

Untersuchungen von Adsorbaten auf Einkristalloberflächen mittels Beugung niederenergetischer Elektronen (LEED)

Koadsorption von K und CO auf Pt(111); Li, Na, K auf Pt(111); N auf Cu(110)
sowie Untersuchung von der reinen Ga(001)-Oberfläche.

Dissertation von
Sam Dylan Moré aus Berlin

Eingereicht am Fachbereich Chemie der Freien Universität Berlin
Durchgeführt in der Abteilung Oberflächenphysik
des Fritz-Haber-Instituts der MPG in Berlin.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
2	Physikalische Grundlagen	12
2.1	Einleitung	12
2.2	Strukturbestimmung	16
2.2.1	Berechnung von atomaren Streuphasen und Kristallpotential	17
2.2.2	Berechnung der I(E)-Kurven	18
2.2.3	Vergleich von theoretischen und experimentellen I(E) Kurven	20
2.2.4	Genauigkeit der Strukturuntersuchung	22
2.3	Oberflächenschwingungen der Adsorbatatome	24
3	LEED-Messungen	27
3.1	Aufbau der Apparatur	27
3.2	Probenpräparation	28
3.2.1	Adsorption von N auf Cu(110)	28

<i>INHALTSVERZEICHNIS</i>	2
3.2.2 Adsorption von Alkalimetallen und CO auf Pt(111)	30
3.2.3 Gallium	33
3.2.4 Fehlerbetrachtung	34
3.3 Adsorptionsstrukturen für Alkalimetalle auf Pt(111)	35
4 Korrugation tieferer Schichten: Cu(110)(2 x 3)-N	41
4.1 Einleitung	41
4.2 Die Cu(110)(2x3)-N-Struktur	42
4.3 Einfluß des Energiebereichs der I(E)-Kurven auf den r-Faktor	49
4.4 Zusammenfassung	51
5 Strukturen von Alkalimetallen auf Pt(111)	53
5.1 Einleitung	53
5.2 Adsorption von K auf Pt(111)	55
5.2.1 Einleitung	55
5.2.2 Strukturanalyse mittels LEED von K auf Pt(111)	56
5.2.3 Die saubere Pt(111)-Oberfläche	59
5.2.4 Die (2x2)-K und ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-K-Strukturen	60
5.2.5 Vergleich mit LDA-Rechnungen und anderen Systemen	65
5.2.6 Dipolmoment des Adsorbatsystems	69

<i>INHALTSVERZEICHNIS</i>	3
5.2.7 Zusammenfassung	71
5.3 Adsorption von Na auf Pt(111)	71
5.3.1 Einleitung	71
5.3.2 Analyse der $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ -Na-Struktur	72
5.3.3 Die Pt(111)(2×2)-Na-Struktur	75
5.3.4 Diskussion	76
5.3.5 Zusammenfassung	79
6 Koadsorption von K und CO auf Pt(111)	80
6.1 Einleitung	80
6.2 Analyse der Pt(111)($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$) $R30^\circ$ -K/CO-Struktur	85
6.2.1 Die reinen Adsorbatsysteme Pt(111)-K und Pt(111)-CO	85
6.2.2 LEED-Analyse	86
6.2.3 Diskussion	97
6.2.4 Schwingungsspektroskopische Messungen und Struktur	105
6.3 Die Pt(111)($2\sqrt{3} \times 2\sqrt{3}$) $R30^\circ$ -K/CO-Phase	109
6.4 Zusammenfassung	112

<i>INHALTSVERZEICHNIS</i>	4
7 Gallium (001)	113
7.1 Einleitung	113
7.2 LEED Untersuchung des Phasenübergangs	116
7.3 Struktur von Ga(001) bei Raumtemperatur	118
7.3.1 LEED-Rechnung	118
7.3.2 Ergebnis der Strukturanalyse	122
7.4 Zusammenfassung	126
8 Zusammenfassung und Ausblick	127

Veröffentlichungen:

Ein Teil der vorliegenden Arbeit wurde bereits publiziert, weitere Veröffentlichungen sind in Vorbereitung.

1. **A New LEED investigation of the Cu(110)(2 × 3)- N Structure**, S. Moré, W. Berndt, C. Stampfl and A.M. Bradshaw, Surface Science Letters, [183], (1997) (Kapitel 4)
2. **Investigation of the Pt(111)($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30°-K and (2 × 2)-K Phases: Experiment and Theory**, S. Moré, W. Berndt, A.M. Bradshaw and R.R. Stumpf, Phys. Rev. B, 57 (1998) 9246. (Kapitel 5.2.)
3. **A LEED structure analysis of the ($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° -Na Phase on Pt(111)**, S. Moré, W. Berndt and A.M. Bradshaw, in preparation (Kapitel 5.3)
4. **Coadsorption of CO and K on Pt(111)**, S. Moré, W. Berndt and A.M. Bradshaw, in preparation (Kapitel 6)
5. **The Ga(001) Surface investigated with LEED**, S. Moré, A.M. Bradshaw and Ph. Hofmann, in preparation (Kapitel 7)

Beiträge zu Fachkonferenzen: (• bezeichnet den Vortragenden)

1. **LEED investigation of the Cu(110)(2 × 3)- N Structure**, • S. Moré, W. Berndt, C. Stampfl and A.M. Bradshaw, DPG Frühjahrstagung, Regensburg, März 1996.
2. **Investigation of the Pt(111)($\sqrt{3} \times \sqrt{3}$)R30° and (2 × 2) Phases**, • S. Moré, W. Berndt and A.M. Bradshaw, DPG Frühjahrstagung, Münster, März 1997.

