



สรุปและอภิปรายผล

ผลการวิจัยเพื่อหาโครงสร้างผลึกของสารประกอบ $Ta_5Ni_4P_4$ โดยอาศัยวิธีการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ ปรากฏว่า ข้อมูลผลึกเบื้องต้นที่จะนำไปใช้ในการคำนวณโครงสร้างหรือคำนวณตำแหน่งอะตอมต่างๆภายในหนึ่งหน่วยเซลล์ของผลึกนั้นได้รวบรวมไว้ทั้งหมดในตาราง 6-1

ตาราง 6-1 แสดงข้อมูลผลึกทั่วไปของ $Ta_5Ni_4P_4$

ระบบผลึก	เททราโกเนล
หมู่สมมาตรสามมิติ	I4/m
มิติเซลล์	a = 9.870(8) Å c = 3.508(3) Å
μ สัมประสิทธิ์การดูดกลืนตามเส้น สำหรับรังสีเอกซ์ของ Mo ชนิด $K\alpha$	885.1 (ซ.ม.) ⁻¹
ρ_m ความหนาแน่น หาโดยวิธีการแทนที่น้ำที่อุณหภูมิ 29 °C	11.3 กรัม/ลบ.ซม.
Z จำนวนหน่วยสูตรในหนึ่งหน่วยเซลล์	2 หน่วยสูตร/หน่วยเซลล์

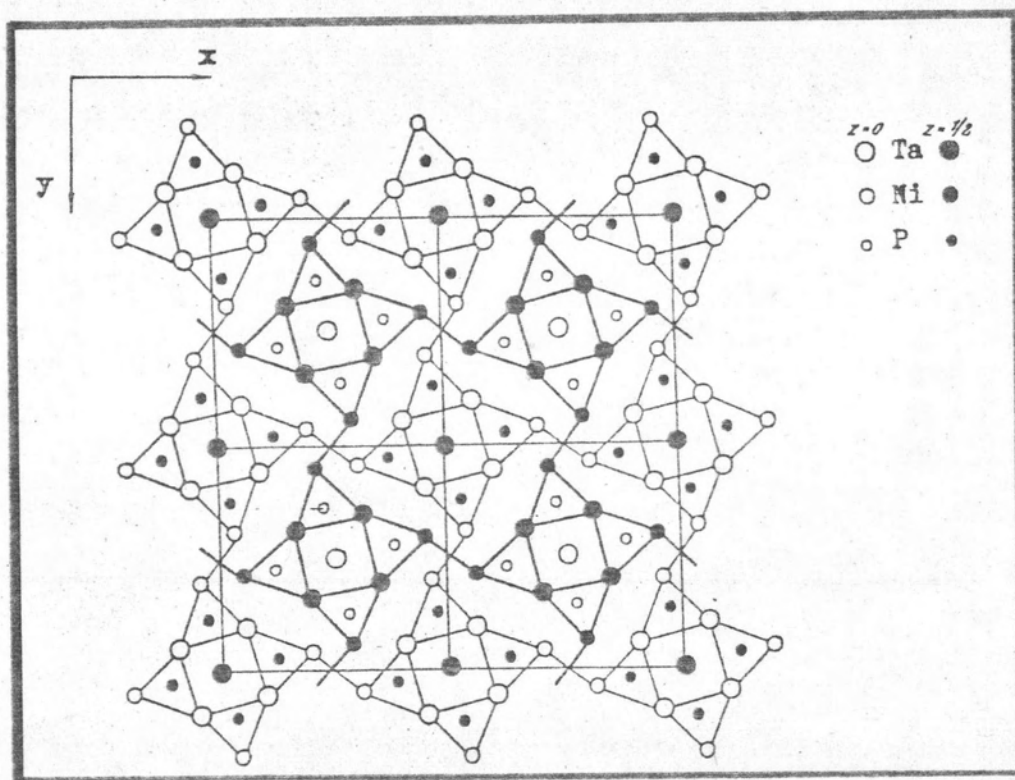
หลังจากรวบรวมข้อมูลความเข้มของรังสีเอกซ์ที่เลี้ยวเบนออกมาจากผลึกด้วยวิธีฟิล์มซ้อนแล้วนำไปคำนวณโครงสร้างผลึกร่วมกับข้อมูลผลึกทั่วไปตามตาราง 6-1 ด้วยวิธีอะตอมหนักปรับโครงสร้างผลึกในชั้นคั่นด้วยวิธีของนูรและปรับอย่างละเอียดด้วยวิธีกำลังสองน้อยที่สุดปรากฏว่า

ได้ตำแหน่งอะตอมต่างๆในหนึ่งหน่วยเซลล์ที่ตีจุดตามตาราง 6-2

ตาราง 6-2 แสดงโคออร์ดิเนตแฟรคชันนัลของอะตอม Ta(I), Ta(II), Ni และ P
ภายในหนึ่งหน่วยเซลล์ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$

ตำแหน่ง ความสมมาตรสามมิติ	อะตอม	x	y	z	
8h	Ta(I)	Ta ₁	0.195(3)	0.129(8)	0
		Ta ₂	0.804(7)	0.870(2)	0
		Ta ₃	0.870(2)	0.195(3)	0
		Ta ₄	0.129(8)	0.804(7)	0
		Ta ₅	0.695(3)	0.629(8)	0.5
		Ta ₆	0.304(7)	0.370(2)	0.5
		Ta ₇	0.370(2)	0.695(3)	0.5
		Ta ₈	0.629(8)	0.304(7)	0.5
2b	Ta(II)	Ta ₁	0	0	0.5
		Ta ₂	0.5	0.5	0
8h	Ni	Ni ₁	0.086(7)	0.391(4)	0
		Ni ₂	0.913(3)	0.608(6)	0
		Ni ₃	0.608(6)	0.086(7)	0
		Ni ₄	0.391(4)	0.913(3)	0
		Ni ₅	0.586(7)	0.891(4)	0.5
		Ni ₆	0.413(3)	0.108(6)	0.5
		Ni ₇	0.108(6)	0.586(7)	0.5
		Ni ₈	0.891(4)	0.413(3)	0.5
8h	P	P ₁	0.44(40)	0.24(15)	0
		P ₂	0.55(60)	0.75(85)	0
		P ₃	0.75(85)	0.44(40)	0
		P ₄	0.24(15)	0.55(60)	0
		P ₅	0.94(40)	0.74(15)	0.5
		P ₆	0.05(60)	0.25(85)	0.5
		P ₇	0.25(85)	0.94(40)	0.5
		P ₈	0.74(15)	0.05(60)	0.5

จากตำแหน่งอะตอมต่างๆตามตาราง 6-2 นำมาพิจารณาโครงสร้างผลึก $Ta_5Ni_4P_4$ โดยเมื่อมองลงไปตามแกน z จะปรากฏเป็นไปตามรูป 6-1 พิจารณาโดยทั่วไปแล้วจะเห็นว่า การจัดตัวของ Ta(I) และ Ni อย่างละ 4 อะตอมทำให้เกิดเป็นรูปควาสี่แฉกที่ประกอบด้วย สามเหลี่ยมด้านไม่เท่า 4 รูปและสี่เหลี่ยมจัตุรัส 1 รูป โดยที่ตรงปลายของแต่ละแฉกของ รูปควาจะเป็นที่อยู่ของอะตอม Ni และตรงแต่ละมุมของสี่เหลี่ยมจัตุรัสจะเป็นที่อยู่ของ Ta(I)



