik olduğu görülmüştür.

Klorlu ve florlu moleküllerin hiperpolarizebilite değerleri ortogonal duruma göre simetrik özellik göstermekte olup, hiperpolarizebiliteye klor ve flor atomlarının özelliklerinden daha çok konumlarının etki ettiği görülmüştür.

KAYNAKLAR

- [1] Roncali, J. “Conjugated poly(thiophenes): synthesis, functionalization, and applications”, *Chem. Rev.*, 92(4): 711-738 (1992).
- [2] Pokhodenko, V.D., Krylov, V.A., Konoshchuk, N.V. “Effect of the electrolyte nature on the electrochemical doping of poly-3-phenylthiophene” *Synthetic Metals.*, 99: 91–95 (1999).
- [3] Iliescu, T., F.D. Irimie, M. Bolboaca, Cs. Paisz, W. Kiefer, “Surface enhanced Raman spectroscopy of 5-(4-fluor-phenyl)-furan-2 carbaldehyde adsorbed on silver colloid”, *Vibrational Spectroscopy*, 29: 251-255 (2002).
- [4] Paizs, C., Tahtinen, P., Lundell, K., Poppe, L., Irimeie, F., and Kanerva, L.T., “Preparation of Novel Phenylfuran-Based Cyanohydrin Esters: Lipase Catalysed Kinetic and Dynamic Resolution”, *Tetrahedron: Asymmetry*, 14: 1895-1904 (2003).
- [5] Abu-Eittah R., R. Hilal, and M.M. Hamed, “Molecular Orbital Treatment Phenylfurans and Bifurans” *Int.J. Qant. Chem.*, 19: 383-399 (1981).
- [6] Fabian W. M. F., “AM1 Calculations of Rotation Around Essential Single Bonds and Preferred Conformations in Conjugated Molecules”, *Journal of Computational Chemistry*, 9:369-377(1988).
- [7] Parr, R. G., Yang W., “Density Functional Theory”, Oxyford University Pres, England, 100-120 (1989).
- [8] Slater, J.C, “The Theory of Complex Spectra”, *Phys. Rev.*, 34,1923-1305 (1929).

- [9] Cramer, J. C., "Essential of Computational Chemistry, Theories and Models", John Wiley&Sons, USA, 100-101 (2004).
- [10] Veszpremi, T., Feher, M., "Quantum Chemistry: Fundamentals to Applications", Kluwer Academic, New York, 76-195 (1999).
- [11] Hohenberg, P., Kohn W., "Inhomogeneous electron gas", Phys. Rev., 136(3b),864-875 (1964).
- [12] Kohn, W., Sham, L. J., "Self consistent equations including Exchange and correlation effects", Phys. Rev.A, 140: 1133-1138 (1965).
- [13] Becke, A.D., "Density functional Exchange energy approximation with correct asymptotic behaviour", Physical Rev.A, 38, 3098-3112 (1988).
- [14] Vosko, S.H., Wilk, L., Nusair, M., "Accurate spin dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis", Can. J. Phys., 58: 1200-1211 (1980).
- [15] Lee, C., Yang, W., Parr, R.G., "Development of the Colle-Salvetti correlation energy formula into a functional of the electron density", Physical Rev. B, 37: 785-794 (1988).
- [16] Internet: Specifying the geometry of molecules, http://chemweb.ucc.ie/courses/RPB/CM3109/09_06_L2.doc (2005).
- [17] Internet: Introduction to Theoretical organic Chemistry, <http://www.chem.elte.hu/departments/szerves/szerves/oktatas/ea/Perczel/Fund.Theor.Org.Chem.1.5.pdf> (2006).
- [18] Foresman, J. B., Frisch, A., "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, Second Edition", Gaussian Inc., Pittsburgh, 276 (1996).

- [19] Pople, J. A., Krishnan, R., Schlegel, H. B., Binkly, J. S., “Derivative studies in Hartree-Fock and Möller-Plesset theories” , *Int. J. Quantum Chem. Symp.*, 13: 225-233 (1979).
- [20] Gill, P. M., W., “DFT, HF and self consistent field”, *Enc. Of Comp. Chemistry*, John Wiley & Sons Ltd., New York, 65-87(1996).
- [21] Bastiansen, O., Fernholt, L., Cyvin, B.N., Cyvin, S.J., Samdal, s., Almenningen, A., “ Structure and barrier of internal rotation of biphenyl derivatives in the gaseous state. Part 3 ”, *J. Mol. Struc.*, 128: 59-69 (1985).
- [22] Basshard Ch., Suttur, K., Pretre, Ph., Flörsheimer, M., Kaatz, P., and Günter, P. “Organic Nonlinear Optical Materials”, Institute of Quantum Electron ETH-Hönggerberg HPF, Gordon and Breach Publisher, Switzerland, 1-18 (1990).
- [23] Francl, M.M., Petro, W.J., Hehre, W.J., Binkley, J.S., Gordon, M.S., DeFrees, D.J. and Pople, J.A., “Self-consistent molecular orbital methods. XXIII. A polarization-type basis set for second-row elements”, *J. Chem. Phys.*, 77: 3654-3665 (1982).
- [24] Clark, T., Chandrasekhar, J., Schleyer, P.v.R., “Efficient diffuse function-augmented basis sets for anion calculations. III. “The 3-21+G basis set for first-row elements, Li F””, *J. Comp. Chem.*, 4: 294-301 (1983).
- [25] Krishnam, R., Binkley, J.S., Seeger, R., Pople, J. A., “Self-consistent molecular orbital methods. XX. A basis set for correlated wave functions”, *J. Chem. Phys.*, 72: 650-654 (1980).
- [26] Simons, J., “An Introduction to Theoretical Chemistry”, Cambridge, Utah, 188-191 (2003).

