

# EDELMETALLE AUF RHENIUM-OBERFLÄCHEN

Morphologische, thermodynamische, kinetische und elektronische  
Betrachtungen des Wachstums dünner metallischer Filme auf atomar  
definierten Rhenium-Oberflächen:

Cu/Re(0001), Ag/Re(0001), Au/Re(0001), Pd/Re(0001)  
Cu/Re(0001)-st, Ag/Re(0001)-st,  
Ag+Cu/Re(0001), Ag+Au/Re(0001).

Inaugural-Dissertation zur Erlangung der Doktorwürde,  
eingereicht am Fachbereich Biologie, Chemie und Pharmazie  
der Freien Universität Berlin,

vorgelegt von Dipl. Chem. Ronald Wagner aus Potsdam,

2002.

Die vorliegende Arbeit wurde in der Zeit Januar 1998 bis zum Dezember 2001 am Institut für Physikalische und theoretische Chemie der Freien Universität Berlin unter der Anleitung von Herrn Prof. Dr. Klaus Christmann angefertigt.

**1. Gutachter: Prof. Dr. Klaus Christmann**

**2. Gutachter: Prof. Dr. Gerhard Ertl**

**Tag der Disputation: 30.01.2003**

## Veröffentlichungen und Konferenzbeiträge

- R. Wagner, D. Schlatterbeck, K. Christmann, „The Interaction of Copper With a Rhenium(0001) Surface: Structure, Energetics and Growth Modes“, Surf. Sci. **440** (1999) 231-251.
  - R. Wagner, K. Christmann, „Three-dimensional View of the Thermal Desorption Reaction: Copper on Rhenium(0001)“, Surf. Sci. **469** (2000) 55-64.
  - S. H. Payne, G. Ledue, J. C. Michael, H. J. Kreuzer, R. Wagner, K. Christmann, „Analysis and Theory of Multilayer Desorption: Ag on Re(0001)“, Surf. Sci. **512** (2002) 151-164.
- 

- R. Wagner, A. Weingart, K. Christmann, „The Interaction of Gold With a Rhenium(0001) Surface: Structure, Energetics and Growth Modes“, in Vorbereitung.
  - R. Wagner, A. Weingart, K. Christmann, „The Growth of Copper and Silver on Flat and Stepped Rhenium(0001) Surfaces: A Combined TDS, LEED and STM Study“, in Vorbereitung.
  - R. Wagner, K. Christmann, „The Interaction of Palladium With a Rhenium(0001) Surface: Energetics, Growth Modes and Alloy Formation“, in Vorbereitung.
  - R. Wagner, K. Christmann, „The Interaction of Silver With Copper and Silver With Gold on a Rhenium(0001) Surface: Influence of the Surface on Alloying and Dealloying Phenomena“, in Vorbereitung.
- 

- R. Wagner, D. Schlatterbeck, K. Christmann, „Zur Wechselwirkung von Kupfer mit der Re(0001)-Oberfläche“, Frühjahrskonferenz der DPG in Regensburg, Poster O 11.22, Verhandlungen der DPG (VI) **33,5** (1998) 865.
- A. Vollmer, K. Schmidt, A. Mohr, R. Wagner, K. Christmann, „LEED, TDS, AES und STM-Untersuchungen zur Struktur und zum Wachstum von Silber auf Re(10-10)“, Frühjahrskonferenz der DPG in Münster, Vortrag O 23.10, Verhandlungen der DPG (VI) **34,5** (1999) 907.
- R. Wagner, K. Christmann, „Statistisch-mechanische Berechnung von Desorptionsenergien beim System Cu/Re(0001)“, Frühjahrskonferenz der DPG in Regensburg, Poster O 11.155, Verhandlungen der DPG (VI) **35,4** (2000) 701.
- A. Mohr, K. Christmann, R. Wagner, „Wachstum von Cu auf einer gestuften Re(0001)-Oberfläche“, Frühjahrskonferenz der DPG in Regensburg, Poster O 11.5, Verhandlungen der DPG (VI) **35,4** (2000) 679.
- R. Wagner, K. Christmann, „Struktur und Energetik von Ag+Cu-Legierungsschichten auf einer Re(0001)-Oberfläche“, Frühjahrskonferenz der DPG in Regensburg, Vortrag O 18.3, Verhandlungen der DPG (VI) **35,4** (2000) 707.
- R. Wagner, K. Christmann, „Legierungsbildung zwischen Silber und Kupfer und zwischen Silber und Gold Schichten auf einer Re(0001)-Oberfläche“, Frühjahrskonferenz der DPG in Hamburg, Vortrag O 28.9, Verhandlungen der DPG (VI) **36,1** (2001) 384.

