การหาโครงสร้างของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$ โดยการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

นายมานัส มงคลสุข

002366

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
ภาควิชาฟิสิกส์
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย
พ.ศ.2523

i 17016381

STRUCTURE DETERMINATION OF $Ta_5Ni_4P_4$ BY X-RAY DIFFRACTION

Mr Manus Mongkolsuk

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1980

หัวข้อวิทยานิพนธ์ การหาโครงสร้างของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$ โดยการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

โดย นายมานัส มงคลสุข

ภาควิชา พิสิกส์

อาจารย์ที่ปรึกษา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภวะนันท์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้นับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต

.....คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

(รองศาสตราจารย์ ดร.สุประดิษฐ์ บุนนาค)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ

(รองศาสตราจารย์ สุพนิจ พราหมทัศ)

..... กรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภวะนันท์)

..... กรรมการ

(อาจารย์ รุ่งศรี กฤตยากีรณ)

..... กรรมการ

(นายณรงค์ สุชพัฒน์ธี)

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

หัวข้อวิทยานิพนธ์ การหาโครงสร้างของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$ โดยการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์
ชื่อนิสิต นายมานัส มงคลสุข
อาจารย์ที่ปรึกษา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภาวะนันท์
ภาควิชา พิสิกส์
ปีการศึกษา 2522

บทคัดย่อ

ผลึกเดี่ยว $Ta_5Ni_4P_4$ เป็นโลหะที่มีลักษณะเป็นแผ่นแบนบางไม่สม่ำเสมออยู่ในระบบเททระกอเนิล มีหมู่สมมาตรสามมิติเป็น I4/m เพอร์แรมิเทอร์อย่างละเอียดในหนึ่งหน่วยเซลล์ได้จากเทคนิคการเลี้ยวเบนแบบกีเนียร์-เฮกของผลึกผงได้ค่าเป็น a = 9.870(8) และ c = 3.508(3) Å บันทึกความเข้มการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ของ Mo ชนิด K_α ที่เลี้ยวเบนจาก ระนาบอิสระ 271 ระนาบของผลึกเดี่ยวลงบนฟิล์มตามวิธีการไวซเซ็นเบิร์กและวัดสัมพัทธ์กับความเข้มมาตรฐานที่เตรียมขึ้น

โครงสร้างของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$ หาโดยวิธีอะตอมหนักพบว่ามีโครงสร้างแบบเดียวกับผลึก $Nb_5Cu_4Si_4$ ในหนึ่งหน่วยเซลล์จะมี $Ta_5Ni_4P_4$ อยู่ 2 หน่วยสูตร และอะตอมทั้งหมดจัดตัวอยู่ในตำแหน่งพิเศษโดย 2 Ta อยู่ที่ตำแหน่ง 2 b และที่เหลืออยู่ที่ตำแหน่ง 8h ต่างๆ สัมประสิทธิ์การดูดกลืนสำหรับรังสีที่ใช้มีค่าเป็น 885.1 cm^{-1} ซึ่งเป็นสาเหตุสำคัญของความผิดพลาดที่เกิดขึ้นอย่างมีระบบ และได้แก้ไขด้วยการคิดคำนวณจากแบบผลึกจำลองที่มีขนาดและรูปร่างใกล้เคียงมากที่สุดกับผลึกที่ใช้ซึ่งมีรูปร่างไม่สม่ำเสมอ แบบผลึกจำลองสร้างจากระนาบมิลเลอร์ที่ได้จากการพิจารณาทางเรขาคณิตของการเลี้ยวเบนที่เกิดขึ้น การปรับโครงสร้างได้ค่า R = 0.0984 ในที่สุด

อะตอมทั้งหมดในหน่วยเซลล์ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$ จะจัดตัวในระนาบร่างแหที่ขนานกันมี z = 0 หรือ 1/2 เท่านั้น ร่างแหเป็นแบบ 3-,4- และ 5-คอนเน็คท์ ผสมกันเมื่อกำหนดให้ความยาวบอนด์มากที่สุดเป็น 3.275 Å อะตอม Ta(I),Ta(II),Ni และ P จะเชื่อมกับอะตอมตัวอื่น 5,4,4 และ 3 ตัวในระนาบร่างแหเดียวกันตามลำดับ

Thesis Title Structure Determination of $Ta_5Ni_4P_4$ by X-Ray Diffraction

Name Mr Manus Mongkolsuk

Thesis Advisor Assistant Professor Phathana Phavanantha, Ph.D.

