

สรุปผลการวิจัย

ผลการวิจัยหาโครงสร้างของผลึก  $Nb_5As_3$  โดยการเลี้ยวเบนของรังสีเอกซ์พบว่าผลึกอยู่ในระบบบอโรรมบิก มีหมู่สมมาตรสามมิติเป็น  $Pnma$  และมีความหนาแน่น  $8.32 \pm 01$  กรัม/ซม<sup>3</sup> โดยมีค่าคงที่ของหน่วยเซลล์คือ  $a = 26.074(1)$   $b = 3.570(1)$  และ  $c = 11.788(1)$  อังสตรอม ในหนึ่งหน่วยเซลล์ของผลึกประกอบด้วย 8 โมเลกุลของ  $Nb_5As_3$  ดังนั้นในแต่ละหน่วยเซลล์จึงประกอบด้วย Nb 40 อะตอม และ As 24 อะตอม โดยทุกอะตอมอยู่ที่ตำแหน่งพิเศษ (4c)

พิจารณาโครงสร้างของผลึกที่นำลงตามแกน  $b$  พบว่าอะตอมของ Nb และ As จะเรียงตัวอยู่บนระนาบ 2 ระนาบซึ่งห่างกันเป็นระยะ  $b/2$  โดยอะตอมของ Nb จะเรียงตัวอยู่ที่มุมของปริซึมสามเหลี่ยมซึ่งมีอะตอมของ As อยู่ตรงกลางของปริซึม และที่หน้าสี่เหลี่ยมแต่ละหน้าของปริซึมจะมีอะตอมของไนโอเบียมอยู่ตรงกลาง อะตอมข้างเคียงของไนโอเบียม จะเรียงตัวอยู่ที่มุมของปริซึมห้าเหลี่ยมหรือปริซึมสี่เหลี่ยมและมีอะตอมอีก 1 อะตอมอยู่ตรงกลางของหน้าคิงแต่ละหน้าของปริซึม จำนวนโคออร์ดิเนชันของ Nb มีค่าตั้งแต่ 14-16 ซึ่งประกอบด้วยอะตอมที่ห่างจากไนโอเบียมน้อยกว่า 3.7 อังสตรอม อะตอมข้างเคียงของ As จะเรียงตัวอยู่ที่มุมของปริซึมสี่เหลี่ยมหรือปริซึมสามเหลี่ยม และมีอะตอมอีก 1 อะตอมอยู่ตรงกลางของหน้าคิงแต่ละหน้าของปริซึม จำนวนโคออร์ดิเนชันของ As มีค่าตั้งแต่ 7-9 ซึ่งประกอบด้วยอะตอมที่ห่างจาก As น้อยกว่า 3.0 อังสตรอม นุ่มระหว่างอะตอมที่ล้อมรอบ Nb และ As มีค่าตั้งแต่แสดงในตาราง 5-1

จากการพิจารณาโครงสร้างของผลึก  $Nb_5P_3$ <sup>(1)</sup> ที่นำลงตามแกน  $b$  พบว่าผลึก  $Nb_5P_3$  มีลักษณะเกี่ยวกับผลึก  $Nb_5As_3$  คือประกอบด้วยอะตอมของโลหะเรียงตัว

อยู่ที่มุมของปริซึมตามเหลี่ยมโดยมีอะตอมของโลหะอยู่ตรงกลางของปริซึม ถ้าพิจารณา  
โครงสร้างที่ฉายองศาตามแกน  $b$  ของผลึก  $Nb_5As_3$  ในรูป(4-18) จะพบว่า  $P$  ใน  
 $Nb_5P_3$  จะแทนที่  $As$  ใน  $Nb_5As_3$