## Danksagung

*An dieser Stelle möchte ich allen danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.*

*Insbesondere gilt mein außerordentlicher Dank Prof. Dr. Klaus Christmann, für die Aufnahme in die Arbeitsgruppe, die Ermöglichung einer interessanten, anspruchsvollen und selbstständigen Arbeit im Rahmen des Sfb 290, TP B3 der DFG, die vielen Diskussionen zum Thema und hilfreichen Tips zur experimentellen Durchführung. (Sorry für die LT's und HT's.)*

*Gleichzeitig gilt mein Dank der Deutschen Forschungsgemeinschaft und der Freien Universität Berlin, für die Bereitstellung der materiellen Grundlagen der Arbeit.*

*Frau Karin Schubert danke ich herzlich für die Hilfe bei der Probenpräparation und beim Ausheizen der Apparatur sowie die Pflege der Literaturdatenbank, Herrn Rudolf Cames für die Hilfe bei den Messungen und sonstigen technischen Problemen.*

*Dr. Dirk Schlatterbeck sei besonders gedankt für die Unterstützung in der Anfangsphase meiner Arbeit in der Arbeitsgruppe. Für viele interessante Diskussionen im Rahmen dieser Arbeit, die mir manche Anregungen zur Lösung von Problemen gaben, danke ich meinen Kollegen Michael Gottfried, Christian Pauls und Dirk Rosenthal sowie für die fruchtbringende Zusammenarbeit im Rahmen des Sfb meiner Kollegin Astrid Weingart.*

*Für ihre Unterstützung in Computerfragen danke ich meinen Kollegen Dr. Markus Oppel, Dr. Dirk Schlatterbeck und Klaus Schmidt. Ebenso seien die Mitarbeiter der feinmechanischen Werkstatt, die Herren Horst Binkowski, Ayhan Dede und Helgo Hesse sowie Herr Peter Schwartz der Elektronikwerkstatt für ihre schnelle unkonventionelle Hilfe beim Aufbau und bei der Reparatur der Apparatur und der Messtechnik herzlich bedankt.*

*Für die vielen geopferten Nerven bei der Durchsicht der Arbeit danke ich meinen Lektoren Ralf Gläser, Michael Gottfried, Christian Pauls, Karin Schubert und Piet Schulz.*

*Nicht zuletzt möchte ich allen meinen lieben (Ex-) Kollegen (soweit noch nicht aufgeführt) Karifala Dumbuya, Astrid Heiland, Dr. Olaf Kurtz, Regine Küster, Jürgen Osswald, Dr. Pia (die Sonne) Schmidt, Dr. Sven Schröder, Dr. Antje Vollmer, Norbert Weiber, Elizabeth Wilneff für die herzliche Arbeitsatmosphäre danken und die vielen gemeinsamen Stunden außerhalb der Uni.*

# Inhaltsverzeichnis

VERÖFFENTLICHUNGEN UND KONFERENZBEITRÄGE.....	1
DANKSAGUNG .....	2
INHALTSVERZEICHNIS .....	3
ABKÜRZUNGSVERZEICHNIS .....	7
EINLEITUNG .....	8