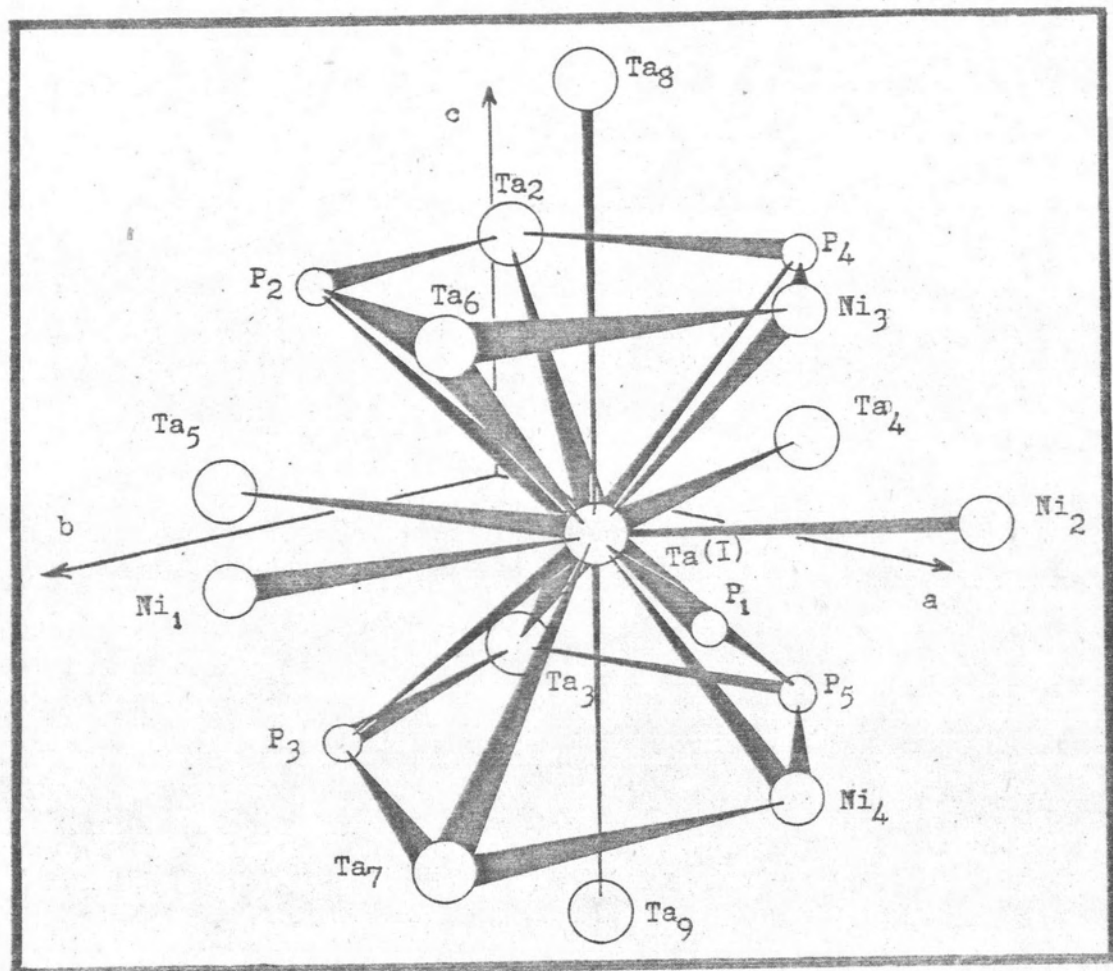
รูป 6-1 แสดงตำแหน่งอะตอมของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$ ภายใน 4 หน่วยเซลล์เมื่อนำมองลงไปตามแกน z

ตำแหน่งที่อยู่ประมาณตรงกลางของสามเหลี่ยมแต่ละรูปที่ประกอบกันเป็นรูปควาสี่แฉกโดยที่ตำแหน่งนั้นอยู่เหนือหรือใต้ระนาบรูปควาขึ้นมาหรือลงไปเป็นระยะครึ่งหนึ่งของเพอร์แรมิเทอร์

ตามแกน c จะเป็นที่อยู่ของอะตอม P ตำแหน่งที่อยู่ตรงกลางของสี่เหลี่ยมจัตุรัสพอดีและ
 อยู่เหนือหรือใต้ระนาบรูปดาวขึ้นมาหรือลงไปเป็นระยะ $c/2$ จะเป็นที่อยู่ของอะตอม Ta(II)
 รูปดาวสี่แฉกดังกล่าวนี้เมื่ออยู่ในระนาบ xy ที่ $z = 1/2$ จะอยู่ตรงกลางหน่วยเซลล์พอดี
 และรูปดาวสี่แฉกจะเอียงในลักษณะหมุนทวนเข็มนาฬิกาเล็กน้อยเมื่อมองตามแกน z แต่เมื่อ
 อยู่ในระนาบ xy ที่ $z = 0$ จะอยู่ตรงกลางระหว่าง 4 หน่วยเซลล์พอดีและจะเอียงในลักษณะ
 เกี่ยวกับคอนตัน

พิจารณาอะตอมที่อยู่ข้างเคียงของอะตอม Ta(I), Ta(II), Ni และ P

อะตอม Ta(I) พิจารณาอะตอมข้างเคียงของอะตอม Ta(I) ที่อยู่ตรงตำแหน่ง
 (0.1953, 0.1298, 0) ตามรูป 6-1 และ 6-2 จะเห็นว่ามีอะตอม 17 ตัวล้อมรอบอยู่
 ชุดแรกประกอบด้วยอะตอม 5 ตัวคือ Ta₄, Ta₅, Ni₁, Ni₂ และ P₁ อยู่ในระนาบเดียวกับ



รูป 6-2 แสดงอะตอมข้างเคียงของอะตอม Ta(I) ของผลึก Ta₅Ni₄P₄

Ta(I) คือระนาบ xy ที่ $z = 0$ จุดที่สองประกอบด้วยอะตอม 5 ตัวคือ Ta_2, Ta_6, Ni_3, P_2 และ P_4 จะเรียงกันเป็นรูปห้าเหลี่ยมจัตุรัสอยู่ในระนาบ xy ที่ $z = 1/2$ จุดที่สามประกอบด้วยอะตอม 5 ตัวคือ Ta_3, Ta_7, Ni_4, P_3 และ P_5 เรียงกันเป็นรูปห้าเหลี่ยมเหมือนจุดที่สอง แต่จุดนี้จัตุรัสอยู่ในระนาบ xy ที่ $z = -1/2$ โดยจุดที่สองและสามมีความสัมพันธ์กันผ่านทางระนาบกระจกซึ่งอยู่ที่ $z = 0$ ทำให้เกิดเป็นรูปปริซึมห้าเหลี่ยมคี่ (pentagonal right prism) โดยแกนของปริซึมขนานกับแกน z ส่วนอะตอมอีก 2 ตัวคือ Ta_8 และ Ta_9 อยู่ในระนาบ xy ที่ $z = 1$ และ -1 ตามลำดับโดยที่บอนด์ระหว่าง Ta(I) กับ Ta_8 และ Ta(I) กับ Ta_9 เกือบจะถือเป็นเส้นตรงเดียวกัน ระยะระหว่าง Ta(I) ไปยังอะตอมข้างเคียงทั้งหมดได้แสดงในตาราง 6-3 มุมที่เกิดจากอะตอมข้างเคียงตัวหนึ่งแต่ละตัวเท่ากับ Ta(I) และอะตอมข้างเคียงตัวอื่นๆทั้งหมดได้แสดงในตาราง 6-4

ตาราง 6-3 ความยาวบอนด์ระหว่างอะตอม Ta(I) กับอะตอมข้างเคียงทั้งหมดเมื่อกำหนดให้ความยาวบอนด์ที่มากที่สุดเป็น 3.508 Å

ระยะระหว่างอะตอม	ความยาวบอนด์ Å	ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน Å
Ta(I) - P_2, P_3	2.568	0.008
- P_4, P_5	2.614	0.008
- P_1	2.690	0.010
- Ni_3, Ni_4	2.782	0.005
- Ni_1	2.795	0.006
- Ni_2	2.885	0.006
- Ta_2, Ta_3	2.905	0.001
- Ta_6, Ta_7	3.140	0.003
- Ta_4, Ta_5	3.275	0.002
- Ta_8, Ta_9	3.508	0.000

