

การศึกษาโครงสร้างผลึกของสารประกอบซาลิไซลิก I-III-VI<sub>2</sub>  
โดยใช้ทฤษฎีพันธะและแถบพลังงาน



นางสาวประเสริฐ แข่งขัน

ศูนย์วิทยทรัพยากร  
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

วิทยานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรมหาบัณฑิต  
ภาควิชาฟิสิกส์

บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

พ.ศ. 2530


ISBN 974-568-286-1

ลิขสิทธิ์ของบัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

013066

110294296

Theoretical Study of Bonds and Bands  
in  
I-III-VI<sub>2</sub> Chalcopyrite Crystals



Miss Prasert Kengkan

ศูนย์วิทยทรัพยากร  
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

A Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements  
for the Degree of Master of Science

Department of Physics

Graduate School

Chulalongkorn University

1987

ISBN 974-568-286-1

หัวข้อวิทยานิพนธ์ การศึกษาโครงสร้างผลึกของสารประกอบซาลิไซโลไฟโรท์กลุ่ม I-III-VI<sub>2</sub>  
โดยใช้เทคนิคผงและแถบพลังงาน

โดย นางสาวประเสริฐ แข่งขัน

ภาควิชา ฟิสิกส์

อาจารย์ที่ปรึกษา ศาสตราจารย์ ดร. วิรุฬห์ สายคณิต

อาจารย์ ดร. ขจรยศ อยู่ดี



บัณฑิตวิทยาลัย จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย อนุมัติให้บัณฑิตวิทยาลัยฉบับนี้เป็นส่วน  
หนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญามหาบัณฑิต

..... คณบดีบัณฑิตวิทยาลัย  
(ศาสตราจารย์ ดร. กาว วิชาภัย)

คณะกรรมการสอบวิทยานิพนธ์

..... ประธานกรรมการ  
(รองศาสตราจารย์ ดร.พัฒนา ภาชนะ)

..... อาจารย์ที่ปรึกษา  
(ศาสตราจารย์ ดร. วิรุฬห์ สายคณิต)

..... อาจารย์ที่ปรึกษา  
(อาจารย์ ดร. ขจรยศ อยู่ดี)

..... กรรมการ  
(รองศาสตราจารย์ ดร. วิจิตร เสงี่ยมพันธ์)

ประเสริฐ แข่งขัน : การศึกษาโครงสร้างผลึกของสารประกอบ ซาลโคไพไรท์  
กลุ่ม I-III-VI<sub>2</sub> โดยใช้ทฤษฎีพันธะและแถบพลังงาน (Theoretical Study of  
Bands and Bands in I-III-VI<sub>2</sub> Chalcopyrite Crystals)  
อ. ที่ปรึกษา : ศ.ดร.วิรุฬห์ สายคณิต, ดร.ชจรยศ อยู่ดี, 92 หน้า

การศึกษาโครงสร้างผลึกของสารประกอบโดยใช้ทฤษฎีพันธะเคมี ทำให้สามารถอธิบาย  
ได้ว่า พันธะที่ยึดเหนี่ยวให้แต่ละอะตอมเกาะกันเกิดเป็นผลึกเกิดได้อย่างไร เมื่อศึกษาร่วมกันกับ  
ทฤษฎีแถบพลังงาน ทำให้สามารถจำแนกโครงสร้างผลึกของสารประกอบโมนารีได้ถูกต้องถึง 97%  
และเมื่อใช้วิธีเดียวกันนี้กับสารประกอบเทอร์นารีทำให้สามารถทำนายการเกิดของสารประกอบ  
เทอร์นารีได้ถูกต้องถึง 94%

