

Kommission V/5

Dr. Václav Drchal CSc.

wissenschaftlicher Arbeiter

der Tschechoslowakischen Akademie der Wissenschaften

das Physikalische Institut - Prag - ČSSR

Ing. Renata Jurášková, Ing. Miloslav Růžek CSc.

Fachassistenten der Photogrammetrie TU - Prag - ČSSR

Fakultät für Bauwesen

## BESTIMMUNG DER RAUMLAGE DER ATOME IN STRUKTURMODELLEN

### Zusammenfassung:

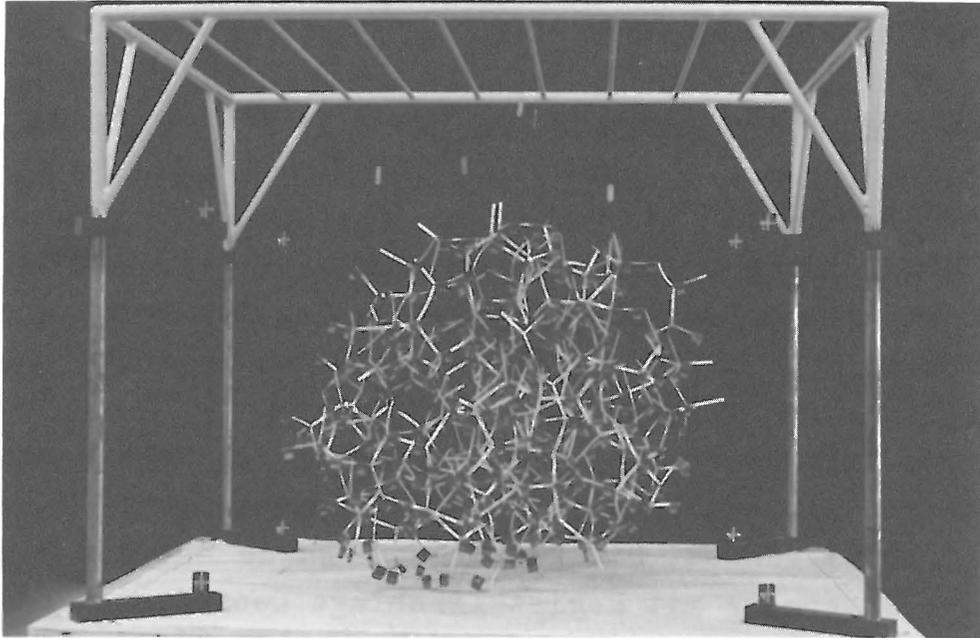
Der Beitrag beschäftigt sich mit der Raumlage der Atome in Strukturmodellen der Amorphmateriale. Die Modelle mit Dimensionen 40 cm x 40 cm x 40 cm enthalten ungefähr 400 Atome - die Länge der Verbindungsröhrchen 5 cm.

Die Aufgabe wird mit dem Verfahren der Nahbereichphotogrammetrie mit dem Einsatz der Stereomesskammer (SMK 5,6/0808 UMK 10/1318) gelöst. Die Auswertung wurde auf dem Stereokomparator Stecometr mit Registrieranlage Coordimetr "E" und mit dem Streifenlocher des Achtpurlochstreifens gelöst. Berechnung der rechtwinkligen räumlichen Koordinaten, deren Transformation in Einheitssystem und Präzisieren der Lage der Atome mit iterativem Relaxationsverfahren wird auf dem Rechner HP 30 durchgeführt.