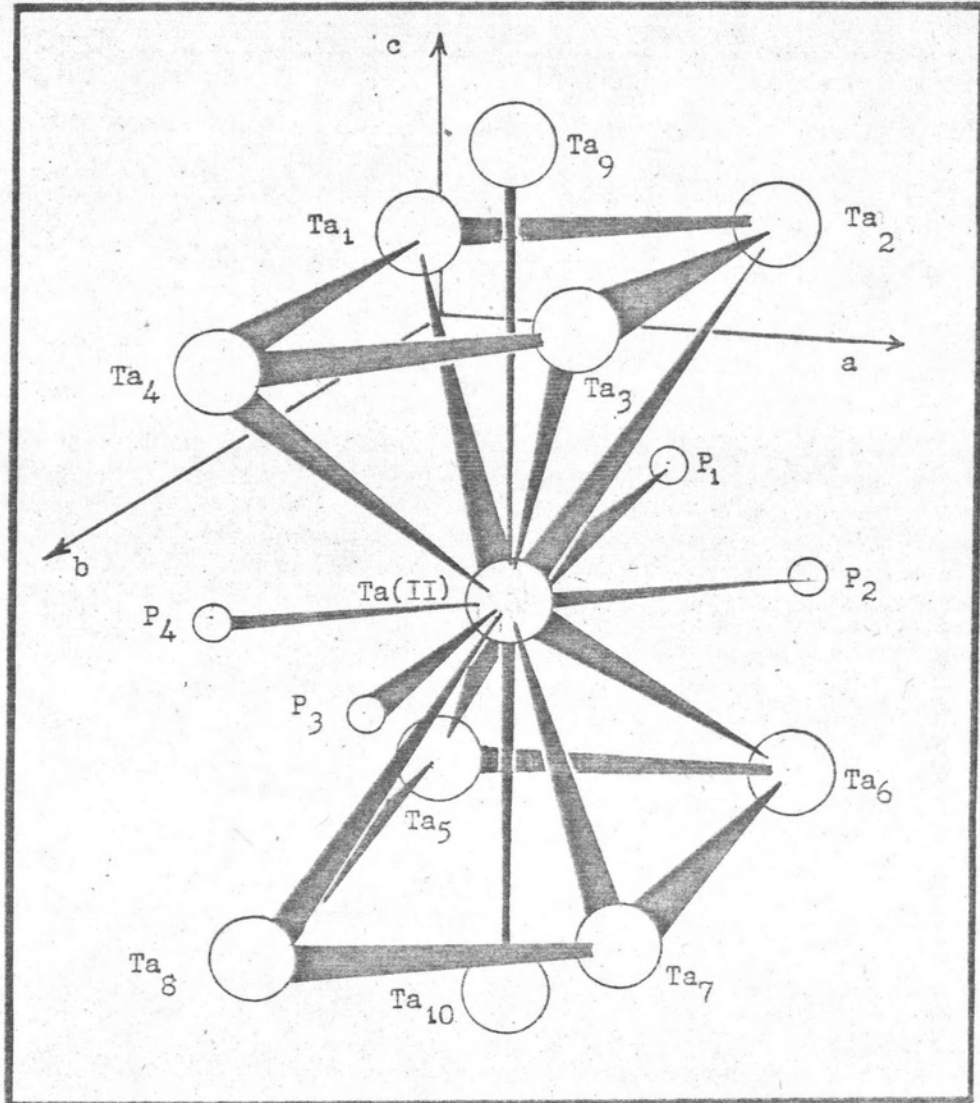
ตาราง 6-4 แสดงค่ามุมระหว่างอะตอมข้างเคียงที่ล้อมรอบอะตอม Ta(I) ตามรูป 6-2

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
Ta ₈ - Ta(I) - Ta ₉	179.92	0.00	Ta ₅ - Ta(I) - Ta ₄	90.00	0.00
- Ta ₄	90.00	0.00	- Ta ₆	100.82	0.08
- Ta ₅	90.00	0.00	- Ta ₇	100.82	0.08
- Ta ₆	56.04	0.03	- Ta ₂	55.69	0.01
- Ta ₇	123.96	0.03	- Ta ₃	55.69	0.01
- Ta ₂	52.86	0.02	- Ni ₁	56.08	0.13
- Ta ₃	127.14	0.02	- Ni ₂	143.51	0.13
- Ni ₁	90.00	0.00	- Ni ₃	140.56	0.08
- Ni ₂	90.00	0.00	- Ni ₄	140.56	0.08
- Ni ₃	50.92	0.08	- P ₁	144.54	0.23
- Ni ₄	129.08	0.08	- P ₂	51.42	0.19
- P ₁	90.00	0.00	- P ₃	51.42	0.19
- P ₂	46.92	0.16	- P ₄	111.94	0.22
- P ₃	133.08	0.16	- P ₅	111.94	0.22
- P ₄	47.84	0.15	Ta ₄ - Ta(I) - Ta ₆	143.89	0.05
- P ₅	132.16	0.15	- Ta ₇	143.89	0.05
Ta ₉ - Ta(I) - Ta ₄	90.00	0.00	- Ta ₂	55.69	0.01
- Ta ₅	90.00	0.00	- Ta ₃	55.69	0.01
- Ta ₆	123.96	0.03	- Ni ₁	146.08	0.13
- Ta ₇	56.04	0.03	- Ni ₂	53.51	0.13
- Ta ₂	127.14	0.02	- Ni ₃	94.49	0.13
- Ta ₃	52.86	0.02	- Ni ₄	94.49	0.13
- Ni ₁	90.00	0.00	- P ₁	125.46	0.23
- Ni ₂	90.00	0.00	- P ₂	112.35	0.22
- Ni ₃	129.08	0.08	- P ₃	112.35	0.22
- Ni ₄	50.92	0.08	- P ₄	50.19	0.19
- P ₁	90.00	0.00	- P ₅	50.19	0.19
- P ₂	133.08	0.16	Ta ₆ - Ta(I) - Ta ₅	67.92	0.06
- P ₃	46.92	0.16	- Ta ₂	102.94	0.03
- P ₄	132.16	0.15	- Ta ₃	153.96	0.08
- P ₅	47.84	0.15	- Ni ₁	55.55	0.10

ชนิด	องศา	δ	ชนิด	องศา	δ
- Ni ₂	109.25	0.11	- P ₁	141.82	0.05
- Ni ₃	55.92	0.12	- P ₂	105.97	0.21
- Ni ₄	98.28	0.12	- P ₃	56.66	0.22
- P ₁	51.57	0.16	- P ₄	104.77	0.21
- P ₂	55.13	0.22	- P ₅	56.25	0.21
- P ₃	101.03	0.21	Ni ₁ - Ta(I) - Ni ₂	160.41	0.15
- P ₄	94.14	0.18	- Ni ₃	111.46	0.13
- P ₅	145.29	0.24	- Ni ₄	111.46	0.13
Ta ₇ - Ta(I) - Ta ₂	153.96	0.08	- P ₁	88.46	0.25
- Ta ₃	102.94	0.03	- P ₂	48.43	0.19
- Ni ₁	55.55	0.10	- P ₃	48.43	0.19
- Ni ₂	109.25	0.11	- P ₄	137.71	0.15
- Ni ₃	98.28	0.12	- P ₅	137.71	0.15
- Ni ₄	55.92	0.12	Ni ₂ - Ta(I) - Ni ₃	54.95	0.18
- P ₁	51.57	0.16	- Ni ₄	54.95	0.18
- P ₂	101.03	0.21	- P ₁	71.95	0.25
- P ₃	55.13	0.22	- P ₂	136.68	0.16
- P ₄	145.29	0.24	- P ₃	136.68	0.16
- P ₅	94.14	0.18	- P ₄	47.07	0.18
Ta ₂ - Ta(I) - Ta ₃	74.29	0.04	- P ₅	47.07	0.18
- Ni ₁	98.82	0.11	Ni ₃ - Ta(I) - Ni ₄	78.17	0.16
- Ni ₂	96.77	0.10	- P ₁	47.59	0.15
- Ni ₃	95.67	0.09	- P ₂	91.22	0.20
- Ni ₄	149.33	0.13	- P ₃	151.94	0.26
- P ₁	141.82	0.05	- P ₄	48.58	0.24
- P ₂	56.66	0.22	- P ₅	100.56	0.22
- P ₃	105.97	0.21	Ni ₄ - Ta(I) - P ₁	47.59	0.15
- P ₄	56.25	0.21	- P ₂	151.94	0.26
- P ₅	104.77	0.21	- P ₃	91.22	0.20
Ta ₃ - Ta(I) - Ni ₁	98.82	0.11	- P ₄	100.65	0.22
- Ni ₂	96.77	0.10	- P ₅	48.58	0.24
- Ni ₃	149.33	0.13	P ₁ - Ta(I) - P ₂	106.70	0.25
- Ni ₄	95.67	0.09	- P ₃	106.70	0.25

