

Versuch im Fortgeschrittenen Praktikum in Physikalischer Chemie „Rasterkraftmikroskopie“

Gruppe 1: Alexander Zulauf und Sven Siebler

18.11.2003

1. Einleitung

Rastersondenmikroskope (SXM) können im Gegensatz zu Lichtmikroskopen auch Strukturen auflösen, die kleiner als 200nm sind. Dabei setzt sich die Bezeichnung aus den Teilen „Scanning“, „Microscopy“ und einem Platzhalter X zusammen. Dieser Platzhalter steht für unterschiedliche Wechselwirkungen, die man sich zu nutze macht. Um ein Abbild der Oberfläche mit dem AFM zu erzeugen, werden anziehende und abstoßende Kräfte ausgenutzt.

2. Theorie

Ein AFM macht sich, wie der Namen schon vermuten lässt, zwischenmolekulare Kräfte zu nutze, um Oberflächen zu untersuchen. Diese Kräfte sind van-der-Waals und abstoßende Wechselwirkungen. Sie liegen typischer Weise in einer Größenordnung von 10^{-8} und 10^{-13} N. Besonders vorteilhaft ist das AFM, da man auch in Lösungen messen kann. Dies ist besonders für biologische Forschung interessant und wichtig. Im Folgenden sollen nun die verschiedenen Kräfte beschrieben werden, die zwischen der untersuchten Oberfläche und der Spitze des Mikroskops wirken.

Als erstens gibt es die anziehenden Kräfte, die van-der-Waals Kräfte. Sie entstehen aufgrund der Wechselwirkung von z.B. zwei permanenten Dipolen. Diese ziehen sich bei unterschiedlicher Orientierung an:

$$U_0 \propto \mathbf{m}_1^2 \cdot \mathbf{m}_2^2 \cdot r^{-6} \quad (1)$$

μ = Dipolmoment der Moleküle; r = Abstand der Moleküle

Des Weiteren kann ein permanenter Dipol bei einem benachbarten Molekül einen Dipol induzieren, so dass auch in diesem Fall anziehende Kräfte wirken. Dies wird als Induktionseffekt bezeichnet. Die wirkende Kraft ist gegeben durch:

$$U_1 \propto -\mathbf{m}_1^2 \cdot \mathbf{a}_2 \cdot r^{-6} \quad (2)$$

μ = Dipolmoment des Moleküls; \mathbf{a} = Polarisierbarkeit des zweiten Moleküls; r = Abstand

Wenn nun dipolfreie Moleküle vorliegen, dann wirken nur kurzzeitige Anziehungskräfte. Dies sind die sog. Dispersionswechselwirkungen. Für sie gilt:

$$U_D \propto -\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \cdot r^{-6} \quad (3)$$

\mathbf{a} = Polarisierbarkeit der Moleküle; r = Abstand

Die damit gesamt wirkenden anziehenden Kräfte ergeben sich durch Summation der drei verschiedenen Einzelkräfte, welche damit proportional zu $1/r^6$ sind. Wenn man nun allerdings die makroskopisch wirkenden Kräfte zwischen der Oberfläche und der

Mikroskopspitze betrachten will, beobachtet man ein etwas anderes Verhalten. Hier ist das Potential nur noch umgekehrt proportional zum Abstand der betrachteten Körper:

$$U_{\text{anziehend}} = \frac{\rho^2 r_1 r_2 C R}{6} \cdot \frac{1}{r} = \frac{A R}{6} \cdot \frac{1}{r} \quad (4)$$

ρ = Teilchendichte; R = Kugelradius; r = Abstand der betrachteten Körper; C = Londonsche Dispersionskonstante; A = Hamaker Konstante

Diesen Kräften stehen die abstoßenden Wechselwirkungen entgegen. Sie entstehen z.B. durch die Abstoßung der Elektronenhüllen der betrachteten Atome oder Moleküle. Dies wird z.B. durch das Harte Kugel Modell vereinfacht beschrieben:

$$U_{HK} = \left(\frac{\mathbf{s}}{r} \right)^n, \text{ mit } n = \infty \quad (5)$$

\mathbf{s} = Harte-Kugel-Radius; r = Teilchenabstand

Wenn der Teilchenabstand also geringer wird als der Harte-Kugel-Radius, dann schnell das Potential ins Unendliche. Andersherum wird es null, wenn der Abstand größer wird.

