Mikroskopie atomárních sil

Mikroskopie atomárních sil (Atomic Force Microscopy – AFM)

- tunelovací mikroskopie vykazovala systematické odchylky, které se daly vysvětlit silovým působením mezi vzorkem a hrotem ⇒ iniciovala vznik mikroskopie atomárních sil
- patří mezi nejrozšířenější odnože mikroskopie skenující sondou

Princip:

- velmi ostrý hrot se pohybuje nad vzorkem nebo je v dotyku s ním a je odpuzován/přitahován vzorkem
- využívá atomárních sil mezi atomy hrotu a vzorku
- hrot je upevněn na tenkém a pružném nosníku
- ohyb nosníku je detekován ⇒ informace o velikosti interakce hrotu a vzorku



Původ interakčních sil:

- přitažlivá van der Waalsova síla relativně dlouhý dosah (0.1 až 100 nm)
- repulzivní síla při dotyku plynoucí z coulombovského odpuzování jader a z Pauliho principu (vzdálenost atomů menší, než je součet atomových poloměrů ⇒ překryv elektronových orbitalů)
- kapilární síly mezi hrotem a kapalinou na povrchu vzorku díky povrchovému napětí
- adhezní, vazebné, aj.



Pracovní režimy AFM

• závislost působících sil mezi atomy na jejich vzdálenosti lze modelově popsat pomocí *Lennard-Jonesova potenciálu* (interakční potenciál)



Průběh meziatomárních sil odvozených z Lennard-Jonesova potenciálu

- postupné přibližování hrotu ke vzorku \Rightarrow působení přitažlivých sil
- přitažlivé síly překročí tuhost nosníku ⇒ hrot přiskočí k povrchu vzorku až do oblasti odpudivých sil ⇒ jedná se o *oblast nestability nosníku*
- další přibližování hrotu ke vzorku \Rightarrow nárůst odpudivých sil

Kontaktní režim AFM

- malá vzdálenost mezi hrotem a vzorkem působí odpudivé síly (řádově 10⁻⁷N)
- velikost ohnutí nosníku je mírou odpudivé síly a tudíž i vzájemné vzdálenosti hrotu a vzorku
- kontaktní režim nejčastěji pracuje ve dvou nastaveních

Kontaktní režim s konstantní výškou

- udržována určená hodnota výšky z_o (poloha základny nosníku)
- měří se ohnutí nosníku



Kontaktní režim s konstantní silou

- udržuje se konstantní ohnutí nosníku
- během skenování se mění posun vzorku (nebo hrotem) ve směru osy z
- tento režim eliminuje závislost prohnutí nosníku na kapilárních silách



Bezkontaktní režim AFM

- minimalizuje možnost poškození vzorku hrotem v porovnání s kontaktní metodou
- využívá se van der Waalsových sil (řádově 10⁻¹² N) ve vzdálenosti 1 -10 nm
- používá se pružný nosník (hrozí zachycení na povrchu) nebo kmitající nosník

Bezkontaktní režim s kmitajícím nosníkem

 nosník rozkmitán v okolí první rezonanční frekvence (rozsahu 100-400 kHz)



Naměřená rezonanční křivka, vpravo horší nosník

- amplituda kmitu musí být optimalizována nesmí dojít ke kontaktu se vzorkem
- vstupem do oblasti gradientu sil tedy dojde ke změně rezonance, což se (v případě buzení s konstantní frekvencí) projeví poklesem amplitudy kmitů



Průběh rezonance volného nosníku (bílá) a změna rezonance vlivem přitažlivé síly

- zpětnou vazbou změna výšky nosníku ⇒ amplituda kmitů je konst. ⇒
 ⇒ sledujeme křivku konstantního gradientu sil
- při vyřazení zpětné vazby ⇒ monitorován *pokles amplitudy*

