



การคำนวณหาโครงสร้างของผลึก

ในบทนี้ จะเป็นการคำนวณหาโครงสร้างของผลึกไตรฮาฟเนียมฟอสไฟต์ โดยเริ่มจากการคำนวณค่ามิติของหน่วยเซลล์อย่างละเอียด ขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้าง ตำแหน่งอะตอม และการเกลตาโครงสร้าง ตามลำดับ ในการคำนวณนี้ ส่วนมากจะคำนวณโดยใช้เครื่องคอมพิวเตอร์ โดยที่โปรแกรมต่าง ๆ ที่ใช้ในการคำนวณ หน่วยรังสีเอกซ์ได้รับจากสถาบันเคมี มหาวิทยาลัยอุพพัชลา โดยความช่วยเหลือของ International Seminar มหาวิทยาลัยอุพพัชลา

5.1 การคำนวณค่ามิติของหน่วยเซลล์อย่างละเอียด

ข้อมูลที่ใช้คำนวณค่ามิติของหน่วยเซลล์อย่างละเอียด คือตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบนบนภาพถ่ายผลึกผง, S และค่ามิติของหน่วยเซลล์อย่างหยาบที่ได้จากภาพถ่ายแบบออสซีเลชันและแบบไวซ์เซนเบอร์ก ค่าทั้งหมดนี้อยู่ในตาราง 4-6, 4-1 และ 4-4 ตามลำดับ

การคำนวณตอนแรก ใช้โปรแกรม CSPHGUNE คำนวณแก้ความผิดพลาดของตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบน เนื่องจากการทดลอง โดยอาศัยตำแหน่งของเส้นการเลี้ยวเบนที่เกิดจากซิลิกอน ผลลัพธ์ที่ได้ คือค่า d_0 , θ_0 และ $\sin^2 \theta_0$ ของแต่ละเส้น

ตอนที่สอง ใช้โปรแกรม CSPHCENE คำนวณค่า $\sin^2 \theta_0$ ที่สมนัยกับค่า (hkl) ต่าง ๆ โดยอาศัยมิติของหน่วยเซลล์อย่างหยาบ

จากนั้น นำค่า $\sin^2 \theta_0$ ที่ได้จากทั้งสองตอนมาเปรียบเทียบกันดู ก็จะสามารถกำหนดค่า (hkl) ของแต่ละเส้นบนภาพถ่ายผลึกผงได้

ตอนสุดท้าย ใช้โปรแกรม CSPHCENE คำนวณปรับค่ามิติของหน่วยเซลล์ ซึ่งเป็นการปรับด้วยวิธีกำลังสองน้อยที่สุด (least-squares method) โดยอาศัยค่า (hkl) ต่าง ๆ ของเส้นที่ได้จากการเปรียบเทียบดังกล่าว และค่า $\sin^2 \theta_0$ ของเส้นการเลี้ยวเบน ซึ่งมีทั้งหมด

57 ค่า แต่ในการปรับนี้ ใช้เพียง 29 ค่า ผลของการปรับได้ค่ามิติของหน่วยเซลล์อย่างละเอียด คือ

$$a = 10.6671 \pm 0.0004 \text{ \AA}$$

$$c = 5.2919 \pm 0.0002 \text{ \AA}$$

สำหรับค่า $\sin^2 \theta_c$ ของ 29 เส้นนี้ ได้แสดงไว้ในตาราง 4-6

5.2 การคำนวณขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้าง

สำหรับขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้างมีค่าดังนี้ คือ (6)

$$|F_o|_{hkl} = \sqrt{\frac{I_{hkl}}{LpA}} \quad (5-1)$$

โดยที่ $|F_o|_{hkl}$ คือขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้างที่ได้จากการสังเกต

I_{hkl} คือความเข้มของจุดสะท้อน (hkl)

L คือแฟคเตอร์ลอเรนซ์ (Lorentz factor) ซึ่งมีค่าเท่ากับ

$$\sin \theta / (\sin 2\theta \sqrt{\sin^2 \theta - \sin^2 \mu_c})$$

p คือแฟคเตอร์โพลาไรเซชัน (polarization factor) ซึ่งมีค่าเท่ากับ

$$(1 + \cos^2 2\theta) / 2$$

A คือแฟคเตอร์ของการดูดกลืน

การคำนวณค่า $|F_o|_{hkl}$ นี้ ได้ใช้วิธีการแก้การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ ของผลึก โดยคิดว่าผลึกมีรูปร่างแบบทั่ว ๆ ไป (general shape) เนื่องจากผลึกที่ทดลองมีรูปร่างเป็นแผ่นบาง

ในการคำนวณค่า $|F_o|_{hkl}$ ใช้โปรแกรม CSPHABSW และข้อมูลที่ใช้สำหรับคำนวณคือสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงเส้น (μ) คำนวณมวลเลขอร์ของระนาบที่ปิดล้อมผลึกที่ใช้ ระยะจากระนาบที่ปิดล้อมผลึกถึงจุดกำเนิด ค่าความเข้มของจุดสะท้อน (hkl) ต่าง ๆ ที่ได้จากการทดลอง และค่ามิติของเซลล์อย่างละเอียด ซึ่งสองค่าหลังนี้ได้แสดงการหาไว้แล้ว ในหัวข้อ 4-9 และ 5-1 สำหรับข้อมูลที่ยังไม่ทราบค่า จะได้ทำการหาต่อไป

5.2.1 การหาค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงเส้น จะหาได้จากความสัมพันธ์ ดังนี้

คือ

$$\mu = D \sum_i p_i (\mu_m)_i \quad (5-2)$$

โดยที่ μ คือสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงเส้น

D คือความหนาแน่นของผลึก

p_i คือสัดส่วนโดยน้ำหนักของอะตอมชนิดที่ i ต่อน้ำหนักรวม

$(\mu_m)_i$ คือสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงมวล ของอะตอมตัวที่ i ซึ่ง

เบ็ดาค่าได้จาก International Table Vol. III ค่า μ_m ของ Hf

และ P มีค่าเท่ากับ 91.7 และ 7.89 (ซ.ม.)²/กรัม ตามลำดับ

จะเห็นว่าในการคำนวณค่า μ นี้ จะต้องคำนวณค่า D และค่า p_i ก่อน

จากหัวข้อ 4-1 ได้ค่า D ซึ่งเป็นค่าจากการทดลอง เท่ากับ 12.31 กรัม/มิลลิลิตร และเมื่อใช้ค่า D นี้ คำนวณหาจำนวนโมเลกุลในหนึ่งหน่วยเซลล์ (Z) โดยคำนวณจาก

$$D = \frac{M \times Z}{V} \times 1.66 \times 10^{-24} \quad (5-3)$$

โดยที่ M คือน้ำหนักโมเลกุลของผลึก ซึ่งมีค่าเท่ากับ 566.5

V คือปริมาตรของหน่วยเซลล์ ซึ่งมีค่าเท่ากับ 602.14×10^{-24} (ซ.ม.)³

ได้ค่า Z เท่ากับ 7.9 แต่เนื่องจาก Z ต้องมีค่าเป็นจำนวนเต็ม ดังนั้น Z จะต้องมีความเท่ากับ 8 นำค่า Z เท่ากับ 8 นี้ กลับไปคำนวณหาค่า D ใหม่ จะได้ว่า D ที่ได้จากการคำนวณ (D_c) มีค่าเท่ากับ 12.49 กรัม/มิลลิลิตร

