

# Literaturverzeichnis

- [1] B. M. Weckhuysen und D. E. Keller, *Cat. Today* **78**, 25 (2003).
- [2] K. Kato, P. K. Song, H. Odaka und Y. Shigesato, *Jpn. J. Appl. Phys. 1* **42**, 6523 (2003).
- [3] F. J. Morin, *Phys. Rev. Lett.* **3**, 34 (1959).
- [4] D. Adler, *Rev. Mod. Phys.* **40**, 714 (1968).
- [5] W. Brückner, H. Oppermann und E. Wolf, „Vanadiumoxide“, Akademie-Verlag, Berlin 1983.
- [6] G. S. Nadkarni und V. S. Shirodkar, *Thin Solid Films* **105**, 115 (1983).
- [7] C. R. Aita, Y.-L. Liu, M. L. Kao und S. D. Hansen, *J. Appl. Phys.* **60**, 749 (1986).
- [8] S. D. Hansen und C. R. Aita, *J. Vac. Sci. Technol.* **3**, 660 (1985).
- [9] E. E. Chain, *Appl. Opt.* **30**, 2782 (1991).
- [10] H. Hirashima, M. Ide und T. Yoshida, *J. Non-Cryst. Solids* **86**, 327 (1986).
- [11] H. K. Park, W. H. Smyrl und M. D. Ward, *J. Electrochem. Soc.* **142**, 1068 (1995) .
- [12] V. Shklover , T. Haibach, F. Ried, R. Nesper und P. Novák, *J. Solid State Chem.* **123**, 317 (1996).
- [13] Q. Wu, D. Ensling, F. J. Fernandez-Madrigal, B. Jäckel, D. Kraft, R. Hunger, C. Pettenkofer, A. Thießen und W. Jaegermann, eingereicht.
- [14] Q. Wu, „Photoelectron Spectroscopy of Intercalation Phases: *Na* and *Li* in  $V_2O_5$  Thin Films and  $LiMn_2O_4$ “, Dissertation, Technische Universität Darmstadt 2003.
- [15] B. Grzybowska-Świerkosz, *Appl. Catal. A* **157**, 409 (1997).
- [16] H. Bosch und F. Janssen, *Catal. Today* **2**, 369 (1988).
- [17] T. Blasco und J. M. López Nieto, *Appl. Cat. A* **157**, 119 (1997).
- [18] G. Ertl, H. Knözinger und J. Weitkamp, „Handbook of Heterogeneous Catalysis“, Wiley VCH Weinheim, 1997.
- [19] M. E. Harlin, V. M. Niemi und A. O. I. Krause, *J. Catal.* **195**, 67 (2000).
- [20] V. E. Henrich und P. A. Cox, „The surface science of metal oxides“, University Press Cambridge 1996.
- [21] R. Družinić, „Strukturelle und elektronische Eigenschaften von Vanadiumpentoxid: Clustermodell-Untersuchungen“, Dissertation, Freie Universität Berlin (1999).
- [22] M. Born und J. R. Oppenheimer, *Ann. der Physik* **84**, 457 (1927).

- [23] P. Hohenberg und W. Kohn, *Phys. Rev. B* **136**, 864 (1964).
- [24] W. Kohn und L. Sham, *Phys. Rev. A* **140**, 1133 (1965).
- [25] W. Koch und M. C. Holthausen, „A Chemist’s Guide to Density Functional Theory“, Wiley-VCH Verlag Weinheim 2000.
- [26] J. F. Janak, *Phys. Rev. B* **18**, 7165 (1978).
- [27] R. M. Dreizler und E. K. U. Gross, „Density Functional Theory - An Approach to the Quantum Many-Body Problem“, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1990.
- [28] O. Gunnarsson und B. I. Lundqvist, *Phys. Rev. B* **13**, 4274 (1976).
- [29] H. Eschrig, „The Fundamentals of Density Functional Theory“, Teubner-Texte Physik Stuttgart 1996.
- [30] P. A. M. Dirac, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **26**, 376 (1930).
- [31] F. Bloch, *Z. Phys.* **57**, 545 (1929).
- [32] E. I. Proynov, E. Ruiz, A. Vela und D. R. Salahub, *Int. J. Quant. Chem.: Quant. Chem. Symp.* **29**, 61 (1995).