## TEIL A – THEORETISCHE GRUNDLAGEN

<b>1. DIE VERWENDETEN PROBEN-METALLE .....</b>	<b>11</b>
1.1. KUPFER .....	11
1.2. SILBER.....	12
1.3. GOLD.....	13
1.4. PALLADIUM .....	13
1.5. RHENIUM .....	14
1.6. WICHTIGE DATEN DER VERWENDETEN METALLE .....	14
1.7. X-RE-VOLUMENLEGIERUNGEN (X = Cu, Ag, Au, Pd).....	15
1.8. AG-X- VOLUMENLEGIERUNGEN (X = Cu, Au).....	15
1.9. NIEDRIG INDIZIERTE METALLOBERFLÄCHEN .....	17
1.9.1. <i>Dicht gepackte, glatte Oberflächen</i> .....	17
1.9.2. <i>Die hcp-(0001)- Oberfläche des Re</i> .....	17
<b>2. METALL-EPITAXIE .....</b>	<b>19</b>
2.1. KEIMBILDUNG.....	19
2.1.1. <i>Segregation</i> .....	19
2.1.2. <i>Abscheidung aus der Gasphase</i> .....	20
2.1.3. <i>Keimbildung an Defekten</i> .....	20
2.2. 1D- UND 2D-WACHSTUM .....	21
2.2.1. <i>Entstehung von Inseln</i> .....	21
2.2.2. <i>Inselformen</i> .....	21
2.3. MONO- UND SUPERMONOLAGEN .....	22
2.3.1. <i>Der „misfit“</i> .....	23
2.3.2. <i>Der ps-cp-Übergang</i> .....	23
2.3.3. <i>Spannungsabbau</i> .....	24
2.4. 3D-WACHSTUM .....	26
2.5. OBERFLÄCHENLEGIERUNGEN.....	28
2.5.1. <i>Oberflächenenergien</i> .....	28
2.5.2. <i>Legierungen mit und auf der Oberfläche</i> .....	30
2.6. ELEKTRONISCHE WECHSELWIRKUNGEN .....	31
2.6.1. <i>Die Adatombindung</i> .....	31
2.6.2. <i>Elektronische Oberflächeneffekte</i> .....	32
<b>3. KINETIK UND ENERGETIK VON OBERFLÄCHENPROZESSEN .....</b>	<b>35</b>
3.1. KINETIK DER DESORPTION .....	35
3.2. THEORIE DES ÜBERGANGSZUSTANDES .....	36
3.3. DAS MODELL DES 2D-GASES.....	39
3.4. THERMODYNAMIK DER DESORPTION.....	40
3.5. BRAGG-WILLIAMS-NÄHERUNG.....	41
3.5.1. <i>Definition des Systems</i> .....	42
3.5.2. <i>Ableitung des chemischen Potentials</i> .....	42
3.5.3. <i>BWA-Phasendiagramm</i> .....	46
3.5.4. <i>Desorptionsratengleichungen</i> .....	47
<b>4. THERMODESORPTIONSSPEKTROSKOPIE .....</b>	<b>49</b>

4.1.	SPEKTREN MIT MEHREREN ZUSTÄNDEN.....	49
4.2.	DAS TD-EXPERIMENT .....	51
4.3.	DESORPTIONSPFADE.....	53
4.4.	DESORPTIONSISOTHERMEN/-ISOSTEREN .....	55
4.5.	DESORPTION MIT VORGELAGERTEM GLEICHGEWICHT.....	58
<b>5.</b>	<b>WEITERE UNTERSUCHUNGSMETHODEN .....</b>	<b>60</b>
5.1.	BEUGUNG LANGSAMER ELEKTRONEN .....	60
5.1.1.	<i>Physikalische Grundlagen.....</i>	<i>60</i>
5.1.2.	<i>Entstehung von Überstrukturen .....</i>	<i>61</i>
5.1.3.	<i>(I,V)-Kurven.....</i>	<i>62</i>
5.2.	PHOTO- UND AUGERELEKTRONENSPEKTROSKOPIE.....	63
5.2.1.	<i>Der Anregungsprozeß .....</i>	<i>63</i>
5.2.2.	<i>Physikalische Besonderheiten.....</i>	<i>64</i>
5.2.3.	<i>Auswertung der Elektronenspektren .....</i>	<i>66</i>
5.3.	MESSUNG DER ÄNDERUNG DER ELEKTRONENAUSTRITTSARBEIT .....	68

