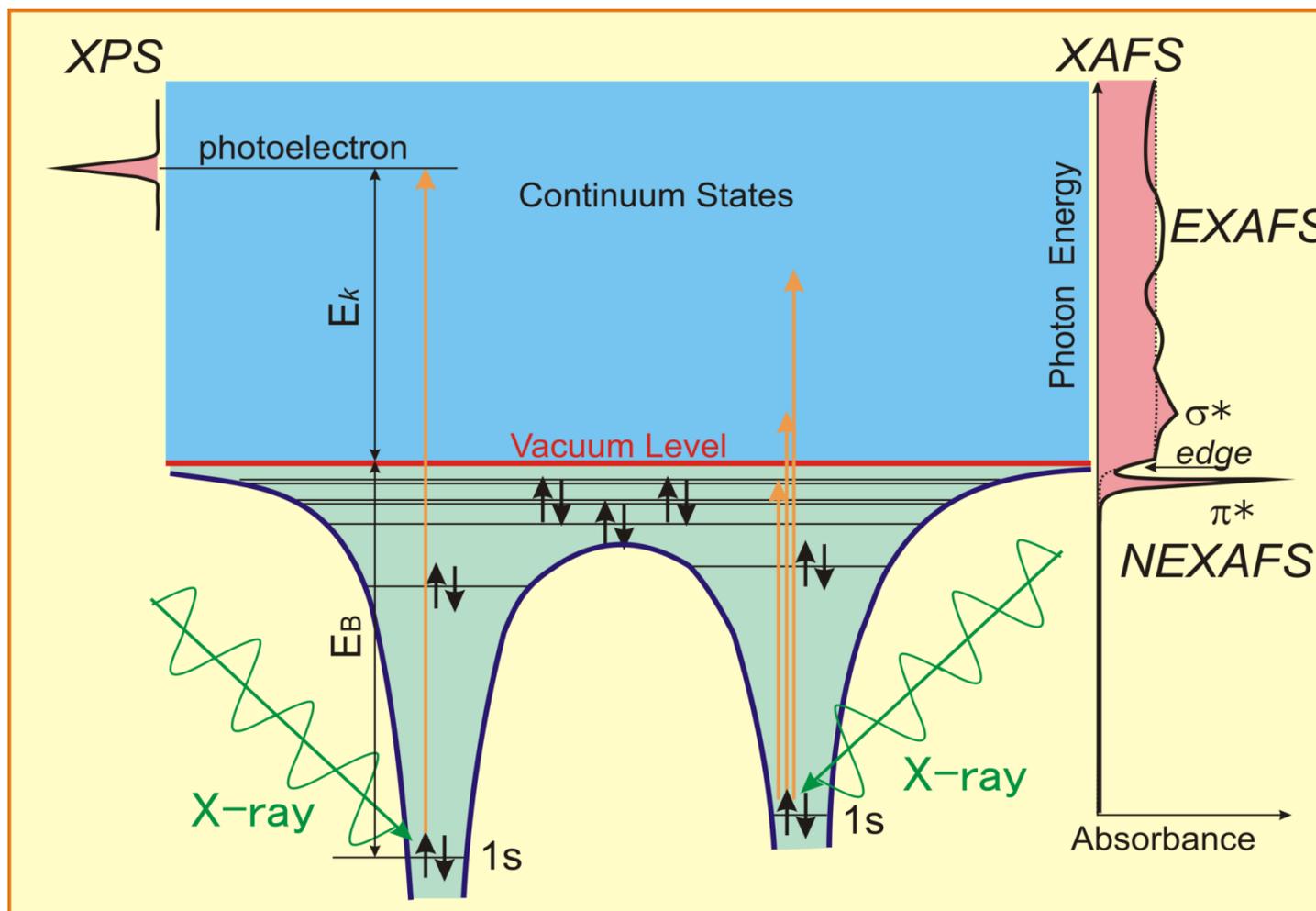


XAFSとは

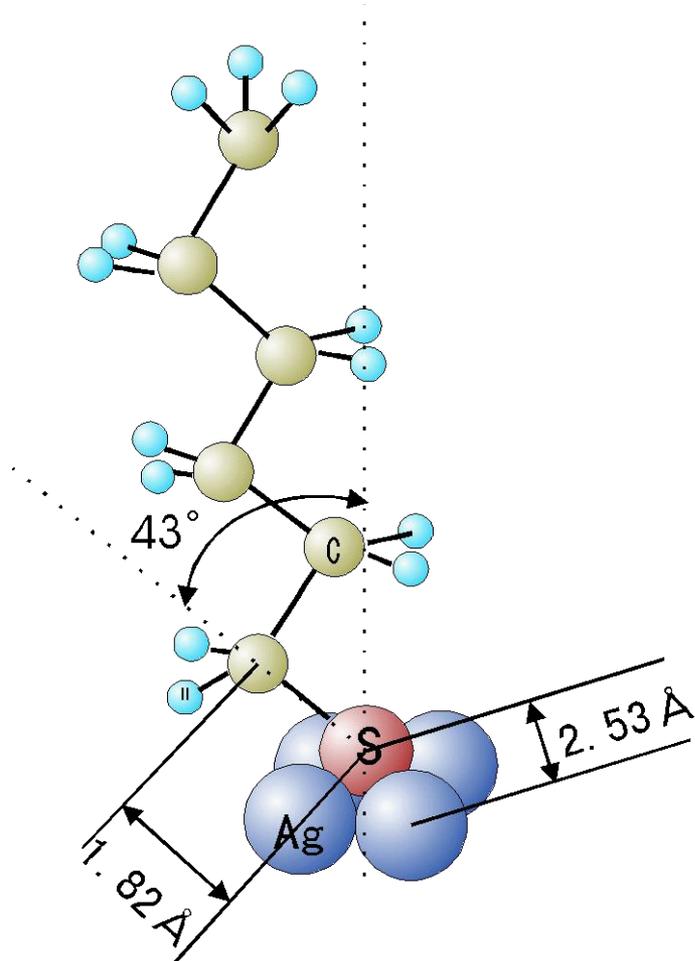
(X-ray Absorption Fine Structure)

- XPSと似ているが、双極子選択律に従う光吸収スペクトル

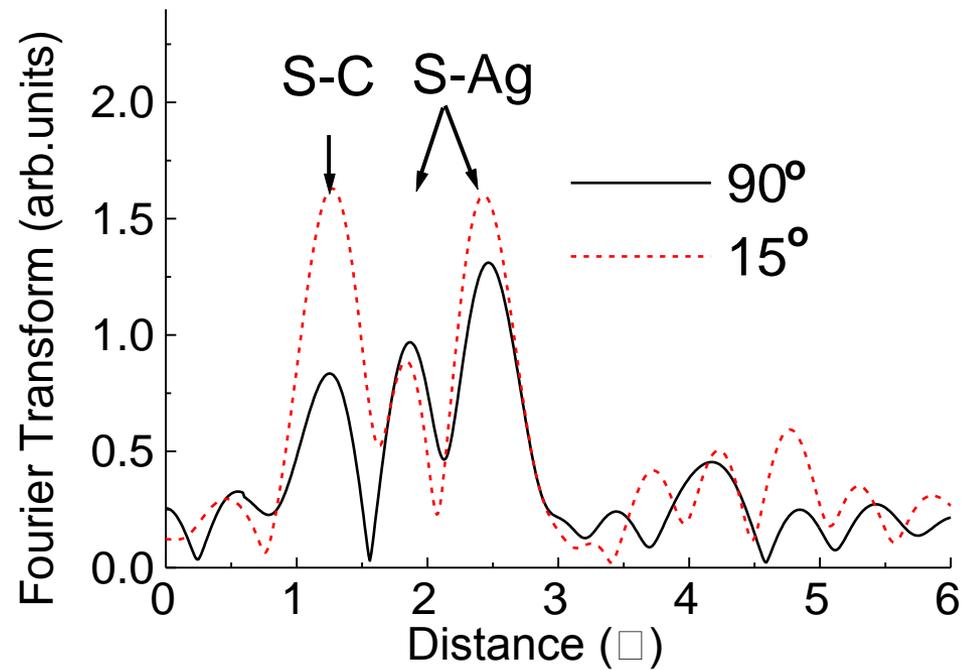


Surface-EXAFS(SEXAFS)による吸着サイトの局所構造解析例

Ag(100)基板上のヘキサチオレート自己組織化膜の構造



S-K SEXAFSのEXAFS振動のフーリエ変換



有効配位数解析による吸着サイトの決定

S-Agの解析結果

	N^*	R (Å)	ΔE (eV)	σ ($\times 10^{-2}\text{Å}^2$)
90°	1.818	2.530	-0.119	0.381
15°	2.009	2.532	-0.119	0.381

$$N^* = 3\sum_i \cos^2 \delta_i \quad \delta_i: \text{電場ベクトルと結合}i\text{の成す角度}$$

計算値

$$\begin{aligned} N^*(90^\circ)/N^*(15^\circ) &= 0.942 \quad (\text{hollow}) \\ &= 0.261 \quad (\text{bridge}) \\ &= 0.0 \quad (\text{atop}) \end{aligned}$$

実験値

$$N^*(90^\circ)/N^*(15^\circ) = 0.91 \quad (\text{exp})$$



hollowサイト (S-Ag距離: 2.53Å)