Bezkontaktní režim AFM - ukázka



https://www.youtube.com/watch?v=Ha53tFTsmW8

- 1. Nalezení rezonanční frekvence nosníku a nastavení vzdálenosti hrotu od vzorku
 - pozice hrotu může být v rezonanční frekvenci, nad nebo pod hodnotou rezonanční frekvence
- 2. Skenování povrchu vzorku
 - změna vzdálenosti mezi hrotem a vzorkem (změna interakční síly) vede ke změně rezonanční frekvence ⇒ zpětnou vazbou je korigována vzdálenost hrotu od vzorku a frekvence nosníku
- 3. Obrazová analýza záznamu

Poklepový režim AFM (tapping mode)

- snaha optimalizovat rozlišení a vlivu hrotu na vzorek
- snímkování v oblasti několika desetin nm nad povrchem vzorku

Problém:

• nutné vyřešit problém *s nestabilitou nosníku* (přitažlivá síla překoná tuhost nosníku)

<u>Řešení:</u>

- nastavení amplitudy kmitu, aby se hrot krátce dotknul vzorku
- laterární posun hrotu v momentě, kdy je hrot dále od vzorku
- dosáhneme vyššího rozlišení (hrot se dotkne vzorku několikrát, než se posune) a nepoškodíme vzorek
- menší tření mezi hrotem a vzorkem \Rightarrow vhodné pro vzorky, které nelze pevně fixovat na podložní slídu



<u>Nevýhoda:</u>

- těžká teoretická interpretace mnohem větší rozsah sil, které na hrot působí (přitažlivé/odpudivé)
- zvýšená interakce hrotu se vzorkem vede k artefaktům u měkkých vzorků obtížné určit skutečný povrch hrot se při poklepovém režimu vždy trochu zaryje do povrchu vzorku

Mikroskopie příbuzné AFM

- 1. Mikroskopie magnetických sil
- 2. Mikroskopie laterálních sil
- 3. Mikroskopie elektrostatických sil

1. Mikroskopie magnetických sil (Magnetic Force Microscopy – MFM)

- využívá působení magnetických sil (síly dalekého dosahu) mezi zmagnetovaným povrchem vzorku a zmagnetovaným hrotem
- probíhá výhradně v bezkontaktním režimu

Princip:

 nosník s hrotem registruje změny interakcí mezi magnetickým polem vzorku a hrotem z feromagnetického materiálu



Základní detekční režimy:

- statický režim
- dynamický režim

1. Mikroskopie magnetických sil

Statický režim

- působení magnetické síly mezi hrotem a vzorkem vyvolá výchylku nosníku, která je detekována
- výsledný obraz odráží sílu vychylující nosník

Dynamický režim

- nosník kmitá blízko své rezonanční frekvence
- při přiblížení hrotu k povrchu vzorku dojde ke změně rezonanční frekvence nosníku

Detekce změny rezonanční frekvence nosníku

- měření amplitudy nosník osciluje s předem nastavenou frekvencí (vyšší než volná rezonanční frekvence). Změna frekvence vede ke změně amplitudy ⇒ detekce změny oscilační výchylky nosníku
- měření rezonanční frekvence nosník osciluje na rezonanční frekvenci pomocí amplitudového zesilovače zpětné vazby ⇒ detekce změn v rezonanční frekvenci jsou detekovány přímo frekvenčním demodulátorem

<u>Problém</u>

 do magnetického obrazu se parazitně promítá i topografie vzorku – tzn. detekovaný signál nelze jednoznačně interpretovat

1. Mikroskopie magnetických sil

Eliminace vlivu topografie vzorku

- 1. Metoda dvojího měření
- nejprve změříme pomocí AFM povrchový profil vzorku data se uloží
- následuje druhé měření s detekcí magnetických sil
 - nosník se oddálí o vzdálenost ∆z (např. 100 nm) a skenuje se vzorek s vypnutou zpětnou vazbou
 - výška nosníku se moduluje pomocí uložených dat o výšce ⇒ udržuje se konstantní vzdálenost nosníku od vzorku
 - změna signálu může být přisouzena magnetické interakci hrotu se vzorkem



