การศึกษาโครงสร้างของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ โดยวิธีเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

นายเอกชัย หุ่นนิวัฒน์

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
ภาควิชาฟิสิกส์
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
พ.ศ. 2527

ISBN 974-563-203-1

013109
I 18345384

X-RAY DIFFRACTION STUDY OF THE CRYSTAL STRUCTURE OF $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$

Mr. Ekachai Hoonnivathana

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1984

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การศึกษาโครงสร้างของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ โดยวิธีเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์
โดย	นายเอกชัย หุ่นนิวัฒน์
ภาควิชา	ฟิสิกส์
อาจารย์ที่ปรึกษา	รองศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภวะนันท์

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้นับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต

.....คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

(รองศาสตราจารย์ ดร.สุประดิษฐ์ บุนนาค)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

.....ประธานกรรมการ

(รองศาสตราจารย์ สุพนิต พราหมทัต)

.....กรรมการ

(รองศาสตราจารย์ ดร.ศรีนวล ถนอมกุล)

.....กรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ศจี วงศ์ไชยบูรณ์)

.....กรรมการ

(รองศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภวะนันท์)

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การศึกษาโครงสร้างของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ โดยวิธีเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์
ชื่อ	นายเอกชัย หุ่นนิวัฒน์
อาจารย์ที่ปรึกษา	รองศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภวะนันท์
ภาควิชา	ฟิสิกส์
ปีการศึกษา	2526

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทคัดย่อ

ผลึกเดี่ยว $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ มีลักษณะเป็นรูปเข็ม โปร่งใส และไม่มีสี อยู่ในระบบทริโกนัล มีหมู่สมมาตรสามมิติเป็น $P3_121$ เพอร์แรมิเตอร์ละเอียดในหนึ่งหน่วยเซลล์ได้จากเทคนิคการเลี้ยวเบนแบบกีเนียร์-เอกของผลึกผงมีค่า $a = 10.013 \pm 0.001$ และ $c = 18.387 \pm 0.004$ Å มีปริมาตรของหน่วยเซลล์ (V) เป็น 1596.6 $(Å)^3$ ความหนาแน่นจากวิธีการลอยตัว (D_m) มีค่า 1.89 กรัม (ซม.)$^{-3}$ จำนวนหน่วยสูตรในหนึ่งหน่วยเซลล์ (Z) เท่ากับ 3 และ D_x = 1.93 กรัม (ซม.)$^{-3}$

บันทึกความเข้มรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบน ของ Cu ชนิด K_α ความยาวคลื่น (λ) = 1.5418 Å ที่เลี้ยวเบนจากระนาบอิสระ 247 ระนาบของผลึกลงบนแผ่นฟิล์มซ้อนโดยวิธีของไวซ์เซ็นเบอร์ก และวัดความเข้มสัมพัทธ์เทียบกับความเข้มมาตรฐานที่เตรียมขึ้น

สัมประสิทธิ์การดูดกลืนสำหรับรังสีเอ็กซ์ที่ใช้มีค่า 168.7 ซม.$^{-1}$ ขนาดของผลึกมีรัศมีเป็น 0.01 ซม. ยาว 0.035 ซม. การหาโครงสร้างผลึกใช้วิธีอะตอมหนักในการปรับเพอร์แรมิเตอร์ตำแหน่งและอุณหภูมิ ใช้วิธีผลต่างกำลังสองน้อยที่สุดแบบเมทริกซ์เต็มชุด ได้ค่าดัชนีความเชื่อถือ (R) เป็น 0.111

ในการศึกษาตำแหน่งอะตอมในหนึ่งหน่วยเซลล์พบว่า อะตอม Tl และอะตอม Br อยู่ที่ตำแหน่งพิเศษ 3a และ 3b ส่วนอะตอมที่เหลืออยู่ตำแหน่งทั่วไป 6c การจับพันธะของอะตอม Tl-Br อยู่ในระนาบเดียวกับการจับพันธะของอะตอม Tl-N ของกลุ่ม $C_{12}H_8N_2$ ส่วนการจับพันธะของอะตอม Tl-C ของกลุ่ม $(C_6H_5)_2$ อยู่บริเวณส่วนบนและส่วนล่างของระนาบN-Tl-Br ตามลำดับ