3. **Analysis of the Adsorption Structures of K on Pt(111)**, R.R. Stump, • S. Moré, W. Berndt and A.M. Bradshaw, European Conference of Surface Science, ECCOS 17, Enschede/Netherlands, September 1997.
4. **LEED Untersuchungen von Coadsorptionsstrukturen von K und CO auf Pt(111)**, • S. Moré, W. Berndt und A.M. Bradshaw, DPG Frühjahrstagung, Regensburg, März 1998.
5. **The Ga(001) Surface investigated with LEED**, • S. Moré, A.M. Bradshaw and Ph. Hofmann, IVC, Birmingham, Juli 1998.

Danksagung

Diese Arbeit ist im Fritz-Haber-Institut der Max Planck Gesellschaft in der Arbeitsgruppe von Prof. A. M. Bradshaw entstanden. Ihm gilt mein besonderer Dank für das fördernde Interesse an dieser Arbeit und die Gewährung hervorragender Arbeitsbedingungen. Prof. K. Christmann von der FU Berlin fungierte als Zweitgutachter, auch ihm gebührt Dank für das gründliche Durchlesen der Arbeit.

Weiterhin möchte ich allen weiteren, die an dieser Arbeit beteiligt waren, herzlich danken:

Herrn Dr. W. Berndt für die Einführung in die Techniken in der LEED-Messung, mit ihm arbeite ich bei der Messung bei der meisten Adsorptionssysteme zusammen. Er war es, der die Bearbeitung der Adsorption von Alkalimetallen auf Pt(111) vorschlug und somit die Bearbeitung dieses interessanten Themengebiets initiierte.

Herrn Prof. Dr. Moritz von der TU München bin ich sehr dankbar für die wertvollen Diskussionen und die freundliche Unterstützung in allen Fragen der LEED-Strukturanalyse insbesondere bei der Installation des Programms auf der VAX.

Dr. C. Stampfl, Dr. M. Gierer und Dr. H. Over sei für die stete Bereitschaft gedankt, mir zur Beantwortung von Fragen zur Anwendung des LEED-Programms zur Verfügung zu stehen.

Dr. K.-U. Weiss wies mich in die grundlegenden Methoden der UHV-Technik ein.

Bei ihm, Dr. K.-M. Schindler und Dr. W. Berndt bedanke ich mich für das Durchlesen der Arbeit.

Mit Dr. Ph. Hofmann arbeitete ich bei der Messung und der Strukturanalyse der Gallium (001) Oberfläche zusammen.

Dr. R.R. Stumpf von den Sandia Laboratories, in Albuquerque/USA führte die LDA Rechnungen zur K-Adsorption auf Pt(111) durch. Dr. C. Stampfl war eine interessierte

Diskussionspartnerin bezüglich meiner Überlegungen zu dem Na/Pt(111) System. A. Seitsonen erläuterte mir die Ergebnisse seiner GGA-Rechnungen zu den Systemen Cs/CO/Ru und K/CO/Pt.

J. Maier war mir bei der Erstellung von Graphiken behilflich. Solveig Moré und F. Behr lasen die Arbeit auf Rechtschreibfehler durch.

Weiterhin möchte ich mich bei allen Mitgliedern der Abteilung Oberflächenphysik, insbesondere der Photoelektronenbeugungsgruppe und meinen Bürogenossen Dr. A. Radgopal, Dr. Y. Cai und T. Nern für die herzliche und freundliche Arbeitsatmosphäre, sowie für viele interessante Diskussionen und wissenschaftlich fruchtbare Gespräche bedanken.

Lebenslauf

Name: Sam Dylan Moré

Geburtsdatum: 16. 4. 1968 in Berlin

- 1974-78 Besuch der Grundschule in Gundershausen/Hessen
- 1978-80 Lichtenberggymnasium in Darmstadt
- 1980-87 Gymnasium Wentorf in Wentorf bei Hamburg
- 1987 Abitur
- 1987-89 Chemiestudium an der Universität Hamburg
- 1989-91 Chemiestudium an der Freien Universität Berlin; 1991 wiss. Hilfskraft im Institut für Anorganische Chemie.
- 1991-92 Diplomarbeit unter der Leitung von Prof. Dr. Hans Bradaczek, Thema: 'Untersuchungen zur Realstruktur von Quarzen'
- 1992 Diplom
- 1992-94 Mitarbeit in der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Wolfgang Saenger am Institut für Kristallographie/FU Berlin, Gastaufenthalt am CMMR in Huntsville/USA bei Prof. Dr. Franz Rosenberger.
- Jan 1995 Beginn der Doktorarbeit am Fritz-Haber-Institut der MPG in der Abteilung von Prof. A.M. Bradshaw, PhD.