بسم الله الرحمن الرحيم

دانشکده علوم پایه

پایان نامه جهت دریافت درجه کارشناسی ارشد (M.Sc) فیزیک گرایش حالت جامد

بررسی ساختار پیوندی و خواص الکترواپتیکی

ال- هیستیدین کلراید منو هیدرات

(L-histidine chloride monohydrate)

استاد راهنما:

دکتر حسین اصغر رهنمای علی آباد

استاد مشاور:

دکتر جواد باعدی

پژوهشگر:

اسماعیل هادوی فر

شهریور ۱۳۹۳

سوگند نامه 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 سرمایه‌های 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 ودرست گام بردارم. خداوند بزرگ، شما شاهدان، دانشجویان و دیگر حاضران را به عنوان داورانی امین گواه می گیرم که ازهمه 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 همنوعان 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، مباینت 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.

نام و نام خانوادگی وامضای دانشجو اسماعیل هادوی فر

تاییدیه‌ی صحت و اصالت نتایج

بسمه تعالی

اینجانب اسماعیل هادوی فر به شماره دانشجویی ۹۱۱۳۷۳۲۰۴۱ رشته فیزیک (حالت جامد) مقطع تحصیلی کارشناسی ارشد

تأیید می نمایم که کلیه نتایج این پایان نامه حاصل کار اینجانب و بدون هرگونه دخل و تصرف و موارد نسخه برداری شده از آثار دیگران را با ذکر کامل مشخصات منبع ذکر کرده ام 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 هر گونه اعتراض در خصوص احقاق حقوق مکتسب و تشخیص و تعیین تخلف و مجازات را از خویش سلب می نمایم . درضمن مسئولیت هر گونه پاسخگویی به اشخاص اعم از حقیقی و حقوقی و مراجع ذی صلاح (اعم از اداری و قضایی) به عهده اینجانب خواهد بود و دانشگاه هیچ گونه مسئولیتی در این خصوص نخواهد داشت .

نام و نام خانوادگی : اسماعیل هادوی فر

تاریخ و امضاء:

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 می‌شود 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 :

تاریخ :

امضاء:

تقدیر و تشکر

منّت **خدای** را عزوجل که طاعتش موجب قربت است و به شکر اندرش مزید نعمت. هر نفسی که فرو می رود ممدّ حیات است و چون بر می آید مفرّح ذات. پس در هر نفسی دو نعمت موجود است و بر هر نعمت شکری واجب.

از دست و زبان که برآید کز عهده شکرش بدرآید

از استاد ارجمندم جناب آقای **دکتر حسین اصغر رهنمای علی آباد** که به عنوان استاد راهنما در انجام این پروژه مرا یاری کردند، سپاسگزاری می کنم.

از استاد محترم و دلسوزم جناب آقای **دکتر جواد باعدی** که در کلیه سال های تحصیل دانشگاهی پشتیبان و یاری گر من بودند و نیز به عنوان استاد مشاور قبول زحمت کردند، کمال تشکر را دارم.

در نهایت از تمامی **دوستانم** که باعث قوت قلب من شدند قدر دانی می کنم.

فرم چکیده‌ی پایان‌نامه‌ی دوره‌ی تحصیلات تکمیلی

مدیریت تحصیلات تکمیلی

دانشگاه حکیم سبزواری

نام خانوادگی دانشجو: هادوی فر	**نام:** اسماعیل	**ش دانشجویی:** ۹۱۱۳۷۳۲۰۴۱
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:** ۱۳۹۳/۶/۲۳	**تعداد صفحات:** ٦٧

عنوان پایان‌نامه: بررسی ساختار پیوندی و خواص الکترواپتیکی ال- هیستیدین کلراید منو هیدرات (L-histidine chloride monohydrate)

کلیدواژه‌ها: اسیدآمینه، ال- هیستیدین کلراید منو هیدرات، خواص اپتیکی غیرخطی، روش‌های DFT .

چکیده

در این پایان‌نامه ویژگی‌های الکتریکی و نوری ترکیب ال- هیستیدین کلراید منو هیدرات (L-histidine chloride monohydrate) با استفاده از محاسبه‌های اصول اولیه مطالعه شده است. محاسبه‌ها به روش موج تخت تقویت شده خطی (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) با تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام شده است.