- 2. Změna magnetické polarity hrotu
- Ize měřit při dvou polaritách pole a výsledky odečíst ⇒ ověření, zda je kontrast v obraze opravdu magnetické povahy
- nevýhodou může být možnost ovlivnění magnetického stavu vzorku při prvním průchodu



FeB₃ nanodráty. (a) AFM , (b, c) MFM při dvou polaritách – opačná barva konců \Rightarrow nanodrát je tyčový magnet 11

2. Mikroskopie laterálních sil (Lateral Force Microscopy – LFM)

- detekce sil, které vznikají při tažení hrotu po povrchu vzorku a způsobují zkroucení nosníku
- převážně se uplatňuje třecí síla mezi hrotem a vzorkem
- do laterálních sil se nežádoucím způsobem promítají i sklony na povrchu \Rightarrow zkreslení signálu
- vliv topografie povrchu lze částečně (nebo zcela) korigovat dvojím skenováním v opačných směrech



3. Mikroskopie elektrostatických sil (Electrostatic Force Microscopy – EFM)

- obdoba magnetické mikroskopie
- hrot nosníku mapuje *elektrostatickou sílu* vzniklou po *přiložení napětí* mezi hrot a vzorek
- velikost síly je daná vztahem: $V^2 \frac{\delta C}{\delta z}$, C kapacita sytému
- obraz odráží nehomogenity nábojové hustoty, permitivity nebo topografie povrchu vzorku



Detekce ohybu v AFM

<u>Detektor</u>

- laserová dioda promítá paprsek na nosník ⇒ odraz paprsku od nosníku na světelný detektor (např. fotodiody)
- světelný detektor rozdělen na dvě (duant) nebo čtyři citlivé části (kvadrantní detektor)

<u>Princip</u>

- před měřením se systém seřídí tak, aby svazek dopadal na špičku nosníku, a aby energie svazku dopadající do jednotlivých částí detektoru byla stejná
- při ohybu nosníku se změní rozložení energie v jednotlivých částech detektoru a z jejich velikostí je možné určit vychýlení nosníku
- *detektor typu duant* detekuje pohyb nosníku nahoru/dolu
- kvadrantní detektor detekuje navíc i zkrut nosníku



• nutné vyrobit ostrý hrot a nosník

<u>Nosník</u>

- slouží jako senzor působící síly
- požadavky na vysokou *rezonanční frekvenci* a malou *setrvačnost*
- kvalita odezvy na náhlé změny je dána hmotností (snaha minimalizovat hmotnost)

- tuhostí - citlivost roste s ohebností

- minimální hodnota tuhosti omezena stabilitou měření

(hrot se nesmí "přilepit" k povrchu vzorku)

- odolnost proti zkroucení nejvhodnější je tvar V a X
- pro maximální úhlovou výchylku nosníku je žádoucí používat co nejkratší nosník
- vlastnosti nosníku závisí na jeho použití
 - dotykový režim pružný nosník
 - bezkontaktní režim tvrdý nosník

Výroba nosníku

- výroba nosníku litografickou technologií délka 100-200 μm, šířka 10-40 μm a tloušťka do 2 μm
- obdélníkový nosník pro velmi ploché vzorky, bez požadavku na vysoké rozlišení

- obdélník se upevní pod úhlem, aby jeden roh nad vzorkem působil jako hrot

- pro vyšší rozlišení lze na roh přilepit zaostřený kousek diamantu – hrot

<u>Hrot jako součást nosníku</u>

- byly vyvinuty metody výroby hrotu jako přímá součást nosníku
- výhoda jednoho materiálu (jeden monokrystal) eliminace teplotních vlivů
- výroba kombinací izotropního a anizotropního leptání např. SiO₂ (specifické leptání krystalových rovin)

