

## บทที่ 6

### ผลการทดลอง

#### 6.1 ระบบผลึก หนึ่งสมมาตรสามมิติ และขนาดหนึ่งหน่วยเซลล์

ผลการตรวจสอบสมมาตรของจุดสะท้อนจากภาพถ่ายออสซิลเลชัน พบว่ามีสมมาตรเป็น  $mmm$  ซึ่งเป็นสมมาตรของผลึกระบบออร์โธรมบิก ฉะนั้นผลึก NbNiP อยู่ในระบบออร์โธรมบิก จากการตรวจสอบเงื่อนไขการปรากฏจุดสะท้อนของรังสีเลี้ยวเบนจากระนาบต่าง ๆ บนภาพถ่ายไวซเซนเบอร์ก ผลึก NbNiP มีหนึ่งสมมาตรสามมิติเป็น  $Pnma$  เงื่อนไขการปรากฏของจุดสะท้อนแสดงในตาราง 6.1

| ประเภทจุดสะท้อน | เงื่อนไข   |
|-----------------|------------|
| $hkl$           | ไม่มี      |
| $0kl$           | $k+l = 2n$ |
| $h0l$           | ไม่มี      |
| $hk0$           | $h = 2n$   |
| $h00$           | $h = 2n$   |
| $0k0$           | $k = 2n$   |
| $00l$           | $l = 2n$   |

$n$  = เลขจำนวนเต็ม

ตาราง 6.1 เงื่อนไขการปรากฏจุดสะท้อน

คำนวณและวัดความยาวแกนกับมุมระหว่างแกนของผลึกจากภาพถ่ายออสซิลเลชัน และภาพถ่ายไวซเซนเบอร์ก ทำให้ทราบขนาดหนึ่งหน่วยเซลล์ของผลึก ความยาวแกน และมุมระหว่างแกนของผลึก แสดงในตาราง 6.2

| แกน | ความยาว ( $\text{\AA}$ ) | มุม      | องศา |
|-----|--------------------------|----------|------|
| a   | $6.074 \pm 0.03$         | $\alpha$ | 90   |
| b   | $3.542 \pm 0.15$         | $\beta$  | 90   |
| c   | $7.107 \pm 0.02$         | $\gamma$ | 90   |

ตาราง 6.2 ความยาวแกน และมุมระหว่างแกนของผลึก

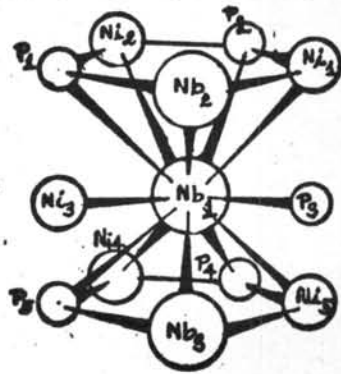
### 6.2 โครงสร้างผลึก NbNiP

โครงสร้างผลึก NbNiP เป็นแบบ anti-PbCl<sub>2</sub> ในหนึ่งหน่วยเซลล์ของผลึก ประกอบด้วยโมเลกุล 4 โมเลกุล เป็น Nb Ni และ P อย่างละ 4 อะตอม แต่ละอะตอมอยู่ที่ตำแหน่งพิเศษ c คือ  $y = 0.25$  โคออร์ดิเนชันของแต่ละอะตอม และเทอร์เมลเพอแรมิเตอร์ แสดงในตาราง 6.3 ซึ่งแสดงพร้อมกับค่าความเบี่ยงเบนมาตรฐาน ( $\sigma$ )

| อะตอม       | x      | $\sigma(x)$ | z      | $\sigma(z)$ | B    | $\sigma(B)$ |
|-------------|--------|-------------|--------|-------------|------|-------------|
| 4 Nb ที่ 4c | 0.0221 | 0.0003      | 0.1683 | 0.0002      | 0.15 | 0.02        |
| 4 Ni ที่ 4c | 0.1471 | 0.0004      | 0.5662 | 0.0004      | 0.47 | 0.02        |
| 4 P ที่ 4c  | 0.2805 | 0.0009      | 0.8766 | 0.0008      | 0.30 | 0.06        |