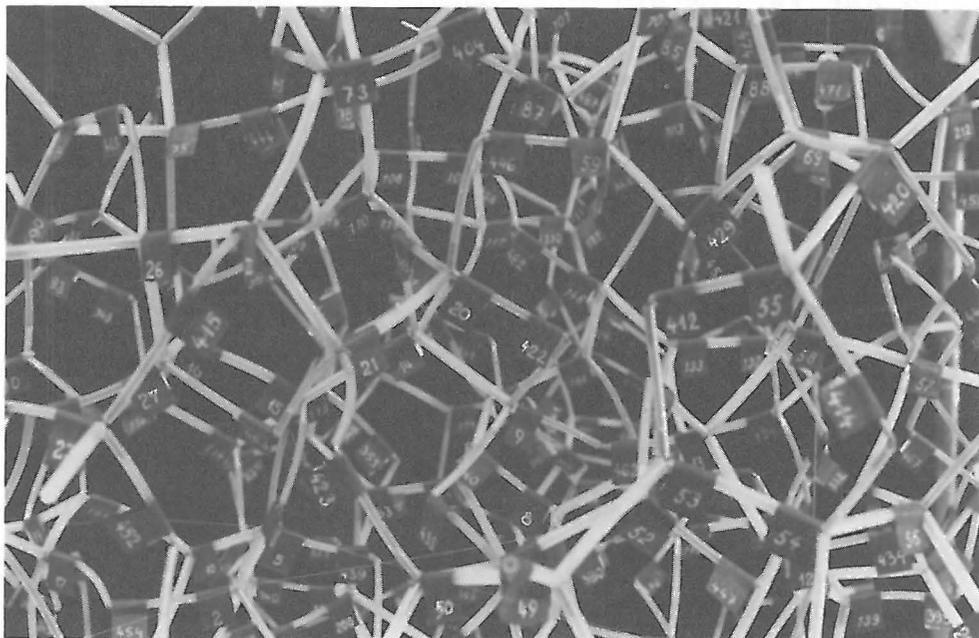
### 1. Einleitung

Die moderne Festkörperphysik befasst sich nicht nur mit Kristallen, sondern auch mit nichtkristallinen Systemen, wie Glas und amorphen Körpern, die topologisch ungeordnet sind. In diesem Fall ergeben die Streuexperimente nur eine begrenzte Information, die zur einheitlichen Bestimmung der atomaren Geometrie jenseits der zweiten Koordinationsschale nicht ausreicht, wobei viele physikalische Eigenschaften von Fernordnungsstrukturmerkmalen abhängen. Die Bildung der Modelle, die Proben atomarer Anordnungen darstellen, hat zu einem

spürbaren Fortschritt in der Untersuchung atomarer Strukturen dieser Systeme geführt. Bei der Konstruktion dieser Modelle sind die bekannten Nahordnungsstrukturmerkmale dieser Materialien genau berücksichtigt worden und gewisse andere Bedingungen (Homogenität, Dichte, usw.) wurden erfüllt. Wir haben die Struktur und einige physikalische Eigenschaften von GeS-Glas folgendermassen untersucht. Beim bauen der Strukturmodellen (Bild 1a) haben wir metallische Verbindungselemente



**Bild 1a** GeS-Glas Strukturmodell



**Bild 1b** Detailaufnahme

(Sternchen und Bogenchen) und plastische Röhrchen (cca 50 mm lang) benutzt (Bild 2a, 2b), die die Atome und die Bindungen darstellen.

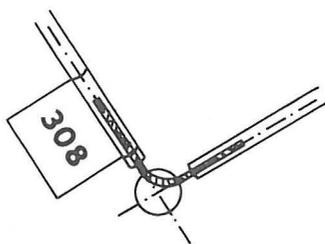
Wir haben zwei strukturell unterschiedliche Modelle gebildet, die 430 oder 350 Atome enthalten. Die wichtigste und auch die schwierigste Aufgabe war es, die Koordinaten der Atome zu finden, die dann als Eingangsparameter bei den quantenmechanischen Berechnungen der physikalischen Eigenschaften von GeS-Glas benutzt wurden. Diese Aufgabe wurde vollständig durch die Photogrammetrische Methode gelöst.

## 2. Lösungen und Messverfahren

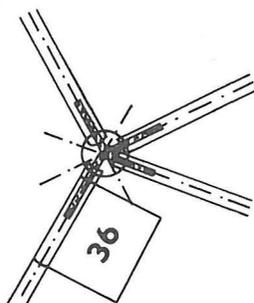
Es wurde die Nahbereichphotogrammetrie mit dem Einsatz der Stereomesskammer benutzt.