- [33] A. D. Becke, *J. Chem. Phys.* **84**, 4524 (1986).
- [34] A. D. Becke, *J. Chem. Phys.* **85**, 7184 (1986).
- [35] J. P. Perdew und Y. Wang, *Phys. Rev. B* **33**, 8800 (1986).
- [36] J. P. Perdew, K. Burke und M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996); *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1396 (1997) (siehe auch [37]).
- [37] Y. Zhang und W. Yang, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 890 (1998) (siehe auch [36]).
- [38] B. Hammer, L. B. Hansen und J. K. Nørskov, *Phys. Rev. B* **59**, 7413 (1999).
- [39] A. D. Becke, *Phys. Rev. A* **38**, 3098 (1988).
- [40] J. P. Perdew, in "Electronic Structure of Solids '91", herausgegeben von P. Ziesche und H. Eschrig, Akademie Verlag 1991, S. 11; J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh und C. Fiolhais, *Phys. Rev. B* **46**, 6671 (1992).
- [41] P. J. Stephens, J. F. Devlin, C. F. Chabalowski und M. J. Frisch, *J. Phys. Chem.* **98**, 11623 (1994)
- [42] S. H. Vosko, L. Wilk und M. Nusair, *Can. J. Phys.* **58**, 1200 (1980).
- [43] D. M. Ceperley und B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980).
- [44] J. P. Perdew und Y. Wang, *Phys. Rev. B* **45**, 13244 (1992).
- [45] J. P. Perdew, *Phys. Rev. B* **33**, 8822 (1986), J. P. Perdew, *Phys. Rev. B* **34**, 7406 (1986).
- [46] C. Lee, W. Yang und R. G. Parr, *Phys. Rev. B* **37**, 785 (1988).
- [47] *StoBe* ist ein DFT-LCGTO-Programmpaket, das für große Cluster optimiert wurde und von K. Hermann und L. G. M. Petterson weiter entwickelt wird. Es basiert auf dem *deMon*-Code [70].
- [48] S. Obara und A. Saika, *J. Chem. Phys.* **84**, 3963 (1986); S. Obara und A. Saika, *J. Chem. Phys.* **89**, 1540 (1988).

- [49] V. A. Nasluzov, V. V. Rivanenkov, A. B. Gordienko, K. M. Neyman, U. Birkenheuer und N. Rösch, *J. Chem. Phys.* **115**, 8157 (2001).
- [50] R. S. Mulliken, *J. Chem. Phys.* **23**, 1833 (1955).
- [51] P. O. Löwdin, *Phys. Rev.* **97**, 1474 (1955); *J. Chem. Phys.*, **18**, 365 (1950).
- [52] R. F. W. Bader, „Atoms in Molecules - a Quantum Theory“, International Series of Monographs on Chemistry 22, Clarendon Press Oxford 1990.
- [53] R. F. W. Bader und P. M. Beddal, *J. Chem. Phys.* **56**, 3320 (1972).
- [54] R. F. W. Bader, P. M. Beddal und J. Peslak, *J. Chem. Phys.* **58**, 557 (1973).
- [55] R. F. W. Bader, „Molecular Charge Distributions - Their Display and Use“, in C. A. Coulson and D. A. Buckingham (eds.), M.T.P. International Series of Science, Theoretical Chemistry, Butterworths 1975, II, 43-79.
- [56] R. F. W. Bader und P. F. Zou, *Chem. Phys. Lett.* **191**, 54 (1992).
- [57] I. Mayer, *Int. J. Quant. Chem.* **23**, 341 (1982).
- [58] I. Mayer, *Chem. Phys. Lett.* **97**, 270 (1983); I. Mayer, *Chem. Phys. Lett.* **117**, 396 (1985).
- [59] P.-O. Löwdin, *J. Chem. Phys.* **18**, 367 (1950).
- [60] K. Fukui, *Science* **218**, 747 (1982).
- [61] R. G. Parr und W. J. Young, *J. Am. Chem. Soc.* **106**, 4049 (1984).
- [62] G. H. Liu, *J. Chem. Phys.* **106**, 165 (1997).