Zum anderen gilt das Pauli-Verbot. So dürfen die Elektronenwolken zweier Moleküle nicht überlappen, da in diesem Fall die Elektronen in einem Orbitalen mit derselben Orientierung vorkommen würden. Dies ist im Normalfall nicht erlaubt (Ausnahme gilt nur für Bosonen). Dies wird häufig in einem Exponentialgesetz

$$U_{\text{abstoßend}} = c \cdot e^{-\frac{r}{\mathbf{s}_0}} \quad (6)$$

c und \mathbf{s}_0 sind angepasste Konstanten; r = Abstand

oder einem Potenzgesetz

$$U_{\text{abstoßend}} = \left(\frac{\mathbf{s}}{r} \right)^n, \text{ mit } 9 \leq n \leq 12 \quad (7)$$

veranschaulicht. Diese Beschreibungen sind genauer, da sie die Kompressibilität der Atome berücksichtigen.

Beide Modelle haben gemeinsam, dass diese Kräfte nur eine kurze Reichweite und eine große Abstandsabhängigkeit besitzen.

Wenn man sich nun diese Kräfte zunutze macht, ist eine getrennte Betrachtung natürlich nicht sinnvoll. Zur Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen der AFM-Spitze und der Oberfläche kombiniert man die anziehenden und abstoßenden Kräfte. Man erhält mit den Gleichungen (4) und (7) folgendes Potential:

$$U = -\frac{A R}{6 r} + \frac{B}{r^{12}} \quad (8)$$

wobei der Exponent der abstoßenden Wechselwirkungen gleich 12 gesetzt wird.

Zur Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen zwei Atomen kann man jedoch die vereinfachte Version der Gleichung (4) verwenden, die sich durch einfache Summation der Einzelpotentiale (1) – (3) ergibt. Zusammen mit Gleichung (7) erhält man dann das Lennard-Jones-Potential:

$$U = 4\epsilon \left[\left(\frac{\mathbf{s}_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\mathbf{s}_0}{r} \right)^6 \right] \quad (9)$$

s_0 ist hierbei der Abstand, bei dem das Potential Null wird. e beschreibt die Tiefe der Potentialmulde. Wenn man also nun die Gleichgewichtslage der Atome beschrieben will, muss das Potential minimal werden.

Der Gleichgewichtsabstand beträgt:

$$r_{eq} = 2^{1/6} \cdot s \quad (10)$$

Einen weiteren Effekt den sich ein Rastersondenmikroskop zu Nutze macht ist, der so genannte quantenmechanische Tunneleffekt. Das Mikroskop bezeichnet man deshalb auch als Rastertunnelmikroskop (RTM). Dieser Effekt beruht darauf, dass in der Quantenmechanik der Aufenthaltsort eines Teilchens nur durch Wahrscheinlichkeiten angegeben werden kann. Hier zu wird das Quadrat der zugehörigen Wellenfunktion gebildet.

Wenn sich nun die Spitze des RTM oberhalb der Oberfläche befindet, dann kann man diesen Abstand als eine Potentialbarriere ansehen. Nach der klassischen Mechanik ist es einem Teilchen (Elektron) nicht möglich diese Barriere zu überwinden. Nach der Quantenmechanik jedoch, gibt es eben eine sehr geringe Wahrscheinlichkeit, dass sich das Elektron auf der „anderen Seite“, also an der Spitze des RTM befindet. Somit wäre durch dieses „Tunneln“ des Elektrons ein Strom geflossen, der gemessen werden kann. Dieser Strom ist abhängig von der Überlappung der Wellenfunktion der beteiligten Energieniveaus und ihrer Besetzungszahlen. Hieraus bekommt man eine exponentielle Abhängigkeit vom Abstand zwischen Probe und Spitze:

$$I \propto U \cdot e^{-2kd} \quad (11)$$

Aufgrund dieser Exponentiellen Abhängigkeit, werden 90% des Tunnelstromes wirklich über das vorderste Spitzenatom gemessen. Somit ist eine wirkliche atomare Auflösung möglich. Die Größenordnung des Tunnelstroms liegt ungefähr bei 1nA. Der Nachteil des RTM ist, dass nur leitfähige Oberflächen vermessen werden können.

Nun wird im Folgenden der prinzipielle Aufbau und die Funktionsweise eines Rastersondenmikroskops (RSM) beschrieben, hierbei wird jedoch nur genauer auf das AFM eingegangen, da wir nur dieses in unserem Versuch verwendet haben.

