การศึกษาโครงสร้างของผลึก C_6H_5HgBr โดยการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

นาย คัน ศรีรัตนประสิทธิ์

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

ภาควิชาฟิสิกส์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พ.ศ. 2525

ISBN 974-561-210-3

007149

I15242031

AN X-RAY DIFFRACTION STUDY OF THE CRYSTAL STRUCTURE OF C_6H_5HgBr

Mr. Khin Sriratanaprasithi

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1982

หัวข้อวิทยานิพนธ์	การศึกษาโครงสร้างของผลึก C_6H_5HgBr โดยการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์
โดย	นาย คัน ศรีรัตนประสิทธิ์
ภาควิชา	ฟิสิกส์
อาจารย์ที่ปรึกษา	รองศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภวะนันท์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้นับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต

..... คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

(รองศาสตราจารย์ ดร.สุประดิษฐ์ บุนนาค)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. ศรีนวล ถนอมกุล)

..... กรรมการ

(อาจารย์ ดร. ศลี วงศ์ไชยบูรณ์)

..... กรรมการ

(นาย ณรงค์ สุขพัฒน์ธี)

..... กรรมการ

(รองศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภวะนันท์)

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

หัวข้อวิทยานิพนธ์ การศึกษาโครงสร้างของผลึก C_6H_5HgBr โดยการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์

ชื่อนิสิต นาย คัน คีรีรัตนประสิทธิ์

อาจารย์ที่ปรึกษา รองศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภวะนันท์

ภาควิชา ฟิสิกส์

ปีการศึกษา 2524

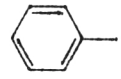
หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

บทคัดย่อ

ผลึกของฟีนายล์ เมอร์คิวริค โบรไมด์ (C_6H_5HgBr) เป็นแผ่นบาง โปร่งใส ไม่มีสี การศึกษาโครงสร้างของผลึกดังกล่าว โดยเทคนิคการเลี้ยวเบนด้วยรังสีเอ็ก จากข้อมูลที่เก็บได้ ในขณะนี้วินิจฉัยได้ว่าผลึกมีหมู่สมมาตรสามมิติ (space group) เป็น Cmm2 ในระบบผลึกออโธรอมบิค (orthorhombic) a = 7.0151± 0.0020 A° , b = 7.0046 ± 0.0009 A° c = 14.4495± 0.0030 A° ในหนึ่งหน่วยเซลล์มี 4 โมเลกุล ความหนาแน่นหาจากวิธีการลอยตัวมีค่า 3.1 กรัม/มล. ความหนาแน่นจากการคำนวณเป็น 3.3 กรัม/มล.

โดยวิธีการอะตอมหนัก และข้อมูลความเข้มจากฟิล์มที่ได้จากการบันทึก การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ จากระนาบอิสระต่าง ๆในผลึกเดี่ยว 160 ระนาบ เก็บโดยเทคนิคไวซ์เซ็นเบิร์ก และรังสีเอ็กซ์ $K_{\bar{\alpha}}$ จากเป้าทองแดง และวัดความเข้มของจุดสะท้อนเหล่านี้สัมพัทธ์กับความเข้มมาตรฐานที่เตรียมขึ้น พบว่าอะตอมหนักทั้งหมดอยู่ในตำแหน่งพิเศษที่ x = 0.0 และ0.5 โดยมี Hg ที่ตำแหน่งชุด 2a และ 2b คือ (0,0,z) และ (0, $\frac{1}{2}$,z) ตำแหน่งชุดละ 2 อะตอม

ในทำนองเดียวกันกับ Br ส่วนระนาบวงแหวนเบนซีนนั้นโดยสมมาตร และพิคในแผนภาพแพทเทอร์สัน บ่งว่ามี C 4 อะตอม จัดตัวเช่นเดียวกันกับอะตอมหนัก ส่วน ตำแหน่งอะตอม C ที่เหลือของระนาบวงแหวน พิจารณาได้จากแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนพบว่าอยู่ตำแหน่งทั่วไป 8 f ในการคำนวณปรับโครงสร้าง ใช้วิธีผลต่างกำลังสองน้อยที่สุด ซึ่งใช้เมทริกซ์เต็มชุด โดยที่อะตอม C ที่ตำแหน่ง 8f ได้จากการคำนวณทางทฤษฎี ผลการคำนวณปรับโครงสร้างจนถึงในขณะนี้ ให้ค่าดัชนีความเชื่อถือเป็น 0.1418