ตาราง 6.3 ตำแหน่งอะตอม และเทอร์เมลเพอแรมิเตอร์ของแต่ละอะตอม

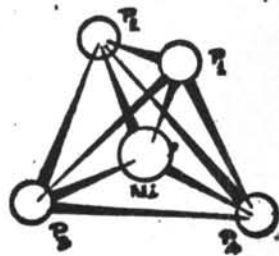
โคออร์ดิเนชันเลข (coordination number) ของอะตอม Nb เป็น 12 ซึ่งประกอบด้วย Nb 2 อะตอม Ni และ P อย่างละ 5 อะตอม สภาพของโคออร์ดิเนชันแสดงในรูป 6.1 (a) มีอะตอมของธาตุ 10 อะตอม จัดตัวเป็นแท่งปริซึมห้าเหลี่ยม (pentagonal prism) อะตอมที่เหลือ 2 อะตอมยื่นออกที่กลางหน้าดิ่งที่ติดกัน อะตอม Ni มีโคออร์ดิเนชันเป็น 4 ซึ่งเป็นอะตอม P ทั้งหมดโดยอยู่ที่มุมทั้งสี่ของเททราฮีดรอนที่บิด



รูป 6.1 (a)

| อะตอม           | x      | y     | z      |
|-----------------|--------|-------|--------|
| Nb <sub>1</sub> | 0.022  | 0.25  | 0.168  |
| Nb <sub>2</sub> | -0.022 | 0.75  | -0.168 |
| Nb <sub>3</sub> | -0.022 | -0.25 | -0.168 |
| Ni <sub>1</sub> | 0.353  | 0.75  | 0.066  |
| Ni <sub>2</sub> | -0.147 | 0.75  | 0.434  |
| Ni <sub>3</sub> | -0.353 | 0.25  | -0.066 |
| Ni <sub>4</sub> | -0.147 | -0.25 | 0.434  |
| Ni <sub>5</sub> | 0.353  | -0.25 | 0.066  |
| P <sub>1</sub>  | -0.280 | 0.75  | 0.123  |
| P <sub>2</sub>  | 0.220  | 0.75  | 0.377  |
| P <sub>3</sub>  | 0.280  | 0.25  | -0.123 |
| P <sub>4</sub>  | 0.220  | -0.25 | 0.377  |
| P <sub>5</sub>  | -0.280 | -0.25 | 0.123  |

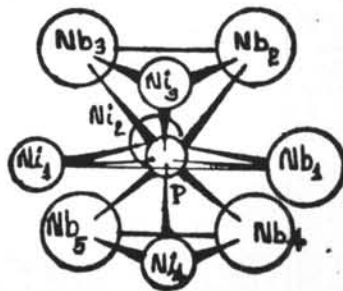
ตาราง 6.4 (a)



รูป 6.1 (b)

| อะตอม           | x      | y     | z     |
|-----------------|--------|-------|-------|
| Ni <sub>1</sub> | 0.147  | 0.25  | 0.566 |
| P <sub>1</sub>  | 0.280  | 0.25  | 0.877 |
| P <sub>2</sub>  | -0.220 | 0.25  | 0.623 |
| P <sub>3</sub>  | 0.220  | 0.75  | 0.377 |
| P <sub>4</sub>  | 0.220  | -0.25 | 0.377 |

ตาราง 6.4 (b)