การหาค่า p_i ได้แสดงไว้ในตาราง 5-1

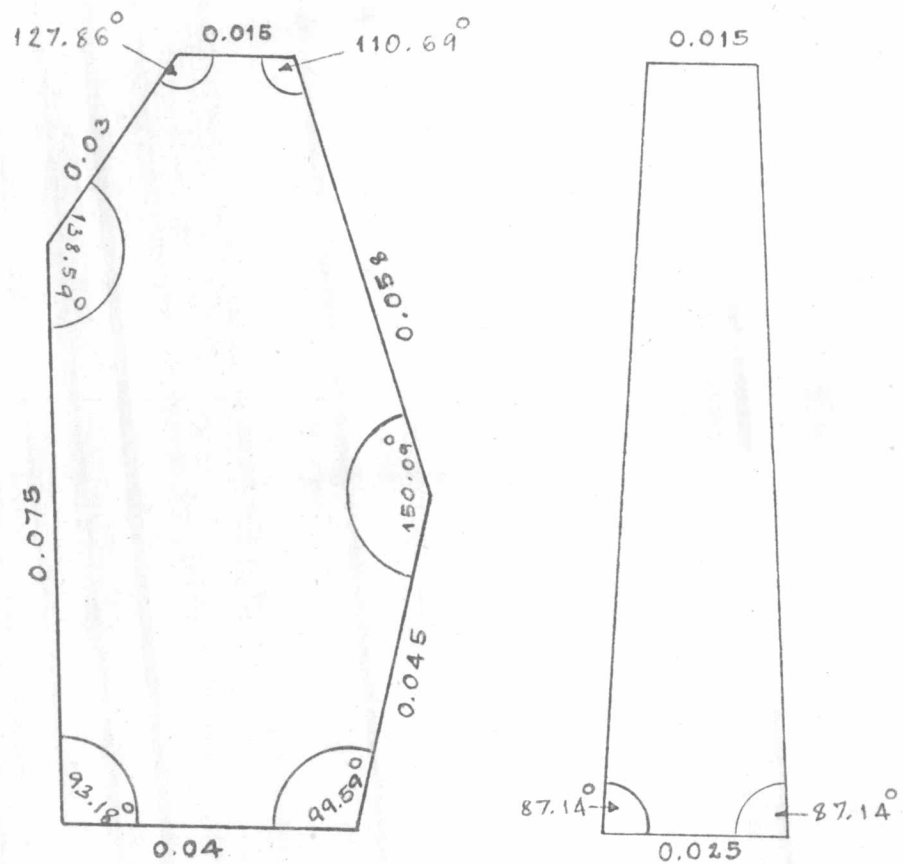
ตาราง 5-1 แสดงการหาค่า p_i

อะตอม	น้ำหนักอะตอม	น้ำหนักของอะตอมแต่ละชนิดใน 1 โมเลกุล	p_i
Hf	178.5	$178.5 \times 3 = 535.5$	0.95
P	31	$31 \times 1 = 31$	0.05
น้ำหนักโมเลกุล = 566.5			

เมื่อแทนค่า D , p_i และ μ_m ลงในสมการ (5-2) จะได้ว่า

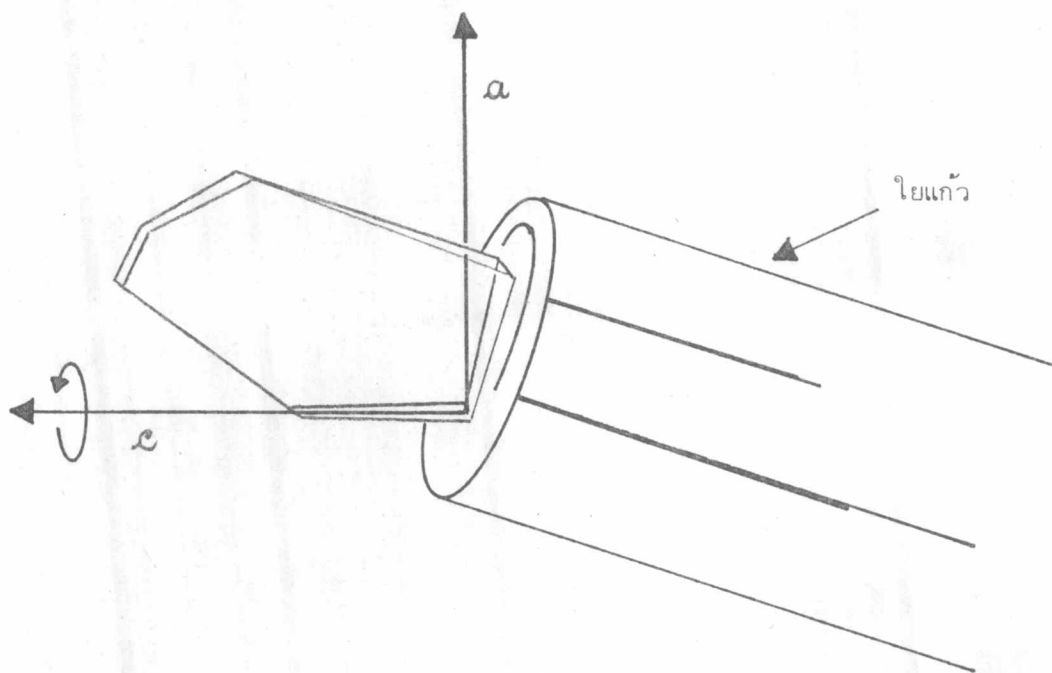
$$\mu = 1093 \quad (\text{ซ.ม.})^{-1}$$

5.2.2 การกำหนดค่าดัชนีของระนาบที่ปิดล้อมผลึก ผลึกเดี่ยวที่ใช้มีลักษณะและขนาด ดังรูป 4-1 ดังนั้นจึงสามารถสร้างแบบจำลองของผลึกได้ ดังรูป 5-1 ซึ่งได้แสดงระยะของด้านต่าง ๆ และมุมภายในต่าง ๆ ไว้ด้วย สำหรับระยะของด้านและมุมภายในของผลึกจำลองนี้ มีค่าใกล้เคียงกับผลึกจริง การกำหนดค่าดัชนีของระนาบที่ปิดล้อมผลึกนั้น จะคำนวณค่าดัชนีของระนาบที่ปิดล้อมผลึกจำลองที่สร้างขึ้น และถือว่าค่าดัชนีที่คำนวณได้นี้ คือค่าดัชนีของระนาบที่ปิดล้อมผลึกจริง



รูป 5-1 แสดงแบบจำลองของผลึก ระยะเป็นมิลลิเมตร

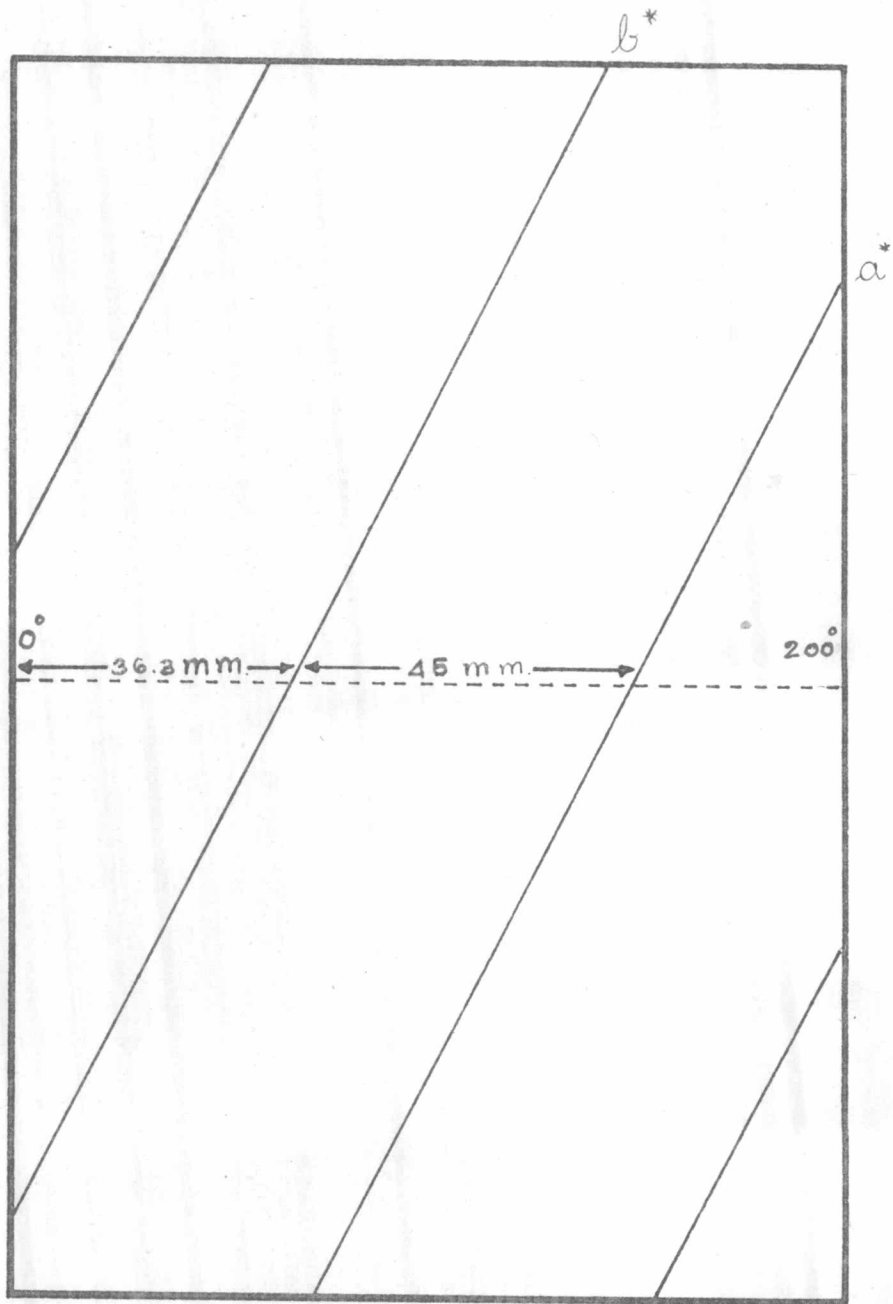
ในการกำหนดค่าดัชนีของระนาบ เริ่มแรก จะต้องกำหนดแกนของหน่วยเซลล์ คือแกน a , b และ c ลงในผลึกจำลอง โดยจะเริ่มกำหนดแกน c เป็นแกนแรก จากการดูผลึกจริงขณะหมุนไปรอบ โดยดูผ่านกล้องส่องผลึก ได้ว่าแกนหมุน หรือแกน c จะอยู่ในลักษณะ ดังรูป 5-2