อะตอมข้างเคียงของ $Nb_1$	มุม(องศา)	อะตอมข้างเคียงของ $Nb_2$	มุม(องศา)
$2Nb_5 - Nb_1 - 2As_3$	59.41	$2Nb_5 - Nb_2 - 2As_6$	59.20
$-2As_5$	60.63	$-2As_5$	59.42
$- Nb_6$	60.30	$- Nb_{10}$	57.09
$- Nb_2$	57.02	$- Nb_1$	54.71
$-2Nb_5$	76.9	$-2Nb_5$	74.48
$2Nb_6 - Nb_1 - 2As_3$	89.67	$2Nb_3 - Nb_2 - 2As_6$	58.24
$-2As_5$	55.21	$-2As_5$	89.02
$- Nb_4$	54.55	$- As_5$	55.79
$- As_4$	54.03	$- Nb_3$	55.82
$-2Nb_6$	66.28	$-2Nb_3$	67.65
$2As_3 - Nb_1 - Nb_6$	50.40	$2As_6 - Nb_2 - Nb_{10}$	52.52
$- As_4$	82.99	$- Nb_3$	50.28
$-2As_3$	84.79	$-2As_6$	86.48
$2As_5 - Nb_1 - Nb_2$	52.97	$2As_5 - Nb_2 - As_1$	80.08
$- Nb_4$	47.07	$- Nb_1$	52.55
$-2As_5$	83.13	$-2As_5$	82.54
$Nb_4 - Nb_1 - Nb_2$	60.86	$Nb_{10} - Nb_2 - Nb_1$	90.45
$- As_4$	91.61	$- Nb_3$	62.04
$Nb_6 - Nb_1 - Nb_2$	96.72	$As_1 - Nb_2 - Nb_1$	112.65
$- As_4$	110.81	$- Nb_3$	94.86

ตาราง 5-1 แสดงมุมระหว่างอะตอมข้างเคียงของ Nb และ As

อะตอมข้างเคียงของ Nb <sub>3</sub>	มุม(องศา)	อะตอมข้างเคียงของ Nb <sub>4</sub>	มุม(องศา)
2Nb <sub>2</sub> -Nb <sub>3</sub> -2Nb <sub>3</sub>	65.14	2Nb <sub>9</sub> -Nb <sub>4</sub> -2Nb <sub>7</sub>	65.94
-2As <sub>1</sub>	49.66	-2As <sub>5</sub>	89.99
-As <sub>6</sub>	50.36	-As <sub>1</sub>	51.86
-2Nb <sub>2</sub>	67.65	-As <sub>2</sub>	49.59
2Nb <sub>3</sub> -Nb <sub>3</sub> -2As <sub>6</sub>	59.55	-2Nb <sub>9</sub>	64.17
-As <sub>6</sub>	52.46	2Nb <sub>6</sub> -Nb <sub>4</sub> -2As <sub>5</sub>	56.87
-Nb <sub>2</sub>	59.04	-2Nb <sub>7</sub>	66.33
-2Nb <sub>3</sub>	70.48	-Nb <sub>1</sub>	57.19
2Nb <sub>8</sub> -Nb <sub>3</sub> -2As <sub>1</sub>	50.72	-As <sub>3</sub>	51.73
-2As <sub>6</sub>	55.31	-2Nb <sub>6</sub>	68.60
-Nb <sub>9</sub>	50.98	2As <sub>5</sub> -Nb <sub>4</sub> -As <sub>1</sub>	76.64
-Nb <sub>10</sub>	51.78	-Nb <sub>1</sub>	47.97
-2Nb <sub>8</sub>	68.3	-2As <sub>5</sub>	84.60
2As <sub>1</sub> -Nb <sub>3</sub> -Nb <sub>9</sub>	46.07	2Nb <sub>7</sub> -Nb <sub>4</sub> -As <sub>2</sub>	53.58
-2As <sub>1</sub>	80.9	-As <sub>3</sub>	54.07
2As <sub>6</sub> -Nb <sub>3</sub> -Nb <sub>10</sub>	50.36	-2Nb <sub>7</sub>	73.31
-Nb <sub>2</sub>	49.23	As <sub>1</sub> -Nb <sub>4</sub> -Nb <sub>1</sub>	101.07
-2As <sub>6</sub>	84.84	-As <sub>2</sub>	83.28
As <sub>6</sub> -Nb <sub>3</sub> -Nb <sub>2</sub>	92.72	As <sub>3</sub> -Nb <sub>4</sub> -Nb <sub>1</sub>	90.39
-Nb <sub>9</sub>	127.18	-As <sub>2</sub>	85.26
Nb <sub>10</sub> -As <sub>3</sub> -Nb <sub>2</sub>	58.01		
-Nb <sub>9</sub>	82.09		