Das erste von der zwei bisher gemessenen GeS-Glas Modelle enthielt insgesamt 430 im Raum mit Ausmassen beiläufig 40 cm x 40 cm x 40 cm angeordnete Atome. Es wurde mit der Zeiss Jena Stereomesskammer SMK 5,6/0808 (b = 1200 mm) mit Vorsatzlinsen aufgenommen. Die Mittelentfernung der Aufnahme wurde 2,7 m gewählt um den Bildmassstab so gross wie möglich zu erreichen.

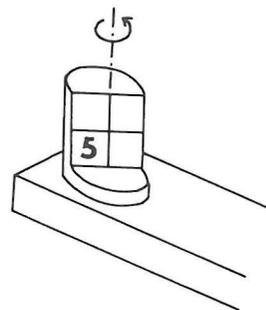
Das Modell (Bild 1a) wurde auf Silonfasern in auf einer Holzgrundplatte befestigten Metallkonstruktion eingehängt. Einzelne Atome wurden nicht signalisiert, nur mit weissen Nummern auf zu Verbindungsröhrchen angeklebten schwarzen Karten bezeichnet (Bild 2a, 2b). An jedes der vier lotrechten Konstruktionsröhre wurden zwei spezielle axialdrehbare Signale befestigt (weisse Kreuzchen auf schwarzer Grundlage) welche aussen des Strukturmodells eine Gruppe von acht Passpunkten bildeten (Bild 2c).



Schwefelatom  
Bild 2a



Germaniumatom  
Bild 2b



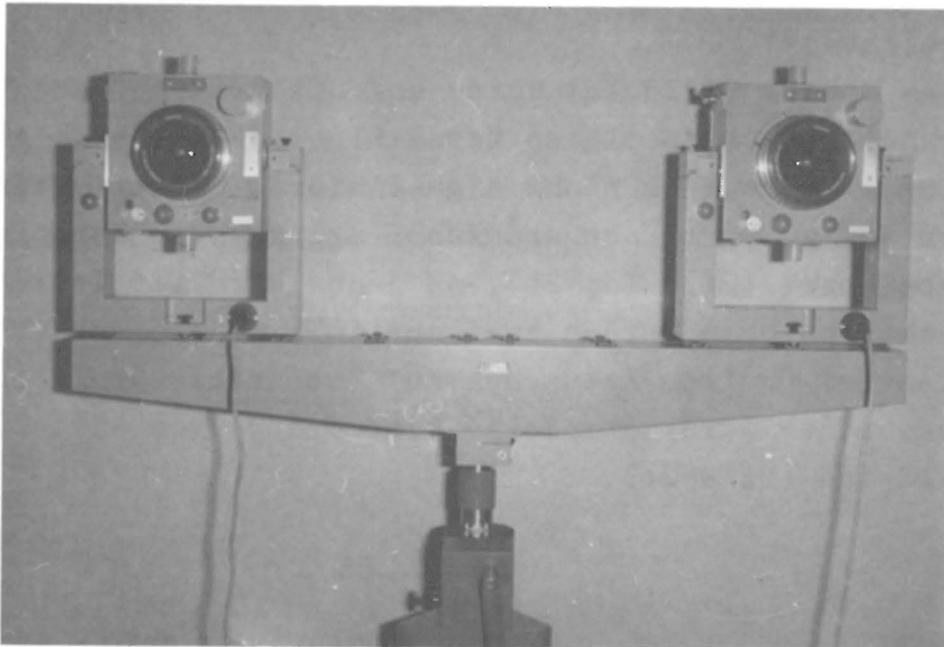
Passpunkt  
Bild 2c

Es wurden insgesamt 4 Bildpaare des Strukturmodells mit horizontalen und immer ungefähr senkrecht zur lotrechten Ebenen des aus den Passpunkten gebildeten Quaders orientierten Aufnahmeachsen aufgenommen. Das ganze Modell mit der Tragkonstruktion und mit der Grundplatte wurde dabei zu der auf Stativ fest stehende Messkammer schufenweise gedreht. Diese Anordnung hat die Vermessung von allen 430 Atomen auch trotz erheblicher Bedeckungszahl ermöglicht (Bild 1b).