เราได้ศึกษาการจำแนกโครงสร้างผลึกของสารประกอบโมนารีและสารประกอบเทอร์นารี  
โดยใช้ทฤษฎีของพอลิง (Pauling), ฟิลลิปส์ (Phillips), เซนต์จอห์น-บล็อก (St. John-  
Bloch), ซุงเกอร์ (Zunger) และวิลลาร์ส (Villars) จากนั้นเราได้ใช้ทฤษฎีเหล่านี้ศึกษา  
โครงสร้างผลึกของสารประกอบซาลโคไพไรท์กลุ่ม I-III-VI<sub>2</sub> และกลุ่ม II-IV-V<sub>2</sub>  
โดยใช้แนวความคิดของวิลลาร์ส พบว่า ความสัมพันธ์ระหว่างเคอร์เวโกลดิสทอร์ชัน,  $2-c/a$ ,  
กับผลต่างของค่าอิเล็กโตรเนกติวิตีของพันธะของสารมีลักษณะที่สามารถหาความสัมพันธ์  
ได้ และความสัมพันธ์ของเคอร์เวโกลดิสทอร์ชัน กับผลต่างของค่าอิเล็กโตรเนกติวิตีของพันธะของ  
สารทั้ง 2 กลุ่มยังแยกจากกันอย่างชัดเจน ในขณะที่การศึกษาโดยใช้ทฤษฎีที่พี่ของซุงเกอร์สามารถ  
ทำนายได้เพียงค่าเฉลี่ยของทั้ง 2 กลุ่มเท่านั้น

ศูนย์วิทยุทรัพยากร  
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย

ภาควิชา ..... ฟิลิกส์  
สาขาวิชา ..... ฟิลิกส์  
ปีการศึกษา ..... 2530

ลายมือชื่อนิสิต ..... 11/6/74  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา ..... 21/6/74

PRASERT DENGKAN : THEORETICAL STUDY OF BONDS AND BANDS IN

I-III-VI<sub>2</sub> CHALCOPYRITE CRYSTALS THESIS ADVISOR : PROF. VIRULH

SA-YAKANIT, PH.D., DR. KAJORN YOD YCODEE, 92 PP.

The study of crystal structure using chemical bond theory allows us to understand the nature of chemical bonds, but it cannot predict crystal properties accurately. On the other hands the energy band theory which can predict crystal properties correctly cannot describe the difference of bond types in different crystals. The combination of both theories have been very successful in classification of binary and ternary crystals.

We study the classification of binary and ternary compounds using the theories of Pauling, Phillips, St. John-Bloch, Zunger, and Villars. We apply these theories to study the structures of I-III-VI<sub>2</sub> and II-IV-V<sub>2</sub> chalcopyrite compounds. The tetragonal distortion,  $2-c/a$ , of both groups of chalcopyrite compounds are determined by using the approach of Villars. We have found that the relations between tetragonal distortion,  $2-c/a$ , and the bonds electronegativity difference is correlated. Where Zunger's CTB theory can only give an average graph of tetragonal distortion an electronegativity difference of I-III-VI<sub>2</sub> and II-IV-V<sub>2</sub> graphs of compounds, this present dissertation finds that the relation of tetragonal distortion and electronegativity difference of both groups of compounds as falling into two distinctive groups.

ภาควิชา ..... วัสดุศาสตร์  
สาขาวิชา ..... วัสดุศาสตร์  
ปีการศึกษา ..... 2530

ลายมือชื่อนิสิต ..... ประเสริฐ ดงกัน  
ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา ..... Virulh Sa-yakanit

## กิตติกรรมประกาศ



วิทยานิพนธ์ฉบับนี้สำเร็จลงได้ด้วยความร่วมมือของท่านศาสตราจารย์ - ดร. วิรุฬห์ สายคณิต อาจารย์ที่ปรึกษาที่ได้กรุณาจัดหาทุนการศึกษาให้ในระหว่างที่ทำการวิจัย และได้ร่วมมือกับ อาจารย์ ดร. ขจรยศ อยู่ดี อาจารย์ที่ปรึกษาอีกท่านหนึ่ง ให้คำแนะนำ ช่วยเหลือและควบคุมการวิจัยอย่างใกล้ชิดตลอดเวลา รวมทั้งตรวจ แก้ไข ข้อเขียนในวิทยานิพนธ์ รองศาสตราจารย์จงอร ธีรานนท์ ได้ช่วยอำนวยความสะดวกและให้กำลังใจตลอดเวลาที่ทำวิจัย ผู้ช่วยศาสตราจารย์ ดร. วิชิต ศรีตระกูล ได้ให้ความรู้ความเข้าใจและตอบคำถามที่เป็นปัญหาทางด้าน Solid State Physics อีกทั้งคอยให้กำลังใจ คุณพงษ์ ทรงพงษ์ และคุณธนา สุทธิโอกาส นิสิตปริญญาโทบัณฑิต ที่ให้ความช่วยเหลืออำนวยความสะดวกในการใช้เครื่องคอมพิวเตอร์ ทั้งในการคำนวณและการพิมพ์วิทยานิพนธ์ ผู้เขียนขอกราบขอบพระคุณทุกท่านที่ได้มีส่วนช่วยเหลือดังกล่าวไว้ ณ ที่นี้

