

## 6 Zusammenfassung

### 6.1 Xenon-Adsorption

Xenon adsorbiert auf Ru(10-10) bei 30 K im Monolagenbereich in 3 verschiedenen Ordnungsphasen. Als erste Phase entsteht eine (3x1)-Phase mit  $\Theta_{\text{Xe/Ru}}=0.33$ , dann eine (2x5)-Phase mit  $\Theta_{\text{Xe/Ru}}=0.5$  und anschließend bis  $\Theta_{\text{Xe/Ru}}=0.65$  (=1 ML) eine uniaxial kommensurable Phase. Wie auf Ni(110) nehmen die Xe-Atome dabei den geringsten nächsten Nachbar-Abstand von 4.16 Å ein, der bei Oberflächenadsorption von Xenon bisher gefunden wurde. Im Gegensatz zu bisher veröffentlichten Multilagen-Daten anderer Xe-Systeme, die eine fcc(111)-Oberfläche des Xe-Kristalls zeigen, ist die Multilagenadsorption von Xe auf Ru(10-10) mindestens bis zur 5. Lage durch ein fcc(100)-Wachstum gekennzeichnet.

Die Austrittsenergieänderung von 1.3 eV für die Monolage, die verglichen mit Xe-Monolagen auf anderen Oberflächen keine besonders hohe Dichte besitzt, ist ausgesprochen hoch. Es konnten allerdings keine direkten Hinweise auf chemische Beiträge zur Wechselwirkung mit dem Substrat gefunden werden. Eine Separation der gesamten Wechselwirkung in einen vertikalen Anteil zwischen Substrat und Adsorbat und in einen lateralen Anteil zwischen den Adteilchen ist nicht möglich.

Die elektronische Bandstruktur der Monolage Xe/Ru(10-10) zeigt zweidimensionalen Charakter. Diese Aussage konnte nicht allein aufgrund der LEED-Phasen und der davon abgeleiteten geometrischen Struktur getroffen werden. Obwohl die einzelnen Xe-Atome innerhalb der Xe-Ketten stark komprimiert sind, sind die Xe-Ketten in der Monolage weiter separiert als bei früher untersuchten, unrekonstruierten Oberflächen mit kleinerer Gitterkonstante. Deshalb ist die Bandbreite der lateral wechselwirkenden Xe5p-Zustände vergleichsweise gering.

Als Ausblick auf weiterführende Untersuchungen zur Dimensionalität der Xe-Adsorption könnte die stark anisotrope (10-10)-Oberfläche des Rheniums dienen, die mit 4.46 Å eine noch größere c-Achse als Ru(10-10) besitzt, so daß die Überlappung der 5p-Level noch geringer ausfällt. Dieses System könnte einen weiteren Zwischenpunkt zwischen der eindimensionalen Bandstruktur von Xe/Pt(110) und der zweidimensionalen Bandstruktur von Xe/Ru(10-10) und anderen Systemen liefern. Andererseits liegt in Form der hier dokumentierten (3x1)-Phase bereits ein ideales 1D-System vor, welches allerdings einen Xe-Xe-Abstand von 4.282 Å in [0001]-Richtung und 8.118 Å in [1-210]-Richtung exakt vorgibt, der nicht durch die Kristalltemperatur oder den Bedeckungsgrad getunt werden kann.

### 6.2 Sauerstoff-Adsorption

Die Sauerstoffadsorption auf Ru(10-10) bei tiefen Temperaturen und anschließendem Tempern auf 600 K brachte eine bisher unbekannte  $c(2 \times 8)$ -Phase zutage, die entweder auf den Einfluß von - bei der Adsorption dissoziierten - subsurface-Sauerstoff oder auf beginnende Oxidbildung zurückzuführen ist. Aufgrund der technischen Schwierigkeit, einerseits atomaren Sauerstoff bei hohen Temperaturen mit hohen Raten zu desorbieren und andererseits tiefe Temperaturen bei den gegebenen apparativen Voraussetzungen mit ausreichender Genauigkeit zu messen, konnte hierfür allerdings bisher kein experimenteller Beweis erbracht werden. Noch höhere Sauerstoffkonzentrationen als bei der  $c(2 \times 8)$ -Phase führen zu verstreiften  $(2 \times n)$ -Phasen, die von anderen Übergangsmetalloberflächen her als oxidische Phasen bekannt sind.

Sauerstoffangebot bei Temperaturen über 850 K führte zu einer  $(2 \times 1)pg$ -Phase, die wie die bei 300 K präparierte  $(2 \times 1)pg_2O$ -Phase eine Gleitspiegelebene aufweist und im Gegensatz zu dieser bis 1000 K stabil ist. Beim Abkühlen unter 250 K wandelt sich diese Phase reversibel in eine bereits bekannte  $p(2 \times 1)$ -Phase um.

Molekularer physisorbierter Sauerstoff konnte auf der Ru(10-10)-Oberfläche wie auf vielen anderen Übergangsmetalloberflächen erst nach Passivierung der Oberfläche mit atomarem Sauerstoff beobachtet werden. Es wurden keine molekular chemisorbierten Sauerstoffspezies gefunden. Während die IPE-Daten an den bekannten, bei 300 K präparierten Sauerstoffphasen keine signifikanten Änderungen zur reinen Oberfläche aufweisen, ändert sich die Situation bei 30 K. Mit IPE wurde das erste, unbesetzte  $\sigma$ -Orbital des molekular physisorbierten Sauerstoffs nachgewiesen. Polarisationsabhängige Messungen am Synchrotron zeigten, daß die Molekülachse in  $[1-210]$ -Richtung des Substrats orientiert ist.