- [27] Hehre, W. J., Ditchfield R. And Pople, J. A., "Self—Consistent Molecular Orbital Methods. XII. Further Extensions of Gaussian—Type Basis Sets for Use in Molecular Orbital Studies of Organic Molecules", J. Chem. Phys., 56: 2257-2261 (1972).
- [28] Frisch, M.J., Pople, J.A. and Binkley, J.S., "Self-consistent molecular orbital methods 25. Supplementary functions for Gaussian basis sets", J. Chem. Phys. 80: 3265-3269 (1984).
- [29] Göller, A., Grummt, U. W., "Torsional Barriers in Biphenyl, 2,2'-Bipyridine and 2-Phenylpyridine", Chemical Physics Letters, 321:399-405 (2000)
- [30] Grein, F., " New theoretical studies on the dihedral angle and energy barriers of biphenyl ", J. Mol. Struc. (Ttheochem), 624: 23-28, (2003).
- [31] Lee, S.Y. "Molecular Structure and Vibrational Spectra of Biphenyl in the Ground and the lowest Triplet States. Density Functional Theory Study", Bull. Korean chem. Soc., 19(1): 93-98 (1998).
- [32] Lee, S.Y., Boo, B.H., "Density Functional Theory Study of Vibrational Spectra of Fluorene", J. Phys. Chem., 100(21): 8782-8785 (1996).
- [33] Uğurlu, G., "3-Feniltiyofen Molekülü Ve Florlu Türevlerinin Yapısal Parametreleri, Elektronik ve Lineer Olmayan Optik Özelliklerinin Teorik Olarak İncelenmesi" Doktora Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü. Ankara, 35-42 (2006).
- [34] Şafak, Y., "2-Fenilfuran molekülünün yapısal, elektronik ve çizgisel olmayan optik özelliklerinin teorik incelenmesi" Yüksek Lisans Tezi, Gazi Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü. Ankara, 51-54 (2007)
- [35] Duarte, H.A., Dos Santos, H.F., Rocha, W.R., De Almeida, W.B., "Improved quantum mechanical study of the potential energy surface for the bithiophene molecule", J. Chem. Phys., 113(10): 4206-4215 (2000).

- [36] Liu, Y., Ma, H., Xu, H., Sun, J., Han, K., “Study of the Molecular Configuration and the Dipole Moment in Fluorinated Liquid Crystals”, *Inter. J. Quant. Chem.*, 102: 415-421 (2005).

ÖZGEÇMİŞ

Kişisel Bilgiler

Adı Soyadı : Tufan ÖZTÜRK

Doğum Yeri : ÇORUM

Doğum Tarihi : 01.10.1977

Yabancı Dili : İngilizce

Telefon: 0506 930 66 20

e-mail: tufanozturk29@mynet.com

Eğitim Durumu (Kurum ve Yıl)

Lise : Çorum Endüstri Meslek Lisesi/Elektrik Bölümü 1991/1994

Lisans : Trakya Üniversitesi Fen Edebiyat Fakültesi Fizik Bölümü 2001/2006

Yüksek Lisans: Kafkas Üniversitesi Fen Bilimleri Enstitüsü Fizik Anabilim Dalı
2006/2009

Çalıştığı Kurum/Kurumlar ve Yıl

Türk Silahlı Kuvvetleri 1995/.....

Yayımları

Öztürk,T.,Uğurlu G.,Ateşer E.,Kantarıcı,Z., “2-Fenilfuran molekülünün yapısal ve potansiyel enerji yüzeyinin teorik olarak incelenmesi”

EKLER

EK-1 2-fenilfuran molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik Yapısal Parametreler	HF' de denge durumu		DFT(B3LYP) 'de denge durumu	
	6-31++G(d,p)	6-311++G(d,p)	6-31++G(d,p)	6-311++G(d,p)
R1 R(1,2)	1,3950	1,3936	1,4079	1,4047
R2 R(1,6)	1,3929	1,391	1,4072	1,404
R3 R(1,12)	1,4694	1,4688	1,4598	1,458
R4 R(2,3)	1,3835	1,3815	1,3932	1,3897
R5 R(2,7)	1,0749	1,0746	1,0857	1,0838
R6 R(3,4)	1,3887	1,3873	1,3990	1,3955
R7 R(3,8)	1,0756	1,0755	1,0863	1,0843
R8 R(4,5)	1,3858	1,3838	1,3974	1,3938
R9 R(4,9)	1,0754	1,0753	1,0859	1,084
R10 R(5,6)	1,3868	1,3854	1,3951	1,3916
R11 R(5,10)	1,0756	1,0755	1,0863	1,0844
R12 R(6,11)	1,0734	1,0732	1,0844	1,0825
R13 R(12,13)	1,3494	1,3471	1,3734	1,3696
R14 R(12,14)	1,3479	1,3458	1,3733	1,371
R15 R(13,15)	1,4376	1,4386	1,4309	1,4295
R16 R(13,16)	1,0697	1,0693	1,0802	1,0779
R17 R(14,17)	1,3445	1,3424	1,3639	1,3615
R18 R(15,17)	1,3409	1,3385	1,3633	1,3589
R19 R(15,18)	1,0703	1,07	1,0806	1,0784
R20 R(17,19)	1,0683	1,0682	1,0787	1,0767
A1 A(2,1,6)	118,8	118,8	118,6	118,5
A2 A(2,1,12)	120,5	120,5	120,4	120,5
A3 A(6,1,12)	120,6	120,7	121,0	121,0
A4 A(1,2,3)	120,6	120,6	120,7	120,7
A5 A(1,2,7)	120,1	120,1	119,9	119,9
A6 A(3,2,7)	119,3	119,3	119,5	119,4
A7 A(2,3,4)	120,3	120,3	120,4	120,4
A8 A(2,3,8)	119,6	119,6	119,5	119,6
A9 A(4,3,8)	120,1	120,1	120,1	120,1
A10 A(3,4,5)	119,5	119,5	119,4	119,4
A11 A(3,4,9)	120,2	120,2	120,3	120,3
A12 A(5,4,9)	120,3	120,3	120,3	120,3
A13 A(4,5,6)	120,4	120,4	120,5	120,5
A14 A(4,5,10)	120,1	120,1	120,0	120,0
A15 A(6,5,10)	119,5	119,5	119,5	119,5
A16 A(1,6,5)	120,4	120,4	120,5	120,5
A17 A(1,6,11)	119,6	119,6	119,4	119,4
A18 A(5,6,11)	119,9	119,9	120,1	120,1
A19 A(1,12,13)	133,4	133,2	133,8	133,7
A20 A(1,12,14)	117,1	117,2	117,3	117,3
A21 A(13,12,14)	109,5	109,6	109,0	109,0
A22 A(12,13,15)	106,3	106,2	106,9	106,9
A23 A(12,13,16)	126,9	126,9	126,4	126,4
A24 A(15,13,16)	126,8	126,9	126,7	126,7
A25 A(12,14,17)	108,0	108,0	107,7	107,7
A26 A(13,15,17)	105,7	105,6	106,2	106,2
A27 A(13,15,18)	127,6	127,6	127,3	127,4
A28 A(17,15,18)	126,7	126,7	126,5	126,5
A29 A(14,17,15)	110,5	110,5	110,3	110,3
A30 A(14,17,19)	116,3	116,4	115,9	115,9
A31 A(15,17,19)	133,2	133,1	133,9	133,8