อะตอมข้างเคียงของNb <sub>5</sub>	มุม(องศา)	อะตอมข้างเคียงของNb <sub>6</sub>	มุม(องศา)
2Nb <sub>1</sub> -Nb <sub>5</sub> -2Nb <sub>2</sub>	68.27	2Nb <sub>1</sub> -Nb <sub>6</sub> -2Nb <sub>4</sub>	68.26
-2Nb <sub>6</sub>	66.99	-2As <sub>4</sub>	48.75
-As <sub>3</sub>	56.24	-As <sub>5</sub>	91.94
-As <sub>5</sub>	56.52	-2Nb <sub>1</sub>	66.28
-2Nb <sub>1</sub>	76.90	2Nb <sub>5</sub> -Nb <sub>6</sub> -2As <sub>3</sub>	56.09
2Nb <sub>10</sub> -Nb <sub>5</sub> -2Nb <sub>2</sub>	67.72	-2As <sub>4</sub>	51.26
-2Nb <sub>6</sub>	75.50	-Nb <sub>1</sub>	52.70
-As <sub>4</sub>	57.22	-Nb <sub>10</sub>	51.77
-As <sub>6</sub>	55.56	-2Nb <sub>5</sub>	69.48
-2Nb <sub>10</sub>	72.57	2Nb <sub>4</sub> -Nb <sub>6</sub> -2As <sub>3</sub>	56.36
2Nb <sub>2</sub> -Nb <sub>5</sub> -As <sub>6</sub>	54.17	-As <sub>5</sub>	52.33
-As <sub>5</sub>	55.97	-Nb <sub>7</sub>	54.35
-2Nb <sub>2</sub>	74.78	-2Nb <sub>4</sub>	82.42
2Nb <sub>6</sub> -Nb <sub>5</sub> -As <sub>3</sub>	52.30	2As <sub>3</sub> -Nb <sub>6</sub> -Nb <sub>7</sub>	50.14
-As <sub>4</sub>	55.75	-Nb <sub>1</sub>	51.31
-2Nb <sub>6</sub>	69.43	-2As <sub>3</sub>	86.15
As <sub>3</sub> -Nb <sub>5</sub> -As <sub>4</sub>	88.73	2As <sub>4</sub> -Nb <sub>6</sub> -Nb <sub>10</sub>	46.98
-As <sub>5</sub>	90.02	-2As <sub>4</sub>	68.68
As <sub>6</sub> -Nb <sub>5</sub> -As <sub>4</sub>	93.24	Nb <sub>10</sub> -Nb <sub>6</sub> -Nb <sub>1</sub>	83.68
-As <sub>5</sub>	88.01	-As <sub>5</sub>	129.15
		Nb <sub>7</sub> -Nb <sub>6</sub> -As <sub>5</sub>	87.37
		-Nb <sub>1</sub>	59.80

