

Supporting material for article "Correlation between stoichiometry and surface structure of the polar MgAl2O4(100) surface as a function of annealing temperature"

Thomas N. Jensen, Morten K. Rasmussen, Jan Knudsen, Alina Vlad, Sergey Volkov, Edvin Lundgren, Andreas Stierle and Jeppe V. Lauritsen,

1. Atomic positions from SXRD refinement

In the following, tables of the refined surface x-ray diffraction atomic positions are given for the three data sets shown in Fig. 7 of the main text. The fractional x, y, z positions are given as in units of the lattice constants $a = b = a_{\text{bulk}} / \sqrt{2}$, $c = a_{\text{bulk}}$, and $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. The bulk lattice constant is $a_{\text{bulk}} = 8.086 \text{ \AA}$. x_{bulk} , y_{bulk} , z_{bulk} refer to the relative positions of the bulk terminated surface, x_{sur} , y_{sur} , z_{sur} to the refined positions, $\text{delta}_x = x_{\text{bulk}} - x_{\text{sur}}$ refers to the difference in fractional coordinates (and so on for delta_y , delta_z) and $\text{delta}_x(\text{A})$ ($\text{delta}_y(\text{A})$, $\text{delta}_z(\text{A})$), to the absolute values of the displacements from the bulk position in $\text{\AA}$.

Data low T regime

El type	x_{bulk}	x_{sur}	delta_x	$\text{delta}_x(\text{A})$	y_{bulk}	y_{sur}	delta_y	$\text{delta}_y(\text{A})$	z_{bulk}	z_{sur}	delta_z	$\text{delta}_z(\text{A})$
O	0,27422	0,26836	0,00586	0,03351	0,5	0,5	0	0	3,76211	3,73386	0,02825	0,22843
O	0,72578	0,73164	-0,00586	-0,03351	0,5	0,5	0	0	3,76211	3,73386	0,02825	0,22843
Al	0,5	0,5	0	0	0,25	0,25546	-0,00546	-0,03122	3,75	3,73933	0,01067	0,08628
Al	0,5	0,5	0	0	0,75	0,74454	0,00546	0,03122	3,75	3,73933	0,01067	0,08628
O	0,27422	0,26836	0,00586	0,03351	0	0	0	0	3,73789	3,72354	0,01435	0,11603
O	0,72578	0,73164	-0,00586	-0,03351	0	0	0	0	3,73789	3,72354	0,01435	0,11603
Mg	1	1	0	0	0,5	0,5	0	0	3,625	3,62361	0,00139	0,01124
O	0,5	0,5	0	0	0,22578	0,26226	-0,03648	-0,20859	3,51211	3,48347	0,02864	0,23158
O	0,5	0,5	0	0	0,77422	0,73774	0,03648	0,20859	3,51211	3,48347	0,02864	0,23158