EK-1 (devam) 2-fenilfuran molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik Yapısal Parametreler	HF' de denge durumu		DFT(B3LYP) 'de denge durumu	
	6-31++G(d,p)	6-311++G(d,p)	6-31++G(d,p)	6-311++G(d,p)
D1 D(6,1,2,3)	0,0	0,0	0,0	0,0
D2 D(6,1,2,7)	180,0	180,0	180,0	180,0
D3 D(12,1,2,3)	180,0	180,0	180,0	180,0
D4 D(12,1,2,7)	0,0	0,0	0,0	0,0
D5 D(2,1,6,5)	0,0	0,0	0,0	0,0
D6 D(2,1,6,11)	180,0	180,0	180,0	180,0
D7 D(12,1,6,5)	180,0	180,0	180,0	180,0
D8 D(12,1,6,11)	0,0	0,0	0,0	0,0
D9 D(2,1,12,13)	0,1	0,0	0,0	0,0
D10 D(2,1,12,14)	180,0	180,0	180,0	180,0
D11 D(6,1,12,13)	180,0	180,0	180,0	180,0
D12 D(6,1,12,14)	0,0	0,1	0,0	0,0
D13 D(1,2,3,4)	0,0	0,0	0,0	0,0
D14 D(1,2,3,8)	180,0	180,0	180,0	180,0
D15 D(7,2,3,4)	180,0	180,0	180,0	180,0
D16 D(7,2,3,8)	0,0	0,0	0,0	0,0
D17 D(2,3,4,5)	0,0	0,0	0,0	0,0
D18 D(2,3,4,9)	180,0	180,0	180,0	180,0
D19 D(8,3,4,5)	180,0	180,0	180,0	180,0
D20 D(8,3,4,9)	0,0	0,0	0,0	0,0
D21 D(3,4,5,6)	0,0	0,0	0,0	0,0
D22 D(3,4,5,10)	180,0	180,0	180,0	180,0
D23 D(9,4,5,6)	180,0	180,0	180,0	180,0
D24 D(9,4,5,10)	0,0	0,0	0,0	0,0
D25 D(4,5,6,1)	0,0	0,0	0,0	0,0
D26 D(4,5,6,11)	180,0	180,0	180,0	180,0
D27 D(10,5,6,1)	180,0	180,0	180,0	180,0
D28 D(10,5,6,11)	0,0	0,0	0,0	0,0
D29 D(1,12,13,15)	180,0	180,0	180,0	180,0
D30 D(1,12,13,16)	0,0	0,0	0,0	0,0
D31 D(14,12,13,15)	0,0	0,0	0,0	0,0
D32 D(14,12,13,16)	180,0	180,0	180,0	180,0
D33 D(1,12,14,17)	180,0	180,0	180,0	180,0
D34 D(13,12,14,17)	0,0	0,0	0,0	0,0
D35 D(12,13,15,17)	0,0	0,1	0,0	0,0
D36 D(12,13,15,18)	180,0	180,0	180,0	180,0
D37 D(16,13,15,17)	180,0	180,0	180,0	180,0
D38 D(16,13,15,18)	0,0	0,0	0,0	0,0
D39 D(12,14,17,15)	0,0	0,0	0,0	0,0
D40 D(12,14,17,19)	180,0	180,0	180,0	180,0
D41 D(13,15,17,14)	0,0	0,0	0,0	0,0
D42 D(13,15,17,19)	180,0	180,0	180,0	180,0
D43 D(18,15,17,14)	180,0	180,0	180,0	180,0
D44 D(18,15,17,19)	0,0	0,0	0,0	0,0