## Teil B – Beschreibung der Experimente

<b>1.</b>	<b>DAS UHV-SYSTEM .....</b>	<b>69</b>
1.1.	WARUM UHV? .....	69
1.2.	PUMPSYSTEM / BASISDRUCK.....	69
1.3.	PROBEN- UND MESSGEOMETRIEN .....	70
<b>2.</b>	<b>DIE PROBEN.....</b>	<b>72</b>
2.1.	DIE PROBENHALTERUNG .....	72
2.2.	DIE PROBENHEIZUNG .....	73
2.3.	DIE PROBENPRÄPARATION.....	74
<b>3.</b>	<b>AUFBRINGEN DER ADSORBATE .....</b>	<b>75</b>
3.1.	KONSTRUKTION DER KNUDSENZELLE.....	75
3.2.	FILMPRÄPARATION.....	76
<b>4.</b>	<b>UNTERSUCHUNGSMETHODEN .....</b>	<b>77</b>
4.1.	TDS .....	77
4.1.1.	<i>Mess technik .....</i>	<i>77</i>
4.1.2.	<i>Datenerfassung.....</i>	<i>77</i>
4.2.	LEED.....	78
4.2.1.	<i>Mess technik.....</i>	<i>78</i>
4.2.2.	<i>Datenerfassung.....</i>	<i>78</i>
4.3.	ELEKTRONENSPEKTROSKOPIEN (XPS / AES) .....	79
4.3.1.	<i>Mess technik.....</i>	<i>79</i>
4.3.2.	<i>Datenerfassung.....</i>	<i>80</i>
4.4.	ÄNDERUNG DER ELEKTRONENAUSTRITTSARBEIT .....	80
4.4.1.	<i>Mess technik.....</i>	<i>80</i>
4.4.2.	<i>Datenerfassung.....</i>	<i>81</i>
<b>5.</b>	<b>DATENVERARBEITUNG.....</b>	<b>81</b>

## Teil C – Münzmetallschichten auf Rhenium

<b>1.</b>	<b>DAS SYSTEM CU/RE(0001) .....</b>	<b>83</b>
1.1.	THERMODESORPTIONSSPEKTROSKOPIE.....	83
1.1.1.	<i>Spektralanalyse.....</i>	<i>83</i>
1.1.2.	<i>Desorptionsenergie.....</i>	<i>88</i>
1.2.	BEUGUNG LANGSAMER ELEKTRONEN .....	92
1.3.	RÖNTGENPHOTOELEKTRONENSPEKTROSKOPIE .....	95
1.4.	AUGER-ELEKTRONENSPEKTROSKOPIE.....	97
1.5.	ÄNDERUNG DER ELEKTRONENAUSTRITTSARBEIT.....	97

<b>2. DAS SYSTEM AG/RE(0001)</b> .....	<b>99</b>
2.1. THERMODESORPTIONSSPEKTROSKOPIE.....	99
2.1.1. <i>Spektrenformanalyse</i> .....	99
2.1.2. <i>Desorptionsenergie</i> .....	104
2.2. BEUGUNG LANGSAMER ELEKTRONEN .....	105
2.3. RÖNTGENPHOTOELEKTRONENSPEKTROSKOPIE .....	109
2.4. ÄNDERUNG DER ELEKTRONENAustrITTSARBEIT.....	110
<b>3. DAS SYSTEM AU/RE(0001)</b> .....	<b>112</b>
3.1. THERMODESORPTIONSSPEKTROSKOPIE.....	112
3.1.1. <i>Spektrenformanalyse</i> .....	112
3.1.2. <i>Desorptionsenergie</i> .....	117
3.2. BEUGUNG LANGSAMER ELEKTRONEN .....	120
3.3. RÖNTGENPHOTOELEKTRONENSPEKTROSKOPIE .....	121
3.4. ÄNDERUNG DER ELEKTRONENAustrITTSARBEIT.....	123
<b>4. CU UND AG AUF DER GESTUFTEN OBERFLÄCHE RE(0001)-ST</b> .....	<b>125</b>
4.1. TDS-SPEKTRENFORMANALYSE.....	125
4.2. TDS-DESORPTIONSENERGIE .....	131
4.3. LEED-MESSUNGEN.....	133
<b>5. DER PHASENÜBERGANG DER 2D-VERDAMPFUNG</b> .....	<b>135</b>
5.1. MESSUNG DER PHASENGRENZE.....	135
5.2. SIMULATION DES VERLAUFES DER DESORPTIONSWÄRME.....	140
<b>6. ÜBERBLICK: CU, AG UND AU AUF RE-OBERFLÄCHEN</b> .....	<b>147</b>
6.1. STRUKTUR UND WACHSTUM.....	148
6.1.1. <i>Der Submonolagenbereich</i> .....	148
6.1.2. <i>Lagenwachstum und der ps-cp-Übergang</i> .....	151
6.1.3. <i>3D-Wachstum im Multilagenbereich</i> .....	154
6.2. ELEKTRONISCHE WECHSELWIRKUNGEN .....	157
6.3. THERMODYNAMISCHE UND KINETISCHE EIGENSCHAFTEN .....	158
6.3.1. <i>Multilagensorption</i> .....	158
6.3.2. <i>Lagen-Desorption von glatten Oberflächen</i> .....	159
6.3.3. <i>„Lagen-“Desorption von gestuften Oberflächen</i> .....	164
6.3.4. <i>Münzmetallbindung auf „refractory metal“-Substraten</i> .....	164