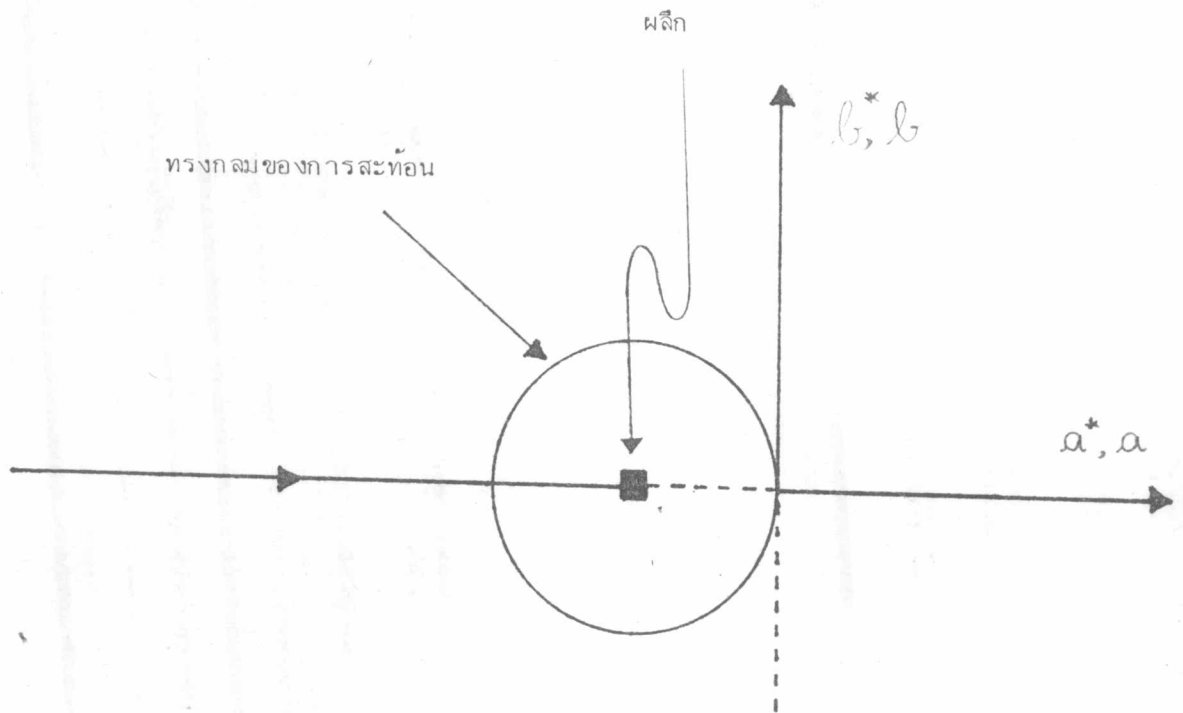
รูป 5-2 แสดงแกนที่ผลึกหมุนรอบ หรือแกน c ภาพนี้ผลึกตั้งอยู่ที่มุม 162.6° ซึ่งแกน a ตั้งฉากกับลำของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบพอดี ทิศทางของรังสีตกกระทบพุ่งเข้ากระดาษ

การกำหนดแกน a หรือแกน b ของผลึก จะอาศัยภาพถ่ายไวซ์เซนเบอร์ก เลย์เออร์ ที่ศูนย์ที่ได้กำหนดแกน a^* และแกน b^* ไว้แล้ว ดังรูป 5-3 สำหรับภาพถ่ายแบบไวซ์เซนเบอร์กนี้

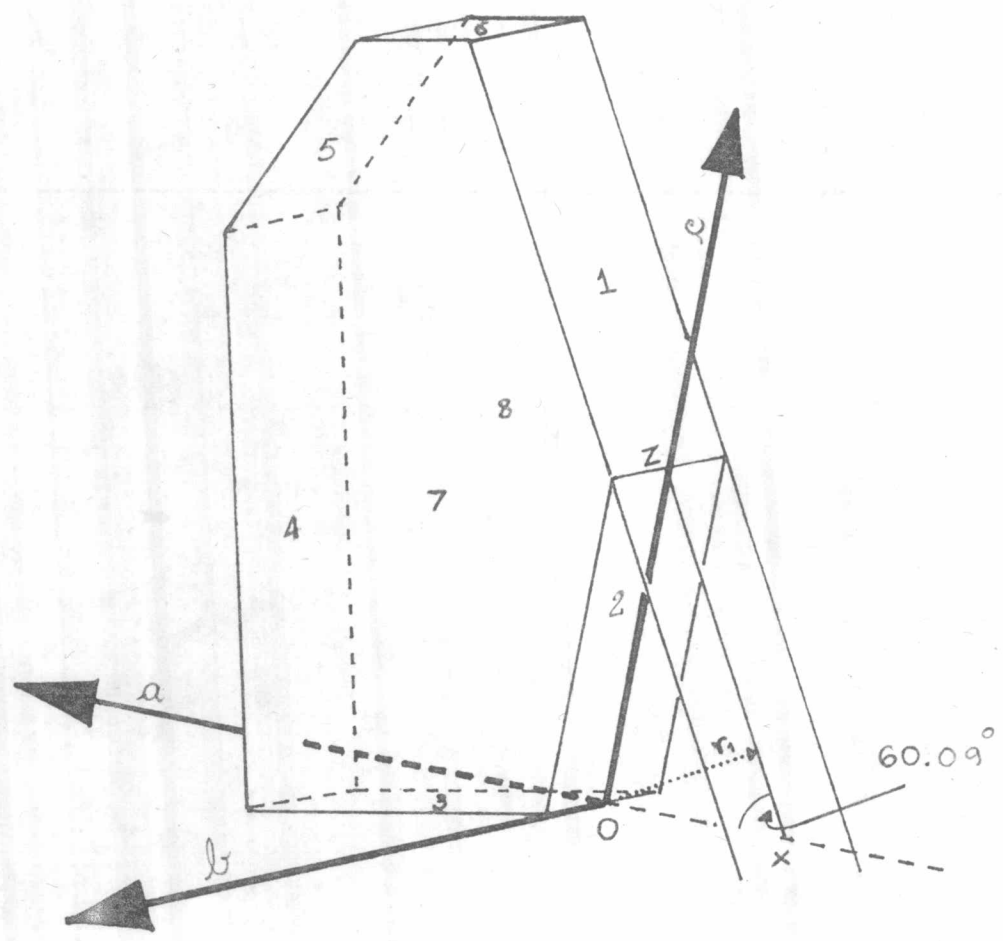
ถ้าโยโดยให้ผลึกหมุนตั้งแต่มุม (ω) เท่ากับ 0 ถึง 220 องศา จากรูป 5-3 จะได้ว่าที่มุมเท่ากับ 36.3×2 หรือ 72.6 องศา แกน b^* ตั้งฉากกับลำของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบ และกำลังเริ่มจะตัดทรงกลมของการสะท้อน ดังรูป 5-4 และเช่นเดียวกัน ที่มุมเท่ากับ 162.6 องศา แกน a^* จะตั้งฉากกับลำของรังสีเอ็กซ์ และกำลังเริ่มจะตัดทรงกลมของการสะท้อน จากการสังเกต ได้ว่า ที่มุมเท่ากับ 162.6 องศา ผลึกจะตั้งอยู่ตามลักษณะ ดังรูป 5-2 ดังนั้นจึงกำหนดแกน a^* หรือแกน a ลงบนผลึกจำลองได้ สำหรับแกน b จะมีทิศทางตาม $\vec{c} \times \vec{a}$ ดังรูป 5-5