Department Physics

Academic Year 1979

ABSTRACT

$Ta_5Ni_4P_4$ exhibits irregular metallic laminar single crystals, and belongs to the tetragonal space group I4/m. The unitcell parameters were obtained from powdered sample by Guinier-Hägg diffraction technique and refined to a = 9.870(8), and c = 3.508(3) Å. 271 independent reflections were recorded photographically by the Weissenberg method using Mo K_α radiation, and the intensities measured visually.

$Ta_5Ni_4P_4$ was found by the heavy atom method to be isostructural with $Nb_5Cu_4Si_4$. There are 2 formular units of $Ta_5Ni_4P_4$ per unitcell, and all atoms occupy special positions -2Ta's at 2b, and the rest at 8h. The absorption coefficient of 885.1 cm^{-1} for the radiation used is a major source of systematic errors, and was corrected for by approximating the irregular-shaped crystal to a model constructed from Miller planes established by geometrical consideration of the diffraction obtained. The refinement was concluded at R = 0.0984.

The structure of $Ta_5Ni_4P_4$ can be viewed as sets of atoms to be found only on parallel planes at z = 0 and 1/2 with an arrangement of mixed 3 - , 4 - and 5 - connected plane nets of a maximum connecting distance of 3.275 Å. Ta(I),Ta(II),Ni and P atoms are connected to 5,4,4 and 3 neighbouring atoms in the same planar net respectively.

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์นี้สำเร็จลงได้ด้วยความกรุณาของ ผศ.ดร.พัฒนะ ภาวะนันท์ ซึ่งเป็นอาจารย์ที่ปรึกษาที่ได้กรุณาให้คำแนะนำ ช่วยเหลือ และควบคุมการวิจัยอย่างใกล้ชิดด้วยดีตลอดมา จึงขอกราบขอบพระคุณไว้ ณ ที่นี้

ผู้เขียนขอกราบขอบพระคุณ รศ.สุพนิจ พราหมทัศ ผศ.ดร.ศรีนวล ถนอมกุล ที่กรุณาให้คำแนะนำช่วยเหลือเกี่ยวกับการวิจัยครั้งนี้ ขอกราบขอบพระคุณ ดร.รอฟ เบอร์เกอร์ แห่งสถาบันเคมี มหาวิทยาลัยอุพซาลา ประเทศสวีเดน ที่กรุณาให้ผลึกของสารประกอบซึ่งใช้ในการวิจัยครั้งนี้ ขอกราบขอบพระคุณ ศจ.รุนด์ควิสท์ และ ศจ.ลิมิงกา แห่งสถาบันเคมี มหาวิทยาลัยอุพซาลา ประเทศสวีเดน ที่กรุณาให้โปรแกรมคอมพิวเตอร์ที่ใช้ในการวิจัยครั้งนี้ ขอกราบขอบพระคุณ ผศ.สมชาย ทยานยง ที่กรุณาให้ใช้เครื่องคอมพิวเตอร์ ณ ศูนย์บริการคอมพิวเตอร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

นอกจากนี้ผู้เขียนขอขอบคุณเจ้าหน้าที่ของศูนย์บริการคอมพิวเตอร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ที่ได้กรุณาให้คำแนะนำช่วยเหลือเกี่ยวกับการจัดเตรียมโปรแกรมการคำนวณ

อนึ่ง ในระหว่างการศึกษา ผู้เขียนได้รับทุนการศึกษาจากโครงการพัฒนามหาวิทยาลัย จึงขอขอบพระคุณต่อโครงการฯ ไว้ ณ ที่นี้ด้วย