รูป 6.1 (c)

| อะตอม           | x      | y     | z     |
|-----------------|--------|-------|-------|
| Nb <sub>1</sub> | 0.022  | 0.25  | 1.168 |
| Nb <sub>2</sub> | -0.022 | 0.75  | 0.832 |
| Nb <sub>3</sub> | 0.478  | 0.75  | 0.668 |
| Nb <sub>4</sub> | -0.022 | -0.25 | 0.832 |
| Nb <sub>5</sub> | 0.478  | -0.25 | 0.668 |
| Ni <sub>1</sub> | 0.647  | 0.25  | 0.934 |
| Ni <sub>2</sub> | 0.147  | 0.25  | 0.566 |
| Ni <sub>3</sub> | 0.353  | 0.75  | 1.066 |
| Ni <sub>4</sub> | 0.353  | 0.25  | 1.066 |
| P               | 0.280  | 0.25  | 0.877 |

ตาราง 6.4 (c)

รูป 6.1 ลักษณะสภาพโคออร์ดิเนชันของอะตอม Nb, Ni และ P

ตาราง 6.4 ตำแหน่งอะตอมในสภาพโคออร์ดิเนชันของอะตอม Nb Ni และ P

ไปเล็กน้อย (slightly distorted tetrahedron) ดังแสดงในรูป 6.1 (b) ส่วนอะตอม P มีโคออร์ดิเนชันนัมเบอร์เป็น 9 ประกอบด้วย Nb 5 อะตอม และ Ni 4 อะตอม สภาพโคออร์ดิเนชันเป็นแท่งปริซึมสามเหลี่ยมที่บิดไปเล็กน้อย (slightly distorted trigonal prism) ตรงกลางหน้าตั้งทั้งสามหน้ามีอะตอมยื่นออกมาอีกหน้าละ 1 อะตอม ดังแสดงในรูป 6.1 (c)

ตำแหน่งของอะตอมในสภาพโคออร์ดิเนชันของอะตอม Nb Ni และ P แสดงในตาราง 6.4 (a) 6.4 (b) และ 6.4 (c) ตามลำดับ ความยาวบอนด์ (bond length) ของสภาพโคออร์ดิเนชันของอะตอม Nb Ni และ P แสดงในตาราง 6.5 (a). (6.5 (b) และ 6.5 (c) ส่วนมุมระหว่างบอนด์ตามสภาพโคออร์ดิเนชันของแต่ละอะตอมแสดงในตาราง 6.7 (a) 6.7 (b) และ 6.7 (c)

ระยะระหว่างอะตอม (interatomic distance) และความเบี่ยงเบนมาตรฐานแสดงในตาราง 6.6 ซึ่งแสดงเฉพาะระยะที่ไม่ถึง  $4 \text{ \AA}$