## Teil D – Re(0001)-Oberflächenlegierungen

<b>1. PALLADIUM-LEGIERUNG MIT RE(0001)</b> .....	<b>168</b>
1.1. THERMODESORPTIONSSPEKTROSKOPIE.....	168
1.1.1. <i>Spektrenformanalyse</i> .....	168
1.1.2. <i>Desorptionsenergie</i> .....	173
1.2. BEUGUNG LANGSAMER ELEKTRONEN .....	175
1.3. RÖNTGENPHOTOELEKTRONENSPEKTROSKOPIE .....	176
1.4. ÄNDERUNG DER ELEKTRONENAustrITTSARBEIT.....	179
<b>2. SILBER+KUPFER-LEGIERUNG AUF RE(0001)</b> .....	<b>181</b>
2.1. TDS-UNTERSUCHUNGEN .....	181
2.1.1. <i>Spektrenformanalyse der Subbilagen</i> .....	181
2.1.2. <i>Energetik der Ag+Cu-Subbilagen</i> .....	185
2.1.3. <i>Multilagen</i> .....	188
2.2. BEUGUNG LANGSAMER ELEKTRONEN .....	192
2.3. LEED-(I,V)-MESSUNGEN.....	193
2.4. XPS- UND AES-MESSUNGEN.....	194
<b>3. SILBER+GOLD-LEGIERUNG AUF RE(0001)</b> .....	<b>196</b>
3.1. TDS-UNTERSUCHUNGEN .....	196
3.1.1. <i>Spektrenformanalyse der Subbilagen</i> .....	196

3.1.2.	<i>Energetik der Ag+Au-Subbilagen</i> .....	100
3.1.3.	<i>Multilagen</i> .....	202
3.2.	LEED- UND LEED-(I,V)-MESSUNGEN.....	206
3.3.	ÄNDERUNG DER ELEKTRONENAustrITTSARBEIT.....	208
3.4.	AUGER-ELEKTRONENSPEKTROSKOPIE.....	209
<b>4.</b>	<b>(2D-) OBERFLÄCHENLEGIERUNGEN</b> .....	<b>211</b>
4.1.	VORBEMERKUNG.....	211
4.2.	DAS ZWEIKOMPONENTENSYSTEM Pd/Re(0001).....	211
4.2.1.	<i>Lagenwachstum der LT-Filme</i> .....	212
4.2.2.	<i>Legierungsbildung bei den HT-Filmen</i> .....	214
4.3.	ZWEIKOMPONENTENSYSTEME AUS CU, AG UND AU.....	217
4.3.1.	<i>Segregations- und Adsorptionssysteme</i> .....	218
4.3.2.	<i>Morphologie</i> .....	220
4.4.	QUASIDREIKOMPONENTENSYSTEME AUS AG, CU, AU AUF Re(0001).....	220
4.4.1.	<i>Submonolagen CuAg und AuAg</i> .....	220
4.4.2.	<i>Multilagen</i> .....	227
4.5.	TRIEBKRAFT ZUR BILDUNG VON OBERFLÄCHENLEGIERUNGEN.....	228

## Teil E – Anhang

<b>1.</b>	<b>ZUSAMMENFASSUNG UND AUSBLICK</b> .....	<b>231</b>
<b>2.</b>	<b>SUMMARY AND OUTLOOK</b> .....	<b>233</b>
<b>3.</b>	<b>LITERATURTABELLEN</b> .....	<b>235</b>
3.1.	TDS-DATEN.....	235
3.2.	THERMODYNAMISCHE PARAMETER.....	240
3.3.	AES- UND $\Delta\Phi$ -DATEN.....	241
3.4.	DATEN ZUR EPITAXIE.....	244
3.5.	DATEN ZUR LEGIERUNGSBILDUNG.....	247
3.5.1.	<i>Zweikomponentensysteme</i> .....	247
3.5.2.	<i>Quasidreikomponentensysteme</i> .....	248
<b>4.</b>	<b>LITERATURVERZEICHNIS</b> .....	<b>249</b>
4.1.	ZEITSCHRIFTEN (/#).....	249
4.2.	BÜCHER (/B).....	264
4.3.	DISSERTATIONEN (/D).....	265
4.4.	PERSÖNLICHE MITTEILUNGEN UND SONSTIGES (/S).....	265
4.5.	INTERNETADRESSEN.....	266
	<b>LEBENS LAUF</b> .....	<b>267</b>