สารบาญ

	หน้า
บทคัดย่อ	ฆ
กิตติกรรมประกาศ	จ
รายการตารางประกอบ	ซ
รายการรูปประกอบ	ฌ
บทที่	
1. บทนำ	1
2. การคำนวณแก้การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์สำหรับผลึกรูปทรงทั่วไป	5
2.1 รูปแบบทั่วไปของแฟคเตอร์การแพร่รังสี	5
2.2 การคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสีเมื่อคิดผลึกรูปทรงทั่วไป	8
2.3 ขั้นตอนการคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสี	14
3. การกำหนดดัชนีมิลเลอร์ของผิวหน้าและแกนของผลึกจำลอง	16
3.1 การกำหนดแกนของผลึกจำลองที่สอดคล้องกับผลึกจริง	16
3.1.1 การสร้างผลึกจำลอง	16
3.1.2 การกำหนดแกน	18
3.2 การกำหนดดัชนีมิลเลอร์ของผิวหน้าของผลึกจำลอง	21
4. เอ็กซ์ทิงค์ชัน ปฐมภูมิและทุติยภูมิ	26
4.1 เอ็กซ์ทิงค์ชัน ปฐมภูมิ	27
4.1.1 ทฤษฎีเฟรสเนิลโซน	28
4.1.2 อำพนธ์ที่สะท้อนโดยระนาบอะตอม	35
4.1.3 การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกสมบูรณ์	39
4.1.4 มัลทิเพิล รีเฟลคชัน จากผลึกสมบูรณ์	44
4.2 เอ็กซ์ทิงค์ชัน ทุติยภูมิ	50
5. การทดลองและการคำนวณโครงสร้างผลึก	58
5.1 ข้อมูลผลึกทั่วไป	58

หอสมุดกลาง จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

หน้า

5.1.1 การปรับแกนหมุนของผลึกแบบให้อาร์คทำมุม 45 องศากับลำรังสีเอ็กซ์ 59
5.1.2 ภาพถ่ายออสซิลเลเชิน 64
5.1.3 ภาพถ่ายแบบไวซเซ็นเบิร์ก 66
5.1.4 ค่ามิติเซลล์อย่างละเอียด 70
5.1.5 หมู่สมมาตรสามมิติ 73
5.2 การคำนวณโครงสร้างผลึก 78
5.2.1 การรวบรวมข้อมูลความเข้ม 78
5.2.2 การเตรียมคำนวณแก้การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ 81
5.2.3 การหาตำแหน่งอะตอมโดยใช้ฟังก์ชันแพทเทอร์สัน 85
5.2.4 การหาตำแหน่งอะตอมโดยคำนวณแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอน 91
5.3 การปรับโครงสร้าง 95
5.3.1 การปรับโดยวิธีการของบูช 95
5.3.2 การปรับโดยวิธีกำลังสองน้อยที่สุด 97
5.3.3 การคำนวณเพื่อตรวจสอบโครงสร้างผลึก 105
6. สรุปและอภิปรายผล 107
เอกสารอ้างอิง 127
ประวัติผู้เขียน 130