รูป 5-3 แสดงแกน a^* และแกน b^* ของภาพถ่ายแบบไวซ์เซนเบอร์กแลย์เออร์
ที่ศูนย์ ค่า w เท่ากับ 0-200 องศา



รูป 5-4 แสดงแกน b^* ขณะที่ตั้งฉากกับลำของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบ ซึ่งค่า ω เท่ากับ 72.6 องศา



รูป 5-5 แสดงแกนต่าง ๆ ที่กำหนดลงในผลึกจำลอง และระนาบต่าง ๆ ที่ปิดล้อมผลึก

หลังจากกำหนดแกน a , b และ c ลงในผลึกจำลองได้เรียบร้อยแล้วต่อไปจะพิจารณาว่า ระนาบต่าง ๆ ที่ปิดล้อมผลึก ซึ่งมีทั้งหมด 8 ระนาบ ควรจะมีค่าดัชนีเป็นเท่าไร จากรูป 5-5 ระนาบ 1 ตัดแกน a ที่ x แกน c ที่ z และแกน b ที่ ∞ หรือขนานกับแกน b ซึ่งจะได้ว่า

$$\frac{z}{x} = \tan 60.09^\circ$$

แต่ระนาบ 1 นี้จะต้องมีค่าดัชนีเป็น (hol) ดังนั้น จะได้ว่า

$$\frac{z}{x} = \frac{(c/l)}{(a/h)}$$

หรือ
$$\frac{h}{l} = \frac{a}{c} \cdot \frac{z}{x}$$

หรือ
$$\frac{h}{l} = \frac{a}{c} \cdot \tan 60.09^\circ$$

$$= 3.5$$

หรือ
$$\frac{h}{l} = \frac{7}{2}$$

นั่นคือเมื่อ h มีค่าเท่ากับ 7 l จะมีค่าเท่ากับ 2 และ k มีค่าเท่ากับ 0 ดังนั้นดัชนีของระนาบ 1 จะเป็น $(\bar{7} 0 2)$ ในที่นี้ h มีค่าเป็นลบ เนื่องจากระนาบ 1 ตัดแกน a ทางด้านลบ สำหรับค่าดัชนีของระนาบอื่น ๆ ก็จะได้ในทำนองเดียวกัน และมีค่าดังแสดงไว้ในตาราง 5-2

ให้ระนาบ 1 นี้อยู่ห่างจากจุดกำเนิด (จุด 0) เป็นระยะ r_1 ซึ่งค่า r_1 นี้จะหาได้จาก

$$r_1 = OZ \sin 29.91^\circ$$

หรือ
$$r_1 = 0.045 \text{ ม.ม.}$$

สำหรับระยะจากจุด 0 ถึงระนาบอื่น ๆ ก็จะได้ ในทำนองเดียวกัน และมีค่าดังแสดงไว้ใน ตาราง 5-2

ตาราง 5-2 แสดงค่าดัชนีมิลเลอร์ของระนาบที่ปิดล้อมผลึก และระยะจากจุดกำเนิด ถึงระนาบ (r)

ระนาบที่	(h k l)	r (ซ.ม.)	หมายเหตุ
1	($\bar{1}$ 0 2)	0.0022	} ผ่านจุด กำเนิด
2	($\bar{1}$ 0 0)	0.0	
3	($\bar{1}$ 0 0)	0.0	
4	(9 0 $\bar{1}$)	0.004	
5	(5 0 1)	0.0077	
6	(1 0 3)	0.01	
7	(0 4 $\bar{1}$ 1)	0.00125	
8	(0 $\bar{4}$ 1)	0.00125	

เมื่อได้ข้อมูลต่าง ๆ ครบถ้วนแล้ว จะนำไปคำนวณค่าขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้าง, $|F_o|_{hkl}$ ซึ่งจะใช้เป็นข้อมูลในการคำนวณฟังก์ชันแพทเทอรัล สำหรับหาตำแหน่งของอะตอมหนักต่อไป

5.3 การหาตำแหน่งอะตอม

ผลึกไตรฮาฟเนียมฟอสไฟด์เป็นสารประกอบที่มีอะตอมหนัก คือฮาฟเนียม และอะตอมที่เบากว่า คือฟอสฟอรัส ดังนั้นจึงเป็นการสะดวกที่จะใช้วิธีการหาตำแหน่งอะตอมหนัก โดยคำนวณฟังก์ชันแพทเทอร์สัน ซึ่งจะได้ว่าตรงที่มีค่าฟังก์ชันแพทเทอร์สันค่อนข้างสูง ในแผนภาพแพทเทอร์สัน จะสมนัยกับตำแหน่งของอะตอมฮาฟเนียม

ผลึกไตรฮาฟเนียมฟอสไฟด์มีหน่วยสมมาตรแบบ $P4_2/n$ สำหรับในกรณีที่จุดกำเนิดอยู่ที่ $\bar{1}$ จะมีค่าโคออดิเนตของตำแหน่งเทียบเท่า (coordinate of equivalent positions) ซึ่งเป็นตำแหน่งทั่วไป (general positions) อยู่ 8 ตำแหน่ง คือ (x, y, z) , $(\frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - y, z)$, $(\bar{y}, \frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + z)$, $(\frac{1}{2} + y, \bar{x}, \frac{1}{2} + z)$, $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$, $(\frac{1}{2} + x, \frac{1}{2} + y, \bar{z})$, $(y, \frac{1}{2} - x, \frac{1}{2} - z)$ และ $(\frac{1}{2} - y, x, \frac{1}{2} - z)$ ดังนั้นในหนึ่งหน่วยเซลล์ซึ่งมี Hf_3P อยู่ 8 โมเลกุล ซึ่งคาดว่าจะสามารถแบ่งอะตอมทั้งหมด (32 อะตอม) ให้เป็นชุด ๆ ละ 8 อะตอมได้ ดังนี้ คือ ชุดของอะตอมฮาฟเนียม 3 ชุด กำหนดให้เป็น Hf_1 , Hf_2 และ Hf_3 และชุดของอะตอมฟอสฟอรัส 1 ชุด ตำแหน่งของอะตอมในชุดเดียวกันจะมีความสัมพันธ์ตามตำแหน่งเทียบเท่า

