



# **Fém egykristály felületeken létrehozott ultravékony rétegek spektroszkópiai vizsgálata**

*PhD. értekezés tézisei*

**Vári Gábor**

*Témavezetők:*

Prof. Dr. Kónya Zoltán tanszékvezető egyetemi tanár

Dr. Óvári László tudományos főmunkatárs

**Környezettudományi Doktori Iskola**

Szegedi Tudományegyetem Természettudományi és Informatikai Kar

Alkalmazott és Környezeti Kémiai Tanszék

Szeged

**2021**

# **1. Előzmények és célkitűzések**

A XXI. században számtalan kihívással kell szembesülnie az emberiségnek, amelyek közül néhány már korábban is köztudott volt a társadalom tájékozottabb rétegei számára, de az internet széleskörű elterjedésével ezek a problémák mindenki számára nyilvánvalóvá váltak. A legnagyobb feladatok közé tartoznak a megújuló energiaforrások tökéletesítése, a CO<sub>2</sub> kibocsátásának és légköri koncentrációjának csökkentése, hatékonyabb és környezetbarátabb energiatárolási koncepciók kidolgozása, új típusú anyagi rendszerek felderítése, fejlesztése, az informatikai fejlődés alapját jelentő miniaturizálás tovább fokozása. A szén-dioxid emisszió legfőbb forrásait az energiatermelés, a szállítás és egyes ipari folyamatok jelentik. Mindezen szektorokban már léteznek karbonsemleges technikák, viszont ezek legtöbbször túl költségesek és/vagy nem elég hatékonyak ahhoz, hogy nagy léptékben elterjedjenek.

Az új technológiák fejlesztésének fontos elemei napjainkban a különböző alacsony dimenziójú nanostruktúrák (0D, 1D, 2D). Az eltérő dimenziójú nanoszerkezeteket az ipar eltérő területein alkalmazzák pl.: a katalízisben, üzemanyagcellákban, nanoelektronikában, informatikában. A változatos szerkezetű nanostruktúrák két jelentős előnye, hogy (I) ebben a mérettartományban a legtöbb anyagnak mások a fizikai és kémiai tulajdonságai, mint a tömbi fázisban. A klasszikus iskolapélda erre az arany, ami tömbi fázisban szinte teljesen inert a kémiai reakciókban, míg a ~2 nm-es Au klasztereken már szobahőmérsékleten is végbemegy a szén-monoxid oxidációja. (II) A kisebb mérettel az is együtt jár, hogy kisebb mennyiség felhasználásával is nagy hatékonyság érhető el a kémiai folyamatokban, ami a lehetővé teszi a költségek csökkenését.

A nanoanyagok tulajdonságainak feltárására számtalan felület- és anyagtudományi technika áll rendelkezésre akár a képalkotásban (elektronmikroszkópia és pásztázó mikroszkopikus módszerek), akár a spektroszkópia (elektron- és ionspektroszkópia, valamint szinkrotronos módszerek) területén. Ezek a mérőmódszerek ma már különböző körülmények között alkalmazhatók az anyag szerkezetének, kémiai környezetének vagy kötésrendszerének vizsgálatára (in situ ↔ ex situ, ultravákuum (UHV) ↔ közel atmoszférikus nyomás). Az UHV körülmények az elérhető nagy tisztaság miatt inkább a modellrendszerek vizsgálatában adnak olyan hasznos információkat, amelyek hozzájárulnak ahhoz, hogy megtervezzük a légköri nyomáson végrehajtandó méréseinket, kísérleteinket, és főként hogy megértsük azok eredményeit.

A valós heterogén katalizátorok nagyon komplex szerkezetűek, emiatt a felületükön lezajló folyamatok jobb megértésének érdekében a modellkatalízisben oxid egykristályokon vagy

ultravékony oxid egykristály filmekben hoznak létre katalitikusan aktív fém nanorészecskéket. A doktori munkám első felében az volt a célom, hogy információt gyűjtsek arról, hogy a kobalt és a  $\text{CeO}_2(111)$  között milyen kölcsönhatások lépnek fel, ezek miként változnak a fém mennyiségének, a hőmérséklet változásának és a céria redukáltsági fokának függvényében. Ismert, hogy a cérium-dioxid hordozós kobalt hatékonyan katalizálja a bioetanol reformálását (az etanol gőzreformálását), amely a megújuló hidrogén előállítás egyik ígéretes útja.