EK-2. 2-(2-klorofenil)furan molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik Yapısal Parametreler	HF 'de denge durumu		DFT(B3LYP) 'de denge durumu	
	6 31++G(d,p)	6 311++G(d,p)	6 31++G(d,p)	6 311++G(d,p)
R1 R(1,2)	1,3947	1,3932	1,4114	1,4082
R2 R(1,6)	1,3999	1,3986	1,4147	1,4119
R3 R(1,11)	1,4736	1,4732	1,4635	1,4615
R4 R(2,3)	1,3868	1,3849	1,3963	1,3925
R5 R(2,19)	1,7458	1,7471	1,7626	1,7629
R6 R(3,4)	1,3821	1,3802	1,393	1,3894
R7 R(3,7)	1,0736	1,0733	1,0844	1,0824
R8 R(4,5)	1,3868	1,385	1,3972	1,3936
R9 R(4,8)	1,075	1,0749	1,0855	1,0835
R10 R(5,6)	1,3807	1,3789	1,3898	1,3861
R11 R(5,9)	1,075	1,0749	1,0857	1,0838
R12 R(6,10)	1,0726	1,0722	1,0831	1,0811
R13 R(11,12)	1,3489	1,347	1,3759	1,3724
R14 R(11,13)	1,3532	1,3513	1,3795	1,3775
R15 R(12,14)	1,4371	1,4379	1,4299	1,4284
R16 R(12,15)	1,067	1,0662	1,0762	1,0737
R17 R(13,16)	1,3416	1,3393	1,3604	1,3578
R18 R(14,16)	1,3407	1,338	1,3621	1,3578
R19 R(14,17)	1,0702	1,0699	1,0805	1,0783
R20 R(16,18)	1,0684	1,0684	1,0789	1,0769
A1 A(2,1,6)	117,0	116,9	116,3	116,2
A2 A(2,1,11)	125,0	125,1	125,3	125,4
A3 A(6,1,11)	117,9	117,9	118,4	118,4
A4 A(1,2,3)	121,5	121,5	121,8	121,9
A5 A(1,2,19)	122,2	122,3	122,2	122,3
A6 A(3,2,19)	116,3	116,2	116,0	115,8
A7 A(2,3,4)	120,3	120,3	120,3	120,4
A8 A(2,3,7)	119,1	119,1	118,9	118,9
A9 A(4,3,7)	120,6	120,7	120,8	120,7
A10 A(3,4,5)	119,5	119,5	119,3	119,3
A11 A(3,4,8)	119,8	119,8	119,8	119,8
A12 A(5,4,8)	120,7	120,7	120,9	120,9
A13 A(4,5,6)	119,9	119,9	120,1	120,1
A14 A(4,5,9)	120,4	120,4	120,4	120,4
A15 A(6,5,9)	119,7	119,7	119,5	119,6
A16 A(1,6,5)	121,9	121,9	122,2	122,2
A17 A(1,6,10)	118,4	118,5	118,1	118,1
A18 A(5,6,10)	119,7	119,6	119,7	119,7
A19 A(1,11,12)	135,6	135,6	136,7	136,7
A20 A(1,11,13)	115,0	115,0	114,9	114,9
A21 A(12,11,13)	109,3	109,3	108,4	108,4
A22 A(11,12,14)	106,4	106,3	107,1	107,1
A23 A(11,12,15)	126,9	127,0	126,5	126,5
A24 A(14,12,15)	126,8	126,7	126,4	126,4
A25 A(11,13,16)	108,1	108,1	107,9	107,9
A26 A(12,14,16)	105,8	105,7	106,2	106,2
A27 A(12,14,17)	127,4	127,5	127,1	127,1
A28 A(16,14,17)	126,8	126,8	126,7	126,6
A29 A(13,16,14)	110,5	110,6	110,3	110,3
A30 A(13,16,18)	116,3	116,4	115,8	115,9
A31 A(14,16,18)	133,2	133,0	133,9	133,8

EK-2(devam) 2-(2-klorofenil)furan molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik Yapısal Parametreler	HF 'de denge durumu		DFT(B3LYP) 'de denge durumu	
	6 31++G(d,p)	6 311++G(d,p)	6 31++G(d,p)	6 311++G(d,p)
D1 D(6,1,2,3)	0,5	0,5	0,2	0,0
D2 D(6,1,2,19)	178,5	178,5	179,3	180,0
D3 D(11,1,2,3)	179,4	179,6	179,8	180,0
D4 D(11,1,2,19)	1,6	1,4	0,6	0,0
D5 D(2,1,6,5)	0,4	0,4	0,1	0,0
D6 D(2,1,6,10)	179,8	179,8	180,0	180,0
D7 D(11,1,6,5)	179,5	179,6	179,9	180,0
D8 D(11,1,6,10)	0,3	0,2	0,1	0,0
D9 D(2,1,11,12)	27,3	25,1	8,1	0,0
D10 D(2,1,11,13)	156,5	158,4	173,3	180,0
D11 D(6,1,11,12)	152,6	154,9	172,0	180,0
D12 D(6,1,11,13)	23,6	21,5	6,6	0,0
D13 D(1,2,3,4)	0,3	0,2	0,2	0,0
D14 D(1,2,3,7)	179,9	179,8	180,0	180,0
D15 D(19,2,3,4)	178,8	178,9	179,4	180,0
D16 D(19,2,3,7)	0,8	0,8	0,4	0,0
D17 D(2,3,4,5)	0,1	0,2	0,0	0,0
D18 D(2,3,4,8)	179,9	180,0	180,0	180,0
D19 D(7,3,4,5)	179,5	179,5	179,8	180,0
D20 D(7,3,4,8)	0,4	0,3	0,2	0,0
D21 D(3,4,5,6)	0,3	0,2	0,1	0,0
D22 D(3,4,5,9)	180,0	179,9	180,0	180,0
D23 D(8,4,5,6)	179,9	180,0	179,9	180,0
D24 D(8,4,5,9)	0,1	0,1	0,0	0,0
D25 D(4,5,6,1)	0,0	0,1	0,0	0,0
D26 D(4,5,6,10)	179,8	179,9	179,8	180,0
D27 D(9,5,6,1)	179,8	179,8	179,9	180,0
D28 D(9,5,6,10)	0,0	0,0	0,1	0,0
D29 D(1,11,12,14)	176,5	176,7	178,7	180,0
D30 D(1,11,12,15)	2,8	2,6	0,9	0,0
D31 D(13,11,12,14)	0,2	0,1	0,0	0,0
D32 D(13,11,12,15)	179,1	179,2	179,6	180,0
D33 D(1,11,13,16)	177,4	177,6	179,1	180,0
D34 D(12,11,13,16)	0,2	0,2	0,0	0,0
D35 D(11,12,14,16)	0,0	0,0	0,0	0,0
D36 D(11,12,14,17)	179,9	179,9	180,0	180,0
D37 D(15,12,14,16)	179,2	179,3	179,7	180,0
D38 D(15,12,14,17)	0,8	0,8	0,4	0,0
D39 D(11,13,16,14)	0,2	0,2	0,1	0,0
D40 D(11,13,16,18)	179,4	179,4	179,7	180,0
D41 D(12,14,16,13)	0,1	0,1	0,0	0,0
D42 D(12,14,16,18)	179,4	179,4	179,7	180,0
D43 D(17,14,16,13)	180,0	180,0	180,0	180,0
D44 D(17,14,16,18)	0,5	0,5	0,3	0,0