- [63] R. F. Nalewajski und J. Korchowiec, „Charge Sensitivity Approach to Electronic Structure and Chemical Reactivity“, Adv. Series Phys. Chem – Vol. 8, World Scientific 1997.
- [64] R. F. Nalewajski und J. Korchowiec, *J. Mol. Catal. A* **112**, 167 (1996).
- [65] R. F. Nalewajski und J. Korchowiec, *J. Mol. Catal.* **82**, 383 (1993).
- [66] R. F. Nalewajski und A. Michalak, *J. Phys. Chem.* **100**, 20076 (1996).
- [67] R. F. Nalewajski und A. Michalak, *J. Phys. Chem. A* **100**, 20076 (1998).
- [68] A. Michalak, F. De Proft, P. Geerlings und R. F. Nalewajski, *J. Phys. Chem. A* **103**, 762 (1999).
- [69] G. H. Liu und R. G. Parr, *J. Am. Chem. Soc.* **117**, 3179 (1995).
- [70] A. St-Amant, Doktorarbeit, Université de Montréal, 1992; A. St-Amant und D. Salahub, *Chem. Phys. Lett.* **169**, 387 (1990).
- [71] H. Sambe und R. H. Felton, *J. Chem. Phys.* **62**, 1122 (1975).
- [72] B. I. Dunlap, J. W. D. Connolly und J. R. Sabin, *J. Chem. Phys.* **71**, 3396 (1979).
- [73] R. Fournier, J. Andzelm und D. R. Salahub, *J. Chem. Phys.* **90**, 6371 (1989).
- [74] R. Fournier, *J. Chem. Phys.* **92**, 5422 (1990).
- [75] F. Jensen, „Introduction to Computational Chemistry“, Wiley-VCH Verlag Weinheim 1999.
- [76] B. A. Murtaugh und R. W. H. Sargent, *Comp. J.* **13**, 185 (1970).

- [77] R. E. Ballard, „Photoelectron Spectroscopy and Molecular Orbital Theory“, A. Hilger Hrsg., Bristol 1978.
- [78] G. Herzberg, „Molecular Spectra and Molecular Structure: III. Electronic Spectra and Electronic Structure of Polyatomic Molecules“, R. Van Nostrand Hrsg., New York 1966.
- [79] G. Lüttgens, N. Pontius, C. Friedrich, R. Klingeler, P. S. Bechthold, M. Neeb und W. Eberhardt, *J. Chem. Phys.* **114**, 8414 (2001).
- [80] P. W. Atkins, „Molecular Quantum Mechanics“, II Ed., Oxford University Press 1983.
- [81] M. Tinkham, „Group Theory and Quantum Mechanics“, McGraw-Hill New York 1964.
- [82] R. Enjalbert und J. Galy, *Acta Cryst. C* **42**, 1467 (1986).
- [83] K. Hermann und M. Witko, „Theory of physical and chemical behavior of transition metal oxides: vanadium and molybdenum oxides“ aus „Oxide Surfaces“, herausgegeben von D. P. Woodruff, Elsevier New York 2001, S. 136.
- [84] R. L. Smith, W. Lu und G. S. Rohrer, *Surf. Sci.* **332**, 293 (1995).
- [85] R. L. Smith, G. S. Rohrer, K. S. Lee, D.-K. Seo und M.-H. Whangbo, *Surf. Sci.* **367**, 87 (1996).
- [86] A. Da Costa, C. Mathieu, Y. Barbaux, H. Poelman, G. Dalmai-Vennik und L. Fiermans, *Surf. Sci.* **370**, 339 (1997).
- [87] H. Poelman, J. Vennik und G. Dalmai, *J. Elec. Spec. Rel. Phen.* **44**, 251 (1987).
- [88] A. Michalak, M. Witko und K. Hermann, *Surf. Sci.* **375**, 385 (1997).
- [89] K. Hermann, M. Witko, R. Družinić und R. Tokarz, *Top. in Catal.* **11/12**, 67 (2000).
- [90] K. Hermann, M. Witko, R. Družinić und R. Tokarz, *Appl. Phys. A* **72**, 429 (2001).
- [91] M. V. Ganduglia-Pirovano und J. Sauer, *Phys. Rev. B*, eingereicht.