Al	0,25	0,24113	0,00887	0,05072	0	0	0	0	3,5	3,49196	0,00804	0,06501
Al	0,75	0,75887	-0,00887	-0,05072	0	0	0	0	3,5	3,49196	0,00804	0,06501
O	1	1	0	0	0,77422	0,73774	0,03648	0,20859	3,48789	3,49723	-0,00934	-0,07552
O	1	1	0	0	0,22578	0,26226	-0,03648	-0,20859	3,48789	3,49723	-0,00934	-0,07552
Mg	0,5	0,5	0	0	0,5	0,5	0	0	3,375	3,34191	0,03309	0,26757
O	0,77422	0,79008	-0,01586	-0,09069	0	0	0	0	3,26211	3,25206	0,01005	0,08126
O	0,22578	0,20992	0,01586	0,09069	0	0	0	0	3,26211	3,25206	0,01005	0,08126
Al	1	1	0	0	0,25	0,23973	0,01027	0,05872	3,25	3,24413	0,00587	0,04746
Al	1	1	0	0	0,75	0,76027	-0,01027	-0,05872	3,25	3,24413	0,00587	0,04746
O	0,77422	0,79008	-0,01586	-0,09069	0,5	0,5	0	0	3,23789	3,22746	0,01043	0,08434
O	0,22578	0,20992	0,01586	0,09069	0,5	0,5	0	0	3,23789	3,22746	0,01043	0,08434
Mg	0,5	0,5	0	0	0	0	0	0	3,125	3,1202	0,0048	0,03881
O	1	1	0	0	0,72578	0,73287	-0,00709	-0,04054	3,01211	3,00762	0,00449	0,03631
O	1	1	0	0	0,27422	0,26713	0,00709	0,04054	3,01211	3,00762	0,00449	0,03631
Al	0,25	0,24395	0,00605	0,03459	0,5	0,5	0	0	3	2,99524	0,00476	0,03849
Al	0,75	0,75605	-0,00605	-0,03459	0,5	0,5	0	0	3	2,99524	0,00476	0,03849
O	0,5	0,5	0	0	0,72578	0,73287	-0,00709	-0,04054	2,98789	2,99625	-0,00836	-0,0676
O	0,5	0,5	0	0	0,27422	0,26713	0,00709	0,04054	2,98789	2,99625	-0,00836	-0,0676
Mg	1	1	0	0	0	0	0	0	2,875	2,875	0	0
O	0,27422	0,27422	0	0	0,5	0,5	0	0	2,76211	2,76211	0	0
O	0,72578	0,72578	0	0	0,5	0,5	0	0	2,76211	2,76211	0	0
Al	0,5	0,5	0	0	0,25	0,25	0	0	2,75	2,75	0	0
Al	0,5	0,5	0	0	0,75	0,75	0	0	2,75	2,75	0	0
O	0,27422	0,27422	0	0	0	0	0	0	2,73789	2,73789	0	0
O	0,72578	0,72578	0	0	0	0	0	0	2,73789	2,73789	0	0
Mg	1	1	0	0	0,5	0,5	0	0	2,625	2,625	0	0
O	0,5	0,5	0	0	0,22578	0,22578	0	0	2,51211	2,51211	0	0
O	0,5	0,5	0	0	0,77422	0,77422	0	0	2,51211	2,51211	0	0
Al	0,25	0,25	0	0	0	0	0	0	2,5	2,5	0	0
Al	0,75	0,75	0	0	0	0	0	0	2,5	2,5	0	0
O	1	1	0	0	0,77422	0,77422	0	0	2,48789	2,48789	0	0
O	1	1	0	0	0,22578	0,22578	0	0	2,48789	2,48789	0	0
Mg	0,5	0,5	0	0	0,5	0,5	0	0	2,375	2,375	0	0
O	0,77422	0,77422	0	0	0	0	0	0	2,26211	2,26211	0	0