Thesis Title	X-Ray Diffraction Study of the Crystal Structure of $(C_6H_5)_2\ TlBrC_{12}H_8N_2$
Name	Mr. Ekachai Hoonnivathana
Thesis Adviser	Associate Professor Phathana Phavanantha, Ph.D.
Department	Physics
Academic Year	1983

ABSTRACT

$(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ crystallizes as colourless and transparent needles in the trigonal system, space group $P3_121$, with cell dimensions $a = 10.013 \pm 0.001$, $c = 18.387 \pm 0.004$ Å, $V = 1596.6$ $(Å)^3$, $D_m =$ 1.89 $gm.cm^{-3}$, $Z=3$ formular unit/unitcell and $D_x = 1.93$ $gm.cm^{-3}$.

The unitcell parameters were obtained from powdered sample using the Guinier-Hägg diffraction technique. The Weissenberg method was employed with Cu K_α radiation $\lambda = 1.5418$ Å to record 247 independent reflections on multiple films, and the intensities were measured visually.

The absorption correction was made with the linear absorption $\mu_{CuK_\alpha} = 168.7\ cm^{-1}$ for an approximately cylindrical crystal of $r = 0.01$ cm. , $l = 0.035$ cm. The structure has been determined by the heavy-atom method, positional and isotropic thermal parameters were refined by the full-matrix least-squares method to a final R index of 0.111 .

Tl and Br atoms are found to occupy special positions in the unitcell at 3a, 3b and the rest in general positions of 6c. The Tl-Br bonds are coplanar with the Tl-N bonds spanning across the group $C_{12}H_8N_2$, whereas the $(C_6H_5-)_2$ groups are both over and under the N-Tl-Br plane, respectively.

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลงได้ด้วยความกรุณาของ รองศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภวะนันท์ ซึ่งเป็นอาจารย์ที่ปรึกษาได้กรุณาให้คำแนะนำช่วยเหลือและควบคุมการวิจัยอย่างใกล้ชิดด้วยดีตลอดมาจึงขอกราบขอบพระคุณไว้ ณ ที่นี้

ผู้เขียนขอกราบขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ สุพนิจ พราหมทัศ รองศาสตราจารย์ ดร.ศรีนวล ถนอมกุล ที่ได้กรุณาให้คำแนะนำช่วยเหลือเกี่ยวกับการวิจัยครั้งนี้ ขอกราบขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์ ดร.ศศิลักษณ์ ทรรพนันทน์ และอาจารย์ พรรณี มุกดีพร้อมที่กรุณาได้มอบผลึกที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้

ผู้เขียนขอขอบคุณเจ้าหน้าที่สถาบันบริการคอมพิวเตอร์ จุฬาฯ ที่ได้กรุณาให้ความสะดวกในการรับส่งโปรแกรมการคำนวณ นอกจากนี้ขอขอบคุณเพื่อน ๆ ที่ได้ช่วยเหลือในการจัดพิมพ์วิทยานิพนธ์ฉบับนี้

อนึ่งในระหว่างปีการศึกษา 2522-2523 ผู้เขียนได้รับทุนการศึกษาจากโครงการผลิตและพัฒนาอาจารย์ จึงขอขอบพระคุณมา ณ ที่นี้

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญ

หน้า

บทคัดย่อภาษาไทย..... ง

บทคัดย่อภาษาอังกฤษ..... จ

กิตติกรรมประกาศ..... ช

รายการตารางประกอบ..... ญ

รายการรูปประกอบ..... ฏ

บทที่

1 บทนำ..... 1

2 ทฤษฎีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์และทฤษฎีการหาโครงสร้าง..... 4

2.1 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์..... 4

2.1.1 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ตามเงื่อนไขของลาวเอ.... 5

2.1.2 กฎของแบรกก์..... 7

2.1.3 แลททิล่วนกลับ..... 8

2.2 การถ่ายภาพผลึกเดี่ยว..... 11

2.2.1 การถ่ายภาพแบบผลึกหมุน..... 11

2.2.2 การถ่ายภาพแบบไวซ์เซ็นเบอร์ก..... 13

2.2.3 การถ่ายภาพแบบพรีเซสชัน..... 20

2.3 การหาโครงสร้างของผลึก..... 20

2.3.1 แฟคเตอร์โครงสร้างและความหนาแน่นอิเลคตรอน.. 20

2.3.2 ฟังก์ชันแพทเทอร์สัน..... 23

3. การถ่ายภาพผลึกด้วยวิธีพรีเซสชัน..... 28

3.1 การพัฒนาวิธีถ่ายภาพแบบพรีเซสชัน..... 28

3.2 การเคลื่อนที่ของผลึกวิธีพรีเซสชัน..... 30

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

สารบัญ (ต่อ)