อะตอมข้างเคียงของNb <sub>7</sub>	มุม(องศา)	อะตอมข้างเคียงของNb <sub>8</sub>	มุม(องศา)
2Nb <sub>4</sub> -Nb <sub>7</sub> -2As <sub>3</sub>	58.72	2Nb <sub>3</sub> -Nb <sub>8</sub> -2Nb <sub>9</sub>	74.13
-2As <sub>2</sub>	60.61	-2Nb <sub>10</sub>	69.12
- Nb <sub>6</sub>	59.32	- As <sub>1</sub>	55.97
- Nb <sub>9</sub>	62.17	- As <sub>6</sub>	52.43
-2Nb <sub>4</sub>	73.31	-2Nb <sub>3</sub>	68.30
2Nb <sub>10</sub> -Nb <sub>7</sub> -2As <sub>3</sub>	88.57	2As <sub>2</sub> -Nb <sub>8</sub> -2Nb <sub>9</sub>	60.28
-2As <sub>2</sub>	59.94	-2Nb <sub>10</sub>	67.61
- As <sub>4</sub>	51.97	- Nb <sub>9</sub>	51.70
- Nb <sub>8</sub>	52.81	- Nb <sub>7</sub>	55.45
-2Nb <sub>10</sub>	64.09	-2As <sub>2</sub>	87.93
2As <sub>3</sub> -Nb <sub>7</sub> - Nb <sub>6</sub>	49.81	2Nb <sub>9</sub> -Nb <sub>8</sub> - Nb <sub>7</sub>	59.49
- As <sub>4</sub>	82.18	- As <sub>1</sub>	57.02
-2As <sub>3</sub>	85.64	-2Nb <sub>9</sub>	72.46
2As <sub>2</sub> -Nb <sub>7</sub> - Nb <sub>9</sub>	49.07	2Nb <sub>10</sub> -Nb <sub>8</sub> - Nb <sub>7</sub>	66.99
- Nb <sub>8</sub>	51.54	- As <sub>6</sub>	56.97
-2As <sub>2</sub>	85.18	-2Nb <sub>10</sub>	75.62
Nb <sub>6</sub> -Nb <sub>7</sub> - Nb <sub>9</sub>	104.92	Nb <sub>9</sub> -Nb <sub>8</sub> -Nb <sub>7</sub>	64.74
- As <sub>4</sub>	107.68	- As <sub>1</sub>	58.54
Nb <sub>8</sub> -Nb <sub>7</sub> - Nb <sub>9</sub>	59.51	As <sub>6</sub> -Nb <sub>8</sub> - Nb <sub>7</sub>	106.73
- As <sub>4</sub>	87.89	- As <sub>1</sub>	90.00

ตารางที่ 5-1 (ต่อ)

อะตอมข้างเคียงของNb <sub>9</sub>	มุม(องศา)	อะตอมข้างเคียงของNb <sub>10</sub>	มุม(องศา)
2Nb <sub>4</sub> -Nb <sub>9</sub> -2As <sub>2</sub>	55.25	2Nb <sub>8</sub> -Nb <sub>10</sub> -2Nb <sub>7</sub>	60.20
-2As <sub>1</sub>	49.69	-2As <sub>6</sub>	58.41
- Nb <sub>7</sub>	51.89	- Nb <sub>3</sub>	59.10
-2Nb <sub>4</sub>	64.17	- As <sub>2</sub>	50.90
2Nb <sub>8</sub> -Nb <sub>9</sub> -2Nb <sub>9</sub>	64.79	-2Nb <sub>8</sub>	75.62
-2As <sub>1</sub>	53.05	2Nb <sub>7</sub> -Nb <sub>10</sub> -2As <sub>4</sub>	48.91
- Nb <sub>3</sub>	54.89	- As <sub>2</sub>	48.17
- As <sub>2</sub>	51.99	-2Nb <sub>7</sub>	64.09
-2Nb <sub>8</sub>	72.46	2Nb <sub>5</sub> -Nb <sub>10</sub> -2As <sub>4</sub>	52.79
2Nb <sub>9</sub> -Nb <sub>9</sub> -2As <sub>2</sub>	57.80	-2As <sub>6</sub>	57.41
- As <sub>2</sub>	52.20	- Nb <sub>6</sub>	54.72
- Nb <sub>8</sub>	55.74	- Nb <sub>2</sub>	55.19
-2Nb <sub>9</sub>	69.09	-2Nb <sub>5</sub>	72.57
2As <sub>2</sub> -Nb <sub>9</sub> - Nb <sub>7</sub>	48.85	2As <sub>4</sub> -Nb <sub>10</sub> - Nb <sub>6</sub>	47.22
- Nb <sub>8</sub>	46.68	-2As <sub>4</sub>	82.82
-2As <sub>2</sub>	84.82	2As <sub>6</sub> -Nb <sub>10</sub> - Nb <sub>2</sub>	49.93
2As <sub>1</sub> -Nb <sub>9</sub> - Nb <sub>3</sub>	47.27	- Nb <sub>3</sub>	48.95
-2As <sub>1</sub>	82.87	-2As <sub>6</sub>	82.70
Nb <sub>7</sub> -Nb <sub>9</sub> - Nb <sub>3</sub>	130.70	Nb <sub>3</sub> -Nb <sub>10</sub> - Nb <sub>2</sub>	59.95
- Nb <sub>8</sub>	55.76	- As <sub>2</sub>	86.48
As <sub>2</sub> -Nb <sub>9</sub> - Nb <sub>3</sub>	84.74	Nb <sub>6</sub> -Nb <sub>10</sub> - Nb <sub>2</sub>	89.15
- Nb <sub>8</sub>	88.80	- As <sub>2</sub>	124.42

