

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
2 Theorie der SFG an Oberflächen	5
2.1 Einleitung	5
2.2 Makroskopische Beschreibung	6
2.2.1 Die Pumpfelder	9
2.2.2 Die SFG–Polarisation	11
2.2.3 Das SFG–Feld	12
2.2.4 Die Signalstärke	15
2.3 Mikroskopische Beschreibung	17
2.4 Polarisationsabhängigkeit, Orientierungsbestimmung	26
2.4.1 Die Symmetrien von $\chi^{(2)}$	26
2.4.2 Die Hyperpolarisierbarkeit	27
2.4.3 Bestimmung der Orientierung	29
3 Apparativer Aufbau und Experimentelles	33
3.1 Planung und Aufbau der Vakuumapparatur	33
3.2 Die Präparationskammer	35
3.3 Hochdruckzelle und Probenhalter	36
3.4 Das Nd:YAG–SFG–Spektrometer	38
3.4.1 Die Lichtquelle	39
3.4.2 Der optische Aufbau	42
3.4.3 Die Detektion	43
3.5 Das Ti:Sa–SFG–Spektrometer	50
3.5.1 Die Lichtquelle	50
3.5.2 Die Detektion	51
3.5.3 Vergleich beider SFG–Experimente	52
3.6 Intensität, Absorption und Wärmeentwicklung der Probe	54
3.7 Die Gasphasenkorrektur	55
3.7.1 Notwendigkeit	55
3.7.2 Anwendung	57
4 Messungen an Pt(111)	61
4.1 Einleitung	61

4.2	Präparation der Pt(111)–Oberfläche	62
4.3	CO–Adsorption bei 300 K und 400 K	62
4.3.1	Wohlgeordnete Pt(111)–Oberfläche bei 300 K und 400 K	62
4.3.2	Gesputterte Oberfläche bei 300 K	64
4.4	Zusammenfassung	65
4.5	Messungen bei 160 K und 230 K	65
5	Messungen an Pd(111)	67
5.1	Einführung	67
5.2	Präparation	67
5.3	Hochvakuummessungen	68
5.4	Hochdruckserien	77
5.4.1	Messungen bei 190 K und 300 K	78
5.4.2	Empirische Gasphasencompensation	82
5.4.3	Auftreten von Nickelkontaminationen	83
5.5	Defektreiche Pd(111)–Oberflächen	86
5.6	CO–Signal bei ca. 2156 cm ⁻¹	89
5.7	Stabilisierungsprozedur auf Pd(111)	90
6	Messungen an Pd/Al₂O₃/NiAl(110)	93
6.1	Beschreibung des Systems	93
6.1.1	Der Al ₂ O ₃ –Film	93
6.1.2	Die Pd–Nanoteilchen	95
6.2	Messungen mit dem Ti:Sa–Lasersystem	96
6.3	Messungen mit dem Nd:YAG–Lasersystem	103
6.4	Einführung	109
6.5	Belegungsserien	110
6.6	Heizserien	113
6.6.1	Reines Heizen (ohne Nachbelegung)	113
6.6.2	Heizen und Abkühlen (ohne Nachbelegung)	118
6.6.3	Heizen und Abkühlen mit Nachbelegung	120
6.7	Stabilisierte Nanopartikel	128
6.7.1	Diskussion und Literaturvergleich	131
6.8	Hochdruckmessungen	135
6.8.1	Einleitung	135
6.8.2	Messungen am reinen Al ₂ O ₃ –Film	135
6.8.3	Hochdruckmessungen an Pd/Al ₂ O ₃ /NiAl(110)	142
6.9	Reversibilität der Hochdruckspektren	153
7	Polarisationsabhängige Messungen	161
7.1	Polarisationsabhängige Messungen an Pd(111)	161
7.1.1	Nanopartikel	166
7.2	Zusammenfassung	176

8 Reaktionen	177
8.1 Einführung	177
8.2 C ₂ H ₄ -Hydrierung auf Pd(111)	177
8.2.1 Testmessungen an C ₂ H ₄ /Pd(111)	177
8.2.2 Untersuchungen der Aktivität mittels der Gaschromatographie . .	182
8.2.3 SFG-Messungen während der C ₂ H ₄ -Hydrierung	183
8.3 CO-Hydrierung auf Pd-Modellkatalysatoren	185
8.3.1 CO-Hydrierung auf Pd(111)	185
8.3.2 CO-Hydrierung auf Pd/Al ₂ O ₃ /NiAl(110)	187
8.3.3 Zusammenfassung	188
9 Zusammenfassung	189
A Messungen an NiAl(110)	193
B Nichtresonanter Hintergrund von Pd/Al₂O₃/NiAl	197
B.1 NiAl(110) und dünner Al ₂ O ₃ -Film	197
B.2 Al ₂ O ₃ -Film und Nanopartikel	199
C Diskussion der SFG-Linienformen	203
D Laserbestrahlung und Temperaturerhöhung	207
D.1 Gaußscher Strahl	207
D.2 Verwendete Intensitäten	208
D.3 Temperaturerhöhung des Substrats	208
E Pulsenegieabhängigkeit	213
E.1 Palladium	213
E.2 Pd/Al ₂ O ₃ /NiAl(110)	215
E.2.1 Messungen bei 200 K	216
E.2.2 Messungen bei 90 K	220
E.2.3 Zusammenfassung	222
E.3 NiAl(110)	223
F Optische Konstanten	225
G Symbole, Konstanten und nützliche Formeln	231
Literaturverzeichnis	232