โครงสร้างของโมเลกุลมีลักษณะเป็น  ความยาวพันธะ

ระหว่างอะตอมอยู่ในเกณฑ์เดียวกับที่พบในสารอื่น ส่วนโครงสร้างของผลึกจะมีการวางตัวเป็นชั้น ๆ โดยมีระนาบวงแหวนเบนซีนของแต่ละโมเลกุลขนานกัน และเอียงทำมุมประมาณ 45° กับระนาบ YZ

Thesis Title	An X-Ray Diffraction Study of the Crystal Structure of C_6H_5HgBr
Name	Mr Khin Sriratanaprasithi
Thesis Adviser	Associate Professor Phathana Phavanantha, Ph.D.
Department	Physics
Academic Year	1981

ABSTRACT

C_6H_5HgBr exhibits colourless, transparent and laminar crystals , probably with a space group Cmm2, a = 7.0151± 0.0020A°, b = 7.0046 ± 0.0009 A°, c = 14.4495± 0.0030A°, D_m= 3.1 Mg m^{-3} D_x= 3.3 Mg m^{-3} and Z = 4 molecules/unit cell.

160 independent reflexions were measured visually from Weissenberg films recorded with $CuK_{\bar{\alpha}}$ radiation.

All heavy atomic positions were conveniently located from the Patterson peaks. One set of 2 Hg-atoms is at 2a, and another at 2b. Br atoms occupy similar positions. The benzene rings appear to undergo severe thermal motion, or rotation and perhaps disordering too. Fullmatrix least-squares refinement based on heavy atoms and calculated positions of 4 C atoms gives R = 0.1418

The molecular structure shows linear bonding of Hg-Br group with benzene ring, bond lengths between these atoms are close to that found in other compounds. The crystal structure of C_6H_5HgBr can be viewed as, along x-axis, stacking structure. By trial-and-error method benzene rings were found to be parallel and inclined at approximatly 45° with respect to YZ plane.

กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จได้ด้วยความกรุณาของรองศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภวะนันท์ ที่ได้ให้คำแนะนำและความรู้เกี่ยวกับวิชาการ และการทำงานต่าง ๆ ด้วยดีตลอดมา จึงขอขอบพระคุณมา ณ ที่นี้

ผลึกที่ใช้ศึกษานี้ รองศาสตราจารย์ ดร.ศักษณ์ ทรรพนันทน์ ได้มอบให้ทางห้องปฏิบัติการผลึกวิทยารังสีเอ็กซ์ไว้ศึกษา ซึ่งอาจารย์ พรรณี มุกดีพร้อม เป็นผู้เตรียมขึ้น จึงขอขอบพระคุณอาจารย์ทั้งสองท่านมา ณ ที่นี้ด้วย

และขอขอบพระคุณ รองศาสตราจารย์สุพจน์ พราหมทัศ ที่กรุณาให้คำปรึกษาและคำแนะนำเกี่ยวกับโปรแกรมคอมพิวเตอร์ ตลอดจนเจ้าหน้าที่สถาบันบริการคอมพิวเตอร์ จุฬาฯ ที่ได้ให้คำปรึกษาต่าง ๆ ในการวิจัยนี้ได้รับความอนุเคราะห์ให้ใช้สารเคมีบางอย่างจากกองฟิสิกส์ สำนักงานพลังงานปรมาณูเพื่อสันติ บางเขน จึงขอขอบพระคุณ อาจารย์ วัลลภ บุญคง หัวหน้ากองฟิสิกส์มา ณ ที่นี้ด้วย