มุม	องศา	ϕ
- P ₄	93.85	0.38
- P ₅	93.85	0.38
P ₂ - Ta(I) - P ₃	86.16	0.31
- P ₄	91.03	0.28
- P ₅	159.21	0.36
P ₃ - Ta(I) - P ₄	159.21	0.36
- P ₅	91.03	0.28
P ₄ - Ta(I) - P ₅	84.32	0.30

อะตอม Ta(II) พิจารณาอะตอมข้างเคียงของอะตอม Ta(II) ที่มีโคออร์ดิเนต แพรคชันนัลเป็น (0.5, 0.5, 0) ตามรูป 6-1 และ 6-3 จะเห็นว่า มีอะตอม 14 ตัวล้อมรอบ ในลักษณะที่ต่างไปจากอะตอม Ta(I) โดยชุดแรกประกอบด้วยอะตอม 4 ตัวคือ P₁, P₂, P₃ และ P₄ จัดตัวอยู่ในระนาบเดียวกับอะตอม Ta(II) ซึ่งอยู่ในระนาบ xy ที่ z = 0 ชุดที่สองประกอบด้วยอะตอม 8 ตัวคือ Ta₁, Ta₂, Ta₃, Ta₄, Ta₅, Ta₆, Ta₇ และ Ta₈ อะตอม 4 ตัวแรกเรียงกันเป็นรูปสี่เหลี่ยมจัตุรัสจัดตัวอยู่ในระนาบ xy ที่ z = 1/2 ถ้ามองลงไปตาม แกน z บนระนาบที่ z = 0 Ta(II) จะอยู่ตรงกลางสี่เหลี่ยมจัตุรัสพอดี อะตอม 4 ตัวหลังจะ ประพฤติเหมือนกับ 4 ตัวแรกเพียงแต่ว่า 4 ตัวหลังจัดตัวในระนาบ xy ที่ z = -1/2 อะตอม ชุดที่สองทั้ง 8 ตัวนี้ทั้งหมดเรียงตัวเป็นรูปปริซึมสี่เหลี่ยมคี่ (quadrangular right prism) แกนของปริซึมขนานกับแกน z ชุดที่สามประกอบด้วย Ta₉ และ Ta₁₀ อยู่เหนือและใต้ Ta(II) ในระนาบ xy ที่ z = 1 และ -1 ตามลำดับ บอนคัระหว่าง Ta(II) กับ Ta₉ และ Ta(II) กับ Ta₁₀ เกือบจะถือเป็นเส้นตรงเดียวกัน ความยาวบอนคัระหว่าง Ta(II) กับอะตอมข้างเคียง ทั้งหมด 14 ตัวนั้นได้แสดงในตาราง 6-5 และมุมระหว่างบอนคัที่เกิดจากอะตอมข้างเคียงตัวหนึ่ง แต่ละตัวกับ Ta(II) และ Ta(II) กับอะตอมข้างเคียงที่เหลือได้แสดงในตาราง 6-6



รูป 6-3 แสดงอะตอมข้างเคียงของอะตอม Ta(II) ของผลึก Ta_5Ni_4P

ตาราง 6-5 แสดงความยาวบอนด์ระหว่างอะตอม Ta(II) กับอะตอมข้างเคียงทั้งหมดเมื่อ
กำหนดให้ความยาวบอนด์ที่มากที่สุดเป็น 3.508 Å

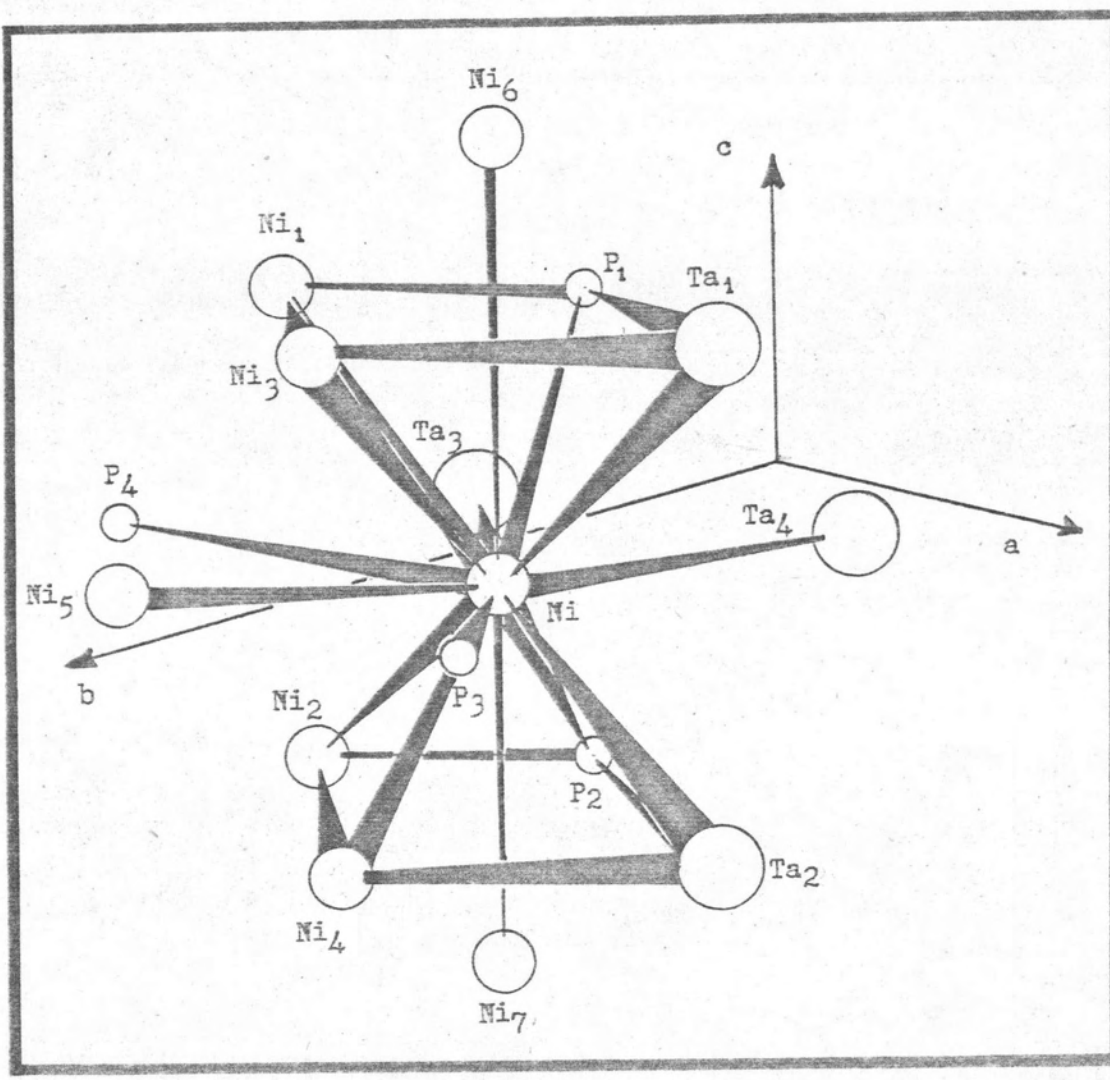
ระยะระหว่างอะตอม	ความยาวบอนด์ (Å)	ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (Å)
Ta(II) - P_1, P_2, P_3, P_4	2.614	0.010
- $Ta_1, Ta_2, Ta_3, Ta_4, Ta_5, Ta_6,$ Ta_7, Ta_8	2.905	0.001
- Ta_9, Ta_{10}	3.508	0.000