- [92] A. Chakrabarti, K. Hermann, R. Družinić, M. Witko, F. Wagner und M. Petersen, *Phys. Rev. B* **59**, 10583 (1999).
- [93] N. Godbout, D. R. Salahub, J. Andzelm und E. Wimmer, *Can. J. Phys.* **70**, 560 (1992).
- [94] R. H. Petrucci, W. S. Harwood und F. G. Herring, „General Chemistry - Principles and Modern Applications“, 8. Aufl., Prentice Hall, Pearson Education 2000.
- [95] L. Pauling, *J. Amer. Chem. Soc.* **69**, 542 (1947); L. Pauling, „Die Natur der chemischen Bindung“, Verlag Chemie Weinheim 1962.
- [96] K. Hermann, M. Witko, R. Družinić, A. Chakrabarti, B. Tepper, M. Elsner, A. Gorschlüter, H. Kühlenbeck und H.-J. Freund, *J. El. Spec. Rel. Ph.*, **98**, 245 (1999).
- [97] K.-A. Wilhelmi, K. Waltersson und Lars Kihlberg, *Acta Chem. Scand.* **25**, 2675 (1971).
- [98] G. Grymonprez, L. Fiermans und J. Vennik, *Surf. Sci.* **36**, 370 (1973).
- [99] P. Clauws, J. Broeckx und J. Vennik, *Phys. Stat. Sol. B* **131**, 459 (1985).
- [100] H. Ibach und D. L. Mills, „Electron energy loss spectroscopy and surface vibration“, Academic Press New York 1982.
- [101] V. Brázdová, M. V. Ganduglia-Pirovano und J. Sauer, eingeschickt.
- [102] P. Clauws und J. Vennik, *Phys. Stat. Sol. B* **76**, 707 (1976).

- [103] I. R. Beattie und T. R. Gilson, *J. Chem. Soc. (A)*, 2322 (1969).
- [104] H. Poelman, L. Fiermans, J. Vennik und G. Dalmai, *Sol. Stat. Com.* **84**, 811 (1992).
- [105] B. Tepper, B. Richter, A.-C. Dupuis, H. Kuhlenbeck, C. Hucho, P. Schilbe, M. A. bin Yarmo und H.-J. Freund, *Surf. Sci.* **496**, 64 (2002).
- [106] T. Oshio, Y. Sakai und S. Ehara, *J. Vac. Sci. Technol. B* **12**, 2055 (1994).
- [107] K. Devriendt, H. Poelman, L. Fiermans, G. Creten und G. F. Froment, *Surf. Sci.* **352**, 750 (1996)
- [108] W. Lambrecht, B. Djafari-Rouhani und J. Vennik, *Sol. Stat. Com.* **39**, 257 (1981).
- [109] W. Lambrecht, B. Djafari-Rouhani und J. Vennik, *Surf. Sci.* **126**, 558 (1982).
- [110] K. Devriendt, H. Poelman und L. Fiermans, *Surf. Sci.* **433-435**, 734 (1999).
- [111] M. Heber und W. Grünert, *J. Phys. Chem. B* **104**, 5288 (2000).
- [112] K. Hermann, M. Witko und R. Družinić, *Faraday Discuss.* **114**, 53 (1999).
- [113] K. Hermann, A. Chakrabarti, R. Družinić und M. Witko, *Phys. Stat. Sol. (a)* **173**, 195 (1999).
- [114] A. Becke, *J. Chem. Phys.* **88**, 2547 (1988).
- [115] R. S. Jones, J. W. Mintmire und B. I. Dunlap, *Int. J. Quantum. Chem.* **S22**, 77 (1988).
- [116] G. Herzberg, „Molecular Spectra and Molecular Structure: I. Spectra of Diatomic Molecules“, 2. Aufl., R. Van Nostrand Hrsg., New York 1950.
- [117] P. Kofstad, „Nanostochiometry, Diffusion, and Electrical Conductivity in Binary Metal Oxides“, R. E. Krieger, Malabar, FL, S. 57 (1983).
- [118] K. B. Lewis, S. T. Oyama und G. A. Somorjai, *Appl. Surf. Sci.* **52**, 241 (1991).
