# การหาโครงสร้างของไตรฮาฟเนียมฟอสไฟด์

# โดยการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์

นายวิวัฒน์ พัฒนสิน

004843

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต

ภาควิชาฟิสิกส์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พ.ศ. 2523

i 17394600

# STRUCTURE DETERMINATION OF TRIHAFNIUM PHOSPHIDE BY X-RAY DIFFRACTION

Mr. Viwat Patanasin

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements

for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1980

| | |
|---|---|
| หัวข้อวิทยานิพนธ์ | การหาโครงสร้างของไดรอาฟเนียมฟอสไฟด์ โดยการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ |
| โดย | นายวิวัฒน์ พัฒนสิน |
| ภาควิชา | ฟิสิกส์ |
| อาจารย์ที่ปรึกษา | ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ศรีนวล ถนอมกุล |

---

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้นับวิทยานิพนธ์ฉบับนี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต

.....คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย

(รองศาสตราจารย์ ดร.สุประดิษฐ์ บุนนาค)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ

(รองศาสตราจารย์ สุพนิจ พราหมทัศ)

..... กรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ศรีนวล ถนอมกุล)

..... กรรมการ

(ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.พัฒนะ ภวะนันท์)

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

หัวข้อวิทยานิพนธ์ การหาโครงสร้างของไตรฮาฟเนียมฟอสไฟด์โดยการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์
ชื่อนิสิต นายวิวัฒน์ พัฒนสิน
อาจารย์ที่ปรึกษา ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร.ศรีนวล ถนอมกุล
ภาควิชา ฟิสิกส์
ปีการศึกษา 2522

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

## บทคัดย่อ

การวิจัยหาโครงสร้างของไตรฮาฟเนียมฟอสไฟด์ , $Hf_3P$ ได้อาศัยวิธีการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ บันทึกความเข้มของรังสีเอ็กซ์ที่เลี้ยวเบนด้วยภาพถ่ายแบบไวซ์เซนเบอร์ก และวัดความเข้มด้วยตา โดยเปรียบเทียบกับความเข้มมาตรฐานที่สร้างขึ้น มิติของหน่วยเซลล์อย่างละเอียดหาได้จากการถ่ายภาพผลึกผง ซึ่งใช้ซิลิกอนเป็นสารมาตรฐาน ข้อมูลทางผลึกวิทยาของ $Hf_3P$ มีค่าดังนี้

| | |
|---|---|
| ระบบผลึก | เททราโกนอล |
| a | 10.6671 ± 0.0004 Å |
| c | 5.2919 ± 0.0002 Å |
| หมู่สมมาตร | $P4_2/n$ |
| สัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงเส้น ($\mu$) | 1093 $(ซ.ม.)^{-1}$ |
| จำนวนโมเลกุล/หน่วยเซลล์ ($Z$) | 8 |
| ความหนาแน่นจากการคำนวณ ($D_c$) | 12.49 กรัม $(ซ.ม.)^{-3}$ |
| ความหนาแน่นจากการทดลอง ($D_m$) | 12.31 กรัม $(ซ.ม.)^{-3}$ |

ตำแหน่งของอะตอมหนัก $Hf_1$ และ $Hf_3$ หาได้จากแผนภาพแพทเทอร์สัน ซึ่งคำนวณจากจุดสะท้อน 341 จุด ส่วนตำแหน่งของอะตอมที่เหลือหาจากแผนภาพความหนาแน่นของอิเลคตรอน ซึ่งค่าเฟสได้จากตำแหน่งของ $Hf_1$ และ $Hf_3$ การเกลาโครงสร้างโดยวิธีกำลังสองน้อยที่สุด

ใช้จุดสะท้อนชุดเดิม ได้ค่า R เท่ากับ 0.073 ตำแหน่งอะตอม ซึ่งมีค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานอยู่ในวงเล็บ มีค่าดังนี้

| | x | y | z |
|---|---|---|---|
| $Hf_1$ | 0.9305 (2) | 0.4656 (3) | 0.7614 (11) |
| $Hf_2$ | 0.8578 (2) | 0.1652 (2) | 0.7803 (10) |
| $Hf_3$ | 0.1119 (2) | 0.2780 (2) | 0.5268 (11) |
| P | 0.0428 (14) | 0.2878 (15) | 0.0275 (61) |