บทที่		หน้า
3	3.2.1 การเคลื่อนที่ของระนาบชั้นที่คู่นย์	31
	3.2.2 การเคลื่อนที่ของระนาบชั้นที่n	32
	3.3 กล้องพรีเซล่ชัน	33
	3.4 ภาพถ่ายพรีเซล่ชัน	34
	3.5 การคำนวณมิติเซลล์	39
	3.6 การปรับแกนของผลึก	40
	3.7 ขีดจำกัดของกล้องพรีเซล่ชัน	44
4	การทดลองและการคำนวณโครงสร้างผลึก	48
	4.1 การทดลอง	48
	4.1.1 ลักษณะทั่วไปและการเลือกผลึก	48
	4.1.2 การหาความหนาแน่นของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$	49
	4.1.3 การปรับแกนของผลึก	50
	4.1.4 การถ่ายภาพแบบผลึกหมุน	54
	4.1.5 การถ่ายภาพแบบไวซ์เซ็นเบอร์ก	57
	4.1.6 การถ่ายภาพแบบพรีเซล่ชัน	60
	4.1.7 ค่ามิติเซลล์อย่างละเอียด	66
	4.1.8 หมู่สมมาตรสามมิติ	67
	4.1.9 การรวบรวมข้อมูลความเข้ม	73
	4.2 การคำนวณโครงสร้างผลึก	75
	4.2.1 การคำนวณขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้าง	75
	4.2.2 การหาตำแหน่งอะตอม	77
	4.2.3 การปรับโครงสร้าง	87
5	สรุปและวิจารณ์ผลการทดลอง	98
เอกสารอ้างอิง		123
ภาคผนวก		125
ประวัติผู้เขียน		127

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

รายการตารางประกอบ

ตารางที่		หน้า
4.1	แสดงการหาค่าระยะ c ของมิติเซลล์.....	55
4.2	แสดงการหาค่าระยะ a ของมิติเซลล์.....	56
4.3	แสดงค่ามุม μ_l และ s_l เมื่อ c เป็นแกนหมุน.....	58
4.4	แสดงค่ามุม μ_h และ s_h เมื่อ a เป็นแกนหมุน.....	58
4.5	แสดงผลการคำนวณ มิติเซลล์ b จากภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์กเลย์ เออร์ที่ 0.....	59
4.6	แสดงค่า s, r_s และ $\bar{\mu}$ โดยเลือก Δ = 3 มม. เมื่อใช้ c เป็นแกนพรีเซสัน.....	60
4.7	แสดงค่า s, r_s และ $\bar{\mu}$ โดยเลือก Δ = 2 มม. เมื่อใช้ a เป็นแกนพรีเซสัน.....	60
4.8	แสดงข้อมูลของ $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ จากภาพถ่ายผลึกผงใช้กล้อง Guinier-Hägg แบบ I XDC 700.....	68
4.9	แสดงเงื่อนไขการเกิดจุดสะท้อนของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$	73
4.10	แสดงจำนวนแผ่นฟิล์มที่ใช้ในการถ่ายภาพของแต่ละเลย์เออร์...	74
4.11	แสดงค่าแก้การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$	76
4.12	แสดงเวคเตอร์อาร์คเกอร์ของหมู่สมมาตรสามมิติ $P3_121$.....	77
	(ก) ที่ตำแหน่งพิเศษ 3a (ข) ที่ตำแหน่งพิเศษ 3b.....	78
4.13	แสดงตำแหน่งอะตอม Tl ที่ตำแหน่งพิเศษ 3a.....	80
4.14	แสดงตำแหน่งอะตอม N และ C เพียงครึ่งหนึ่งของหมู่ $C_{12}H_8N_2$	82
4.15	แสดงตำแหน่งอะตอม C ของวงแหวน C_6H_5.....	83
4.16	แสดงตำแหน่งอะตอม H ของหมู่ $C_{12}H_8N_2$ ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$.....	84
4.17	แสดงตำแหน่งอะตอม H ของหมู่ C_6H_5 ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$.....	84