EK-3 2-(2-florofenil)furan molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik Yapısal Parametreler	HF 'de denge durumu		DFT(B3LYP) 'de denge durumu	
	6-31++G(d,p)	6-311++G(d,p)	6-31++G(d,p)	6-311++G(d,p)
R1 R(1,2)	1,3879	1,3864	1,4029	1,4002
R2 R(1,6)	1,3968	1,3949	1,4107	1,4076
R3 R(1,12)	1,4671	1,4668	1,4569	1,4549
R4 R(2,3)	1,3768	1,3751	1,3865	1,383
R5 R(2,7)	1,3348	1,3286	1,363	1,3585
R6 R(3,4)	1,3854	1,3835	1,3966	1,393
R7 R(3,8)	1,0741	1,0741	1,0847	1,0829
R8 R(4,5)	1,3872	1,3852	1,3984	1,3945
R9 R(4,9)	1,0749	1,0748	1,0854	1,0834
R10 R(5,6)	1,384	1,3821	1,393	1,3894
R11 R(5,10)	1,0748	1,0747	1,0855	1,0836
R12 R(6,11)	1,0729	1,0726	1,0839	1,0821
R13 R(12,13)	1,3498	1,3476	1,3742	1,3706
R14 R(12,14)	1,3507	1,3486	1,3756	1,3732
R15 R(13,15)	1,4376	1,4385	1,4306	1,4289
R16 R(13,16)	1,0674	1,067	1,0781	1,0758
R17 R(14,17)	1,3435	1,3413	1,3629	1,3608
R18 R(15,17)	1,3407	1,3382	1,363	1,3586
R19 R(15,18)	1,0703	1,0699	1,0806	1,0783
R20 R(17,19)	1,0684	1,0683	1,0787	1,0767
A1 A(2,1,6)	116,6	116,7	116,2	116,3
A2 A(2,1,12)	122,4	122,4	122,4	122,4
A3 A(6,1,12)	120,9	120,9	121,3	121,3
A4 A(1,2,3)	123,2	123,0	123,4	123,3
A5 A(1,2,7)	119,2	119,3	119,0	119,0
A6 A(3,2,7)	117,7	117,7	117,6	117,7
A7 A(2,3,4)	119,0	119,1	119,0	119,1
A8 A(2,3,8)	119,1	119,0	119,0	119,0
A9 A(4,3,8)	122,0	121,9	122,0	121,9
A10 A(3,4,5)	119,7	119,7	119,6	119,6
A11 A(3,4,9)	119,8	119,8	119,8	119,8
A12 A(5,4,9)	120,5	120,5	120,6	120,6
A13 A(4,5,6)	120,1	120,1	120,4	120,3
A14 A(4,5,10)	120,2	120,2	120,1	120,1
A15 A(6,5,10)	119,6	119,7	119,5	119,5
A16 A(1,6,5)	121,4	121,4	121,5	121,5
A17 A(1,6,11)	118,7	118,7	118,4	118,4
A18 A(5,6,11)	119,9	119,9	120,1	120,1
A19 A(1,12,13)	134,6	134,4	134,9	134,8
A20 A(1,12,14)	115,8	115,9	116,1	116,2
A21 A(13,12,14)	109,6	109,7	109,0	109,1
A22 A(12,13,15)	106,2	106,1	106,8	106,8
A23 A(12,13,16)	126,6	126,6	126,0	126,0
A24 A(15,13,16)	127,2	127,3	127,3	127,3
A25 A(12,14,17)	107,9	107,9	107,6	107,5
A26 A(13,15,17)	105,8	105,8	106,3	106,3
A27 A(13,15,18)	127,4	127,5	127,2	127,2
A28 A(17,15,18)	126,7	126,7	126,5	126,5
A29 A(14,17,15)	110,5	110,6	110,3	110,3
A30 A(14,17,19)	116,3	116,4	115,8	115,8
A31 A(15,17,19)	133,2	133,1	133,9	133,8

