

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ



دانشگاه حکیم سبزواری

دانشکده‌ی علوم پایه

پایان نامه جهت دریافت درجه‌ی کارشناسی ارشد (M.Sc)

فیزیک گرایش حالت جامد

بررسی خواص ساختاری بلوری  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$

برای کاربردهای ایتوالکتریکی

استاد راهنما:

دکتر حسین اصغر رهنمای علی آباد

استاد مشاور:

دکتر جواد باعدی

پژوهشگر:

زهرا مجردی

(مهر 1392)



## سوگندنامه دانش آموختگان دانشگاه حکیم سبزواری

به نام خداوند جان و خرد  
کزین برتر اندیشه بر نگذرد

اینک که به خواست آفریدگار پاک، کوشش خویش و بهره گیری از دانش استادان و سرمایه های مادی و معنوی این مرز و بوم، توشه ای از دانش و خرد گردآورده ام، در پیشگاه خداوند بزرگ سوگند یاد می کنم که در به کارگیری دانش خویش، همواره بر راه راست و درست گام بردارم. خداوند بزرگ، شما شاهدان، دانشجویان و دیگر حاضران را به عنوان داورانی امین گواه می گیرم که از همه دانش و توان خود برای گسترش مرزهای دانش بهره گیرم و از هیچ کوششی برای تبدیل جهان به جایی بهتر برای زیستن، دریغ نورزم. پیمان می بندم که همواره کرامت انسانی را در نظر داشته باشم و هموعان خود را در هر زمان و مکان تا سر حد امکان یاری دهم. سوگند می خورم که در به کارگیری دانش خویش به کاری که با راه و رسم انسانی، آیین پرهیزگاری، شرافت و اصول اخلاقی برخاسته از ادیان بزرگ الهی، به ویژه دین مبین اسلام، مبادینت دارد دست نیازم. همچنین در سایه اصول جهان شمول انسانی و اسلامی، پیمان می بندم از هیچ کوششی برای آبادانی و سرافرازی میهن و هم میهنانم فروگذاری نکنم و خداوند بزرگ را به یاری طلبم تا همواره در پیشگاه او و در برابر وجدان بیدار خویش و ملت سرافراز، بر این پیمان تا ابد استوار بمانم.

زهره مجردی

## مجوز بهره برداری از پایان نامه

بهره برداری از این پایان نامه در چهار چوب مقررات کتابخانه و با توجه به محدودیتی

که توسط استاد راهنما به شرح زیر تعیین می شود بلامانع است:

- بهره برداری از این پایان نامه برای همگان بلامانع است.
- بهره برداری از این پایان نامه با اخذ مجوز از استاد راهنما بلامانع است.
- بهره برداری از این پایان نامه تا تاریخ ..... ممنوع است.

استاد راهنما : استاد راهنمای اول

تاریخ :

امضاء:

## تاییدیه‌ی صحت و اصالت نتایج

اینجانب زهرا مجردی به شماره دانشجویی ۹۰۱۳۷۳۲۰۶۵ رشته فیزیک (حالت جامد) مقطع تحصیلی کارشناسی ارشد تأیید می‌نمایم که کلیه‌ی نتایج این پایان‌نامه حاصل کار اینجانب و بدون هرگونه دخل و تصرف و موارد نسخه برداری شده از آثار دیگران را با ذکر کامل مشخصات منبع ذکر کرده‌ام در صورت اثبات خلاف مندرجات فوق به تشخیص دانشگاه مطابق با ضوابط و مقررات حاکم (قانون حمایت از حقوق مولفان و مصنفان. قانون ترجمه و تکثیر کتب و نشریات و آثار صوتی ضوابط و مقررات آموزشی پژوهشی و انضباطی ...) با اینجانب رفتار خواهد شد و حق هرگونه اعتراض در خصوص احقاق حقوق مکتسب و تشخیص و تعیین تخلف و مجازات را از خویش سلب می‌نمایم. در ضمن مسئولیت هرگونه پاسخ‌گویی به اشخاص اعم از حقیقی و حقوقی و مراجع ذی‌صلاح (اعم از اداری و قضایی) به عهده اینجانب خواهد بود و دانشگاه هیچ‌گونه مسئولیتی در این خصوص نخواهد داشت.