รายการตารางประกอบ (ต่อ)

ตารางที่		หน้า
4.18	แสดงตำแหน่งอะตอม Tl และ Br หลังจากการปรับโดยวิธีของบูธเทียบกับตำแหน่งเดิม	88
4.19	แสดงตำแหน่งอะตอมของ Tl และ Br หลังจากการปรับอย่างละเอียด	91
4.20	แสดงค่าแฟคเตอร์สเกล และดัชนีความถูกต้องของแฟคเตอร์ที่เลย์เออร์ต่าง ๆ	91
4.21	แสดงค่า F_o และ F_c ของจุดสะท้อน hkl หลังจากการปรับโครงสร้างผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ สิ้นสุดลงแล้ว	92
5.1	แสดงข้อมูลทั่วไปของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$	98
5.2	แสดงตำแหน่งอะตอมในหนึ่งหน่วย อสมมาตรของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ หลังจากปรับตำแหน่งอะตอม	99
5.3	แสดงความยาวพันธะของอะตอมต่าง ๆ ในหนึ่งหน่วยอสมมาตร	103
5.4	แสดงค่ามุมระหว่างอะตอมต่าง ๆ ในหนึ่งหน่วยอสมมาตร	106

ศูนย์วิทยทรัพยากร
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

รายการรูปประกอบ

รูปที่		หน้า
2.1	แสดงการเรียงตัวของจุดแลททิสใน 2 มิติ.....	4
2.2	แสดงทิศทางการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์เมื่อผ่านจุดแลททิส A_1 และ A_2	5
2.3	แสดงการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ตามเงื่อนไขลาวเอใน 3 มิติ.....	6
2.4	แสดงการสะท้อนของรังสีเอ็กซ์บนระนาบของผลึก.....	7
2.5	แสดงจุดแลททิสส่วนกลับของระนาบอะตอมปกติ.....	8
2.6	แสดงทิศทางรังสีตกกระทบและสะท้อนตามกฎของแบรกก์.....	9
2.7	แสดงทรงกลมของการสะท้อนที่ความยาวคลื่นต่างกัน.....	10
2.8	แสดงลักษณะเลย์เออร์ไลน์ที่ปรากฏบนฟิล์มของการถ่ายภาพผลึกหมุน	11
2.9	แสดงการถ่ายภาพแบบผลึกหมุนมี $\vec{c}$ เป็นแกนหมุน.....	12
2.10	แสดงการถ่ายภาพแบบไวซ์เซ็นเบอร์กเลยเออร์ไลน์ที่ศูนย์.....	14
2.11	แสดงการถ่ายภาพไวซ์เซ็นเบอร์กเลย์เออร์ไลน์ที่ 1 โดยวิธี equi-inclination.....	15
2.12	แสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะของเลย์เออร์ไลน์ในแลททิสส่วนกลับกับระยะที่ปรากฏบนฟิล์ม.....	15
2.13	แสดงลักษณะภาพถ่ายที่ได้จากวิธีไวซ์เซ็นเบอร์ก.....	17
2.14	ก. แสดงจุดสะท้อนซึ่งสมมูลย์กันจากภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์ก	18
	ข. แสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะแลททิสส่วนกลับกับระยะที่ปรากฏบนฟิล์ม.....	18
2.15	แสดงค่าผลรวมของแฟคเตอร์การกระเจิง.....	21
2.16	แสดงเวคเตอร์ของอะตอม (ก) ในสเปสของผลึก (ข) ในสเปสของแพทเทอร์สัน.....	26
3.1	แสดงสมมาตร 2 mm บนฟิล์มเนื่องจากการถ่ายภาพแบบผลึกหมุน	29
3.2	แสดงการหมุนของผลึกทั้งทางแกนนอน (H) และแกนดิ่ง (V)	29

รายการรูปประกอบ (ต่อ)