A grafén és annak egyedi jellemzőinek felfedezése óta számtalan publikáció született a 2D nanoanyagok témakörében. A grafén közel ellenállásmentes elektromos- és hővezetése inspirálta azokat a kutatásokat, amelyekben hasonló 2D nanoanyagokat vizsgáltak a félvezetők ( $\text{MoS}_2$ ) vagy a szigetelők (hexagonális BN, h-BN) körében. A hexagonális bór-nitrid különösen érdekes a 2D anyagok közt, mivel szinte tökéletesen izomorf a grafénnel. Miközben a hővezető képessége nem marad el tőle jelentősen, viszont a grafénnel szemben a h-BN elektromosan szigetelő. Irodalomból jól ismert, hogy az erős fém-nitrid kölcsönhatás, és a számottevő rácsállandó eltérés miatt a bór-nitrid periodikusan hullámzó, ún. nanomesh morfológiát mutat Rh(111)-en. Ezzel szemben a réz csoport elemein a h-BN közel sík a gyenge fém-nitrid kölcsönhatás miatt. A vizsgálataim második felében az arany-ródium és az arany/bór-nitrid/ródium rendszerek sajátosságait vizsgáltam. Arra voltam kíváncsi, hogy a Rh(111) felületén milyen növekedési mechanizmust követ az arany különböző hőmérsékleteken, a depozíció utáni hőkezelés hatására milyen változások következnek be a legkülső atomi rétegben, valamint milyen kémiai változások történnek eközben a felületi rétegben. A hexagonális bór-nitrid nanoháló felületén vizsgáltam az arany növekedési mechanizmusát és a kémiai környezetének változását, valamint az Au interkalációjának hatását a bór-nitrid elektronszerkezetére. Továbbá vizsgáltam a h-BN növekedését az Au-Rh ötvözet felületeken, különböző arany mennyiségeknél.

A munkám során a röntgen fotoelektron spektroszkópia (XPS) mellett a kisenergiájú ionszórás spektroszkópia (LEIS) volt a fő kísérleti módszerem, mely a felület legkülső atomi rétegéről szolgáltat információt nemes gáz ionok használata esetén. Bár nem általános, de néhány anyagi rendszernél előfordul, hogy az alkalmazott nemesgáz ionok neutralizációs valószínűsége függ a vizsgált atom kémiai környezetétől is („neutralizációs effektus”), ami megnehezíti a kvantitatív analízist. Emiatt a LEIS mérések során külön figyelmet fordítottam ennek ellenőrzésére. Az XPS mérések egyrészt a felületi réteg oxidációs állapotának feltérképezését tették lehetővé, másrészt az XPS és LEIS eredmények összehasonlításából kirajzolódtak a felületre merőleges diffúziós folyamatok.

## **2. Kísérleti körülmények**

A doktori munkám során a méréseket egy UHV kamrában végeztem, ahol az alapnyomás  $\sim 5 \times 10^{-10}$  mbar volt. A kamra egy Leybold félgömb analizátorral van felszerelve, amely használható LEIS, XPS és Auger-elektron spektroszkópiái (AES) mérésekhez is. Egy kvadrupól tömegspektrométert használtam a gáztér analíziséhez. A LEIS mérések során  $\text{He}^+$  és  $\text{Ne}^+$  ionokat bocsátottam a felületre 800 eV kinetikus energiával és alacsony ionfluxussal ( $\sim 30$  nA/cm<sup>2</sup>). A szórási szög 95° volt. Az XPS mérésekhez egy Al K<sub>α</sub> röntgenforrást használtam. A kötési energia skála kalibrálásához egy kvázi tömbi Au réteg 4f<sub>7/2</sub> csúcsát (84,0 eV) és a tiszta Cu(111) felület 2p<sub>3/2</sub> csúcsát (932,6 eV) használtam a Cu(111) egykristályon végzett mérésekhez. A Rh(111) egykristályon végzett mérések során az Au 4f<sub>7/2</sub> mellett a Rh 3d<sub>5/2</sub> csúcs (307,2 eV) volt a második kalibrációs pont. A detektálás szöge 16° volt a felület normálisához képest.

A Cu(111) felület tisztítását 300 K-en végzett Ar<sup>+</sup> maratásból és 1000 K-en UHV-ben végzett felfűtésekkel álló ciklusokkal végeztem.

