Quantenchemische Untersuchung der Adsorption von schwefelhaltigen Heterozyklen an Cadmiumsulfid

Beate Flemmig, Joachim Reinhold
Wilhelm-Ostwald-Institut für Physikalische und Theoretische Chemie, Universität Leipzig
04109 Leipzig, Augustusplatz 10-11

Die für metallurgische Prozesse bedeutsamen grenzflächenaktiven Substanzen Mercaptobenzothiazol (MBT) und die strukturverwandten Mercaptobenzooxazol (MBO) bzw. Mercaptobenzoimidazol (MBI) werden mit Dichtefunktionalmethoden hinsichtlich ihrer Adsorptionseigenschaften an CdS untersucht.
Als Modelle für die betrachtete Oberfläche des CdS-Wurzitgitters werden mit Punktladungen abgesättigte Clusterausschnitte mit 24 und 28 Atomen verwendet. Partielle Geometrieoptimierungen mit zunächst festgehaltenen, der idealen Kristallstruktur entsprechenden Koordinaten des Clusters liefern Geometrien für die Adsorbatkomplexe, die mit den vorhandenen experimentellen Ergebnissen im Einklang stehen. Für die drei Adsorptivmoleküle, werden graduelle Unterschiede für einzelne Strukturmerkmale gefunden, deren Zusammenhang mit den drei unterschiedlichen Heteroatomen S, O bzw. NH diskutiert wird.
Darauf aufbauend wird der Einfluß der Adsorption auf die Relaxation der Kristalloberfläche betrachtet. Wie die Rechnungen zeigen, ist die bei der Relaxation der freien Oberfläche erfolgende Absenkung der Cadmiumoberflächenatome in Richtung des Festkörpervolumens im Adsorbatkomplex aufgehoben.