

## Motivation

Im Rahmen unserer Untersuchungen zur  $H_2$ -Wechselwirkung mit einer stickstoffgekühlten Pd(210)-Probe stellten wir eine starke Temperaturabhängigkeit der wasserstoffinduzierten Austrittsarbeitänderung fest. In Abbildung 3.1 sind zur Verdeutlichung  $\Delta\Phi$ -Adsorptionskurven bei den Temperaturen 90K, 104K, 110K und 130K dargestellt. Es werden jeweils 25L Wasserstoff dosiert. Der  $H_2$ -Partialdruck steigt dabei auf  $1 \times 10^{-6}$  mbar an. Bei einer Adsorptionstemperatur von 130K steigt die Austrittsarbeit steil auf +170mV an. Wird die Substrattemperatur auf 110K reduziert, erreicht die Austrittsarbeit während des Dosierens nur noch einen Wert von

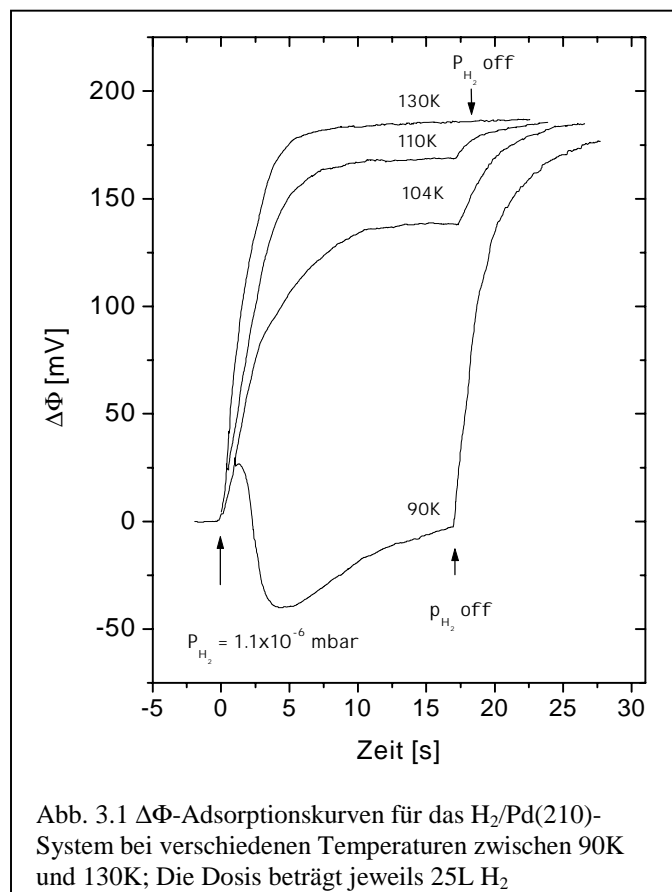


Abb. 3.1  $\Delta\Phi$ -Adsorptionskurven für das  $H_2$ /Pd(210)-System bei verschiedenen Temperaturen zwischen 90K und 130K; Die Dosis beträgt jeweils 25L  $H_2$

160mV. Fällt nach dem Dosieren der  $H_2$ -Partialdruck in der Kammer jedoch wieder ab, steigt die Austrittsarbeit auf den ursprünglichen Maximalwert an. Der beobachtete Effekt wird mit niedrigerer Temperatur größer. Bei einer Substrattemperatur von 90K ist die  $\Delta\Phi$ -Anfangssteigung gering. Die Kurve durchläuft ein Maximum und fällt dann auf einen Wert unterhalb den der reinen Oberfläche ab. Sobald der Wasserstoffpartialdruck reduziert wird, steigt die Austrittsarbeit wiederum auf den  $\Delta\Phi$ -Maximalwert an.

Bei unseren Untersuchungen mit einer stickstoffgekühlten Pd(210)-Oberfläche beobachteten wir eine spontan dissoziative Adsorption von Wasserstoff. Die atomaren Adsorptionszustände liegen negativ polarisiert vor und bewirken eine Austrittsarbeitserhöhung. Der beschriebene Temperatureffekt in den  $\Delta\Phi$ -Adsorptionskurven konnte nur mit der Besetzung eines zweiten konkurrierenden Zustandes erklärt werden. In diesem sollte der Wasserstoff positiv polarisiert sein, also die beobachtete Austrittsarbeiterniedrigung induzieren. Sinkt der Wasserstoffpartialdruck in der Kammer, wird die schwach gebundene Spezies depopuliert, und die Austrittsarbeit steigt wie beobachtet an.

Es galt mit Hilfe niedrigerer Substrattemperaturen die positiv polarisierte Spezies zu stabilisieren, um sie genauer untersuchen zu können. In  $H_2$ -TD-Spektren einer heliumgekühlten Oberfläche erfolgte tatsächlich zwischen 50K und 100K die Desorption aus zwei bis dahin unbekanntem Zuständen. Mit Hilfe von  $H_2/D_2$ -Austauschexperimenten und Schwingungsspektren gelang es uns nachzuweisen, daß es sich um eine Chemisorption von Wasserstoffmolekülen handelt. Messungen der wasserstoffinduzierten Austrittsarbeitänderung bei 50K ergaben, daß sich mit Besetzung dieser Zustände die Austrittsarbeit tatsächlich vermindert. Damit kann eine zur atomaren Adsorption konkurrierende molekulare Adsorption für den beobachteten Temperatureffekt verantwortlich gemacht werden.

Die Ergebnisse konnten für das  $H_2/Ni(210)$ -System reproduziert werden.