

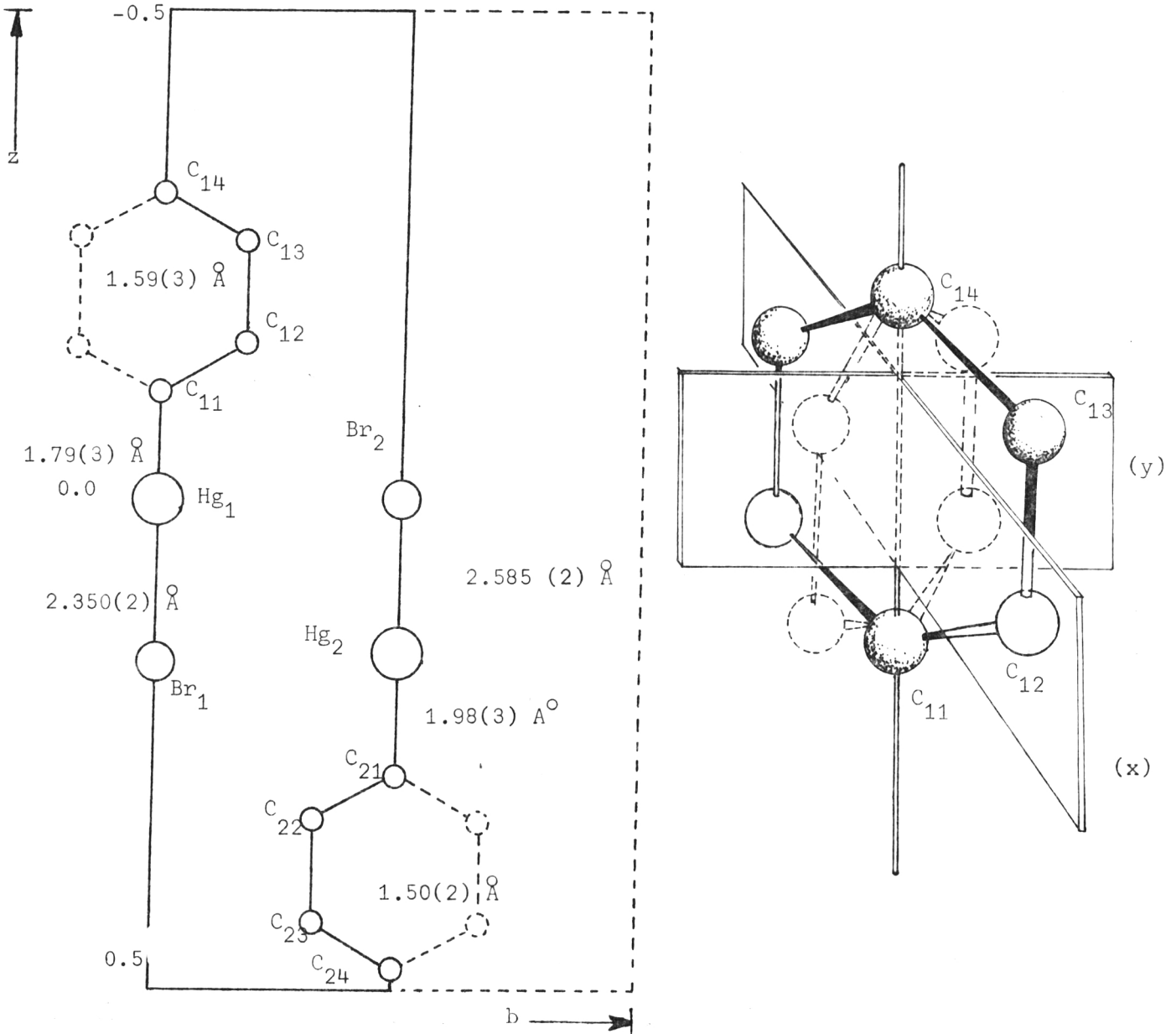
สรุป และอภิปรายผลการทดลอง

ผลจากการทดลอง เพื่อศึกษาโครงสร้างผลึก  $C_6H_5HgBr$  โดยการเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์  
สรุปเป็นข้อมูลผลึกเดี่ยวทั่วไป ดังตารางที่ 5.1

ตารางที่ 5.1 แสดงข้อมูลผลึกเดี่ยวทั่วไปของ  $C_6H_5HgBr$

ระบบผลึก	ออร์โธโรมบิก
หมู่สมมาตรสามมิติ	$C_{2mm}$
มิติของหน่วยเซลล์	$a = 7.015 \pm 0.002 \text{ \AA}$ $b = 7.0046 \pm 0.0009 \text{ \AA}$ $c = 14.449 \pm 0.003 \text{ \AA}$
$\mu$ - สัมประสิทธิ์การดูดกลืนตามเส้น สำหรับรังสีเอ็กซ์ชนิด $CuK_{\alpha}$	$476.056 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$
$\rho$ - ความหนาแน่น หาโดยวิธีการ ลอยตัวของผลึกในของเหลว เอล - เตตราโบโมซีเรน ซึ่ง มีความหนาแน่น 2.96 กรัม/มล. ที่ $25^{\circ}C$	$\approx 3.0 - 3.1 \text{ กรัม/มล.}$
$Z$ จำนวนโมเลกุลในหนึ่งหน่วยเซลล์	4 โมเลกุล/หน่วยเซลล์

ในหนึ่งหน่วยเซลล์มี 2 หน่วยย่อยสมมาตร โดยในหนึ่งหน่วยย่อยสมมาตรมีอยู่ 2 โมเลกุล คือจุดหนึ่งประกอบด้วยอะตอม  $Hg_1$ ,  $Br_1$ ,  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{13}$  และ  $C_{14}$  อีกจุดหนึ่งประกอบด้วยอะตอม  $Hg_2$ ,  $Br_2$ ,  $C_{21}$ ,  $C_{22}$ ,  $C_{23}$  และ  $C_{24}$  ดังแสดงในรูปที่ 5.1 (ก) ในระนาบวงแหวนเบนซีนทั้งสอง มีระนาบกระจกผ่านที่อะตอม  $C_{11}$ ,  $C_{14}$  กับอะตอม  $C_{21}$  และ  $C_{24}$  ตามลำดับ



รูปที่ 5.1 (ก) แสดงอะตอมในหนึ่งหน่วยย่อยสมมาตร

(ข) แสดงความสัมพันธ์ระนาบวงแหวนเบนซีนกับระนาบกระจก

จากรูป 5.1 (ก) เส้นทึบแสดงหนึ่งหน่วยของสมมาตร และความยาวพันธะ ที่แสดง ได้จากการทดลอง สำหรับความยาวพันธะ  $C_{12}-C_{13}$  กับ  $C_{22}-C_{23}$  ได้จากการคำนวณ โดยกำหนดให้ระนาบวงแหวนเบนซีนเป็นหกเหลี่ยมด้านเท่า

ในรูปที่ 5.1 (ข) แสดงสมมาตรระนาบกระจกกับระนาบวงแหวนเบนซีน เมื่อมีการเอียงตัวไป  $45^\circ$  (x) หมายถึงระนาบกระจกที่ขนานกับระนาบ YZ และ (y) เป็นระนาบกระจกที่ขนานกับระนาบ XZ ซึ่งทำมุมจากกับระนาบ YZ เส้นไขว้ปลาแสดงอะตอมที่เกิดจากระนาบกระจก

