

บทที่ 4

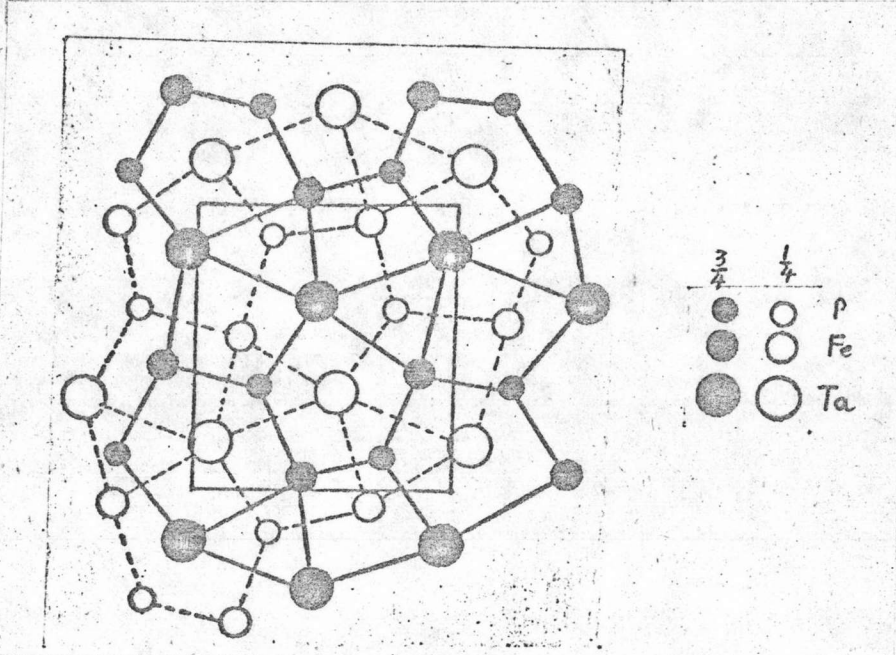


สรุปและอภิปรายผล

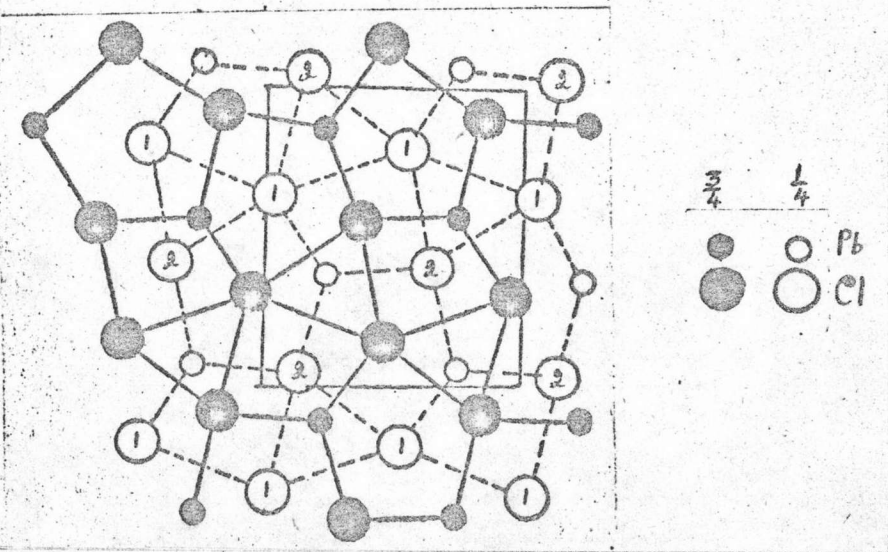
ผลของการวิจัยเพื่อหาโครงสร้างของผลึกทานทาลัม เพอร์สฟอสไฟด์พบว่าผลึกอยู่ในระบบ  
ออร์โธรมบิค หมู่สมมาตร 3 มิติ เป็น  $Pnma$  (No.62) ในหนึ่งหน่วยเซลล์มี 4 หน่วยสูตรโดย  
ประกอบด้วยอะตอมของ Ta, Fe และ P อย่างละ 4 อะตอม อยู่ที่ตำแหน่งพิเศษ 4c  
ความหนาแน่น  $D_x = 11.69$  และ  $D_m = 11.2 \pm 0.4$  กรัมต่อลูกบาศก์เซนติเมตร ที่ 34 องศา  
เซลเซียส

พิจารณาโครงสร้างของผลึก TaFeP ตามรูป 4.1 ซึ่งเป็นการฉายลงในแนวแกน b  
เปรียบเทียบกับรูป 4.2 ซึ่งเป็นโครงสร้างของผลึก  $PbCl_2$  ฉายลงในแนวแกน b พบว่า  
โครงสร้างของผลึกทั้งสองนี้คล้ายคลึงกัน โดยที่ Cl (ตัวที่ 1 ซึ่งมีตัวเลขโคออดิเนชันเป็นรูป  
ห้าเหลี่ยม) แทนด้วย Ta ส่วน Cl<sub>2</sub> (ตัวที่มีตัวเลขโคออดิเนชันเป็นรูปสี่เหลี่ยม) แทนด้วย Fe  
และ Pb แทนด้วย P สรุปได้ว่าอะตอมของโลหะในโครงสร้าง  $PbCl_2$  ถูกแทนที่ด้วย  
อะตอมของโลหะในโครงสร้างของผลึก TaFeP และอะตอมของโลหะใน  $PbCl_2$  ถูกแทนที่ด้วย  
อะตอมของโลหะในโครงสร้างของผลึก TaFeP

เนื่องจากคำว่า แอนติ (anti-) ในความหมายของโครงสร้างของผลึกนั้น หมายถึง  
โครงสร้างที่มีลักษณะผันกลับ (reversed) คือจะพบอะตอมของโลหะในตำแหน่งที่เป็นโลหะ  
และพบอะตอมของโลหะในตำแหน่งที่เป็นโลหะ ดังนั้นโครงสร้างของผลึก TaFeP จึงมีโครง  
สร้างเป็นแบบ แอนติ-เลดคลอไรด์ (anti-lead chloride)