จากเวกเตอร์ฮาร์คเกอร์ (Harker vector) ซึ่งเป็นผลต่างของโคออดิเนตของตำแหน่งเทียบเท่า ดังแสดงไว้ในตาราง 5-3 จะทราบว่ามีการนาบฮาร์คเกอร์ (Harker plane) คือ $(u, v, 0)$ และ $(u, v, 0.5)$ และเส้นฮาร์คเกอร์ (Harker line) คือ $(0.5, 0.5, w)$ โดยที่ w เท่ากับ $2z$ ดังนั้น เพื่อให้ได้ข้อมูลพอที่จะหาตำแหน่งของอะตอมฮาฟเนียมได้ จึงต้องคำนวณฟังก์ชันแพทเทอร์สัน โดยมีค่า u และ v ตั้งแต่ 0 ถึง 0.5 ที่ ค่า w เท่ากับ 0, 0.25 และ 0.5 สำหรับการคำนวณฟังก์ชันแพทเทอร์สันนี้ ใช้โปรแกรม CSPHFOUR และข้อมูลที่ใช้คำนวณ คือขนาดของแฟกเตอร์โครงสร้าง, $|F_o|_{hk\ell}$ ผลลัพธ์ที่ได้ออกมา คือ แผนภาพแพทเทอร์สัน 3 แผนภาพ มีดังนี้ คือ $P(u, v, 0)$, $P(u, v, 0.25)$ และ $P(u, v, 0.5)$ ดังรูป 5-6 (ก), 5-6 (ข) และ 5-6 (ค) ตามลำดับ

ตาราง 5.3 แสดงเวกเตอร์ฮาร์กเกอร์ ที่ได้จากโคออดิเนตของตำแหน่งเทียบเท่าของมุมสมมาตร $P4_2/n$ เมื่อจุดกำเนิดอยู่ที่ $\bar{1}$

ตำแหน่ง เทียบเท่า	x, y, z	$\frac{1-x, 1-y, z}{2}$	$\bar{y}, \frac{1+x, 1+z}{2}$	$\frac{1+y, \bar{x}, 1+z}{2}$	$\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	$\frac{1+x, 1+y, \bar{z}}{2}$	$y, \frac{1-x, 1-z}{2}$	$\frac{1-y, x, 1-z}{2}$
x, y, z	0, 0, 0	$\frac{1-2x, 1-2y, 0}{2}$	$-(x+y), \frac{1+(x-y), 1}{2}$	$\frac{1-(x-y), -(x+y), 1}{2}$	$2\bar{x}, 2\bar{y}, 2\bar{z}$	$\frac{1, 1, 2\bar{z}}{2}$	$-(x-y), \frac{1-(x+y), 1}{2}, -2z$	$\frac{1-(x+y), x-y, 1-2z}{2}$
$\frac{1-x, 1-y, z}{2}$	$-\frac{1+2x, -1+2y, 0}{2}$	0, 0, 0	$-\frac{1+(x-y), x+y, 1}{2}$	$x+y, -\frac{1-(x-y), 1}{2}$	$-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 2\bar{z}$	$2x, 2y, 2\bar{z}$	$-\frac{1+(x+y), -(x-y), 1-2z}{2}$	$x-y, -\frac{1+(x+y), 1-2z}{2}$
$\bar{y}, \frac{1+x, 1+z}{2}$	$x+y, -\frac{1-(x-y), -1}{2}$	$\frac{1-(x-y), -(x+y), -1}{2}$	0, 0, 0	$\frac{1+2y, -1-2x, 0}{2}$	$-(x-y), -\frac{1-(x+y), -1-2z}{2}$	$\frac{1+(x+y), -(x-y), -1-2z}{2}$	$2y, 2\bar{x}, 2\bar{z}$	$\frac{1, -1, 2\bar{z}}{2}$
$\frac{1+y, \bar{x}, 1+z}{2}$	$-\frac{1+(x-y), x+y, -1}{2}$	$-(x+y), \frac{1+(x-y), -1}{2}$	$-\frac{1-2y, 1+2x, 0}{2}$	0, 0, 0	$-\frac{1-(x+y), x-y, 1+(x+y), -1-2z}{2}$	$x-y, \frac{1+(x+y), -1-2z}{2}$	$-\frac{1, 1, 2\bar{z}}{2}$	$2\bar{y}, 2x, 2\bar{z}$
$\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$	$2x, 2y, 2z$	$\frac{1, 1, 2z}{2}$	$x-y, \frac{1+(x+y), 1+2z}{2}$	$\frac{1+(x+y), -(x-y), 1+2z}{2}$	0, 0, 0	$\frac{1+2x, 1+2y, 0}{2}$	$x+y, \frac{1-(x-y), 1}{2}$	$\frac{1+(x-y), x+y, 1}{2}$
$\frac{1+x, 1+y, \bar{z}}{2}$	$-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 2z$	$2\bar{x}, 2\bar{y}, 2z$	$-\frac{1-(x+y), x-y, 1+2z}{2}$	$-(x-y), -\frac{1-(x+y), 1+2z}{2}$	$-\frac{1-2x, -1-2y, 0}{2}$	0, 0, 0	$-\frac{1-(x-y), -(x-y), 1}{2}$	$-(x+y), -\frac{1+(x-y), 1}{2}$
$y, \frac{1-x, 1-z}{2}$	$x-y, -\frac{1+(x+y), -1+2z}{2}$	$\frac{1-(x+y), x-y, -1+2z}{2}$	$2\bar{y}, 2x, 2z$	$\frac{1, -1, 2z}{2}$	$-(x+y), -\frac{1-2y, -1}{2}$	$\frac{1+(x-y), -(x+y), -1}{2}$	0, 0, 0	$\frac{1-2y, -1+2x, 0}{2}$
$\frac{1-y, x, 1-z}{2}$	$-\frac{1+(x+y), -(x-y), -1+2z}{2}$	$-\frac{(x-y), 1-(x+y), -1+2z}{2}$	$-\frac{1, 1, 2z}{2}$	$2y, 2\bar{x}, 2z$	$-\frac{1-(x-y), -(x+y), -1}{2}$	$x+y, \frac{1-(x-y), -1}{2}$	$-\frac{1+2y, 1-2x, 0}{2}$	0, 0, 0

จากแผนภาพแพทเทอร์สัน $P(u, v, 0)$ กับ $P(u, v, 0.5)$ ที่ตำแหน่ง $(0.5, 0.5, 0)$ และ $(0.5, 0.5, 0.5)$ มีค่าฟังก์ชันแพทเทอร์สันสูง ซึ่งสอดคล้องกับเส้นฮาร์คเกอร์ที่คาดไว้นั้นเอง ดังนั้น จึงได้ว่าค่า z ของตำแหน่ง (xyz) ของอะตอมฮาฟเนียม มีค่าเป็นไปได้คือ 0 หรือ 0.5 และ 0.25 หรือ 0.75 ตามลำดับ

และจากแผนภาพแพทเทอร์สัน, $P(u, v, 0.5)$ มีค่าฟังก์ชันแพทเทอร์สันสูงที่ตำแหน่ง $(0.4, 0.04, 0.5)$ ซึ่งจะสมนัยกับเวกเตอร์ฮาร์คเกอร์ $[x+y, \frac{1}{2} - (x-y), \frac{1}{2}]$ ดังนั้น จะได้ว่า

$$x + y = 0.4$$

และ
$$\frac{1}{2} - (x - y) = 0.04$$

ซึ่งจะได้ค่า x เท่ากับ 0.93 และ y เท่ากับ 0.47 สำหรับค่า z จะใช้วิธีแทนค่าดู โดยใช้ค่าที่ได้จากเส้นฮาร์คเกอร์ และพบว่าค่า z เท่ากับ 0.75 จะทำให้ตำแหน่งอะตอมที่ได้ สอดคล้องกับแผนภาพแพทเทอร์สัน นั่นคือตำแหน่งของอะตอม Hf_1 คือ $(0.93, 0.47, 0.75)$ นอกจากนี้ ยังมีค่าฟังก์ชันแพทเทอร์สันสูง ที่ตำแหน่ง $(0.34, 0.38, 0.5)$ ซึ่งนำมาหาตำแหน่งอะตอมได้โดยวิธีเดียวกัน และได้ว่าตำแหน่งอะตอมนั้นคือ $(0.11, 0.27, 0.50)$ โดยจะกำหนดให้เป็นตำแหน่งของอะตอม Hf_3 เพื่อสอดคล้องกับไอโซสตรัคเจอร์ (isostructure) $Nb_3As^{(12)}$ ตำแหน่งอะตอมของ Nb_3As นี้ ได้แสดงไว้ในตาราง 5-4