โดยอาศัยข้อมูลความเข้มของจุดสะท้อน จากวิธีการวัดด้วยตาเปรียบเทียบกับความเข้มมาตรฐานที่สร้างขึ้น ร่วมกับข้อมูลผลึกเดี่ยวทั่วไปดังตารางที่ 5.1 นำไปคำนวณโครงสร้าง โดยเริ่มจากตำแหน่งอะตอมหนัก Hg และ Br ชนิดละ 2 อะตอม ที่ได้จากแผนภาพแพทเทอรัสนำทำการปรับสเกลแฟคเตอร์ และตำแหน่งอะตอมทุกอะตอมยกเว้นอะตอม Hg ที่ตำแหน่งพิเศษ  $2a (0, 0, z)$  จนกระทั่งสิ้นสุดได้ค่าดัชนีความเชื่อถือเป็น 0.1538 เมื่อนำผลที่คำนวณที่บันทึกไว้ในเทปแม่เหล็ก ไปทำแผนภาพความหนาแน่นอิเล็กตรอน ได้ตำแหน่งอะตอมคาร์บอนอีก 4 อะตอม นำทำการปรับสเกลแฟคเตอร์ ตำแหน่งอะตอมทุกอะตอมยกเว้น Hg ที่  $0, 0, z$  จนกระทั่งสิ้นสุดได้ค่าดัชนีความเชื่อถือเป็น 0.1481 ตำแหน่งอะตอมและความเบี่ยงเบนมาตรฐาน ( $\sigma$ ) ที่เป็นผลจากการปรับตำแหน่ง แสดงไว้ในตารางที่ 5.2

ตารางที่ 5.2 แสดงตำแหน่งอะตอมและความเบี่ยงเบนมาตรฐานหลังจากปรับตำแหน่งอะตอม

อะตอม	ตำแหน่งในหมู่ สมมาตรสามมิติ	x	y	z	$\sigma(z)$
Hg <sub>1</sub>	2a	0.0	0.0	0.0	0.0
Hg <sub>2</sub>	2b	0.0	0.5	0.18331	0.00076
Br <sub>1</sub>	2a	0.0	0.0	0.1626	0.0022
C <sub>11</sub>	2a	0.0	0.0	-0.124	0.030
C <sub>14</sub>	2a	0.0	0.0	-0.344	0.017
C <sub>21</sub>	2b	0.0	0.5	0.321	0.028
C <sub>24</sub>	2b	0.0	0.5	0.528	0.018
Br <sub>2</sub>	2b	0.0	0.5	0.0044	0.0022

สำหรับตำแหน่งของอะตอม  $C_{12}$ ,  $C_{13}$ ,  $C_{22}$  และ  $C_{23}$  ได้จากการคำนวณ เนื่องจากที่ค้ำปรากฏในระนาบ  $x = 0$  ไม่ชัดเจน แต่ในระนาบ  $x = 0.12$   $x = 0.16$  มีลักษณะเด่นชัดกว่า สิ่งคาดว่าระนาบของวงแหวนเบนซีนมีการเอียงทำมุมกับระนาบ YZ จากการทดลองพบว่าที่มุม  $45^\circ$  จะสอดคล้องกับข้อมูลมากที่สุด และจากการให้ระนาบอิสระที่ไม่มีสัมมาตราบกันเอียงทำมุมต่าง ๆ ปรากฏว่าการวางตัวของระนาบอิสระในลักษณะขนานกัน จะให้ความเชื่อถือดีที่สุด ในการนี้ตำแหน่งของ  $C_{12}$ ,  $C_{13}$ ,  $C_{22}$  และ  $C_{23}$  จะเป็นตำแหน่งทั่วไป 8 f ซึ่งมี 8 ตำแหน่ง แต่อะตอมที่จะเข้าไปอยู่ในตำแหน่งเหล่านี้มี 4 อะตอม เพราะฉะนั้นค่าออกคิควแพนซีแพคเตอร์จึงเป็น  $\frac{4}{8} = .5$

ตารางที่ 5.3 แสดงตำแหน่ง  $C_{12}$ ,  $C_{13}$ ,  $C_{22}$  และ  $C_{23}$  ที่ได้จากการคำนวณ

อะตอม	ตำแหน่งในหมู่สัมมาตราบสามมิติ	x	y	z
$C_{12}$	8f	0.1392	0.1392	-0.1789
$C_{13}$	8f	0.1392	0.1392	-0.2891
$C_{22}$	8f	-0.1312	0.3688	0.3725
$C_{23}$	8f	-0.1312	0.3688	0.4763

ผลการคำนวณโครงสร้างทั้งหมดได้ค่าดัชนีความเชื่อถือเป็น 0.1419 ซึ่งอยู่ในเกณฑ์พอเชื่อถือได้ เหตุที่ค่าดัชนีความเชื่อถือไม่ต่ำกว่านี้ คาดว่าอาจเป็นเนื่องจากเหตุต่าง ๆ ดังนี้

- (1) จำนวนข้อมูลจุดสะท้อนที่สามารถเก็บได้มี 160 จุด ซึ่งอาจไม่มากพอที่จะปรับพารามิเตอร์ทั้งหมดที่แปรค่าได้จำนวน 29 พารามิเตอร์
- (2) ข้อมูลความเข้มอาจวัดไม่ดีพอ เนื่องจากวัดด้วยตาเทียบกับความเข้มมาตรฐานที่เตรียมขึ้น
- (3) อะตอมคาร์บอน 6 อะตอม ของระนาบวงแหวนเบนซีน ตามที่พบในการสังเคราะห์ฟูเรียร์ ไม่อยู่ในระนาบเดียวกัน ซึ่งพบที่ระนาบ  $x = 0.12$  และระนาบ  $x = 0.16$
- (4) การเอียงตัวของระนาบวงแหวนเบนซีน อาจพิจารณาได้ว่าเป็นผลจากอิทธิพลของความร้อน ในกรณีนี้ค่าแพคเตอร์อุณหภูมิ ควรจะมีค่ามากกว่าค่าเฉลี่ย ของทุกอะตอมที่ได้จากวิลสันพลอต

(5) จากการที่มิติของหน่วยเซลล์  $a$  และ  $b$  มีค่าใกล้เคียงกัน ประกอบกับระนาบวงแหวนเบนซีนมีการเอียงตัว  $45^\circ$  ด้วย ทำให้มีข้อสังเกตได้ว่า ผลึกนี้อาจเป็นระบบเทตระโกนัล (tetragonal) แต่เนื่องจากข้อจำกัดของผลึกที่นำมาศึกษามีการสลายตัว (decompose) จึงยังมิได้ทำการถ่ายภาพศึกษา สัมมาตรลุ่มมิติในอีกแกนหนึ่ง เพื่อการตรวจสอบนั้น

แต่อย่างไรก็ตามจากการคำนวณปรับโครงสร้างปัจจุบัน ผลก็ได้สอดคล้องกับการศึกษาทางอื่น ทำให้คาดได้ว่า ถึงหากระบบผลึกจะเป็นเทตระโกนัลก็ตามโครงสร้างโมเลกุลจะไม่ต่างไปจากนี้ ส่วนรายละเอียดเช่นความยาวพันธะระหว่างอะตอมหน้าจะแตกต่างกันบ้าง