ตาราง 6-6 แสดงค่ามุมระหว่างอะตอมข้างเคียงที่ล้อมรอบอะตอม Ta(II) ตามรูป 6-3

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
Ta ₁ - Ta(II) - Ta ₅	74.29	0.04	- Ta ₁₀	127.14	0.02
- Ta ₃	105.71	0.04	- P ₃	55.16	0.15
- Ta ₇	180.00	0.00	- P ₁	124.84	0.15
- Ta ₂	68.62	0.02	- P ₄	123.77	0.16
- Ta ₆	111.38	0.02	- P ₂	56.23	0.16
- Ta ₄	68.62	0.02	Ta ₇ - Ta(II) - Ta ₂	111.38	0.02
- Ta ₈	111.38	0.02	- Ta ₆	68.62	0.02
- Ta ₉	52.86	0.02	- Ta ₄	111.38	0.02
- Ta ₁₀	127.14	0.02	- Ta ₈	68.62	0.02
- P ₃	124.84	0.15	- Ta ₉	127.14	0.02
- P ₁	55.16	0.15	- Ta ₁₀	52.86	0.02
- P ₄	56.23	0.16	- P ₃	55.16	0.15
- P ₂	123.77	0.16	- P ₁	124.84	0.15
Ta ₅ - Ta(II) - Ta ₃	179.92	0.00	- P ₄	123.77	0.16
- Ta ₇	105.72	0.04	- P ₂	56.23	0.16
- Ta ₂	111.38	0.02	Ta ₂ - Ta(II) - Ta ₆	74.29	0.04
- Ta ₆	68.62	0.02	- Ta ₄	105.71	0.04
- Ta ₄	111.38	0.02	- Ta ₈	179.92	0.00
- Ta ₈	68.62	0.02	- Ta ₉	52.86	0.02
- Ta ₉	127.14	0.02	- Ta ₁₀	127.14	0.02
- Ta ₁₀	52.86	0.02	- P ₃	123.77	0.16
- P ₃	124.84	0.15	- P ₁	56.23	0.16
- P ₁	55.16	0.15	- P ₄	124.84	0.15
- P ₄	56.23	0.16	- P ₂	55.16	0.15
- P ₂	123.77	0.16	Ta ₆ - Ta(II) - Ta ₄	179.92	0.00
Ta ₃ - Ta(II) - Ta ₇	74.29	0.04	- Ta ₈	105.71	0.04
- Ta ₂	68.62	0.02	- Ta ₉	127.14	0.02
- Ta ₆	111.38	0.02	- Ta ₁₀	52.84	0.02
- Ta ₄	68.62	0.02	- P ₃	123.77	0.16
- Ta ₈	111.38	0.02	- P ₁	56.23	0.16
- Ta ₉	52.86	0.02	- P ₄	124.84	0.15

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ	
	- P ₂	55.16	0.15	Ta ₉ - Ta(II) - Ta ₁₀	179.92	0.00
Ta ₄ - Ta(II)	- Ta ₈	74.29	0.04	- P ₃	90.00	0.00
	- Ta ₉	52.86	0.02	- P ₁	90.00	0.00
	- Ta ₁₀	127.14	0.02	- P ₄	90.00	0.00
	- P ₃	56.23	0.16	- P ₂	90.00	0.00
	- P ₁	123.77	0.16	Ta ₁₀ - Ta(II) - P ₃	90.00	0.00
	- P ₄	55.16	0.15	- P ₁	90.00	0.00
	- P ₂	124.84	0.15	- P ₄	90.00	0.00
Ta ₈ - Ta(II)	- Ta ₉	127.14	0.02	- P ₂	90.00	0.00
	- Ta ₁₀	52.86	0.02	P ₃ - Ta(II) - P ₁	179.94	0.00
	- P ₃	56.23	0.16	- P ₄	90.00	0.00
	- P ₁	123.77	0.16	- P ₂	90.00	0.00
	- P ₄	55.16	0.15	P ₁ - Ta(II) - P ₄	90.00	0.00
	- P ₂	124.84	0.15	- P ₂	90.00	0.00
				P ₄ - Ta(II) - P ₂	180.00	0.00

อะตอม Ni พิจารณาอะตอมข้างเคียงของอะตอม Ni ที่มีโคออร์ดิเนตแฟรคชันนัล เป็น (0.0867, 0.3914, 0) ตามรูป 6-1 และ 6-4 จะเห็นว่ามีอะตอมข้างเคียงทั้งหมด 15 ตัว โดยมีอะตอม 5 ตัวได้แก่ Ta₃, Ta₄, Ni₅, P₃ และ P₄ จัดตัวล้อมรอบอะตอม Ni โดยอยู่ในระนาบเดียวกับ Ni ซึ่งเป็นระนาบ xy ที่ z = 0 อะตอมกลุ่มต่อไปมี 8 ตัวได้แก่ Ta₁, Ni₁, Ni₃, P₁, Ta₂, Ni₂, Ni₄ และ P₂ อะตอม 4 ตัวแรกเรียงกันเป็นรูปสี่เหลี่ยมคางหมูไม่เท่าอยู่ในระนาบ xy ที่ z = 1/2 อะตอม 4 ตัวหลังเรียงกันเป็นรูปสี่เหลี่ยมที่มีขนาดและรูปร่างเท่ากับสี่เหลี่ยมที่เกิดจากอะตอม 4 ตัวแรกและจัดตัวอยู่ในระนาบ xy ที่ z = -1/2 สี่เหลี่ยมที่เท่ากันทั้งสองนี้มีความสัมพันธ์ซึ่งกันและกันผ่านทางระนาบกระจกที่อยู่ที่ z = 0 ทำให้เกิดเป็นรูปปริซึมสี่เหลี่ยมคางหมูโดยแกนของปริซึมขนานกับแกน z อะตอมที่เหลืออีก 2 ตัวคือ Ni₆ และ Ni₇ จะอยู่ในระนาบ xy ที่ z = 1 และ -1 ตามลำดับ โดยที่บ่อน้ำระหว่าง Ni กับ Ni₆ และ Ni กับ Ni₇ เกือบจะถือเป็นเส้นตรงเดียวกัน ความยาวบ่อน้ำระหว่าง Ni กับอะตอม



รูป 6-4 แสดงอะตอมข้างเคียงของอะตอม Ni ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$

ข้างเคียงทั้งหมดก็ได้แสดงในตาราง 6-7 และมุมระหว่างบอนด์ที่เกิดจากอะตอมข้างเคียง
ตัวหนึ่งแต่ละตัวกับ Ni และ Ni กับอะตอมข้างเคียงตัวที่เหลือก็ได้แสดงในตาราง 6-8

ตาราง 6-7 แสดงความยาวบอนด์ระหว่างอะตอม Ni กับอะตอมข้างเคียงทั้งหมด 15 ตัว
เมื่อกำหนดให้ความยาวบอนด์ที่มากที่สุดเป็น 3.508 Å

ระยะระหว่างอะตอม	ความยาวบอนด์ (Å)	ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (Å)
Ni - P ₁ , P ₂	2.210	0.007
- P ₃	2.225	0.012
- Ni ₁ , Ni ₂ , Ni ₃ , Ni ₄	2.616	0.006
- Ni ₅	2.745	0.012
- Ta ₁ , Ta ₂	2.782	0.005
- Ta ₄	2.795	0.006
- Ta ₃	2.885	0.006
- P ₄	3.279	0.012
- Ni ₆ , Ni ₇	3.508	0.000