รายการตารางประกอบ

ตาราง		หน้า
1-1	มิติเซลล์ของ $Ta_5Ni_4P_4$ ที่หาโดย Rolf Berger	1
4-1	แสดงค่าแฟคเตอร์แก้ (tanh pq)/pq สำหรับเอ็กซ์ทิงค์ชันปฐมภูมิของรังสีเอ็กซ์ประเภท hOO ที่เลี้ยวเบนจากผลึกของ NaCl	49
5-1	แสดงข้อมูลผลึกทั่วไปในขั้นต้นของ $Ta_5Ni_4P_4$	58
5-2	แสดงค่าเพอร์แรมิเทอร์ทางแกน c จากภาพถ่ายออสซิลเลเชินรอบแกน c ตามรูป 5-4	65
5-3	แสดงค่ามุมที่ต้องเอียงกล้อง (μ_n) และระยะที่ต้องเลื่อนตัวกั้นเส้นเลย์เออร์ (S_n) เพื่อการถ่ายภาพไวซเซ็นเบิร์กสำหรับเลย์เออร์สูงๆเมื่อผลึกหมุนรอบแกน c และใช้รังสีเอ็กซ์ของ Mo ชนิด Kα	69
5-4	แสดงค่าเพอร์แรมิเทอร์ตามแกน a และ b ซึ่งเท่ากันคำนวณจากภาพถ่ายไวซเซ็นเบิร์กตามรูป 5-5(ก)	69
5-5	ข้อมูลการเลี้ยวเบนของ $Ta_5Ni_4P_4$ จากภาพถ่ายผลึกผง	71-73
5-6	เงื่อนไขในการพบจุดสะท้อนที่ปรากฏในระนาบแลททิสส่วนกลับ	77
5-7	แสดงดัชนีมิลเลอร์ของระนาบที่ล้อมรอบผลึกจำลองและระยะระหว่างระนาบกับจุดกำเนิด O	83
5-8	แสดงดัชนีมิลเลอร์ของระนาบที่ล้อมรอบผลึกจำลองใหม่และระยะจากทุกระนาบถึงจุดกำเนิด O	84
5-9	แสดงเวคเตอร์ฮาร์คเกอร์ที่ตำแหน่งพิเศษ 8h ของหมู่สมมาตรสามมิติ I4/m	87
5-10	แสดงเวคเตอร์ฮาร์คเกอร์ 2 พวกที่สอดคล้องกับ (0.06,0.32,0) และค่า x,y ในแต่ละพวก	90
5-11	แสดงโคออร์ดิเนตแฟรคชันนัลของอะตอม Ta(I) (หมายถึงอะตอม Ta ชุดที่หนึ่ง) ทั้งหมด 8 อะตอมที่ได้จากแผนภาพแพทเทอร์สัน	90

ตาราง		หน้า
5-12	แสดงโคออร์ดิเนตแฟรคชันนัลของอะตอม Ni และ P ที่คำนวณได้จากแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอน	91
5-13	แสดงค่าโคออร์ดิเนตแฟรคชันนัลของอะตอมทุกตัวของ $Ta_5Ni_4P_4$ ก่อนและหลังการปรับด้วยวิธีการของบูธ	96
5-14	แสดงค่าโคออร์ดิเนตแฟรคชันนัลของอะตอมทุกตัวของ $Ta_5Ni_4P_4$ หลังจากปรับโดยวิธีการของบูธจากแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนครั้งที่ 2	96
5-15	แสดงค่าเพอร์แรมิเทอร์ต่างๆๆคือ โคออร์ดิเนตแฟรคชันนัล x, y,z แฟคเตอร์อุณหภูมิ และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของอะตอมทุกตัวหลังจากการปรับในขั้นที่ 3 จบลง	100
5-16	แสดงค่าแฟคเตอร์สเกล และดัชนีความเชื่อมั่นหลังจากจบการปรับในขั้นที่ 3	100
5-17	แสดงค่าเพอร์แรมิเทอร์หลังจากสิ้นสุดการปรับขั้นสุดท้าย	102
5-18	แสดงค่าแฟคเตอร์สเกล ดัชนีความเชื่อมั่น สัมประสิทธิ์เอ็กซ์ทิงค์ชัน และค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของ g คือ (g) หลังจากการปรับขั้นสุดท้าย	102
5-19	แสดงค่า $\|F_o\|_{hkl}$ และ $\|F_c\|_{hkl}$ หลังจากการปรับโครงสร้างผลึกจบลง	102-105
6-1	แสดงข้อมูลผลึกทั่วไปของ $Ta_5Ni_4P_4$	107
6-2	แสดงโคออร์ดิเนตแฟรคชันนัลของอะตอม Ta(I),Ta(II),Ni และ P ภายในหนึ่งหน่วยเซลล์ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$	108
6-3	ความยาวบอนด์ระหว่างอะตอม Ta(I) กับอะตอมข้างเคียงทั้งหมดเมื่อกำหนดให้ความยาวบอนด์ที่มากที่สุดเป็น 3.508 Å	111
6-4	แสดงค่ามุมระหว่างอะตอมข้างเคียงที่ล้อมรอบอะตอม Ta(I) ตามรูป 6-2	112-114