Allgemein besteht ein RSM aus einer Probe mit Probenhalterung und Positionierung, einer Sonde, einer Schwingungsdämpfung und einer Steuerungs- bzw. Auswertungseinheit. Die Sonde wird nun oberhalb der Probe positioniert und über die Oberfläche bewegt. Hierbei werden die Oberflächeneigenschaften durch die Sonde gemessen.

Da die Positionierung direkt auf bzw. über der Probe mechanisch nur sehr schwierig durchzuführen wäre, macht man sich für die Feinsteuerung den so genannten inversen piezoelektrischen Effekt zunutze. Dieser Effekt kann bei allen Stoffen auftreten, die eine permanente Polarisation aufweisen, ohne dass ein äußeres Feld angelegt ist. Diese interne Polarisation kommt durch interne parallel ausgerichtete permanente Dipole zustande. Diese können nun durch Anlegen eines elektrischen Feldes gezwungen werden Ihre Orientierung zu ändern und können somit eine Längenänderung bewirken. Dieser Effekt wird inverser piezoelektrischer Effekt genannt.

Wenn die Polarisation durch mechanischen Druck geändert wird, dann bezeichnet man das als Piezoelektrizität.

Bei unserem AFM wurde zur Feinsteuerung ein Rohscanner verwendet, der aus einer zirkular polarisierten Keramik besteht, die auf der Innenseite eine Elektrode und auf der Außenseite 4 isolierte Elektroden trägt.

Durch Anlegen einer unsymmetrischen Spannung lässt sich also eine Verschiebung in x- y- oder z-Richtung bewirken, je nachdem welche Elektroden geschaltet werden. Somit lässt sich die Spitze also sehr genau auf der Oberfläche positionieren ohne diese zu beschädigen.

Der Scanvorgang kann auf zwei verschiedene Arten durchgeführt werden. Entweder im Auflagemodus oder im „Non Contact“-Mode.

Im Auflagemodus wird die Spitze des AFM mit Hilfe eines Federbalkens auf die Oberfläche gedrückt. Dieser Federbalken ist mit Gold bedampft, so dass er einen Laserstrahl reflektiert. Der Laserstrahl trifft auf den Federbalken und wird unter einem bestimmten Winkel reflektiert. Ändert sich nun die Höhe der Spitze ändert sich somit auch der Reflexionswinkel des Lasers. Dieser Winkel wird mit Hilfe einer Vierfeld-Photoelektrode gemessen. So kann eine Höhenänderung genauso wie ein Verkippen der Spitze durch eine Änderung des Photostromwertes registriert werden.

Der Auflagemodus kann wiederum auch in zwei unterschiedlichen Moden durchgeführt werden. Im Mode konstanter Kraft wird mit Hilfe eines Rückkopplungskreises der z-Piezo nachgeregelt, so dass das Signal der Photoelektrode konstant bleibt. So kann über die sich ändernde Steuerspannung des z-Piezo die Höheninformation gewonnen werden.

Die Zweite Möglichkeit ist der Mode konstanter Höhe. Hierbei wird kein Rückkopplungskreis benötigt, was den Vorteil hat, dass die Messung schneller durchgeführt werden kann. Die Feder wird nicht nachgeregelt sondern biegt sich je nach Topographie der Oberfläche durch. Hieraus resultiert wieder eine Änderung des Reflexionswinkels und damit eine Änderung des Photostroms. Allerdings muss zur Gewinnung der Höheninformation unter Umständen die Federkonstante berücksichtigt werden. Auch ist dieses Verfahren nur bei sehr glatten Oberflächen zu verwenden, da ansonsten evtl. die Spitze beschädigt werden kann.

Im „Non Contact“-Modus befindet sich die Spitze einige nm oberhalb der Oberfläche. Die Spitze wird nun über ein Piezoelement nahe ihrer Resonanzfrequenz in Schwingung gebracht. Die Wechselwirkung zwischen Spitze und Oberfläche bewirkt nun eine Änderung der Federkonstanten k , welche wegen

$$n = \frac{1}{2p} \cdot \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (12)$$

eine unmittelbare Änderung der Resonanzfrequenz bewirkt. Dies führt zu einer Änderung der Amplitude, welche nun wieder durch Nachregeln des Piezoelementes konstant gehalten wird. Die Änderung der Piezospannung liefert also wieder direkt die Höheninformation.