อะตอมข้างเคียงของ $As_1$	มุม(องศา)		
$2Nb_3-As_1-2Nb_9$	86.66	$2Nb_8-As_2-Nb_{10}$	61.49
- $2As_5$	84.93	- $2Nb_8$	87.93
- $Nb_8$	73.30	$2Nb_7-As_2-Nb_{10}$	71.89
- $Nb_2$	74.55	- $Nb_4$	65.81
- $2Nb_3$	80.90	- $2Nb_7$	85.18
$2Nb_9-As_1-2As_5$	86.02	$Nb_9-As_2-Nb_{10}$	106.69
- $Nb_8$	69.92	- $Nb_4$	132.12
- $Nb_4$	78.45	$Nb_{10}-As_2-Nb_4$	121.19
- $2Nb_9$	82.87		
$2As_5-As_1-Nb_4$	50.66	อะตอมข้างเคียงของ $As_3$	มุม(องศา)
- $Nb_2$	52.20	$2Nb_7-As_3-2Nb_6$	80.05
- $2As_5$	63.90	- $2As_4$	48.36
$Nb_8-As_1-Nb_4$	137.26	- $Nb_4$	67.21
- $Nb_2$	137.32	- $2Nb_7$	85.64
$Nb_4-As_1-Nb_2$	85.42	$2Nb_1-As_3-2Nb_6$	78.29
		- $2As_4$	46.87
อะตอมข้างเคียงของ $As_2$	มุม(องศา)	- $Nb_5$	64.35
$2Nb_9-As_2-2Nb_8$	78.62	- $2Nb_1$	84.79
- $2Nb_7$	82.08	$2Nb_6-As_3-Nb_4$	71.91
- $Nb_9$	70.00	- $Nb_5$	71.61
- $Nb_4$	75.16	- $2Nb_6$	86.15
- $2Nb_9$	84.82	$2As_4-As_3-2As_4$	62.86
$2Nb_8-As_2-2Nb_7$	75.01	$Nb_4-As_3-Nb_5$	129.25
- $Nb_9$	67.73		

อะตอมข้างเคียงของ $As_4$	มุม(องศา)		
$2Nb_6-As_4-2Nb_{10}$	85.80	$2Nb_2-As_5-2Nb_2$	82.54
- $2As_3$	85.40	$2Nb_4-As_5-2As_1$	49.70
- $Nb_1$	77.22	- $Nb_6$	70.8
- $Nb_5$	72.99	- $2Nb_4$	84.60
- $2Nb_6$	82.42	$2As_1-As_5-2As_1$	63.90
$2Nb_{10}-As_4-2As_3$	86.20	$Nb_5-As_5-Nb_6$	119.22
- $Nb_7$	79.11		
- $Nb_5$	69.99	อะตอมข้างเคียงของ $As_6$	มุม(องศา)
- $2Nb_{10}$	82.82	$2Nb_{10}-As_6-2Nb_3$	80.69
$2As_3-As_4-Nb_1$	50.14	- $2Nb_2$	77.54
- $Nb_7$	49.47	- $Nb_5$	67.03
- $2As_3$	62.86	- $Nb_8$	64.62
$Nb_1-As_4-Nb_7$	81.7	- $2Nb_{10}$	82.70
- $Nb_5$	140.02	$2Nb_3-As_6-2Nb_2$	80.49
$Nb_7-As_4-Nb_5$	132.28	- $Nb_3$	67.99
		- $Nb_8$	72.26
อะตอมข้างเคียงของ $As_5$	มุม(องศา)	- $2Nb_3$	84.84
$2Nb_1-As_5-2Nb_2$	74.50	$2Nb_2-As_6-Nb_5$	66.62
- $2Nb_4$	84.96	- $Nb_3$	71.40
- $Nb_5$	62.85	- $2Nb_2$	86.48
- $Nb_6$	72.85	$Nb_5-As_6-Nb_8$	113.86
- $2Nb_1$	83.13	- $Nb_3$	121.03
$2Nb_2-As_5-2As_1$	47.77	$Nb_3-As_6-Nb_8$	125.11
- $Nb_5$	64.61		