از جمله ویژگی‌های مورد مطالعه می‌توان به ساختار نواری، چگالی ابر الکترونی، چگالی حالت‌ها، تابع دی‌الکتریک، تابع اتلاف، هدایت نوری، بازتابندگی، ضریب شکست، ضریب خاموشی، پاشندگی و ضریب جذب اشاره کرد.

نتیجه‌های بدست آمده نشان می‌دهد که ال- هیستیدین کلراید منو هیدرات دارای پیوند کوالانسی بین اتم‌ها بوده و گاف نواری آن مستقیم و برابر ٤/١٧ eV می‌باشد. هم چنین از نتیجه‌های نوری، گاف نوری برابر ٤/٠٠ eV و ضریب شکست استاتیک در راستای x، y و z به ترتیب برابر ١/٦٥، ١/٦٢ و ١/٦٠ بدست آمد، که نشان‌دهنده ویژگی ناهمسان‌گردی این ترکیب است. به دلیل شفافیت بالا و نیز ضریب جذب کم و بازتابندگی و ضریب شکست پایین در ناحیه مرئی، $C_6H_{12}N_3O_3Cl$ به‌عنوان پوشش ضد بازتاب در دستگاه‌های خورشیدی مناسب است. هم چنین با دارا بودن ویژگی‌های نوری غیرخطی، این بلور می‌تواند در لیزرها برای دوبرابر سازی بسامد و غیره به کار گرفته شود.

امضای استاد راهنما

فهرست مطالب:

فصل اول: معرفی ترکیب ال- هیستیدین کلراید منو هیدرات ($C_6H_{12}N_3O_3Cl$)

۱-۱ مقدمه..... ۲

۱-۲ ویژگی اپتیک غیرخطی..... ۲

۱-۳ مواد آلی..... ۳

۱-٤ اسیدهای آمینه..... ٤

۱-۵ تاریخچه ال- هیستیدین..... ۵

۱-٦ معرفی ترکیب ال – هیستیدین کلراید منو هیدرات..... ٦

فصل دوم: محاسبه‌های نظری

۲-۱ مقدمه..... ۹

بخش اول: روش‌های محاسبه ساختار نواری..... ۹

۲-۲ سیستم‌های بس ذره ای..... ۹

۲-۳ تقریب بورن– اپن هایمر..... ۱۱

۲-٤ تقریب هارتری..... ۱۲

۲-۵ تقریب هارتری- فوک– اسلیتر..... ۱۳

۲-٦ نظریه تابعی چگالی (DFT)..... ۱٤

۲-۷ تقریب چگالی موضعی (LDA) ۱٦

۲-۸ تقریب شیب تعمیم‌یافته(GGA) ۱۷
۲-۹ روش‌های حل معادلات کوهن- شم ۱۷
۲-۱۰ روش موج تخت تقویت‌شده (APW) ۱۸
۲-۱۱ روش موج تخت تقویت‌شده خطی (LAPW) ۱۹
۲-۱۲ روش موج تخت تقویت‌شده خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) ۲۰
بخش دوم: بررسی روابط اپتیکی ۲۱
۲-۱۳ تابع دی‌الکتریک $\varepsilon(q,\omega)$ ۲۱
۲-۱٤ بازتابش اپتیکی ۲٤
۲-۱۵ روابط کرامرز – کرونیگ ۲۵
۲-۱٦ قدرت انتقال بین نواری ۲۷
۲-۱۷ قاعده‌ی جمع قدرت نوسانگر ۲۸
۲-۱۸ اتلاف انرژی ذرات سریع در جامد ۲۸
۲-۱۹ روابط به‌کاربرده شده در انجام محاسبه‌های WIEN2K ۲۹

فصل سوم: نتیجه‌های الکترونیکی

۳-۱ مقدمه ۳۲
۳-۲ روش انجام محاسبه‌ها ۳۲
۳-۳ بهینه سازی ثابت‌های شبکه ۳۳
۳-٤ ساختار نواری ۳۵
۳-۵ چگالی حالت‌های کل ترکیب ۳۷