อนึ่ง ระหว่างการศึกษานิสิตปริญญาโทบัณฑิต ผู้เขียนได้รับทุนอุดหนุนการศึกษาจากโครงการผู้ช่วยวิจัยของบัณฑิตวิทยาลัยและฝ่ายวิจัยจุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย จึงขอขอบพระคุณเป็นอย่างสูงไว้ ณ ที่นี้ด้วย

ศูนย์วิทยทรัพยากร  
จุฬาลงกรณ์มหาวิทยาลัย



สารบัญ

	หน้า
บทคัดย่อภาษาไทย .....	ค
บทคัดย่อภาษาอังกฤษ .....	ค
กิตติกรรมประกาศ .....	ฆ
สารบัญ .....	ง
รายการตารางประกอบ .....	ฉ
รายการภาพประกอบ .....	ณ
บท	
1. บทนำ.....	1
2. สสารในทัศนของนักเคมี.....	3
2.1 พันธะเคมี.....	3
2.1.1 พันธะ โลหะ.....	3
2.1.2 พันธะ เนื่องจากการเกิดอำนาจไฟฟ้า.....	4
2.1.3 พันธะ โควาเลนซ์.....	4
2.2 คำอ็เล็กโตรเนกตีวดีและอีหออพพอร์เมชัน.....	6
2.3 ความเป็นไอออนิก.....	8
2.4 ไฮบริไดเซชัน.....	11
2.5 ความเป็นไอออนิกตามทฤษฎีของคลัสัน.....	12
2.6 การทำนายโครงสร้างผลึกโดยใช้ทฤษฎีพันธะเคมี.....	13
2.6.1 การทำนายโครงสร้างผลึกโดยใช้พลังงานยึดเหนี่ยว.....	14
2.6.2 การทำนายโครงสร้างผลึกของมูเซอร์และเบียร์สัน.....	14
2.7 ระดับพลังงานในพันธะเคมี.....	15
3. สสารในทัศนของนักฟิสิกส์.....	19
3.1 การเกิดแถบพลังงาน.....	19
3.2 พังก์ชันคลื่นของอ็เล็กตรอนในผลึก.....	20
3.3 การจำแนกชนิดของสสารโดยใช้ทฤษฎีแถบพลังงาน.....	22
3.4 เทคนิคการคำนวณระดับพลังงานแบบไท-บายดิ้ง.....	25
3.5 แบบจำลองของอ็เล็กตรอนอิสระ.....	27

