

Kurzzusammenfassung

In Rahmen dieser Arbeit wurden substituierte Benzolmoleküle auf Kupfer, Gold und Silber Oberflächen mittels eines Rastertunnelmikroskops bei tiefen Temperaturen untersucht.

Die optimale Adsorptionsgeometrie von Phenylresten, Nitrobenzol- und Chlornitrobenzolmolekülen auf Cu(111) wurde mit Hilfe von molekulardynamischen Rechnungen bestimmt. Die durchgeführte Analyse zeigt, dass alle drei Moleküle in on-top-Position des Phenylringes auf Cu(111) adsorbieren. Ein qualitativer Vergleich von RTM-Bildern von Phenylen und Nitrobenzolmolekülen zeigt wie die Substitution von einem Wasserstoffatom durch eine Nitrogruppe das Molekül von einem Isolator zu einem Leiter verändert.

Die elektroneninduzierte Manipulation wurde benutzt, um die Adsorptionsgeometrie von Nitrobenzolmolekülen auf Cu(111) von parallel zur Oberfläche zur gekippt zu verändern. Die Messungen zeigen, dass die Adsorptionsgeometrieänderung von Nitrobenzolmolekülen durch die Ionisierung des Moleküls angeregt wird.

Im Mittelpunkt dieser Arbeit steht die Untersuchung der Isomerisierung innerhalb von einzelnen Chlornitrobenzolmolekülen auf Cu(111) und Au(111) und Dichlorbenzolmolekülen auf Ag(111). In dieser chemischen Reaktion werden die Positionen des Chloratoms und eines Wasserstoffatoms innerhalb des Moleküls vertauscht. Durch die Bestimmung des Anregungsmechanismus und des Ablaufes wurde diese chemische Reaktion komplett beschrieben. Bei der Anregung dieser Reaktion werden zunächst Schwingungen innerhalb des Moleküls angeregt, so dass das Chloratom und ein Wasserstoffatom sich annähern und gegenseitig die Plätze tauschen. Die Analyse der Messdaten zeigt, dass die Anregung der Isomerisierung nur über die gleichzeitige Anregung von zwei Molekülschwingungen erfolgt. Eine der Kombinationsschwingungen ist immer eine der C-Cl Schwingungen. Es wurden keine signifikanten Unterschiede im Anregungsmechanismus auf verschiedenen Oberflächen gefunden.

Die durchgeführte Kontrollexperimente auf Chlornitrobenzolmolekülen auf Cu(111) und Au(111) haben gezeigt, dass die Chloratome in isomerisierten Molekülen fest gebunden sind.

Es wurde gezeigt, dass es möglich ist, einen Substituenten zwischen einem Chlornitrobenzol- und einem Nitrobenzolmolekül auf Cu(111) zu transferieren.

Der Anregungsmechanismus der Rotation von Chlornitrobenzolmolekülen auf Au(111) wurde in Abhängigkeit vom Adsorptionsplatz und vom Injektionspunkt untersucht. Es wurde festgestellt, dass die Rotation durch die Anregung einer Molekülschwingung ausgelöst wird.