ตาราง		หน้า
6-5	แสดงความยาวบอนด์ระหว่างอะตอม Ta(II) กับอะตอมข้างเคียงทั้งหมดเมื่อกำหนดให้ความยาวบอนด์ที่มากที่สุดเป็น 3.508 Å ...	115
6-6	แสดงค่ามุมระหว่างอะตอมข้างเคียงที่ล้อมรอบอะตอม Ta(II) ตามรูป 6-3	116-117
6-7	แสดงความยาวบอนด์ระหว่างอะตอม Ni กับอะตอมข้างเคียงทั้งหมด 15 ตัวเมื่อกำหนดให้ความยาวบอนด์ที่มากที่สุดเป็น 3.508 Å ...	119
6-8	แสดงค่ามุมระหว่างอะตอมข้างเคียงที่ล้อมรอบอะตอม Ni ตามรูป 6-4	119-121
6-9	แสดงความยาวบอนด์ระหว่างอะตอม P กับอะตอมข้างเคียงทั้งหมด 12 อะตอมเมื่อกำหนดให้ความยาวบอนด์มากที่สุดเป็น 3.508 Å .	123
6-10	แสดงค่ามุมระหว่างอะตอมข้างเคียงที่ล้อมรอบอะตอม P ตามรูป 6-5	123-124

รายการรูปประกอบ

รูป		หน้า
2-1	แสดงทางเดินของรังสีเอ็กซ์ผ่านวัตถุที่มีเนื้อเดียวกันตลอด	6
2-2	แสดงทางเดินรังสีเอ็กซ์ผ่านผลึกเดี่ยวเพื่อคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสี .	7
2-3	แสดงรูปเรขาคณิตเพื่อการคำนวณแก้การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ของผลึกเดี่ยว รูปทรงทั่วไป	9
2-4	แสดงรูปเรขาคณิตของการคำนวณ r_{α}	12
3-1	แสดงการเปรียบเทียบระหว่างผลึกจริงกับผลึกจำลอง (ก) ผลึกจริง (ข) ผลึกจำลอง	17
3-2	แสดงลักษณะการจัดตัวของผลึกเมื่อแกนหมุน c ถูกปรับให้ตั้งฉากกับลำรังสีเอ็กซ์	18
3-3	(ก) แสดงเรขาคณิตของการถ่ายภาพแบบไวซเซ็นเบิร์ก (ข) แสดงภาพถ่ายแบบไวซเซ็นเบิร์กที่เลย์เออร์ที่ 0 ที่สอดคล้องกับรูป (ก)	19
3-4	แสดงการจัดตัวของผลึกที่ติดตั้งบนกล้องและทิศทางของแกน a,b และ c .	20
3-5	แสดงระนาบ xyz ในหนึ่งหน่วยเซลล์ของผลึก	21
3-6	(ก) แสดงทิศทางและการจัดแกน a,bและ c ในผลึกจำลอง (ข) ภาพขยายบางส่วนของรูป (ก) เพื่อการคำนวณกำหนดดัชนีมิลเลอร์ของระนาบ	23
4-1	การสะท้อนของรังสีเอ็กซ์ที่ทำให้เกิด เอ็กซ์ทิงค์ชัน ปฐมภูมิ	27
4-2	(ก) รังสีเอ็กซ์ตกกระทบกับระนาบการสะท้อนแล้วเลี้ยวเบนไปที่จุดๆหนึ่ง (ข) มองรูป (ก) ในระนาบของ OMP (ค) แสดงรายละเอียดทางด้านซ้ายมือของรูป (ข)	29
4-3	แสดงเฟรสเนิลโซนที่ 1 และ 2 บนระนาบการสะท้อน	30