โครงสร้างของ $Hf_3P$ เป็นแบบ $Ti_3P$ จำนวนอะตอมข้างเคียงของ $Hf_1$, $Hf_2$, $Hf_3$ และ P มีค่าเท่ากับ 13, 14, 12 และ 9 ตามลำดับ อะตอมข้างเคียงทุกชุดจัดตัวประกอบกันในลักษณะรูปหลายเหลี่ยม มี $Hf_1$ (หรือ $Hf_2$ หรือ $Hf_3$ หรือ P) อยู่ประมาณศูนย์กลางของรูปหลายเหลี่ยมนั้น

| | |
|---|---|
| Thesis Title | Structure Determination of Trihafnium Phosphide by X-Ray Diffraction |
| Name | Mr. Viwat Patanasin |
| Thesis Advisor | Assistant Professor Srinuan Thanomkul Dr. Ing. |
| Department | Physics |
| Academic Year | 1979 |


## Abstract

The structure investigation of trihafnium phosphide, $Hf_3P$ was determined by X-Ray Diffraction method. The intensities of diffracted X-Ray were recorded by Weissenberg photographs and visually measured by comparing with a constructed standard wedge. The accurate cell dimensions were determined by the powder photographing technique with silicon as the internal standard substance. The crystallographic data of $Hf_3P$ is as follows

| | |
|---|---|
| crystal | tetragonal |
| a | $10.6671 \pm 0.0004$ Å |
| c | $5.2919 \pm 0.0002$ Å |
| space group | $P4_2/n$ |
| linear absorption coefficient ($\mu$) | 1093 $(cm.)^{-1}$ |
| molecules/unit cell (Z) | 8 |
| calculated density ($D_c$) | 12.49 $g.cm.^{-3}$ |
| measured density ($D_m$) | 12.31 $g.cm.^{-3}$ |

The positions of heavy atoms, $Hf_1$ and $Hf_3$ were obtained from the calculated Patterson maps of 341 reflections. The other atomic positions were then determined from the electron density maps with phases from $Hf_1$ and $Hf_3$. The least-squares refinement based on the same set of reflections yielded the R-value of 0.073 . The atomic positions with standard deviations in the brackets are as follows

| | x | y | z |
|---|---|---|---|
| $Hf_1$ | 0.9305 (2) | 0.4656 (3) | 0.7614 (11) |
| $Hf_2$ | 0.8578 (2) | 0.1652 (2) | 0.7803 (10) |
| $Hf_3$ | 0.1119 (2) | 0.2780 (2) | 0.5268 (11) |
| P | 0.0428 (14) | 0.2878 (15) | 0.0275 (61) |

The structure of $Hf_3P$ belongs to $Ti_3P$-type. The numbers of the nearest neighbours of $Hf_1$, $Hf_2$, $Hf_3$ and P are 13, 14, 12 and 9 respectively. Each set of the nearest neighbours forms a polyhedron with $Hf_1$ (or $Hf_2$ or $Hf_3$ or P) sitting roughly at its center.

หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

# กิตติกรรมประกาศ

วิทยานิพนธ์นี้สำเร็จลงได้ด้วยความกรุณาของอาจารย์ ผศ.ดร.ศรีนวล ถนอมกุล ซึ่งให้การปรึกษา คำแนะนำ และความช่วยเหลือ ในทุกด้านอย่างดียิ่ง จึงขอขอบพระคุณท่าน ไว้ ณ ที่นี้

การวิจัยครั้งนี้ได้รับคำแนะนำการใช้เครื่องมือในห้องปฏิบัติการรังสีเอ็กซ์ภาควิชาฟิสิกส์ จากอาจารย์ รศ. สุพนิจ พราหมทัศ และ ผศ.ดร. พัฒนะ ภวะนันท์ ผู้เขียนจึงขอบขอบพระคุณ อาจารย์ทั้งสองท่าน และขอขอบคุณทางศูนย์บริการคอมพิวเตอร์ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย ที่ได้ อนุญาตให้ใช้เครื่อง และบริการด้วยดีมาตลอด