|                                   | ความยาว <sup>o</sup> A |                                   | ความยาว <sup>o</sup> A |                                   | ความยาว <sup>o</sup> A |                                  | ความยาว <sup>o</sup> A |
|-----------------------------------|------------------------|-----------------------------------|------------------------|-----------------------------------|------------------------|----------------------------------|------------------------|
| Nb <sub>1</sub> - Nb <sub>2</sub> | 2.995                  | Nb <sub>2</sub> - P <sub>4</sub>  | 5.469                  | Ni <sub>2</sub> - Ni <sub>3</sub> | 4.165                  | Ni <sub>5</sub> - P <sub>1</sub> | 5.285                  |
| - Nb <sub>3</sub>                 | 2.995                  | - P <sub>5</sub>                  | 4.424                  | - Ni <sub>4</sub>                 | 3.578                  | - P <sub>2</sub>                 | 4.279                  |
| - Ni <sub>1</sub>                 | 2.794                  | Nb <sub>3</sub> - Ni <sub>1</sub> | 4.562                  | - Ni <sub>5</sub>                 | 5.378                  | - P <sub>3</sub>                 | 2.281                  |
| - Ni <sub>2</sub>                 | 2.795                  | - Ni <sub>2</sub>                 | 4.562                  | - P <sub>1</sub>                  | 2.347                  | - P <sub>4</sub>                 | 2.347                  |
| - Ni <sub>3</sub>                 | 2.830                  | - Ni <sub>3</sub>                 | 2.794                  | - P <sub>2</sub>                  | 2.276                  | - P <sub>5</sub>                 | 3.890                  |
| - Ni <sub>4</sub>                 | 2.795                  | - Ni <sub>4</sub>                 | 4.337                  | - P <sub>3</sub>                  | 5.063                  |                                  |                        |
| - Ni <sub>5</sub>                 | 2.794                  | - Ni <sub>5</sub>                 | 2.830                  | - P <sub>4</sub>                  | 4.241                  |                                  |                        |
| - P <sub>1</sub>                  | 2.592                  | - P <sub>1</sub>                  | 4.424                  | - P <sub>5</sub>                  | 4.279                  |                                  |                        |
| - P <sub>2</sub>                  | 2.615                  | - P <sub>2</sub>                  | 5.469                  | Ni <sub>3</sub> - Ni <sub>4</sub> | 4.165                  |                                  |                        |
| - P <sub>3</sub>                  | 2.602                  | - P <sub>3</sub>                  | 2.592                  | - Ni <sub>5</sub>                 | 4.761                  |                                  |                        |
| - P <sub>4</sub>                  | 2.615                  | - P <sub>4</sub>                  | 4.136                  | - P <sub>1</sub>                  | 2.281                  |                                  |                        |
| - P <sub>5</sub>                  | 2.592                  | - P <sub>5</sub>                  | 2.602                  | - P <sub>2</sub>                  | 5.028                  |                                  |                        |
| Nb <sub>2</sub> - Nb <sub>3</sub> | 3.578                  | Ni <sub>1</sub> - Ni <sub>2</sub> | 4.015                  | - P <sub>3</sub>                  | 3.890                  |                                  |                        |
| - Ni <sub>1</sub>                 | 2.830                  | - Ni <sub>3</sub>                 | 4.761                  | - P <sub>4</sub>                  | 5.028                  |                                  |                        |
| - Ni <sub>2</sub>                 | 4.337                  | - Ni <sub>4</sub>                 | 5.378                  | - P <sub>5</sub>                  | 2.281                  |                                  |                        |
| - Ni <sub>3</sub>                 | 2.794                  | - Ni <sub>5</sub>                 | 3.578                  | Ni <sub>4</sub> - Ni <sub>5</sub> | 4.015                  |                                  |                        |
| - Ni <sub>4</sub>                 | 5.623                  | - P <sub>1</sub>                  | 3.890                  | - P <sub>1</sub>                  | 4.279                  |                                  |                        |
| - Ni <sub>5</sub>                 | 4.562                  | - P <sub>2</sub>                  | 2.347                  | - P <sub>2</sub>                  | 4.241                  |                                  |                        |
| - P <sub>1</sub>                  | 2.602                  | - P <sub>3</sub>                  | 2.281                  | - P <sub>3</sub>                  | 5.063                  |                                  |                        |
| - P <sub>2</sub>                  | 4.136                  | - P <sub>4</sub>                  | 4.279                  | - P <sub>4</sub>                  | 2.276                  |                                  |                        |
| - P <sub>3</sub>                  | 2.592                  | - P <sub>5</sub>                  | 5.285                  | - P <sub>5</sub>                  | 2.347                  |                                  |                        |

ตาราง 6.5 (a) ความยาวบอนด์ของสภาพโคออร์ดิเนชันของอะตอม Nb

ตามรูป 6.1 (a)

|                     | ความยาว(Å) |                                 | ความยาว(Å) |                                 | ความยาว(Å) |
|---------------------|------------|---------------------------------|------------|---------------------------------|------------|
| Ni - P <sub>1</sub> | 2.347      | P <sub>1</sub> - P <sub>2</sub> | 3.543      | P <sub>2</sub> - P <sub>3</sub> | 3.668      |
| - P <sub>2</sub>    | 2.276      | - P <sub>3</sub>                | 3.989      | - P <sub>4</sub>                | 3.668      |
| - P <sub>3</sub>    | 2.281      | - P <sub>4</sub>                | 3.989      | P <sub>3</sub> - P <sub>4</sub> | 3.578      |
| - P <sub>4</sub>    | 2.281      |                                 |            |                                 |            |

