

Kapitel 15

Zusammenfassung

Im Rahmen der vorliegenden Dissertation wurden drei Themenkomplexe bearbeitet.

Für das Spektromikroskop SMART wurde ein Schwingungsdämpfungssystem spezifiziert und getestet, welches trotz seitlicher Vakuumverbindungen eine Positioniergenauigkeit und -stabilität von $2\ \mu\text{m}$ einhält. Zudem wurde für dieses Spektromikroskop eine Probenpräparationskammer entwickelt, die unabhängig vom Mikroskopmessbetrieb betrieben werden kann. Diese Kammer ist besonders für die Präparation dünner Filme und kleiner Aggregate aus Verdampferquellen, sowie die Lagerung und Einschleusung der Proben optimiert. Das Gasdosiersystem an der Messkammer kann ohne Beeinträchtigung der Schwingungsisolation bedient werden.

Für denselben Monochromator, an dem das SMART bei BESSY II betrieben werden soll, wurde ein Spektrometersystem aufgebaut. Das Spektrometer und das SMART sollen hintereinander aufgestellt werden, so dass innerhalb von Minuten der Messbetrieb zwischen den beiden Experimenten umgestellt werden kann. Das Spektrometer stellt einen hochauflösenden Energieanalysator, einen Partial-Yield-Detektor und einen Fluoreszenzdetektor zur Verfügung. Der Rezipient ist zur Aufnahme eines Fluoreszenzspektrometers alternativ zum Fluoreszenzdetektor vorbereitet. Probenpräparationen können in einer separaten Kammer durchgeführt werden. Für die Kammer sind verschiedene, u.a. heliumgekühlte Manipulatoren vorgesehen. Ein Probenwechselsystem erlaubt den Austausch von Proben mit anderen Apparaturen in der Arbeitsgruppe.

Erste Messungen wurden zum Oxidationsverhalten von Tantal-Deponaten auf $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{NiAl}(110)$ -Filmen durchgeführt. Während mehrere Monolagen starke Filme bei Sauerstoffangebot oxidieren, kann keine merkliche Oxidation bei Submonolagen von

Tantal mit XPS beobachtet werden. Auf den dicken Filmen wird unabhängig von ihrer Dicke chemisorbierter Sauerstoff nachgewiesen, wenn sie auf Al₂O₃-Filme aufgedampft werden.

Es wurde die temperaturprogrammierte Desorption von CO, NO und H₂O untersucht. Erstmals wurden die Messungen unterhalb der jeweiligen Multilagendesorptionstemperatur beginnend an UHV-gespaltenen MgO(100) und NiO(100)-Oberflächen durchgeführt. Zu diesem Zweck wurde eine dritte UHV-Apparatur aufgebaut und eine sehr genaue Heizrampenregelung entwickelt.

Den regulären Plätzen an der Oberfläche können für kleine Bedeckungen folgende Desorptionsenergien zugeordnet werden:

Substrat	CO	NO	H ₂ O
MgO(100)	0,14 eV (13 kJ/mol)	0,22 eV (21 kJ/mol)	0,66 eV (63 kJ/mol)
NiO(100)	0,30 eV (28 kJ/mol)	0,57 eV (54 kJ/mol)	0,59 eV (57 kJ/mol)

Diese Ergebnisse widersprechen der aus theoretischen Berechnungen formulierten Erwartung, dass die Bindungsenergien von CO und NO auf NiO(100) und MgO(100) sehr ähnlich seien [175] und die bisherigen Messungen an dünnen NiO(100)/Ni(100)-Filmen [14, 207] auf Defektadsorption beruhten. Die Desorption von den NiO(100)/Ni(100)-Filmen entspricht im Gegenteil bei allen auf ihnen gemessenen Bedeckungen der Desorption von der nahezu perfekten NiO(100)-Einkristallspaltfläche. Sowohl CO als auch NO desorbieren von dem regulären Platz an der MgO(100)-Oberfläche bei Temperaturen unterhalb des Temperaturbereiches, bei denen bisher sämtliche Untersuchungen zu diesen Systemen durchgeführt wurden.

CO bildet auf NiO(100) bei hinreichend tiefen Temperaturen und hohem Gasangebot eine c(4x2) Überstruktur aus, die sich im Temperaturbereich von 65 K bis 125 K auflöst. Von den untersuchten Systemen zeigt nur CO/NiO(100) eine signifikante Verschiebung des Desorptionsmaximums zu niedrigeren Temperaturen mit steigender Bedeckung. Daraus wird auf eine substratinduzierte oder substratvermittelte repulsive laterale Wechselwirkung des adsorbierten CO geschlossen.

Eine senkrechte Adsorptionsgeometrie wird für NO auf MgO(100) vorgeschlagen. Die Unterschiede zu NO/NiO(100) in Geometrie und Bindungsenergie werden auf die fehlenden 3d-Elektronen beim Magnesium und damit des kovalenten Bindungsanteils zurückgeführt.

Selbst an ionenbeschossenen Oberflächen werden für CO und NO keine Desorptionstemperaturen wie bei Pulverproben beobachtet. Werden den Desorptionen von Pulverproben Defektplätze wie z.B. Ecken und Kanten zugeordnet, die auf den ionenbeschossenen Oberflächen sehr unwahrscheinlich sind (siehe Seite 144), kann die theoretisch ermittelte Steigerung der Bindungsenergien von CO an den regulären Plätzen über Stufen und Kanten zu den Eckplätzen (vgl. Abs. 13.1.2) bestätigt werden. Allerdings entstehen durch Ionenbeschuss auch Adsorptionsplätze auf den NiO(100) und MgO(100)-Oberflächen, an denen CO und NO eine geringere Bindungsenergie als an der regulären Oberfläche haben.

Wasser bindet stärker an MgO(100) als an NiO(100). Auf beiden Substraten zeigt H₂O bei großen Bedeckungen eine Desorption bei der gleichen Temperatur, 197K, die in der Literatur für MgO(100) der Desorption aus dem Abbau einer Überstruktur zugeordnet wird. Die gleiche Struktur wird auch für NiO(100) vorgeschlagen. Auf einer durch Ionenbeschuss modifizierten Fläche kann dieser Zustand nicht mehr nachgewiesen werden.

Die hier vorgestellten temperaturprogrammierten Desorptionsuntersuchungen bieten eine solide Datengrundlage für die weiteren Untersuchungen der Bindung von CO, NO und H₂O an die Oberflächen von MgO(100) und NiO(100). Der Einfluss von Defekten auf die Adsorption konnte abgeschätzt und für die Bestimmung der Bindungsenergie an dem regulären Platz an der Oberfläche ausgeschlossen werden.