Egy monoréteg (ML) oxigént a Cu(111) felületi atomsűrűségével megegyezőnek definiálunk ( $1,78 \times 10^{15}$  atom/cm<sup>2</sup>). A Ce (99,9%) és a Co (99,99%) fémeket egy 4-zsebes párologtató (Oxford Applied Research) segítségével deponáltam. Egy monoréteg CeO<sub>2</sub>-ot egy teljes CeO<sub>2</sub>(111) hármaréteggként definiálunk (azaz O-Ce-O,  $7,87 \times 10^{14}$  Ce atom/cm<sup>2</sup>), amelynek vastagsága 3,13 Å. A fém Ce esetében az egy monoréteg borítottságot a dhcp tömbi β-fázis szorosán pakolt (0001)-es felületének felületi atomsűrűségével definiáljuk, mert az általam vizsgált körülményeknél ez a termodinamikailag stabil fázis és ezért 1 ML Ce  $\sim 8,53 \times 10^{14}$  atom/cm<sup>2</sup> [1]. A Co borítottság definíciónk szerint akkor 1 ML, ha a Co atomok felületi koncentrációja megegyezik a Co(0001) felületi atomsűrűségével ( $1,8 \times 10^{15}$  atom/cm<sup>2</sup>). A Ce és Co párologtatási sebességét egy kvarckristály mikromérleggel (QCM) határoztam meg, ami 0,07 ML/min volt a Ce és a CeO<sub>2</sub> esetében, míg a kobalté 0,5 ML/min.

A Rh(111) egykristály (orientáció pontossága: 0,1°) tisztítását 300 K-es Ar<sup>+</sup> ionmaratás és 1200 K-es UHV-ben való fűtések ciklusaival végeztem. Az utolsó ciklus után  $\sim 3 \times 10^{-8}$  mbar O<sub>2</sub>-ben 1050 K-en fűtöttem a mintát 30 percig, majd oxigén atmoszférában hagytam 350 K alá hűlni. A minta előkészítésének utolsó lépése egy 1200 K-es 1 perces felfűtés volt ultranagy vákuumban. A h-BN monoréteget > 99,8% tisztaságú bórazin (Katchem Ltd.) termikus bontásával állítottam elő 1000 K-en. Az Au depozíciójához a fentebb említett párologtatóban lévő nagy tisztaságú (99,95%) aranyat használtam. Az arany borítottságot a Rh(111) felületi atomsűrűségével definiáljuk (1 ML  $\sim 1,60 \times 10^{15}$  atom/cm<sup>2</sup>). Ezt a definíciót azért használom,

mert az arany 1 ML-ig pszeudomorf növekszik a Rh(111) felületén [2]. Az arany párologtatási sebessége  $\sim 0,2$  ML/perc volt.

### **3. Az új tudományos eredmények tézisszerű bemutatása**

#### **1. Neutralizációs effektusok a Ce-O-Cu terner rendszerben**

- 1.1. Az oxigén Cu(111) felületen történő adszorpciójának LEIS vizsgálata során oxigénhez rendelhető jel természetszerűleg csak a héliummal felvett spektrumokban volt detektálható, mivel a neon tömege meghaladja az oxigénét. Az O<sub>2</sub> expozíció növekedésének hatására a héliumos oxigén jel intenzitásának növekedése mellett – azzal lineáris összefüggést mutatva – csökkent a Cu jel intenzitása mind a héliummal, mind a neonnal felvett spektrumokban. A réz és az oxigén jelek intenzitás változásai közti lineáris összefüggés alapján kimutattuk, hogy az O<sub>2</sub> adszorpciója a Cu(111) felületen nem okoz neutralizációs effektust sem héliummal, sem neonnal szemben.
- 1.2. A Ce depozícióját LEIS-sel nyomon követve a He<sup>+</sup> ionokkal rögzített cérium és réz jelek intenzitás változásai közt lineáris összefüggést mutattunk ki, azaz He<sup>+</sup> ionokkal szemben nem lép fel neutralizációs effektus a Cu(111) felületre történő cérium depozíció során. A Ne<sup>+</sup> ionokkal felvett spektrumokban a Ce és Cu csúcsok intenzitás változásai közt nem lineáris az összefüggés, viszont a héliummal és neonnal rögzített réz jel intenzitásokat összevetve azok közt lineáris összefüggést állapítottunk meg. Tehát validáltuk, hogy a cérium a Ne<sup>+</sup> ionokkal szemben jelentős mátrixhatást okoz, emiatt kvantitatív analízisre csak a héliumos mérések és a neonnal felvett Cu intenzitás használható.
- 1.3. A Cu(111) felületen létrehozott cérium-dioxid vizsgálatakor kapott héliumos LEIS intenzitás értékeket összevetve a réz és oxigén összesített felületi hányada lineárisan csökkent a cérium intenzitásának növekedésével, ezzel bizonyítottuk, hogy a héliummal szemben nem lépett fel mátrix effektus. A neonnal mért Ce intenzitásokat a héliummal rögzített értékekkel összevetve szintén lineáris összefüggést állapítottunk meg, tehát a cérium-dioxid esetében nem lép fel neutralizáció effektus a neonnal szemben sem. Bizonyítottuk, hogy a Cu(111)-en végzett oxigén adszorpció, illetve fém cérium depozíció során külön-külön meghatározott héliumos LEIS relatív érzékenységi faktorok alkalmazhatók a CeO<sub>2</sub> növesztés mennyiségi jellemzésére is.