สำหรับอะตอม H ทำการคำนวณตำแหน่ง โดยอาศัยตำแหน่งอะตอมคาร์บอน ของระนาบวงแหวนเบนซีนที่เอียงทำมุม  $45^\circ$  กับระนาบ YZ ความยาวพันธะระหว่างอะตอม C กับอะตอม H เป็น  $1.08 \text{ \AA}$  ซึ่งเป็นค่าที่ได้จากสาร  $C_6H_6$  (benzene) (Wyckoff, 1966) โดยให้ตำแหน่งของอะตอม H อยู่ในระนาบเดียวกับระนาบวงแหวนเบนซีน มุมระหว่างพันธะเป็น  $120^\circ$  ผลการคำนวณตำแหน่งได้แสดงไว้ในตารางที่ 5.4 และรูปที่ 4.17 เมื่อทำการคำนวณโครงสร้างทั้งหมด ซึ่งมี Hg 2 อะตอม Br 2 อะตอม C 8 อะตอม และ H 6 อะตอม โดยปรับค่าสเกลแพคเตอร์อย่างเดียว ให้ค่าดัชนีความเชื่อถือเป็น 0.1422

ตารางที่ 5.4 แสดงตำแหน่ง H ที่ได้จากการคำนวณ

อะตอม	ตำแหน่งในหน่วย สัมมาตรลุ่มมิติ	x	y	z
H <sub>12</sub>	8f	0.2330	0.2330	-0.1420
H <sub>13</sub>	8f	0.2330	0.2330	-0.3270
H <sub>14</sub>	2a	0.0	0.0	-0.4190
H <sub>22</sub>	8f	-0.2260	-0.2260	0.3360
H <sub>23</sub>	8f	-0.2260	-0.2260	0.5150
H <sub>24</sub>	2b	0.0	0.5	0.6030

โครงสร้างของผลึกในหนึ่งหน่วยเซลล์ ได้แสดงไว้ดังรูปที่ 5.1 เมื่อพิจารณาตามระนาบ XY ตามแนวแกน Z ในระดับความสูงที่ Z ประมาณ 0.0 - 0.25 Å เป็นอะตอม Hg กับ Br ที่ระดับความสูงขึ้นมาจากชั้นแรกประมาณ 2 Å จะเป็นระนาบวงแหวนเบนซีน และชั้นที่สามซึ่งอยู่เหนือชั้นที่สองประมาณ 2 Å จะมีระนาบวงแหวนเบนซีนอีกเช่นกัน

ถ้าพิจารณาในหนึ่งหน่วยเซลล์ ในลักษณะเป็นโมเลกุลจะพบว่าการวางตัวของโมเลกุลจะอยู่ในระนาบที่  $x = 0.0$  และ  $0.5$  เป็นแบบ 12121 .... โดยที่ระนาบวงแหวนเบนซีนของแต่ละโมเลกุลจะขนานกัน และมีตำแหน่งเหลื่อมกันเล็กน้อย ซึ่งจะใช้ปริมาณน้อยกว่าในการวางตัวแบบตรงกัน

ความสัมพันธ์ระหว่างระนาบวงแหวนเบนซีน กับองค์สัมมาตรของหมู่สัมมาตรลุ่มมิติ ได้แสดงไว้ดังรูปที่ 5.3 จากรูปที่ 5.3 นี้สามารถคำนวณระยะห่างระหว่างศูนย์กลางระนาบวงแหวนเบนซีน  $P_1$  กับ  $P_2$  ซึ่งสัมพันธ์กันเนื่องจากแกน 2 ทบเป็น  $4.96$  Å และระหว่างระนาบ  $P_1$  กับ  $P_3$  ซึ่งเป็นอิสระต่อกันได้ระยะห่างเป็น  $5.99$  Å

ความยาวพันธะระหว่างอะตอมต่าง ๆ ในระดับหน่วยโมเลกุล และค่าความเบี่ยงเบนมาตรฐานได้แสดงไว้ในรูปที่ 4.17 และเทียบผลกับที่ได้จากสารอื่น หรือในสถานะอื่นแสดงได้ในตารางที่ 5.5 เมื่อเปรียบเทียบความยาวพันธะของสาร  $C_6H_5HgBr$  ในสถานะไอและเป็นผลึก โดยใช้วิธีทางสถิติคือการกระจายปกติ (normal distribution) (Stout and Jensen, 1968) พบว่า ความยาวพันธะ  $Hg_2 - C_{21}$ ,  $C_{21} - C_{22}$  มีความแตกต่างอาจจะมีนัยสำคัญสำหรับความยาวพันธะอื่น มีความแตกต่างมีนัยสำคัญ ซึ่งพบได้ในสาร  $CH_3HgCl$  กับ  $(C_6H_5)_2Hg$  คือ ความยาวพันธะระหว่างอะตอมในสถานะไอกับรูปผลึก มีความแตกต่างอย่างมีนัยสำคัญสำหรับสารที่มีกลุ่มอัลคิล ( $C_{2n}H_{2n-1}$ ) สัมกับอะตอมหนัก ความยาวพันธะระหว่างอะตอมมีความต่างอย่างไม่มีนัยสำคัญ ในสารที่มีกลุ่มวงแหวนเบนซีนสับอยู่ เมื่ออยู่ในสถานะเดียวกัน ความยาวพันธะระหว่างอะตอมคาร์บอนในวงแหวน ส่วนใหญ่มีความต่างอย่างไม่มีนัยสำคัญ เว้นแต่ความยาวพันธะ C-C ที่ยาวที่สุดในการสาร  $C_6H_5NO_3$  กับพันธะที่สั้นที่สุดในสาร  $(C_6H_5)_4Cl_2N_2$  ที่มีความต่างอย่างมีนัยสำคัญ ซึ่งสารที่นำมาพิจารณา ใช้หลักเกณฑ์ที่ว่า สารนั้นมีอะตอม Hg, Br หรือกลุ่ม  $C_6H_5$  อย่างใดอย่างหนึ่ง หรือมีอยู่ในช่องสถานะ คือเป็นรูปผลึกกับไอหรือก๊าซ เพื่อดูการเปลี่ยนแปลงของความยาวพันธะของสารในสถานะต่างกัน กรณีที่อยู่ในสถานะเดียวกันก็พิจารณาความยาวพันธะระหว่างอะตอม เมื่ออยู่ในสารต่างชนิดกัน สารที่นำมาพิจารณาและความยาวพันธะต่าง ๆ ได้แสดงไว้ในตารางที่ 5.5

ตารางที่ 5.5 แสดงการเปรียบเทียบความยาวพันธะและมุมระหว่างพันธะของอะตอม  
ในสารต่าง ๆ ในระดับโครงสร้างโมเลกุล