จากผลการวิจัยพบว่าค่าเทอร์มอลพารามิเตอร์ของอะตอม Nb และ As ให้ค่าที่เป็นลบซึ่งเป็นค่าที่ไม่ให้ความหมายใด ๆ เนื่องจาก B เป็นค่าที่แสดงถึงการสั้นของอะตอมเนื่องจากอุณหภูมิโดย  $B = 8T^2 \times 10^{-2}$  ซึ่งให้ค่าเป็นบวกเสมอ ดังนั้นการที่ค่า B เป็นลบแสดงว่าต้องมีความผิดพลาดจากข้อมูลที่ใช้ในการคำนวณปรับโครงสร้าง ความผิดพลาดที่เกิดขึ้นได้คือ

1. ความผิดพลาดเนื่องจากการวัดความเข้มของจุดสะท้อน ซึ่งจะเกิดความผิดพลาดได้ง่าย เพราะในการวัดความเข้มของจุดสะท้อนนั้นใช้เปรียบเทียบความเข้มที่ต่ำกับสเกลของความเข้มที่ต่ำขึ้น

2. ความผิดพลาดจากการวัดขนาดของผลึกมีผลทำให้การแก้การคูกักคืนของรังสีเอ็กซ์ ของผลึกผิดพลาดได้

3. การใช้ข้อมูลที่ไม่เพียงพอในการคำนวณ โดยที่จุดสะท้อนของผลึก  $Nb_5As_3$  ที่ได้จากภาพถ่ายไวส์เซนเบอร์ก จุดที่ใช้เวลาถ่ายภาพ 200 ชั่วโมงนั้นมีทั้งหมด 1199 จุดใน  $h0l$  และ  $h1l$  แต่ได้นำข้อมูลเพียง 257 จุดมาใช้ในการคำนวณปรับโครงสร้างของผลึกซึ่งโดยปกติการคำนวณปรับโครงสร้างของผลึกโดยวิธีเกลากำลังสองน้อยที่สุดจะต้องใช้ข้อมูลทั้งหมดในการคำนวณ

อย่างไรก็ตามเมื่อพิจารณาจากค่าเรซิดิวพบว่าในการคำนวณครั้งสุดท้ายได้ค่า  $R = 0.0925$  ซึ่งมีค่าต่ำพอที่จะยืนยันความถูกต้องของโครงสร้างของผลึก  $Nb_5As_3$  ที่ได้