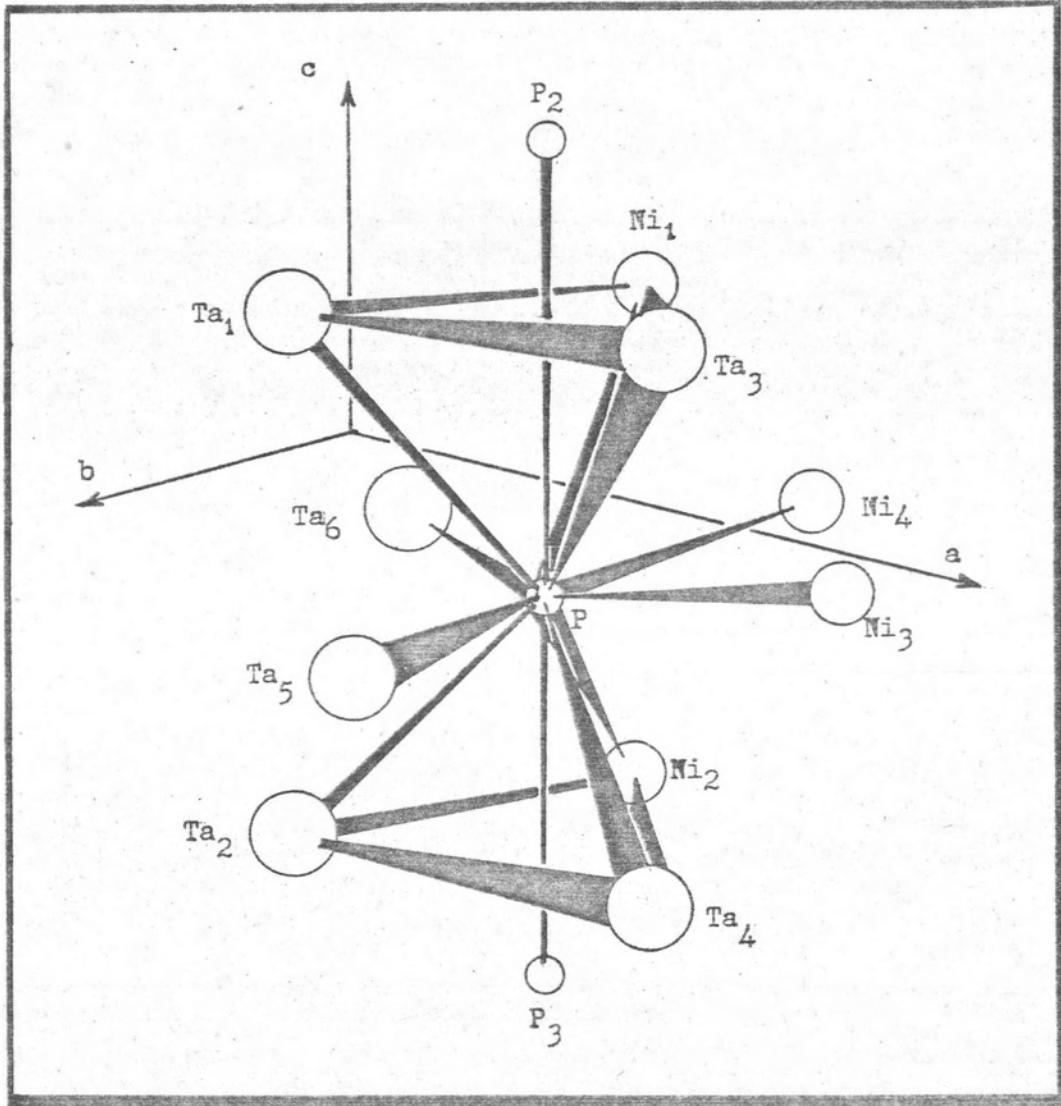
ตาราง 6-8 แสดงค่ามุมระหว่างอะตอมข้างเคียงที่ล้อมรอบอะตอม Ni ตามรูป 6-4

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
Ta ₄ - Ni - Ta ₃	70.41	0.15	- P ₃	114.29	0.35
- Ta ₁	68.54	0.13	- P ₁	60.42	0.27
- Ta ₂	68.54	0.13	- P ₂	60.42	0.27
- Ni ₆	90.00	0.00	Ta ₃ - Ni - Ta ₁	121.48	0.16
- Ni ₇	90.00	0.00	- Ta ₂	121.48	0.16
- Ni ₅	163.88	0.37	- Ni ₆	90.00	0.00
- Ni ₃	130.52	0.21	- Ni ₇	90.00	0.00
- Ni ₄	130.52	0.21	- Ni ₅	93.47	0.29
- Ni ₁	111.00	0.26	- Ni ₃	123.74	0.15
- Ni ₂	111.00	0.26	- Ni ₄	123.74	0.15
- P ₄	121.68	0.27	- Ni ₁	60.53	0.22

หมู่	องค์การ	ด	หมู่	องค์การ	ด		
	- Ni ₂	60.53	0.22		- Ni ₁	47.90	0.12
	- P ₄	51.27	0.21		- Ni ₂	132.10	0.12
	- P ₃	175.30	0.38		- P ₄	90.00	0.00
	- P _I	60.00	0.27		- P ₃	90.00	0.00
	- P ₂	60.00	0.27		- P ₁	37.45	0.24
Ta ₁ - Ni	- Ta ₂	78.17	0.16		- P ₂	142.55	0.24
	- Ni ₆	50.92	0.08	Ni ₇ - Ni	- Ni ₅	90.00	0.00
	- Ni ₇	129.08	0.08		- Ni ₃	132.10	0.12
	- Ni ₅	122.79	0.23		- Ni ₄	47.90	0.12
	- Ni ₃	64.52	0.20		- Ni ₁	132.10	0.12
	- Ni ₄	114.53	0.27		- Ni ₂	47.90	0.12
	- Ni ₁	98.81	0.09		- P ₄	90.00	0.00
	- Ni ₂	176.93	0.19		- P ₃	90.00	0.00
	- P ₄	140.78	0.08		- P ₁	142.55	0.24
	- P ₃	61.74	0.23		- P ₂	37.45	0.24
	- P ₁	64.02	0.27	Ni ₅ - Ni	- Ni ₃	58.36	0.07
	- P ₂	124.26	0.35		- Ni ₄	58.36	0.07
Ta ₂ - Ni	- Ni ₆	129.08	0.08		- Ni ₁	58.36	0.07
	- Ni ₇	50.92	0.08		- Ni ₂	58.36	0.07
	- Ni ₅	122.79	0.23		- P ₄	42.20	0.26
	- Ni ₃	114.53	0.27		- P ₃	81.83	0.37
	- Ni ₄	64.52	0.20		- P ₁	112.06	0.33
	- Ni ₁	176.93	0.19		- P ₂	112.06	0.33
	- Ni ₂	98.81	0.09	Ni ₃ - Ni	- Ni ₄	84.21	0.24
	- P ₄	140.78	0.08		- Ni ₁	63.29	0.14
	- P ₃	61.74	0.23		- Ni ₂	116.71	0.14
	- P ₁	124.26	0.35		- P ₄	87.92	0.19
	- P ₂	64.02	0.27		- P ₃	53.57	0.25
Ni ₆ - Ni	- Ni ₇	179.92	0.00		- P ₁	85.16	0.23
	- Ni ₅	90.00	0.00		- P ₂	168.58	0.32
	- Ni ₃	47.90	0.12	Ni ₄ - Ni	- Ni ₁	116.71	0.14
	- Ni ₄	132.10	0.12		- Ni ₂	63.29	0.14