Mit LEED wurde eine Ordnungsphase des molekularen Sauerstoff beobachtet, die eine exakt hexagonale Anordnung zeigt und einen  $O_2-O_2$ -Abstand von 2.8 Å aufweist. Diese Phase wird durch elektroneninduzierte Dissoziation und elektronenstimulierte Desorption innerhalb weniger Sekunden zerstört und führt zu einer Unordnung der Sauerstoffmoleküle im Monolagenbereich. Auch minutenlange UV-Bestrahlung führte zur Abnahme der Signalintensitäten in den Photoemissionsspektren.

Da eine zerstörungsfreie Untersuchung der molekular physisorbierten und kondensierten Sauerstoffschichten unter Verwendung von UV-Strahlung oder bei Elektronenbeschuß nicht möglich ist, ist ein nächster Schritt bei der Untersuchung des  $O_2/O/Ru(10-10)$ -Systems möglicherweise die zeitaufgelöste EELS-Spektrometrie vom Zerfall des  $O_2$ -Moleküls und der Entwicklung der Zustände des atomaren Sauerstoffs.

## Summary

### Xenon adsorption

Xenon adsorbs on Ru(10-10) at 30 K in 3 different ordered phases within the monolayer range. First a (3x1)-phase with  $\Theta_{\text{Xe/Ru}} = 0.33$  grows, followed by a (2x5)-phase with  $\Theta_{\text{Xe/Ru}} = 0.5$  and after that an uniaxially commensurate phase develops until  $\Theta_{\text{Xe/Ru}} = 0.65$  (= 1 ML). As on Ni(110) the Xe atoms thereby take the shortest next neighbour distance of 4.16 Å, which was found with surface adsorption by xenon so far. In contrast to previously published multilayer data of other Xe systems showing a fcc(111) face of the Xe crystal, multilayer adsorption of Xe on Ru(10-10) is characterized by a fcc(100) face at least up to the 5<sup>th</sup> layer.

The change in the work function of 1.3 eV for the monolayer is strong, although the density compared with Xe monolayers on other surfaces is not particularly high. However, no direct referring to chemical contributions in the interaction with the substrate could be found. A separation of the entire interaction into a vertical portion between substrate and adsorbate and into a lateral portion between the adparticles is not possible.

The electronic bandstructure of the monolayer of Xe/Ru(10-10) shows two-dimensional character. This statement could not be met alone due to the LEED phases and the deduced geometrical structure. Although the individual Xe atoms are strongly compressed within the Xe chains, the Xe chains are further separated in the monolayer as with unreconstructed surfaces with smaller lattice constant  $c$  earlier examined. Hence, the bandwidth of the laterally interacting Xe5p levels is comparatively small.

As an outlook for resuming investigations concerning the dimensionality of Xe adsorption the strongly anisotropic rhenium (10-10)-surface could serve, which has a still larger lattice constant  $c$  of 4.46 Å compared to Ru(10-10) so that the overlap of the 5p-levels will be still smaller. This system could supply a further intermediate point between the one-dimensional bandstructure of Xe/Pt(110) and the two-dimensional bandstructure of Xe/Ru(10-10) and other systems. On the other hand, the (3x1)-phase documented in this work is an already ideal 1D-system, which certainly gives an accurately fixed Xe-Xe distance of 4.282 Å in [0001]-direction and 8.118 Å in [1-210]-direction that can not be tuned by the crystal temperature or the coverage.

## Oxygen adsorption

With oxygen adsorption on Ru(10-10) at low temperatures followed by annealing to 600 K a previously unknown  $c(2 \times 8)$ -phase came to light, which is either due to the influence of oxygen - dissociated during adsorption - in the subsurface region or to the onset of oxide formation. However, because of the technical difficulty to desorb atomic oxygen at high temperatures with high rates on the one hand and to measure low temperatures with the given equipment and sufficient accuracy on the other hand an experimental proof could not be furnished so far. Still higher oxygen concentrations than within the  $c(2 \times 8)$ -phase lead to striped  $(2 \times n)$ -structures, which are known from other transition metal surfaces as oxidic phases.

Oxygen exposure at temperatures above 850 K led to a  $(2 \times 1)pg_2O$ -phase, which like the  $(2 \times 1)pg_2O$ -phase prepared at 300 K exhibits a glide mirror plane and contrary to this phase is stable up to 1000 K. Upon cooling below 250 K this phase reversibly converts into an already well-known  $p(2 \times 1)$ -phase.

Molecularly physisorbed oxygen could be observed on the Ru(10-10)-surface as on many other transition metal surfaces only after passivation of the surface with atomic oxygen. No molecularly chemisorbed oxygen species were found. While the IPE data at the well-known oxygen phases prepared at 300 K do not exhibit significant changes with respect to the clean surface, the situation changes at 30 K. With IPE the first, vacant  $\sigma$ -orbital of the molecularly physisorbed oxygen was proven. Polarization-dependent measurements at the synchrotron showed that the molecule axis is oriented in  $[1-210]$ -direction of the substrate.

Using LEED, an ordered phase of molecular oxygen was observed, which shows an accurately hexagonal arrangement and exhibits an  $O_2-O_2$  distance of 2.8 Å. This phase is destroyed by electron-induced dissociation and electron-stimulated desorption within a few seconds and leads to a disorder of the oxygen molecules in the monolayer range. Also longer UV irradiation within a few minutes led to the reduction of the signal intensities in the photoemission spectra.

Since with the use of UV radiation or with electron bombardment a non destructive investigation of the molecularly physisorbed and the condensed oxygen layers is not possible, a next step in the investigation of the  $O_2/O/Ru(10-10)$ -System could be a time-resolved EELS spectrometry of the decay of the  $O_2$  molecule and the development of atomic oxygen states.