

Abschätzung von Wechselwirkungsenergien in 2D Oberflächenlegierungen aus der Verteilung der Atome

A. Bergbreiter

Abteilung Oberflächenchemie und Katalyse, Universität Ulm

Wir untersuchen die Verteilung von zweidimensionalen Legierungen auf glatten Metalleinkristallen. Diese bestehen entweder aus dem jeweiligen Substratmaterial und einem weiteren Metall, oder aus zwei aufgedampften Fremdmetallen. Durch Heizen auf jeweils geeignete Temperaturen wird erreicht, dass die jeweiligen Metalle sich lateral vermischen und eine zweidimensionale Quasi-Gleichgewichtsverteilung annehmen, ohne dass die Unterlage durch Eindiffusion von Fremdmetallen verändert wird. Aufgrund der homogen gehaltenen Unterlage hängt die Verteilung der Atome dann idealerweise nur von lateralen Wechselwirkungen der Legierungskomponenten ab. Mit dem Tunnelmikroskop können diese Oberflächen mit atomarer Auflösung abgebildet und die Atomsorten anhand ihrer scheinbaren Helligkeit in den Bildern unterschieden werden. Diese Daten bilden die Grundlage umfassender statistischer Analysen, wobei einerseits die Verfügbarkeit solcher Atomkonstellationen bestimmt wird, die für Oberflächenreaktionen von besonderer Bedeutung sind, und andererseits mögliche Nah- und Fernordnungen quantitativ beschrieben werden. Hier stehen Verfahren wie die Paarkorrelationsanalyse im Vordergrund. Aus den experimentellen Daten sollen über systematische Monte-Carlo-Simulationen effektive Wechselwirkungsenergien gleicher und verschiedener Metalle als Funktion ihrer lokalen Konstellation bestimmt werden. Diese können dann in einem weiteren Schritt mit Energien verglichen werden, die aus Dichtefunktionalrechnungen anderer Arbeitsgruppen resultieren.