

บทที่ 6



สรุปและวิจารณ์

ผลของการวิจัย เพื่อหาโครงสร้างของไตรฮาฟเนียมฟอสไฟด์ โดยการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ ได้ข้อมูลต่าง ๆ ของผลึก และตำแหน่งอะตอม ดังแสดงไว้ในตาราง 6-1 (ก) และ 6-1 (ข) ตามลำดับ ตำแหน่งของอะตอมฮาฟเนียมและฟอสฟอรัสที่แสดงในตาราง 6-1 (ข) นี้ เป็นค่าที่ได้จากการเกลารูปโครงสร้างครั้งสุดท้าย ซึ่งมีค่า R เท่ากับ 0.073

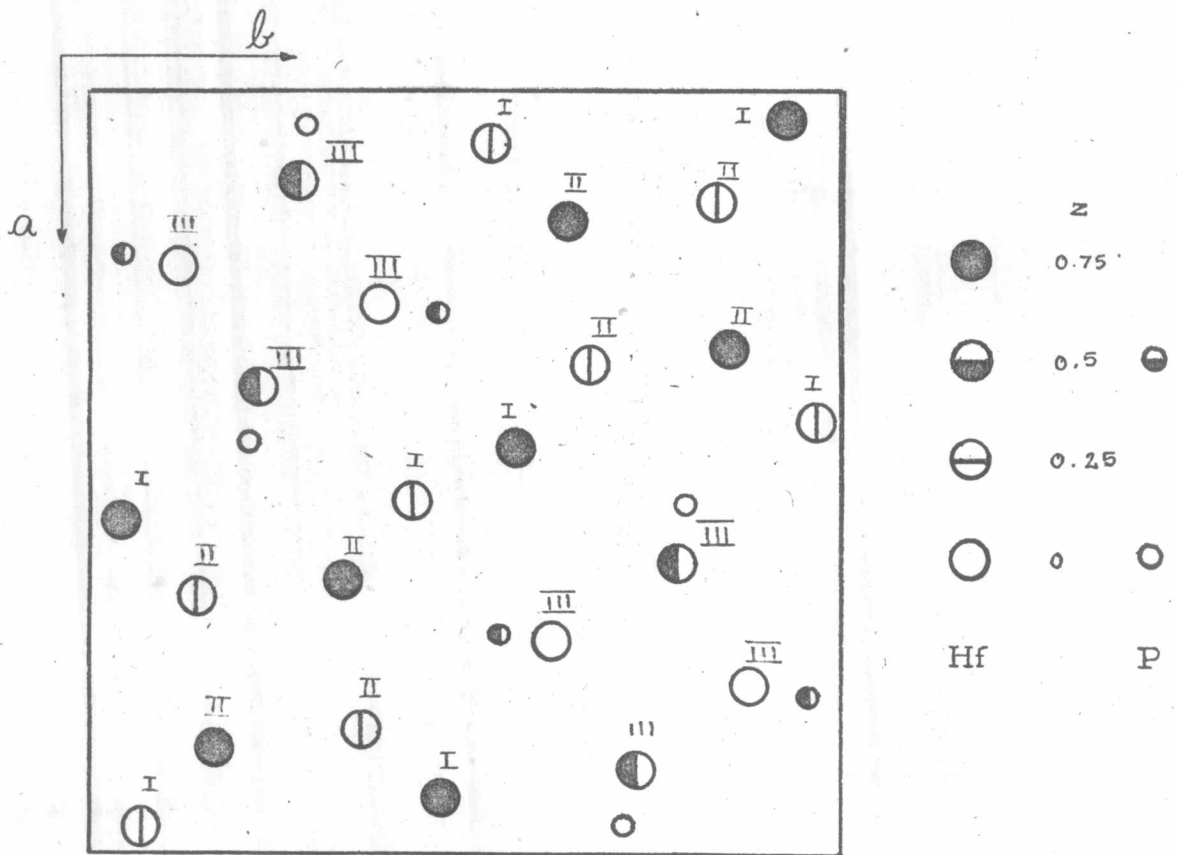
ตาราง 6-1 (ก) แสดงข้อมูลต่าง ๆ ของผลึก Hf_3P

ระบบผลึก	เทตราโกนอล
a	$10.6671 \pm 0.0004 \text{ \AA}$
c	$5.2919 \pm 0.0002 \text{ \AA}$
หมู่สมมาตร	$P4_2/n$
μ	1093 (ช.ม.) ⁻¹
Z	8
D_c	12.49 กรัม (ช.ม.) ⁻³
D_m	12.31 กรัม (ช.ม.) ⁻³

ตาราง 6-1 (ข) แสดงตำแหน่งของอะตอมฮาฟเนียม และฟอสฟอรัสที่ได้จากการ
 เกลาครั้งหลังสุด ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานอยู่ในวงเล็บ

อะตอม	x	y	z
Hf ₁	0.9305 (2)	0.4656 (3)	0.7614 (11)
Hf ₂	0.8578 (2)	0.1652 (2)	0.7803 (10)
Hf ₃	0.1119 (2)	0.2780 (2)	0.5268 (11)
P	0.0428 (14)	0.2878 (15)	0.0275 (61)