## **2. A Ce és CeO<sub>2</sub> növekedési mechanizmusának vizsgálata Cu(111)-en**

- 2.1. Igazoltuk, hogy a cérium 0,5 ML mennyiségig kétdimenziósan növekszik a Cu(111) felületen, e fölött a növekedés háromdimenziós. A felület teljes fedése 2,0 ML Ce mennyiséggel érhető el. A Ce deponiton végzett utólagos oxigén adszorpciós mérések eredményei alapján megállapítottuk, hogy ekkor a cérium kevésbé nedvesítette a felületet, más szóval az oxigén adszorpció hatására a cérium klaszterek átlagos magassága megnőtt.
- 2.2. A CeO<sub>2</sub> szintézise során vizsgáltuk az O<sub>2</sub> nyomás hatását az oxid film folytonosságára és sztöchiometriájára.  $3 \times 10^{-6}$  mbar oxigénben deponálva a cériumot a 16 ML céria film alapvetően folytonos volt, és a cériumnak csupán 2%-a volt redukált (Ce<sup>3+</sup>), azonban ~0,015 ML mennyiségben réz is megjelent a legkülső atomi rétegben. Ezzel szemben a CeO<sub>2</sub>-ot  $5 \times 10^{-7}$  mbar oxigénben szintetizálva a felületi Cu mennyisége lecsökkent ~0,003 ML-re, tehát a 16 ML oxid film biztosan folytonos volt, viszont a Ce<sup>3+</sup> ionok aránya 4%-ra növekedett.

## **3. A Co és CeO<sub>2</sub> kölcsönhatásának vizsgálata**

- 3.1. Az LEIS eredmények alapján a kobalt kétdimenziós növekedését állapítottuk meg a CeO<sub>2</sub>(111) felületen 0,3 ML borítottságig, ennél nagyobb mennyiségű Co viszont 3D klasztereket képez a cérián. Sem a kobalt, sem a cérium tekintetében nem lép fel neutralizációs mátrix effektus a LEIS-ben, akár héliumot, akár neont használunk. Ezt a megállapítást az egyes intenzitás adatok összevetésében tapasztalt lineáris összefüggések igazolják. Viszont a Co depozíciója során a lineáris változástól való jelentős eltérés volt megfigyelhető az O LEIS csúcs intenzitásában. Egy kvázi tömbi, folytonos kobalt filmen megvizsgálva az O<sub>2</sub> adszorpcióját, jelentős neutralizációs effektust állapítottunk meg a He<sup>+</sup> ionokra vonatkozóan az oxigénnel szemben.
- 3.2. XPS mérésekkel igazoltuk, hogy a Co 0,2 ML mennyiségig Co<sup>2+</sup>-vé oxidálódik a céria felületén a depozíció során, miközben részlegesen redukálja azt. Nagyobb kobalt mennyiségeknél a fémes kobalt arányának fokozatos növekedését figyeltük meg, feltételezzük, hogy a kobalt oxidációja a depozíció során a Co-CeO<sub>2</sub> határfelületre korlátozódik. Emellett a Ce<sup>4+</sup> ionok egyre nagyobb hányadának Ce<sup>3+</sup>-á történő redukálódását mutattuk ki a depozíció során.
- 3.3. A termikus kezelések hatására a kobalt egyre nagyobb hányadának oxidálódását és a Co<sup>2+</sup> ionoknak a CeO<sub>2</sub> film mélyebb rétegeibe történő diffúzióját figyeltük meg.