۳-٦ چگالی حالت‌های جزیی..... ٤٣
۳-۷ چگالی الکترونی..... ٤٦

فصل چهارم: نتیجه‌های اپتیکی

٤-۱ مقدمه..... ٤٨
٤-۲ تابع دی‌الکتریک..... ٤٨
٤-۲-۱ قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک..... ٤٩
٤-۲-۲ قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک..... ٥١
٤-۲-۳ تابع اتلاف انرژی..... ٥٣
٤-۳ ضریب شکست و ضریب خاموشی..... ٥٥
٤-٤ پاشندگی (ضریب شکست بر حسب طول موج)..... ٥٧
٤-٥ ضریب جذب..... ٥٨
٤-٦ ضریب بازتابندگی..... ٥٩
٤-۷ هدایت اپتیکی..... ٦٠
٤-۸ شدت انتقال بین نواری..... ٦١
٤-۹ قاعده جمع نوسانگر..... ٦٢
٤-۱۰ جمع بندی..... ٦٣
مرجع‌ها..... ٦٤

فهرست جدول‌ها

جدول (۱-۱): داده‌های بلوری و ساختاری برای ال- هیستیدین کلراید منو هیدرات.....۷

جدول (۳-۱): شعاع کره‌های مافین تین بر حسب واحد اتمی برای ترکیب ال – هیستیدین کلراید منو هیدرات.....۳۳

جدول (۳-۲) : مقادیر ثابت‌های شبکه‌ی بهینه‌شده و مقادیر اولیه‌ی آن‌ها.....۳۵

جدول (۳-۳): مقایسه انرژی گاف نواری با نتیجه‌های دیگران.....۳۷

جدول (۳-٤): قله‌های نمودار چگالی حالت‌ها و اربیتال‌های مربوطه.....٤۳

جدول(٤-۱): بیشینه‌های موجود در نمودار قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک.....۵۰

جدول (٤-۲): مقدار تابع دی‌الکتریک استاتیک و جذر آن.....۵۱

جدول(٤-۳): انرژی بیشینه‌های نمودار قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک بر حسب (eV).....۵۲

جدول (٤-٤): قله‌های نمودار اتلاف انرژی.....٥٤

جدول (٤-۵): ضریب شکست بیشینه و ضریب شکست استاتیک.....۵۵

فهرست شکل‌ها:

شکل (۱-۱): ساختار یک اسید آمینه..... ۵

شکل (۱-۲): ساختار ال-هیستیدین..... ٦

شکل (۱-۳): ساختار فضایی ترکیب ال-هیستیدین کلراید منو هیدرات..... ۷

شکل (۱-٤): سلول واحد بلور ال-هیستیدین کلراید منو هیدرات ۷

شکل (۳-۱): انرژی ترکیب $C_6H_{12}N_3O_3Cl$ بر حسب تغییر نسبت c/a؛ و معادله‌ی تابع برازش داده‌شده.....۳۵

شکل(۳-۲): ساختار نواری $C_6H_{12}N_3O_3Cl$ و جهت‌های انتخاب شده در منطقه اول بریلوئن..... ۳۷