3. Versuchsdurchführung

Zur praktischen Durchführung wird der Laser justiert, so dass er genau auf den Mittelpunkt des Vierfeldphotodetektors fällt.

Nun soll als erstes die Auflagekraft der Spitze auf die Probe gemessen und berechnet werden. Hierzu wird die Spitze automatisch angenähert und das Sensorsignal in Abhängigkeit von der Zeit aufgenommen.

Als nächstes wird das AFM geeicht, indem vier Messungen von Mikrostrukturen mit bekannten Gitterkonstanten durchgeführt werden. Diese werden mit zwei Unterschiedlichen Auflösungen und Geschwindigkeiten aufgenommen.

Anschließend wird über die Software der Abstand von drei horizontalen und drei vertikalen Gitterreihen ermittelt.

Die wirkende Kraft zwischen der Spitze und der Probe soll mit Werten von typischen Bindungskräften und van-der-Waals Kräften verglichen werden.

Als dritte Aufgabe wird die dritte Probe mit atomarer Auflösung gescannt und anhand von zur Verfügung gestellten Daten bestimmt, um welche Substanz es sich handelt. Als letztes wird ein Übersichtsbild einiger DNA-Plasmide aufgenommen und Ihre Höhe bestimmt. Der ermittelte Wert soll mit dem Literaturwert von 2nm verglichen werden.

Des Weiteren sollen eine Reihe von theoretischen Aufgaben gelöst werden.

4. Auswertung der Ergebnisse

Aufgabe 2:

Da auf die van-der-Waals Kräfte bereits im Theorieteil eingegangen wurde, wird hier direkt mit der Berechnung des Lennard-Jones-Potentials für zwei Argonatome begonnen.

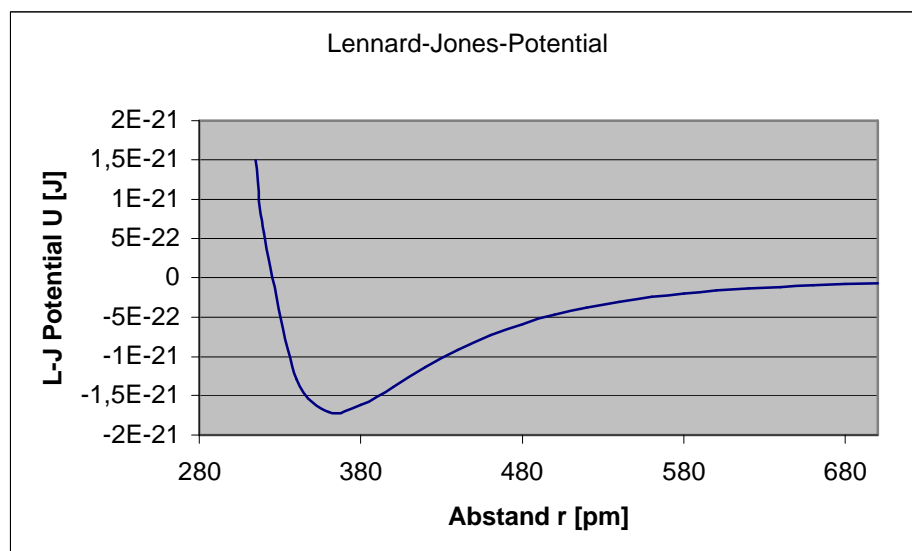
Hierzu wird die Gleichung (9) verwendet:

$$U = 4e \left[\left(\frac{s_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{s_0}{r} \right)^6 \right]$$

Für die benötigten Parameter s_0 und e werden Literaturdaten¹ verwendet.

$$U(r) = 4 \cdot 1,712 \cdot 10^{-21} \text{ J} \cdot \left[\left(\frac{342 \text{ pm}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{342 \text{ pm}}{r} \right)^6 \right]$$