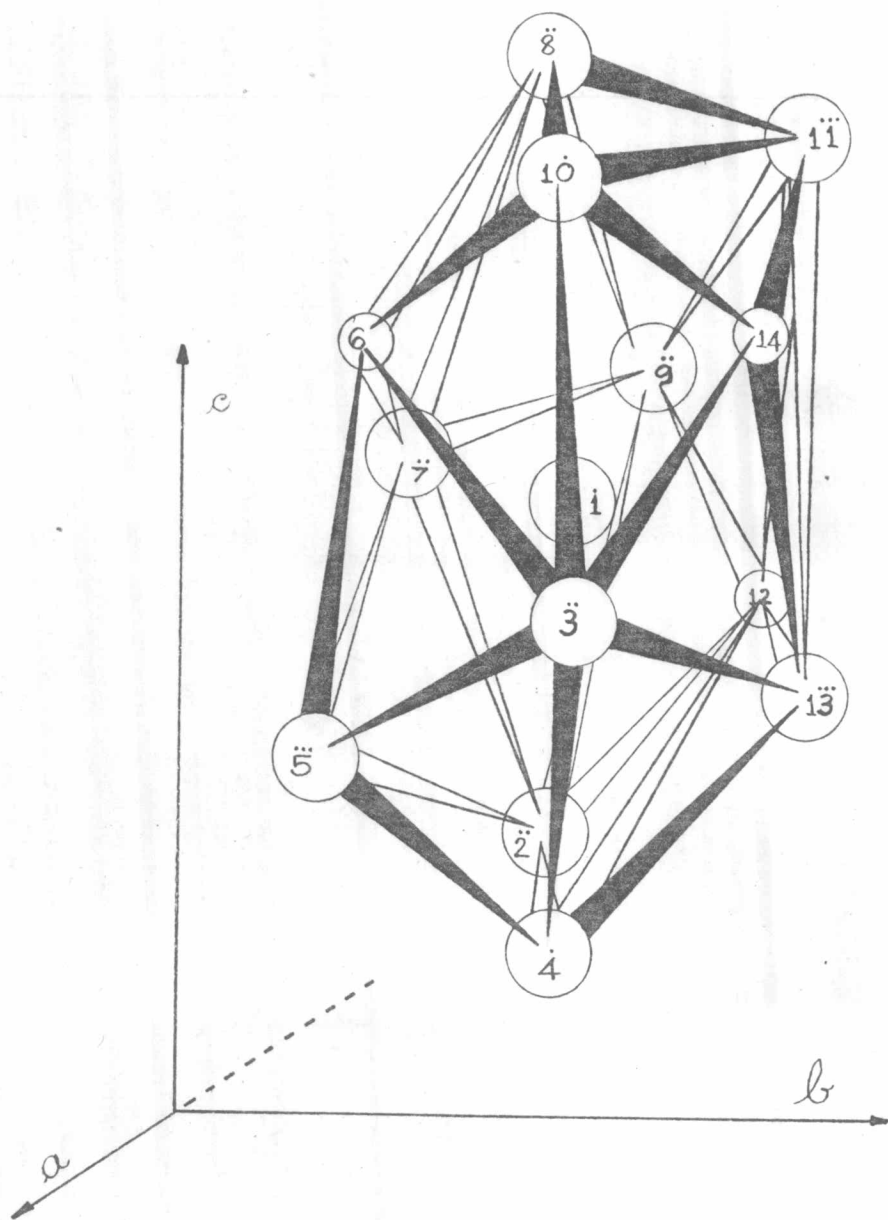
เมื่อฉายอะตอมต่าง ๆ ในหนึ่งหน่วยเซลล์ ตามแกน c จะได้ภาพ ดังรูป 6-1



รูป 6-1 แสดงภาพฉายของอะตอมต่าง ๆ ในหนึ่งหน่วยเซลล์ตามแกน c

ต่อไปจะพิจารณาอะตอมข้างเคียงของ Hf_1 , Hf_2 , Hf_3 และ P ในที่นี้การพิจารณาว่าอะตอมใดเป็นอะตอมข้างเคียงหรือไม่ ดูจากค่าระยะทางที่อะตอมนั้นอยู่ห่างจากอะตอมที่สนใจ ถ้าไม่เกิน 3.4 \AA จะถือว่าอะตอมนั้นเป็นอะตอมข้างเคียงของอะตอมที่สนใจ

อะตอมข้างเคียงของ Hf_1 มีอยู่ด้วยกันทั้งหมด 13 อะตอม เป็นฮาฟเนียม 10 อะตอม และฟอสฟอรัส 3 อะตอม อะตอมทั้ง 13 อะตอมนี้จัดตัวประกอบกันเป็นรูปหลายเหลี่ยม (polyhedron) ดังรูป 6-2 ซึ่งตำแหน่งของอะตอมต่าง ๆ ได้แสดงไว้ในตาราง 6-2 (ก) ส่วนระยะและมุม ระหว่างอะตอมต่าง ๆ ที่ล้อมรอบ Hf_1 ได้แสดงไว้ในตาราง 6-2 (ข) เพื่อความสะดวกในการที่จะทราบว่าอะตอมใดเป็นอะตอมอะไร จึงได้ทำเครื่องหมาย 1 จุด 2 จุด และ 3 จุด ไว้บนเลขที่ของอะตอม ซึ่งเครื่องหมายดังกล่าวนี้จะหมายถึง Hf_1 , Hf_2 และ Hf_3 ตามลำดับ (เช่น i หมายถึงอะตอม 1 และเป็น Hf_1) สำหรับอะตอมฟอสฟอรัส จะไม่มีจุดบนเลขที่ของอะตอม



รูป 6-2 แสดงอะตอมข้างเคียงของ Hf_1

ตาราง 6-2 (ก) แสดงตำแหน่งของอะตอมต่าง ๆ ในรูป 6-2

อะตอม	x	y	z	ระยะถึงอะตอม 1 (Å)
1	-0.070	0.466	0.761	0.0
2	-0.165	0.358	0.280	2.974 (7)
3	0.165	0.642	0.720	3.140 (4)
4	0.070	0.534	0.239	3.223 (10)
5	0.112	0.278	0.527	3.049 (5)
6	0.043	0.288	1.073	2.649 (22)
7	-0.142	0.165	0.780	3.299 (4)
8	-0.165	0.358	1.280	3.147 (7)
9	-0.358	0.335	0.780	3.379 (4)
10	0.070	0.534	1.239	3.018 (10)
11	-0.278	0.612	1.027	3.059 (5)
12	-0.288	0.534	0.528	2.763 (20)
13	-0.112	0.722	0.473	3.164 (5)
14	-0.043	0.712	0.973	2.872 (19)

