

Présenté par Siham Naima Derrar  
Laboratoire de Microscopie, Microanalyse de la matière et Spectroscopie  
Moléculaire (L2MSM), Faculté des Sciences, BP 89, Rue LARBI BEN MHIDI 22000  
UDL SIDI BEL ABBES  
Email : derrarsiham@yahoo.fr

## ETUDE QUANTIQUE DE PROPRIETES DE MOLECULES ORGANIQUES

**Résumé:** Dans ce mémoire, une étude quantique a été menée quelques molécules organiques. Une analyse structurale, spectrale et des réponses non-linéaires a été établie. A ce titre, quelques molécules de type push/pull ont été étudiées, l'effet de la longueur de la chaîne alkyle et de la substitution des groupements terminaux a été entrepris, par la suite, les monomères respectifs ont été réalisées et on a procédé par le greffage sur des copolymères. Une étude spectrale des chromophores par différentes bases et méthodes de calcul a été réalisée, ou des spectres IR expérimentaux ont été comparés à nos spectres IR théoriques. La meilleure fonctionnelle combinée à la base la plus raisonnable ont été sélectionnées pour ce genre de calcul. La dimerisation de l'un de ces chromophores est entreprise pour élucider l'impact de la géométrie du système sur la réponse non-linéaire. Enfin, la première hyperpolarisabilité de biomolécules candidates pour être sondes dans l'optique non-linéaire a été calculée; le Tryptophane notamment a été combiné à d'autres acides aminés pour confirmer sa capacité à être une sonde dans l'imagerie biologique.

**Summary :** In this memory, a quantum study has been carried out on some organic molecules. A structural and a spectral analysis but also nonlinear response has been established. In fact, some push/pull molecules have been studied, the alkyl chain length effect and the substitution of the terminal groups has been done; then, the respective monomers and their grafting on copolymers have been established. A spectral study of some chromophores by different methods and bases has been completed, where the experimental IR spectra have been compared to our theoretical IR spectra. The best functional combined to the most suitable basis set have been selected to perform such kind of calculations. The dimerisation of one of these chromophores has been achieved to better elucidate the system's geometry impact on the nonlinear response. Finally, the first hyperpolarizability of some biomolecules devoted to be probes molecules in nonlinear optics has been calculated; namely Tryptophan has been combined to other amino acids to confirm its ability for the use in biologic imaging.

في هذه المذكرة قمنا بإجراء دراسة مكانية كمية لبعض المركبات العضوية حيث تم تحليل بنيوي ملخص:  
هندسي بياني و تحليل اجابة الفيزياء البصرية غير الخطية. كما تم تركيب بعض الجزيئات بوش بول و فحص  
تأثير السلسلة الالكيلية و تغيير الجذور النهائية. إضافة الى المقارنة التي تمت بين الأطياف تحت الحمراء لبعض  
الكروموفورات النظرية و التجريبية استنادا على النتائج الأولية قمنا باستعمال أحسن وظيفة هجينة و أحسن  
البعض المكونات البيولوجية قاعدة مدارات انجاز هذه الحسابات و أخيرا التقطيب العالي من الدرجة الأولى قابلة  
الاستعمال كمسبار في الفيزياء البصرية غير الخطية.

**Mots clés:** première hyperpolarisabilité, chromophore, imagerie biologique, push/pull