วิทยานิพนธ์ฉบับนี้คงสำเร็จช้ากว่านี้ ถ้าไม่ได้รับความช่วยเหลือจากเพื่อน ๆ โดยเฉพาะคุณวินัส วิเชษฐพิทยาพงษ์ ที่ช่วยวาดรูปประกอบให้ จึงขอขอบคุณมา ณ ที่นี้ด้วย

อนึ่ง ในระหว่างปีการศึกษา 2521 - 2522 ผู้เขียนได้รับทุนการศึกษา ของโครงการผลิตและพัฒนาอาจารย์ จึงขอขอบพระคุณต่อโครงการนี้ด้วย

สารบาญ

หน้า

บทคัดย่อ ..... ง

กิตติกรรมประกาศ ..... ฆ

รายการตารางประกอบ ..... ฑ

รายการรูปประกอบ ..... ฒ

บทที่

1. บทนำ 1

2. แบบโครงสร้างของธาตุและสารประกอบ 5

2.1 แบบโครงสร้างของธาตุ 6

2.1.1 คิวบิคโคลส์เส้สท์แพคคิ้ง 7

2.1.2 เฮ็กแฮ็กโกนัลโคลส์เส้สท์แพคคิ้ง 9

2.1.3 บอดี้เซ็นเตอร์คิวบิค 11

2.1.4 แบบโครงสร้างเพชร 13

2.1.5 แบบโครงสร้างแกรฟไฟท์ 15

2.2 แบบโครงสร้างของสารประกอบที่มีสูตรเป็น RX 16

2.2.1 แบบโครงสร้าง NaCl 16

2.2.2 แบบโครงสร้าง CSCl 18

2.2.3 แบบโครงสร้าง ZnS 20

2.2.4 แบบโครงสร้าง ZnO 21

2.3 โครงสร้างบางสารที่ประกอบด้วยระนาบวงแหวนเบนซีน 23

3. โปรแกรมและขั้นตอนการคำนวณด้วยเครื่องคอมพิวเตอร์ 27

3.1 โปรแกรม CSPHABSW 27

3.1.1 การใช้และลักษณะโปรแกรม CSPHABSW 28

สารบาญ(ต่อ)

หน้า

3.2 โปรแกรม CSPHFOUR 29

3.2.1 การใช้และลักษณะโปรแกรม CSPHFOUR 29

3.3 โปรแกรม CSPHLSQ 30

3.3.1 การใช้และลักษณะโปรแกรม CSPHLSQ 35

3.4 โปรแกรม CSPHGUNE 37

3.4.1 การใช้และลักษณะโปรแกรม CSPHGUNE 37

3.5 โปรแกรม CSPHCENE 38

3.5.1 การใช้และลักษณะโปรแกรม CSPHCENE 38

3.6 โปรแกรม CSPHDIST 40

3.6.1 การใช้และลักษณะโปรแกรม CSPHDIST 40

4. การทดลองและการศึกษาโครงสร้างผลึก

4.1 ลักษณะทั่วไปและการเลือกผลึกเดี่ยว 42

4.2 การถ่ายภาพแบบหมุนมุมแคบ 43

4.2.1 การปรับแกนผลึก 43

4.2.2 การคำนวณค่าความยาวแกนผลึกที่ขนานกับแกนหมุน 45

4.3 การถ่ายภาพแบบไวซ์เซ็นเบิร์ก 46

4.3.1 การคำนวณค่ามิติของหน่วยเซลล์ b, c และมุม α 47

4.4 การหาค่ามิติของหน่วยเซลล์อย่างละเอียด 50

4.5 การตรวจหาหมู่สมมาตรสามมิติ 57

4.5.1 การเก็บข้อมูลความเข้มของจุดสะท้อน 66

4.6 การหาความหนาแน่นของผลึก C_6H_5HgBr 68

4.6.1 การหาความหนาแน่นของผลึก C_6H_5HgBr 68

4.6.2 การคำนวณจำนวนโมเลกุลใน 1 หน่วยเซลล์ 68

สารบาญ (ต่อ)