สารประกอบ	Hg-Br (Å)	Hg-C (Å)	C-C (Å)	C-Hg-Br	วิธีการศึกษา
$C_6H_5HgBr$ (crystal)	$2.350 \pm 0.002^*$ $2.585 \pm 0.002$	$1.79 \pm 0.03$ $1.98 \pm 0.03$	$1.59 \pm 0.03$ $1.50 \pm 0.03$	$180^\circ$	การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์
$C_6H_5HgBr$ (vapour)	$2.435 \pm 0.004$	$2.068 \pm 0.02$	$1.42 \pm 0.01$	$180^\circ$	การเลี้ยวเบนอิเล็กตรอน
$HgBr_2(1)$ (crystal)	2.50 (ไม่ระบุค่า เพียงเบนมาตร ฐาน)	-	-	-	การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ (1)
$CH_3HgBr$ (gas)(2)	$2.406 \pm 0.005$	$2.074 \pm 0.015$	-	$180^\circ$	คลื่นไมโคร(2)
$CH_3HgCl$ (gas)(2)	-	$2.061 \pm 0.02$	-	-	คลื่นไมโคร (2)
$CH_3HgCl$ (crystal)(3)	-	$2.06 \pm 0.03$	-	-	การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์(3)
$C_2H_5HgBr(3)$	$2.51 \pm 0.03$	-	-	-	การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์(3)
$C_2H_5HgCl(3)$	-	-	-	-	"
$C_3H_7HgCl(3)$	-	$2.06 \pm 0.03$	-	-	"
$C_4H_9HgCl(3)$	-	-	-	-	"
$(C_6H_5)_2Hg(4)$	-	2.13	1.28-1.43	-	" (4)
$(C_6H_5)_2Hg$ (vapour)(5)	-	$2.092 \pm 0.005$	$1.415 \pm$ $0.006$	-	การเลี้ยวเบนอิเล็กตรอน(5)
$C_6H_5F(6)$ (gas)	-	-	$1.39 \pm 0.02$	-	" (6)

สารประกอบ	Hg-Br (Å)	Hg-C (Å)	C-C (Å)	C-Hg-Br	วิธีการศึกษา
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> NO <sub>2</sub>	-	-	1.388±0.015	-	การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์(7)
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> I (gas)	-	-	1.42±0.03	-	(8)
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> Br (gas)	-	-	1.42±0.03	-	" (8)
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> N <sub>3</sub> O (crystal)	-	-	1.446±0.002	-	การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ (9)
			1.398±0.003		
			1.374±0.003		
			1.403±0.003		
			1.400±0.002		
(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>2</sub> FeO <sub>4</sub> (crystal)	-	-	1.395	-	การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ (10)
	-	-	1.395	-	
(C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> ) <sub>4</sub> C <sub>2</sub> N <sub>2</sub>	-	-	1.371-1.391		การเลี้ยวเบนรังสีเอ็กซ์ (11)
			± 0.007		
			1.360-1.404		
			±0.007		

\* ค่าความเบี่ยงเบนมาตรฐาน คำนวณโดยอาศัยความสัมพันธ์ ดังสมการที่ 5.1 (Stout and Jensen, 1968)

$$\begin{aligned}
 \sigma_l = & \left[ (\sigma_{x1}^2 + \sigma_{x2}^2) \left( \frac{\Delta xa + \Delta yb \cos \gamma + \Delta zc \cos \beta}{l} \right)^2 \right. \\
 & + (\sigma_{y1}^2 + \sigma_{y2}^2) \left( \frac{\Delta yb + \Delta xa \cos \gamma + \Delta zc \cos \alpha}{l} \right)^2 \\
 & \left. + (\sigma_{z1}^2 + \sigma_{z2}^2) \left( \frac{\Delta zc + \Delta xa \cos \beta + \Delta yb \cos \alpha}{l} \right)^2 \right]^{1/2} \dots (5.1)
 \end{aligned}$$



โดยที่  $\sigma_{x1}$  ,  $\sigma_{x2}$  = ความเบี่ยงเบนมาตรฐานของอะตอมตัวที่ 1 และตัวที่ 2 ในทางแกน x

$$\Delta x = (x_2 - x_1)$$

$l$  = ความยาวพันธะ

$a$  = ความยาวของแกน a

ในกรณีระบบผลึกมี แกนตั้งฉากกันทั้ง 3 แกนจะเป็นดังสมการที่ (5.2)

$$\sigma_l = \left[ (\sigma_{x1}^2 + \sigma_{x2}^2) \left( \frac{\Delta xa}{l} \right)^2 + (\sigma_{y1}^2 + \sigma_{y2}^2) \left( \frac{\Delta yb}{l} \right)^2 + (\sigma_{z1}^2 + \sigma_{z2}^2) \left( \frac{\Delta zc}{l} \right)^2 \right]^{1/2} \dots (5.2)$$

สำหรับอะตอมที่พิจารณาคือ Hg, Br และ C ในผลึก  $C_6H_5HgBr$  มีตำแหน่งที่ปรบอยู่ในแกน z เท่านั้น เพราะฉะนั้น ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานจึงเป็นดังสมการที่ 5.3

$$\sigma_l = \sqrt{\sigma_{z1}^2 + \sigma_{z2}^2} \quad (5.3)$$

- (1) Verweel and Bijvoet, 1931
- (2) Gordy and Sheriden, 1954
- (3) Gradenic and Kitaigorodski, 1949
- (4) Zjulkovska, Mjasnikova and Kitaigorodski, ค่าเบี่ยงเบนมาตรฐานของพันธะ C-C ไม่ระบุ
- (5) Vilkov, Anaskin and Mamaeva, 1968
- (6) Yuzawa and Yamaha, 1953.
- (7) Wright and King, 1953
- (8) Schoppe, 1936
- (9) Urbanczyk - Lipkowska, et al. , 1979
- (10) Fusaō Takusagawa, and Thomas F.Koetzle, 1979, Acta Cryst. B35, 2888., 1980, ไม่ระบุค่าเบี่ยงเบนมาตรฐาน และกำหนดให้ระนาบวงแหวนไม่เปลี่ยนรูป (rigid hexagons)

(11) Busetti, et al., 1980 แสดงช่วงความยาวพันธะในแต่ละระนาบวงแหวนเบนซีน ความยาวพันธะระหว่างอะตอมต่าง ๆ และความเบี่ยงเบนมาตรฐาน ในหนึ่งหน่วยอสมมาตร คำนวณโดยใช้โปรแกรม CSPHDIST ผลการคำนวณแสดงไว้ในตารางที่ 5.6 มุมระหว่างพันธะคำนวณ โดยไม่พิจารณา ความเบี่ยงเบนมาตรฐานของความยาวพันธะ การคำนวณมุมใช้ กฎโคซายน์ (cosine rule) ดังสมการที่ (5.4)