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
- P ₄	87.92	0.19	Ni ₂ - Ni - P ₄	42.18	0.12
- P ₃	53.57	0.25	- P ₃	116.41	0.23
- P ₁	168.58	0.32	- P ₁	118.59	0.40
- P ₂	85.16	0.23	- P ₂	54.12	0.32
Ni ₁ - Ni - Ni ₂	84.21	0.24	P ₄ - Ni - P ₃	124.03	0.31
- P ₄	42.18	0.12	- P ₁	87.54	0.23
- P ₃	116.41	0.23	- P ₂	87.54	0.23
- P ₁	54.12	0.32	P ₃ - Ni - P ₁	121.78	0.21
- P ₂	118.59	0.40	- P ₂	121.78	0.21
			P ₁ - Ni - P ₂	105.11	0.48

อะตอม P พิจารณาอะตอมข้างเคียงของอะตอม P ที่มีโคออร์ดิเนตแฟรคชันนัล เป็น $(0.4440, 0.2415, 0)$ ตามรูป 6-1 และ 6-5 จะเห็นว่ามีอะตอมข้างเคียงล้อมรอบ อะตอม P ทั้งหมด 12 อะตอมโดยที่อะตอม 4 ตัวคือ Ta₅, Ta₆, Ni₃ และ Ni₄ จักตัวอยู่ใน ระนาบเดียวกันร่วมกับอะตอม P ซึ่งเป็นระนาบ xy ที่ $z = 0$ อะตอมกลุ่มต่อไป 6 ตัวคือ Ta₁, Ta₃, Ni₁, Ta₂, Ta₄ และ Ni₂ อะตอม 3 ตัวแรกเรียงกันเป็นรูปสามเหลี่ยมคานไม้เท่า และจักตัวอยู่ในระนาบ xy ที่ $z = 1/2$ อะตอม 3 ตัวหลังจะเรียงเหมือนกันกับ 3 ตัวแรก แต่จักตัวอยู่ในระนาบ xy ที่ $z = -1/2$ และสามเหลี่ยมที่เกิดจากอะตอม 3 ตัวแรกและหลัง นี้สัมพันธ์กันโดยผ่านทางระนาบกระจกที่อยู่ ที่ $z = 0$ ทำให้เกิดเป็นรูปปริซึมสามเหลี่ยม (triangular right prism) โดยแกนของปริซึมขนานกับแกน z อะตอมที่เหลืออีก 2 ตัวคือ P₂ และ P₃ จะอยู่ในระนาบ xy ที่ $z = 1$ และ -1 ตามลำดับ โดยที่บอแนร์ระหว่าง P กับ P₂ และ P กับ P₃ เกือบจะถือเป็นเส้นตรงเดียวกัน ความยาวบอแนร์ระหว่างอะตอม P กับ อะตอมข้างเคียงทั้งหมดได้แสดงในตาราง 6-9 และมุมระหว่างบอแนร์ที่เกิดจากอะตอมข้างเคียง ตัวหนึ่งแต่ละตัวเท่ากับ P และ P เท่ากับอะตอมข้างเคียงตัวอื่นที่เหลือได้แสดงในตาราง 6-10



รูป 6-5 แสดงอะตอมข้างเคียงของอะตอม P ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$

ตาราง 6-9 แสดงความยาวบอนด์ระหว่างอะตอม P กับอะตอมข้างเคียงทั้งหมด 12 อะตอม
เมื่อกำหนดให้ความยาวบอนด์มากที่สุดเป็น 3.508 Å

ระยะระหว่างอะตอม	ความยาวบอนด์ (Å)	ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน (Å)
P - Ni ₁ , Ni ₂	2.210	0.007
- Ni ₃	2.225	0.012
- Ta ₁ , Ta ₂	2.568	0.008
- Ta ₃ , Ta ₄	2.614	0.008
- Ta ₅	2.614	0.010
- Ta ₆	2.690	0.010
- Ni ₄	3.279	0.012
- P ₂ , P ₃	3.508	0.000

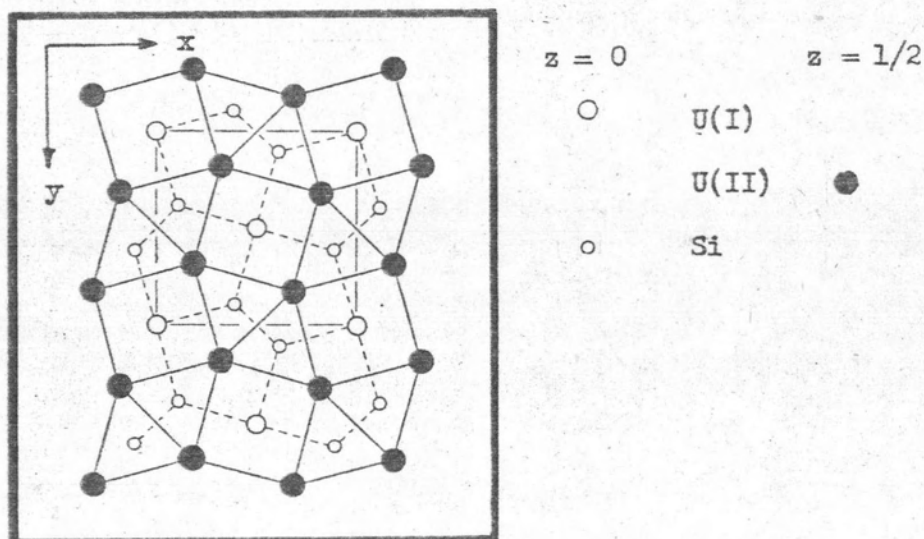
ตาราง 6-10 แสดงค่านุมระหว่างอะตอมข้างเคียงที่ล้อมรอบอะตอม P ตามรูป 6-5

มุม	องศา	σ	มุม	องศา	σ
Ta ₆ - P - Ta ₁	73.30	0.25	- Ta ₅	68.18	0.23
- Ta ₂	73.30	0.25	- Ni ₃	136.92	0.16
- Ta ₃	137.58	0.16	- Ni ₄	113.85	0.28
- Ta ₄	137.58	0.16	- Ni ₁	71.14	0.19
- Ta ₅	126.24	0.39	- Ni ₂	139.58	0.49
- Ni ₃	112.75	0.43	- P ₂	46.92	0.16
- Ni ₄	56.78	0.22	- P ₃	133.08	0.16
- Ni ₁	68.40	0.29	Ta ₂ - P - Ta ₃	135.70	0.42
- Ni ₂	68.40	0.29	- Ta ₄	78.39	0.15
- P ₂	90.00	0.00	- Ta ₅	68.18	0.23
- P ₃	90.00	0.00	- Ni ₃	136.92	0.16
Ta ₁ - P - Ta ₂	86.16	0.31	- Ni ₄	113.85	0.28
- Ta ₃	78.39	0.15	- Ni ₁	139.58	0.49
- Ta ₄	135.70	0.42	- Ni ₂	71.14	0.19

หมู่	องศา	หมู่	องศา
- P ₂	133.08 0.16	- Ni ₂	127.44 0.24
- P ₃	46.92 0.16	- P ₂	90.00 0.00
Ta ₃ - P - Ta ₄	84.32 0.30	- P ₃	90.00 0.00
- Ta ₅	67.52 0.23	Ni ₃ - P - Ni ₄	55.97 0.31
- Ni ₃	69.68 0.27	- Ni ₁	72.31 0.36
- Ni ₄	110.39 0.28	- Ni ₂	72.31 0.36
- Ni ₁	72.93 0.19	- P ₂	90.00 0.00
- Ni ₂	140.56 0.48	- P ₃	90.00 0.00
- P ₂	47.84 0.15	Ni ₄ - P - Ni ₁	52.66 0.24
- P ₃	132.16 0.15	- Ni ₂	52.66 0.24
Ta ₄ - P - Ta ₅	67.52 0.23	- P ₂	90.00 0.00
- Ni ₃	69.68 0.27	- P ₃	90.00 0.00
- Ni ₄	110.39 0.28	Ni ₁ - P - Ni ₂	105.11 0.48
- Ni ₁	140.56 0.48	- P ₂	37.45 0.24
- Ni ₂	72.93 0.19	- P ₃	142.55 0.24
- P ₂	132.16 0.15	Ni ₂ - P - P ₂	142.55 0.24
- P ₃	47.84 0.15	- P ₃	37.45 0.24
Ta ₅ - P - Ni ₃	121.01 0.45	P ₂ - P - P ₃	179.92 0.00
- Ni ₄	176.98 0.41		
- Ni ₁	127.44 0.24		