## Abkürzungsverzeichnis

Folgende Abkürzungen und Bezeichnungen wurden in dieser Arbeit verwendet:

2D, 3D	zwei- und dreidimensional
AES	<i>auger electron spectroscopy</i> , Augerelektronenspektroskopie
BWA	Bragg-Williams <i>approximation</i> (Bragg-Williams-Näherung)
cp	<i>close packed</i> (dichtest gepackte Anordnung von Adsorbatatomen)
dl	Dislokation
FLAPW	<i>full potential linearized augmented plane wave method</i>
FM <sub>#</sub>	Frank-van-der-Merwe-Wachstum, reines Lagenwachstum mit # geschlossenen Lagen
Gl.	Gleichung
HT	<i>high temperature</i> (Hochtemperatur-, im Gegensatz zu Tieftemperatur LT)
LEED	<i>low energy electron diffraction</i> (Beugung langsamer Elektronen)
LEIS	<i>low energy ion scattering</i> (Streuung langsamer Ionen)
LGA	<i>lattice gas approximation</i> (Gittergasnäherung)
LT	<i>low temperature</i> (Tieftemperatur-, im Gegensatz zu Hochtemperatur HT)
MEIS	<i>medium energy ion scattering</i> (Streuung von Ionen mittlerer Energie)
MC	Monte Carlo (-Simulation)
QCA	<i>quasi chemical approximation</i> (Quasichemische Näherung)
PAX	<i>XPS of adsorbed Xenon</i> (XPS an adsorbiertem Xenon)
ps	pseudomorph (Anordnung von Adsorbatatomen)
HREED	<i>high resoluted energy electron diffraction</i> (Hochaufgelöste Beugung schneller Elektronen)
RT	Raumtemperatur, 300 K $\approx$ 30°C
SAM	<i>scanning auger microscopy</i> (Raster-Augerelektronenmikroskopie)
SK <sub>#</sub>	Stranski-Krastanov-Wachstum, unvollst. Lagenwachstum mit # geschlossenen Lagen
STM	<i>scanning tunneling microscopy</i> (Ratertunnelmikroskopie)
TDS	<i>thermal desorption spectroscopy</i> , Thermodesorptionspektroskopie
TED	<i>transmission electron diffraction</i> (Transmissionselektronenbeugung)
TEM	<i>transmission electron microscopy</i> (Transmissionselektronenspektroskopie)
UHV	Ultrahochvakuum
UPS	<i>UV photoelectron spectroscopy</i> (UV-Photoelektronenspektroskopie)
XPS	<i>xray photoelectron spectroscopy</i> (Röntgen-Photoelektronenspektroskopie)
XRD	<i>xray diffraction</i> (Röntgenbeugung)
$\alpha, \beta, \gamma, \delta$	TD-Zustände
$\Delta\Phi$	Änderung der Elektronen-Austrittsarbeit

Die betrachteten Metall-Systeme wurden wie folgt bezeichnet:

X/Z(hkl)	Adsorbat X deponiert auf Substrat Z mit der Oberfläche (hkl)
X+Y/Z(hkl)	Adsorbate X und Y auf Substrat Z mit der Oberfläche (hkl)
X;Y/Z(hkl)	Systeme X/Z(hkl) und Y/Z(hkl)
XY	(Adsorbat-) Metall X, legiert mit (Adsorbat-) Metall Y
X(Y)	Metall X, legiert mit wenig Metall Y

## Einleitung

Die Ausbildung einer Metall-Metall-Bindung auf einer Oberfläche kann große Veränderungen in den elektronischen, chemischen und katalytischen Eigenschaften des Metalls hervorrufen. Zur Untersuchung von entsprechenden metallischen Bindungen erweist es sich als sehr vorteilhaft, bimetallische Systeme zu verwenden, die im Vakuum durch Deposition eines Metalls auf einer gut definierten Metalloberfläche hergestellt werden können. Solche Systeme erlauben die Korrelation elektronischer und chemischer Eigenschaften mit Oberflächenstrukturen auf atomarer Stufe. In vielen Fällen haben Erkenntnisse, die durch die Nutzung epitaktischer Systeme gewonnen wurden, den Blick auf Oberflächen-Metallsysteme revolutioniert.