شکل (۳-۳): نمودار چگالی حالت‌های کل ترکیب $C_6H_{12}N_3O_3Cl$..... ۳۸

شکل (۳-٤): نمودار چگالی حالت کلی اتم‌های کربن..... ۳۹

شکل (۳-۵): نمودار چگالی حالت کلی اتم‌های کلر، اکسیژن و نیتروژن..... ٤۰

شکل (۳-٦): نمودار چگالی حالت کلی اتم‌های هیدروژن..... ٤۱

شکل (۳-۷): ادامه نمودار چگالی حالت کلی اتم‌های هیدروژن..... ٤۲

شکل (۳-۸): چگالی جزئی حالت‌های اتم‌های کربن..... ٤٤

شکل (۳-۸): چگالی جزئی حالت‌های اتم‌های کلر، اکسیژن و نیتروژن..... ٤۵

شکل (۳-۵): چگالی ابرالکترونی ترکیب در جهت‌های مختلف..... ٤٦

شکل (٤-۱): قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک..... ۵۰

شکل (٤-۲): قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک..... ۵۲

شکل (٤-۳): طیف اتلاف انرژی..... ۵٤

شکل (٤-٤): ضریب شکست حقیقی..... ۵٦

شکل (٤-٥): ضریب خاموشی..... ٥٦

شکل (٤-٦): پاشندگی (ضریب شکست بر حسب طول موج)..... ٥٧

شکل (٤-٧): ضریب جذب..... ٥٨

شکل (٤-٨): ضریب بازتابندگی..... ٥٩

شکل (٤-٩): هدایت اپتیکی..... ٦٠

شکل (٤-١٠): شدت انتقال بین نواری..... ٦١

شکل (٤-١١): قاعده جمع نوسانگر..... ٦٢

فصل اول

معرفی ترکیب ال-هیستیدین کلراید منو هیدرات

$(C_6H_{12}N_3O_3Cl)$

۱-۱ مقدمه

در این فصل به بررسی ویژگی‌های ساختاری و تاریخچه‌ی ترکیب ال هیستیدین کلراید منو هیدرات می‌پردازیم اما قبل از آن، ویژگی اپتیک غیرخطی[1] (NLO)، مواد آلی و اسیدآمینه‌ها را مورد بررسی قرار می‌دهیم.

۱-۲ ویژگی اپتیک غیرخطی

اپتیک غیرخطی شاخه ای از نورشناسی است که رفتار نور را در محیط غیرخطی توضیح می‌دهد. در این محیط‌ها قطبش دی‌الکتریک (P) به میدان الکتریکی نوری (E) پاسخ غیرخطی می‌دهد. این غیرخطی بودن فقط در شدت‌های نوری بالا مشاهده می‌شود (شدت میدان الکتریکی قابل مقایسه با میدان الکتریکی میان اتمی به طور مثال حدود 10^8 V/m است). اثر اپتیک غیرخطی تا زمان کشف نسل هارمونیک دوم (کمی بعد از نمایش لیزر) ناشناخته بود. از مرحله‌های ترکیب بسامد در اپتیک غیرخطی، می‌توان به تولید هارمونیک دوم[2] (SHG) اشاره کرد.

برخی کاربردهای اپتیک غیرخطی شامل موارد زیر می‌باشد:

1. NonLinear Optics
2. Second Harmonic Generation

تغییر رنگ پرتو نوری

کاربردهای فراوان در ارتباط‌های نوری و الکترونیک نوری

سامانه‌های نمایش پروژکتور

استفاده گسترده در لیزر

طیف سنجی با وضوح بالا

پژوهش‌های پزشکی

فن آوری صفحه نمایش.

۱-۳ مواد آلی

برای کاربردهای اپتیک غیرخطی از بلورهای غیرخطی استفاده می‌کنند. رایج ترین بلورهای غیر آلی به کار رفته، پتاسیم دی هیدروژن فسفات[۱] (KDP)، بتا- باریم بورات[۲] (BBO) و پتاسیم تیتانیل فسفات[۳] (KTP) و غیره می‌باشند. این بلورها ویژگی‌های مهمی از جمله دوشکستی قوی یعنی ضریب شکست به قطبش و جهت نور عبوری بستگی دارد، داشتن تقارن ویژه بلوری، شفاف بودن برای هر دو طول موج لیزر و نور دو برابر شده بسامدی و داشتن آستانه آسیب بالا که آن‌ها را در مقابل نور شدید مقاوم می‌کنند، هستند. با این وجود مواد آلی می‌توانند جایگزین بلورها شوند زیرا ساخت آن‌ها آسان‌تر و ارزان‌تر است و عمل‌کرد بهتری دارند. مهم‌ترین ترکیب‌های آلی با ویژگی اپتیک غیرخطی عبارت‌اند از: ال-آرژینین مالئات دی هیدرات[۴] (LAMD) [۱]، ال-متیونین ال-

1. Potassium Dihydrogen Phosphate
2. β-Barium Borate
3. Potassium Titanyl Phosphate
4 . L-Arginine Maleate Dihydrate

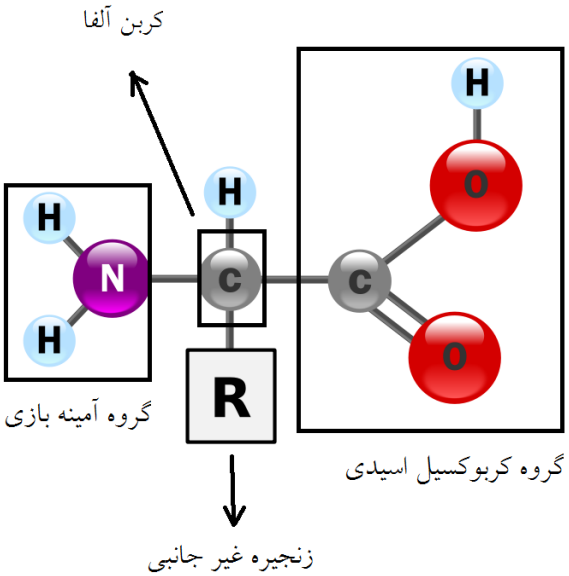
متیونینیوم هیدروژن مالئات[1] (LMMM) [۲].