Data intermediate T regime

El type	x_bulk	x_sur	delta_x	delta_x (A)	y_bulk	y_sur	delta_y	delta_y (A)	z_bulk	z_sur	delta_z	delta_z (A)
O	0,27422	0,28212	-0,0079	-0,04517	0,5	0,5	0	0	3,76211	3,75841	0,0037	0,02992
O	0,72578	0,71788	0,0079	0,04517	0,5	0,5	0	0	3,76211	3,75841	0,0037	0,02992
Al	0,5	0,5	0	0	0,25	0,2489	0,0011	0,00629	3,75	3,7499	1E-4	8,086E-4
Al	0,5	0,5	0	0	0,75	0,7511	-0,0011	-0,00629	3,75	3,7499	1E-4	8,086E-4
O	0,27422	0,28212	-0,0079	-0,04517	0	0	0	0	3,73789	3,73129	0,0066	0,05337
O	0,72578	0,71788	0,0079	0,04517	0	0	0	0	3,73789	3,73129	0,0066	0,05337
Mg	1	1	0	0	0,5	0,5	0	0	3,625	3,6073	0,0177	0,14312
O	0,5	0,5	0	0	0,22578	0,23638	-0,0106	-0,06061	3,51211	3,49091	0,0212	0,17142
O	0,5	0,5	0	0	0,77422	0,76362	0,0106	0,06061	3,51211	3,49091	0,0212	0,17142
Al	0,25	0,2563	-0,0063	-0,03602	0	0	0	0	3,5	3,4861	0,0139	0,1124
Al	0,75	0,7437	0,0063	0,03602	0	0	0	0	3,5	3,4861	0,0139	0,1124
O	1	1	0	0	0,77422	0,76362	0,0106	0,06061	3,48789	3,49829	-0,0104	-0,08409
O	1	1	0	0	0,22578	0,23638	-0,0106	-0,06061	3,48789	3,49829	-0,0104	-0,08409
Mg	0,5	0,5	0	0	0,5	0,5	0	0	3,375	3,3676	0,0074	0,05984
O	0,77422	0,78482	-0,0106	-0,06061	0	0	0	0	3,26211	3,26261	-5E-4	-0,00404
O	0,22578	0,21518	0,0106	0,06061	0	0	0	0	3,26211	3,26261	-5E-4	-0,00404
Al	1	1	0	0	0,25	0,2582	-0,0082	-0,04689	3,25	3,242	0,008	0,06469
Al	1	1	0	0	0,75	0,7418	0,0082	0,04689	3,25	3,242	0,008	0,06469
O	0,77422	0,78482	-0,0106	-0,06061	0,5	0,5	0	0	3,23789	3,23669	0,0012	0,0097
O	0,22578	0,21518	0,0106	0,06061	0,5	0,5	0	0	3,23789	3,23669	0,0012	0,0097
Mg	0,5	0,5	0	0	0	0	0	0	3,125	3,114	0,011	0,08895
O	1	1	0	0	0,72578	0,72868	-0,0029	-0,01658	3,01211	3,01271	-6E-4	-0,00485
O	1	1	0	0	0,27422	0,27132	0,0029	0,01658	3,01211	3,01271	-6E-4	-0,00485
Al	0,25	0,2522	-0,0022	-0,01258	0,5	0,5	0	0	3	2,9941	0,0059	0,04771
Al	0,75	0,7478	0,0022	0,01258	0,5	0,5	0	0	3	2,9941	0,0059	0,04771
O	0,5	0,5	0	0	0,72578	0,72868	-0,0029	-0,01658	2,98789	2,99599	-0,0081	-0,0655
O	0,5	0,5	0	0	0,27422	0,27132	0,0029	0,01658	2,98789	2,99599	-0,0081	-0,0655
Mg	1	1	0	0	0	0	0	0	2,875	2,8676	0,0074	0,05984
O	0,27422	0,27422	0	0	0,5	0,5	0	0	2,76211	2,76211	0	0
O	0,72578	0,72578	0	0	0,5	0,5	0	0	2,76211	2,76211	0	0
Al	0,5	0,5	0	0	0,25	0,25	0	0	2,75	2,75	0	0
Al	0,5	0,5	0	0	0,75	0,75	0	0	2,75	2,75	0	0
O	0,27422	0,27422	0	0	0	0	0	0	2,73789	2,73789	0	0
O	0,72578	0,72578	0	0	0	0	0	0	2,73789	2,73789	0	0
Mg	1	1	0	0	0,5	0,5	0	0	2,625	2,625	0	0
O	0,5	0,5	0	0	0,22578	0,22578	0	0	2,51211	2,51211	0	0
O	0,5	0,5	0	0	0,77422	0,77422	0	0	2,51211	2,51211	0	0
Al	0,25	0,25	0	0	0	0	0	0	2,5	2,5	0	0
Al	0,75	0,75	0	0	0	0	0	0	2,5	2,5	0	0
O	1	1	0	0	0,77422	0,77422	0	0	2,48789	2,48789	0	0
O	1	1	0	0	0,22578	0,22578	0	0	2,48789	2,48789	0	0
Mg	0,5	0,5	0	0	0,5	0,5	0	0	2,375	2,375	0	0
O	0,77422	0,77422	0	0	0	0	0	0	2,26211	2,26211	0	0