ตาราง 5-4 แสดงตำแหน่งอะตอมของ Nb_3As

อะตอม	x	$\sigma(x)$	y	$\sigma(y)$	z	$\sigma(z)$
Nb ₁	0.0568	0.0005	0.5361	0.0005	0.239	0.001
Nb ₂	0.1651	0.0004	0.6544	0.0005	0.730	0.001
Nb ₃	0.1024	0.0005	0.2621	0.0005	0.516	0.001
As	0.0419	0.0006	0.2714	0.0005	0.017	0.006

การหาตำแหน่งของอะตอมที่เหลือ Hf_2 และ P ทำโดยนำค่าตำแหน่งของอะตอม Hf_1 และ Hf_3 ที่ได้จากแผนภาพแพทเทอริสัน ไปคำนวณหาความหนาแน่นของอิเล็กตรอน, $\rho(xyz)$ โดยใช้โปรแกรม CSPHFOUR ในการคำนวณนี้ จะให้ x มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 1 และ y มีค่าตั้งแต่ 0 ถึง 0.5 ที่ค่า z เท่ากับ 0, 0.25, 0.5 และ 0.75 ผลลัพธ์ที่ได้ออกมา คือแผนภาพความหนาแน่นของอิเล็กตรอน 4 แผนภาพ ดังรูป 5-7 (ก), 5-7 (ข), 5-7 (ค) และ 5-7 (ง)

จากแผนภาพอิเล็กตรอน ปรากฏว่าตำแหน่งของอะตอม Hf_2 และ P อยู่ที่ (0.86, 0.16, 0.75) และ (0.04, 0.28, 0) ตามลำดับ ตาราง 5-5 แสดงตำแหน่งอะตอมของ Hf_3P

ตาราง 5-5 แสดงตำแหน่งอะตอมของ Hf_3P

อะตอม	x	y	z
Hf_1	0.93	0.47	0.75
Hf_2	0.86	0.16	0.75
Hf_3	0.11	0.27	0.50
P	0.04	0.28	0.0

5.4 การเกลลาโครงสร้าง

การเกลลาโครงสร้างที่ใช้ในงานวิจัยครั้งนี้ ได้แบ่งออกเป็น 2 ขั้นตอน สำหรับตอนแรก จะปรับเฉพาะตำแหน่งอะตอมโดยใช้วิธีของบูธ (Booth's method) ซึ่งโดยวิธีนี้ จะปรับเพียงค่า x และ y เท่านั้น เนื่องจากปรับโดยพิจารณาค่าความหนาแน่นของอิเล็กตรอนจากแผนภาพที่เป็นระนาบ xy และในการปรับนี้ จะปรับทีละค่า ซึ่งวิธีการปรับนั้นจะได้แสดงต่อไป

กำหนดให้ ρ_1 , ρ_2 และ ρ_3 เป็นค่าความหนาแน่นของอิเล็กตรอนที่อยู่ติดกันบนแผนภาพ ตามแกน x โดยที่ ρ_2 มีค่าสูงสุด ในการคำนวณค่าที่เปลี่ยนไปของตำแหน่งทางแกน x (x_m) จะให้ตำแหน่งของอะตอมอยู่ที่ x_1 ซึ่งเป็นตำแหน่งของ ρ_1 และค่า x_m คำนวณจาก

$$x_m = \frac{(\Delta\rho_2/\Delta\rho_1) - 4}{(2\Delta\rho_2/\Delta\rho_1) - 4} \quad (5-4)$$

โดยที่ $\Delta\rho_1$ เท่ากับ $\rho_1 - \rho_2$

และ $\Delta\rho_2$ เท่ากับ $\rho_1 - \rho_3$

ตำแหน่งอะตอมทางแกน x ที่ปรับแล้ว จะมีค่าเท่ากับ $x_1 + x_m$ สำหรับการปรับตำแหน่งอะตอมทางแกน y จะทำโดยวิธีเดียวกัน ผลของการปรับตำแหน่งอะตอมโดยวิธีของบูธ ได้ตำแหน่งอะตอมใหม่ ดังแสดงไว้ในตาราง 5-6 ตำแหน่งใหม่นี้จะถูกนำไปใช้ในการเกลารังสีต่อไป

ตาราง 5-6 แสดงตำแหน่งอะตอมหลังจากปรับโดยวิธีของบูธ เปรียบเทียบกับตำแหน่งเดิม

อะตอม	ตำแหน่งเดิม	ตำแหน่งที่ปรับแล้ว
Hf ₁	(0.93, 0.47, 0.75)	(0.9301, 0.4661, 0.75)
Hf ₂	(0.86, 0.16, 0.75)	(0.8583, 0.1643, 0.75)
Hf ₃	(0.11, 0.27, 0.50)	(0.1111, 0.2776, 0.50)
P	(0.04, 0.28, 0.0)	(0.0391, 0.2813, 0.0)

การเลลาโครงสร้างในตอนสุดท้าย ใช้วิธีกำลังสองน้อยที่สุด ซึ่งหลักการของวิธีนี้มีอยู่ว่า ผลรวมของผลต่างกำลังสองของค่าที่สังเกตกับค่าที่คำนวณได้จากความสัมพันธ์ที่สร้างขึ้น จะต้องมิต้าน้อยที่สุด ในที่นี้ค่าที่สังเกต คือ $|F_o|_{hkl}$ และค่าที่คำนวณจากความสัมพันธ์ที่สร้างขึ้น คือ $|F_c|_{hkl}$ ดังนั้นปริมาณที่จะต้องถูกทำให้มีค่าน้อยที่สุด (D) คือ

$$D = \sum_{hkl} w_{hkl} (|F_o|_{hkl} - |kF_c|_{hkl})^2 \quad (5-6)$$

โดยที่ w_{hkl} คือน้ำหนักทางสถิติ

k คือ แฟคเตอร์สเกลซึ่งจะเป็นตัวทำให้ $|F_c|_{hkl}$ และ $|F_o|_{hkl}$ มีค่าอยู่ในระดับเดียวกัน

ในการเลลาโครงสร้างโดยวิธีกำลังสองน้อยที่สุดนี้ จะปรับค่าพารามิเตอร์ต่าง ๆ ของ F_c เพื่อทำให้ $|F_c|_{hkl}$ มีค่าเข้าใกล้ $|F_o|_{hkl}$ มากที่สุด พารามิเตอร์ที่จะปรับ คือพารามิเตอร์สเกล (k) พารามิเตอร์ตำแหน่ง (x, y, z) พารามิเตอร์อุณหภูมิ (thermal parameter, B) และพารามิเตอร์เอ็กซ์ทิงค์ชัน (extinction parameter) สำหรับค่า $|F_o|_{hkl}$ ที่นำมาเปรียบเทียบ เพื่อเลลาโครงสร้าง มีทั้งหมด 341 ค่า

ค่าน้ำหนักทางสถิติ, w_{hkl} ที่ใช้ในการวิจัยนี้ ใช้ตามค่าของครุคแซงค์ (Cruickshank) ซึ่ง

$$w_{hkl} = \frac{1}{(a + |F_o|_{hkl} + c |F_o|_{hkl}^2)} \quad (5-7)$$

โดยที่ a เท่ากับ $2|F_o|_{\min}$

และ c เท่ากับ $2/|F_o|_{\max}$

ในการেলাโครงสร้าง จะมีเกณฑ์ในการพิจารณาโครงสร้าง โดยดูจากค่าดัชนีแห่งความถูกต้อง, R ซึ่ง

$$R = \frac{\sum_{hkl} (|F_o|_{hkl} - |F_c|_{hkl})}{\sum_{hkl} |F_o|_{hkl}} \quad (5-8)$$

ถ้าค่า R มีค่าอยู่ระหว่าง 0.1-0.15 โครงสร้างที่หาได้ถือว่าเป็นพอใช้ สำหรับค่า R ที่อยู่ระหว่าง 0.05-0.09 และ 0.03-0.05 โครงสร้างที่หาได้ถือว่าเป็นเกณฑ์ดีและดีเยี่ยมตามลำดับ (6)

การেলাโครงสร้างโดยวิธีกำลังสองน้อยที่สุดนี้ โปรแกรมที่ใช้คำนวณคือ CSPHLSQ ซึ่งขั้นตอนของการคำนวณเป็นดังนี้ คือ ครั้งแรกปรับค่าพารามิเตอร์สเกลเพียงอย่างเดียว โดยที่ค่าพารามิเตอร์สเกลก่อนปรับมีค่าเท่ากับ 10