หมายเหตุ ในวงเล็บคือค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน

ตาราง 6-2 (ข) แสดงระยะและมุมระหว่างอะตอมต่าง ๆ ที่ล้อมรอบ Hf_1 ในรูป 6-2

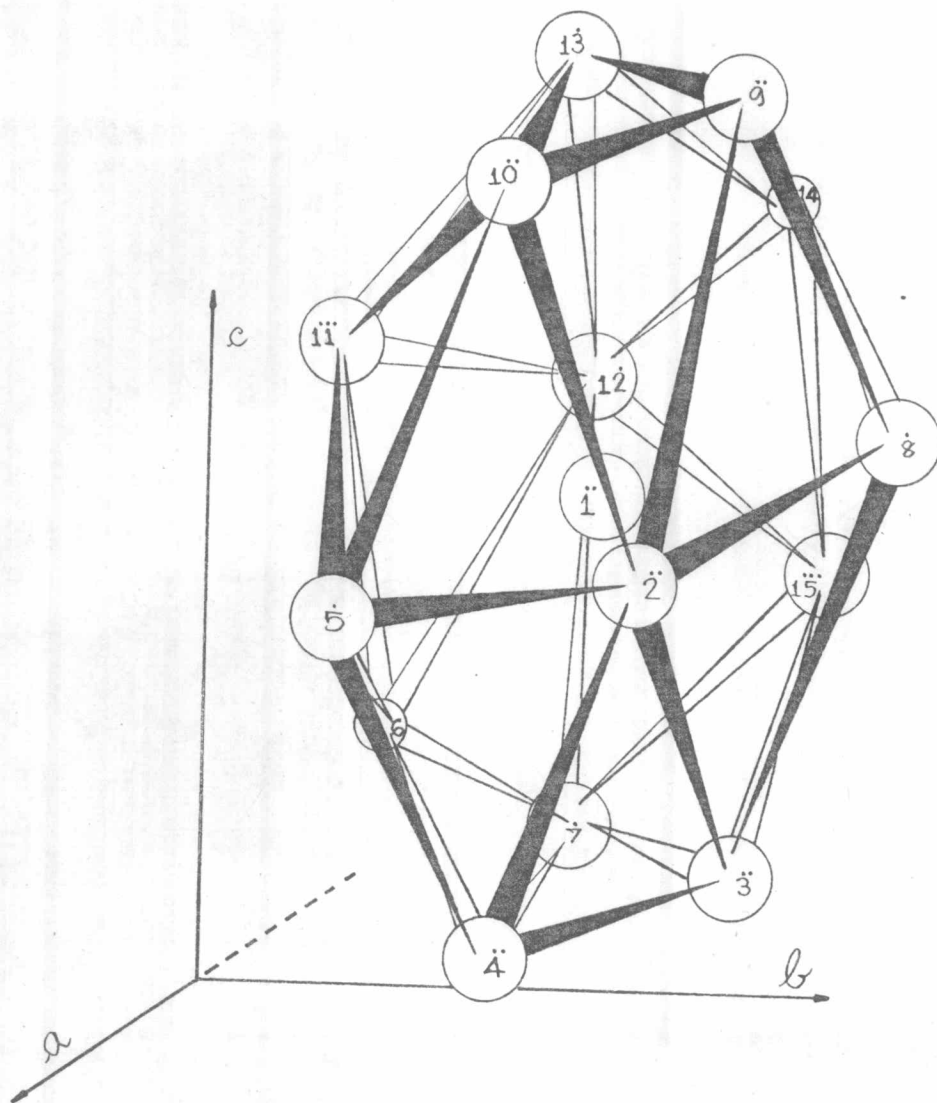
มุม	แขน 12 (Å)	แขน 23 (Å)	แขน 13 (Å)	องศา
2 - 4 - 5	3.140	3.164	3.341	64.02 (1)
- 12	3.140	4.107	2.705	41.19 (27)
- 5 - 4	3.341	3.164	3.140	57.64 (9)
- 7	3.341	3.255	3.359	61.22 (8)
- 7 - 5	3.359	3.255	3.341	60.65 (12)
- 9	3.359	2.927	3.359	64.17 (3)
- 9 - 7	3.359	2.927	3.359	64.17 (3)
- 12	3.359	2.697	2.705	51.65 (50)
- 12- 4	2.705	4.107	3.140	49.85 (31)
- 9	2.705	2.697	3.359	76.92 (44)
3 - 4 - 5	2.974	3.164	4.057	82.68 (17)
- 13	2.974	3.049	3.341	67.38 (14)
- 5 - 4	4.057	3.164	2.974	46.65 (12)
- 6	4.057	2.752	4.318	76.02 (33)
- 6 - 5	4.318	2.752	4.057	65.74 (45)
- 10	4.318	2.872	3.147	46.77 (30)
- 10- 6	3.147	2.872	4.318	91.56 (61)
- 14	3.147	2.649	2.697	54.63 (56)
- 13- 4	3.341	3.049	2.974	55.25 (12)
- 14	3.341	2.745	2.697	51.47 (39)