ตาราง 6.5 (b) ความยาวบอนด์ของสภาพโคออร์ดิเนชันของอะตอม Ni ตามรูป 6.1(b)

|                                   | ความยาว(Å) |                                   | ความยาว(Å) |                                   | ความยาว(Å) |
|-----------------------------------|------------|-----------------------------------|------------|-----------------------------------|------------|
| P - Nb <sub>1</sub>               | 2.602      | Nb <sub>1</sub> - Ni <sub>3</sub> | 2.794      | Nb <sub>4</sub> - Nb <sub>5</sub> | 3.266      |
| - Nb <sub>2</sub>                 | 2.592      | - Ni <sub>4</sub>                 | 2.794      | - Ni <sub>1</sub>                 | 2.795      |
| - Nb <sub>3</sub>                 | 2.615      | Nb <sub>2</sub> - Nb <sub>3</sub> | 3.266      | - Ni <sub>2</sub>                 | 2.794      |
| - Nb <sub>4</sub>                 | 2.592      | - Nb <sub>4</sub>                 | 3.578      | - Ni <sub>3</sub>                 | 4.620      |
| - Nb <sub>5</sub>                 | 2.615      | - Nb <sub>5</sub>                 | 4.845      | - Ni <sub>4</sub>                 | 2.923      |
| - Ni <sub>1</sub>                 | 2.276      | - Ni <sub>1</sub>                 | 4.520      | Ni <sub>1</sub> - Ni <sub>2</sub> | 4.015      |
| - Ni <sub>2</sub>                 | 2.347      | - Ni <sub>2</sub>                 | 2.795      | - Ni <sub>3</sub>                 | 2.704      |
| - Ni <sub>3</sub>                 | 2.281      | - Ni <sub>3</sub>                 | 2.830      | - Ni <sub>4</sub>                 | 2.704      |
| - Ni <sub>4</sub>                 | 2.281      | - Ni <sub>4</sub>                 | 4.562      | Ni <sub>2</sub> - Ni <sub>3</sub> | 4.165      |
| Nb <sub>1</sub> - Nb <sub>2</sub> | 2.995      | Nb <sub>3</sub> - Nb <sub>4</sub> | 4.845      | - Ni <sub>4</sub>                 | 4.165      |
| - Nb <sub>3</sub>                 | 2.615      | - Nb <sub>5</sub>                 | 3.578      | Ni <sub>3</sub> - Ni <sub>4</sub> | 3.578      |
| - Nb <sub>4</sub>                 | 2.995      | - Ni <sub>1</sub>                 | 2.795      |                                   |            |
| - Nb <sub>5</sub>                 | 4.850      | - Ni <sub>2</sub>                 | 2.794      |                                   |            |
| - Ni <sub>1</sub>                 | 4.164      | - Ni <sub>3</sub>                 | 2.923      |                                   |            |
| - Ni <sub>2</sub>                 | 4.337      | - Ni <sub>4</sub>                 | 4.620      |                                   |            |

ตาราง 6.5 (c) ความยาวบอนด์ของสภาพโคออร์ดิเนชันของอะตอม P ตามรูป 6.1(c)