نام و نام خانوادگی

تاریخ و امضا

## تقدیر و تشکر

سپاس خدای را که سخنوران، در ستودن او بمانند...  
و درود خدا بر محمد نبی، معلم اخلاق و رحمت...  
بدون شک جایگاه و منزلت معلم، اجل از آن است که در مقام قدردانی از زحمات بی‌شائبه‌ی او، با زبان قاصر و دست ناتوان، چیزی بنگاریم.  
این پژوهش حاصل تلاش بزرگانی است که از شاگردی در مکتب دانش و فضل آنان بهره‌ی فراوان بردم و بر خود لازم می‌دانم تشکر خالصانه‌ی خود را به استاد گرانقدر راهنما جناب آقای دکتر حسین اصغر رهنمای علی‌آباد، استاد محترم مشاور جناب آقای دکتر جواد باعدی و نیز تمامی اساتید گروه فیزیک دانشگاه حکیم سبزواری که چراغ هدایت علم و دانش را در دستم نهاده و درس اخلاق و زندگی را به من آموختند، ابراز دارم.

تقدیم با بوسه بر دستان پدرم

به او که نمی‌دانم از مهربانی اش بگویم یا مردانگی و سخاوت و سکوتش...

تقدیم به مادر عزیزتر از جانم

او که وجود پر مهرش آرامبخش لحظه‌های پر تلاطم زندگی من است.

و تقدیم به خواهران و برادران مهربانم.



دانشگاه گیلان

## فرم چکیده پایان نامه دوره تحصیلات تکمیلی

### مدیریت تحصیلات تکمیلی

نام خانوادگی دانشجو: زهرا	نام: مجردی	ش دانشجویی: 9013732065
استاد راهنما: دکتر حسین اصغر رهنمای علی آباد	استاد مشاور: دکتر جواد باعدی	
دانشکده: علوم پایه	رشته: فیزیک	گرایش: حالت جامد
مقطع: کارشناسی ارشد	تاریخ دفاع: 92/7/14	تعداد صفحات: 93
عنوان پایان نامه: بررسی خواص ساختاری بلوری $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$ برای کاربردهای اپتوالکتریکی		
کلیدواژه‌ها: ساختار نواری، گاف نواری، چگالی حالت، قاعده جمع نوسانگر.		

#### چکیده

در این پایان نامه خواص الکترونیکی و اپتیکی ترکیب  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  (L-آلانین) در حالت خالص و اثر جاننشانی اتم F با استفاده از محاسبات اصول اولیه مطالعه شده است. محاسبات به روش امواج تخت تقویت شده خطی (FL-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام شده است. خواص الکترونیکی شامل: ساختار نواری، چگالی حالت‌های کلی و چگالی ابر الکترونی محاسبه و اثر جاننشانی اتم F در گروه متیل بر ساختار خواص الکترونیکی آن بررسی شده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که این ترکیب گاف نواری غیر مستقیم به اندازه  $4/93 \text{ eV}$  دارد و با جاننشانی اتم F این مقدار کاهش می‌یابد. در نتایج قسمت اپتیکی نشان دادیم، اثر جاننشانی اتم F به جای H در گروه متیل باعث افزایش تعداد الکترون‌های موثر و بهبود خواص اپتیکی می‌گردد.

امضای استاد راهنما



## فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول : مروری برویژگی های ساختاری $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$ .....	1
1-1 مقدمه .....	2
2-1 تقسیم بندی آمینو اسیدها .....	2
3-1 خواص آمینو اسیدها .....	4
1-3-1 خاصیت اسیدی و بازی آمینو اسیدها.....	4
2-3-1 فعالیت نوری آمینو اسیدها .....	5
3-3-1 قابلیت انحلال و نقطه ی ذوب اسیدهای آمینه .....	5
4-3-1 خاصیت جذب ماوراءبنفش .....	6
4-1 آلانین چیست ؟ .....	6
5-1 ویژگی های ساختاری .....	7
6-1 کاربردهای L- آلانین .....	8

- 7-1 برخی خواص شیمیایی و فیزیکی آلانین ..... 9
- 8-1 فعالیت نوری آلانین ..... 9
- فصل دوم : روش انجام محاسبات ..... 11
- 1-2 مقدمه ..... 12
- 2-2 سیستم های بس ذره ای ..... 12
- 3-2 تقریب بورن - اپن هایمر ..... 13
- 4-2 تقریب هارتری و هارتری - فوک ..... 15
- 5-2 مدل توماس - فرمی ..... 16
- 6-2 نظریه ی تابعی چگالی ..... 17
- 7-2 قضایای هوهنبرگ - کوهن ..... 18
- 8-2 معادلات کوهن - شم ..... 19
- 9-2 تابع همبستگی - تبادلی ..... 20
- 10-2 تقریب چگالی موضعی (LDA) ..... 20
- 11-2 تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) ..... 21