หากเปรียบเทียบโครงสร้างของผลึก Ta₅Ni₄P₄ กับผลึกที่มีโครงสร้างคล้ายคลึงกัน เช่น U₃Si₂ ซึ่งคำนวณโดย W.H. Zachariasen⁽¹⁹⁾ และมีการอภิปรายเพิ่มเติมของ Clara Brink Shoemaker และ David P. Shoemaker⁽²⁰⁾ ศึกษามองในแบบระนาบร่างแห (planar nets) ดังรูป 6-6 จะเห็นว่าระนาบร่างแหที่ z=1/2 อันประกอบด้วยอะตอม U(II) เท่านั้นจะเป็นร่างแหแบบ 5-คอนเน็คท์ (5-connected) หมายความว่า⁽²¹⁾ อะตอม U(II) แต่ละตัวที่อยู่ในระนาบร่างแหจะเชื่อมกับอะตอม U(II) อื่นๆอีก 5 ตัวในระนาบเดียวกัน ส่วนระนาบร่างแหที่ z=0 จะเป็นร่างแหที่ประกอบด้วยรูปห้าเหลี่ยม

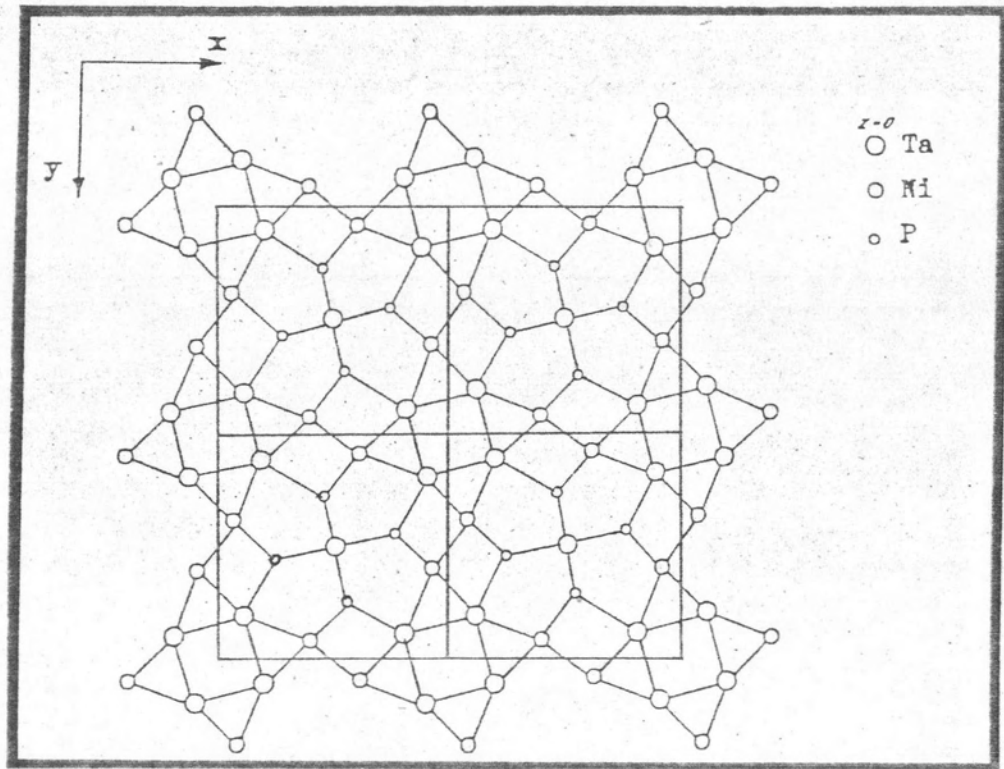
(pentagons) ที่เกิดจากอะตอม Si 3 ตัว และ U(I) 2 ตัว สำหรับระนาบร่างแหที่ $z=1/2$ ของผลึก U_3Si_2 มีความคล้ายคลึงกับระนาบร่างแหที่ $z=0$ และ $1/2$ ของ



รูป 6-6 โครงสร้างของผลึก U_3Si_2 เมื่อฉายลงตามแกน z

ผลึก $Ta_5Ni_4P_4$ ดังแสดงในรูป 6-1 ต่างกันตรงที่ว่า ในแต่ละระนาบร่างแหของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$ หน่วยรูปดาว 4 แฉกอันประกอบด้วยอะตอมอิสระ 8 ตัวจะถูกแยกออกห่างจากกัน และเชื่อมกันด้วยบอนด์ระหว่างอะตอม Ni แต่รูปดาว 4 แฉกของผลึก U_3Si_2 อันประกอบด้วยอะตอมอิสระ 2 ตัวนั้นเบียดชิดกันแน่นจนกระทั่งแฉกของดาวแต่ละดวงที่อยู่ติดไปซ้อนกันสนิทพอดิ

การเชื่อมกันของอะตอมต่างๆ ในระนาบร่างแหของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$ เป็นลักษณะแบบผสมที่มีความซับซ้อนมาก กล่าวคือ เมื่อกำหนดให้ความยาวบอนด์มากที่สุดเป็น 3.275 Å แล้ว จะได้ร่างแหเป็นแบบรูป 6-7 ซึ่งเกิดจากการผสมกันของร่างแหแบบ 3-, 4- และ 5-คอนเน็คท์ ประกอบด้วยรูปหลายเหลี่ยมต่างๆ คือ รูปสามเหลี่ยมที่เกิดจากอะตอม Ta(I) 2 ตัวและ Ni 1 ตัว รูปสี่เหลี่ยมคางหมูที่เกิดจากอะตอม Ta(I) และ P อย่างละ 1 ตัวและ Ni 2 ตัว รูปสี่เหลี่ยมจัตุรัสที่เกิดจากอะตอม Ta(I) 4 ตัว และรูปห้าเหลี่ยมที่เกิดจากอะตอม Ta(I), Ta(II) และ Ni อย่างละ 1 ตัวและ P 2 ตัว



รูป 6-7 แสดงระนาบร่างแหภายใน 4 หน่วยเซลล์เมื่อนายลงตามแกน z เฉพาะที่ $z=0$ ของผลึก $Ta_5Ni_4P_4$

พิจารณาการเชื่อมกันของอะตอมต่างๆ ในระนาบร่างแหแบบ 3- , 4- และ 5-คอนเน็คต์ผสมกันพบว่า อะตอม Ta(I) จะเชื่อมกับอะตอมตัวอื่นๆแบบ 5-คอนเน็คต์ โดยเชื่อมกับอะตอม Ta(I) และ Ni อย่างละ 2 ตัว และ P 1 ตัว อะตอม Ta(II) จะเชื่อมกับอะตอมตัวอื่นๆแบบ 4-คอนเน็คต์ โดยเชื่อมกับอะตอม P 4 ตัว อะตอม Ni จะเชื่อมกับอะตอมตัวอื่นๆแบบ 4-คอนเน็คต์ เช่นเดียวกับอะตอม Ta(II) โดยจะเชื่อมกับอะตอม Ta(I) 2 ตัว Ni และ P อีกอย่างละ 1 ตัว สุดท้ายอะตอม P จะเชื่อมกับอะตอมตัวอื่นๆแบบ 3-คอนเน็คต์ โดยเชื่อมกับอะตอม Ta(I), Ta(II) และ Ni อย่างละ 1 ตัว