รูป 4.1 ตำแหน่งอะตอมของผลึก TaFeP  
ฉายลงในแนวแกน b



รูป 4.2 ตำแหน่งอะตอมของผลึก PbCl<sub>2</sub>  
ฉายลงในแนวแกน b

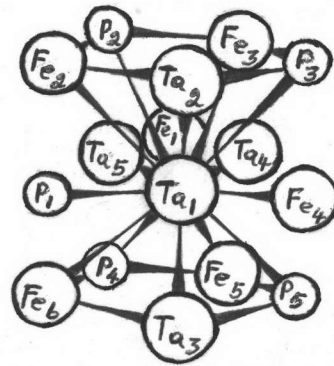
พิจารณาโครงสร้างของผลึก TaFeP ในหนึ่งหน่วยเซลล์จากรูป 3.15 พบว่าประกอบไปด้วย Ta, Fe และ P อย่างละ 4 อะตอม แต่ละอะตอมอยู่ในตำแหน่งพิเศษ 4c คือ Ta, Fe และ P อย่างละ 2 อะตอม อยู่ที่ตำแหน่ง  $y = 0.25$  ส่วน Ta, Fe และ P อีกอย่างละ 2 อะตอม อยู่ที่ตำแหน่ง  $y = 0.75$

จากการพิจารณาตัวเลขโคออดิเนชันในรูป 4.1 จะพบว่าสำหรับอะตอมของ Ta มีตัวเลขโคออดิเนชันเป็น 15 ประกอบด้วย Ta 4 อะตอม Fe 6 อะตอม และ P 5 อะตอม โดย 10 อะตอมเรียงตัวกันเป็นรูปปริซึมห้าเหลี่ยมตันที่บิดไปเล็กน้อย (slightly distorted pentagonal prism) และอีก 5 อะตอมที่เหลืออยู่ในตำแหน่งยื่นออกมาจากกลางหน้าตั้งทั้งห้าดังรูป 4.3 (ก) ค่าโคออดิเนตของแต่ละอะตอมดูได้จากตาราง 4.1 (ก)

สำหรับอะตอมของ Fe ตัวเลขโคออดิเนชันเป็น 12 ประกอบด้วย Fe 2 อะตอม Ta 6 อะตอม และ P อีก 4 อะตอม โดยที่ 8 อะตอมเรียงตัวกันเป็นรูปปริซึมสี่เหลี่ยมตันที่บิดไปเล็กน้อย (slightly distorted tetragonal prism) และอีก 4 อะตอมอยู่ที่ตำแหน่งยื่นออกมาจากกลางหน้าตั้งทั้ง 4 หน้าดังรูป 4.3 (ข) ค่าโคออดิเนตของแต่ละอะตอมนั้นจะดูได้จากตาราง 4.1 (ข)

ส่วนตัวเลขโคออดิเนชันของ P นั้น เป็น 9 โดยประกอบด้วย Ta 5 อะตอม และ Fe 4 อะตอม โดย 6 อะตอมเรียงตัวกันเป็นแบบปริซึมสามเหลี่ยมตันที่บิดไปเล็กน้อย (slightly distorted trigonal prism) และตรงกลางหน้าตั้งทั้ง 3 หน้า จะมีอะตอมยื่นออกมาอีกหน้าละหนึ่งอะตอม ดังรูป 4.3 (ค) สำหรับค่าโคออดิเนตจะดูได้จากตาราง 4.1 (ค)

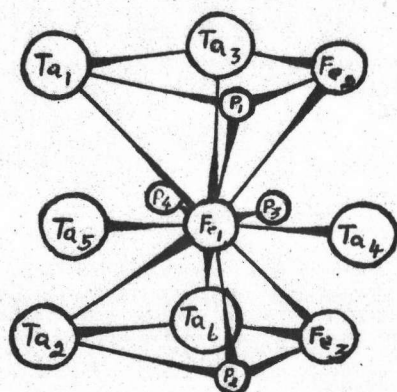
ค่าระยะบอนด์และมุมของโครงสร้างผลึก TaFeP จากรูป 4.3 นั้นแสดงในตาราง 4.2 และตาราง 4.3 ตามลำดับ



รูป 4.3(ก) แสดงอะตอมข้างเคียงของอะตอม Ta

ตาราง 4.1(ก) แสดงค่าโคออดิเนตของรูป 4.3(ก)

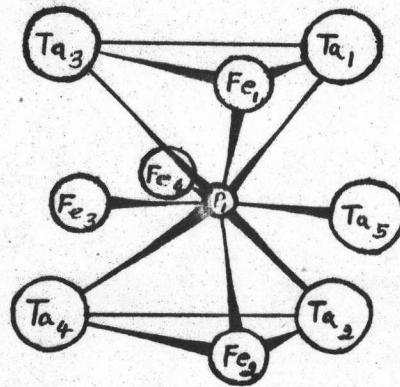
อะตอม	x	y	z
Ta <sub>1</sub>	0.023	0.25	0.175
Ta <sub>2</sub>	-0.023	0.75	-0.175
Ta <sub>3</sub>	-0.023	-0.25	-0.175
Ta <sub>4</sub>	-0.476	0.25	0.324
Ta <sub>5</sub>	0.523	0.25	0.324
Fe <sub>1</sub>	0.144	0.25	0.561
Fe <sub>2</sub>	0.355	0.75	0.061
Fe <sub>3</sub>	-0.144	0.75	0.438
Fe <sub>4</sub>	-0.355	0.25	-0.061
Fe <sub>5</sub>	-0.144	-0.25	0.438
Fe <sub>6</sub>	0.355	-0.25	0.061
P <sub>1</sub>	0.268	0.25	-0.124
P <sub>2</sub>	0.231	0.75	0.375
P <sub>3</sub>	-0.268	0.75	0.124
P <sub>4</sub>	0.231	-0.25	0.375
P <sub>5</sub>	-0.268	-0.25	0.124



รูป 4.3(ข) แสดงอะตอมข้างเคียงของอะตอม Fe

ตาราง 4.1(ข) แสดงค่าโคออดิเนตของรูป 4.3(ข)

อะตอม	x	y	z
Fe <sub>1</sub>	0.144	0.25	0.561
Fe <sub>2</sub>	-0.144	0.75	0.438
Fe <sub>3</sub>	-0.144	-0.25	0.438
Ta <sub>1</sub>	0.476	0.75	0.675
Ta <sub>2</sub>	0.476	-0.25	0.675
Ta <sub>3</sub>	-0.023	0.75	0.824
Ta <sub>4</sub>	-0.023	-0.25	0.824
Ta <sub>5</sub>	0.023	0.25	0.175
Ta <sub>6</sub>	0.523	0.25	0.324
P <sub>1</sub>	0.231	0.75	0.375
P <sub>2</sub>	0.231	-0.25	0.375
P <sub>3</sub>	-0.231	0.25	0.624
P <sub>4</sub>	0.268	0.25	0.875