อนึ่ง ในระหว่างการศึกษา ผู้เขียนได้รับทุนการศึกษาจากโครงการพัฒนามหาวิทยาลัย จึงขอขอบพระคุณต่อโครงการ ฯ ไว้ ณ ที่นี้ด้วย

สารบาญ

หน้า


บทคัดย่อ ..... ฆ

กิตติกรรมประกาศ ..... ช

รายการตารางประกอบ ..... ญ

รายการรูปประกอบ ..... ฏ

บทที่

1. บทนำ ..... 1

2. ทฤษฎีการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์และทฤษฎีการหาโครงสร้าง ..... 3

2.1 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ ..... 3

2.1.1 การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ตามเงื่อนไขของลาวอี ... 3

2.1.2 กฎของแบรกก์ ..... 6

2.1.3 แลททิสส่วนกลับ ..... 7

2.2 การถ่ายภาพผลึกเดี่ยว ..... 10

2.2.1 ภาพถ่ายแบบผลึกหมุน ..... 11

2.2.2 ภาพถ่ายแบบไวซ์เซนเบอร์ก ..... 13

2.3 การหาโครงสร้างผลึก ..... 20

2.3.1 แฟคเตอร์โครงสร้างและความหนาแน่นอิเลคตรอน . 20

2.3.2 การแก้ปัญหาเฟสโดยฟังชันแพทเทอร์สัน ..... 23

3. การขาดหายไปของจุดสะท้อนเนื่องจากหมู่สมมาตร ..... 26

3.1 การขาดหายไปเนื่องจากแลททิสแบบนอนพริมิทีพ ..... 26

3.1.1 แลททิสแบบ A, แบบ B และแบบ C ..... 29


หอสมุดกลาง สถาบันวิทยบริการ จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

หน้า


3.1.2 แลททิสแบบ I ..... 30

3.1.3 แลททิสแบบ F ..... 32

3.1.4 แลททิสแบบ R ..... 33

3.2 การขาดหายไปเนื่องจากระนาบเลื่อน ..... 35

3.2.1 ระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนตามแกน ..... 38

3.2.2 ระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนแบบ n ..... 39

3.2.3 ระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนแบบ d ..... 41

3.3 การขาดหายไปเนื่องจากแกนเกลียว ..... 44

4. การทดลอง ..... 47

4.1 การหาค่าความหนาแน่นของสารประกอบไตรฮาฟเนียม ฟอสไฟด์ ..... 47

4.2 เลือกผลึกเดี่ยวและติดตั้งผลึก ..... 47

4.2.1 เลือกผลึกเดี่ยว ..... 47

4.2.2 การติดตั้งผลึก ..... 49

4.3 การปรับแกน ..... 50

4.4 การถ่ายภาพแบบออสซิเลชัน ..... 53

4.5 การถ่ายภาพแบบไวซ์เซนเบอร์ก ..... 55

4.6 การหาค่ามิติของเซลล์ a, b และ $\gamma^*$ ..... 60

4.7 การตรวจสอบหมู่สมมาตร ..... 61

4.8 การวัดความเข้มของจุดสะท้อนต่าง ๆ บนฟิล์ม ..... 64

4.9 การถ่ายภาพผลึกผง ..... 66

หน้า

5. การคำนวณหาโครงสร้างของผลึก ..... 69
5.1 การคำนวณค่ามิติของหน่วยเซลล์อย่างละเอียด ..... 69
5.2 การคำนวณขนาดของแฟคเตอร์โครงสร้าง ..... 70
5.2.1 การหาค่าสัมประสิทธิ์การดูดกลืนเชิงเส้น ..... 71
5.2.2 การกำหนดค่าดัชนีของระนาบที่ปิดล้อมผลึก ..... 73
5.3 การหาตำแหน่งอะตอม ..... 81
5.4 การเกลาโครงสร้าง ..... 92
6. สรุปและวิจารณ์ ..... 102
เอกสารอ้างอิง ..... 126
ประวัติผู้เขียน ..... 128

