

Kurzfassung

Diese Dissertation befasst sich mit der Bestimmung der lokalen geometrischen Struktur von Molekülen auf Oberflächen. Als Messmethode wird dabei Photoelektronenbeugung im *scanned-energy mode* verwendet. Dazu wird die Intensität der Photoemission Photoelektronen aus einem Rumpfniveau des Adsorbats winkelaufgelöst in Abhängigkeit von deren kinetischen Energie gemessen.

N₂ adsorbiert auf Ni(100) bei Sättigungsbedeckung ($\Theta = 0.5$) in einem *atop*-Platz mit der N-N-Achse senkrecht zu der Nickel -Oberfläche. Die Bindungslänge zwischen dem Stickstoff- und dem Nickel-Atom ist 1.81 ± 0.02 Å. Der N-N Abstand hat einen Wert von 1.13 ± 0.03 Å. Dieses Ergebnis steht im Widerspruch zu früheren ARPEFS Messungen. Es zeigt auch, dass die Bindungslänge für schwach chemisorbierte Moleküle nicht ungewöhnlich lang ist, wie einige theoretische Arbeiten vorher gesagt haben.

Für die Adsorption von Ameisensäure (HCOOH) auf TiO₂(110) bei Sättigungsbedeckung wurde eine 2x1-Struktur gefunden. Die Endprodukte der Oberflächenreaktion sind Formiat (HCOO⁻) und H⁺. Die zwei O-Atome der HCOO- Einheit adsorbieren nahe der *atop*-Positionen von zwei benachbarten 5-fach koordinierten Ti-Atomem. Der Ti-O Bindungsabstand ist 2.08 ± 0.03 Å. Das Proton bindet mit dem sogenannten Brücken-Sauerstoff, dessen Bindungslänge zum Ti Atom 2.02 ± 0.05 Å beträgt.

Für die (3x2)-Struktur von S-Alanin auf Cu(110) wird ein Modell vorgeschlagen, bei dem das S-Alanin Molekül mit einer *tridentate*-Bindung durch die N und O Atome zu der Oberfläche bindet. Das N Atom ist nahe der *atop*-Position lokalisiert. Die N-Cu-Bindungslänge beträgt 2.03 ± 0.03 Å. Die O Atome nehmen niedrigsymmetrische Adsorptionplätze nahe der *atop*-Position auf den $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ -Rücken. Der O-O Abstand ist kürzer als der Cu-Cu Abstand. Das induziert eine Rekonstruktion auf den $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ -Rücken, da sich der Cu-Cu Abstand in der Oberflächenlage um etwa 11% reduziert. Auch die Anwendung von zirkular polarisierten Röntgenstrahlen zur Charakterisierung von chiralen Adsorbaten wird hier kurz diskutiert.