3.6	แบบจำลองของอิเล็กทรอนิกส์ที่ใกล้เป็นอิสระ .....	30
4.	ปัญหาโครงสร้างผลึกของสารประกอบไอออนี .....	33
4.1	แบบจำลองของเพนนี .....	34
4.2	ทฤษฎีของฟิลลิปส์ .....	35
4.3	ซูโดโพเทนเชียล .....	40
4.4	พลังงานศักย์ของไซมอนส-บล็อก .....	41
4.5	ค่าอิเล็กโตรเนกติวิตีของวงโคจร .....	44
4.6	ดัชนีสำหรับโครงสร้าง .....	44
4.7	การจำแนกโครงสร้างผลึกของเซนต์จอร์ห์นและบล็อก .....	45
4.8	การศึกษาโครงสร้างผลึกของเซลิควาสกีและฟิลลิปส์ .....	47
4.9	พลังงานศักย์ของซุงเกอร์ .....	51
4.10	การจำแนกสารตามลักษณะโครงสร้างผลึกของวิลลาร์ดส์ .....	53
5.	เตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน ในสารประกอบซาลโคไพไรท์ .....	57
5.1	สารกึ่งตัวนำ .....	57
5.1.1	สมบัติของสารกึ่งตัวนำ .....	57
5.1.2	โครงสร้างและองค์ประกอบของสารกึ่งตัวนำ .....	58
5.2	ผลของเตตระโกนอล ดิสทอร์ชันต่อระดับพลังงาน .....	62
6.	ทฤษฎีที่ใช้ในการอธิบายการเกิดเตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน .....	70
6.1	สาเหตุของการเกิดเตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน .....	70
6.2	การอธิบายการเกิดเตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน โดยใช้ค่าอิเล็กโตรเนกติวิตี .....	71
6.3	การอธิบายการเกิดเตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน โดยใช้รัศมีวงโคจรของอิเล็กตรอนในอะตอม .....	72
6.4	ทฤษฎีซีทีบี .....	74
6.5	การศึกษาเตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน โดยใช้วิธีของวิลลาร์ดส์ .....	77
6.6	เปรียบเทียบผลการคำนวณโดยใช้ทฤษฎีซีทีบีและผลจากการหา ความสัมพันธ์ของ $2-c/a$ กับ $[R_L(A)-R_L(B)]/R_L(C)$ .....	81
7.	สรุปและวิจารณ์ .....	86
	เอกสารอ้างอิง .....	89
	ประวัติผู้เขียน .....	93



## สารบัญภาพ

รูปที่	หน้า
2.1 แสดงออร์บิทัลของโมเลกุลที่ประกอบด้วย อะตอมของธาตุชนิดเดียวกัน 2 อะตอม	5
2.2 แสดงฟังก์ชันคลื่นที่เกิดจากการไฮบริไดเซชัน .....	5
2.3 แสดงค่าอิเล็กโตรเนกาติวิตีของธาตุต่างๆ ของพอลิง .....	6
2.4 แสดงตารางธาตุและการจัดตัวของวาเลนซ์อิเล็กตรอนของอะตอมที่เป็นกลาง ..	9
2.5 แสดงการจำแนกโครงสร้างของสารโดยใช้ทฤษฎีของพอลิง ของมูเซอร์และเปียร์สัน .....	16
2.6 แสดงลักษณะของฟังก์ชันคลื่นและระดับพลังงานของอิเล็กตรอน ที่อยู่ในสถานะที่มีการสร้างพันธะและด้านการสร้างพันธะ .....	17
3.1 แสดงลักษณะพลังงานศักย์และระดับพลังงานในอะตอม .....	20
3.2 แสดงพลังงานศักย์ในผลึกและพลังงานศักย์ในอะตอมอิสระ .....	20
3.3 แสดงการนำไฟฟ้าของสารกึ่งตัวนำ .....	23
3.4 แสดงการแบ่งชนิดของสารโดยใช้ลักษณะแถบพลังงาน .....	24
3.5 แสดงลักษณะของพลังงานศักย์และระดับพลังงานในอะตอมอิสระ และแถบพลังงานที่เกิดจากการนำอะตอมมาวางใกล้กัน .....	26
3.6 แสดงพลังงานศักย์ตามแบบจำลองอิเล็กตรอนอิสระ .....	27
3.7 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างตำแหน่งและโมเมนต์ของซาร์โมนิกออสซิลเลเตอร์ .	27
3.8 แสดงความหนาแน่นสถานะตามแนวความคิดก่อนที่จะมีทฤษฎีควอนตัม ....	28
3.9 แสดงความสัมพันธ์ระหว่างพลังงานกับเวคเตอร์คลื่น ตามแบบจำลองอิเล็กตรอนอิสระ .....	29
3.10 แสดงความหนาแน่นสถานะตามแบบจำลองอิเล็กตรอนอิสระ .....	29
3.11 แสดงลักษณะแถบพลังงานที่ได้จากแบบจำลองอิเล็กตรอนที่ใกล้จะเป็นอิสระ .	31
4.1 แสดงช่องว่างแถบพลังงานที่เกิดจากการสร้างพันธะโควาเลนต์ และพันธะโควาเลนต์ที่มีความเป็นไอออนิกอยู่ด้วย .....	37
4.2 แสดงการเขียนกราฟระหว่างค่า $E_n, C$ เพื่อหาค่ามุมเฟสของความถี่ไอออนิก .....	38
4.3 แสดงจำนวนอะตอมที่ล้อมรอบอะตอมกลางในผลึก .....	38
4.5 แสดงการจำแนกโครงสร้างผลึกของธาตุโดยใช้ดัชนีโครงสร้าง	