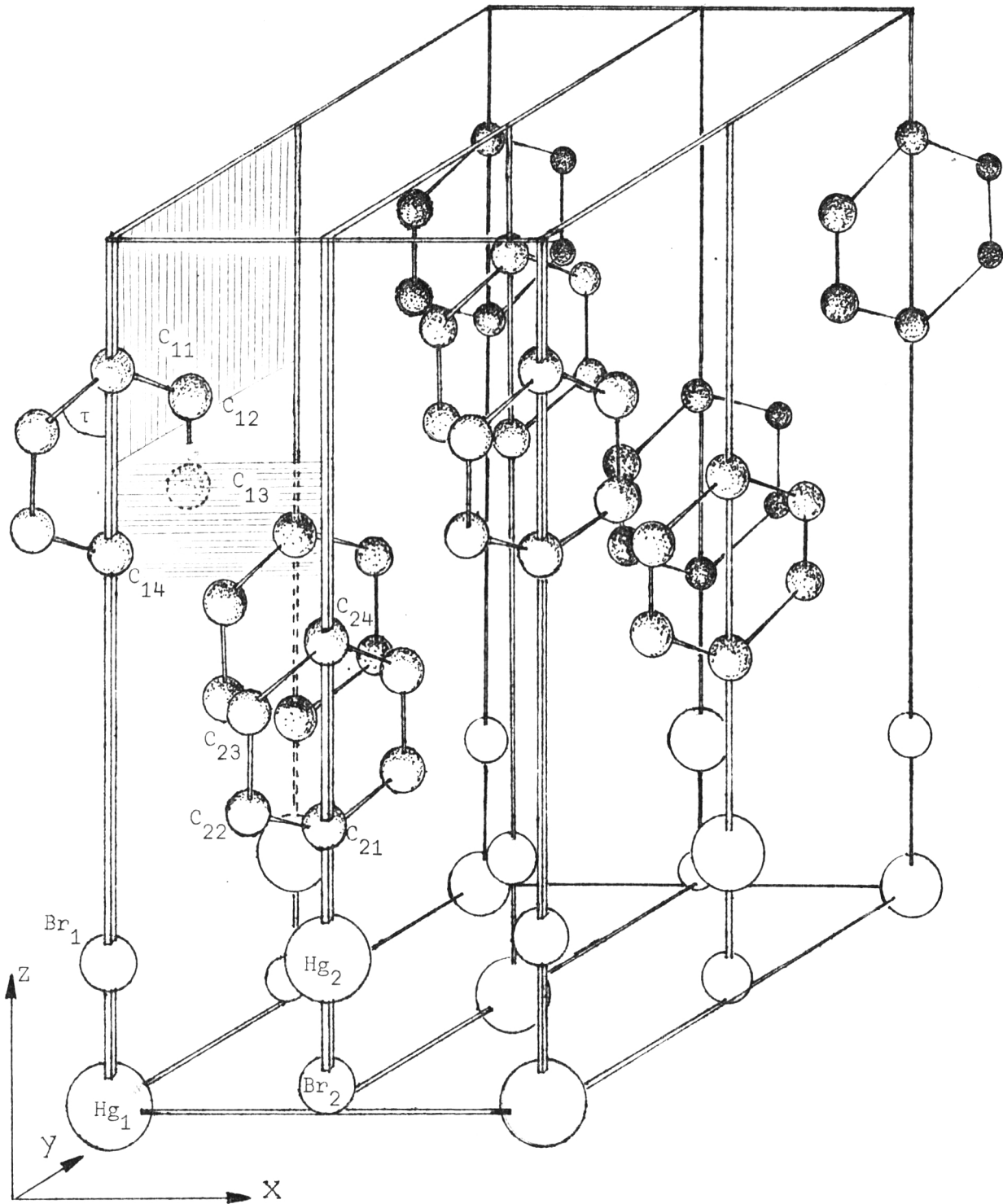
$$\cos \theta = \frac{(AB)^2 + (AC)^2 - (BC)^2}{2(AB)(AC)}$$

$$\theta = \cos^{-1} \left[ \frac{(AB)^2 + (AC)^2 - (BC)^2}{2(AB)(AC)} \right] \dots\dots\dots(5.4)$$

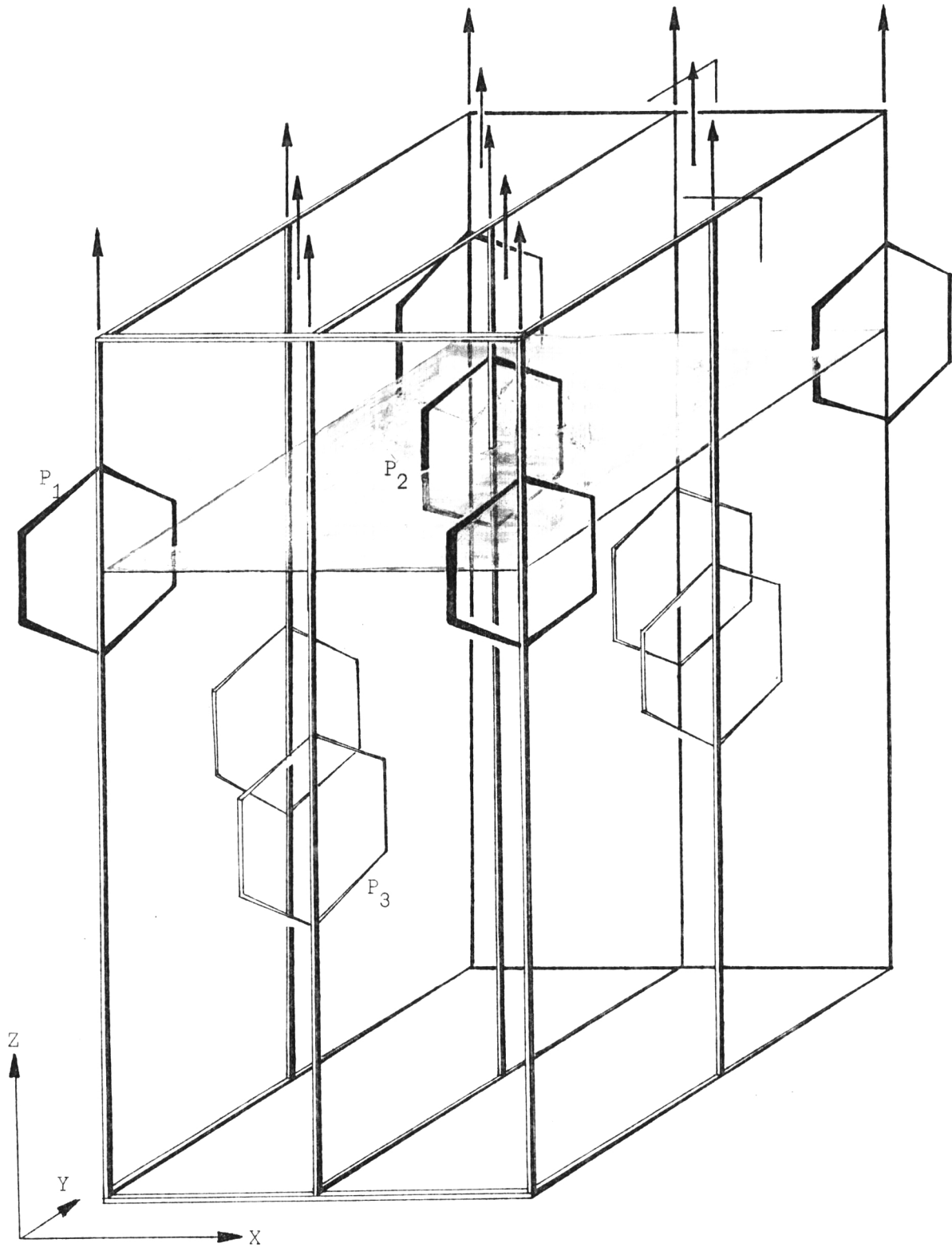
โดยที่ AB = ความยาวพันธะระหว่างอะตอม A กับอะตอม B

AB และ AC = ความยาวพันธะระหว่างอะตอม C กับ B และอะตอม C กับ A  
ตามลำดับ

ผลการคำนวณมุมระหว่างบางพันธะได้แสดงไว้ในตารางที่ 5.7



รูปที่ 5.2 แสดงรูปแบบจำลองโครงสร้างของผลึก  $C_6H_5HgBr$



รูปที่ 5.3 แสดงความสัมพันธ์ของระนาบวงแหวนเบนขึ้น และองค์ลิ่มมาตรแกน 2 ทบ ( $\uparrow$ ) และระนาบกระฉาก ( $\square$ ) ในหมู่ลิ่มมาตรสามมิติ  $C_{mm^2}$