|         | ระยะ(Å) | $\sigma$ |        | ระยะ(Å) | $\sigma$ |
|---------|---------|----------|--------|---------|----------|
| Nb - 2P | 2.592   | 0.002    | P - Ni | 2.276   | 0.001    |
| - P     | 2.602   | 0.005    | - 2Ni  | 2.281   | 0.004    |
| - 2P    | 2.615   | 0.004    | - Ni   | 2.347   | 0.006    |
| - 2Ni   | 2.794   | 0.001    | - 2Nb  | 2.592   | 0.001    |
| - 2Ni   | 2.795   | 0.002    | - Nb   | 2.602   | 0.005    |
| - Ni    | 2.830   | 0.002    | - 2Nb  | 2.615   | 0.003    |
| - Ni    | 2.923   | 0.004    | - 2P   | 2.543   | 0.006    |
| - 2Nb   | 2.995   | 0.003    | - Nb   | 3.549   | 0.006    |
| - 2Nb   | 3.266   | 0.001    | - 2P   | 3.578   | 0.000    |
| - P     | 3.549   | 0.006    | - 2P   | 3.668   | 0.006    |
| - 2Nb   | 3.578   | 0.000    | - Ni   | 3.890   | 0.001    |
| -----   |         |          |        |         |          |
| Ni - P  | 2.276   | 0.001    |        |         |          |
| - 2P    | 2.281   | 0.004    |        |         |          |
| - P     | 2.347   | 0.006    |        |         |          |
| - 2Ni   | 2.704   | 0.002    |        |         |          |
| - 2Nb   | 2.794   | 0.001    |        |         |          |
| - 2Nb   | 2.795   | 0.002    |        |         |          |
| - Nb    | 2.830   | 0.002    |        |         |          |
| - Nb    | 2.930   | 0.004    |        |         |          |
| - 2N    | 3.578   | 0.000    |        |         |          |
| - P     | 3.890   | 0.001    |        |         |          |