Postup litografické výroby hrotu z SiO₂

- na malý bloček monokrystalu Si (100) se teplotní oxidací vytvoří 100 nm tlustá vrstva SiO₂
- aplikace resistu na plochu bločku (tvar kruhu o průměru 5 μm) a leptáním se vytvoří kruh (základna hrotu)
- anizotropním leptáním se na kruhovém výstupku odleptá vrstva SiO₂ \Rightarrow vytvoří se válcový "zub"
- odstraní se resist z vrcholu válcového zubu a izotropním leptáním Si se zub zaostří do hrotu
- vytvoří se znovu vrstva SiO₂
- následuje vytvarování bločku do tvaru nosníku
- anizotropní a izotropní leptání specifických krystalových rovin Si se provádí např. s KOH a KOH s isopropylalkoholem
- dnešní výroba nosníků a hrotů je velmi dobře standardizovaná
- hroty s koncovým rozměrem až 2nm, standard je cca 10 nm

Hrot pro nekontaktní režim





Ostrý hrot s DLC (diamondlike carbon) výstupkem

• nosníky i hroty lze speciálně upravovat dle požadované aplikace

Diamantový nosník – aplikace vyžaduje vysokou tvrdost nosníku

Aktivované hroty – vyrobené hroty lze chemicky upravit např. pro snížení vlivu kapilárních sil, pro tzv. funkčně citlivé zobrazování

Lokalizace cytochromu b₆f komplexu v tylakoidní membráně



- molekuly plastocyaninu (Pc) navázány na hrot pomocí 10 nm PEG linkeru
- Pc je substrát pro cytochrome b₆f komplex
- vzorek skenován v poklepovém režimu
- v případě vazby Pc na cytochrom b₆f komplex je potřeba aplikovat větší sílu na odtržení hrotu

Aplikace aktivovaného hrotu - lokalizace cytochromu b₆f komplexu v tylakoidní membráně



Johnson et al., 2014, Plant Cell

Aktivace hrotů na mikroskopii magnetických sil

nanesení tenké magnetické vrstvy

Nanotrubičky jako hrot

- mají velmi malý průměr velmi vhodné pro AFM
- jednostěnné trubičky (poloměr až 0.5 nm) nebo mnohostěnné trubičky
- nejčastěji se používá uhlík nebo WS₂
- ostrost obrazu závisí i na zakončení trubičky, uhlíkové mají pětiúhelníkové, WS₂ pak trojúhelníkové
- trubičky lze naplnit chemicky nebo biologicky aktivní látkou



Speciální typy nosníků: vlevo) nosník se sférou, uprostřed) hrot s uhlíkovou nanotrubičkou plněnou železem – určeno pro MFM, vpravo) detail nanotrubičky

Piezorezistivní nosníky

- nosník slouží přímo i jako detektor
- ohybem dojde ke změně odporu piezorezistoru vytváří obraz
- pro výrobu nosníků se často používá křemík, kdy změny odporu se měří můstkovou metodou
- používají se v aplikacích, kde nelze použít laserový paprsek (např. kvůli nežádoucím změnám stavu vzorku)

Aktivní nosníky

- nosníky upraveny k přímému buzení za pomoci magnetického pole
 - a) nosník je pokryt magnetickou vrstvou nebo magnetickou částicí ⇒ kmity vyvolané střídavým magnetickým polem
 - b) používá vodivý hrot, kterým protéká proud ⇒ vytvořené magnetické pole interaguje se statickým magnetem

- základní uspořádání velmi podobné pro všechny typy mikroskopů skenující sondou
 - sonda tvořena hrotem a nosníkem
 - konstrukce závisí na typu mikroskopie
 - *skener* piezoelektrický pohybový prvek
 - úkolem je vytvářet měřící rastr a kontrolovat vzdálenost sondy od vzorku
 - *detektor* dle typu mikroskopie snímá měrnou veličinu
 - *elektronika* obvody zpětné vazby, řídící elektronika, záznam a vizualizace dat
 - stolek pro hrubý posuv vzorku (upevnění, manipulace)
 - optický systém pro snadnou orientaci na povrchu vzorku
- umožňují sledovat vzorek ve vakuu, na vzduchu, v kapalinách

Hrubý pohyb vzorku

- makroskopický posuv, který přiblíží hrotu a vzorek
- realizace posuvem hrotu, vzorku nebo hlavou mikroskopu
- rychlý posuv manuálně, pomalejší elektronicky