รูป 4.3(ค) แสดงอะตอมข้างเคียงของอะตอม P

ตาราง 4.1(ค) แสดงค่าโคออดิเนตของรูป 4.3(ค)

อะตอม	x	y	z
P <sub>1</sub>	0.268	0.25	0.875
Ta <sub>1</sub>	-0.023	0.75	0.824
Ta <sub>2</sub>	-0.023	-0.25	0.824
Ta <sub>3</sub>	0.476	0.75	0.675
Ta <sub>4</sub>	0.476	-0.25	0.675
Ta <sub>5</sub>	0.023	0.25	1.175
Fe <sub>1</sub>	0.355	0.75	1.061
Fe <sub>2</sub>	0.355	-0.25	1.061
Fe <sub>3</sub>	0.644	0.25	0.938
Fe <sub>4</sub>	0.144	0.25	0.561

ตาราง 4.2(ก) แสดงระยะบอนด์ของอะตอมที่ล้อมรอบอะตอม Ta ในรูป 4.3(ก)

อะตอม	ความยาว อังสตรอม	อะตอม	ความยาว อังสตรอม	อะตอม	ความยาว อังสตรอม
Ta <sub>1</sub> - Ta <sub>2</sub>	3.040	Ta <sub>2</sub> - Fe <sub>6</sub>	4.567	Ta <sub>4</sub> - Fe <sub>4</sub>	2.796
- Ta <sub>3</sub>	3.040	- P <sub>1</sub>	2.549	- Fe <sub>5</sub>	2.814
- Ta <sub>4</sub>	3.223	- P <sub>2</sub>	4.145	- Fe <sub>6</sub>	5.684
- Ta <sub>5</sub>	3.223	- P <sub>3</sub>	2.568	- P <sub>1</sub>	5.520
- Fe <sub>1</sub>	2.796	- P <sub>4</sub>	5.473	- P <sub>2</sub>	4.686
- Fe <sub>2</sub>	2.813	- P <sub>5</sub>	4.401	- P <sub>3</sub>	2.600
- Fe <sub>3</sub>	2.759	Ta <sub>3</sub> - Ta <sub>4</sub>	4.794	- P <sub>4</sub>	4.686
- Fe <sub>4</sub>	2.842	- Ta <sub>5</sub>	5.148	- P <sub>5</sub>	2.600
- Fe <sub>5</sub>	2.759	- Fe <sub>1</sub>	5.538	Ta <sub>5</sub> - Fe <sub>1</sub>	2.843
- Fe <sub>6</sub>	2.813	- Fe <sub>2</sub>	4.567	- Fe <sub>2</sub>	2.759
- P <sub>1</sub>	2.568	- Fe <sub>3</sub>	5.623	- Fe <sub>3</sub>	4.518
- P <sub>2</sub>	2.599	- Fe <sub>4</sub>	2.814	- Fe <sub>4</sub>	6.003
- P <sub>3</sub>	2.548	- Fe <sub>5</sub>	2.568	- Fe <sub>5</sub>	4.518
- P <sub>4</sub>	2.599	- Fe <sub>6</sub>	2.843	- Fe <sub>6</sub>	2.759
- P <sub>5</sub>	2.548	- P <sub>1</sub>	2.549	- P <sub>1</sub>	3.498
Ta <sub>2</sub> - Ta <sub>3</sub>	3.574	- P <sub>2</sub>	5.473	- P <sub>2</sub>	2.549
- Ta <sub>4</sub>	4.794	- P <sub>3</sub>	4.401	- P <sub>3</sub>	5.338
- Ta <sub>5</sub>	5.148	- P <sub>4</sub>	4.145	- P <sub>4</sub>	2.549
- Fe <sub>1</sub>	5.538	- P <sub>5</sub>	2.568	- P <sub>5</sub>	5.338
- Fe <sub>2</sub>	2.843	Ta <sub>4</sub> - Ta <sub>5</sub>	6.099	Fe <sub>1</sub> - Fe <sub>2</sub>	4.125
- Fe <sub>3</sub>	4.341	- Fe <sub>1</sub>	4.131	- Fe <sub>3</sub>	2.653
- Fe <sub>4</sub>	2.814	- Fe <sub>2</sub>	5.634	- Fe <sub>4</sub>	5.313
- Fe <sub>5</sub>	5.623	- Fe <sub>3</sub>	2.814	- Fe <sub>5</sub>	2.653

อะตอม	ความยาว อังสตรอม	อะตอม	ความยาว อังสตรอม	อะตอม	ความยาว อังสตรอม
Fe <sub>1</sub> - Fe <sub>6</sub>	4.125	Fe <sub>4</sub> - Fe <sub>5</sub>	4.125	P <sub>2</sub> - P <sub>4</sub>	3.574
- P <sub>1</sub>	4.846	- Fe <sub>6</sub>	4.770	- P <sub>5</sub>	5.015
- P <sub>2</sub>	2.272	- P <sub>1</sub>	3.832	P <sub>3</sub> - P <sub>4</sub>	5.015
- P <sub>3</sub>	4.342	- P <sub>2</sub>	5.032	- P <sub>5</sub>	3.574
- P <sub>4</sub>	2.272	- P <sub>3</sub>	2.272	P <sub>4</sub> - P <sub>5</sub>	3.518
- P <sub>5</sub>	4.342	- P <sub>4</sub>	5.032		
Fe <sub>2</sub> - Fe <sub>3</sub>	4.024	- P <sub>5</sub>	2.272		
- Fe <sub>4</sub>	4.770	Fe <sub>5</sub> - Fe <sub>6</sub>	4.024		
- Fe <sub>5</sub>	5.382	- P <sub>1</sub>	4.994		
- Fe <sub>6</sub>	3.574	- P <sub>2</sub>	4.268		
- P <sub>1</sub>	2.272	- P <sub>3</sub>	4.259		
- P <sub>2</sub>	2.317	- P <sub>4</sub>	2.333		
- P <sub>3</sub>	3.832	- P <sub>5</sub>	2.317		
- P <sub>4</sub>	4.259	Fe <sub>6</sub> - P <sub>1</sub>	2.272		
- P <sub>5</sub>	5.240	- P <sub>2</sub>	4.259		
Fe <sub>3</sub> - Fe <sub>4</sub>	4.125	- P <sub>3</sub>	5.240		
- Fe <sub>5</sub>	3.574	- P <sub>4</sub>	2.317		
- Fe <sub>6</sub>	5.382	- P <sub>5</sub>	3.832		
- P <sub>1</sub>	4.994	P <sub>1</sub> - P <sub>2</sub>	3.926		
- P <sub>2</sub>	2.333	- P <sub>3</sub>	4.115		
- P <sub>3</sub>	2.317	- P <sub>4</sub>	4.259		
- P <sub>4</sub>	4.268	- P <sub>5</sub>	5.240		
- P <sub>5</sub>	4.259	P <sub>2</sub> - P <sub>3</sub>	3.518		