EK-3 (devam) 2-(2-florofenil) furan molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik Yapısal Parametreler	HF 'de denge durumu		DFT(B3LYP) 'de denge durumu	
	6-31++G(d,p)	6-311++G(d,p)	6-31++G(d,p)	6-311++G(d,p)
D1 D(6,1,2,3)	0,0	0,0	0,0	0,0
D2 D(6,1,2,7)	180,0	180,0	180,0	180,0
D3 D(12,1,2,3)	180,0	180,0	180,0	180,0
D4 D(12,1,2,7)	0,0	0,0	0,0	0,0
D5 D(2,1,6,5)	0,0	0,0	0,0	0,0
D6 D(2,1,6,11)	180,0	180,0	180,0	180,0
D7 D(12,1,6,5)	180,0	180,0	180,0	180,0
D8 D(12,1,6,11)	0,0	0,0	0,0	0,0
D9 D(2,1,12,13)	0,0	0,0	0,0	0,0
D10 D(2,1,12,14)	180,0	180,0	180,0	180,0
D11 D(6,1,12,13)	180,0	180,0	180,0	180,0
D12 D(6,1,12,14)	0,0	0,0	0,0	0,0
D13 D(1,2,3,4)	0,0	0,0	0,0	0,0
D14 D(1,2,3,8)	180,0	180,0	180,0	180,0
D15 D(7,2,3,4)	180,0	180,0	180,0	180,0
D16 D(7,2,3,8)	0,0	0,0	0,0	0,0
D17 D(2,3,4,5)	0,0	0,0	0,0	0,0
D18 D(2,3,4,9)	180,0	180,0	180,0	180,0
D19 D(8,3,4,5)	180,0	180,0	180,0	180,0
D20 D(8,3,4,9)	0,0	0,0	0,0	0,0
D21 D(3,4,5,6)	0,0	0,0	0,0	0,0
D22 D(3,4,5,10)	180,0	180,0	180,0	180,0
D23 D(9,4,5,6)	180,0	180,0	180,0	180,0
D24 D(9,4,5,10)	0,0	0,0	0,0	0,0
D25 D(4,5,6,1)	0,0	0,0	0,0	0,0
D26 D(4,5,6,11)	180,0	180,0	180,0	180,0
D27 D(10,5,6,1)	180,0	180,0	180,0	180,0
D28 D(10,5,6,11)	0,0	0,0	0,0	0,0
D29 D(1,12,13,15)	180,0	180,0	180,0	180,0
D30 D(1,12,13,16)	0,0	0,0	0,0	0,0
D31 D(14,12,13,15)	0,0	0,0	0,0	0,0
D32 D(14,12,13,16)	180,0	180,0	180,0	180,0
D33 D(1,12,14,17)	180,0	180,0	180,0	180,0
D34 D(13,12,14,17)	0,0	0,0	0,0	0,0
D35 D(12,13,15,17)	0,0	0,0	0,0	0,0
D36 D(12,13,15,18)	180,0	180,0	180,0	180,0
D37 D(16,13,15,17)	180,0	180,0	180,0	180,0
D38 D(16,13,15,18)	0,0	0,0	0,0	0,0
D39 D(12,14,17,15)	0,0	0,0	0,0	0,0
D40 D(12,14,17,19)	180,0	180,0	180,0	180,0
D41 D(13,15,17,14)	0,0	0,0	0,0	0,0
D42 D(13,15,17,19)	180,0	180,0	180,0	180,0
D43 D(18,15,17,14)	180,0	180,0	180,0	180,0
D44 D(18,15,17,19)	0,0	0,0	0,0	0,0

EK-4 2-(4-klorofenil)furan molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik Yapısal Parametreler	HF 'de denge durumu		DFT(B3LYP) 'de denge durumu	
	6-31++G(d,p)	6-311++G(d,p)	6-31++G(d,p)	6-311++G(d,p)
R1 R(1,2)	1,3939	1,3922	1,4073	1,4042
R2 R(1,6)	1,3924	1,3906	1,4068	1,4036
R3 R(1,10)	1,4686	1,4681	1,4585	1,4567
R4 R(2,3)	1,3827	1,3809	1,3924	1,3889
R5 R(2,19)	1,0744	1,0741	1,0853	1,0834
R6 R(3,4)	1,3847	1,3829	1,3961	1,3923
R7 R(3,7)	1,0737	1,0735	1,0845	1,0825
R8 R(4,5)	1,3822	1,3801	1,3949	1,391
R9 R(4,18)	1,7427	1,7441	1,7581	1,7582
R10 R(5,6)	1,3856	1,3841	1,3939	1,3905
R11 R(5,8)	1,0738	1,0736	1,0846	1,0826
R12 R(6,9)	1,0731	1,0729	1,0842	1,0823
R13 R(10,11)	1,3493	1,3469	1,3735	1,3697
R14 R(10,12)	1,3473	1,3452	1,3729	1,3707
R15 R(11,13)	1,4375	1,4385	1,4306	1,4292
R16 R(11,14)	1,0697	1,0693	1,0802	1,0779
R17 R(12,15)	1,3444	1,3423	1,3638	1,3614
R18 R(13,15)	1,3411	1,3386	1,3633	1,3589
R19 R(13,16)	1,0702	1,0698	1,0805	1,0783
R20 R(15,17)	1,0682	1,0682	1,0786	1,0767
A1 A(2,1,6)	118,6	118,6	118,3	118,3
A2 A(2,1,10)	120,7	120,7	120,6	120,6
A3 A(6,1,10)	120,7	120,7	121,1	121,1
A4 A(1,2,3)	121,0	121,0	121,1	121,1
A5 A(1,2,19)	120,2	120,2	120,0	120,0
A6 A(3,2,19)	118,8	118,8	118,9	118,8
A7 A(2,3,4)	119,4	119,4	119,3	119,3
A8 A(2,3,7)	120,4	120,5	120,5	120,5
A9 A(4,3,7)	120,2	120,2	120,2	120,1
A10 A(3,4,5)	120,7	120,8	120,8	120,8
A11 A(3,4,18)	119,6	119,5	119,6	119,5
A12 A(5,4,18)	119,7	119,7	119,7	119,6
A13 A(4,5,6)	119,5	119,4	119,5	119,4
A14 A(4,5,8)	120,1	120,1	120,1	120,1
A15 A(6,5,8)	120,4	120,4	120,4	120,5
A16 A(1,6,5)	120,8	120,8	121,0	121,0
A17 A(1,6,9)	119,7	119,7	119,5	119,5
A18 A(5,6,9)	119,4	119,4	119,5	119,5
A19 A(1,10,11)	133,4	133,3	133,8	133,7
A20 A(1,10,12)	117,0	117,1	117,2	117,2
A21 A(11,10,12)	109,6	109,7	109,0	109,0
A22 A(10,11,13)	106,2	106,2	106,9	106,9
A23 A(10,11,14)	127,0	127,0	126,5	126,5
A24 A(13,11,14)	126,8	126,9	126,6	126,6
A25 A(10,12,15)	108,0	108,0	107,7	107,6
A26 A(11,13,15)	105,7	105,7	106,2	106,2
A27 A(11,13,16)	127,5	127,6	127,3	127,4
A28 A(15,13,16)	126,7	126,7	126,5	126,5
A29 A(12,15,13)	110,4	110,5	110,3	110,3
A30 A(12,15,17)	116,4	116,4	115,9	115,9
A31 A(13,15,17)	133,2	133,0	133,9	133,8