- 21..... بخش دوم: مقدمه‌ای بر خواص اپتیکی مواد
- 21..... 12-2 مقدمه
- 22..... 13-2 تابع دی الکتریک
- 24..... 14-2 روابط کرامرز-کرونیک
- 25..... 15-2 طیف اتلاف انرژی الکترون
- 26 ..... فصل سوم: نتایج محاسبات الکترونیکی
- 27..... 1-3 مقدمه
- 27 ..... 2-3 بخش اول: بررسی خواص الکترونیکی  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 27..... 1-2-3 روش انجام محاسبات
- 28..... 2-2-3 بهینه سازی ثابت‌های شبکه
- 30 ..... 3-2-3 ساختار نواری
- 33..... 4-2-3 چگالی حالت‌ها
- 38..... 5-2-3 چگالی ابرالکترونی
- 39..... 3-3 بخش دوم: بررسی خواص الکترونیکی  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$

39	1-3-3 مقدمه
39	2-3-3 فلئورچیست؟
39	3-3-3 بهینه‌سازی ترکیب $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
41	4-3-3 ساختار نواری
41	5-3-3 چگالی حالت‌ها
46	6-3-3 چگالی ابر الکترونی
47	4-3-4 بخش سوم: بررسی خواص ترکیب $\text{CHF}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
47	1-4-3 بهینه‌سازی پارامترهای شبکه
48	2-4-3 ساختار نواری
49	3-4-3 چگالی حالت الکترونی
54	4-4-3 چگالی ابر الکترونی
55	فصل چهارم: نتایج محاسبات اپتیکی
56	1-4-4 مقدمه
56	2-4-4 بخش اول: بررسی خواص اپتیکی ترکیب $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$

- 56..... 1-2-4 تابع دی الکتریک
- 60..... 2-2-4 ضریب شکست
- 61..... 3-2-4 ضریب جذب
- 62..... 4-2-4 بازتابندگی
- 63..... 5-2-4 هدایت اپتیکی
- 64..... 6-2-4 شدت انتقال بین نواری
- 65..... 7-2-4 طیف اتلاف انرژی
- 66..... 8-2-4 قاعده ی جمع نوسانگر
- 67..... بخش دوم : بررسی خواص اپتیکی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 67..... 3-4 مقدمه
- 68..... 1-3-4 تابع دی الکتریک
- 70..... 2-3-4 ضریب شکست
- 71..... 3-3-4 ضریب جذب
- 72..... 4-3-4 بازتابندگی

- 73.....5-3-4هدایت اپتیکی
- 74.....6-3-4 شدت انتقال بین نواری
- 75 .....7-3-4 تابع اتلاف انرژی
- 76.....8-3-4 قاعدهی جمع نوسانگر
- 77 ..... بخش سوم: بررسی خواص اپتیکی ترکیب  $\text{CHF}_2\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 77.....4-4 مقدمه
- 77.....1-4-4 تابع دی الکتریک
- 80 .....2-4-4 ضریب شکست
- 81.....3-4-4 ضریب جذب
- 81.....4-4-4 بازتابندگی
- 82.....5-4-4 هدایت اپتیکی
- 83.....6-4-4 شدت انتقال بین نواری
- 84.....7-4-4 تابع اتلاف انرژی
- 85 .....8-4-4 قاعدهی جمع نوسانگر

87.....	نتیجه گیری
88.....	مراجع
93 .....	مقالات

فهرست جداول

8.....	جدول (1-1)
28.....	جدول (1-3)
30.....	جدول (2-3)
33.....	جدول (3-3)
40 .....	جدول (4-3)
48.....	جدول (5-3)
58.....	جدول (1-4)
59.....	جدول (2-4)
68.....	جدول (3-4)
69.....	جدول (4-4)
77.....	جدول (5-4)
77.....	جدول (6-4)