รูปที่		หน้า
3.3	แสดงลักษณะการเคลื่อนที่แบบพรีเซสชันของผลึก.....	30
3.4	แสดงการเคลื่อนที่ระนาบส่วนกลับชั้นที่ศูนย์.....	31
3.5	แสดงการเคลื่อนที่ของระนาบส่วนกลับชั้นที่ 1.....	32
3.6	แสดงหลักการทำงานของกล้องพรีเซสชัน.....	33
3.7	แสดงการถ่ายภาพของระนาบชั้นที่ศูนย์.....	34
3.8	แสดงการถ่ายภาพของระนาบชั้นที่ 1.....	35
3.9	แสดงรูปโนโมแกรมสำหรับเลือกค่า s, r_s, $\bar{\mu}$ เมื่อทราบ nd*	37
3.10	แสดงรูปร่างของฉากกั้นรังสีเอ็กซ์.....	38
3.11	แสดงลักษณะภาพถ่ายพรีเซสชันของระนาบชั้นที่ 0.....	39
3.12	แสดงระนาบส่วนกลับที่ยังไม่ได้ปรับแกนตัดกับทรงกลมการสะท้อน.	
	(ก) ระนาบส่วนกลับตัดด้านบนของทรงกลมการสะท้อน.....	41
	(ข) ระนาบส่วนกลับตัดด้านล่างของทรงกลมการสะท้อน.....	41
3.13	แสดงลักษณะภาพถ่ายที่ได้ในขณะปรับแกนพรีเซสชันของผลึก.....	43
3.14	แสดงลักษณะการปรับแกนพรีเซสชันของผลึกของ H_{arc} , V_{arc} และ V_{dial}.....	45
4.1	แสดงการเลือกผลึกโดยวางผลึกไว้ระหว่างแผ่นโพลารอยด์(polaroid)	49
4.2	แสดงวิธีการถ่ายภาพเพื่อปรับแกนหมุนของผลึกโดยให้อาร์คทำมุม 45° กับรังสีเอ็กซ์	
	(ก) แสดงตำแหน่งของอาร์คทั้งสอง.....	51
	(ข) แสดงจุดสะท้อน R และ $\bar{R}$ บนฟิล์มที่สอดคล้องกับจุดแลททิส ส่วนกลับ A และ $\bar{A}$ ตามลำดับ.....	51
4.3	แสดงลักษณะของเส้นเลย์เออร์ที่ปรากฏบนฟิล์มขณะปรับแกนหมุนของผลึกโดยการถ่ายภาพแบบดับเบิลออสซิลเลชัน.....	53

รายการรูปประกอบ (ต่อ)

รูปที่			หน้า
4.4	(ก)	แสดงภาพถ่ายแบบผลึกหมุนของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ c เป็นแกนหมุนผลึกหมุนในช่วง $\pm 30^\circ$ (CuK_α 35 kV 20mA ตัวกรอง Ni 6 ชั่วโมง).....	54
	(ข)	แสดงภาพถ่ายแบบผลึกหมุนของผลึก$(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ c เป็นแกนหมุนผลึกหมุนในช่วง $\pm 50^\circ$ (CuK_α 35 kV 20mA ตัวกรอง Ni 3 ชั่วโมง).....	56
4.5	(ก)	แสดงภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์กเลย์เออร์ที่ 0 หรือ hko ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ c เป็นแกนหมุน (CuK_α 35 kV 20mA ตัวกรอง Ni 81 ชั่วโมง)	61
	(ข)	แสดงภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์กเลย์เออร์ที่ 1 หรือ hk1 ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ c เป็นแกนหมุน (CuK_α 35 kV 20mA ตัวกรอง Ni 81 ชั่วโมง)	61
	(ค)	แสดงภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์กเลย์เออร์ที่ 2 หรือ hk2 ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ c เป็นแกนหมุน (CuK_α 35kV 20mA ตัวกรอง Ni 81 ชั่วโมง)	62
	(ง)	แสดงภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์กเลย์เออร์ที่ 0 หรือ ok1 ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ a เป็นแกนหมุน (CuK_α 35 kV 20mA ตัวกรอง Ni 24 ชั่วโมง)	62
	(จ)	แสดงภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์กเลย์เออร์ที่ 1 หรือ 1k1 ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ a เป็นแกนหมุน (CuK_α 35 kV 20mA ตัวกรอง Ni 24 ชั่วโมง)	63
4.6	(ค)	แสดงภาพถ่ายพรีเซสชันตามแกน c เลย์เออร์ที่ 0 หรือ hko $\bar{u}$ = 30 องศา (Mo K_α 50 kV 14 mA ตัวกรอง Zr 94 ชั่วโมง)	63