Die Aufnahmen wurden auf photographischen Platten ORWO WP-1, 9 x 12 cm durchgeführt. Die Belichtung wurde bei geöffneten Verschlüssen ("B") durch zwei auf den Messkammerseiten befestigten Transistorlichtblitzgeräten TR-64 realisiert.

Photographische Platten wurden mit Anwendung des Feinkornentwicklers ORWO ATOMAL verarbeitet.

Das zweite gemessene Modell mit Inhalt von 350 Atomen wurde mit Zeiss Jena Universalmeßkammer UMK 10/1318 in Doppelaufhängung, ( $b = 840$  mm) mit Objektiven Iamegon 8/100 N (Bild 3) aufgenommen.



Die Universalmeßkammer Zeiss Jena UMK 10/1318  
in Doppelaufhängung

Bild 3

Mit Rücksicht auf günstigere Parameter der Kammer und die Möglichkeit der Scharfeinstellung konnte die Entfernung der Kammer vom Modell auf 1,8 m verkürzt werden. Dadurch vergrößerte Bildmassstab hatte nicht nur die Erhöhung der Messgenauigkeit, sondern auch wesentlich bessere Identifikation der gemessenen Punkte mitgebracht. Sonst blieb im wesentlichen das Messverfahren erhalten, das sich im ersten Fall gut bewährt hat.

### 3. Bildauswertung

Die Bilder wurden mit analytischem Verfahren ausgewertet, wobei der Normalfall der Aufnahme vorausgesetzt wurde. Die Bildkoordinaten und Horizontalparallaxen wurden auf dem Zeiss Jena Stereokomparator Stecometer "C" mit Registrieranlage Coordimeter "E" und mit Streifenlocher des 8-Spur-Lochstreifens gemessen.

Die Messmarke des Stereokomparators wurde vom Auswerter auf ideale, nicht signalisierte Achsenschnittpunkte der Verbindungsröhrchen (Valenzen) bzw. der Metallverbindungselemente zweimal unabhängig eingestellt. Es hat sich gezeigt, dass mit Rücksicht auf erhebliche Dichte und Verworrenheit beider Modelle für eindeutige Identifikation der Atome bei der Auswertung notwendig ist, dass der Auswerter beim Messen im Stereokomparator die Möglichkeit hat auch das wirkliche Modell gleichzeitig anzuschauen.

Der Bildkoordinaten und Parallaxenfehler: für die Passpunkte  $4\mu\text{m}$ ; für die Atome  $10\mu\text{m}$ . Die Messung jedes Bildpaares wurde mit der Serie von acht Passpunkten begonnen und auch beendet.

### 4. Koordinatenberechnung und Genauigkeit der erreichten Ergebnisse

Unter Benutzung der Karthesischen Koordinaten von 8 Bezugspunkten, die durch eine unabhängig direkte Messung bestimmt wurden, wurden die 12 Parameter der linearen Transformation (Translation und 3 x 3 Matrix) zu dem Koordinatensystem der Bezugspunkte für jedes Bildpaar durch die Methode der kleinsten Quadrate gefunden. Mit diesen Parametern wurden die Koordinaten aller Atome in das Bezugspunktsystem

transformiert. Jeder Punkt wurde gewöhnlich in drei verschiedenen Bildpaaren gemessen. Unter Benutzung der Methode der kleinsten Quadrate haben wir die wahrscheinlichsten Werte der Atompositionen erhalten und wir haben den mittleren quadratischen Fehler der Karthesischen Koordinaten bestimmt. Es waren 2 mm für das erste Modell (SMK) und 1 mm für das zweite Modell (UMK). Der Transformationsfehler: 0,4 mm.

## 5. Schlussfolgerung

Die erzielte Genauigkeit dem Zwecke der gelösten Aufgabe völlig ausreicht, denn die Karthesischen Raumkoordinaten der Atome werden nur als Ausgangsapproximation für das Relaxationsverfahren benutzt, deren Ziel ist, die Atome entsprechend der vorhandenen interatomaren Kräfte umzuordnen und das lokale Minimum der Deformationsenergie (metastabiles Zustand) zu erreichen.