ตาราง 4.2(ข) แสดงระยะบอนด์ของอะตอมที่ล้อมรอบอะตอม Fe ในรูป 4.3(ข)

อะตอม	ความยาว อังสตรอม	อะตอม	ความยาว อังสตรอม	อะตอม	ความยาว อังสตรอม	อะตอม	ความยาว อังสตรอม
Fe <sub>1</sub> - Fe <sub>2</sub>	2.653	Fe <sub>2</sub> - P <sub>2</sub>	2.333	Ta <sub>1</sub> - P <sub>3</sub>	4.686	Ta <sub>4</sub> - P <sub>2</sub>	4.145
- Fe <sub>3</sub>	2.653	- P <sub>3</sub>	2.272	- P <sub>4</sub>	2.600	- P <sub>3</sub>	5.992
- Ta <sub>1</sub>	2.814	- P <sub>4</sub>	2.653	Ta <sub>2</sub> - Ta <sub>3</sub>	3.224	- P <sub>4</sub>	2.549
- Ta <sub>2</sub>	2.814	Fe <sub>3</sub> - Ta <sub>1</sub>	5.463	- Ta <sub>4</sub>	3.224	Ta <sub>5</sub> - Ta <sub>6</sub>	3.224
- Ta <sub>3</sub>	2.759	- Ta <sub>2</sub>	4.131	- Ta <sub>5</sub>	4.794	- P <sub>1</sub>	2.600
- Ta <sub>4</sub>	2.759	- Ta <sub>3</sub>	4.538	- Ta <sub>6</sub>	3.040	- P <sub>2</sub>	2.600
- Ta <sub>5</sub>	2.796	- Ta <sub>4</sub>	2.796	- P <sub>1</sub>	4.401	- P <sub>3</sub>	3.498
- Ta <sub>6</sub>	2.843	- Ta <sub>5</sub>	2.759	- P <sub>2</sub>	2.568	- P <sub>4</sub>	5.111
- P <sub>1</sub>	2.272	- Ta <sub>6</sub>	4.518	- P <sub>3</sub>	4.686	Ta <sub>6</sub> - P <sub>1</sub>	2.549
- P <sub>2</sub>	2.272	- P <sub>1</sub>	4.268	- P <sub>4</sub>	2.600	- P <sub>2</sub>	2.549
- P <sub>3</sub>	2.333	- P <sub>2</sub>	4.268	Ta <sub>3</sub> - Ta <sub>4</sub>	3.574	- P <sub>3</sub>	5.056
- P <sub>4</sub>	2.317	- P <sub>3</sub>	2.272	- Ta <sub>5</sub>	4.881	- P <sub>4</sub>	4.145
Fe <sub>2</sub> - Fe <sub>3</sub>	3.574	- P <sub>4</sub>	2.653	- Ta <sub>6</sub>	5.148	P <sub>1</sub> - P <sub>2</sub>	3.574
- Ta <sub>1</sub>	4.131	Ta <sub>1</sub> - Ta <sub>2</sub>	3.574	- P <sub>1</sub>	3.498	- P <sub>3</sub>	3.764
- Ta <sub>2</sub>	5.463	- Ta <sub>3</sub>	3.224	- P <sub>2</sub>	3.498	- P <sub>4</sub>	3.926
- Ta <sub>3</sub>	2.796	- Ta <sub>4</sub>	3.224	- P <sub>3</sub>	2.600	P <sub>2</sub> - P <sub>3</sub>	3.764
- Ta <sub>4</sub>	2.796	- Ta <sub>5</sub>	4.794	- P <sub>4</sub>	2.549	- P <sub>4</sub>	3.926
- Ta <sub>5</sub>	2.759	- Ta <sub>6</sub>	3.040	Ta <sub>4</sub> - Ta <sub>5</sub>	3.040	P <sub>3</sub> - P <sub>4</sub>	3.518
- Ta <sub>6</sub>	4.518	- P <sub>1</sub>	2.568	- Ta <sub>6</sub>	5.148		
- P <sub>1</sub>	2.333	- P <sub>2</sub>	4.401	- P <sub>1</sub>	5.473		

ตาราง 4.2(ค) แสดงระยะบอนด์ของอะตอมที่ล้อมรอบอะตอม P ในรูป 4.3(ค)

อะตอม	ความยาว อังสตรอม	อะตอม	ความยาว อังสตรอม	อะตอม	ความยาว อังสตรอม
P <sub>1</sub> - Ta <sub>1</sub>	2.549	Ta <sub>2</sub> - Ta <sub>5</sub>	3.040	Ta <sub>5</sub> - Fe <sub>4</sub>	4.341
- Ta <sub>2</sub>	2.549	- Fe <sub>1</sub>	4.567	Fe <sub>1</sub> - Fe <sub>2</sub>	2.653
- Ta <sub>3</sub>	2.272	- Fe <sub>2</sub>	2.843	- Fe <sub>3</sub>	2.653
- Ta <sub>4</sub>	2.272	- Fe <sub>3</sub>	4.518	- Fe <sub>4</sub>	4.125
- Ta <sub>5</sub>	2.568	- Fe <sub>4</sub>	2.759	Fe <sub>2</sub> - Fe <sub>3</sub>	2.653
- Fe <sub>1</sub>	2.272	Ta <sub>3</sub> - Ta <sub>4</sub>	3.574	- Fe <sub>4</sub>	4.125
- Fe <sub>2</sub>	2.272	- Ta <sub>5</sub>	4.794	Fe <sub>3</sub> - Fe <sub>4</sub>	4.024
- Fe <sub>3</sub>	2.333	- Fe <sub>1</sub>	2.796		
- Fe <sub>4</sub>	2.317	- Fe <sub>2</sub>	4.538		
Ta <sub>1</sub> - Ta <sub>2</sub>	3.574	- Fe <sub>3</sub>	2.759		
- Ta <sub>3</sub>	3.224	- Fe <sub>4</sub>	2.814		
- Ta <sub>4</sub>	4.813	Ta <sub>4</sub> - Ta <sub>5</sub>	4.794		
- Ta <sub>5</sub>	3.040	- Fe <sub>1</sub>	4.538		
- Fe <sub>1</sub>	2.843	- Fe <sub>2</sub>	2.796		
- Fe <sub>2</sub>	4.567	- Fe <sub>3</sub>	2.759		
- Fe <sub>3</sub>	4.518	- Fe <sub>4</sub>	2.814		
- Fe <sub>4</sub>	2.814	Ta <sub>5</sub> - Fe <sub>1</sub>	2.814		
Ta <sub>2</sub> - Ta <sub>3</sub>	4.813	- Fe <sub>2</sub>	2.814		
- Ta <sub>4</sub>	3.224	- Fe <sub>3</sub>	4.131		