รูป		หน้า
4-4	แผนผังแสดงผลลัพธ์ของอำพน ที่กระเจิงจากโซนย่อยของเฟรสเนิลโซนที่ 1 เมื่อเฟสคงเดิมและเมื่อเฟสเปลี่ยนไป	32
4-5	(ก) รังสีเอ็กซ์ตกกระทบระนาบการสะท้อนโดยเอียงทำมุม θ กับระนาบการสะท้อน (ข) มองรูป (ก) ในระนาบ OMP (ค) แสดงสมมาตรของการสะท้อนเทียบกับระนาบการสะท้อน	33
4-6	แสดงรังสีเอ็กซ์ตกกระทบและเลี้ยวเบนบนระนาบอะตอม	35
4-7	แสดงการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกสมบูรณ์	39
4-8	แสดงการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกสมบูรณ์ที่มุมการสะท้อน θ และมุมข้างเคียง $\theta_o + u$	40
4-9	แสดงการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกสมบูรณ์ที่ประกอบด้วยระนาบอะตอม p ระนาบไปยังจุด Q	42
4-10	แสดง มัลทิเพิล รีเฟลคชันของรังสีเอ็กซ์จากผลึกสมบูรณ์	44
4-11	การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากผลึกโมเซอิคที่มีผิวหน้าแผ่กว้าง	50
4-12	การเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์จากกล่องอันหนึ่งที่อยู่ภายในผลึกโมเซอิค .	52
5-1	รูปทรงผลึกเดี่ยวของสารประกอบ $Ta_5Ni_4P_4$	59
5-2	แสดงวิธีการถ่ายภาพเพื่อปรับแกนหมุนของผลึกแบบให้อาร์คทำมุม 45 องศากับลำรังสีเอ็กซ์ที่ออกจากแหล่งกำเนิด (ก) แสดงการจัดอาร์ค (ข) แสดงจุดสะท้อนบนฟิล์ม R และ $\bar{R}$ ที่สอดคล้องกับ A และ $\bar{A}$ ตามลำดับ	60
5-3	แสดงภาพถ่ายเมื่อถ่ายแบบให้อาร์คทำมุม 45 องศากับลำรังสีเอ็กซ์เพื่อปรับแกนหมุนของผลึก (ก) ถ่ายครั้งแรก (ข) ถ่ายครั้งที่สองหลังจากปรับอาร์คด้วยค่ามุมที่คำนวณได้จากภาพ (ก)	