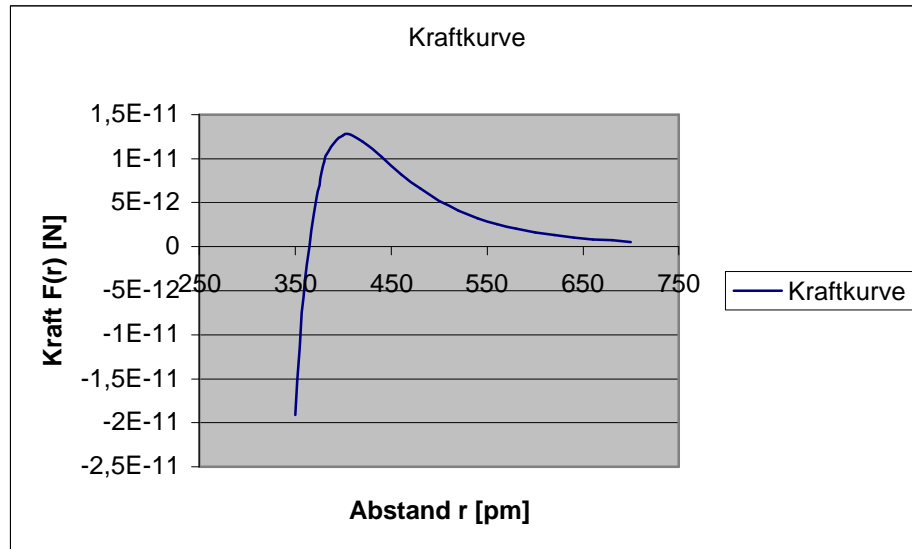
Die Graphische Auftragung von U gegen r liefert uns die Potentialkurve für die beiden Argon Atome:



¹ Peter W. Atkins, *Physikalische Chemie*, 3. korrigierte Auflage, 2001, S.728 Tab 22.4

Die Kraftkurve dieses Potentialverlaufes erhalten wir indem wir das Potential nach dem Abstand ableiten:

$$F(r) = \frac{\partial U}{\partial r} = 4e \cdot \left[\frac{6s_0^6}{r^7} - \frac{12s_0^{12}}{r^{13}} \right]$$



Das Maximum dieser Funktion erhalten wir durch Bildung der zweiten Ableitung

$$F'(r) = \frac{\partial F(r)}{\partial r} = 4e \cdot \left[-\frac{42s_0^6}{r^8} + \frac{156s_0^{12}}{r^{14}} \right]$$

und anschließend gleichsetzen mit Null:

$$4e \cdot \left[-\frac{42s_0^6}{r^8} + \frac{156s_0^{12}}{r^{14}} \right] = 0$$

Diese Gleichung ist nur erfüllt, wenn gilt:

$$\left[-\frac{42s_0^6}{r^8} + \frac{156s_0^{12}}{r^{14}} \right] = 0$$

Umformen nach r liefert den gewünschten Abstand bei der die Kraft zwischen den Argonatomen am größten ist:

$$r = \sqrt[6]{\frac{156s_0^6}{42}} = s_0 \cdot \sqrt[6]{\frac{78}{21}}$$

Für $s_0 = 342 \text{ pm}$ erhalten wir

$$r = 425,6 \text{ pm}$$

Durch Einsetzen dieses Wertes in die Kraftgleichung erhalten wir:

$$F(r) = 4e \cdot \left[\frac{6s_0^6}{r^7} - \frac{12s_0^{12}}{r^{13}} \right]$$

$$F_{\max} = 4 \cdot 1,712 \cdot 10^{-21} \text{ J} \cdot \left[\frac{6 \cdot (342 \text{ pm})^6}{(425 \text{ pm})^7} - \frac{12 \cdot (342 \text{ pm})^{12}}{(425 \text{ pm})^{13}} \right] = 1,2 \cdot 10^{-11} \text{ N}$$

Aufgaben 3:

Es soll nun die Kraft berechnet werden, mit der die Spitze des AFM auf die Oberfläche drückt. Dieses geschieht durch automatisches Annähern der Spitze. Das sich dadurch ändernde „Internal-Sensor-Feedback“ wird gemessen und daraus der Kraftnullpunkt bestimmt. Es beträgt $F_0 = 22nA$. Mit Hilfe des Umrechnungsfaktors

von $0,1 \frac{nN}{nA}$ erhalten wir damit eine Auflagekraft von

$$F = 22nA \cdot 0,1 \frac{nN}{nA} = 2,2nN \equiv 2,2 \cdot 10^{-9} N$$

Aufgabe 4:

Im Folgenden wird eine Mikrostruktur mit einer Gitterkonstanten von 200nm mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten vermessen. Die erhaltenen Werte werden mit den realen Werten verglichen.