# รายการตารางประกอบ


| ตาราง | | หน้า |
|---|---|---|
| 3-1 | แสดงชนิดของการเลื่อนแบบต่าง ๆ ..... | 36 |
| 3-2 | แสดงเงื่อนไขการเกิดจุดสะท้อนเนื่องจากระนาบเลื่อน ..... | 43 |
| 3-3 | แสดงเงื่อนไขการเกิดจุดสะท้อนเนื่องจากแกนเกลียว ..... | 46 |
| 4-1 | แสดงการหาค่า c ..... | 55 |
| 4-2 | แสดงเวลาที่ใช้ถ่ายและชนิดของแผ่นกั้นระหว่างฟิล์ม ของฟิล์มแต่ละชุด .... | 56 |
| 4-3 | แสดงค่ามุม $\mu_\ell$ และ $S_\ell$ ..... | 57 |
| 4-4 | แสดงการคำนวณหาค่า a ..... | 60 |
| 4-5 | แสดงเงื่อนไขต่าง ๆ ของการเกิดจุดสะท้อน ของผลึก $Hf_3P$ ..... | 64 |
| 4-6 | แสดงค่า S ของเส้นต่าง ๆ ในรูป 4-10 ..... | 67 |
| 5-1 | แสดงการหาค่า $p_i$ ..... | 72 |
| 5-2 | แสดงค่าดัชนีมิลเลอร์ของระนาบที่บีดล้อมผลึก และระยะจากจุดกำเนิดถึงระนาบ (r) ..... | 80 |
| 5-3 | แสดงเวคเตอร์ฮาร์คเกอร์ ที่ได้จากโคออดิเนทของตำแหน่งเทียบเท่าของหมู่สมมาตร $P4_2/n$ เมื่อจุดกำเนิดอยู่ $\bar{1}$ ..... | 82 |
| 5-4 | แสดงตำแหน่งอะตอมของ $Nb_3As$ ..... | 87 |
| 5-5 | แสดงตำแหน่งอะตอมของ $Hf_3P$ ..... | 92 |
| 5-6 | แสดงตำแหน่งอะตอมหลังจากปรับโดยวิธีบูธ เปรียบเทียบกับตำแหน่งเดิม .. | 93 |
| 5-7 | แสดงตำแหน่งของอะตอมและค่า $B_{iso}$ ที่ R มีค่าเท่ากับ 0.0728 ..... | 96 |
| 5-8 | แสดงค่า $\|F_o\|_{hk\ell}$ และ $\|F_c\|_{hk\ell}$ เมื่อสิ้นสุดการเกลาโครงสร้าง $Hf_3P$ | 98 |

ตาราง หน้า


6-1 (ก) แสดงข้อมูลต่าง ๆ ของผลึก $Hf_3P$ ..... 102

(ข) แสดงตำแหน่งของอะตอมฮาฟเนียม และฟอสฟอรัสที่ได้จากการเกลาครั้งสุดท้าย ..... 103