4.5	แสดงการจำแนกโครงสร้างผลึกของธาตุโดยใช้ดัชนีโครงสร้างและค่าอิเล็กโตรเนกาติวิตีที่ไซมอนสและบล็อกได้นิยามไว้ .....	45
4.6	แสดงการจำแนกสารประกอบไบนารีตามลักษณะโครงสร้างผลึกโดยใช้ค่ารัศมีวงโคจรของไซมอนสและบล็อก .....	46
4.7	แสดงโครงสร้างแบบเวอรัทไซต์ .....	48
4.8	แสดงผลต่างระหว่างมุมระหว่างพันธะและผลต่างของค่าอิเล็กโตรเนกาติวิตีตามทฤษฎีของเซนต์ จอห์น และบล็อก .....	48
4.9	แสดงการเปลี่ยนแปลงของอัตราส่วน $c/a$ เทียบกับ $r$ ในสารที่มีโครงสร้างผลึกแบบเวอรัทไซต์ .....	50
4.10	แสดงความสัมพันธ์ของเตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน กับ ออร์บิทัลของพันธะในสารประกอบซัลโคไพไรท์กลุ่ม II-IV-V <sub>2</sub> .....	50
4.11	แสดงผลการใช้รัศมีวงโคจรของอิเล็กตรอนในการจำแนกโครงสร้างผลึกของซิงเกอร์ .....	53
4.12	แสดงการจำแนกสารประกอบไบนารีตามลักษณะโครงสร้างผลึกของวิลลาร์ส .....	54
4.13	แสดงแผนภาพที่ใช้ในการทำนายการเกิดของสารประกอบเทอร์นารี ....	55
5.1	แสดงโครงสร้างแบบเตตระฮีดรอล .....	58
5.2	แสดงประเภทของสารประกอบกึ่งตัวนำ .....	59
5.3	แสดงโครงสร้างผลึกชนิดต่างๆ ที่พบในสารกึ่งตัวนำ .....	60
5.4	แสดงลักษณะแถบพลังงานของสารประกอบซัลโคไพไรท์เทียบกับแถบพลังงานของสารประกอบซิงค์เบลนด์ .....	63
5.5	แสดงกราฟระหว่างพารามิเตอร์ที่บอกถึงการแยกของระดับพลังงานที่เกิดจากการเปลี่ยนแปลงของสนามไฟฟ้าในผลึกและค่าเตตระโกนอล ดิสทอร์ชันในสารประกอบซัลโคไพไรท์กลุ่ม II-IV-V <sub>2</sub> .....	64
5.6	แสดงกราฟระหว่างพารามิเตอร์ของการแยกของระดับพลังงานที่เกิดจากการเปลี่ยนแปลงของสนามไฟฟ้าในผลึกและค่าเตตระโกนอล ดิสทอร์ชันในสารประกอบซัลโคไพไรท์กลุ่ม I-III-VI <sub>2</sub> .....	66
5.7	แสดงการเปลี่ยนแปลงระดับพลังงานในชั้นพลังงานย่อย $d$ เมื่ออยู่ในสารประกอบที่มีการสร้างพันธะแบบเตตระฮีดรอล .....	67
5.8	แสดงโครงสร้างแถบพลังงานของ $CuAlS_2$ และ $CuAlSe_2$ .....	68
5.9	แสดงความสัมพันธ์ระหว่างความกว้างของแถบช่องว่างพลังงานกับสัดส่วนของ $d$ อิเล็กตรอนในระดับพลังงานสูงสุดในแถบวาเลนซ์ .....	69
6.1	แสดงความสัมพันธ์ของเตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน และผลต่างของ	