So beinhaltet das Gebiet der Oberflächenwissenschaft einerseits auf der atomaren Ebene hervorragende Modellsysteme zur Untersuchung der Wechselwirkung der Atome bzw. Atomverbände und erlaubt das Studium des Einflusses der Dimensionalität des jeweiligen Systems auf dessen geometrischer Struktur. Andererseits ist die Technologie zur heutigen Zeit soweit fortgeschritten, daß spezielle Anwendungen (der Mikroelektronik und -mechanik) in den Größenbereich atomarer Dimensionen vorgestoßen sind. Dies setzt gut geordnete Strukturen voraus, deren Wachstum bereits in diesem Bereich initiiert werden muß. Im Gebiet der magnetischen und magnetooptischen Speichertechnologie kommt es zu starken Einflüssen der Oberflächengeometrie. Heterogen katalytische Prozesse laufen im Detail immer auf Oberflächen und auf atomarer Ebene ab, so daß zu deren Verständnis Untersuchungen direkt im *interface*-Bereich nötig sind.

Durch die vielfältigen technologischen Anwendungen, die gemischte Metallsysteme haben, wuchs in den letzten Jahren das Interesse am Verhalten von Atomen und Molekülen auf Oberflächen, die heteronukleare Bindungen ausbilden und natürlich an ihren chemischen und physikalischen Eigenschaften. Dabei ergeben sich mehrere Fragen: Was zeichnet eine heteronukleare Metallbindung im Oberflächenbereich aus? Wie verändert die Ausbildung solch einer Bindung die chemischen und physikalischen Eigenschaften der Metalle? Wie beeinflußt die geometrische Struktur der reinen und der mit Adsorbat bedeckten Oberfläche die elektronische Struktur und welche direkte Relevanz hat sie für An- und Umordnungen des Adsorbates, insbesondere Phasenumwandlungen?

Mit diesen Fragestellungen befaßt sich der von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) seit 1992 geförderte Sonderforschungsbereich 290 „Metallische dünne Filme: Struktur, Magnetismus und elektronische Eigenschaften“. Im speziellen geht es innerhalb des Sonderforschungsbereiches darum, ein grundlegendes Verständnis des Wachstums, der Struktur, der (insbesondere auch magnetischen) Eigenschaften und der Stabilität dünner und ultradünner metallischer Festkörperfilme und ihrer physikalischen und chemischen Eigenschaften zu erreichen. Es werden dabei von experimenteller Seite mit teilweise recht unterschiedlichen Methoden Situationen angestrebt, die auch von theoretischer Seite her zugänglich sind.

In der Teilprojektgruppe B „Morphologie und elektronische Eigenschaften dünner Filme“ stehen die detaillierte Aufklärung des Zusammenhangs zwischen Filmwachstum und geometrisch-strukturellen Parametern auf der einen Seite und der elektronischen Struktur sowie Transporteigenschaften und optischen Eigenschaften in dimensionsreduzierten Systemen im Vordergrund. Die vorliegende Arbeit ist in das Teilprojekt B3 „Bestimmung von Wachstums- und Strukturparametern von einkristallinen Metall- und Legierungsfilmern“ eingeordnet. In diesem Teilprojekt und auch in der vorliegenden Arbeit werden verschiedene Schwerpunkte bearbeitet:

- systematische Erfassung von Informationen (Systemparameter, Kinetiken, Wachstumsformen) bei der Adsorption der Münzmetalle (Cu, Ag, Au) auf Übergangsmetalloberflächen (speziell des Rheniums),

- Untersuchung des Einflusses der verminderten Dimensionalität und der Morphologie der Substratoberfläche (atomar glatte (0001), stark statistisch gestufte „(0001)-st“, grabenförmige (10-10)) auf das Wachstum des Adsorbatfilmes,
- Erforschung von Oberflächenlegierungen (AlRe, CoRe, PdRe, AgCu, AgAu) im Hinblick auf Veränderung der Eigenschaften sowohl gegenüber denen der reinen Legierungspartner selbst als auch der analogen 3D-Legierungen.

Als eine der wichtigsten Größen hat sich das Mißverhältnis der Gitterparameter der beteiligten Metalle (*misfit*) erwiesen. Der *misfit* spielt sowohl bei morphologischen Fragen, wie z. B. ein- oder zweidimensionalen Wellungen der Oberfläche, als auch bei den elektronischen Wechselwirkungen im *interface* eine wichtige Rolle, und ist häufig für die Bildung von Legierungen maßgeblich.