Die ermittelten Abstandswerte sind in den folgenden Tabellen zusammengefasst:

Messung1 2500mm x 2500mm 1 Zeile/s horizontal

Linie1			Linie2			Linie3		
Abstand [nm]	Gitterpkt.	Gitterkonst.	Abstand [nm]	Gitterpkt.	Gitterkonst.	Abstand [nm]	Gitterpkt.	Gitterkonst.
907,6	3	302,53	978,3	3	326,10	1891	6	315,17
1533	5	306,60	347,8	1	347,80	630,4	2	315,20
1228	4	307,00	972,8	3	324,27	907,6	3	302,53
1196	4	299,00	1913	6	318,83	1560	5	312,00
1842	6	307,00	907,6	3	302,53	1554	5	310,80
635,9	2	317,95	293,5	1	293,50	923,9	3	307,97
vertikal								
1395	5	279,00	826,2	3	275,40	568,4	2	284,20
831,5	3	277,17	1084	4	271,00	536,8	2	268,40
1416	5	283,20	1958	7	279,71	568,4	2	284,20
847,6	3	282,53	525,8	2	262,90	552,6	2	276,30
1685	6	280,83	836,9	3	278,97	1947	7	278,14
563,3	2	281,65	557,9	2	278,95	1100	4	275,00

Messung2 1000mm x 1000mm 1 Zeile/s horizontal

Linie1			Linie2			Linie3		
Abstand [nm]	Gitterpkt.	Gitterkonst.	Abstand [nm]	Gitterpkt.	Gitterkonst.	Abstand [nm]	Gitterpkt.	Gitterkonst.
182,4	1	182,40	165,2	1	165,20	165,2	1	165,20
225,3	1	225,30	203,9	1	203,90	195,3	1	195,30
598,7	3	199,57	566,5	3	188,83	562,2	3	187,40
336,9	2	168,45	332,6	2	166,30	725,3	4	181,33
			399,1	2	199,55	364,8	2	182,40
vertikal								
218,9	1	218,90	324	2	162,00	216,7	2	108,35
321,9	2	160,95	530	3	176,67			
540,8	3	180,27						

Messung3 2500mm x 2500 mm 4 Zeilen/s horizontal

Linie1			Linie2			Linie3		
Abstand [nm]	Gitterpkt.	Gitterkonst.	Abstand [nm]	Gitterpkt.	Gitterkonst.	Abstand [nm]	Gitterpkt.	Gitterkonst.
654,5	2	327,25	348,7	1	348,70	343,3	1	343,30
321,9	1	321,90	659,9	2	329,95	649,1	2	324,55
971	3	323,67	1642	5	328,40	960,3	3	320,10
949,6	3	316,53	321,9	1	321,90	1304	4	326,00
1931	6	321,83	987,1	3	329,03	1336	4	334,00
1293	4	323,25	1293	4	323,25	992,5	3	330,83
vertikal								
359,4	1	359,40	370,2	1	370,20	364,8	1	364,80
311,2	1	311,20	316,5	1	316,50	643,8	2	321,90
563,3	2	281,65	971	3	323,67	1282	4	320,50
676	2	338,00	1481	5	296,20	1202	4	300,50
869,1	3	289,70	563,3	2	281,65	1196	4	299,00
1497	5	299,40	1567	5	313,40	1845	6	307,50

Messung 4 1000mm x 1000mm 4 Zeilen/s horizontal

Linie1			Linie2			Linie3		
Abstand [nm]	Gitterpkt.	Gitterkonst.	Abstand [nm]	Gitterpkt.	Gitterkonst.	Abstand [nm]	Gitterpkt.	Gitterkonst.
150,2	1	150,20	176	1	176,00	163,1	1	163,10
416,3	2	208,15	390,6	2	195,30	218,9	1	218,90
598,7	3	199,57	271,2	2	135,60	414,2	2	207,10
746,8	4	186,70	746,8	4	186,70	532,2	3	177,40
206	1	206,00	188,8	1	188,80	585,8	3	195,27
536,5	3	178,83	746,8	4	186,70	748,9	4	187,23
vertikal								
231,8	1	231,80	191	1	191,00	203,9	1	203,90
218,9	1	218,90	223,2	1	223,20	238,2	1	238,20
392,7	2	196,35	414,2	2	207,10	412	2	206,00
403,4	2	201,70	384,1	2	192,05	375,5	2	187,75
618	3	206,00	605,2	3	201,73	613,7	3	204,57