	ค่าอิเล็กโตรเนกติวิตีของพันธะตามทฤษฎีของชอกัทและสิงห์ .....	73
6.2	แสดงความสัมพันธ์ระหว่างเตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน กับผลต่างของ ค่าอิเล็กโตรเนกติวิตีของพันธะ A-C และ B-C ในสารประกอบซาลโคไพไรท์ ของชอกัทและฮัสเสน .....	74
6.3	แสดงลักษณะการจัดเรียงอะตอมในส่วนหนึ่งของโครงสร้างแบบซาลโคไพไรท์.	74
6.4	แสดงความสัมพันธ์ระหว่างเตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน และค่า $\delta$ ตามนิยามของ ทฤษฎีฮึบ์ .....	78
6.5	แสดงความสัมพันธ์ระหว่างเตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน กับผลต่างของ ค่าอิเล็กโตรเนกติวิตี $[R_1(A) - R_1(B)] / R_1(C)$ .....	78
6.7	แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $\delta$ ตามที่นิยามในทฤษฎีฮึบ์ และผลต่างของ ค่าอิเล็กโตรเนกติวิตีของพันธะตามนิยามของชอกัทและฮัสเสน .....	81
6.8	แสดงความสัมพันธ์ระหว่าง $2-c/a$ กับ $[R_1(A) - R_1(B)] / R_1(C)$ ที่เป็นผล จากทฤษฎีฮึบ์ .....	82
6.9	แสดงความสัมพันธ์ระหว่างรัศมีของอะตอมในขณะที่มีการสร้างพันธะ แบบเตตระฮีดรอล กับค่าอิเล็กโตรเนกติวิตีที่อยู่ในรูปรัศมีวงโคจร ของอิเล็กตรอน .....	84

## สารบัญตาราง

ตารางที่		หน้า
4.1	แสดงค่า $l'(1)$ ของธาตุต่างๆ .....	42
4.2	แสดงค่ารัศมีวงโคจรและค่าอิเล็กโตรเนกติวิตีตามนิยามของ เซนต์ จอห์น-บล็อก เทียบกับค่าอิเล็กโตรเนกติวิตีของพอลิ่ง และของฟิลลิปส์ .....	43
4.3	แสดงค่ารัศมีวงโคจรของอิเล็กตรอนที่มีโมเมนต์เชิงมุมต่างๆ ตามการคำนวณของชุงเกอร์ .....	52
5.1	แสดงค่าเตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน และค่าความกว้างของ ช่องว่างแถบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงช่องว่างแถบพลังงานเนื่องจาก การเปลี่ยนแปลงของสนามไฟฟ้า และผลจากสปิน-ออร์บิต คัปปลิง ของ สารประกอบซาลโคไฟไรท์กลุ่ม II-IV-V <sub>2</sub> .....	64
5.2	แสดงค่าเตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน และค่าความกว้างของ ช่องว่างแถบพลังงาน การเปลี่ยนแปลงช่องว่างแถบพลังงานเนื่องจาก การเปลี่ยนแปลงของสนามไฟฟ้า และผลจากสปิน-ออร์บิต คัปปลิง ของ สารประกอบซาลโคไฟไรท์กลุ่ม I-III-VI <sub>2</sub> .....	65
6.1	แสดงค่ารัศมีของอะตอมในขณะที่มีการสร้างพันธะโควาเลนซ์ แบบเตตระฮีดรอลของพอลิ่ง .....	77
6.2	แสดงค่ารัศมีของอะตอมในขณะที่มีการสร้างพันธะโควาเลนซ์ แบบเตตระฮีดรอลของคิทเทล .....	75
6.3	แสดงค่า d character ของสารประกอบซาลโคไฟไรท์ .....	79
6.4	แสดงผลต่างของค่าอิเล็กโตรเนกติวิตีเมื่อ d character มีค่าต่างๆกัน	80
6.5, 6.6, 6.7	แสดงค่าเตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน ที่ได้จากการทดลอง จากทฤษฎีซีทีบี และ จากการหาความสัมพันธ์ของ $2-c/a$ กับ $[R_1(A)-$ $R_1(B)] / R_1(C)$ .....	83
6.8	แสดงค่าความผิดพลาดของการคำนวณ เตตระโกนอล ดิสทอร์ชัน .....	85