ตารางที่ 5.6 แสดงความยาวพันธะและความเบี่ยงเบนมาตรฐานระหว่างอะตอมต่าง ๆ

ในหนึ่งหน่วยอสมมาตร

อะตอม	ความยาวพันธะ (Å)	ความเบี่ยงเบน มาตรฐาน	อะตอม	ความยาวพันธะ (Å)	ความเบี่ยงเบน มาตรฐาน
C <sub>11</sub> - C <sub>12</sub>	1.5933	0.2181	C <sub>12</sub> - C <sub>13</sub>	1.5923	0.0003
- C <sub>13</sub>	2.7587	0.3777	- C <sub>14</sub>	2.7580	0.2150
- C <sub>14</sub>	3.1845	0.5020	- Br <sub>1</sub>	9.6141	0.0316
- Br <sub>1</sub>	10.3111	0.4374	- Hg <sub>1</sub>	11.9444	0.0005
- Hg <sub>1</sub>	12.6606	0.4362	- C <sub>21</sub>	7.7226	0.3834
- C <sub>21</sub>	8.7589	0.5484	- C <sub>22</sub>	6.6788	0.0013
- C <sub>22</sub>	7.7780	0.4082	- C <sub>23</sub>	5.2356	0.0010
- C <sub>23</sub>	6.3963	0.3941	- C <sub>24</sub>	5.0239	0.2188
- C <sub>24</sub>	6.1268	0.4166	- Br <sub>2</sub>	12.1080	0.0228
- Br <sub>2</sub>	13.0752	0.2045	- Hg <sub>2</sub>	9.6058	0.0107
- Hg <sub>2</sub>	10.6072	0.3425	C <sub>13</sub> - C <sub>14</sub>	1.5929	0.1241
C <sub>14</sub> - Br <sub>1</sub>	7.1265	0.2504	- Br <sub>1</sub>	8.0415	0.0315
- Hg <sub>1</sub>	9.4765	0.2484	- Hg <sub>1</sub>	10.3644	0.0008
- C <sub>21</sub>	5.9773	0.3881	- C <sub>21</sub>	6.2564	0.3691
- C <sub>22</sub>	4.9276	0.2064	- C <sub>22</sub>	5.1477	0.0010
- C <sub>23</sub>	3.7749	0.1707	- C <sub>23</sub>	3.7524	0.0006
- C <sub>24</sub>	3.9575	0.1674	- C <sub>24</sub>	3.7817	0.1813
- Br <sub>2</sub>	10.0434	0.2057	- Br <sub>2</sub>	10.5620	0.0275
- Hg <sub>2</sub>	7.6736	0.2212	- Hg <sub>2</sub>	8.0906	0.0105
Hg <sub>1</sub> - C <sub>21</sub>	5.8076	0.3266	Br <sub>1</sub> - Hg <sub>1</sub>	2.3499	0.0319
C <sub>22</sub>	6.0408	0.0010	- C <sub>21</sub>	4.1806	0.2243

อะตอม	ความยาวพันธะ (Å)	ความเบี่ยงเบน มาตรฐาน	อะตอม	ความยาวพันธะ (Å)	ความเบี่ยงเบน มาตรฐาน
- C <sub>23</sub>	7.4085	0.0013	- C <sub>22</sub>	4.0886	0.0237
- C <sub>24</sub>	8.3988	0.2362	- C <sub>23</sub>	5.2974	0.0273
Hg <sub>1</sub> -Br <sub>2</sub>	3.5029	0.0008	- C <sub>24</sub>	6.3392	0.2182
- Hg <sub>2</sub>	4.3911	0.0066	Br <sub>1</sub> -Br <sub>2</sub>	4.1825	0.0249
C <sub>21</sub> -C <sub>22</sub>	1.5012	0.2045	- Hg <sub>2</sub>	3.5150	0.0029
- C <sub>23</sub>	2.5985	0.3545	C <sub>22</sub> -C <sub>23</sub>	1.4999	0.0003
- C <sub>24</sub>	3.0010	0.4850	- C <sub>24</sub>	2.6001	0.2250
- Br <sub>2</sub>	4.5692	0.4108	- Br <sub>2</sub>	5.4756	0.0317
- Hg <sub>2</sub>	1.9841	0.4609	- Hg <sub>2</sub>	3.0274	0.0099
C <sub>24</sub> -Br <sub>2</sub>	7.5701	0.2619	C <sub>23</sub> -C <sub>24</sub>	1.5021	0.1300
- Hg <sub>2</sub>	4.9851	0.2601	- Br <sub>2</sub>	6.9417	0.0320
Hg <sub>2</sub> -Br <sub>2</sub>	2.5852	0.0344	- Hg <sub>2</sub>	4.4289	0.0105

ตารางที่ 5.7 แสดงผลการคำนวณมุมระหว่างพันธะของอะตอมต่าง ๆ ในหนึ่งหน่วยเซลล์มาตรฐาน

มุม	องศา	มุม	องศา
$C_{14} - C_{11} - C_{12}$	60.0	$C_{12} - C_{11} - C_{13}$	30.0
- $C_{13}$	30.0	- $C_{14}$	60.0
- $Br_1$	0.0	- $Br_1$	60.0
- $Hg_1$	0.0	- $Hg_1$	60.0
- $C_{21}$	23.6	- $C_{21}$	45.3
- $C_{22}$	20.6	- $C_{22}$	42.0
- $C_{23}$	25.4	- $C_{23}$	38.1
- $C_{24}$	34.9	- $C_{24}$	40.5
- $Br_2$	15.5	- $Br_2$	49.8
- $Hg_2$	19.3	- $Hg_2$	47.6
$C_{11} - C_{12} - C_{13}$	120.0	$C_{13} - C_{12} - C_{11}$	120.0
- $C_{14}$	90.9	- $C_{14}$	30.0
- $Br_1$	111.7	- $Br_1$	8.2
- $Hg_1$	113.3	- $Hg_1$	6.6
- $C_{21}$	126.2	- $C_{21}$	20.5
- $C_{22}$	128.9	- $C_{22}$	13.9
- $C_{23}$	131.1	- $C_{23}$	17.9
- $C_{24}$	127.6	- $C_{24}$	32.6
- $Br_2$	124.4	- $Br_2$	12.9
- $Hg_2$	125.3	- $Hg_2$	16.4

ຊຸມ	ອາຄ່າ	ຊຸມ	ອາຄ່າ
$C_{12} - C_{13} - C_{11}$	30.0	$C_{14} - C_{13} - C_{11}$	90.0
- $C_{14}$	120.0	- $C_{12}$	120.0
- $Br_1$	170.1	- $Br_1$	50.1
- $Hg_1$	172.3	- $Hg_1$	52.4
- $C_{21}$	154.35	- $C_{21}$	72.6
- $C_{22}$	161.79	- $C_{22}$	73.1
- $C_{23}$	154.61	- $C_{23}$	78.6
- $C_{24}$	134.25	- $C_{24}$	84.4
- $Br_2$	165.2	- $Br_2$	66.6
- $Hg_2$	160.4	- $Hg_2$	68.1
$C_{11} - C_{14} - C_{12}$	30.0	$C_{13} - C_{14} - C_{11}$	60.0
- $C_{13}$	60.0	- $C_{12}$	30.0
- $Br_1$	180.0	- $Br_1$	120.0
- $Hg_1$	180.0	- $Hg_1$	120.0
- $C_{21}$	144.13	- $C_{21}$	90.7
- $C_{22}$	146.19	- $C_{22}$	88.8
- $C_{23}$	133.41	- $C_{23}$	77.0
- $C_{24}$	62.25	- $C_{24}$	72.0
- $Br_2$	159.6	- $Br_2$	104.7
- $Hg_2$	152.8	- $Hg_2$	99.5