ตาราง 4.3(ก) แสดงค่ามุมระหว่างอะตอมที่ล้อมรอบอะตอม Ta ในรูป 4.3(ก)

มุม	องศา	มุม	องศา	มุม	องศา
Ta <sub>2</sub> -Ta <sub>1</sub> -Ta <sub>3</sub>	71.99	Ta <sub>3</sub> -Ta <sub>1</sub> -Fe <sub>4</sub>	57.03	Ta <sub>4</sub> -Ta <sub>1</sub> -P <sub>5</sub>	51.94
-Ta <sub>4</sub>	99.84	-Fe <sub>5</sub>	96.82	Ta <sub>5</sub> -Ta <sub>1</sub> -Fe <sub>1</sub>	55.81
-Ta <sub>5</sub>	110.49	-Fe <sub>6</sub>	57.03	-Fe <sub>2</sub>	53.87
-Fe <sub>1</sub>	143.13	-P <sub>1</sub>	53.25	-Fe <sub>3</sub>	97.80
-Fe <sub>2</sub>	57.94	-P <sub>2</sub>	151.97	-Fe <sub>4</sub>	163.37
-Fe <sub>3</sub>	96.82	-P <sub>3</sub>	103.54	-Fe <sub>5</sub>	97.80
-Fe <sub>4</sub>	57.03	-P <sub>4</sub>	94.28	-Fe <sub>6</sub>	53.87
-Fe <sub>5</sub>	151.65	-P <sub>5</sub>	53.84	-P <sub>1</sub>	73.33
-Fe <sub>6</sub>	102.46	Ta <sub>4</sub> -Ta <sub>1</sub> -Ta <sub>5</sub>	142.17	-P <sub>2</sub>	50.53
-P <sub>1</sub>	53.25	-Fe <sub>1</sub>	86.36	-P <sub>3</sub>	134.96
-P <sub>2</sub>	94.28	-Fe <sub>2</sub>	140.51	-P <sub>4</sub>	50.53
-P <sub>3</sub>	53.84	-Fe <sub>3</sub>	55.46	-P <sub>5</sub>	134.96
-P <sub>4</sub>	151.97	-Fe <sub>4</sub>	54.46	Fe <sub>1</sub> -Ta <sub>1</sub> -Fe <sub>2</sub>	94.67
-P <sub>5</sub>	103.54	-Fe <sub>5</sub>	55.46	-Fe <sub>3</sub>	57.05
Ta <sub>3</sub> -Ta <sub>1</sub> -Ta <sub>4</sub>	99.84	-Fe <sub>6</sub>	140.51	-Fe <sub>4</sub>	140.82
-Ta <sub>5</sub>	142.17	-P <sub>1</sub>	144.50	-Fe <sub>5</sub>	57.05
-Fe <sub>1</sub>	143.13	-P <sub>2</sub>	106.66	-Fe <sub>6</sub>	94.67
-Fe <sub>2</sub>	102.46	-P <sub>3</sub>	51.94	-P <sub>1</sub>	129.14
-Fe <sub>3</sub>	151.65	-P <sub>4</sub>	106.66	-P <sub>2</sub>	49.63

ตาราง 4.3(ก) ต่อ แสดงค่ามุมระหว่างอะตอมที่ล้อมรอบอะตอม Ta ในรูป 4.3(ก)

มุม	องศา	มุม	องศา	มุม	องศา
$Fe_1 - Ta_1 - P_3$	108.56	$Fe_4 - Ta_1 - Fe_5$	94.85	$P_1 - Ta_1 - P_4$	98.87
- $P_4$	49.63	- $Fe_6$	114.97	- $P_5$	107.08
- $P_5$	108.56	- $P_1$	90.03	$P_2 - Ta_1 - P_3$	86.20
$Fe_2 - Ta_1 - Fe_3$	92.45	- $P_2$	135.21	- $P_4$	86.85
- $Fe_4$	114.97	- $P_3$	49.47	- $P_5$	153.87
- $Fe_5$	149.93	- $P_4$	135.21	$P_3 - Ta_1 - P_4$	153.87
- $Fe_6$	78.85	- $P_5$	49.47	- $P_5$	89.05
- $P_1$	49.67	$Fe_5 - Ta_1 - Fe_6$	92.45	$P_4 - Ta_1 - P_5$	86.20
- $P_2$	50.49	- $P_1$	139.21	$Fe_6 - Ta_3 - P_5$	} 90.04
- $P_3$	91.08	- $P_2$	105.56	$Fe_2 - Ta_2 - P_3$	
- $P_4$	103.71	- $P_3$	106.68	$Ta_3 - P_5 - Fe_5$	} 119.22
- $P_5$	155.43	- $P_4$	51.52	$Ta_2 - P_3 - Fe_3$	
$Fe_3 - Ta_1 - Fe_4$	94.85	- $P_5$	51.58	$P_5 - Fe_5 - P_4$	} 104.41
- $Fe_5$	80.74	$Fe_6 - Ta_1 - P_1$	49.67	$P_3 - Fe_3 - P_2$	
- $Fe_6$	149.93	- $P_2$	103.71	$Fe_5 - P_4 - Fe_6$	} 119.86
- $P_1$	139.21	- $P_3$	155.43	$Fe_3 - P_2 - Fe_2$	
- $P_2$	51.52	- $P_4$	50.49	$P_4 - Fe_6 - Ta_3$	} 106.4
- $P_3$	51.58	- $P_5$	91.08	$P_2 - Fe_2 - Ta_2$	
- $P_4$	105.56	$P_1 - Ta_1 - P_2$	98.87		
- $P_5$	106.68	- $P_3$	107.08		

