Lokalisierte Adsorption mit lateralen Wechselwirkungen: Theoretische Betrachtung und Anwendung in der Praxis

Phasenübergang in einer Adsorbatlage Cu auf einer Re(0001)-Oberfläche

Ronald Wagner

Inhalt:

Abstract:

Adsorptionssysteme entstehen durch attraktive Wechselwirkungen von Adsorbat- und Substratteilchen. Die Adteilchen können dabei an bestimmten Adsorptionsplätzen lokalisiert sein und mit ihren Nachbarteilchen lateral wechselwirken. Die Beschreibung solcher Systeme mittels *Bragg-Williams-Approximation* (BWA) wird gezeigt.
Beim System Cu/Re(0001) kommt es zur Ausbildung von zwei Adspezieskonformationen (Insel- und 2D-Gasteilchen) und Phasenübergängen, die mit dem *Modell des zweidimensionalen Gases* beschrieben werden.
Es wird die *Gewinnung der kritischen und Systemparameter* durch Messung von Thermodesorptionsspektren gezeigt und der Verlauf des lateralen Anteils der Desorptionsenergie durch Anwendung der BWA auf das TD-Experiment simuliert.

Literatur:

H. J., Kreuzer in: „Dynamics of Gas-Surface Interactions“, Eds.: M. N. R. Ashfold, C. T. Rettner, Ch. 6: „Thermal Desorption Kinetics“, Royal Soc. of Chem., Cambr. (1991), S. 220 ff.

T. L. Hill, „An Introduction to Statistical Thermodynamics“, Ch. 14: „Lattice Statistics“, Addison-Wesley Publishing Company, Inc., Reading, MA, USA, (1962)S. 235 ff.

F. C. Tompkins, „Chemisorption of Gases on Metals“, Ch. 9:, „Statistical Thermodynamics of Adsorption“, Academic Press, London (1978) S. 134 ff.

A. Clark, „The Theory of Adsorption and Catalysis“, Ch. 3: „Localized Adsorption – Dependent Systems“, Academic Press, London (1970), S. 62 ff.

M. J. Spaarney, „Thermodynamics (With an Emphasis on Surface Problems)“, Surf. Sci. Rep., **4** (1985) 101.

P. J. Estrup, E. F. Green, M. J. Cardillo, J. C. Tully, „Influence of Surface Phase Transitions on Desorption Kinetics: The Compensation Effect“, J. Phys. Chem., **90** (1986) 4099.

H. J., Kreuzer, „Theory of Surface Processes“, Surf. Sci., **231** (1990) 213.

J. Kolaczkiewicz, E. Bauer, „The Law of Corresponding States for Chemisorbed Layers with Attractive Lateral Interactions“, Surf. Sci., **151** (1985) 333.

M. Paunov, E. Bauer, „An Adsorption-Desorption Study of Cu on Mo(110)“, Appl. Phys. A, **44** (1984) 201.

K. Nagai, „A Simple Rate Equation Useful for Adsorptions Systems: Analyses of Thermal Desorption Spectra“, Surf. Sci. **176** (1986) 193.

Langmuir	**B**ragg-**W**illiams-**A**pproximation	**Q**uasi-**C**hemical-**A**pproximation $\alpha^2 = 1-4\Theta\cdot(1-\Theta)\cdot\left[1-\exp(\beta E_{WW})\right]$
$Z = z^N \cdot \Omega$	$Z = z^N \cdot \Omega \cdot \exp\left(\frac{-cN_{AB}\Delta E}{2kT}\right)$	$Z = z^N \sum_{N_{AB}} \Omega^{1-c}\left[\exp\left(\frac{-cE_{WW}}{2kT}\right)\right]^N \frac{\frac{cN_{SF}}{2}!\exp\left(\frac{N_{AB}E_{WW}}{2kT}\right)}{\frac{cN-N_{AB}}{2}!\frac{cN_0-N_{AB}}{2}!\left(\frac{N_{AB}}{2}!\right)^2}$
$\mu = kT\cdot\ln\frac{\Theta}{(1-\Theta)z}$	$\mu = kT\ln\frac{\Theta}{(1-\Theta)z}+\left(\frac{1}{2}-\Theta\right)cE_{WW}$	$\mu = \left(1-\frac{1}{2}c\right)kT\cdot\ln\frac{\Theta}{(1-\Theta)z}+\frac{1}{2}ckT\ln\left(\frac{\alpha-1+2\Theta}{\alpha+1-2\Theta}\right)$
$E_{WW} = 0$	$E_{WW} = \frac{4RT_c}{c} \overset{c=6}{=} 0.67RT_c$ $\Theta_c=1/2$	$E_{WW} = 2RT_c\ln\left(\frac{c}{c-2}\right) \overset{c=6}{=} 0.81RT_c$ $\Theta_c=1/2$
$\varphi = -kT\cdot\ln(1-\Theta)$	$\varphi = -kT\cdot\ln(1-\Theta)+(0.5-\Theta)c\Theta E_{WW}$	$\varphi = -kT\cdot\ln(1-\Theta)-\frac{ckT}{2}\cdot\ln\left[\frac{\alpha+1-2\Theta}{(\alpha+1)\cdot(1-\Theta)}\right]^2$
$y = \frac{\Theta}{(1-\Theta)\cdot z}$	$y = \frac{\Theta}{(1-\Theta)\cdot z}\cdot\exp\left[-\frac{(1-2\Theta)cE_{WW}}{2kT}\right]$	$y = \frac{\Theta}{(1-\Theta)\cdot z}\cdot\left[\frac{(\alpha-1+2\Theta)}{(\alpha+1-2\Theta)}\cdot\frac{1-\Theta}{\Theta}\right]^{\frac{c}{2}}$
$z = \frac{\alpha}{\lambda^2}\cdot\frac{kT}{h\nu}\cdot\exp\left(\frac{V_0}{kT}\right)$	$z = \frac{\alpha}{\lambda^2}\cdot\frac{kT}{h\nu}\cdot\exp\left(\frac{V_0}{kT}\right)$	$z = \frac{\alpha}{\lambda^2}\cdot\frac{kT}{h\nu}\cdot\exp\left(\frac{V_0}{kT}\right)$
$R_1 = \nu\cdot\Theta\cdot\exp\left(-\frac{V_0}{RT}\right)$	$R_1 = \nu\cdot\frac{\Theta}{1-\Theta}\cdot\exp\left(-\frac{V_0}{RT}\right)\cdot\exp\left(-\frac{c\Theta E_{WW}}{RT}\right)$	$R_1 = \nu\cdot\frac{\Theta}{1-\Theta}\cdot\exp\left(-\frac{V_0}{RT}\right)\cdot\left[\frac{(\alpha-1+2\Theta)(1-\Theta)}{(\alpha+1-2\Theta)\Theta}\right]^{\frac{c}{2}}$
	$R_2 = \nu\cdot\exp\left(-\frac{V_0}{RT}\right)\cdot\exp\left(-\frac{cE_{WW}}{2RT}\right)$	$R_2 = \nu\cdot\exp\left(-\frac{V_0}{RT}\right)\cdot\exp\left(-\frac{cE_{WW}}{2RT}\right)$

$$\Omega = \frac{N!}{\prod_i (N_i!)}$$

$$\mu = -kT\cdot\frac{\partial\ln Z}{\partial\Theta}$$

$$\mu \overset{GGW}{=} \mu_{3D} = kT\ln\frac{p}{p_0} = kT\ln y$$

$$R_i = \frac{kT}{h}\cdot\frac{\alpha}{\lambda^2}\cdot\exp\left(-\frac{\mu}{kT}\right)$$