EK-4 (devam) 2-(4-klorofenil)furan molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik Yapısal Parametreler	HF 'de denge durumu		DFT(B3LYP) 'de denge durumu	
	6-31++G(d,p)	6-311++G(d,p)	6-31++G(d,p)	6-311++G(d,p)
D1 D(6,1,2,3)	0,0	0,0	0,0	0,0
D2 D(6,1,2,19)	180,0	180,0	180,0	180,0
D3 D(10,1,2,3)	180,0	180,0	180,0	180,0
D4 D(10,1,2,19)	0,0	0,0	0,0	0,0
D5 D(2,1,6,5)	0,0	0,0	0,0	0,0
D6 D(2,1,6,9)	180,0	180,0	180,0	180,0
D7 D(10,1,6,5)	180,0	180,0	180,0	180,0
D8 D(10,1,6,9)	0,0	0,0	0,0	0,0
D9 D(2,1,10,11)	0,0	0,0	0,0	0,0
D10 D(2,1,10,12)	180,0	180,0	180,0	180,0
D11 D(6,1,10,11)	180,0	180,0	180,0	180,0
D12 D(6,1,10,12)	0,0	0,0	0,0	0,0
D13 D(1,2,3,4)	0,0	0,0	0,0	0,0
D14 D(1,2,3,7)	180,0	180,0	180,0	180,0
D15 D(19,2,3,4)	180,0	180,0	180,0	180,0
D16 D(19,2,3,7)	0,0	0,0	0,0	0,0
D17 D(2,3,4,5)	0,0	0,0	0,0	0,0
D18 D(2,3,4,18)	180,0	180,0	180,0	180,0
D19 D(7,3,4,5)	180,0	180,0	180,0	180,0
D20 D(7,3,4,18)	0,0	0,0	0,0	0,0
D21 D(3,4,5,6)	0,0	0,0	0,0	0,0
D22 D(3,4,5,8)	180,0	180,0	180,0	180,0
D23 D(18,4,5,6)	180,0	180,0	180,0	180,0
D24 D(18,4,5,8)	0,0	0,0	0,0	0,0
D25 D(4,5,6,1)	0,0	0,0	0,0	0,0
D26 D(4,5,6,9)	180,0	180,0	180,0	180,0
D27 D(8,5,6,1)	180,0	180,0	180,0	180,0
D28 D(8,5,6,9)	0,0	0,0	0,0	0,0
D29 D(1,10,11,13)	180,0	180,0	180,0	180,0
D30 D(1,10,11,14)	0,0	0,0	0,0	0,0
D31 D(12,10,11,13)	0,0	0,0	0,0	0,0
D32 D(12,10,11,14)	180,0	180,0	180,0	180,0
D33 D(1,10,12,15)	180,0	180,0	180,0	180,0
D34 D(11,10,12,15)	0,0	0,0	0,0	0,0
D35 D(10,11,13,15)	0,0	0,0	0,0	0,0
D36 D(10,11,13,16)	180,0	180,0	180,0	180,0
D37 D(14,11,13,15)	180,0	180,0	180,0	180,0
D38 D(14,11,13,16)	0,0	0,0	0,0	0,0
D39 D(10,12,15,13)	0,0	0,0	0,0	0,0
D40 D(10,12,15,17)	180,0	180,0	180,0	180,0
D41 D(11,13,15,12)	0,0	0,0	0,0	0,0
D42 D(11,13,15,17)	180,0	180,0	180,0	180,0
D43 D(16,13,15,12)	180,0	180,0	180,0	180,0
D44 D(16,13,15,17)	0,0	0,0	0,0	0,0