ครั้งที่สองปรับค่าพารามิเตอร์สเกลและพารามิเตอร์ตำแหน่งของอะตอมฮาฟเนียม ทั้ง 3 ชุด โดยที่ค่าตำแหน่งของอะตอมฮาฟเนียมก่อนปรับมีค่าดังตาราง 5-6

ครั้งที่สามปรับค่าพารามิเตอร์สเกล และพารามิเตอร์ตำแหน่งของอะตอมฮาฟเนียม และฟอสฟอรัส โดยที่ค่าตำแหน่งของอะตอมฟอสฟอรัสก่อนปรับมีค่าดังตาราง 5-6

ครั้งที่สี่ปรับค่าพารามิเตอร์สเกล พารามิเตอร์ตำแหน่งของอะตอมฮาฟเนียมและฟอสฟอรัส และพารามิเตอร์อุณหภูมิแบบไอโซทรอปิก (isotropic temperature parameter, B_{iso}) ของอะตอมทุกตัว ค่า B_{iso} ของทุกอะตอมก่อนปรับ กำหนดให้มีค่าเท่ากับ 0.25 (\AA)^2

ครั้งสุดท้ายปรับพารามิเตอร์สเกล พารามิเตอร์ตำแหน่งของทุกอะตอม พารามิเตอร์อุณหภูมิแบบไอโซทรอปิก ของทุกอะตอม และพารามิเตอร์เอ็กซ์ทิงคชัน ค่าพารามิเตอร์เอ็กซ์ทิงคชันก่อนปรับ กำหนดให้มีค่าเท่ากับ 0.4

ในการেলাโครงสร้างแต่ละครั้ง จะกระทำจนกระทั่งค่าพารามิเตอร์ที่ปรับ
คอนเวิร์ท (converge) และในกรณีที่มีการปรับพารามิเตอร์นั้นอีก ในครั้งต่อไป จะนำค่าที่ปรับ
แล้ว ในครั้งก่อน มาปรับ เช่นการปรับพารามิเตอร์สเกลในครั้งที่สอง จะนำค่าพารามิเตอร์
สเกลที่ปรับแล้ว จากครั้งแรก มาปรับ

เมื่อการেলাโครงสร้างสิ้นสุดลง ปรากฏว่า ตำแหน่งอะตอมและค่า B_{iso} มีค่าดัง
แสดงไว้ใน ตาราง 5-7 ค่าพารามิเตอร์เอ็กซ์ทิงคชันมีค่าเท่ากับ 2.1 ± 0.2 สำหรับค่า
R มีค่าเท่ากับ 0.073

ตาราง 5-7 แสดงตำแหน่งอะตอมและค่า B_{iso} ที่ R มีค่าเท่ากับ 0.0728 ค่า
เบี่ยงเบนมาตรฐานอยู่ในวงเล็บ

อะตอม	x	y	z	B_{iso}
Hf ₁	0.9305 (2)	0.4656 (3)	0.7614 (11)	0.29 (5)
Hf ₂	0.8578 (2)	0.1652 (2)	0.7803 (10)	0.22 (5)
Hf ₃	0.1119 (2)	0.2780 (2)	0.5268 (11)	0.26 (5)
P	0.0428 (14)	0.2878 (15)	0.0275 (61)	1.04 (22)

นอกจากตำแหน่งและค่า B_{iso} ของอะตอมต่าง ๆ ในตาราง 5-7 ยังได้คำนวณ
ขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้าง, $|F_c|_{hkl}$ ทั้ง 341 ค่า ซึ่งค่าเหล่านี้มีค่าใกล้เคียงกับขนาด
ของแฟคเตอร์โครงสร้างสังเกต, $|F_o|_{hkl}$ มาก ดังแสดงไว้ในตาราง 5-8

ตาราง 5-8 แสดงค่า $|F_o|_{hkl}$ และ $|F_c|_{hkl}$ เมื่อสิ้นสุดการเคลือบโครงสร้าง Hf_3P

h	k	l	$ F_o $	$ F_c $	h	k	l	$ F_o $	$ F_c $
0	10	0	176.86	207.23	7	1	0	410.52	411.44
0	12	0	111.28	122.01	7	3	0	285.20	282.49
0	16	0	147.17	160.83	7	5	0	365.75	356.68
1	7	0	377.16	316.10	7	7	0	86.62	79.14
1	13	0	115.19	123.82	7	9	0	261.32	249.97
1	15	0	175.68	209.47	7	13	0	154.17	129.28
1	17	0	199.49	241.43	8	4	0	231.54	232.46
2	2	0	179.15	175.41	8	12	0	290.24	251.98
2	4	0	72.59	64.67	8	16	0	160.05	151.38
2	6	0	109.43	96.12	8	18	0	185.82	226.72
2	8	0	656.38	552.99	9	1	0	410.20	405.32
2	10	0	272.46	275.09	9	5	0	302.92	293.47
2	12	0	114.98	105.43	9	7	0	345.24	321.59
2	14	0	213.28	270.74	9	11	0	322.78	314.06
3	1	0	167.99	152.83	9	13	0	233.07	195.84
3	3	0	697.41	615.44	9	19	0	103.44	110.11
3	5	0	87.59	71.96	10	0	0	193.64	207.23
3	9	0	155.71	143.62	10	2	0	131.01	134.10
3	11	0	163.80	162.66	10	4	0	157.70	142.34
3	13	0	281.02	331.33	10	8	0	273.10	255.91
4	0	0	216.92	205.81	10	10	0	164.27	149.34
4	2	0	761.50	710.80	10	12	0	355.94	328.95
4	4	0	105.12	116.55	11	1	0	573.20	579.79
4	6	0	526.32	514.83	11	3	0	186.67	191.23
4	8	0	295.04	283.63	11	5	0	152.59	147.51
4	10	0	187.79	182.10	11	7	0	149.25	126.04
4	12	0	239.56	243.91	11	9	0	196.28	174.74
4	14	0	154.07	163.31	11	11	0	146.32	124.87
4	16	0	229.58	295.38	11	21	0	135.81	160.17
5	1	0	54.34	50.69	12	0	0	114.39	122.02
5	3	0	120.67	125.13	12	2	0	155.47	169.82
5	5	0	705.37	615.96	12	4	0	152.95	150.49
5	7	0	195.76	191.94	12	6	0	295.78	298.51
5	17	0	130.88	136.04	12	10	0	133.35	118.01
5	21	0	138.89	171.87	12	18	0	133.97	143.62
6	2	0	355.77	381.77	13	7	0	203.50	187.09
6	4	0	106.22	94.18	13	9	0	241.47	210.19
6	6	0	184.71	190.59	13	17	0	191.76	185.09
6	8	0	100.22	83.40	14	6	0	276.42	287.56
6	10	0	450.36	408.58	14	10	0	142.72	118.87
6	16	0	248.62	286.35	14	14	0	318.24	274.23

h	k	ℓ	$ F_o $	$ F_c $
15	3	0	372.07	383.63
15	5	0	110.70	106.06
15	7	0	259.55	250.86
16	0	0	156.99	160.82
16	4	0	86.50	92.31
16	6	0	172.62	158.59
0	7	1	251.26	259.98
0	9	1	101.35	110.14
0	10	1	107.241	118.64
0	11	1	150.50	171.86
0	13	1	224.96	270.45
1	3	1	475.10	424.77
1	7	1	134.81	135.44
1	8	1	211.92	219.72
1	9	1	96.23	106.65
1	11	1	144.74	170.39
2	2	1	65.02	67.21
2	3	1	459.21	447.99
2	4	1	223.47	229.16
2	5	1	124.31	123.29
2	7	1	184.30	182.00
2	9	1	345.01	318.40
2	10	1	263.29	268.36
2	11	1	131.94	156.37
2	13	1	139.74	164.39
3	0	1	171.18	171.45
3	1	1	130.50	137.34
3	2	1	651.33	619.30
3	3	1	175.00	204.56
3	6	1	133.51	144.72
3	7	1	137.45	146.50
3	8	1	340.82	287.71
3	9	1	126.43	118.70
3	10	1	193.40	170.08
3	11	1	180.19	186.62
3	12	1	206.40	243.69
4	0	1	352.99	323.00
4	1	1	354.10	323.91
4	2	1	121.86	139.44
4	3	1	76.84	74.19
4	5	1	86.46	83.30
4	6	1	280.72	286.78
4	7	1	111.83	114.03
4	9	1	141.67	121.41
4	10	1	149.34	136.80