فهرست اشکال

- شکل (1-1): نحوه‌ی نام گذاری آمینو اسیدها ..... 3
- شکل (1-1): تصویر فضایی L-آلانین ..... 7
- شکل (2-1): تصویرایزومری آلانین ..... 10
- شکل (1-2): چگونگی پلاریزه شدن مواد در اثر میدان ..... 22
- شکل (1-3): نمودار تغییرات انرژی بر حسب تغییرات درصد  $\frac{e}{a}$  برای ترکیب  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 29
- شکل (2-3): ساختار نواری بلور  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 32
- شکل (3-3): چگالی حالت کلی مربوط ترکیب  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 34
- شکل (4-3): چگالی حالت‌های کلی و ساختار نواری  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 34
- شکل (5-3): مقایسه‌ی چگالی حالت‌های کلی  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  با سهم هر یک از اتم‌های تشکیل دهنده‌ی آن ..... 36
- شکل (6-3): مقایسه‌ی چگالی حالت‌های کلی و جزئی ترکیب  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 37
- شکل (7-3): چگالی ابرالکترونی ترکیب  $\text{CH}_3\text{CH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 38
- شکل (8-3): نمودار تغییرات انرژی بر حسب تغییرات درصد  $\frac{e}{a}$  برای ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 40

- 41 ..... شکل (3-9): ساختار نواری ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 42..... شکل (3-10): چگالی حالت کلی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 42..... شکل (3-11): چگالی حالت های کلی و ساختار نواری  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- شکل (3-12): مقایسه حالت های کلی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  با سهم هر یک از اتم های تشکیل دهنده آن..... 44
- 45..... شکل (3-13): مقایسه ی حالت های کلی و جزئی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 46..... شکل (3-14): چگالی ابر الکترونی  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 47..... شکل (3-15): نمودار بهینه سازی درصد  $\frac{e}{a_0^3}$  برای  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 49..... شکل (3-16): ساختار نواری ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 50..... شکل (3-17): چگالی حالت کلی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 50..... شکل (3-18): مقایسه بین چگالی حالت کلی و ساختار نواری  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- شکل (3-19): مقایسه ی چگالی حالت های کلی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  با سهم هر یک از اتم های تشکیل دهنده آن..... 52
- 53..... شکل (3-20): مقایسه ی چگالی حالت های کلی و جزئی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 54..... شکل (3-21): چگالی ابر الکترونی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$

- شکل (4-1): قسمت حقیقی تابع دی الکتریک ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 59
- شکل (4-2): قسمت موهومی تابع دی الکتریک ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 60
- شکل (4-3): ضریب شکست ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 61
- شکل (4-4): ضریب جذب ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 62
- شکل (4-5): بازتابندگی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 63
- شکل (4-6): قسمت حقیقی رسانندگی الکتریکی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 64
- شکل (4-7): شدت انتقال بین نواری ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 65
- شکل (4-8): طیف اتلاف انرژی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 66
- شکل (4-9): تغییرات قاعدهی جمع قدرت نوسانگر ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 67
- شکل (4-10): قسمت حقیقی تابع دی الکتریک ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 69
- شکل (4-11): قسمت موهومی تابع دی الکتریک ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 70
- شکل (4-12): ضریب شکست ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 71
- شکل (4-13): ضریب جذب ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 72
- شکل (4-14): بازتابندگی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ..... 73

- 74.....  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ترکیب رسانندگی الکتریکی شکل (4-15): قسمت حقیقی رسانندگی الکتریکی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 75.....  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ترکیب شدت انتقال بین نواری شکل (4-16): شدت انتقال بین نواری ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 76.....  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ترکیب طیف اتلاف انرژی شکل (4-17): طیف اتلاف انرژی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 77.....  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ترکیب تغییرات قاعده‌ی جمع قدرت نوسانگر ترکیب شکل (4-18): تغییرات قاعده‌ی جمع قدرت نوسانگر ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 79.....  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ترکیب دی الکتریک تابع دی الکتریک شکل (4-19): قسمت حقیقی تابع دی الکتریک ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 79.....  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ترکیب دی الکتریک موهومی تابع دی الکتریک شکل (4-20): قسمت موهومی تابع دی الکتریک ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 80.....  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ترکیب ضریب شکست شکل (4-21): ضریب شکست ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 81.....  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ترکیب ضریب جذب شکل (4-22): ضریب جذب ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 82.....  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ترکیب بازتابندگی مربوط به شکل (4-23): بازتابندگی مربوط به ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 83.....  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ترکیب رسانندگی الکتریکی شکل (4-24): قسمت حقیقی رسانندگی الکتریکی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 84.....  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ترکیب شدت انتقال بین نواری شکل (4-25): شدت انتقال بین نواری ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 85.....  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ترکیب طیف اتلاف انرژی شکل (4-26): طیف اتلاف انرژی ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$
- 86.....  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$  ترکیب نوسانگر ترکیب تغییرات قاعده‌ی جمع نوسانگر ترکیب شکل (4-27): تغییرات قاعده‌ی جمع نوسانگر ترکیب  $\text{CH}_2\text{FCH}(\text{NH}_2)\text{COOH}$