มุม	แขน 12 (Å)	แขน 23 (Å)	แขน 13 (Å)	องศา
- 14 - 10	2.697	2.649	3.147	72.13 (42)
- 13	2.697	2.745	3.341	75.75 (80)
4 - 2 - 5	3.140	3.341	3.164	58.34 (10)
- 12	3.140	2.705	4.107	88.96 (35)
- 3 - 5	2.974	4.057	3.164	50.68 (11)
- 13	2.974	3.341	3.049	57.38 (12)
- 12 - 13	4.107	2.693	3.049	47.92 (30)
- 13 - 12	3.049	2.693	4.107	91.11 (42)
5 - 2 - 7	3.341	3.359	3.255	58.13 (12)
- 3 - 6	4.057	4.318	2.752	38.21 (40)
- 6 - 7	2.752	2.705	3.255	73.24 (76)
- 7 - 6	3.255	2.705	2.752	54.05 (62)
6 - 3 - 10	4.318	3.147	2.872	41.67 (40)
- 5 - 7	2.752	3.255	2.705	52.71 (37)
- 7 - 8	2.705	3.359	2.697	51.43 (51)
- 8 - 7	2.697	3.359	2.705	51.65 (50)
- 10	2.697	3.140	2.872	58.36 (36)
- 10 - 8	2.872	3.140	2.697	53.08 (40)
7 - 2 - 9	3.359	3.359	2.927	51.66 (6)
- 6 - 8	2.705	2.697	3.359	76.92 (44)
- 8 - 9	3.359	3.359	2.927	51.66 (6)
- 9 - 8	2.927	3.359	3.359	64.17 (3)
8 - 7 - 9	3.359	2.927	3.359	64.17 (3)
- 9 - 11	3.359	3.341	3.255	58.13 (12)

มุม	แขน 12 (Å)	แขน 23 (Å)	แขน 13 (Å)	องศา
- 10 - 11	3.140	3.959	3.255	53.07 (8)
- 11 - 9	3.255	3.341	3.359	61.22 (8)
- 10	3.255	3.959	3.140	50.44 (8)
9 - 2 - 12	3.359	2.705	2.697	51.43 (51)
- 8 - 11	3.359	3.255	3.341	60.65 (12)
- 11 - 12	3.341	2.745	2.697	51.47 (39)
- 12 - 11	2.697	2.745	3.341	75.75 (80)
10 - 3 - 14	3.147	2.697	2.649	53.23 (55)
- 8 - 11	3.140	3.255	3.959	76.49 (10)
- 11 - 14	3.959	2.742	2.649	41.83 (46)
- 14 - 11	2.649	2.742	3.959	94.51 (64)
11 - 9 - 12	3.341	2.697	2.745	52.78 (63)
- 10 - 14	3.959	2.649	2.742	43.66 (36)
- 12 - 13	2.745	2.693	3.619	83.42 (66)
- 13 - 12	3.619	2.693	2.745	48.09 (68)
- 14	3.619	2.745	2.742	48.70 (39)
- 14 - 13	2.742	2.745	3.619	82.53 (65)
12 - 4 - 13	4.107	3.049	2.693	40.97 (25)
- 11 - 13	2.745	3.619	2.693	47.67 (38)
13 - 3 - 14	3.341	2.697	2.745	52.78 (63)
-11 - 14	3.619	2.742	2.745	48.78 (67)

หมายเหตุ ในวงเล็บคือค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน

อะตอมข้างเคียงของ Hf_2 มีอยู่ด้วยกันทั้งหมด 14 อะตอม เป็นฮาฟเนียม 12 อะตอม และฟอสฟอรัส 2 อะตอม อะตอมทั้ง 14 อะตอมนี้ จัดตัวประกอบกันเป็นรูปหลายเหลี่ยม ดังรูป 6-3 ซึ่งตำแหน่งของอะตอมต่าง ๆ ได้แสดงไว้ในตาราง 6-3 (ก) ส่วนระยะและมุม ระหว่างอะตอมต่าง ๆ ที่ล้อมรอบ Hf_2 ได้แสดงไว้ในตาราง 6-3 (ข)



รูป 6-3 แสดงอะตอมข้างเคียงของ Hf_2

ตาราง 6-3 (ก) แสดงตำแหน่งของอะตอมต่าง ๆ ในรูป 6-3

อะตอม	x	y	z	ระยะถึงอะตอม 1 (Å)
1	0.165	0.642	0.720	0.0
2	0.335	0.868	0.720	2.927 (5)
3	0.142	0.835	0.220	3.359 (2)
4	0.358	0.665	0.220	3.359 (2)
5	0.466	0.570	0.739	3.299 (4)
6	0.288	0.457	0.473	2.705 (21)
7	0.070	0.534	0.239	2.974 (7)
8	0.034	0.931	0.739	3.379 (4)
9	0.142	0.835	1.220	3.359 (2)
10	0.358	0.665	1.220	3.359 (2)
11	0.278	0.388	0.973	3.255 (5)
12	-0.070	0.466	0.761	3.140 (4)
13	0.070	0.534	1.239	3.147 (7)
14	-0.043	0.712	0.973	2.697 (22)
15	-0.112	0.722	0.473	3.341 (5)