ตาราง 6.6 ระยะระหว่างอะตอมและความเบี่ยงเบนมาตรฐาน

| มุม   | องศา  | มุม   | องศา  | มุม   | องศา  | มุม  | องศา  |
|---|-------|---|-------|---|-------|--|-------|
| Nb <sub>2</sub> -Nb <sub>1</sub> -Nb <sub>3</sub> | 73.5  | Nb <sub>3</sub> -Nb <sub>1</sub> -P <sub>5</sub>  | 54.9  | Ni <sub>3</sub> -Nb <sub>1</sub> -P <sub>1</sub>  | 49.5  | P <sub>2</sub> -Nb <sub>1</sub> -P <sub>3</sub>  | 89.7  |
| -Ni <sub>1</sub>                                  | 58.4  | Ni <sub>1</sub> -Nb <sub>1</sub> -Ni <sub>2</sub> | 148.4 | -P <sub>2</sub>                                   | 134.8 | -P <sub>4</sub>                                  | 86.3  |
| -Ni <sub>2</sub>                                  | 152.3 | -Ni <sub>3</sub>                                  | 115.6 | -P <sub>3</sub>                                   | 91.3  | -P <sub>5</sub>                                  | 150.5 |
| -Ni <sub>3</sub>                                  | 57.2  | -Ni <sub>4</sub>                                  | 91.8  | -P <sub>4</sub>                                   | 134.8 | P <sub>3</sub> -Nb <sub>1</sub> -P <sub>4</sub>  | 99.7  |
| -Ni <sub>4</sub>                                  | 96.9  | -Ni <sub>5</sub>                                  | 79.6  | -P <sub>5</sub>                                   | 49.5  | -P <sub>5</sub>                                  | 109.5 |
| -Ni <sub>5</sub>                                  | 103.9 | -P <sub>1</sub>                                   | 92.4  | Ni <sub>4</sub> -Nb <sub>1</sub> -Ni <sub>5</sub> | 148.4 | P <sub>4</sub> -Nb <sub>1</sub> -P <sub>5</sub>  | 85.7  |
| -P <sub>1</sub>                                   | 54.9  | -P <sub>2</sub>                                   | 51.3  | -P <sub>1</sub>                                   | 51.4  | P <sub>2</sub> -Ni <sub>1</sub> -Nb <sub>2</sub> | 105.7 |
| -P <sub>2</sub>                                   | 94.7  | -P <sub>3</sub>                                   | 49.8  | -P <sub>2</sub>                                   | 49.6  | P <sub>4</sub> -Ni <sub>5</sub> -Nb <sub>3</sub> |       |
| -P <sub>3</sub>                                   | 54.6  | -P <sub>4</sub>                                   | 104.5 | -P <sub>3</sub>                                   | 139.4 | Ni <sub>1</sub> -Nb <sub>2</sub> -P <sub>1</sub> | 91.4  |
| -P <sub>4</sub>                                   | 154.2 | -P <sub>5</sub>                                   | 157.7 | -P <sub>4</sub>                                   | 103.1 | Ni <sub>5</sub> -Nb <sub>3</sub> -P <sub>5</sub> |       |
| -P <sub>5</sub>                                   | 104.4 | Ni <sub>2</sub> -Nb <sub>1</sub> -Ni <sub>3</sub> | 95.5  | -P <sub>5</sub>                                   | 105.1 | Nb <sub>2</sub> -P <sub>1</sub> -Ni <sub>2</sub> | 100.4 |
| Nb <sub>3</sub> -Nb <sub>1</sub> -Ni <sub>1</sub> | 103.9 | -Ni <sub>4</sub>                                  | 79.5  | Ni <sub>5</sub> -Nb <sub>1</sub> -P <sub>1</sub>  | 157.7 | Nb <sub>3</sub> -P <sub>5</sub> -Ni <sub>4</sub> |       |
| -Ni <sub>2</sub>                                  | 96.9  | -Ni <sub>5</sub>                                  | 91.8  | -P <sub>2</sub>                                   | 104.5 | P <sub>1</sub> -Ni <sub>2</sub> -P <sub>2</sub>  | 100.1 |
| -Ni <sub>3</sub>                                  | 57.2  | -P <sub>1</sub>                                   | 105.1 | -P <sub>3</sub>                                   | 49.8  | P <sub>5</sub> -Ni <sub>4</sub> -P <sub>4</sub>  |       |
| -Ni <sub>4</sub>                                  | 152.3 | -P <sub>2</sub>                                   | 103.1 | -P <sub>4</sub>                                   | 51.3  | Ni <sub>2</sub> -P <sub>2</sub> -Ni <sub>1</sub> | 120.5 |
| -Ni <sub>5</sub>                                  | 58.4  | -P <sub>3</sub>                                   | 139.4 | -P <sub>5</sub>                                   | 92.4  | Ni <sub>4</sub> -P <sub>4</sub> -Ni <sub>5</sub> |       |
| -P <sub>1</sub>                                   | 104.4 | -P <sub>4</sub>                                   | 49.6  | P <sub>1</sub> -Nb <sub>1</sub> -P <sub>2</sub>   | 85.7  |  |       |
| -P <sub>2</sub>                                   | 154.2 | -P <sub>5</sub>                                   | 51.4  | -P <sub>3</sub>                                   | 109.5 |  |       |
| -P <sub>3</sub>                                   | 54.6  | Ni <sub>3</sub> -Nb <sub>1</sub> -Ni <sub>4</sub> | 95.5  | -P <sub>4</sub>                                   | 150.5 |  |       |
| -P <sub>4</sub>                                   | 94.7  | -Ni <sub>5</sub>                                  | 115.6 | -P <sub>5</sub>                                   | 87.3  |  |       |

ตาราง 6.7(a) มุมระหว่างบอนด์ในสภาพโคออร์ดิเนชันของอะตอม Nb ตามรูป 6.1(a)