หน้า

4.7 การหาค่าแฟคเตอร์อุณหภูมิโดยใช้วิลสันพลอต (Wilson plot)..... 69

4.8 การพิจารณาตำแหน่งอะตอมจากแผนภาพแพทเทอร์สันและแผนภาพความหนาแน่นอิเล็คตรอน..... 73

5. สรุปและอภิปรายผลการทดลอง 89

เอกสารอ้างอิง 113

ภาคผนวก 108

ประวัติผู้เขียน 116

รายการตารางประกอบ

ตารางที่		หน้า
1.1	แสดงผลการคำนวณความยาวพันธะของสาร C_6H_5HgBr ในสถานะไอ	3
2.1	แสดงธาตุและมิติของหน่วยเซลล์ที่มีการจัดตัวแบบคิวบิคโคลสเส่ท์แพคคิ้ง	9
2.2	แสดงธาตุและมิติของหน่วยเซลล์ที่มีโครงสร้างแบบเฮ็กแซ็กโกนัลโคลสเส่ท์แพคคิ้ง .	11
2.3	แสดงธาตุและมิติของหน่วยเซลล์ที่มีโครงสร้างแบบบอดี้เซ็นเตอร์คิวบิค	12
2.4	แสดงธาตุและมิติของหน่วยเซลล์ที่มีโครงสร้างแบบเพชร	15
2.5	แสดงสารประกอบและมิติเซลล์ที่มีแบบโครงสร้าง NaCl	18
2.6	แสดงสารประกอบและมิติเซลล์ที่มีแบบโครงสร้าง CsCl	19
2.7	แสดงสารประกอบและมิติเซลล์ที่มีโครงสร้างแบบโครงสร้าง ZnS	21
2.8	แสดงสารประกอบและมิติเซลล์ที่มีโครงสร้างแบบโครงสร้าง ZnO	22
2.9	แสดงอัตราส่วนของรัศมีไอออนบวกและไอออนลบของสารประกอบที่มีแบบโครงสร้าง NaCl , CsCl และ ZnS	22
2.10	แสดงพารามิเทอร์ของหน่วยเซลล์ หมู่สมมาตรสามมิติ และระยะห่างระหว่างระนาบวงแหวนเบนซีนของสาร $C_6H_5NO_2$	24
2.11	แสดงพารามิเทอร์ของหน่วยเซลล์, หมู่สมมาตรสามมิติ และระยะห่างระหว่างระนาบวงแหวนเบนซีนของสาร $C_6H_5ICl_2$	25
2.12	แสดงพารามิเทอร์ของหน่วยเซลล์, หมู่สมมาตรสามมิติและระยะห่างระหว่างระนาบวงแหวนเบนซีนของสาร $KH(C_6H_5COO)_2$	26
4.1	แสดงผลการคำนวณมิติของหน่วยเซลล์ a จากภาพถ่ายแบบหมุน	46
4.2	แสดงมุมที่ต้องเอียงกล้อง (μ_n) และระยะที่เลื่อนตัวกั้นเลย์เออร์ (S_n) เพื่อถ่ายภาพที่เลย์เออร์ที่ n เมื่อใช้รังสีเอ็กซ์ชนิด CuK_{α} (λ=1.5418 Å) ...	47
4.3	แสดงผลการคำนวณมิติของหน่วยเซลล์ b และ c จากภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบิร์กที่เลย์เออร์ 0	49

รายการตารางประกอบ (ต่อ)

