

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
I	Grundlagen und Einführung in die Meßmethoden	7
2	Experimenteller Aufbau	9
2.1	Die Apparatur in Clausthal	9
2.1.1	Die Streuapparatur	10
2.1.2	Das Quadrupol-Massenspektrometer (QMS)	11
2.1.3	Der Halbkugelanalysator	12
2.1.3.1	Korrekturspannung zur Austrittsarbeitskompensation	13
2.1.3.2	Der CCR-Modus	14
2.1.3.3	Der CPE-Modus	15
2.1.4	Das Transfersystem	15
2.1.5	Die Substrathalterung	16
2.1.6	Das Gaseinlaßsystem	17
2.1.7	Die Verdampfer	18
2.1.8	Die MIES-Quelle	19
2.1.8.1	Funktionsweise von MIES-Quellen	19
2.1.8.2	Messelektronik der Flugzeittrennung	22
2.1.9	Die HeII-Quelle	25
2.1.9.1	Arbeitsweise der HeII-Quelle	26
2.1.9.2	Bepumpung der HeII-Quelle	27
2.1.10	Das LEED	28
2.1.10.1	Arbeitsweise des LEED	28
2.1.11	Das TPD	29
2.1.12	Die Sputtergun	30
2.1.13	Die XPS-Röhre	30
2.1.14	Die Elektronenkanone	30
2.2	Die Apparatur in Texas A&M	31
2.2.1	Die Streuapparatur	31
2.2.2	Der CMA	33
2.2.3	Das TPD-System	33
3	Physikalische Grundlagen der Meßmethoden	37
3.1	Die Grundlagen der Elektronenspektroskopie	37
3.1.1	Die Potentielle Elektronenemission (PEE)	38
3.1.1.1	Der resonante Transfer (RT)	38
3.1.1.2	Die Augerneutralisation (Auger Neutralization AN; Auger Capture AC)	39
3.1.1.3	Die Augerabregung (Auger Deexcitation AD)	40
3.1.1.4	Die Autoionisation (Autodetachment AU)	42
3.1.2	Elektronen-Austausch-Prozesse an ausgewählten Systemen	43

3.1.2.1	Metallische Oberflächen	43
3.1.2.2	Isolatoren ohne unbesetzte Zustände unterhalb von E_{vac}	43
3.1.2.3	Nichtmetalle mit unbesetzten Zuständen unterhalb von E_{vac}	44
3.1.3	Die <u>M</u> etastable <u>I</u> mpact <u>E</u> lectron Spectroscopy MIES	45
3.1.4	Die <u>U</u> ltraviolet <u>P</u> hotoelectron Spectroscopy UPS	52
3.1.5	Die <u>A</u> uger <u>E</u> lectron Spectroscopy AES	54
3.1.6	<u>X</u> -Ray <u>P</u> hotoelectron Spectroscopy XPS	55
3.1.7	Die Messung der Austrittsarbeit	56
3.2	Die temperaturprogrammierte Desorption TPD	58
3.2.1	Die Redhead-Methode	59
3.2.2	Anstiegsflanken-Analyse	60
3.2.3	Isosteren-Analyse	60
3.3	<u>L</u> ow <u>E</u> nergy <u>E</u> lectron <u>D</u> iffraction LEED	61
3.3.1	Die Entstehung des Beugungsbildes	61
3.3.2	Die Auswertung von LEED-Aufnahmen	61
3.3.2.1	Die Nomenklatur	62
3.3.2.2	Auswertung von LEED-Bildern	63
4	Simulation der MIES-Spektren	67
4.1	Der Aufbau des Programms	68
4.1.1	Die Ein- und Ausgabeparameter	69
4.1.2	Berechnung der Trajektorie	70
4.1.3	Modifikation der Projektilniveaus	71
4.1.4	Berechnung der Übergangsrate	71
4.1.5	Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten	72
4.2	Leistungsvermögen und Grenzen des Programms	72
II	Experimentelle Ergebnisse und Diskussion	75
5	Untersuchungen an TiO₂-Oberflächen	77
5.1	Die Probenpräparation	77
5.1.1	Die Präparation der Filme	77
5.1.2	Die Präparation der Einkristalle	78
5.2	Die elektronische Struktur des TiO ₂	79
6	Wechselwirkung diverser Adsorbate mit TiO₂	87
6.1	Metalladsorption auf TiO ₂	88
6.1.1	Alkaliatome auf TiO ₂	89
6.1.1.1	Lithium	89
6.1.1.2	Natrium	100
6.1.1.3	Kalium	108
6.1.1.4	Cäsium	114
6.1.1.5	Zusammenfassung: Alkaliadsorption auf TiO ₂	119
6.1.2	Gold auf TiO ₂	123
6.2	Adsorbate mit hohem Dampfdruck auf TiO ₂	127
6.2.1	Wasser	127
6.2.1.1	Wasseradsorption auf Ru(0001)	128
6.2.1.2	Wasser auf TiO ₂ -Film	131
6.2.1.3	Wechselwirkung von Wasser mit dem TiO ₂ (110)-Einkristall	135
6.2.2	Methanol-Adsorption	146
6.2.3	Wasser- und Methanoladsorption: Vergleich MgO und TiO ₂	150
6.2.4	Benzol-Adsorption	156

6.2.4.1	Benzoladsorption auf verschiedenen Oberflächen (Mo, Ru, MgO)	157
6.2.4.2	Die Adsorption von C ₆ H ₆ auf TiO ₂	162
6.2.5	O ₂ -Adsorption	167
6.2.6	Wechselwirkung von H ₂ , CO ₂ und CO mit TiO ₂ -Oberflächen	174
7	Wechselwirkung zweier Adsorbate mit TiO₂	177
7.1	Alkalimetalle und H ₂ O	178
7.1.1	Lithium und Wasser	179
7.1.2	Natrium und Wasser	188
7.1.3	Kalium und Wasser	196
7.1.4	Cäsium und Wasser	206
7.1.5	Zusammenfassung: Mechanismus der Wechselwirkung von Alkalimetallen mit Wasser	218
7.2	Alkalimetalle und CO ₂	221
8	Ausblick	225
III	Anhang	227
A	SimSpec Parameter	229
B	Alkali-CO₂	231
B.1	Lithium und CO ₂	231
B.2	Kalium und CO ₂	234
B.3	Cäsium und CO ₂	237
C	MIES- und UPS-Spektren verschiedener Moleküle	239
D	Peakpositionen ausgewählter Messungen	249
E	Eichtabelle des Thermocouples	253
F	Abkürzungen	257
	Literaturverzeichnis	258