EK-5 2-(4-florofenil)furan molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik Yapısal Parametreler	HF 'de denge durumu		DFT(B3LYP) 'de denge durumu	
	631++G(d,p)	6311++G(d,p)	631++G(d,p)	6311++G(d,p)
R1 R(1,2)	1,3926	1,3905	1,4076	1,4042
R2 R(1,6)	1,3947	1,3929	1,4078	1,4046
R3 R(1,11)	1,4692	1,4686	1,4593	1,4577
R4 R(2,3)	1,3865	1,3848	1,3948	1,3912
R5 R(2,7)	1,0731	1,0729	1,0841	1,0821
R6 R(3,4)	1,3763	1,3745	1,3888	1,3852
R7 R(3,8)	1,0741	1,074	1,0846	1,0829
R8 R(4,5)	1,3797	1,3783	1,3904	1,3871
R9 R(4,19)	1,3331	1,3268	1,3601	1,3561
R10 R(5,6)	1,3829	1,3808	1,3932	1,3894
R11 R(5,9)	1,074	1,074	1,0845	1,0828
R12 R(6,10)	1,0744	1,0742	1,0853	1,0833
R13 R(11,12)	1,3489	1,3466	1,3733	1,3693
R14 R(11,13)	1,3473	1,3452	1,3725	1,3705
R15 R(12,14)	1,4382	1,4391	1,4308	1,4297
R16 R(12,15)	1,0698	1,0694	1,0802	1,0779
R17 R(13,16)	1,3457	1,3436	1,3649	1,3625
R18 R(14,16)	1,3405	1,338	1,363	1,3585
R19 R(14,17)	1,0703	1,0699	1,0806	1,0783
R20 R(16,18)	1,0682	1,0681	1,0785	1,0766
A1 A(2,1,6)	118,6	118,6	118,5	118,4
A2 A(2,1,11)	120,7	120,7	121,0	121,0
A3 A(6,1,11)	120,7	120,7	120,5	120,6
A4 A(1,2,3)	120,9	120,9	121,0	121,0
A5 A(1,2,7)	119,6	119,7	119,5	119,5
A6 A(3,2,7)	119,4	119,4	119,6	119,6
A7 A(2,3,4)	118,7	118,8	118,7	118,8
A8 A(2,3,8)	121,4	121,4	121,5	121,4
A9 A(4,3,8)	119,9	119,8	119,9	119,8
A10 A(3,4,5)	122,1	121,9	122,2	122,0
A11 A(3,4,19)	119,1	119,2	119,0	119,0
A12 A(5,4,19)	118,8	118,9	118,9	118,9
A13 A(4,5,6)	118,6	118,7	118,6	118,7
A14 A(4,5,9)	119,9	119,8	119,9	119,8
A15 A(6,5,9)	121,5	121,5	121,5	121,5
A16 A(1,6,5)	121,1	121,1	121,1	121,1
A17 A(1,6,10)	120,1	120,1	120,0	120,0
A18 A(5,6,10)	118,8	118,8	118,9	118,9
A19 A(1,11,12)	133,5	133,3	133,8	133,8
A20 A(1,11,13)	116,9	117,0	117,2	117,2
A21 A(12,11,13)	109,6	109,7	109,1	109,0
A22 A(11,12,14)	106,2	106,1	106,9	106,8
A23 A(11,12,15)	127,0	127,0	126,5	126,5
A24 A(14,12,15)	126,8	126,9	126,6	126,6
A25 A(11,13,16)	108,0	108,0	107,6	107,6
A26 A(12,14,16)	105,7	105,7	106,2	106,2
A27 A(12,14,17)	127,5	127,6	127,3	127,4
A28 A(16,14,17)	126,7	126,7	126,5	126,4
A29 A(13,16,14)	110,4	110,5	110,2	110,2
A30 A(13,16,18)	116,3	116,4	115,9	115,9
A31 A(14,16,18)	133,3	133,1	133,9	133,8

EK-5 (devam) 2-(4-florofenil)furan molekülünün denge durumu geometrilerinin yapı parametreleri

Geometrik Yapısal Parametreler	HF 'de denge durumu		DFT(B3LYP) 'de denge durumu	
	631++G(d,p)	6311++G(d,p)	631++G(d,p)	6311++G(d,p)
D2 D(6,1,2,7)	180,0	180,0	180,0	180,0
D3 D(11,1,2,3)	180,0	180,0	180,0	180,0
D4 D(11,1,2,7)	0,0	0,0	0,0	0,0
D5 D(2,1,6,5)	0,0	0,0	0,0	0,0
D6 D(2,1,6,10)	180,0	180,0	180,0	180,0
D7 D(11,1,6,5)	180,0	180,0	180,0	180,0
D8 D(11,1,6,10)	0,0	0,0	0,0	0,0
D9 D(2,1,11,12)	180,0	180,0	180,0	180,0
D10 D(2,1,11,13)	0,0	0,0	0,0	0,0
D11 D(6,1,11,12)	0,0	0,0	0,0	0,0
D12 D(6,1,11,13)	180,0	180,0	180,0	180,0
D13 D(1,2,3,4)	0,0	0,0	0,0	0,0
D14 D(1,2,3,8)	180,0	180,0	180,0	180,0
D15 D(7,2,3,4)	180,0	180,0	180,0	180,0
D16 D(7,2,3,8)	0,0	0,0	0,0	0,0
D17 D(2,3,4,5)	0,0	0,0	0,0	0,0
D18 D(2,3,4,19)	180,0	180,0	180,0	180,0
D19 D(8,3,4,5)	180,0	180,0	180,0	180,0
D20 D(8,3,4,19)	0,0	0,0	0,0	0,0
D21 D(3,4,5,6)	0,0	0,0	0,0	0,0
D22 D(3,4,5,9)	180,0	180,0	180,0	180,0
D23 D(19,4,5,6)	180,0	180,0	180,0	180,0
D24 D(19,4,5,9)	0,0	0,0	0,0	0,0
D25 D(4,5,6,1)	0,0	0,0	0,0	0,0
D26 D(4,5,6,10)	180,0	180,0	180,0	180,0
D27 D(9,5,6,1)	180,0	180,0	180,0	180,0
D28 D(9,5,6,10)	0,0	0,0	0,0	0,0
D29 D(1,11,12,14)	180,0	180,0	180,0	180,0
D30 D(1,11,12,15)	0,0	0,0	0,0	0,0
D31 D(13,11,12,14)	0,0	0,0	0,0	0,0
D32 D(13,11,12,15)	180,0	180,0	180,0	180,0
D33 D(1,11,13,16)	180,0	180,0	180,0	180,0
D34 D(12,11,13,16)	0,0	0,0	0,0	0,0
D35 D(11,12,14,16)	0,0	0,0	0,0	0,0
D36 D(11,12,14,17)	180,0	180,0	180,0	180,0
D37 D(15,12,14,16)	180,0	180,0	180,0	180,0
D38 D(15,12,14,17)	0,0	0,0	0,0	0,0
D39 D(11,13,16,14)	0,0	0,0	0,0	0,0
D40 D(11,13,16,18)	180,0	180,0	180,0	180,0
D41 D(12,14,16,13)	0,0	0,0	0,0	0,0
D42 D(12,14,16,18)	180,0	180,0	180,0	180,0
D43 D(17,14,16,13)	180,0	180,0	180,0	180,0
D44 D(17,14,16,18)	0,0	0,0	0,0	0,0