Um die Vielzahl an Informationen erfassen zu können, wird im Teilprojekt mit mehreren experimentellen Methoden gearbeitet. Gleichzeitig werden die Ergebnisse durch theoretische Betrachtungen untermauert. Im Speziellen kommen dabei zum Einsatz (die fett geschriebenen Methoden finden in der vorliegenden Arbeit Anwendung):

- abbildende sowie die Struktur- und die Zusammensetzung bestimmende Methoden wie STM und **LEED**, NEXAFS, **AES**,
- Methoden zur Untersuchung der elektronischen Struktur und Wechselwirkung wie **XPS**, UPS,  $\Delta\Phi$ ,
- **TDS** als Möglichkeit, sowohl energetische als auch kinetische Eigenschaften zu bestimmen.

Speziell die Thermodesorptionsspektroskopie (TDS) wurde im Rahmen dieser Arbeit extensiv weiterentwickelt und half, eine Vielzahl an Daten über die untersuchten Systeme Cu;Ag;Au;Pd/Re(0001), Cu;Ag/Re(0001)-st, Ag+Cu;Ag+Au/Re(0001) zu erhalten.

Die vorliegende Arbeit gliedert sich in folgende fünf Teile:

- In Teil A werden die theoretischen Grundlagen zur Metall-Epitaxie, zur Thermodynamik der betrachteten Prozesse und zu den angewandten Untersuchungsmethoden (mit Schwerpunkt auf der TDS) dargelegt.
- Teil B spiegelt den experimentellen Aufbau der verwendeten Apparatur, die Probenpräparation und -charakterisierung sowie die Beschreibung der Experimente wider.
- Teil C befaßt sich mit der Münzmetall-Adsorption auf der glatten (0001)- und der gestuften (0001)-st-Oberfläche, wobei einerseits die Einzelsysteme, andererseits aber auch die daraus erwachsene Systematik dargestellt werden.
- In Teil D werden Ergebnisse zur Legierungsbildung **mit** der Oberfläche (Pd/Re), als auch **auf** der Oberfläche (Ag/Cu, Ag/Au) präsentiert und miteinander verglichen.
- Teil E beinhaltet u. a. eine tabellarische Übersicht über die mannigfaltigen Literaturdaten zu den untersuchten sowie zu vergleichbaren Systemen. Diese sollen zur Wertung der Meßergebnisse aber auch zur Einordnung in den Bereits vorhandenen Wissensstand innerhalb der Oberflächenwissenschaft dienen.



# Lebenslauf

## Persönliche Daten

Name: Ronald Wagner  
 Geburtsdatum und -ort: 27.08.1969 in Potsdam  
 Vater: Prof. Dr. Ing. habil. Harold Wagner  
 Mutter: Helga Wagner  
 Schwester: Dr. med. Heike Vandreier  
 Familienstand: ledig

## Schulbildung

01.09.1976 - 30.06.1978 Polytechnische Oberschule „Diesterweg“  
 01.09.1978 - 04.07.1986 Polytechnische Oberschule mit erweitertem Russischunterricht  
 „W. I. Lenin“  
 01.09.1986 - 15.07.1989 Berufsschule des VEB Elektronische Bauelemente Teltow „B. H.  
 Bürgel“

## Berufsbildung

01.09.1986 - 15.07.1989 Berufsschule des VEB Elektronische Bauelemente Teltow „B. H.  
 Bürgel“:  
 Elektronikfacharbeiter  
 01.09.1989 - 10.02.1990 Grenztruppen der DDR:  
 Facharbeiter für Fernmeldeverkehr

## Wehrdienst

01.09.1989 - 31.08.1990 Grenztruppen der DDR:  
 Gefreiter, Unteroffizier

## Studium

01.10.1990 - 22.08.1997 Freie Universität Berlin:  
 Studium der Chemie: Vordiplom am 28.09.1993, Diplom am  
 22.08.1997  
 seit 01.01.1998 Freie Universität Berlin, Arbeitsgruppe von Prof. Dr. K.  
 Christmann:  
 Promotionsstudium und wissenschaftliche Mitarbeit im Sonderfor-  
 schungsbereich 290 B3 der Deutschen Forschungsgemeinschaft

...nur die Ruhe!