6-2 (ก) แสดงตำแหน่งของอะตอมต่าง ๆ ในรูป 6-2 ..... 106

(ข) แสดงระยะและมุมระหว่างอะตอมต่าง ๆ ที่ล้อมรอบ $Hf_1$ ในรูป 6-2 ..... 107

6-3 (ก) แสดงตำแหน่งของอะตอมต่าง ๆ ในรูป 6-3 ..... 111

(ข) แสดงระยะและมุมระหว่างอะตอมต่าง ๆ ที่ล้อมรอบ $Hf_2$ ในรูป 6-3 ..... 112

6-4 (ก) แสดงตำแหน่งของอะตอมต่าง ๆ ในรูป 6-4 ..... 117

(ข) แสดงระยะและมุมระหว่างอะตอมต่าง ๆ ที่ล้อมรอบ $Hf_3$ ในรูป 6-4 ..... 118

6-5 (ก) แสดงตำแหน่งของอะตอมต่าง ๆ ในรูป 6-5 ..... 122

(ข) แสดงระยะและมุมระหว่างอะตอมต่าง ๆ ที่ล้อมรอบ P ในรูป 6-5 ..... 123

# รายการรูปประกอบ


| รูป | | หน้า |
|---|---|---|
| 2-1 | แสดงการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ โดยพิจารณาจุดแลททิสในแกน a ..... | 4 |
| 2-2 | แสดงการเลี้ยวเบนของรังสีเอ็กซ์ตามเงื่อนไขของลาวอี ใน 3 มิติ ..... | 6 |
| 2-3 | แสดงการสะท้อนรังสีเอ็กซ์โดยชุดระนาบของผลึก ..... | 7 |
| 2-4 | แสดงรูปสามเหลี่ยมมุมฉากที่เขียนจากสมการ (2-8) ..... | 8 |
| 2-5 | แสดงทิศทางรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบ และสะท้อนกับผลึก ตามกฎของแบรกก์ ..... | 9 |
| 2-6 | แสดงหน่วยเซลล์ของแลททิสส่วนกลับบนหน่วยเซลล์แบบออโธรอมบิค ..... | 10 |
| 2-7 | แสดงการถ่ายภาพแบบผลึกหมุนโดยมี $\vec{c}$ เป็นแกนหมุน ..... | 11 |
| 2-8 | แสดงแนวของจุดสะท้อนบนภาพถ่ายแบบผลึกหมุน ..... | 13 |
| 2-9 | แสดงการติดตั้งที่กั้นเลย์เออร์ สำหรับการถ่ายภาพแบบไวซ์เซนเบอร์ก เลย์เออร์ที่ศูนย์ ..... | 14 |
| 2-10 | แสดงการถ่ายภาพแบบไวซ์เซนเบอร์ก เลย์เออร์ที่ $\ell$ ..... | 15 |
| 2-11 | แสดงตัวอย่างภาพถ่ายแบบไวซ์เซนเบอร์ก เลย์เออร์ที่ศูนย์ ..... | 17 |
| 2-12 | แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $\xi_h$ กับ $y_h$ ..... | 18 |
| 2-13 | แสดงผลรวมของแฟคเตอร์การกระเจิง ..... | 21 |
| 2-14 | แสดงความสัมพันธ์ระหว่างตำแหน่งอะตอมในสเปสของผลึก กับค่าพีคของฟังชันแพทเทอร์สันในสเปสแพทเทอร์สัน ..... | 24 |
| 3-1 | แสดงหน่วยเซลล์แบบพริมิทีพและแบบนอนพริมิทีพ ในแลททิสเดียวกัน ..... | 27 |
| 3-2 | แสดงแลททิสแบบ C ซึ่งได้แสดงหน่วยเซลล์แบบพริมิทีพไว้ด้วย ..... | 29 |
| 3-3 | แสดงแลททิสแบบ I ซึ่งแสดงหน่วยเซลล์แบบพริมิทีพไว้ด้วย ..... | 31 |
| 3-4 | แสดงแลททิสแบบ F ซึ่งแสดงหน่วยเซลล์แบบพริมิทีพไว้ด้วย ..... | 32 |
| 3-5 | แสดงแลททิสแบบ R ซึ่งแสดงหน่วยเซลล์แบบพริมิทีพไว้ด้วย ..... | 34 |

รูป หน้า


3-6 แสดงการปฏิบัติของระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนตามแกน a ใน 1 มิติ ..... 37

3-7 แสดงการปฏิบัติของระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนตามแกน a ใน 2 มิติ ..... 38

3-8 แสดงการปฏิบัติของระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนแบบ n ..... 40

3-9 แสดงการปฏิบัติของระนาบเลื่อนที่มีการเลื่อนแบบ d ..... 41

3-10 แสดงการปฏิบัติของแกนเกลียว $4_2$ โดยที่แกนเกลียวนี้ขนานกับแกน c ..... 44

4-1 แสดงรูปร่างและขนาดของผลึกเดี่ยว (เป็นมิลลิเมตร) ที่ถูกเลือกนำมาใช้ในการวิจัยครั้งนี้ ..... 48

4-2 แสดงผลึกเดี่ยวที่ติดกับปลายของใยแก้ว ..... 49

4-3 แสดงการติดตั้งผลึกที่สมบูรณ์ ..... 50

4-4 (ก) แสดงตำแหน่งของอาร์คทั้งสอง ..... 51

(ข) แสดงจุดสะท้อน R และ $\overline{R}$ บนฟิล์ม โดยที่จุดทั้งสองสมนัยกับจุดแลททิสส่วนกลับ A และ $\overline{A}$ ตามลำดับ จุด R และ $\overline{R}$ นี้อยู่ห่างจากกึ่งกลางฟิล์มเป็นระยะ 45 มิลลิเมตร ..... 51