รายการรูปประกอบ (ต่อ)

รูปที่		หน้า
4.6	(ข) แสดงภาพถ่ายพรีเซสชันตามแกน c เลย์เออร์ที่ 1 หรือ hk1 $\bar{\mu}$ = 25 องศา (Mo K_α 50 kV 14mA ตัวกรอง Zr 105 ชั่วโมง).....	64
	(ค) แสดงภาพถ่ายพรีเซสชันตามแกน c เลย์เออร์ที่ 2 หรือ hk2 $\bar{\mu}$ = 27 องศา (Mo K_α 50 kV 14mA ตัวกรอง Zr 116 ชั่วโมง).....	64
	(ง) แสดงภาพถ่ายพรีเซสชันตามแกน a เลย์เออร์ที่ 0 หรือ ok1 $\bar{\mu}$ = 30 องศา (Mo K_α 50 kV 14mA ตัวกรอง Zr 100 ชั่วโมง).....	65
	(จ) แสดงภาพถ่ายพรีเซสชันตามแกน a เลย์เออร์ที่ 1 หรือ 1k1 $\bar{\mu}$ = 25 องศา (Mo K_α 50 kV 14 mA ตัวกรอง Zr123 ชั่วโมง).....	65
4.7	แสดงภาพถ่ายผลึกผงของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ ด้วยกล้อง Guinier-Hägg แบบXDC 700 (Cu K_{α_1} นาน 2 ชั่วโมง).....	66
4.8	แสดงโคออร์ดิเนตของจุดสะท้อนของภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบอร์ก เลย์เออร์ที่ 0 หรือ hko ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$	69
4.9	แสดงแลททิสส่วนกลับของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ เมื่อ c เป็นแกนหมุน (ก) ระนาบ hko (ข) ระนาบ hk1 (ค) ระนาบ hk2	70, 71
4.10	แสดงแลททิสส่วนกลับของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ เมื่อ a เป็นแกนหมุน (ก) ระนาบ ok1 (ข) ระนาบ1k1	72
4.11	แสดงแผนภาพแพทเทอร์สันที่ $P(u, v, \frac{1}{3})$ ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$.....	79

รายการรูปประกอบ (ต่อ)

รูปที่		หน้า
4.12	แสดงแผนภาพแพทเทอร์สันที่ $P(u, v, \frac{2}{3})$ ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$.....	79
4.13	แสดงการจับพันธะของ $(R_F)_2L_2TlX$.....	81
4.14	แสดงการจับพันธะของ $C_{12}H_8N_2$.....	82
4.15	แสดงแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนที่ $Z = \frac{1}{6}$ บนระนาบ xy เมื่อ x = 0-0.5 และ y=0-0.5	85
4.16	แสดงแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนของ C ของกลุ่ม C_6H_5	
	(ก) ที่ระนาบ x = 0-0.5,y = 0-0.5 เมื่อ Z = 0.363.....	85
	(ข) ที่ระนาบ x = 0-0.5, y = 0-0.5 เมื่อ Z = 0.403.....	86
5.1	แสดงโครงสร้างอะตอมของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$	101
5.2	แสดงตำแหน่งอะตอม Tl และBr ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$ ภายใน 4 หน่วยเซลล์เมื่อฉายลงไปตามแกนZ	102
5.3	แสดงแบบจำลอง 4 หน่วยเซลล์ของผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$	102
5.4	แสดงลักษณะการจับพันธะของกลุ่ม $C_{12}H_8N_2$.....	119
5.5	แสดงโครงสร้างอะตอมของผลึก $C_{14}H_{14}ClN_2O_4Tl$...	120
5.6	แสดงความยาวและมุมของพันธะระหว่างอะตอม Tl กับอะตอมข้างเคียง	
	(ก) ผลึก $C_{14}H_{14}ClN_2O_4Tl$	
	(ข) ผลึก $(C_6H_5)_2TlBrC_{12}H_8N_2$.....	121
5.7	แสดงความยาวและมุมของพันธะระหว่างอะตอม C-C และอะตอม C-H ของวงแหวน C_6H_5.....	122