หมายเหตุ ในวงเล็บคือค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน

ตาราง 6-3 (ข) แสดงระยะและมุมระหว่างอะตอมต่าง ๆ ที่ล้อมรอบ Hf_2 ในรูป 6-3

มุม	แขน 12 (Å)	แขน 23 (Å)	แขน 13 (Å)	องศา
2 - 3 - 4	3.359	2.927	3.359	64.17 (3)
- 8	3.359	3.147	3.299	60.83 (9)
- 4 - 3	3.359	2.927	3.359	64.17 (3)
- 5	3.359	3.147	5.379	62.48 (9)
- 5 - 4	3.379	3.147	3.359	61.84 (9)
- 10	3.379	2.974	3.359	63.47 (9)
- 8 - 3	3.299	3.147	3.359	62.76 (10)
- 9	3.299	2.974	3.359	64.51 (10)
- 9 - 8	3.359	2.974	3.299	62.44 (9)
- 10	3.359	2.927	3.359	64.17 (3)
- 10 - 5	3.359	2.974	3.359	64.15 (9)
- 9	3.359	2.927	3.359	64.17 (3)
3 - 2 - 4	3.359	3.359	2.927	51.66 (6)
- 8	3.359	3.299	3.147	56.41 (14)
- 4 - 7	2.927	3.379	3.299	62.61 (1)
- 7 - 4	3.299	3.379	2.927	51.98 (9)
- 15	3.299	3.049	3.255	61.55 (9)
- 8 - 15	3.147	3.059	3.255	63.25 (13)
- 15 - 7	3.255	3.049	3.299	63.02 (1)
- 8	3.255	3.059	3.147	59.70 (12)

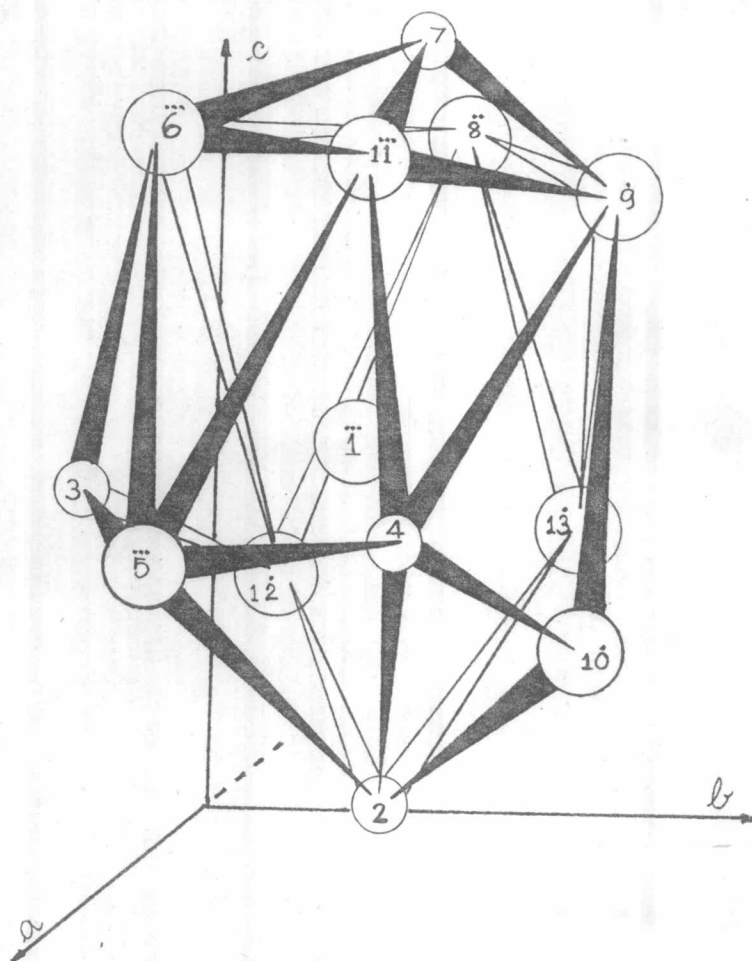
มุม	แขน 12 (Å)	แขน 23 (Å)	แขน 13 (Å)	องศา
4 - 2 - 5	3.359	3.379	3.147	55.69 (14)
- 3 - 7	2.927	3.299	3.379	65.42 (10)
- 5 - 6	3.147	2.649	2.697	54.63 (56)
- 6 - 5	2.697	2.649	3.147	72.13 (42)
- 7	2.697	2.763	3.379	76.47 (61)
- 7 - 6	3.379	2.763	2.697	50.88 (41)
5 - 2 - 10	3.379	3.359	2.974	52.38 (14)
- 4 - 6	3.147	2.697	2.649	53.23 (55)
- 6 - 11	2.649	2.752	3.049	68.69 (73)
- 10 - 11	2.974	3.341	3.049	57.38 (12)
- 11 - 6	3.049	2.752	2.649	54.05 (36)
- 10	3.049	3.341	2.974	55.25 (12)
6 - 4 - 7	2.697	3.379	2.763	52.65 (39)
- 5 - 11	2.649	3.049	2.752	57.26 (62)
- 7 - 12	2.763	3.223	4.107	86.28 (61)
- 11 - 12	2.752	3.959	4.107	72.96 (33)
- 12 - 7	4.107	3.223	2.763	42.17 (41)
- 11	4.107	3.959	2.752	39.85 (42)
7 - 3 - 15	3.299	3.255	3.049	55.43 (9)
- 6 - 12	2.763	4.107	3.223	51.55 (33)
- 12 - 15	3.223	3.164	3.049	57.01 (13)