H	K	L	FO	FC					
					8	0	13	252.46	229.58
					8	0	14	257.73	247.88
					9	0	1	157.78	150.21
					9	0	2	220.25	182.84
0	0	6	346.05	328.35	9	0	3	221.92	204.83
0	0	8	192.96	168.61	9	0	5	320.91	285.14
0	0	10	142.08	133.69	9	0	6	141.91	142.77
1	0	4	191.28	173.40	9	0	7	352.59	315.72
1	0	5	130.78	114.08	9	0	12	263.19	263.55
1	0	6	114.28	106.26	9	0	0	313.61	284.99
1	0	7	106.47	93.79	10	0	1	242.42	235.34
1	0	8	210.13	180.29	10	0	2	261.99	226.05
1	0	9	227.77	195.24	10	0	3	563.84	639.67
1	0	14	299.77	262.30	10	0	6	230.76	238.91
2	0	4	118.08	89.89	10	0	8	233.04	237.39
2	0	5	461.78	439.64	10	0	9	170.43	151.16
2	0	6	154.15	412.07	10	0	11	293.87	259.44
2	0	7	185.65	187.33	10	0	1	513.05	538.30
2	0	8	265.86	282.61	11	0	6	255.19	266.49
2	0	10	232.12	204.08	11	0	9	172.65	188.33
3	0	3	96.72	85.04	11	0	1	235.77	241.08
3	0	5	232.37	225.21	12	0	2	398.40	409.12
3	0	6	295.07	262.22	12	0	3	379.06	356.08
3	0	7	371.65	350.90	12	0	4	275.49	271.51
3	0	8	250.14	270.28	12	0	5	345.78	360.55
3	0	10	175.47	162.71	12	0	8	249.40	237.98
3	0	13	253.54	228.35	12	0	9	407.25	406.24
3	0	14	162.76	179.80	12	0	3	289.65	293.49
4	0	3	91.16	74.54	13	0	5	263.14	245.69
4	0	4	193.13	184.80	13	0	9	338.93	342.02
4	0	5	445.44	462.13	13	0	11	360.99	385.96
4	0	7	193.51	193.63	13	0	0	180.75	208.37
4	0	8	478.74	463.37	14	0	1	365.59	390.75
4	0	9	335.19	281.33	14	0	2	183.91	152.81
4	0	10	213.49	219.97	14	0	3	161.62	115.85
4	0	11	248.78	249.18	14	0	4	178.67	133.11
4	0	12	251.47	230.02	14	0	5	159.11	133.35
5	0	3	85.84	59.83	14	0	8	206.75	194.91
5	0	4	208.67	196.01	14	0	9	219.46	190.35
5	0	5	206.43	184.90	14	0	2	251.26	214.60
5	0	7	231.51	187.10	15	0	3	91.42	102.66
5	0	10	352.50	330.89	15	0	4	144.53	148.83
5	0	11	174.02	184.07	15	0	6	179.57	206.33
5	0	13	480.15	414.86	15	0	9	187.19	187.27
6	0	7	224.98	228.81	15	0	11	294.70	290.34
6	0	12	156.97	159.29	16	0	1	211.47	193.80
6	0	14	268.37	251.47	16	0	2	270.99	252.75
7	0	4	622.44	642.65	16	0	3	158.77	150.08
7	0	5	411.19	418.94	16	0	5	274.40	319.53
7	0	9	220.01	183.90	16	0	7	254.42	231.59
8	0	1	101.84	86.33	16	0	11	397.84	389.14
8	0	3	239.05	227.04	17	0	1	391.30	392.25
8	0	4	468.78	453.15	17	0	2	421.10	411.30
8	0	6	250.40	251.35	17	0	3	136.54	105.10
8	0	7	185.99	153.35	17	0			

ตาราง 5-2 เปรียบเทียบค่า  $F_o$  และ  $F_c$  ของผลึก  $Nb_5As_3$  ในเซเบอร์  $h0l$  และ  $h1l$   
จำนวน 257 จุดที่ใช้คำนวณหาปริมาตรของผลึก  $Nb_5As_3$  ตลอดจนหาปริมาตรของมัน.