ตาราง 4.3(ข) แสดงค่ามุมระหว่างอะตอมที่ล้อมรอบอะตอม Fe ในรูป 4.3(ข)

มุม	องศา	มุม	องศา	มุม	องศา	มุม	องศา
$Fe_2-Fe_1-Fe_3$	84.68	$Ta_1-Fe_1-Ta_2$	78.85	$Ta_3-Fe_1-P_2$	167.54	$P_2-Fe_1-P_3$	109.65
- $Ta_1$	98.12	- $Ta_3$	70.67	- $P_3$	60.71	- $P_4$	117.63
- $Ta_2$	175.37	- $Ta_4$	119.45	- $P_4$	59.52	$P_3-Fe_1-P_4$	98.31
- $Ta_3$	62.19	- $Ta_5$	117.42	$Ta_4-Fe_1-Ta_5$	122.95		
- $Ta_4$	113.95	- $Ta_6$	65.03	- $Ta_6$	133.55	$Ta_2-P_2-Fe_3$	114.84
- $Ta_5$	60.76	- $P_1$	59.53	- $P_1$	167.54	$Ta_1-P_1-Fe_2$	
- $Ta_6$	110.56	- $P_2$	119.47	- $P_2$	87.56		
- $P_1$	55.91	- $P_3$	130.88	- $P_3$	60.71	$P_2-Fe_3-Ta_6$	85.49
- $P_2$	119.95	- $P_4$	59.95	- $P_4$	59.52	$P_1-Fe_2-Ta_3$	
- $P_3$	53.74	$Ta_2-Fe_1-Ta_3$	119.45	$Ta_5-Fe_1-Ta_6$	69.73		
- $P_4$	121.61	- $Ta_4$	70.67	- $P_1$	60.67	$Fe_3-Ta_6-Ta_2$	86.35
$Fe_3-Fe_1-Ta_1$	175.37	- $Ta_5$	117.42	- $P_2$	60.67	$Fe_2-Ta_3-Ta_1$	
- $Ta_2$	98.12	- $Ta_6$	65.03	- $P_3$	85.49		
- $Ta_3$	113.95	- $P_1$	119.47	- $P_4$	176.19	$Ta_6-Ta_2-P_2$	73.32
- $Ta_4$	62.19	- $P_2$	59.53	$Ta_6-Fe_1-P_1$	58.51	$Ta_3-Ta_1-P_1$	
- $Ta_5$	60.76	- $P_3$	130.88	- $P_2$	58.51		
- $Ta_6$	110.56	- $P_4$	59.95	- $P_3$	155.22		
- $P_1$	119.95	$Ta_3-Fe_1-Ta_4$	80.74	- $P_4$	106.47		
- $P_2$	55.91	- $Ta_5$	122.95	$P_1-Fe_1-P_2$	103.75		
- $P_3$	53.74	- $Ta_6$	133.55	- $P_3$	109.65		
- $P_4$	121.61	- $P_1$	87.56	- $P_4$	117.63		

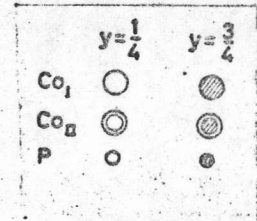
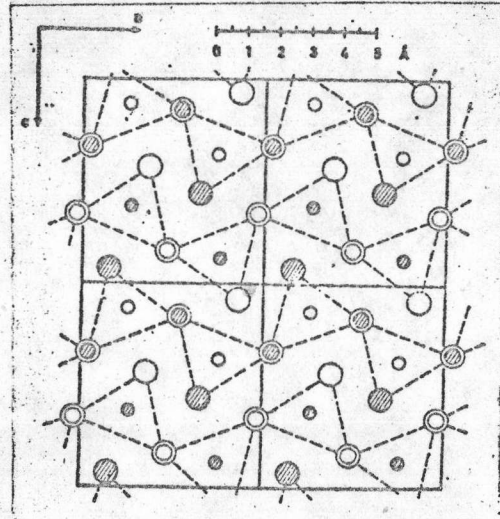
ตาราง 4.3 (ค) แสดงค่ามุมระหว่างอะตอมที่ล้อมรอบอะตอม P ในรูป 4:3 (ค)

มุม	องศา	มุม	องศา	มุม	องศา	มุม	องศา
Ta <sub>1</sub> -P <sub>1</sub> -Ta <sub>2</sub>	89.05	Ta <sub>3</sub> -P <sub>1</sub> -Fe <sub>3</sub>	67.77	Ta <sub>4</sub> -Fe <sub>2</sub> -Ta <sub>2</sub>	69.74		
-Ta <sub>3</sub>	77.53	-Fe <sub>4</sub>	69.55	Ta <sub>3</sub> -Fe <sub>1</sub> -Ta <sub>1</sub>			
-Ta <sub>4</sub>	138.42	Ta <sub>4</sub> -P <sub>1</sub> -Ta <sub>5</sub>	136.18	Ta <sub>2</sub> -Ta <sub>4</sub> -Fe <sub>2</sub>	55.81		
-Ta <sub>5</sub>	72.92	-Fe <sub>1</sub>	137.27	Ta <sub>1</sub> -Ta <sub>3</sub> -Fe <sub>1</sub>			
-Fe <sub>1</sub>	72.01	-Fe <sub>2</sub>	69.70				
-Fe <sub>2</sub>	142.60	-Fe <sub>3</sub>	67.77				
-Fe <sub>3</sub>	135.48	-Fe <sub>4</sub>	69.55	Fe <sub>2</sub> -Ta <sub>2</sub> -Ta <sub>4</sub>	54.45		
-Fe <sub>4</sub>	68.90	Ta <sub>5</sub> -P <sub>1</sub> -Fe <sub>1</sub>	70.80	Fe <sub>1</sub> -Ta <sub>1</sub> -Ta <sub>3</sub>			
Ta <sub>2</sub> -P <sub>1</sub> -Ta <sub>3</sub>	138.42	-Fe <sub>2</sub>	70.80				
-Ta <sub>4</sub>	77.53	-Fe <sub>3</sub>	114.81				
-Ta <sub>5</sub>	72.92	-Fe <sub>4</sub>	125.34				
-Fe <sub>1</sub>	142.60	Fe <sub>1</sub> -P <sub>1</sub> -Fe <sub>2</sub>	103.75				
-Fe <sub>2</sub>	72.01	-Fe <sub>3</sub>	70.35				
-Fe <sub>3</sub>	135.48	-Fe <sub>4</sub>	128.06				
-Fe <sub>4</sub>	68.90	Fe <sub>2</sub> -P <sub>1</sub> -Fe <sub>3</sub>	70.35				
Ta <sub>3</sub> -P <sub>1</sub> -Ta <sub>4</sub>	86.85	-Fe <sub>4</sub>	128.06				
-Ta <sub>5</sub>	136.18	Fe <sub>3</sub> -P <sub>1</sub> -Fe <sub>4</sub>	119.85				
-Fe <sub>1</sub>	69.70						
-Fe <sub>2</sub>	137.27						