มุม	แขน 12 (Å)	แขน 23 (Å)	แขน 13 (Å)	องศา
- 15 - 12	3.049	3.164	3.223	62.47 (17)
8 - 2 - 9	3.299	3.359	2.974	53.05 (14)
- 3 - 15	3.147	3.255	3.059	57.04 (12)
- 9 - 14	2.947	2.705	2.763	57.99 (54)
- 14 - 9	2.763	2.705	2.947	65.89 (38)
- 15	2.763	2.745	3.059	67.46 (7)
- 15 - 14	3.059	2.745	2.763	56.55 (35)
9 - 2 - 10	3.359	3.359	2.927	51.66 (6)
- 8 - 14	2.974	2.763	2.705	56.11 (55)
- 10 - 13	2.927	3.379	3.299	62.61 (10)
- 13 - 10	3.299	3.379	2.927	51.98 (9)
- 14	3.299	2.649	2.705	52.72 (41)
- 14 - 13	2.705	2.649	3.299	76.08 (65)
10 - 5 - 11	2.974	3.049	3.341	67.38 (14)
- 9 - 13	2.927	3.299	3.379	65.42 (10)
- 11 - 13	3.341	3.059	3.379	63.56 (10)
- 13 - 11	3.379	3.059	3.341	62.29 (9)
11 - 6 - 12	2.752	4.107	3.959	67.19 (47)
- 10 - 13	3.341	3.379	3.059	54.14 (9)
- 12 - 13	3.959	3.018	3.059	49.79 (11)
- 13 - 12	3.059	3.018	3.959	81.31 (19)
12 - 7 - 15	3.223	3.049	3.164	60.52 (14)
- 11 - 13	3.959	3.059	3.018	48.90 (16)

มุม	แกน 12 (Å)	แกน 23 (Å)	แกน 13 (Å)	องศา
- 13 - 14	3.018	2.649	2.872	60.48 (54)
- 14 - 13	2.872	2.649	3.018	66.14 (38)
- 15	2.872	2.745	3.164	68.52 (64)
- 15 - 14	3.164	2.745	2.872	57.64 (34)
13 - 9 - 14	3.299	2.705	2.649	51.20 (42)
- 12 - 14	3.018	2.872	2.649	53.38 (54)
14 - 8 - 15	2.763	3.059	2.745	55.99 (61)
- 12 - 15	2.872	3.164	2.745	53.84 (60)

หมายเหตุ ในวงเล็บคือค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน

อะตอมข้างเคียงของ Hf_3 มีอยู่ด้วยกันทั้งหมด 12 อะตอม เป็นอะตอมฮาฟเนียม 8 อะตอม และฟอสฟอรัส 4 อะตอม อะตอมทั้ง 12 อะตอมนี้ จัดตัวประกอบกันเป็นรูปหลายเหลี่ยม ดังรูป 6-4 ซึ่งตำแหน่งของอะตอมต่าง ๆ ได้แสดงไว้ในตาราง 6-4 (ก) ส่วนระยะและมุม ระหว่างอะตอมต่าง ๆ ที่ล้อมรอบ Hf_3 ได้แสดงไว้ในตาราง 6-4 (ข)



รูป 6-4 แสดงอะตอมข้างเคียงของ Hf_3

ตาราง 6-4 (ก) แสดงตำแหน่งของอะตอมต่าง ๆ ในรูป 6-4

อะตอม	x	y	z	ระยะถึงอะตอม 1 (\AA)
1	0.112	0.278	0.527	0.0
2	0.043	0.288	0.028	2.742 (17)
3	0.212	0.043	0.473	2.693 (16)
4	0.288	0.457	0.473	2.745 (17)
5	0.388	0.222	0.527	3.005 (5)
6	0.222	0.112	0.973	3.178 (9)
7	0.043	0.288	1.028	2.752 (17)
8	-0.142	0.165	0.780	3.255 (5)
9	-0.070	0.466	0.761	3.059 (5)
10	0.070	0.534	0.239	3.164 (5)
11	0.278	0.388	0.973	3.178 (9)
12	-0.034	0.070	0.261	3.059 (5)
13	-0.165	0.358	0.280	3.341 (5)

หมายเหตุ ในวงเล็บคือค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน

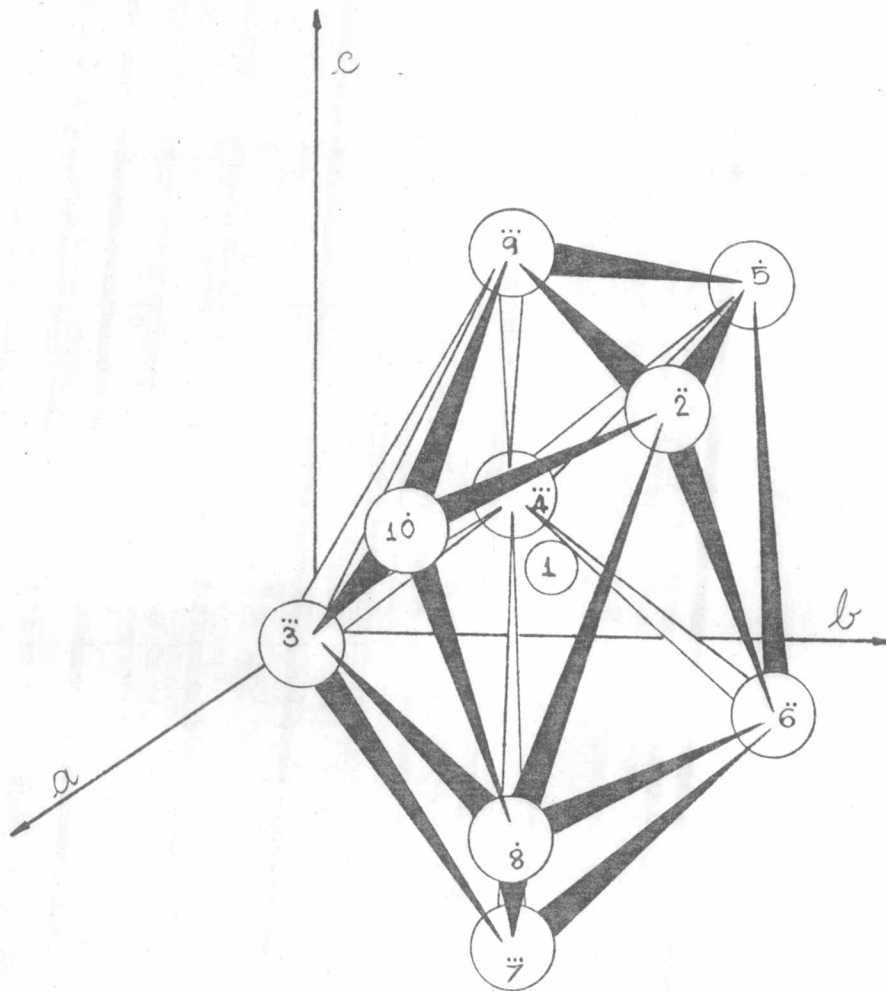
ตาราง 6-4 (ข) แสดงระยะและมุมระหว่างอะตอมต่างๆ ที่ล้อมรอบ I.f_3 ในรูป 6-4