Skenování

- přiblížení hrotu ke vzorku po hrubém posuvu
- realizace posuvu piezokeramicky (přesnost nastavení polohy $\delta z = 1 \text{ pm}$, $\delta x = \delta y = 10 \text{ pm}$, pohybhrotu v ose z v rozsahu až 10 µm)

Realizace záznamu obrazu skenerem:

- měření v pravidelném rastru fast-scan pohyb hrotu po řádku
 - slow-scan na konci řádku pomalý posuv kolmém směru a bez

měření pohyb na začátek řádku



• pohyb kolmo ke vzorku během měření (řízen zpětnou vazbou pro udržení konstantního signálu)

Piezoprvky

 krystalické látky schopných generovat elektrický náboj při mechanickém zatížení v tlaku nebo tahu – tzv. *piezoelektrický jev*



 naopak, krystaly se kontrolovaně deformují, jsou-li vystaveny elektrickému poli – inverzní piezoelektrický jev



Piezoprvky

- základním piezokrystalickým materiálem je keramická směs PZT (Pb(Zr,Ti)O₃
- přesný poměr příměsí určuje výsledné vlastnosti
- roztažení v intervalu od méně než 0.1 nm až do stovek mikrometrů
- výroba piezokeramických prvků se provádí spékáním prášku do požadovaného tvaru
- piezoelektrický jev je podmíněn přítomností vlastních orientovaných dipólů krystalků
- vyrobený prvek se musí zahřát a vystavit stejnosměrnému elektrickému poli ⇒ rychle zchlazen ⇒ dipóly si uchovají svou orientaci



- realizace pouze jednoho směru pohybu \Rightarrow piezoprvky nemohou představovat skener
- skener se skládá z vhodné kombinace více piezoprvků

Skener – uvedené tři typy umožňují skenovat vzorek v oblasti stovek mikrometrů

- 1. <u>Trojnožka (tripod)</u>
 - tři navzájem kolmé piezokeramické hranoly s upevněným hrotem
 - pohyb ve všech třech osách
 - <u>nevýhoda</u> křížový efekt ve spoji ohyb všech hranolů i při změně délky pouze jednoho z nich
- 2. <u>Dutá trubička</u>
 - středem je umístěna vnitřní elektroda
 - vnější elektroda je rozdělena na čtyři symetrické části (protilehlé elektrody tvoří pár)
 - stejné napětí na všech elektrodách \Rightarrow prodloužení trubičky
 - různá napětí na párech elektrod ohyb trubičky do příslušného směru
 - vykazuje menší křížový efekt
 - chyby způsobené nesouměrným rozdělením elektrod, hrot mimo střed
- 3. <u>Kříž</u>
 - čtyři kolmá ramena, protilehlé dvojice slouží k posuvu v jednom směru
 - páté rameno s hrotem umožňuje pohyb ve třetím rozměru (osa z)
 - konstrukce zaručuje absenci křížového efektu v ose z



Jednotlivé konstrukční typy skenerů: tripod, kříž a trubička

Chyby skenerů a konstrukce

- z konstrukce skenerů plyne, že jednotlivé ohyby nejsou nezávislé ⇒ *chyby v polohování hrotu*
- chyby související s vlastnostmi piezokeramiky
- chyby ovlivňují skenování v rovině (tvar měřící mřížky) a velikost výškových rozdílů

<u>Intrinzická nelinearita</u>

- prodloužení či zkrácení piezokeramiky není lineárně závislé na přiloženém napětí
- efekt nelinearity se výrazněji projeví při skenování velkých ploch
- chyba se projevuje zborcením původně ekvidistantní mřížky měřících bodů