ตารางที่		หน้า
4.4	แสดงค่า h k ℓ, d_o, d_c $\sin^2\theta_o$, $\sin^2\theta_c$ และ $S-S_o$ จากภาพถ่ายผลึกผงที่ใช้กล้องกีเนียร์-เฮกก์รุ่น XDC 700	52
4.5	แสดงเงื่อนไขการเกิดจุดสะท้อนที่เลย์เออร์ต่าง ๆ	59
4.6	แสดงผลการคำนวณค่า N(Z) ที่ได้จากการทดลอง	61
4.7	แสดงข้อมูลที่ใช้ในการทดสอบ N(Z)	62
4.8	แสดงค่า N(Z) จากทฤษฎี	66
4.9	แสดงค่า $\ell n \frac{\bar{I}_{rel}}{\Sigma fo_j^2}$ ที่ค่า sin θ ต่าง ๆ	73
4.10	แสดงค่าดัชนีความเชื่อถือเมื่อสลับตำแหน่งอะตอมหนัก	78
4.11	แสดงตำแหน่งของ C_{11}, C_{12}, C_{22}, C_{23} ที่ได้จากการคำนวณที่ของค่าต่าง ๆ และค่าดัชนีความเชื่อถือ	81
5.1	แสดงข้อมูลผลึกเดี่ยวทั่วไปของ C_6H_5HgBr	89
5.2	แสดงตำแหน่งอะตอมและความเบี่ยงเบนมาตรฐานหลังจากปรับตำแหน่งอะตอม .	91
5.3	แสดงตำแหน่ง C_{12}, C_{13}, C_{22} และ C_{23} ที่ได้จากการคำนวณ	92
5.4	แสดงตำแหน่งอะตอม H ที่ได้จากการคำนวณ	93
5.5	แสดงการเปรียบเทียบความยาวพันธะระหว่างอะตอมในสารอื่นและสารเดียวกันในสถานะอื่นในระดับโครงสร้างโมเลกุล	95
5.6	แสดงความยาวพันธะและความเบี่ยงเบนมาตรฐานระหว่างอะตอมต่าง ๆ	101
5.7	แสดงผลการคำนวณมุมระหว่างพันธะของอะตอมต่าง ๆ ในหน่วยอสัมมาตร ...	103

รายการรูปประกอบ

หน้า

รูปที่ 1.1 (ก) กราฟรูปที่ 1 คำนวณจากทฤษฎีโดยอาศัยความสัมพันธ์ตามสมการที่ 1.1 1

กราฟรูปที่ 2 คำนวณจากทฤษฎีโดยอาศัยความสัมพันธ์ตามสมการที่ 1.2 1

กราฟรูปที่ 3 ได้จากการเฉลี่ยผลการทดลอง 1

1.1 (ข) แสดงการกระจายตามแนวรัศมีของการทดลอง (radial distribution) ซึ่งได้จากฟูเรียร์ซายน์ทรานส์ฟอร์ม (Fourier sine transform) ของกราฟรูปที่ 3 1

รูปที่ 1.2 อินฟราเรดสเปคตราของสาร C_6H_5HgBr 4

รูปที่ 2.1 แสดง แผนภาพของโครงสร้างผลึก C_6H_5HgBr ที่พิจารณาให้กลุ่ม C_6H_5 เป็น R และ Hg-Br เป็น X บนระนาบ YZ ที่ X=0 5

รูปที่ 2.2 แสดงช่องว่างในเลย์เออร์ที่สองที่อะตอมจะไปแทนที่ได้ 6

รูปที่ 2.3 (ก) แสดงภาพฉายลงบนระนาบของหน่วยเซลล์ที่มีโครงสร้างแบบ คิวบิคโคลสเส่ท์-แพคคิ้ง 8

(ข) แสดงการเรียงตัวของอะตอมเป็นเลย์เออร์แบบ 12312312... ของคิวบิคโคลสเส่ท์แพคคิ้ง พิจารณาตามแกน 3 ทบ 8