รูป หน้า

ครั้งนี้ถ่ายวิธีเดิมแต่ใช้คับเบิลออสซิลเลเชิน
(ค) ถ่ายครั้งที่สามหลังจากปรับอาร์คด้วยค่ามุมที่คำนวณได้จากภาพ(ข)
ครั้งนี้ถ่ายเหมือนภาพ(ข) 63
5-4 ภาพถ่ายออสซิลเลเชินรอบแกน c ในช่วงมุม ±110 องศา ใช้รังสีเอ็กซ์
ของ Mo ชนิด K_α เวลาในการถ่ายภาพ 16 ชั่วโมง 65
5-5 (ก) ภาพถ่ายแบบไวซเซ็นเบิร์กสำหรับเลย์เออร์ที่ 0 ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$
เมื่อให้ผลึกหมุนรอบแกน c โดยใช้รังสีเอ็กซ์ของ Mo ชนิด K_α
จุดสะท้อนที่ปรากฏสอดคล้องกับเงื่อนไข $h + k = 2n$ 67
(ข) ภาพถ่ายแบบไวซเซ็นเบิร์กสำหรับเลย์เออร์ที่ 1 ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$
เมื่อให้ผลึกหมุนรอบแกน c โดยใช้รังสีเอ็กซ์ของ Mo ชนิด K_α
จุดสะท้อนที่ปรากฏสอดคล้องกับเงื่อนไข $h + k = 2n + 1$ 68
5-6 ภาพถ่ายผลึกผง $Ta_5Ni_4P_4$ ถ่ายด้วย Guinier – Hägg focusing
camera ใช้รังสีเอ็กซ์ชนิด Cu $K_{\alpha 1}$ ($\lambda = 1.54051$ Å) 70
5-7 (ก) แสดงโคออร์ดิเนตของจุดสะท้อนบนภาพถ่ายไวซเซ็นเบิร์กที่ถูกสร้าง
ขึ้นโดยใช้แผ่นแสดงแนวไวซเซ็นเบิร์ก เลย์เออร์ที่ 0 74
(ข) แสดงโคออร์ดิเนตของจุดสะท้อนบนภาพถ่ายไวซเซ็นเบิร์กที่ถูกสร้าง
ขึ้นโดยใช้แผ่นแสดงแนวไวซเซ็นเบิร์ก เลย์เออร์ที่ 1 75
5-8 แลททิสส่วนกลับของ $Ta_5Ni_4P_4$
(ก) hk0 เลย์เออร์ที่ 0
(ข) hkl เลย์เออร์ที่ 1 76
5-9 (ก) ภาพถ่ายไวซเซ็นเบิร์กเพื่อรวบรวมข้อมูลความเข้มเมื่อให้ผลึกหมุนรอบ
แกน c สำหรับเลย์เออร์ที่ 0 ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$ 79
(ข) ภาพถ่ายไวซเซ็นเบิร์กเพื่อรวบรวมข้อมูลความเข้มเมื่อให้ผลึกหมุนรอบ
แกน c สำหรับเลย์เออร์ที่ 1 ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$ 80
5-10 (ก) ขนาดผลึกจำลองที่ใช้ในการคำนวณแก้การดูดกลืน
(ข) ทิศทางและตำแหน่งของแกนผลึกในผลึกจำลอง 82

รูป		หน้า
5-11	ขนาดและรูปร่างของผลึกจำลองใหม่ที่ใช้ในการคำนวณแฟคเตอร์การแพร่รังสี	84
5-11	แผนภาพแพทเทอร์สัน P(u,v,0) ของ $Ta_5Ni_4P_4$	89
5-12	(ก) แผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนของ $Ta_5Ni_4P_4$ ที่ z = 0 ใช้เฟสของแฟคเตอร์โครงสร้างที่ได้จากอะตอม Ta 10 อะตอม .	92
	(ข) แผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนของ $Ta_5Ni_4P_4$ บนระนาบที่ z = 0 เฉพาะบริเวณตำแหน่งอะตอม Ta(I)	93
	(ค) แผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนของ $Ta_5Ni_4P_4$ บนระนาบที่ z = 0 เฉพาะบริเวณที่เป็นตำแหน่งอะตอม Ni	93
	(ง) แผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนของ $Ta_5Ni_4P_4$ บนระนาบที่ z = 0 เฉพาะบริเวณที่เป็นตำแหน่งอะตอม P	94
5-13	แสดงค่าความหนาแน่นอิเลคตรอนตรงบริเวณตำแหน่งอะตอม	95
5-14	กราฟแสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $\left(\lvert F_c \rvert_{hkl} / \lvert F_o \rvert_{hkl} \right)^4$ กับ $\lvert F_c \rvert^2_{hkl} \cdot T_{hkl}$ เพื่อพิจารณาค่าสัมประสิทธิ์เอ็กซ์ทิงคชัน 101	
6-1	แสดงตำแหน่งอะตอมของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$ ภายใน 4 หน่วยเซลล์เมื่อฉายลงไปตามแกน z	109
6-2	แสดงอะตอมข้างเคียงของอะตอม Ta(I) ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$	110
6-3	แสดงอะตอมข้างเคียงของอะตอม Ta(II) ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$	115
6-4	แสดงอะตอมข้างเคียงของอะตอม Ni ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$	118
6-5	แสดงอะตอมข้างเคียงของอะตอม P ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$	122
6-6	โครงสร้างของผลึก U_3Si_2 เมื่อฉายลงตามแกน z	125
6-7	แสดงระนาบร่างแหภายใน 4 หน่วยเซลล์เมื่อฉายลงตามแกน z เฉพาะที่ z = 0 ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$	126