<u>Hystereze</u>

- výstupní veličina nezávisí jen na nezávisle proměnné vstupní veličině, ale i na předchozím stavu systému ⇒ tzv. paměťový efekt systému
- většina piezoelektrických materiálů vykazuje hysterezi
- vytváří se uzavřená smyčka v grafu závislosti prodloužení na přiloženém napětí (ideální je lineární závislost)
- plocha smyčky (tudíž i hystereze) roste s intenzitou el. pole E
- výhodné používat piezokeramiku s co největším koeficientem dl/dF
- projevuje se i v určení výškových rozdílů
- eliminace hystereze \Rightarrow řádkování skenování v jednom směru



Chyby skenerů a konstrukce

<u>Creep (tečení)</u>

- nastává při náhlém přiložení napětí pizokeramika se neroztahuje jako celek, ale po částech
- nastavená pozice skeneru začne zvolna "ujíždět"
- "Creep" efekt lze charakterizovat poměrem $\Delta x_c/\Delta x$, kde Δx je prodloužení po napěťovém skoku a Δx_c je "doběhové" prodloužení (rozdíl mezi skutečným prodloužení a Δx)
- projevem tečení je rozdílnost obrazů nasnímaných při různých rychlostech skenování
- ve vertikálním směru se tečení projeví "zákmitem" na prudkých výškových rozdílech



<u>Křížový efekt</u>

- nežádoucí pohyb v jednom směru, je-li požadován pohyb v odlišném směru
- způsobeno konstrukcí skeneru a nehomogenním elektrickým polem ve skeneru
- projeví se zaoblením rovinného povrchu



Chyby skenerů a konstrukce

<u>Stárnutí</u>

- při nepoužívání skeneru dochází k náhodné orientaci dipólů a k exponenciálnímu poklesu piezoelektrického koeficientu v čase
- při používání dochází naopak k dokonalé orientaci
- vhodné přiložit na elektrody skeneru napětí zabrání se ztrátě jeho účinnosti
- stárnutí skeneru se projeví chybným určováním rozměrů

<u>Tuhost a ohyb</u>

• při prudké změně rychlosti skenování může vlivem setrvačnosti skeneru dojít k ohybu hrotu

<u>Drift</u>

- pozvolné ujíždění hrotu vzhledem ke vzorku
- patrný zvláště při malých rychlostech skenování
- různé příčiny převážně tepelná (uvažujeme rozdílné koeficienty roztažnosti jednotlivých konstrukčních částí mikroskopu
- vibrace
- korekce rovnoměrného driftu srovnání dvou snímků téže oblasti a počítačová korekce obrazu o
 posun

Rentgenová strukturní analýza

<u>Teorie struktury látek</u>

• strukturou látek rozumíme geometrické vlastnosti seskupení stavebních elementů látky

Rozdělení pevných látek

- 1. krystalické a kvazikrystalické
- pravidelné uspořádání částic (atomů, molekul, iontů), které se u krystalů periodicky opakuje
- částice tvoří vzor buňku která se periodicky opakuje v 3D na velké vzdálenosti



krystal křemene (SiO₂)

• kvazikrystaly – částice jsou uspořádané, ale ne zcela periodicky



atomický model kvazikrystalu Ag-Al

Teorie struktury látek

Rozdělení pevných látek

- 2. polykrystalické
- většina látek má tuto strukturu (např. všechny kovy)
- drobné krystalky jsou v látce náhodně orientované a spojené amorfní fází
- 3. mezomorfní
- molekuly vykazují určitou pravidelnou strukturu např. kapalné krystaly
- mezomorfní stav závisí na fyzikálních podmínkách (teplota, tlak)
- přechod mezi pevnou a kapalnou fází látky zachovávají si tekutost, ale i uspořádání molekul



- 4. amorfní
- vyznačují se krátkodosahovým uspořádáním
- příklady: sklo, pryskyřice, vosk, plasty, polymery

Atomic packing factor (APF)