۱-٤ اسیدهای آمینه

اصلی‌ترین ساختار پروتئین‌ها را اسیدهای آمینه تشکیل می‌دهند. هر اسید آمینه از یک کربن نامتقارن (کایرال[2]) به نام کربن آلفا تشکیل شده است که با چهار گروه مختلف: اتم هیدروژن (H)، گروه کربوکسیلات (COOH)، گروه آمینه باز (NH_2) و یک زنجیره‌ی غیرجانبی (R) پیوند برقرار می کند. وجود گروه بازی و اسیدی باعث پیدایش ویژگی آمفوتری[3] در اسیدهای آمینه می‌شود. ریشه‌ی R ممکن است یک زنجیره کربنی و یا یک حلقه کربنی باشد. گروه‌های دیگری مانند الکل، آمین، کربوکسیل و نیز گوگرد می توانند در ساختمان ریشه R شرکت کنند. ریشه R عامل اصلی تفاوت اسیدهای آمینه با یک‌دیگر است. شکل (۱-۱) ساختار اسید آمینه را نمایش می‌دهد.

به دلیل اینکه چندین گروه باردار بر روی اسیدهای آمینه وجود دارد، اسیدهای آمینه به آسانی در حلال‌های قطبی نظیر آب و اتانول حل می‌شوند ولی در حلال‌های غیرقطبی مثل بنزین یا اتر حل نمی‌شوند. هم چنین مقدار زیادی انرژی برای گسستن نیروهای یونی پایدار کننده شبکه بلوری لازم است که دلیل نقطه ذوب بالای اسیدهای آمینه است (بالاتر از ۲۰۰ درجه سانتیگراد). بیشتر اسیدهای آمینه نور مرئی را جذب نمی‌کنند بنابراین شفاف هستند [۳، ٤ و ٥].

1. L-Methionine L-Methioninium Hydrogen Maleate
2. Chiral
۳. آمفوتر ماده‌ای است که می‌تواند در واکنش با باز، به عنوان اسید، و در واکنش با اسید، به عنوان باز شرکت کند. هم چنین می‌تواند در مقابل تغییر جزئی اسید و باز مقامت کند.

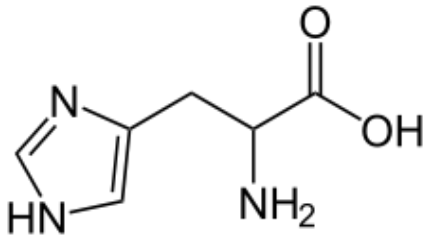


شکل (۱-۱): ساختار یک اسید آمینه

۱-۵ تاریخچه ال- هیستیدین[1]

هیستیدین یک اسید آمینه ضروری است که بدن انسان قادر به ساختن آن‌ها نیست و بایستی از طریق مواد غذایی به بدن برسد. چنانچه گروه R که به کربن آلفا متصل است در طرف چپ باشد اسید آمینه از نوع L است. اسیدآمینه‌های طبیعی همگی از نوع L هستند. در شکل (۱-۲) ساختار ال-هیستیدین را مشاهده می کنید. ال-هیستیدین با گروه عاملی ایمیدازول[2] یک اسیدآمینه تشکیل دهنده ساختار پروتئین‌ها می باشد. ساختار این ترکیب نخستین بار توسط یک پزشک آلمانی به نام آلبرشت کوسل[3] در سال ۱۸۹۶ میلادی تعیین شد. ال-هیستیدین محلول در آب است و در دمای ۲۵ درجه سلسیوس ٤/۱۹ گرم از آن در ۱۰۰ گرم آب حل می‌شود. جرم مولی ال- هیستیدین ۱۵۵/۱۵ گرم بر مول و فرمول تجربی آن $C_6H_9N_3O_2$ است [٦].