(ค) แสดงระนาบของหน่วยเซลล์ โครงสร้างแบบคิวบิคโคลสเส่ท์แพคคิ้ง 8

รูปที่ 2.4 (ก) แสดงหน่วยเซลล์ของเฮ็กแซ็กโกนัลโคลสเส่ท์แพคคิ้ง 9

(ข) แสดงมิติของหน่วยเซลล์ a,b ซึ่งเท่ากัน 9

รูปที่ 2.5 แสดงการเรียงตัวของอะตอมในโครงสร้างแบบบอดี้เซ็นเตอร์ 11

รูปที่ 2.6 (ก) แสดงหน่วยเซลล์แบบโครงสร้างเพชร 14

(ข) แสดงความสัมพันธ์ระหว่างค่ารัศมีอะตอม (r) กับค่ามิติของหน่วยเซลล์ 14

รูปที่ 2.7 แสดงหน่วยเซลล์ของแบบโครงสร้างแกรฟไฟท์ 15

รูปที่ 2.8 แสดงการเรียงตัวของอะตอมแบบโครงสร้าง NaCl 16

รูปที่ 2.9 แสดงการเรียงตัวของอะตอมในแบบโครงสร้าง CsCl 18

รูปที่ 2.10(ก) แสดงหน่วยเซลล์ของแบบโครงสร้าง ZnS 20

รายการรูปประกอบ (ต่อ)

			หน้า
	(ข)	แสดงภาพฉายของหน่วยเซลล์บนระนาบ z = 0	20
รูปที่ 2.11	(ก)	แสดงหน่วยเซลล์ของแบบโครงสร้าง ZnO	21
	(ข)	แสดงการจัดตัวของอะตอม	21
รูปที่ 2.12	(ก)	แสดงภาพฉายตามแกน a ของโครงสร้างผลึกของสาร $C_6H_5NO_2$	23
	(ข)	แสดงภาพฉายตามแกน b ของโครงสร้างผลึกของสาร $C_6H_5IC\ell_2$	25
	(ค)	แสดงภาพฉายตามแกน b ของโครงสร้างผลึกของสาร $KH(C_6H_5COO)_2$.	26
รูปที่ 3.1		แผนผังแสดงขั้นตอนการคำนวณด้วยโปรแกรมคอมพิวเตอร์	41
รูปที่ 4.1		แสดงการปรับแกนผลึกโดยให้อาร์คทำมุม 45° กับรังสีเอ็กซ์	43
รูปที่ 4.2	(ก)	แสดงความสัมพันธ์ระหว่างระยะห่างในสเปสส่วนกลับ (reciprocal space) กับระยะบนฟิล์มของเลย์เออร์ที่ 0 กับเลย์เออร์ที่ n ในภาพถ่ายแบบหมุน	45
รูปที่ 4.3	(ก)	แสดงความสัมพันธ์ของจุดสะท้อน 2 จุด ที่มีตำแหน่งสมมูลย์กัน (equivalent positions) ของเลย์เออร์ 0 ในภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบิร์ก	48
	(ข)	แสดงการเกิดจุดสะท้อนในภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบิร์ก	48
รูปที่ 4.4		แสดงภาพถ่ายผลึกผง C_6H_5HgBr ถ่ายด้วยกล้องกีเนียร์-เฮกก์ ใช้รังสีเอ็กซ์ชนิด $CuK_{\alpha 1}$ (λ=1.54051 Å)	50
รูปที่ 4.5	(ก)	แสดงภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบิร์กที่เลย์เออร์ 0 ของผลึก C_6H_5HgBr ให้ a เป็นแกนหมุน ใช้เวลาถ่ายภาพ 81 ชั่วโมง จากรังสีเอ็กซ์ชนิด $CuK_{\bar{\alpha}}$ (λ=1.5418 Å)	53
	(ข)	แสดงภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบิร์กที่เลย์เออร์ 1 ของผลึก C_6H_5HgBr ให้ a เป็นแกนหมุน ใช้เวลาถ่ายภาพ 81 ชั่งโมง จากรังสีเอ็กซ์ชนิด $CuK_{\bar{\alpha}}$ (λ=1.5418 Å)	54

รายการรูปประกอบ (ต่อ)

หน้า

รูปที่ 4.6 (ก) แสดงพิกัดของจุดจากภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบิร์กเลย์เออร์ที่ 0 แสดงแนวโดยใช้ไวซ์เซ็นเบิร์กฮาร์ท ◉ เป็นจุดสะท้อนที่มีความเข้มมากกว่าความเข้มเฉลี่ย (I_{max} = 4998 I_{min} = 36 $I_{av.}$ = 639) 55