Die aus diesen Daten berechneten mittleren Gitterkonstanten sind mit Ihrer prozentualen Abweichung vom Sollwert (200nm) in folgender Tabelle aufgeführt:

	Messung 1	Messung 2	Messung 3	Messung 4
Horizontal [nm]	312,04	186,51	327,47	185,97
Abweichung [%]	56,02	6,745	63,735	7,015
Vertikal [nm]	277,64	167,86	316,40	207,35
Abweichung [%]	38,82	16,07	58,2	3,675

Aus diesen Werten wird deutlich, dass das AFM einen sehr großen Fehler besitzt, da z.T. Abweichungen von über 60% auftreten. Außerdem fällt auf das der Rohrscanner in x und y Richtung einen unterschiedlichen Fehler aufweist. Allerdings lässt sich sehr schön erkennen, dass bei den Messungen 2 und 4, bei denen mit einer höheren Auflösung gescannt wurde, die Fehler deutlich kleiner sind.

Des Weiteren soll die in Aufgabe 3 ermittelte Auflagekraft des AFM mit typischen Bindungskräften verglichen werden.

Hierzu wird die schon in Aufgabe 2 bestimmte van-der-Waals-Kraft zwischen Argonatomen und die (noch zu berechnende) Kraft der kovalenten Bindung im HCl herangezogen.

Das Vorgehen zur Bestimmung der Bindungskräfte im HCl ist analog zu Aufgabe 2. Der Potentialverlauf beim HCl lässt sich durch das Morsepotential beschreiben:

$$U(r) = hcD_{eq} \left[1 - \exp \left(- \left(\frac{m}{2hcD_{eq}} \right)^{1/2} \cdot w \cdot (r - s) \right) \right]^2$$

D_{eq} = Dissoziationsenergie; μ = reduzierte Masse; w = Schwingungsfrequenz; r_{eq} = Bindungslänge

Die Parameter für HCl betragen²:

$$D_{eq} = 37212 \text{ cm}^{-1}$$

$$m = 1,63 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$$

$$w = 5,63 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$$

$$s = 127,45 \text{ pm}$$

Aus dieser Potentialkurve lässt sich nun wieder durch Bildung der Ableitung die Kraftkurve berechnen:

$$U'[r] = \sqrt{2}chw \left(1 - \exp \left[- \frac{(r-s)w \sqrt{\frac{m}{chD_{eq}}}}{\sqrt{2}} \right] \right) \sqrt{\frac{m}{chD_{eq}}} D_{eq} \exp' \left[- \frac{(r-s)w \sqrt{\frac{m}{chD_{eq}}}}{\sqrt{2}} \right]$$

Zur Vereinfachung wird die Gleichung substituiert:

$$F(r) = 2ab \cdot (1 - e^{-b(r-s)}) \cdot e^{-b(r-s)} = 2ab \cdot (e^{-b(r-s)} - e^{-2b(r-s)})$$

$$\text{mit } a = hcD_{eq} \quad \text{und} \quad b = \left(\frac{m}{2hcD_{eq}} \right)^{1/2} w$$

Zur Bestimmung des Maximum wird nun die erste Ableitung der Kraftkurve nach r gebildet und gleich Null gesetzt:

$$F'(r) = 2ab^2 \cdot (2e^{-2b(r-s)} - e^{-b(r-s)})$$

$$F'(r) = 2ab^2 \cdot (2e^{-2b(r-s)} - e^{-b(r-s)}) = 0$$

Diese ist nur erfüllt wenn gilt:

$$(2e^{-2b(r-s)} - e^{-b(r-s)}) = 0$$

Aufgelöst nach r :

$$r = \frac{\ln 2}{b} + s$$

² Peter W. Atkins, *Physikalische Chemie*, dritte Auflage, 2001

Mit $\mathbf{b} = \left(\frac{\mathbf{m}}{2hcD_{eq}} \right)^{1/2} \mathbf{w}$ folgt

$$r = \ln 2 \cdot \left(\left(\frac{\mathbf{m}}{2hcD_{eq}} \right)^{1/2} \mathbf{w} \right)^{-1} + \mathbf{s}$$