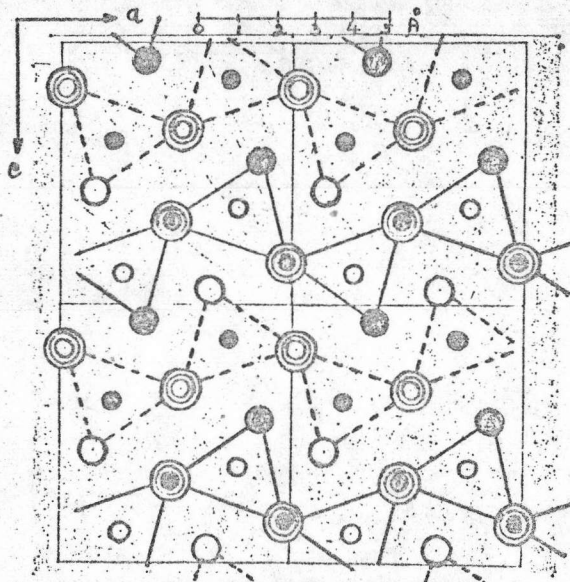
เนื่องจากโครงสร้างของผลึกแบบ anti-FbCl<sub>2</sub> แบ่งเป็น 3 หมู่ย่อย ที่สำคัญคือหมู่ย่อย Co<sub>2</sub>P และ Co<sub>2</sub>Si เมื่อเปรียบเทียบโครงสร้างของผลึก TaFeP, Co<sub>2</sub>P และ Co<sub>2</sub>Si ตามรูป 4.4 พิจารณาค่าตัวเลขโคออดิเนชันและอัตราส่วน a/c ของผลึก TaFeP กับของผลึก Co<sub>2</sub>P และ Co<sub>2</sub>Si ในหัวข้อ 1.1 บทที่ 1 พบว่า TaFeP มีโครงสร้างแบบ Co<sub>2</sub>P เปรียบเทียบโครงสร้างของผลึก TaFeP กับ Co<sub>2</sub>P พบว่า Ta แทนตำแหน่งอะตอม Co<sub>II</sub> และ Fe แทนตำแหน่งของอะตอม Co<sub>I</sub> เมื่อพิจารณาตัวเลขโคออดิเนชันของ P ในโครงสร้างของผลึก TaFeP และ Co<sub>2</sub>P จะได้ดังรูป 4.5 สำหรับค่าโคออดิเนตของอะตอมและมีติของเซลล์ ดูได้จากตาราง 4.4

นอกจากนี้จากการพิจารณาอะตอมของ P ที่อยู่รอบอะตอมโลหะพบว่า Fe และ Co<sub>I</sub> มี P เป็นอะตอมข้างเคียง 4 อะตอม โดยเรียงตัวเป็นแบบเตตราฮีดรอนที่บิดไปเล็กน้อย ค่าเฉลี่ยของ Co<sub>I</sub>-P มีค่า 2.21 อังสตรอม และค่าเฉลี่ยของ Fe-P มีค่า 2.29 อังสตรอม โดย Fe-P ยาวมากที่สุดเท่ากับ 2.33 อังสตรอม และสั้นที่สุดเท่ากับ 2.27 อังสตรอม

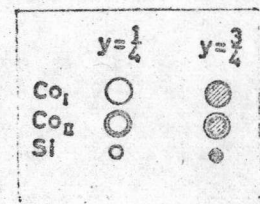
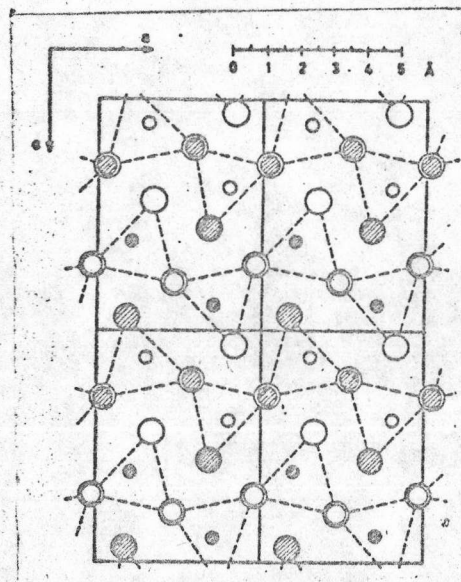
สำหรับ Ta และ Co<sub>II</sub> มี P เป็นอะตอมข้างเคียง 5 อะตอม โดยค่าเฉลี่ยของ Co<sub>II</sub>-P เท่ากับ 2.44 อังสตรอม สำหรับ Ta นั้นค่า Ta-P สั้นที่สุด เท่ากับ 2.54 อังสตรอม ยาวที่สุดเท่ากับ 2.59 อังสตรอม และ Ta-P เฉลี่ยเท่ากับ 2.57 อังสตรอม