มุม	แกน 12 (\AA)	แกน 23 (\AA)	แกน 13 (\AA)	องศา
2 - 4 - 5	3.955	2.693	4.586	85.00 (37)
- 10	3.955	2.763	2.872	46.56 (52)
- 5 - 4	4.586	2.693	3.955	59.20 (53)
- 12	4.586	4.992	2.763	33.19 (24)
- 10 - 4	2.372	2.763	3.955	89.12 (82)
- 13	2.372	3.140	2.697	53.08 (40)
- 12 - 5	2.763	4.992	4.586	65.31 (46)
- 13	2.763	3.379	2.697	50.88 (41)
- 13 - 10	2.697	3.140	2.872	58.36 (36)
- 12	2.697	3.379	2.763	52.65 (39)
3 - 5 - 6	2.693	3.178	2.752	55.17 (68)
- 12	2.693	4.992	2.872	27.14 (42)
- 6 - 5	2.752	3.178	2.693	53.44 (39)
- 12	2.752	4.677	2.872	34.56 (32)
- 12 - 5	2.872	4.992	2.693	25.33 (34)
- 6	2.872	4.677	2.752	32.93 (59)
4 - 2 - 5	3.955	4.586	2.693	35.80 (28)
- 10	3.955	2.872	2.763	44.31 (48)
- 5 - 11	2.693	3.178	2.752	55.17 (68)

มุม	แขน 12 (Å)	แขน 23 (Å)	แขน 13 (Å)	องศา
- 9 - 10	4.107	3.223	2.763	42.17 (41)
- 11	4.107	3.959	2.752	39.85 (42)
- 10 - 9	2.763	3.223	4.107	86.28 (61)
- 11 - 5	2.752	3.178	2.693	53.44 (39)
- 9	2.752	3.959	4.107	72.96 (33)
5 - 2 - 12	4.586	2.763	4.992	81.50 (57)
- 3 - 6	2.693	2.752	3.178	71.39 (62)
- 12	2.693	2.872	4.992	127.53 (69)
- 4 - 11	2.693	2.752	3.178	71.39 (62)
- 6 - 11	3.178	3.005	3.178	61.78 (9)
- 11 - 6	3.178	3.005	3.178	61.78 (9)
6 - 3 - 12	2.752	2.872	4.677	112.51 (72)
- 5 - 11	3.178	3.178	3.005	46.44 (18)
- 12	3.178	4.992	4.677	65.52 (11)
- 7 - 8	2.693	2.705	4.057	97.44 (64)
- 11	2.693	2.742	3.005	67.13 (40)
- 8 - 7	4.057	2.705	2.693	41.17 (35)
- 12	4.057	3.147	4.677	79.88 (11)
- 11 - 7	3.005	2.742	2.693	55.66 (33)
- 12 - 8	4.677	3.147	4.057	58.63 (11)
7 - 6 - 8	2.693	4.057	2.705	41.39 (45)
- 11	2.693	3.005	2.742	57.21 (34)

มุม	แขน 13 (Å)	แขน 23 (Å)	แขน 13 (Å)	องศา
- 8 - 9	2.705	3.299	2.649	51.20 (42)
- 9 - 8	2.649	3.299	2.705	52.72 (41)
- 11	2.649	3.959	2.742	43.66 (36)
- 11 - 9	2.742	3.959	2.649	41.83 (46)
8 - 6 - 12	4.057	4.667	3.147	41.49 (9)
- 7 - 9	2.705	2.649	3.299	76.08 (65)
- 9 - 13	3.299	2.974	3.359	64.51 (10)
- 12 - 13	3.147	3.379	3.359	61.84 (9)
- 13 - 9	3.359	2.974	3.299	62.44 (9)
- 12	3.359	3.379	3.147	55.69 (14)
9 - 4 - 10	4.107	2.763	3.223	51.55 (33)
- 11	4.107	2.752	3.959	67.19 (47)
- 7 - 11	2.649	2.742	3.959	94.51 (64)
- 8 - 13	3.299	3.359	2.974	53.05 (14)
- 10 - 13	3.223	3.140	2.974	55.72 (12)
- 13 - 10	2.974	3.140	3.223	63.56 (17)
10 - 2 - 13	2.872	2.697	3.140	68.56 (51)
- 9 - 13	3.223	2.974	3.140	60.72 (17)
12 - 2 - 13	2.763	2.697	3.379	76.47 (61)
- 8 - 13	3.147	3.359	3.379	62.48 (9)

อะตอมข้างเคียงของ P มีอยู่ด้วยกันทั้งหมด 9 อะตอม เป็นฮาฟเนียมทั้งหมด อะตอม ทั้ง 9 อะตอมนี้ จัดตัวประกอบกันเป็นรูปหลายเหลี่ยม ดังรูป 6-5 ซึ่งตำแหน่งของอะตอมต่าง ๆ ได้แสดงไว้ในตาราง 6-5 (ก) ส่วนระยะและมุม ระหว่างอะตอมต่าง ๆ ที่ล้อมรอบ P ได้แสดง ไว้ในตาราง 6-5 (ข)



