

— **Abstract** —

Untersuchung der oberflächenverstärkten Infrarotabsorption am System Kohlenmonoxid auf dünnen Eisenfilmen

Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine Ultrahochvakuum(UHV)-Apparatur zur Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie (FTIRS) an komplexen Systemen, bestehend aus Adsorbaten auf dünnen Metallfilmen, aufgebaut und erprobt. Mittels Transmissionsspektroskopie wurde die verstärkte IR-Absorption von Kohlenmonoxid auf dünnen (<6 nm), morphologisch unterschiedlichen Eisenfilmen auf Magnesiumoxid und Kaliumbromid in Abhängigkeit von der CO-Bedeckung sowie von der Fe-Filmdicke untersucht. Die IR-Spektren unterscheiden sich in der Anzahl der CO-Absorptionslinien sowie in deren Frequenzen, Linienformen und Intensitäten. Bei CO/Fe/MgO(001) können die einzelnen Linien verschiedenen Adsorptionsplätzen auf kristallinen Facetten an den Oberflächen der epitaktisch gewachsenen Eisenfilme zugeordnet werden. Die hohe Intensität der Linien entspricht einer oberflächenverstärkten IR-Absorption (SEIRA) um etwa zwei Größenordnungen. Bei jedem der Filme hat die stärkste der Linien eine von der Fe-Schichtdicke abhängende, asymmetrische Linienform, welche auf eine nicht-adiabatische Kopplung zwischen Adsorbatschwingung und elektronischen Übergängen hinweist. Wie erstmals gezeigt werden konnte, ist der Asymmetrie-Effekt bei gerade geschlossenen Eisenfilmen mit hoher Oberflächenrauigkeit am stärksten.

Investigation of the surface enhanced infrared absorption in the case of carbon monoxide on iron thin films

In the context of this work an ultra high vacuum (UHV) apparatus for Fourier transform infrared spectroscopy (FTIRS) has been built up and tested in order to study complex systems consisting of adsorbates on metal thin films. Using transmission spectroscopy the enhanced IR-absorption of carbon monoxide on thin (<6 nm) iron films, different in morphology, on magnesium oxide and potassium bromide has been studied dependent on CO coverage and iron film thickness. The IR-spectra differ in number of CO absorption lines, their frequencies, line shapes, and intensities. For CO/Fe/MgO(001) the distinct lines can be assigned to specific adsorption sites on crystalline facets on the surfaces of the epitaxially grown iron films. The high intensity of the lines corresponds to a surface enhanced IR-absorption (SEIRA) by about two orders of magnitude. For each of the films the strongest line has an asymmetric line shape dependent on Fe film thickness suggesting nonadiabatic coupling between adsorbate vibration and electronic transitions. As could be shown for the first time the asymmetry effect is strongest for just completely covered iron films with high surface roughness.