ສຸມ	ອາຄ່າ	ສຸມ	ອາຄ່າ
$C_{22} - C_{21} - C_{23}$	30.0	$C_{24} - C_{21} - C_{22}$	60.0
- $C_{24}$	60.0	- $C_{23}$	30.0
- $Br_2$	120.0	- $Br_2$	180.0
- $Hg_2$	120.0	- $Hg_2$	180.0
- $C_{11}$	45.4	- $C_{11}$	100.4
- $C_{12}$	41.8	- $C_{12}$	20.5
- $C_{13}$	37.5	- $C_{13}$	25.7
- $C_{14}$	40.2	- $C_{14}$	35.9
- $Br_1$	59.3	- $Br_1$	123.1
- $Hg_1$	91.7	- $Hg_1$	142.9
$C_{21} - C_{22} - C_{23}$	120.0	$C_{23} - C_{22} - C_{21}$	120.0
- $C_{24}$	90.0	- $C_{24}$	30.0
- $Br_2$	46.3	- $Br_2$	166.3
- $Hg_2$	34.6	- $Hg_2$	154.5
- $C_{11}$	126.7	- $C_{11}$	20.6
- $C_{12}$	129.6	- $C_{12}$	13.9
- $C_{13}$	132.2	- $C_{13}$	18.2
- $C_{14}$	128.4	- $C_{14}$	33.8
- $Br_1$	52.3	- $Br_1$	137.9
- $Hg_1$	56.4	- $Hg_1$	153.0

หมู่	องค์ค่า	หมู่	องค์ค่า
$C_{22} - C_{23} - C_{21}$	30.0	$C_{24} - C_{25} - C_{21}$	90.0
- $C_{24}$	120.0	- $C_{22}$	120.0
- $Br_2$	10.8	- $Br_2$	109.2
- $Hg_2$	17.1	- $Hg_2$	102.9
- $C_{11}$	154.6	- $C_{11}$	73.0
- $C_{12}$	162.1	- $C_{12}$	73.6
- $C_{13}$	154.6	- $C_{13}$	79.6
- $C_{14}$	133.4	- $C_{14}$	85.7
- $Br_1$	31.2	- $Br_1$	128.4
- $Hg_1$	21.7	- $Hg_1$	126.7
$C_{23} - C_{24} - C_{21}$	60.0	$C_{21} - C_{24} - C_{22}$	10.0
- $C_{22}$	30.0	- $C_{23}$	10.0
- $Br_2$	60.0	- $Br_2$	0.36
- $Hg_2$	60.0	- $Hg_2$	0.0
- $C_{11}$	93.5	- $C_{11}$	145.1
- $C_{12}$	89.7	- $C_{12}$	147.4
- $C_{13}$	77.4	- $C_{13}$	134.2
- $C_{14}$	72.0	- $C_{14}$	117.8
- $Br_1$	40.9	- $Br_1$	33.5
- $Hg_1$	44.8	- $Hg_1$	24.64

มุมมอง	องศา	มุมมอง	องศา
Br <sub>1</sub> -Hg <sub>1</sub> -C <sub>11</sub>	0.0	Hg <sub>1</sub> -Br <sub>1</sub> -C <sub>11</sub>	178.8
- C <sub>12</sub>	6.6	- C <sub>12</sub>	142.8
- C <sub>13</sub>	7.6	- C <sub>13</sub>	170.1
- C <sub>14</sub>	0.0	- C <sub>14</sub>	0.0
- C <sub>21</sub>	37.1	- C <sub>21</sub>	123.1
- C <sub>22</sub>	27.0	- C <sub>22</sub>	137.8
- C <sub>23</sub>	21.7	- C <sub>23</sub>	148.8
- C <sub>24</sub>	24.6	- C <sub>24</sub>	146.4
- Br <sub>2</sub>	89.0	- Br <sub>2</sub>	56.9
- Hg <sub>2</sub>	52.9	- Hg <sub>2</sub>	94.9
Br <sub>2</sub> -Hg <sub>2</sub> -C <sub>21</sub>	179.2	Hg <sub>2</sub> -Br <sub>2</sub> -C <sub>21</sub>	0.0
- C <sub>22</sub>	154.5	- C <sub>22</sub>	13.7
- C <sub>23</sub>	162.9	- C <sub>23</sub>	10.8
- C <sub>24</sub>	179.1	- C <sub>24</sub>	0.0
- C <sub>11</sub>	160.7	- C <sub>11</sub>	15.5
- C <sub>12</sub>	163.6	- C <sub>12</sub>	12.9
- C <sub>13</sub>	160.4	- C <sub>13</sub>	14.7
- C <sub>14</sub>	152.8	- C <sub>14</sub>	20.4
- Br <sub>1</sub>	85.1	- Br <sub>1</sub>	56.9
- Hg <sub>1</sub>	52.9	- Hg <sub>1</sub>	91.0

ต้นฉบับ หน้าขาดหาย

ตารางแสดงการเปรียบเทียบค่า  $F_o$  และ  $F_c$  ที่คำนวณโดยใช้ตำแหน่ง Hg 2 อะตอม Br 2 อะตอม และระนาบวงแหวนเบนซีนเอียงทำมุม  $45^\circ$  กับระนาบ  $x = 0$

h	k	l	$F_o$	$F_c$	h	k	l	$F_o$	$F_c$
C	0	2	147.41	144.39	C	4	7	126.11	112.30
C	0	4	203.23	206.06	C	4	8	56.93	48.25
O	0	5	223.19	277.89	O	4	9	51.51	51.63
C	0	6	228.74	314.18	C	4	10	81.58	68.04
C	0	7	224.84	177.33	C	4	11	80.52	73.80
O	0	8	87.30	50.93	C	4	12	77.50	67.81
C	0	9	66.03	40.93	C	4	13	45.91	32.79
C	0	10	155.37	121.13	C	6	1	112.36	95.38
C	0	11	164.03	138.93	C	6	2	61.91	48.68
C	0	12	130.93	92.81	C	6	4	64.44	60.70
C	0	13	72.44	55.02	C	6	5	86.73	86.71
C	0	15	51.83	32.36	C	6	6	88.93	92.36
O	0	16	53.55	42.32	C	6	7	60.08	58.74
C	0	17	33.10	41.25	C	6	10	42.77	40.62
O	2	0	236.95	382.11	C	6	11	39.22	46.47
C	4	0	188.55	211.07	C	6	12	34.20	34.76
C	6	0	113.09	130.34	C	8	1	37.59	41.39
C	8	0	48.16	61.18	C	8	4	32.77	27.62
C	2	1	230.14	293.00	C	8	5	34.16	39.03
C	2	2	145.54	153.09	O	8	6	31.47	42.92
C	2	3	42.89	43.46	1	1	1	168.51	144.41
C	2	4	166.02	169.47	1	1	2	113.91	118.64
C	2	5	224.30	241.98	1	1	3	150.84	141.50
C	2	6	236.67	250.12	1	1	4	98.81	71.69
C	2	7	171.66	161.57	1	1	5	33.96	29.37
C	2	8	80.89	61.01	1	1	6	93.91	68.69
C	2	9	72.93	59.52	1	1	7	157.05	122.38
C	2	10	125.29	101.65	1	1	8	119.33	111.46
C	2	11	150.19	112.61	1	1	9	90.28	78.66
C	2	12	127.42	90.26	1	1	11	45.42	35.12
C	2	13	67.01	47.60	1	1	12	72.61	60.08
O	2	16	37.63	37.63	1	1	13	65.22	57.07
C	2	17	30.57	33.26	1	1	14	52.81	51.82
C	4	1	186.15	196.36	1	3	1	80.77	63.12
C	4	2	116.68	106.77	1	3	2	128.84	118.40
C	4	3	58.12	37.54	1	3	3	116.43	108.34
O	4	4	120.31	109.68	1	3	4	55.67	51.11
C	4	5	160.03	161.98	1	3	6	59.50	53.94
O	4	6	154.96	158.72	1	3	7	101.42	78.57