รูป 6-5 แสดงอะตอมข้างเคียงของ P

ตาราง 6-5 (ก) แสดงตำแหน่งของอะตอมต่าง ๆ ในรูป 6-5

อะตอม	x	y	z	ระยะถึงอะตอม 1. (\AA)
1	0.7878	0.9572	0.528	0.0
2	0.858	1.165	0.780	2.697 (22)
3	0.888	0.722	0.473	2.693 (16)
4	0.612	0.778	0.473	2.742 (17)
5	0.570	1.034	0.761	2.763 (20)
6	0.665	1.142	0.280	2.705 (21)
7	0.778	0.888	0.027	2.752 (17)
8	0.966	1.070	0.261	2.649 (22)
9	0.778	0.888	1.027	2.742 (17)
10	1.034	0.931	0.739	2.872 (19)

หมายเหตุ ในวงเล็บคือค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน

ตาราง 6-5 (ข) แสดงระยะและมุมระหว่างอะตอมต่างๆ ที่ล้อมรอบ P ในรูป 6-5

มุม	แกน 12 (Å)	แกน 23 (Å)	แกน 13 (Å)	องศา
2 - 5 - 6	3.379	2.974	3.359	63.47 (9)
- 9	3.379	3.059	3.341	62.29 (9)
- 6 - 5	3.359	2.974	3.379	64.15 (9)
- 8	3.359	3.299	3.147	56.41 (14)
- 8 - 6	3.147	3.299	3.359	62.76 (10)
- 10	3.147	3.018	3.140	61.18 (18)
- 9 - 5	3.341	3.059	3.379	63.56 (10)
- 10	3.341	3.164	3.140	57.64 (9)
- 10 - 8	3.140	3.018	3.147	61.44 (13)
- 9	3.140	3.164	3.341	64.02 (10)
3 - 4 - 7	3.005	3.178	3.178	61.78 (9)
- 9	3.005	3.619	3.619	65.47 (7)
- 7 - 4	3.178	3.178	3.005	56.44 (18)
- 8	3.178	3.049	3.959	78.95 (17)
- 8 - 7	3.959	3.049	3.178	51.97 (15)
- 10	3.959	3.018	3.059	49.79 (11)
- 9 - 4	3.619	3.619	3.005	49.07 (15)
- 10	3.619	3.164	3.059	53.10 (12)
- 10 - 8	3.059	3.018	3.959	81.31 (19)
- 9	3.059	3.164	3.619	71.10 (17)
4 - 3 - 7	3.005	3.178	3.178	61.78 (9)
- 9	3.005	3.619	3.619	65.47 (7)
- 5 - 6	3.164	2.974	4.057	82.68 (17)
- 9	3.164	3.059	3.619	71.10 (17)

มุม	แขน 12 (A) ^o	แขน 23 (A) ^o	แขน 13 (A) ^o	องศา
- 6 - 5	4.057	2.974	3.164	50.68 (11)
- 7	4.057	3.255	3.178	50.06 (15)
- 7 - 6	3.178	3.255	4.057	78.18 (16)
- 9 - 5	3.619	3.059	3.164	55.81 (12)
5 - 2 - 6	3.379	3.359	2.974	52.38 (14)
- 9	3.379	3.341	3.059	54.14 (9)
- 4 - 6	3.164	4.057	2.974	46.65 (12)
- 9	3.164	3.619	3.059	53.10 (12)
6 - 2 - 8	3.359	3.147	3.299	60.83 (9)
- 4 - 7	4.057	3.178	3.255	51.76 (9)
- 7 - 8	3.255	3.049	3.299	63.08 (10)
- 8 - 7	3.299	3.049	3.255	61.55 (9)
7 - 3 - 8	3.178	3.959	3.049	49.08 (9)
- 6 - 8	3.255	3.299	3.049	55.43 (9)
8 - 2 - 10	3.147	3.140	3.018	57.38 (17)
- 3 - 10	3.959	3.059	3.018	48.09 (16)
9 - 2 - 10	3.341	3.140	3.164	58.34 (10)
- 3 - 10	3.619	3.059	3.164	55.81 (12)

หมายเหตุ ในวงเล็บคือค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน

โครงสร้างของ Hf_3P จัดได้ว่าเป็นโครงสร้างแบบ Ti_3P ⁽¹³⁾ โดยทั่วไป ผลึกที่มีโครงสร้างแบบนี้ จะมีอะตอมข้างเคียงของอะตอมโลหะ อยู่ในช่วง 12 - 15 อะตอม สำหรับ Hf_3P มีอะตอมข้างเคียงของอะตอมฮาฟเนียม, Hf_1 , Hf_2 และ Hf_3 เท่ากับ 13, 14 และ 12 อะตอม ตามลำดับ

โครงสร้างแบบ Ti_3P นี้ จำนวนอะตอมข้างเคียงของอะตอมโลหะซึ่งเป็นอะตอมโลหะทั้งหมด มีค่าประมาณ 10 อะตอม⁽¹⁴⁾ ในโครงสร้าง Hf_3P ก็เช่นกันอะตอมข้างเคียงของ P เป็นอะตอมฮาฟเนียมทั้งสิ้น จำนวน 9 อะตอม มีระยะห่างในช่วง 2.649 (22) - 2.872 (19) Å ระยะ P - P ที่สั้นที่สุดเท่ากับ 3.955 (43) Å ซึ่งยาวกว่าระยะสั้นที่สุด (3.44 Å ใน Ni_3P) ในกลุ่มเดียวกัน⁽¹⁴⁾