17	0	4	173.32	154.93	3	1	5	350.71	278.86
17	0	5	191.33	197.64	3	1	6	190.83	151.10
17	0	7	260.27	226.15	3	1	7	286.39	246.37
18	0	0	149.07	112.30	3	1	10	188.01	152.42
18	0	3	116.81	106.92	3	1	12	228.35	243.07
18	0	5	314.86	347.81	4	1	3	639.74	611.87
18	0	10	321.18	378.14	4	1	4	403.34	359.37
19	0	1	184.00	174.46	4	1	6	204.67	182.46
19	0	3	219.91	217.25	4	1	10	579.07	535.38
19	0	5	226.36	217.00	4	1	11	357.14	345.63
19	0	6	398.66	418.99	5	1	3	589.21	521.17
20	0	2	302.11	343.46	5	1	4	286.27	224.93
20	0	3	156.94	158.83	5	1	7	236.62	202.67
20	0	5	166.07	163.49	5	1	10	229.79	184.11
20	0	6	135.43	130.30	6	1	2	271.98	237.04
21	0	2	264.84	247.87	6	1	4	154.10	127.93
21	0	3	312.14	343.28	6	1	7	416.42	360.10
21	0	5	204.80	201.06	6	1	8	297.87	243.29
21	0	6	264.86	265.81	6	1	9	450.81	424.24
22	0	0	236.40	239.50	6	1	11	210.34	224.18
22	0	1	152.17	181.61	7	1	1	170.48	136.85
22	0	7	200.04	208.95	7	1	2	606.86	692.67
22	0	8	318.29	257.20	7	1	4	214.91	196.30
23	0	5	202.24	207.98	7	1	11	178.45	181.34
23	0	8	347.48	362.81	8	1	0	358.17	600.59
23	0	11	248.33	291.70	8	1	1	447.57	431.21
24	0	2	226.57	222.61	8	1	2	465.27	416.14
24	0	5	213.84	218.89	8	1	3	247.33	225.42
24	0	7	296.44	289.71	8	1	5	211.24	156.17
24	0	11	215.15	225.41	8	1	7	173.26	143.91
25	0	9	273.84	292.45	8	1	8	352.03	373.62
25	0	11	189.89	172.76	8	1	10	270.57	280.56
26	0	0	371.95	372.66	9	1	1	370.92	385.30
26	0	6	255.23	213.14	9	1	2	121.05	110.89
27	0	2	269.66	238.09	9	1	3	136.24	113.60
27	0	3	301.29	289.95	9	1	4	220.81	192.86
28	0	2	479.35	535.82	9	1	7	302.15	293.25
28	0	4	203.05	201.41	10	1	0	110.23	361.91
28	0	7	239.34	272.09	11	1	1	243.89	237.96
29	0	3	405.57	343.38	11	1	6	547.80	508.46
30	0	4	309.48	306.91	11	1	7	423.96	415.90
31	0	3	275.22	275.87	12	1	0	167.09	118.35
32	0	3	251.96	289.83	12	1	1	316.97	321.94
0	1	5	399.72	353.19	12	1	3	200.96	174.59
0	1	7	123.79	106.55	12	1	5	255.53	192.85
0	1	9	316.23	273.43	12	1	8	460.76	463.76
0	1	11	269.90	282.71	13	1	1	123.15	126.73
1	1	4	600.72	579.51	13	1	4	243.05	218.30
1	1	5	240.19	194.94	13	1	5	182.20	153.69
1	1	7	184.33	149.24	13	1	7	182.26	185.82
1	1	10	235.58	214.85	13	1	13	406.54	418.06
1	1	12	195.88	198.09	14	1	0	93.38	144.40
2	1	3	449.50	404.63	14	1	2	163.40	142.11
2	1	5	208.66	183.62	14	1	5	276.95	216.99
2	1	7	285.99	261.26	14	1	11	219.17	217.27
2	1	8	259.37	213.54	15	1	2	401.95	422.12
3	1	3	268.34	215.40	15	1	3	236.66	229.68
					15	1	5	310.65	315.18

15	1	6	208.53	204.02
15	1	11	219.63	189.74
16	1	6	462.24	459.27
17	1	1	318.85	323.96
17	1	5	365.66	349.63
17	1	7	229.39	222.01
17	1	8	377.43	388.92
18	1	2	212.35	204.10
18	1	8	206.33	191.08
18	1	12	256.46	254.27
19	1	1	310.73	302.25
19	1	2	320.11	361.21
19	1	3	282.71	294.69
20	1	1	213.56	223.78
20	1	3	286.07	232.22
20	1	5	393.94	407.98
20	1	11	300.02	337.47
21	1	1	196.69	162.91
21	1	2	222.86	240.82
21	1	3	314.70	310.16
21	1	9	297.64	281.24
22	1	0	230.89	228.33
22	1	1	268.32	245.81
22	1	4	241.98	135.86
22	1	6	212.78	207.98
23	1	4	139.37	165.11
24	1	0	471.37	500.00
24	1	3	329.66	333.80
24	1	12	396.06	440.35
25	1	6	195.89	207.50
26	1	6	240.30	242.52
28	1	7	302.39	342.07
28	1	8	296.89	310.55
29	1	6	401.09	459.64
32	1	1	330.27	357.31
34	1	1	266.45	275.27