การศึกษาไตรไนโอเบียมอาร์เซไนด์ทางผลึกวิทยาโดยรังสีเอ็กซ์

นางสาว กัลณกา สาธิตธาดา

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต
แผนกวิชา ฟิสิกส์
บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณมหาวิทยาลัย
พ.ศ. ๒๕๒๐

AN X-RAY CRYSTALLOGRAPHIC STUDY OF TRINIOBIUM ARSENIDE (Nb_3As)

Miss Gannaga Satittada

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1977

Thesis Title	An X-ray Crystallographic Study of Triniobium Arsenide (Nb_3As)
By	Miss Gannaga Satittada
Department	Physics
Thesis Advisor	Assistant Professor Phathana Phavanantha Ph.D.

Accepted by the Graduate School, Chulalongkorn University in partial fulfillment of the requirements for the Master's degree.

S. Bunnag ..... Acting Dean of Graduate School

(Assistant Professor Supradit Bunnag Ph.D.)

Thesis Committee

S. Thanomkul ..... Chairman

(Assistant Professor Srinuan Thanomkul Dr.Ing.)

Phathana Phavanantha ..... Advisor

(Assistant Professor Phathana Phavanantha Ph.D.)

Supanich Pramat ..... Member

(Assistant Professor Supanich Pramat M.Sc.)

Ch. Khantaprab ..... Member

(Archan Chaiyut Kunthaprab Ph.D.)

หัวข้อวิทยานิพนธ์ การศึกษาไตรไนโอเบียมอาร์เซไนด์ทางผลึกวิทยาโดยรังสีเอ็กซ์
ชื่อนิสิต นางสาว กัลณกา สาธิตชาดา
อาจารย์ที่ปรึกษา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. พัฒนะ ภวะนันท์
แผนกวิชา ฟิสิกส์
ปีการศึกษา ๒๕๒๐

บทคัดย่อ

การศึกษาผลึกไตรไนโอเบียมอาร์เซไนด์ (Nb_3As) ในขั้นต้นนี้ได้จากการใช้กล้องไวซ์เซนเบิร์กแบบเอ็นราฟ – โนเนียส โดยใช้เป้าโมลิบเดนัม K_α พบว่าไตรไนโอเบียมอาร์เซไนด์อยู่ในระบบเททราโกนัล และมีหมู่สมมาตรสามมิติเป็น $P4_2/n$ ความยาวด้านทั้งสามของหนึ่งหน่วยเซลล์ ถูกปรับให้ละเอียดแม่นยำขึ้นด้วยข้อมูลของผลึกผง และตามหลักของค่ากำลังสองน้อยที่สุด ให้ความยาวเป็นดังนี้คือ a = 10.294±0.001 อังสตรอม, c = 5.1958 ± 0.0007 อังสตรอม และปริมาตร = 550.58 ลูกบาศก์อังสตรอม

ความหนาแน่นของไตรไนโอเบียมอาร์เซไนด์ที่ได้จากการทดลองที่อุณหภูมิ $23^\circ C$ มีค่า 7.92 ± 0.6 กรัม ต่อลูกบาศก์เซนติเมตร และ ค่าที่ได้จากการคำนวณสำหรับ 8 หน่วยสูตร ใน 1 หน่วยเซลล์นี้มีค่า 8.29 กรัม ต่อลูกบาศก์เซนติเมตร

ตำแหน่งอะตอมคำนวณหาจากแผนที่แพทเทอสัน พบว่าไม่มีอะตอมใดปรากฏ ณ ตำแหน่งพิเศษในเซลล์เลย

การปรับค่าละเอียดใช้หลักของค่ากำลังสองน้อยที่สุด โดยมีระนาบของการเลี้ยวเบนทั้งหมด 415 ระนาบ เพื่อให้ได้ค่าสตรัคเจอร์แฟคเตอร์ที่ได้จากการคำนวณ และค่าที่ได้จากการทดลองมีค่าใกล้เคียงกันที่สุดซึ่งได้ R = 0.124

ไตรไนโอเบียมอาร์เซไนด์มีโครงสร้างแบบไตรทิเทเนียมฟอสไฟท์ มีอะตอมของไนโอเบียม และอาร์เซนิค จัดตัวแบบรูปหลายเหลี่ยม รอบอะตอมอาร์เซนิคนั้นประกอบด้วยไนโอเบียม 10 อะตอม และคิดทางผลึกวิทยามีไนโอเบียมอยู่ 3 ประเภทในหนึ่งหน่วยเซลล์โดยจะมีอะตอมข้างเคียงเป็นจำนวน 14-15 อะตอมรอบไนโอเบียมแต่ละอะตอมเหล่านั้น

Thesis Title	An X-ray Crystallographic Study of Triniobium Arsenide (Nb_3As)
Name	Miss Gannaga Satittada
Thesis Advisor	Assistant Professor Phathana Phavanantha Ph.D.
Department	Physics
Academic Year	1977

ABSTRACT

A preliminary X-ray investigation of triniobium arsenide, Nb_3As, was determined by using an Enraf-Nonius Weissenberg camera with MoK radiation. Triniobium arsenide is in the tetragonal system and conforms to space group $P4_2/n$. The unit cell dimensions as refined from powder data by the least-squares method are a = 10.294 $\pm$ 0.001 Å , c = 5.1958$\pm$ 0.0007 Å and V = 550.58 $Å^3$

The density of Nb_3As was found to be 7.92 $\pm$ 0.6 gm-cm^{-3} at 23°C, and the calculated density is 8.29 gm-cm^{-3} for eight formular units in the unit cell.

The atomic positions were determined from the Patterson map. None of the atoms were found to occupy any special positions in the cell.

The refinement by least-squares method was employed to obtain the best agreement between calculated and observed structure factors based on 415 reflections yeilded the R-factor of 0.124.

Nb_3As has the Ti_3P-type structure consisting of the co-ordinating

polyhedra of niobium and arsenic. The arsenic atoms have ten niobium neighbours and the three crystallographically non-equivalent niobium atoms has fourteen to fifteen nearest neighbours.

ACKNOWLEDGEMENTS

I wish to express my deep gratitude to Assistant Professor Dr. Phatana Phavanantha, for his valuable advice, continuous guidance and encouragement.

I also wish to express my sincere appreciation to Assistant Professor Supanich Pramatus, Assistant Professor Dr. Srinuan Thanomkul for their kind assistance which enable this work to be carried out.

The Nb_3As crystal was supplied by Professor Stig Rundqvist, Institute of Chemistry, University of Uppsala, Uppsala, Sweden to whom I offer my grateful thanks and appreciation.

The computation was made possible by programs written by Professor Rune Liminga of the University of Uppsala and his colleaques to whom I am grateful. I thank the Computer Science Center, Chulalongkorn University and the Bangkok Data Center Company and their staff for their kind assistance.

Finally, I wish to express my thanks to all my friends and those who helped me.

Gannaga Satittada

CONTENTS

CONTENTS (continued)

CONTENTS (continued)

LIST OF TABLES

LIST OF TABLES (continued)

LIST OF TABLES (continued)

LIST OF TABLES (continued)

LIST OF FIGURES

LIST OF FIGURES (continued)

LIST OF FIGURES (continued)

LIST OF FIGURES (continued)

LIST OF FIGURES (continued)

LIST OF FIGURES (continued)