h	k	ℓ	$ F_o $	$ F_c $
5	1	1	115.60	131.11
5	4	1	116.54	120.63
5	5	1	247.29	255.65
5	6	1	107.98	97.78
5	7	1	285.97	288.79
5	8	1	142.22	144.56
5	10	1	255.64	249.53
5	12	1	293.36	284.03
5	13	1	136.47	138.52
6	1	1	229.30	224.94
6	2	1	214.58	210.21
6	3	1	264.11	279.81
6	5	1	78.50	87.14
6	6	1	268.54	279.03
6	7	1	128.22	116.78
6	8	1	132.43	134.80
6	9	1	410.69	368.02
6	12	1	145.40	129.53
6	13	1	217.82	199.12
7	0	1	242.14	259.98
7	1	1	214.41	225.63
7	2	1	348.83	363.79
7	3	1	236.21	221.85
7	4	1	216.60	230.87
7	5	1	85.66	81.79
7	8	1	253.61	265.18
7	9	1	134.07	125.47
7	13	1	205.33	194.44
7	14	1	245.06	250.20
8	0	1	75.40	81.56
8	1	1	76.40	73.71
8	2	1	333.57	340.07
8	3	1	185.78	195.01
8	4	1	213.73	231.29
8	5	1	315.96	313.73
8	7	1	404.68	383.91
8	8	1	143.15	142.50
8	10	1	127.37	119.18
8	15	1	166.33	164.67
9	0	1	111.31	110.14
9	1	1	112.90	114.73
9	2	1	175.60	181.03
9	3	1	137.84	149.45
9	4	1	352.11	327.89
9	7	1	135.89	131.04

h	k	ℓ	$ F_o $	$ F_c $	h	k	ℓ	$ F_o $	$ F_c $
9	8	1	103.59	92.58	1	9	2	145.82	152.20
9	9	1	247.35	246.60	1	13	2	203.04	225.63
10	0	1	123.39	118.63	2	2	2	352.30	388.61
10	4	1	107.01	98.26	2	6	2	468.73	412.59
10	5	1	148.61	142.20	2	10	2	338.13	339.87
10	6	1	107.59	93.09	3	0	2	209.66	215.37
10	7	1	166.58	152.81	3	1	2	406.74	449.65
10	8	1	184.37	175.45	3	3	2	76.13	78.65
10	10	1	147.01	125.92	3	7	2	276.19	287.21
10	15	1	270.31	242.58	3	15	2	312.87	375.82
11	0	1	163.54	171.85	4	0	2	143.55	170.41
11	2	1	139.62	140.53	4	2	2	81.31	84.48
11	4	1	285.67	294.09	4	4	2	344.78	345.31
11	5	1	201.92	194.76	4	5	2	198.49	215.48
11	8	1	240.74	225.78	4	6	2	456.36	482.19
11	14	1	184.72	167.77	4	7	2	142.71	137.41
12	4	1	216.78	228.33	4	8	2	179.01	162.28
12	5	1	228.29	226.78	4	12	2	243.14	239.90
12	6	1	182.80	176.90	4	16	2	192.28	234.07
12	9	1	248.99	229.94	5	0	2	128.25	137.63
12	12	1	147.35	120.85	5	1	2	166.29	167.43
13	0	1	244.24	270.45	5	2	2	81.17	76.08
13	1	1	110.15	107.36	5	3	2	594.84	619.67
13	2	1	178.90	188.64	5	5	2	422.69	439.06
13	4	1	118.39	122.09	5	9	2	309.74	316.28
13	5	1	135.49	130.75	5	11	2	312.82	257.22
13	10	1	291.98	266.49	6	0	2	305.89	320.88
13	11	1	169.50	146.58	6	1	2	153.50	146.02
14	0	1	169.64	180.06	6	4	2	108.93	105.59
14	1	1	127.70	122.00	6	5	2	98.35	101.01
14	2	1	117.33	110.16	6	8	2	249.77	236.89
14	3	1	239.80	248.54	7	1	2	338.27	337.00
15	1	1	162.11	158.13	7	3	2	258.55	262.90
15	7	1	126.88	118.97	7	11	2	207.21	182.99
15	10	1	174.45	156.25	8	0	2	244.71	247.59
16	3	1	174.99	179.78	8	2	2	104.17	102.23
16	11	1	178.41	156.37	8	6	2	452.92	413.51
17	0	1	221.70	242.44	9	1	2	194.17	189.74
17	4	1	152.85	150.43	9	2	2	138.42	134.27
0	4	2	204.73	170.40	9	11	2	496.20	429.44
0	5	2	165.13	137.63	10	0	2	367.85	406.11
0	6	2	328.52	320.88	10	1	2	117.71	107.68
0	8	2	236.27	247.59	10	2	2	382.89	403.80
0	10	2	347.50	406.11	10	4	2	272.51	269.38
1	7	2	341.32	317.21	10	8	2	250.93	232.18

h	k	ℓ	$ F_O $	$ F_C $
11	7	2	186.39	175.15
11	13	2	270.68	227.26
12	0	2	189.81	187.58
12	2	2	177.62	180.96
12	4	2	233.59	207.76
12	6	2	208.02	172.10
12	8	2	304.99	275.18
13	1	2	282.51	287.95
14	4	2	230.98	231.16
14	6	2	226.45	225.06
15.	7	2	265.80	255.71
0	1	3	171.53	152.83
0	4	3	376.09	321.78
0	7	3	338.99	347.22
0	13	3	201.25	231.63
1	3	3	80.99	80.45
1	4	3	501.88	475.85
1	6	3	268.45	235.28
1	7	3	130.79	112.71
1	9	3	140.47	167.42
1	14	3	206.00	235.10
2	0	3	139.42	144.93
2	1	3	65.01	72.10
2	2	3	197.21	237.78
2	3	3	323.01	375.34
2	4	3	345.23	370.54
2	7	3	309.30	308.59
2	9	3	288.15	280.86
2	12	3	164.21	177.38
3	0	3	128.13	126.86
3	1	3	216.58	242.31
3	4	3	150.97	159.52
3	6	3	222.14	238.83
3	8	3	166.37	155.58
3	9	3	284.73	260.76
3	10	3	195.77	171.59
3	12	3	261.87	267.40
4	0	3	296.33	321.78
4	1	3	329.43	355.82
4	2	3	85.94	77.07
4	3	3	256.40	250.81
4	6	3	192.72	198.41

h	k	ℓ	$ F_O $	$ F_C $
5	1	3	93.89	95.54
5	2	3	156.36	175.47
5	5	3	177.39	193.49
5	7	3	219.77	227.65
5	12	3	281.50	250.04
6	1	3	179.70	191.53
6	3	3	89.98	100.80
6	6	3	218.47	243.29
6	9	3	471.36	450.55
6	12	3	236.91	206.56
7	0	3	315.21	347.22
7	1	3	196.51	212.55
7	2	3	287.55	279.32
7	3	3	347.72	366.56
7	4	3	117.15	121.37
7	7	3	149.50	132.46
7	8	3	166.76	159.59
7	14	3	237.61	230.46
8	0	3	145.10	141.05
8	2	3	194.18	203.01
8	3	3	182.90	170.12
8	5	3	430.52	427.54
8	7	3	262.54	223.26
8	8	3	260.38	244.21
9	0	3	113.30	107.50
9	2	3	119.43	112.83
9	3	3	195.76	190.76
9	4	3	201.62	192.66
9	6	3	144.86	129.19
9	9	3	199.57	185.54
10	7	3	167.94	152.16
11	2	3	287.14	272.91
11	4	3	235.03	221.13
11	5	3	304.04	291.83
11	8	3	308.34	275.38
13	0	3	263.69	231.64
13	5	3	182.39	171.85