(ก) โครงสร้างของผลึก Co<sub>2</sub>P



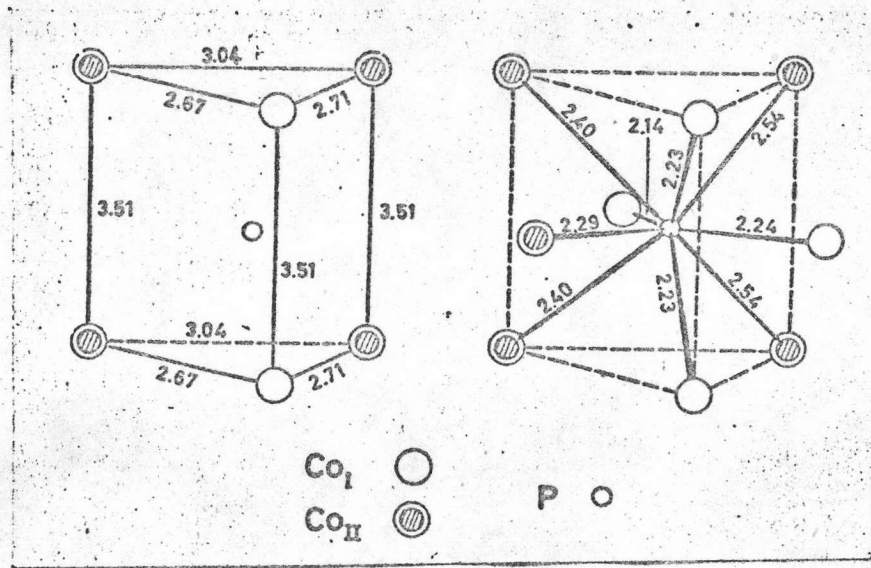
(ข) โครงสร้างของผลึก TaFeP



(ค) โครงสร้างของผลึก Co<sub>2</sub>Si

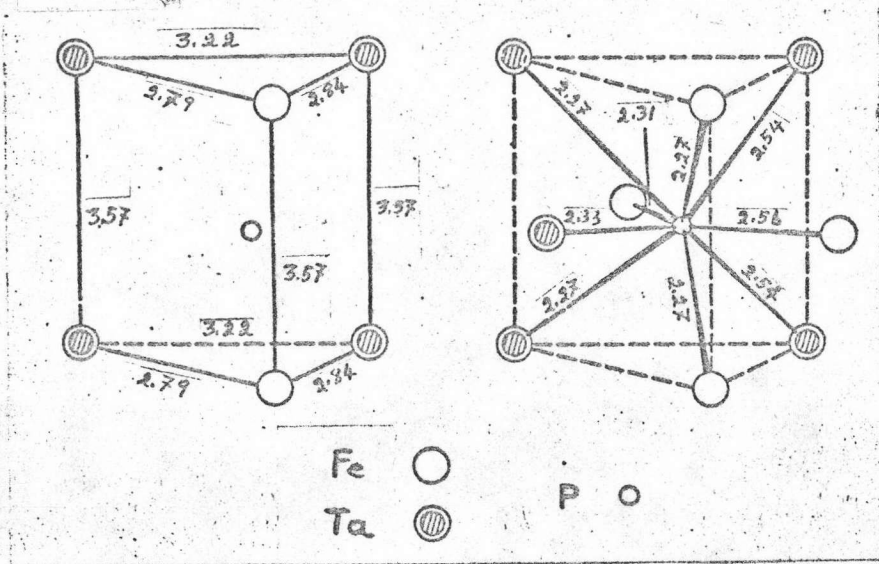
รูป 4.4 แสดงโครงสร้างของผลึก Co<sub>2</sub>P, TaFeP และ Co<sub>2</sub>Si





(ก) โคออดิเนชันของ P ในโครงสร้างของผลึก Co<sub>2</sub>P

(ข) โคออดิเนชันของ P ในโครงสร้างของผลึก TaFeP



รูป 4.5 แสดงโคออดิเนชันรอบอะตอม P ของผลึก TaFeP และ Co<sub>2</sub>P

ตาราง 4.4 เปรียบเทียบค่าโคออดิเนตและมิติของเซลล์ของผลึก TaFeP, Co<sub>2</sub>P และ ZrFeP

อะตอม	x	E.S.D. ของ x	z	E.S.D. ของ z	a อังสตรอม	b อังสตรอม	c อังสตรอม	U ลูกบาศก์ อังสตรอม
ผลึก TaFeP								
Ta	0.0236	0.0003	0.1751	0.0002	6.099	3.574	6.976	152.1
Fe	0.1443	0.0017	0.5617	0.0012				
P	0.2686	0.0037	0.8757	0.0034				
ผลึก Co <sub>2</sub> P					5.646	3.513	6.608	131.1
Co <sub>I</sub>	0.8560	0.0003	0.0647	0.0003				
Co <sub>II</sub>	0.9685	0.0003	0.6657	0.0003				
P	0.2461	0.0007	0.1249	0.0006				
* ผลึก ZrFeP					6.309	3.740	7.172	169.2
Zr	0.0199	0.0004	0.1830	0.0003				
Fe	0.1468	0.0006	0.5615	0.0005				
P	0.7782	0.0012	0.6160	0.0009				

\*สำหรับโครงสร้างของผลึก ZrFeP นั้น Stig Runqvist และ Pichet Chantra Nawapong ได้ทำการวิจัยไว้เมื่อปี 1966 ซึ่งมีโครงสร้างเป็นแบบ Co<sub>2</sub>P เช่นเดียวกัน

จากระยะบอนด์ทางเคมีของสารประกอบ TaFeP พบว่าเป็นสารประกอบเทอร์นารีฟอสไฟด์ ประเภทที่มีโลหะเป็นองค์ประกอบสูง หรือเป็นแบบที่มีฟอสฟอรัสเป็นองค์ประกอบน้อยกว่า 60 เปอร์เซ็นต์อะตอมนั่นเอง และคุณสมบัติที่พบปรากฏว่าคล้ายคลึงกันกับสารประกอบ ประเภทโลหะทรานซิชัน-ฟอสไฟด์ทั่ว ๆ ไป คือมีลักษณะแข็งเปราะเป็นมันวาว และมีตัวเลขโคออดิเนชันสูงทั้งโลหะและฟอสฟอรัส นอกจากนี้ระยะบอนด์ระหว่างฟอสฟอรัส-ฟอสฟอรัสก็ยาวมากกว่า 3 อังสตรอม

สำหรับค่าดัชนีความเชื่อมั่น R นั้น ปรากฏว่าได้ค่า  $R = 10.04\%$  ซึ่งเมื่อเปรียบเทียบกับเกณฑ์ค่า R ในหัวข้อ 3.4 บทที่ 3 แล้ว เห็นได้ว่าการหาโครงสร้างของผลึก TaFeP โดยวิธีทางผลึกวิทยารังสีเอ็กซ์ ให้ผลโครงสร้างของผลึกอยู่ในเกณฑ์ใช้ได้