| มุม              | องศา  | มุม                   | องศา | มุม                   | องศา |
|------------------|-------|-----------------------|------|-----------------------|------|
| $P_1$ -Ni- $P_2$ | 100.1 | $P_1$ - $P_2$ - $P_3$ | 67.2 | $P_2$ - $P_3$ - $P_4$ | 60.8 |
| - $P_3$          | 119.1 | $P_2$ - $P_3$ - $P_1$ | 54.9 | $P_3$ - $P_4$ - $P_2$ | 60.8 |
| - $P_4$          | 119.1 | $P_3$ - $P_1$ - $P_2$ | 57.9 | $P_4$ - $P_2$ - $P_3$ | 58.4 |
| $P_2$ -Ni- $P_3$ | 107.1 | $P_1$ - $P_2$ - $P_4$ | 67.2 | $P_1$ - $P_3$ - $P_4$ | 66.3 |
| - $P_4$          | 107.1 | $P_2$ - $P_4$ - $P_1$ | 54.9 | $P_3$ - $P_4$ - $P_1$ | 66.3 |
| $P_3$ -Ni- $P_4$ | 103.3 | $P_4$ - $P_1$ - $P_2$ | 57.9 | $P_4$ - $P_1$ - $P_3$ | 53.5 |

ตาราง 6.7(b) มุมระหว่างบอนด์ในสภาพโคออร์ดิเนชันของอะตอม Ni ตามรูป 6.1(b)

| มุม               | องศา  | มุม               | องศา  | มุม                       | องศา  | มุม   | องศา   |
|-------------------|-------|-------------------|-------|---------------------------|-------|---|--------|
| $Nb_1$ -P- $Nb_2$ | 70.4  | $Nb_2$ -P- $Nb_5$ | 137.1 | $Nb_3$ -P-Ni <sub>4</sub> | 141.2 | Ni <sub>1</sub> -Nb <sub>1</sub> -Ni <sub>2</sub> | 55.4   |
| -Nb <sub>3</sub>  | 136.7 | -Ni <sub>1</sub>  | 136.3 | $Nb_4$ -P- $Nb_5$         | 77.7  | Nb <sub>1</sub> -Ni <sub>2</sub> -Ni <sub>1</sub> | 58.4   |
| -Nb <sub>4</sub>  | 70.4  | -Ni <sub>2</sub>  | 68.7  | -Ni <sub>1</sub>          | 136.3 | Ni <sub>2</sub> -Ni <sub>1</sub> -Nb <sub>1</sub> | 66.2   |
| -Nb <sub>5</sub>  | 136.7 | -Ni <sub>3</sub>  | 70.6  | -Ni <sub>2</sub>          | 68.7  | $Nb_3$ -Ni <sub>3</sub> -Nb <sub>2</sub>          | } 69.3 |
| -Ni <sub>1</sub>  | 117.1 | -Ni <sub>4</sub>  | 138.7 | -Ni <sub>3</sub>          | 138.7 | Nb <sub>5</sub> -Ni <sub>4</sub> -Nb <sub>4</sub> |        |
| -Ni <sub>2</sub>  | 122.3 | $Nb_3$ -P- $Nb_4$ | 137.1 | -Ni <sub>4</sub>          | 70.6  | Ni <sub>3</sub> -Nb <sub>2</sub> -Nb <sub>3</sub> | } 56.8 |
| -Ni <sub>3</sub>  | 69.4  | -Nb <sub>5</sub>  | 86.3  | $Nb_5$ -P-Ni <sub>1</sub> | 69.3  | Ni <sub>4</sub> -Nb <sub>4</sub> -Nb <sub>5</sub> |        |
| -Ni <sub>4</sub>  | 69.4  | -Ni <sub>1</sub>  | 69.3  | -Ni <sub>2</sub>          | 68.3  | $Nb_2$ -Nb <sub>3</sub> -Ni <sub>3</sub>          | } 53.9 |
| $Nb_2$ -P- $Nb_3$ | 77.7  | -Ni <sub>2</sub>  | 68.3  | -Ni <sub>3</sub>          | 141.2 | Nb <sub>4</sub> -Nb <sub>5</sub> -Ni <sub>4</sub> |        |
| -Nb <sub>4</sub>  | 87.3  | -Ni <sub>3</sub>  | 72.9  | -Ni <sub>4</sub>          | 72.9  |   |        |

ตาราง 6.7(c) มุมระหว่างบอนด์ในสภาพโคออร์ดิเนชันของอะตอม P ตามรูป 6.1(c)