
Verwendete Abkürzungen und Größen

AES	<i>Auger electron spectroscopy</i> , Auger-Elektronenspektroskopie
DFT	<i>density functional theory</i> , Dichtefunktional-Theorie
fcc	<i>face centred cubic</i> , kubisch-flächenzentriert
HAS	<i>Helium atom scattering</i> , Helium-Atomstreuung
(HR)EELS	<i>(high resolution) electron energy loss spectroscopy</i> , (hochauflösende) Elektronenenergieverlust-Spektroskopie
LEED	<i>low-energy electron diffraction</i> , Beugung niederenergetischer Elektronen
PEEM	<i>photoemission electron microscopy</i> , Photoemissions-Elektronenmikroskopie
RDS	Reaktions-Diffusions-System
STM	<i>scanning tunneling microscopy</i> , Rastertunnelmikroskopie
TDS	<i>thermal desorption spectroscopy</i> , Thermodesorptions-Spektroskopie
UHV	Ultrahochvakuum
a	Gitterkonstante
b	Sauerstoffkonzentration, $b = b(t) = [\text{O}]$
E	Energie
f_y, f_x	Rasterfrequenz in x-/y-Richtung
I	Tunnelstrom
k	Geschwindigkeitskonstante
v	Präexponentieller Faktor (bei Geschwindigkeitskonstanten)
p	Druck
T	Temperatur
t	Zeit

t_y	Zeit für die Aufnahme eines STM-Bildes
u	Wasserkonzentration, $u = u(t) = [\text{H}_2\text{O}]$
U	Tunnelspannung, bezogen auf das Probenpotential
v	Hydroxylkonzentration, $v = v(t) = [\text{OH}]$
Z	Stoßzahl, Zahl der Stöße von Teilchen aus der Gasphase pro Zeit und Fläche
eV	Elektronenvolt, $1 \text{ eV} = 1,602177 \cdot 10^{-19} \text{ J}$
k_B	Boltzmann-Konstante, $k_B = 1,38062 \cdot 10^{-23} \frac{\text{J}}{\text{K}} = 8,61715 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{K}}$
L	Langmuir, $1 \text{ L} = 1 \cdot 10^{-6} \text{ torr s}$
mbar	$1 \text{ mbar} = 100 \text{ Pa}$
ML	Monolagen, strukturabhängiger relativer Bedeckungsgrad bezogen auf die Oberflächenatome des Metalls. 1 ML entspricht einem Adsorbatteilchen pro Metallatom an der Oberfläche.
u	Atomare Masseneinheit, $1 \text{ u} = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

Angabe von Bedeckungen

$\Theta_A, [\text{A}]$ relativer Bedeckungsgrad des Adsorbats A in Einheiten von Substrat-Monolagen.

$\langle \Theta \rangle_A$ relative Flächenbedeckung, $\langle \Theta \rangle_A = \frac{\text{Fläche, die das Adsorbat A bedeckt}}{\text{betrachtete Gesamtfläche}}$.

In dieser Arbeit wird der Begriff der Bedeckung immer im Sinne des relativen Bedeckungsgrads Θ gebraucht. Wenn die relative Flächenbedeckung $\langle \Theta \rangle$ gemeint ist, z.B. bei der Diskussion von STM-Bildern, wird dies besonders erwähnt. Die Umrechnung zwischen Θ_A und $\langle \Theta \rangle_A$ geschieht nach der Formel

$$\Theta_A = \Theta_A^{\max} \langle \Theta \rangle_A \quad (0.1)$$

wobei Θ_A^{\max} der maximal mögliche Bedeckungsgrad des Adsorbates A (in Einheiten von Substrat-Monolagen) ist.

Materialkonstanten

Platin Gitterkonstante: $a_{\text{Pt}} = 3,92 \text{ \AA}$, fcc

Schmelzpunkt: 2040 K

Elektronenkonfiguration: $[\text{Xe}] 4f^{14}5d^96s^1$

Pt(111) Abstand benachbarter Atome: $d = \frac{\sqrt{2}}{2} a_{\text{Pt}} = 2,76 \text{ \AA}$

$$1 \text{ ML} = 1,52 \times 10^{15} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$$

(2×2)O Abstand benachbarter O-Atome: $d = \sqrt{2} a_{\text{Pt}} = 5,52 \text{ \AA}$

$$\Theta = 1/4 \text{ ML} = 3,8 \times 10^{14} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$$

Rhodium Gitterkonstante: $a_{\text{Rh}} = 3,80 \text{ \AA}$, fcc

Schmelzpunkt: 2243 K

Elektronenkonfiguration: $[\text{Kr}] 4d^85s^1$

Rh(111) Abstand benachbarter Atome: $d = \frac{\sqrt{2}}{2} a_{\text{Rh}} = 2,69 \text{ \AA}$

$$1 \text{ ML} = 1,60 \times 10^{15} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$$

(2×2)O Abstand benachbarter O-Atome: $d = \sqrt{2} a_{\text{Rh}} = 5,37 \text{ \AA}$

$$\Theta = 1/4 \text{ ML} = 4,0 \times 10^{14} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$$

(2×1)O kürzerer Abst. benachb. O-Atome: $d_1 = \frac{\sqrt{2}}{2} a_{\text{Rh}} = 2,69 \text{ \AA}$

größerer Abst. benachb. O-Atome: $d_2 = \frac{\sqrt{6}}{2} a_{\text{Rh}} = 4,66 \text{ \AA}$

$$\Theta = 1/2 \text{ ML} = 8,0 \times 10^{14} \frac{\text{Atome}}{\text{cm}^2}$$