1 . L-Histidine
2 . Imidazole
3 . Albrecht Kossel

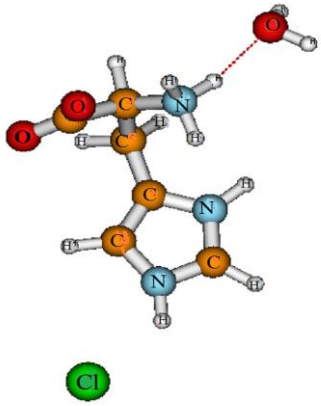


شکل (۱-۲): ساختار ال-هیستیدین

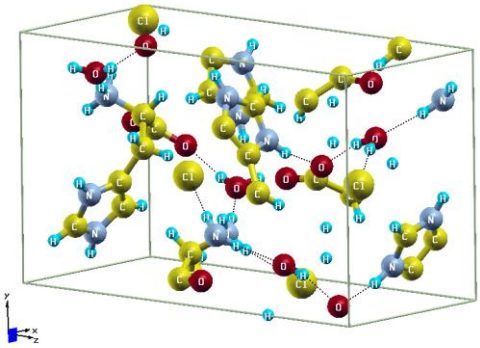
۱-٦ معرفی ترکیب ال – هیستیدین کلراید منو هیدرات

گسترش اپتیک غیرخطی از ترکیب‌های غیرآلی فراتر رفته و به ترکیب‌های آلی رسیده است. امروزه در پژوهش‌های جدید سعی براین است که با ترکیب اسیدهای آمینه با ترکیب‌های آلی و غیر آلی ترکیب‌های جدیدی با ویژگی اپتیک غیرخطی تولید کرد. رشد بلورها از محلول آبی یکی از روش‌های رشد بلوری است که در تهیه آزمایشگاهی بلورهای مهم، بسیار مطلوب است [۷] . ترکیب ال- هیستیدین کلراید منو هیدرات از ترکیب ال هیستیدین و اسید کلریک در محلول آبی شکل گرفت. بلور این ترکیب اولین بار توسط دونوهو[۱]، لاوین[۲] و رولت[۳] در سال ۱۹٥٦ میلادی تعیین شد [۸]. در سال‌های اخیر تلاش‌های زیادی روی این ترکیب توسط پژوهش‌گران انجام شده است [۱۷-۹]. ترکیب مورد نظر از محلول آبی با نسبت غلظت مولی یکسان ال-هیستیدین (با خلوص ۹۹٪) و اسید هیدروکلریک بدست می آید. ترکیب ساخته شده با استفاده از یک هم‌زن مغناطیسی در آب مقطر حل شده و سپس برای حذف ناخالصی‌های ته نشین شده در محلول دوبار تصفیه می‌شود. پس از دو هفته بلورهای شفاف بدست می آیند [۹]. ساختار فضایی مولکول آن در شکل (۱-۳) نشان داده شده است. داده‌های بلوری و ساختاری برای ال- هیستیدین کلراید منو هیدرات در جدول (۱-۱) آورده شده است. هم‌چنین سلول واحد این ترکیب نیز در شکل (۱-٤) نمایش داده شده است.

1 . Donohue
2 . Lavine
3 . Rollett



شکل (۱-۳): ساختار فضایی مولکول ال- هیستیدین کلراید منو هیدرات



شکل (۱-٤): سلول واحد بلور ال – هیستیدین کلراید منو هیدرات

جدول (۱-۱): داده‌های بلوری و ساختاری برای ال- هیستیدین کلراید منو هیدرات

فرمول تجربی	$C_6H_9N_3O_2.HCl.H_2O$ ($C_6H_{12}N_3O_3$)
فاز بلوری [۹]	اورتورومبیک
گروه فضایی [۹]	$P2_12_12_1$
حجم [۹] ($Å^3$)	۹۳٤/۸۸۵
چگالی [۹] (g/cm^3)	۱/٤۸۹
جرم مولی [۹] (g/mol)	۲۰۹/٦٤
دمای ذوب [۱۸] (°C)	۲۵٤
pH [۱۸] (۰/۵ مولار محلول آبی در دمای ۲۵ °C)	۳/۰-٤/۰