h	k	l	Fo	Fc	h	k	l	Fo	Fc
1	3	8	90.81	99.03	2	2	13	49.95	42.39
1	3	9	64.81	65.01	2	4	1	138.27	159.50
1	3	12	49.97	45.73	2	4	2	82.11	82.24
1	3	13	45.26	48.21	2	4	4	93.22	98.59
1	3	14	37.79	41.49	2	4	5	120.07	141.22
1	5	1	48.28	41.57	2	4	6	123.70	147.89
1	5	2	84.89	75.97	2	4	7	86.15	95.39
1	5	3	70.40	64.65	2	4	8	53.22	53.94
1	5	4	47.63	33.37	2	4	9	42.44	33.10
1	5	6	32.85	32.21	2	4	10	66.73	63.45
1	5	7	56.32	50.58	2	4	11	64.85	71.50
1	5	8	56.28	58.84	2	4	12	49.14	55.58
2	0	2	133.42	153.17	2	6	1	88.77	87.09
2	0	3	46.65	43.49	2	6	2	42.44	45.23
2	0	4	175.37	169.55	2	6	4	53.34	53.61
2	0	5	238.43	242.09	2	6	5	65.99	77.52
2	0	6	242.02	250.23	2	6	6	99.09	80.53
2	0	7	150.15	161.63	2	6	7	50.97	53.03
2	0	8	78.40	61.03	2	6	8	32.36	39.31
2	0	9	63.01	59.55	2	8	1	53.42	63.17
2	0	10	109.50	101.69	3	1	2	91.71	118.50
2	0	11	119.78	112.55	3	1	3	85.13	108.43
2	0	12	106.44	90.29	3	1	4	57.59	51.14
2	0	13	61.10	47.62	3	1	5	31.55	18.12
2	0	14	39.47	37.64	3	1	6	60.16	53.59
2	2	0	234.88	326.39	3	1	7	96.52	78.53
2	4	0	164.88	211.27	3	1	8	90.36	99.10
2	6	0	104.03	110.69	3	1	9	61.46	65.06
2	8	0	36.04	49.53	3	1	12	50.20	45.76
2	2	1	181.21	244.97	3	1	13	48.53	48.25
2	2	2	110.44	126.82	3	3	1	72.81	75.15
2	2	3	44.49	32.64	3	3	2	69.87	69.24
2	2	4	125.50	146.82	3	3	3	34.23	82.01
2	2	5	174.92	209.47	3	3	4	54.36	46.36
2	2	6	190.72	218.52	3	3	6	49.42	39.97
2	2	7	129.87	140.34	3	3	7	67.71	75.05
2	2	8	60.36	51.05	3	3	8	56.35	65.06
2	2	9	57.26	49.58	3	3	9	45.30	48.10
2	2	10	91.54	90.35	3	5	1	53.67	40.37
2	2	11	103.58	101.03	3	5	2	49.59	46.19
2	2	12	92.24	79.34	3	5	3	54.24	50.22

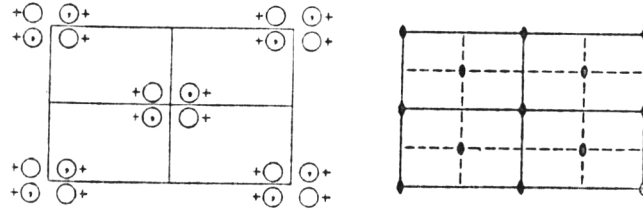
- การดูดกลืนรังสีเอ็กซ์ (X-ray absorption) 27
- คิวบิกโคลล์เส่งที่แพคคิง (cubic closest packing) 7
- โคออดิเนชันนัมเบอร์ (co-ordination number) 7
- จุดสะท้อนส่วนกลับ (reciprocal lattice point) 27
- ชื่อโปรแกรมและลักษณะงาน (JOB SET-UP) 27
- ชุดคำสั่งขั้นตอนในการคำนวณ (JOB CONTROL CARDS) 27
- ทรงกลมสะท้อน (reflecting sphere) 27, 46
- บอดีเซ็นเตอร์คิวบิก (body centered cubic) 11
- โพลาไรเซชันแฟคเตอร์ (Polarization factor) 27
- โพลารอยด์ (Polaroid) 42
- แฟคเตอร์โครงสร้างสังเกต (observed structure factor,  $F_o$ ) 29
- ลอเรนซ์แฟคเตอร์ (Lorentz factor) 27
- วิธีการลอยตัว (flotation method), 68
- วิธีการเอียงมุมเท่ากัน (equi-inclination method) 27, 46
- ไวซ์เซ็นเบิร์กชาร์ท (Weissenberg chart), 57
- ลุ่มสัณฐาน (isotropic) 30
- สเปซของผลึก (crystal space) 73, 76
- สเปซแพทเทอร์สัน (Patterson space) 75, 76, 77
- สัมประสิทธิ์การดูดกลืน (absorption coefficient) 27
- สารมาตรฐานภายใน (internal standard) 50
- อเซ็นตริก (acentric) 61
- อนอมัลส์ดีสเพอร์ชัน (anomalous dispersion) 33
- อลุ่มสัณฐาน (anisotropic) 30
- ออคคิวแพนซีแฟคเตอร์ (occupancy factor) 30
- ออโรรมบิก (orthorhombic) 59
- เอ็กซ์เรย์โกนัลโคลล์เส่งที่แพคคิง, 9

Orthorhombic  $mm2$

$Cmm2$

No. 35

$Cmm2$   
 $C_{2v}^{11}$



Origin on  $mm2$

Number of positions,  
Wyckoff notation,  
and point symmetry

Co-ordinates of equivalent positions

Conditions limiting  
possible reflections

$(0,0,0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)+$

8  $f$  1  $x, y, z; \bar{x}, \bar{y}, z; \bar{x}, y, z; x, \bar{y}, z.$

General:

- $hkl: h+k=2n$
- $0kl: (k=2n)$
- $h0l: (h=2n)$
- $hk0: (h+k=2n)$
- $h00: (h=2n)$
- $0k0: (k=2n)$
- $00l: \text{No conditions}$

4  $e$   $m$   $0, y, z; 0, \bar{y}, z.$

Special: as above, plus

4  $d$   $m$   $x, 0, z; \bar{x}, 0, z.$

} no extra conditions

4  $c$  2  $\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, z; \frac{1}{4}, \frac{3}{4}, z.$

$hkl: h=2n; (k=2n)$

2  $b$   $mm$   $0, \frac{1}{2}, z.$

} no extra conditions

2  $a$   $mm$   $0, 0, z.$

Symmetry of special projections

$(001) cmm; a'=a, b'=b$

$(100) pm1; b'=b/2, c'=c$

$(010) p1m; c'=c, a'=a/2$