(ข) แสดงพิกัดของจุดจากภาพถ่ายไวซ์เซ็นเบิร์กเลย์เออร์ที่ 1 แสดงแนวโดยใช้ไวซ์เซ็นเบิร์กฮาร์ท ◉ เป็นจุดสะท้อนที่มีความเข้มมากกว่าความเฉลี่ย (I_{max} = 3069 I_{min} = 18 $I_{av.}$ = 341) 56

รูปที่ 4.7 แสดงจุดแลททิสส่วนกลับของ C_6H_5HgBr ในแกนพิกัดฉาก

(ก) เลย์เออร์ที่ 0 58

(ข) เลย์เออร์ที่ 1 58

รูปที่ 4.8 แสดงผลการทดลอบ N(Z) จากทฤษฎีและจากผลึก C_6H_5HgBr 67

รูปที่ 4.9 แสดงค่าแฟคเตอร์การกระเจิงของอะตอม Hg, Br, C และ H กับค่า $(\sin\theta)/\lambda$ 70

รูปที่ 4.10 แสดงผลของแฟคเตอร์อุณหภูมิต่อแฟคเตอร์การกระเจิงของอะตอม 71

รูปที่ 4.11 แสดงวิลสันพลอต (Wilson plot) เพื่อหาแฟคเตอร์อุณหภูมิและสเกลสัมบูรณ์ 74

รูปที่ 4.12 (ก) แสดงอะตอมในสเปสของผลึก 76

(ข) แสดง เวคเตอร์ระหว่างอะตอมต่าง ๆ 76

(ค) แสดง พีคที่ปรากฏในสเปสแพทเทอร์สัน 76

รูปที่ 4.13 แผนภาพแพทเทอร์สันที่ระนาบ u = 0.0, v = 0.0-0.5, w = 0.0-0.5 77

รูปที่ 4.14 แผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนที่ระนาบ x = 0.0 y = 0.0-0.5 ที่ใช้Hg 2 อะตอม และ Br 2 อะตอม เป็นแบบจำลองเฟส 79

รายการรูปประกอบ (ต่อ)

หน้า

รูปที่ 4.15 แสดงผลการใช้อนุกรมฟูเรียร์ (Fourier series) แทนความหนาแน่นอิเลคตรอน ตามรูปอนุกรมฟูเรียร์มี 13 เทอม (เส้นทึบได้จากอนุกรมฟูเรียร์ เส้นไข่ปลาแสดงความหนาแน่นอิเลคตรอน) 84

รูปที่ 4.16 แสดงแผนภาพความหนาแน่นอิเลคตรอนที่ใช้ตำแหน่ง Hg 2 อะตอม Br 2 อะตอม และ C 4 อะตอม (พีคที่ 5,6,7 และ 8) เป็นแบบจำลองเฟส 85

(ก) ระนาบที่ x = 0, y = 0.0-0.5, z = 0.0-0.5 85

(ข) ระนาบที่ x = .12 y = 0.0-0.5, z = 0.0 - 0.5 86

(ค) ระนาบที่ x = .16 y = 0.0-0.5, z = 0.0-0.5 87

รูปที่ 4.17 แสดงตำแหน่ง C_{12}, C_{13}, C_{22} และ C_{23} ที่เป็นผลจากการคำนวณที่ระนาบ x = 0, y = 0.0-0.5 และ z = 0.0-0.5 88

รูปที่ 5.1 (ก) แสดงอะตอมในหนึ่งหน่วยอสัมมาตร 90

(ข) แสดงความสัมพันธ์ระนาบวงแหวนเบนซีนกับระนาบกระจก 90

รูปที่ 5.2 แสดงโครงสร้างของผลึก C_6H_5HgBr ในหนึ่งหน่วยเซลล์ของผลึก ... 99

รูปที่ 5.3 แสดงความสัมพันธ์ของระนาบวงแหวนเบนซีน และองค์สมมาตรแกน 2 ทบ (↑) และระนาบกระจก (⌐) ในหมู่สมมาตรสามมิติ C_{mm2} 100