

7 Blatt - Festkörperphysik 2 - Surface extended X-ray absorption fine structure (SEXAFS)

7.1 (Nächster Nachbar Abstand für Schwefel adsorbiert auf Ni(100))

Wir wollen aus den Extrema der Energien des SEXAFS Spektrums den nächste Nachbar-Abstand für Schwefel adsorbiert auf Ni(100) abschätzen.

skipped

7.2 (Senkrechter Abstand der S Atome von der obersten Ni-Lage)

Die Maxima aus der FT befinden sich bei

$$\begin{aligned} a_1 &= 2.23 \pm 0.02 \text{ \AA} \\ a_2 &= 4.15 \pm 0.10 \text{ \AA} \end{aligned}$$

Es ist unter der Annahme einer unrelaxierten Ni(100) Oberfläche (fcc: $a = 3.52 \text{ \AA}$) der senkrechte Abstand der Schwefelatome von der obersten Ni-Lage für den Muldenplatz zu bestimmen. Die zwei Peaks zeigen uns die Abstände des S zu den Ni-Atomen an, wobei die nächsten Nachbarn zwei Ni Atome im Abstand a_1 sind und das S direkt über einem Ni (Muldenatom) sitzt, welches sich im Abstand a_2 befindet. Die Gitterkonstante bezogen auf das kubische Gitter ist gegeben mit $a = 3.52 \text{ \AA}$, daraus ergibt sich also ein senkrechter Abstand der Ni-Atome von der unteren Ni-Atomlage mit $a_{Ni,\perp} = \frac{3.52}{2} \text{ \AA}$. Dies können wir nun mit dem a_2 Peak verrechnen. Somit erhalten wir für den senkrechten Abstand des S Atoms von der obersten Atomlage von $a_{S-Ni,\perp} = (4.15 - \frac{3.52}{2}) \text{ \AA} = 2.39 \text{ \AA}$. Dies ist jedoch nicht möglich, da der Abstand von den Ni's der obersten Lage bereits $2.23 \text{ \AA}$ beträgt und der Gesamtabstand nicht geringer sein kann, als der senkrechte Abstand. Hier kann uns nur der Fehler zu Hilfe eilen. Betrachten wir dies, so kommen wir auf:

$$a_{S-Ni,\perp} = \left(4.15 - \frac{3.52}{2} \right) \text{ \AA} = 2.39 \pm 0.10 \text{ \AA}$$

wobei die anderen Seiten des Dreiecks $a_1 = 2.23 \pm 0.02 \text{ \AA}$ und $a_3 = 1.76 \text{ \AA}$ betragen. Dies würde uns jedoch

$$a_{S-Ni,\perp} = 1.37 \text{ \AA}$$

erwarten lassen. Dies ist mit dem gefundenen Ergebnis jedoch nicht vereinbar. (Evtl. ist das verwendete Gittermodell falsch (vgl. 7.4) oder die Angabe des fcc bezieht sich nicht auf die kubische Gitterkonstante, sondern auf den nächste Nachbarabstand. Evtl. erhalten wir als 2. Peak auch ein nächste Nachbar S-Atom, dagegen spricht jedoch die 2x2 Struktur, womit das nächste S Atom ca. $2 \cdot a_{Ni} = 7.04 \text{ \AA}$ entfernt sein müsste, was mit dem $4.15 \text{ \AA}$ nicht vereinbar wäre. Leider ergeben sich hier widersprüche. Es deutet alles auf eine falsche Gittermodell-Vorstellung hin.)

7.3 (S auf on-top sites ?)

Es ist festzustellen, ob die vorliegenden Informationen ausreichen, um auszuschließen, dass die Schwefelatome direkt über den Nickel-Atomen (on-top site) sitzen. Die Informationen reichen aus. Wir erhalten auf Grund den zwei Peaks die Erkenntnis, dass die Schwefelatome zwischen den Nickelatomen in den "Muldenplätzen" sitzen müssen. (Dies scheint falsch zu sein, da die Aufgabe 7.2 nicht auf geht, daraus wird dies hier auch falsch sein.)

7.4 (c(2x2) Struktur von S/Ni(100))

Es ist die c(2x2) Struktur von S auf Ni(100) zu skizzieren. Die Skizze befindet sich in Abbildung (1).

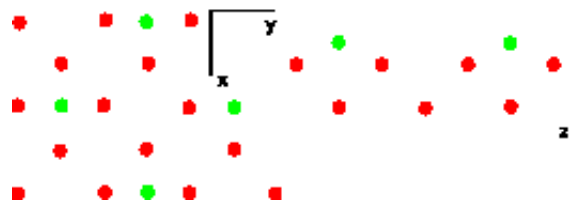


Figure 1: Skizze der c(2x2) Struktur von S/Ni(100) (qualitativ). Die Ni-Atome sind in rot, die S-Atome sind in grün gezeichnet.