- bezrozměrné číslo s hodnotou < 1
- charakterizuje *rozložení strukturních elementů* v látce
- udává způsob zaplnění prostoru (jednotky objemu) atomy/molekulami
- atomy/molekuly krystalu aproximujeme jako *pevnou kuličku*
- poloměr kuličky udává maximální vzdálenost, kdy nedochází k překryvu atomů
- APF je definovaný jako poměr objemu N atomů v jednotkové prostorové buňce ku objemu jednotkové prostorové buňky

$$APF = \frac{N_{prvku}V_{prvku}}{V_{jednotková buňka}}$$

- lze dokázat, že pro jednosložkovou látku je pro nejtěsnější uspořádání APF ~0.74
- pro látku složenou z více komponent může nabývat vyšších hodnot APF > 0.74

Atomic packing factor (APF)

Jednotková prostorová buňka – krychle (Simple Cubic – SC)

- krychle strana *a*
- poloměr atomu *r*, platí: *a = 2r*
- objem atomu: $V_{at} = \frac{4}{3}\pi r^3$
- krychle může obsahovat 8 atomů (ve vrcholech krychle)
- každý atom (kulička) přispívá do jednotkové buňky 1/8
- objem krychle: $a^3 = (2r)^3 = 8r^3$
- počet atomů na buňku: n = 1

$$APF = \frac{N_{prvku}V_{prvku}}{V_{jednotková buňka}} = \frac{8 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi r^{3}}{8r^{3}} = \frac{\pi}{6} = 52\%$$







Atomic packing factor (APF)

Jednotková prostorová buňka – prostorově centrovaná krychle (Body Centered Cubic – **BCC**)

- krychle strana *a*
- poloměr atomu *r*, platí: $4r = \sqrt{3} \cdot a$
- objem atomu: $V_{at} = \frac{4}{3}\pi r^3$
- krychle může obsahovat 9 atomů
- objem krychle: $a^3 = \left(\frac{4r}{\sqrt{3}}\right)^3$
- počet atomů na buňku: n = 2

$$APF = \frac{\frac{4}{3}\pi r^3 + 8 \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{64r^3}{3\sqrt{3}}} = \frac{\sqrt{3}\pi}{8} = 68\%$$



Atomic packing factor (APF)

Jednotková prostorová buňka – plošně centrovaná krychle (Face Centered Cubic – FCC)

- krychle strana *a*
- poloměr atomu *r*, platí: $4r = \sqrt{2} \cdot a$
- objem atomu: $V_{at} = \frac{4}{3}\pi r^3$
- krychle může obsahovat (1/8)*8 + (1/2)*6 atomů
- objem krychle: $a^3 = \left(\frac{4r}{\sqrt{2}}\right)^3$
- počet atomů na buňku: n = 4

$$APF = \frac{4 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{64r^3}{2\sqrt{2}}} = \frac{\sqrt{2}\pi}{6} = 74\%$$





Atomic packing factor (APF)

Jednotková prostorová buňka – hexagonální (Hexagonal Closed-Packed – HCP)

- dvě střídající se vrstvy ABAB ...
- buňka se skládá ze tří vrstev A-B-A
- strana *a*, výška *c*
- poloměr atomu r, platí: a = 2r, $c = 4\sqrt{\frac{2}{3}}r$
- objem hexagonu: $\frac{3\sqrt{3}}{2}a^2 \cdot c = 24\sqrt{2} \cdot r^3$
- počet atomů na buňku: n = 6

$$APF = \frac{6 \cdot \frac{4}{3}\pi r^3}{\frac{3\sqrt{3}}{2}a^2.c} = \frac{\pi}{\sqrt{18}} \sim 74\%$$

3D model

2D projekce



Teoretický výpočet hustoty krystalické látky



<u> Příklad – měď</u>

- krystalová struktura: plošně centrovaná krychle FCC
- počet atomů na buňku: n = 4
- atomová hmotnost = 63.55 g/mol
- průměr atomu: r = 0.128 nm
- $V_c = a^3$, FCC platí: $a = 4r/\sqrt{2} \Rightarrow V_c = 4.75 \times 10^{-23} \text{ cm}^3$
- teoretický výpočet hustoty: ρ_{Cu} = 8.89 g/cm³
- skutečná hustota: ρ_{Cu} = 8.94 g/cm³