Einsetzen der Parameter liefert:

$$r = \ln 2 \cdot \left(\left(\frac{1,63 \cdot 10^{-27} \text{ kg}}{2 \cdot 6,62608 \cdot 10^{-34} \text{ Js} \cdot 2,998 \cdot 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}} \cdot 37212 \text{ cm}^{-1}} \right)^{1/2} \cdot 5,63 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1} \right)^{-1} + 127,45 \text{ pm}$$

$$r = 164,53 \text{ pm} \approx 165 \text{ pm}$$

Einsetzen in die Kraftgleichung liefert:

$$F_{\max} = 6,91 \cdot 10^{-9} \text{ N}$$

Vergleich der unterschiedlichen Kräfte:

$$\text{Kovalente Bindung: } F_{\max} = 6,91 \cdot 10^{-9} \text{ N}$$

$$\text{Van-der-Waals Kräfte: } F_{\max} = 1,2 \cdot 10^{-11} \text{ N}$$

$$\text{Sensorkraft: } F = 2,2 \cdot 10^{-9} \text{ N}$$

Es wird deutlich das die Auflagekraft des AFM die van-der-Waals Kräfte um zwei Größenordnungen übersteigt und in der Größenordnung von kovalenten Bindungen liegt. Somit wird auch klar, warum mit Hilfe eines AFM Moleküle auf der Oberfläche bewegt und neu angeordnet werden können.

Aufgabe 5:

Nun wurde eine Übersicht mit atomarer Auflösung von einer zu identifizierenden Probe aufgenommen. Man erkennt sehr schön die hexagonale Struktur. Es werden wieder die Atomabstände und die Bindungswinkel vermessen. Die Ergebnisse sind in der folgenden Tabelle dargestellt:

Abstand [nm]	Atome	Atomabstand	Winkel [°]
2,375	4	0,59	57,62
2,588	4	0,65	123,49
1,63	3	0,54	114,21
Durchschnitt:		0,59	98,44

Ein Vergleich mit den uns zur Verfügung stehenden Daten zeigt, dass es sich bei dem untersuchten Stoff um Glimmer handeln muss.

Aufgabe 6

Als nächstes werden im „Non Contact“-Mode einige DNA Plasmide aufgenommen. Es soll die Höhe dieser Plasmide bestimmt werden.

Aus den im Anhang beigefügten Werten wird eine mittlere Höhe von
 $h = 0,59 \text{ nm}$

bestimmt.

Dieser Wert weicht ziemlich vom tatsächlichen Wert von 2 nm ab. Dies liegt unter anderem daran, dass sich aufgrund der Umgebungsbedingungen immer ein geringer Wasserfilm auf der Probe befindet. Dadurch wird das Ergebnis zusätzlich zum schon in Aufgabe 4 festgestellten Fehler verfälscht. Diesen Fehler könnte man aber umgehen, indem man direkt in Lösung misst.

5. Fehlerbetrachtung

Bei diesem Versuch gibt es eine ganze Reihe von Fehlerquellen. Die größte ist wohl bei unseren Messungen der Rohrscanner gewesen. Da dieser bei vorherigen Messungen zu heiß wurde, entspricht er nicht mehr den ursprünglichen Spezifikationen bzgl. Anlegen eines elektrischen Feldes und daraus resultierender Verformung. Dies erklärt auch die massiven Abweichungen bei den Messungen der Kalibrierungsgitter. Allerdings ist dort auch schön zu sehen, dass sich dieses Überhitzen in x- und y- Richtung des Scanners unterschiedlich stark ausgewirkt hat. Ein weiterer Grund für die großen Abweichungen kann natürlich auch die Spitze selber sein. Sie ist größer als die zu vermessenden Löcher und passt somit nicht vollständig hinein. Somit messen wir im Grunde immer nur den Abstand der beiden äußeren Kanten.

Des Weiteren ist das AFM natürlich sehr störungsanfällig was Schwingungen der Umgebung angeht. Der Versuchsaufbau ist zwar auf einem Schwingungsgedämpften Tisch platziert, aber dennoch waren Störschwingungen deutlich zu erkennen. Dies beeinflusst das Ergebnis natürlich wiederum.

Besonders deutlich wurde das beim Scan mit atomarer Auflösung. Da nach zweimaligem Versuch kein vernünftiges Bild aufgenommen werden konnte, musste zur Auswertung ein Übersichtsbild vom Vortag verwendet werden.