- [119] N. Magg, J. B. Giorgi, A. Hammoudeh, T. Schroeder, M. Bäumer und H.-J. Freund, *J. Phys. Chem. B* **107**, 9003 (2003).
- [120] N. Magg, „Model Catalyst Studies on Oxide-Supported Vanadium and Vanadia Particles“, Dissertation, Humboldt Universität Berlin (2003).
- [121] N. Magg, J. B. Giorgi, T. Schroeder, M. Bäumer und H.-J. Freund, *J. Phys. Chem. B* **106**, 8756 (2002).
- [122] P. Concepción, B. M. Reddy und H. Knözinger, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **1**, 3031 (1999).
- [123] B. Tepper, „Elektronenspektroskopische Untersuchungen an Vanadiumoxidoberflächen“, Dissertation, Freie Universität Berlin (2001)
- [124] Z. Zhang und V. Henrich, *Surf. Sci.* **321**, 133 (1994).
- [125] H. H. Patterson, J. Cheng, S. Despres, M. Sunamoto und M. Anpo, *J. Phys. Chem.* **95**, 8813 (1991).
- [126] W. E. Thompson und M. E. Jacox, *J. Chem. Phys.* **111**, 4487 (1999).
- [127] S. F. Boys und F. Bernardi, *Mol. Phys.* **19**, 558 (1970).
- [128] H. Haken und H. C. Wolf, „Molekülphysik und Quantenchemie“, 2. Aufl., Springer-Lehrbuch 1994.

- [129] P. Hänggi, P. Talkner und M. Borkovec, *Rev. Mod. Phys.* **62**, 251 (1990).
- [130] J. Behler, private Mitteilung.
- [131] M. F. Hughes und G. R. Hill, *J. Phys. Chem.* **59**, 388 (1954).
- [132] F. Roozeboom, A. J. van Dillen, J. W. Geus und P. J. Gellings, *Ind. Eng. Chem. Prod. Res. Dev.* **20**, 304 (1981).
- [133] P. T. Wierzchowski und L. W. Zatorski, *Appl. Catal. B* **44**, 53 (2003).
- [134] S. P. So, *J. Chem. Soc. Faraday II* **72**, 646 (1976).
- [135] E. Guglielminotti, *Langmuir* **6**, 1455 (1990).
- [136] D. Bianchi, T. Chafik, M. Khalfallah und S. J. Teichner, *Appl. Cat. A: General* **112**, 57 (1994).
- [137] D. Bianchi, T. Chafik, M. Khalfallah und S. J. Teichner, *Appl. Cat. A: General* **112**, 219 (1994).
- [138] I. A. Fisher und A. T. Bell, *J. Catal.* **172**, 222 (1997).
- [139] L.-F. Liao, C.-F. Lien, D.-L. Shieh, M.-T. Chen und J.-L. Lin, *J. Phys. Chem. B* **106**, 11240 (2002).
- [140] A. Eichler und J. Hafner, *J. Catal.* **204**, 118 (2001).
- [141] G. Blyholder, *J. Phys. Chem.* **68**, 2772 (1964).
- [142] F. M. Hoffmann, *Surf. Sci. Rep.* **3**, 107 (1983).
- [143] X. Yin, H. Han, A. Endou, M. Kubo, K. Teraishi, A. Chatterjee und A. Miyamoto, *J. Phys. Chem. B* **103**, 1263 (1999).
- [144] K. Hermann, A. Michalak und M. Witko, *Catal. Today* **32**, 321 (1996).
- [145] M. Witko und K. Hermann, *J. Mol. Catal.* **81**, 279 (1993) .
- [146] M. Witko, K. Hermann und R. Tokarz, *J. Elec. Spec. Rel. Phen.* **69**, 89 (1994).
- [147] M. Witko, R. Tokarz und J. Haber, *Appl. Cat. A* **157**, 23 (1997).
- [148] G. Busca, G. Centi, L. Marchetti und F. Trifiro, *Langmuir* **2**, 568 (1986).
- [149] A. F. Holleman und E. Wiberg, „Lehrbuch der Anorganischen Chemie“, 33. Aufl., Walter De Gruyter Berlin 1985.
- [150] T. Mineva, V. Paranov, I. Petrov, N. Neshev und N. Russo, *J. Phys. Chem. A* **105**, 1959 (2001).