Data high T regime

El type	x_bulk	x_sur	delta_x	delta_x (A)	y_bulk	y_sur	delta_y	delta_y (A)	z_bulk	z_sur	delta_z	delta_z (A)
O	0,27422	0,31801	-0,04379	-0,25039	0,5	0,5	0	0	3,76211	3,7254	0,03671	0,29684
O	0,72578	0,68199	0,04379	0,25039	0,5	0,5	0	0	3,76211	3,7254	0,03671	0,29684
Al	0,5	0,5	0	0	0,25	0,2569	-0,0069	-0,03945	3,75	3,72638	0,02362	0,19099
Al	0,5	0,5	0	0	0,75	0,7431	0,0069	0,03945	3,75	3,72638	0,02362	0,19099
O	0,27422	0,31801	-0,04379	-0,25039	0	0	0	0	3,73789	3,71563	0,02226	0,17999
O	0,72578	0,68199	0,04379	0,25039	0	0	0	0	3,73789	3,71563	0,02226	0,17999
Mg	1	1	0	0	0,5	0,5	0	0	3,625	3,61205	0,01295	0,10471
O	0,5	0,5	0	0	0,22578	0,25674	-0,03096	-0,17703	3,51211	3,46632	0,04579	0,37026
O	0,5	0,5	0	0	0,77422	0,74326	0,03096	0,17703	3,51211	3,46632	0,04579	0,37026
Al	0,25	0,233	0,017	0,09721	0	0	0	0	3,5	3,49305	0,00695	0,0562
Al	0,75	0,767	-0,017	-0,09721	0	0	0	0	3,5	3,49305	0,00695	0,0562
O	1	1	0	0	0,77422	0,74326	0,03096	0,17703	3,48789	3,46805	0,01984	0,16043
O	1	1	0	0	0,22578	0,25674	-0,03096	-0,17703	3,48789	3,46805	0,01984	0,16043
Mg	0,5	0,5	0	0	0,5	0,5	0	0	3,375	3,35178	0,02322	0,18776
O	0,77422	0,79367	-0,01945	-0,11122	0	0	0	0	3,26211	3,23451	0,0276	0,22317
O	0,22578	0,20633	0,01945	0,11122	0	0	0	0	3,26211	3,23451	0,0276	0,22317
Al	1	1	0	0	0,25	0,244	0,006	0,03431	3,25	3,23492	0,01508	0,12194
Al	1	1	0	0	0,75	0,756	-0,006	-0,03431	3,25	3,23492	0,01508	0,12194
O	0,77422	0,79367	-0,01945	-0,11122	0,5	0,5	0	0	3,23789	3,22411	0,01378	0,11143
O	0,22578	0,20633	0,01945	0,11122	0,5	0,5	0	0	3,23789	3,22411	0,01378	0,11143
Mg	0,5	0,5	0	0	0	0	0	0	3,125	3,10786	0,01714	0,13859
O	1	1	0	0	0,72578	0,73184	-0,00606	-0,03465	3,01211	2,99881	0,0133	0,10754
O	1	1	0	0	0,27422	0,26816	0,00606	0,03465	3,01211	2,99881	0,0133	0,10754
Al	0,25	0,24594	0,00406	0,02322	0,5	0,5	0	0	3	2,98924	0,01076	0,08701
Al	0,75	0,75406	-0,00406	-0,02322	0,5	0,5	0	0	3	2,98924	0,01076	0,08701
O	0,5	0,5	0	0	0,72578	0,73184	-0,00606	-0,03465	2,98789	2,98853	-6,4E-4	-0,00518
O	0,5	0,5	0	0	0,27422	0,26816	0,00606	0,03465	2,98789	2,98853	-6,4E-4	-0,00518
Mg	1	1	0	0	0	0	0	0	2,875	2,86765	0,00735	0,05943
O	0,27422	0,27422	0	0	0,5	0,5	0	0	2,76211	2,76439	-0,00228	-0,01844
O	0,72578	0,72578	0	0	0,5	0,5	0	0	2,76211	2,76439	-0,00228	-0,01844
Al	0,5	0,5	0	0	0,25	0,25	0	0	2,75	2,74176	0,00824	0,06663
Al	0,5	0,5	0	0	0,75	0,75	0	0	2,75	2,74176	0,00824	0,06663
O	0,27422	0,27422	0	0	0	0	0	0	2,73789	2,73293	0,00496	0,04011
O	0,72578	0,72578	0	0	0	0	0	0	2,73789	2,73293	0,00496	0,04011
Mg	1	1	0	0	0,5	0,5	0	0	2,625	2,61343	0,01157	0,09356
O	0,5	0,5	0	0	0,22578	0,22578	0	0	2,51211	2,51211	0	0
O	0,5	0,5	0	0	0,77422	0,77422	0	0	2,51211	2,51211	0	0
Al	0,25	0,25	0	0	0	0	0	0	2,5	2,5	0	0
Al	0,75	0,75	0	0	0	0	0	0	2,5	2,5	0	0
O	1	1	0	0	0,77422	0,77422	0	0	2,48789	2,48789	0	0
O	1	1	0	0	0,22578	0,22578	0	0	2,48789	2,48789	0	0
Mg	0,5	0,5	0	0	0,5	0,5	0	0	2,375	2,375	0	0
O	0,77422	0,77422	0	0	0	0	0	0	2,26211	2,26211	0	0