

# Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit der elektronischen Wechselwirkung zwischen einem Metallatom und einer organischen Umgebung. Dabei befindet sich das Metallatom inmitten eines organischen Ligandensystems, bestehend aus einem inneren  $C_8N_8$  Ring, vier Pyrrolgruppen, und schließlich einer variablen Anzahl ( $4n$ ) äußerer Benzolgruppen, wobei  $0 \leq n \leq 3$  (Tetraazaporphyrin TAP, Phthalocyanin Pc, Naphthalocyanin Nc, Anthralocyanin Ac). Je nach Anzahl der Benzolgruppen sind die Moleküle durch Tertbutyl bzw. Phenyl-Gruppen substituiert worden, da dies die Synthese erheblich vereinfacht.

Im Vordergrund der Untersuchungen stehen Photoemissionsmessungen und resonante Photoemission mit Synchrotronstrahlung (BESSY) zur Bestimmung der elektronischen Struktur dünner, auf einem Gold-Einkristall deponierter Filme der entsprechenden Moleküle. Diese Messungen sind ebenfalls für die metallfreien Spezies durchgeführt worden. Einige ausgewählte Systeme sind zudem mit XPS und NEXAFS untersucht worden, und für sämtliche Filme sind optische Absorptionsspektren gemessen worden. Ein zentraler Aspekt dieser Experimente ist Zuordnung der Photoemissionsbanden zu spezifischen Molekülorbitalen und insbesondere deren Verhalten in Abhängigkeit von der Ligandengröße und dem Zentralatom.

Aus den Untersuchungen lassen sich Informationen sowohl zum Ladungstransfer innerhalb des nicht-angeregten (Initial State) Metallorganischen Systems als auch zur Ladungsumverteilung während des Photoemissionsprozesses (Final State) ableiten. Ein Vergleich der Cu- und Zn-Porphyrin Photoemissionsspektren mit den entsprechenden Spektren metallfreier Filme gestattet es die metallspezifischen Beiträge, insbesondere die Satelliten und Photolinien, zu extrahieren. Photodegradation ist bei der Auswertung stets berücksichtigt worden. Ein weiterer zentraler Punkt dieser Arbeit ist die resonante Verstärkung der Cu- und Zn Satelliten für die ersten drei Moleküle ( $0 \leq n \leq 2$ ) bei Photonenenergien in der Nähe von 75.3 bzw. 91.7 eV. Die detaillierte Messung dieser Resonanzen erlaubte es das Intensitätsverhältnis zwischen Satelliten und Photolinie (Hauptlinie) in Abhängigkeit der Ligandengröße quantitativ zu bestimmen. Relative Unterschiede lassen sich der unterschiedlichen Ionizität der Metallatom-Stickstoffatom Bindung in den Molekülen zuschreiben. Der zugrundeliegende Ladungstransfer scheint mit der Größe des  $C_8N_8$  Rings der Moleküle zu korrelieren. Die Größe des  $C_8N_8$  Rings hängt dabei sowohl vom Metallatom als auch von der Ligandengröße ab.