4-5 แสดงภาพถ่ายออสซิเลชันของผลึก $Hf_3P$ โดยใช้รังสีเอ็กซ์ชนิด $CuK_\alpha$ ที่ 34 kV, 20 mA เวลาที่อาบรังสี 12 ชั่วโมง ..... 54

4-6 (ก) แสดงภาพถ่ายแบบไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ศูนย์ ของ $Hf_3P$ ..... 58

(ข) แสดงภาพถ่ายแบบไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ 1 ของ $Hf_3P$ ..... 58

(ค) แสดงภาพถ่ายแบบไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ 2 ของ $Hf_3P$ ..... 59

(ง) แสดงภาพถ่ายแบบไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ 3 ของ $Hf_3P$ ..... 59

4-7 แสดงเส้น h และเส้น k ที่ลากตามแผนภาพไวซ์เซนเบอร์ก บนรูปที่ลอกมาจากภาพถ่ายแบบไวซ์เซนเบอร์ก เลย์เออร์ที่ศูนย์ ของ $Hf_3P$ ซึ่งถ่ายโดยใช้รังสีเอ็กซ์ชนิด $CuK_\alpha$ ..... 62

รูป หน้า


4-8 แสดงแลททิสส่วนกลับของผลึก $Hf_3P$ โดยแยกออกเป็นเลย์เออร์ต่าง ๆ ...

4-9 แสดงภาพถ่ายผลึกผงของ $Hf_3P$ใช้เวลาอาบรังสี $1\frac{1}{2}$ ชั่วโมง ..... 66

5-1 แสดงแบบจำลองของผลึก ระยะเป็นมิลลิเมตร ..... 73

5-2 แสดงแกนที่ผลึกหมุนรอบ หรือแกน c ภาพนี้ผลึกตั้งอยู่ที่มุม $162.6^{\circ}$ ซึ่งแกน a ตั้งฉากกับลำของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบพอดี ทิศทางของรังสีเอ็กซ์ตกกระทบพุ่งเข้ากระดาษ ..... 74

5-3 แสดงแกน $a^*$ และแกน $b^*$ ของภาพถ่ายแบบไวซ์เซนเบอร์กเลย์เออร์ที่ศูนย์ ค่า ω เท่ากับ 0-200 องศา .....

5-4 แสดงแกน $b^*$ ขณะที่ตั้งฉากกับลำของรังสีเอ็กซ์ที่ตกกระทบ ซึ่งมีค่า ω เท่ากับ 72.6 องศา .....

5-5 แสดงแกนต่าง ๆ ที่กำหนดลงในผลึกจำลอง และระนาบต่าง ๆ ที่ปิดล้อมผลึก ..... 78

5-6 (ก) แสดงแผนภาพแพทเทอร์สัน, P(u,v,0) ..... 83

(ข) แสดงแผนภาพแพทเทอร์สัน, P(u,v,0.25) ..... 84

(ค) แสดงแผนภาพแพทเทอร์สัน, P(u,v,0.5) ..... 85

5-7 (ก) แสดงแผนภาพความหนาแน่นของอิเลคตรอนที่ z = 0 ..... 88

(ข) แสดงแผนภาพความหนาแน่นของอิเลคตรอนที่ z = 0.25 ..... 89

(ค) แสดงแผนภาพความหนาแน่นของอิเลคตรอนที่ z = 0.5 ..... 90

(ง) แสดงแผนภาพความหนาแน่นของอิเลคตรอนที่ z = 0.75 ..... 91

6-1 แสดงภาพฉายของอะตอมต่าง ๆ ในหนึ่งหน่วยเซลล์ตามแกน c ..... 103

6-2 แสดงอะตอมข้างเคียงของ $Hf_1$ ..... 105

6-3 แสดงอะตอมข้างเคียงของ $Hf_2$ ..... 110

6-4 แสดงอะตอมข้างเคียงของ $Hf_3$ ..... 116

6-5 แสดงอะตอมข้างเคียงของ P ..... 121