3.4. A kobalt redukált  $\text{CeO}_x$  rétegre való párologtatása során kimutattuk, hogy a depozíció során a kobalt és a  $\text{CeO}_x$  közti redox reakció korlátozottabb, azaz a kobalt kevésbé oxidálódik és a  $\text{Ce}^{3+}/\text{Ce}^{4+}$  arány kisebb mértékben változik, mint a sztöchiometrikus  $\text{CeO}_2$ -on. Ez a korlátozott redox reakció lelassítja a kobalt mélyebb rétegekbe történő diffúzióját is a hőkezelések során.

#### **4. Az arany növekedésének vizsgálata Rh(111) felületen**

4.1. A LEIS adatok alapján igazoltuk, hogy az arany 0,5 ML mennyiségig kétdimenziós klasztereket képez a Rh(111) felületén 500 K-en, ennél nagyobb mennyiségű Au 3D klaszterekben stabilizálódik a felületen. A ródium felület teljes fedéséhez ~2,5 ML arany szükséges.

4.2. LEIS-sel különböző szubsztrát hőmérsékleteken vizsgálva az Au növekedését a Rh(111) felületen az arany megtapadási valószínűségében („sticking coefficient”) nem tapasztaltunk detektálható változást a 500 K és 700 K közti hőmérséklet tartományban, így azt egységnyi tekintjük ezeken a hőmérsékleteken.

4.3. A LEIS mérések alapján 700 K-en jobban nedvesíti az arany a ródium felületét, mint 500 K-en, különösen az 1-3 ML tartományban, de ennek ellenére az Au növekedése 3D 0,5 ML mennyiség felett mindkét hőmérsékleten. Ezért feltételezzük, hogy 500 K-en a 2D növekedéstől való eltérésnek inkább kinetikai, mintsem termodinamikai okai vannak. A 700 K-en tapasztalt jobb nedvesedést részben a felületi ötvöződés okozhatja.

#### **5. Az Au és h-BN közti kölcsönhatás vizsgálata Rh(111)-en**

5.1. Bórazin termikus bontásával 1000 K-en szinte tökéletesen folytonos bór-nitrid filmet sikerült előállítani, mivel a szintézis végén a LEIS spektrumban, a Rh jel hozzájárulása a kimutatási határ alatt volt, ami 0,0005 ML ródiumnak megfelelő mennyiséget jelent. A h-BN szintézis hatására nem lép fel neutralizációs effektus a ródium jelben sem a  $\text{He}^+$ , sem a  $\text{Ne}^+$  ionokkal szemben.

5.2. Az arany 0,1-0,2 ML mennyiségig 2D klasztereket képez a h-BN nanomesh felületén, míg ennél nagyobb Au mennyiségeknél a növekedés egyértelműen 3D.

5.3. A h-BN/Rh(111) felületre deponált arany klaszterek felfűtése során folyamatos arany intenzitás csökkenést tapasztaltunk a LEIS spektrumokban 700 K-ig, ami Ostwald-érésre, interkalációra és/vagy deszorpcióra utal. Az azonos arany mennyiségekkel elvégzett XPS mérések alapján azonban 700 K-ig a párolgás nem jelentős. A 700-1050 K hőmérséklet tartományban az Au intenzitása a LEIS spektrumokban fokozatosan a kimutatási határ alá csökkent, ami az arany teljes

interkalációjához és/vagy deszorpciójához rendelünk. Az Au 4f tartomány csúcs területe 1050 K-ig a kiindulási érték 75%-ra csökkent, ami korlátozott mértékű deszorpcióra utal, azaz az arany nagyobb része interkalálódott. Kimutattuk, hogy 1050 K fölötti hőmérsékleteken a h-BN film fokozatosan elveszíti folytonosságát és a LEIS spektrumokban újra láthatóvá válik a Rh és az Au.

## **6. h-BN szintézise Au-Rh ötvözet felületeken**

- 6.1. Kimutattuk, hogy a Rh(111)-en létrehozott Au-Rh ötvözet felületen a Rh LEIS jel sokkal kisebb bórazin expozíció hatására csökkent a detektálási határ alá, mint az arany jel. Ennek oka a Rh és a bórazin (és annak fragmentjei) közti erősebb kölcsönhatás és a Rh nagyobb aktivitása a bórazin bontásában.
- 6.2. Kimutattuk, hogy az ötvözött felületen lévő arany mennyiségének növelésével az Au jel csökkenése egyre lassabbá válik. Az arany jel csökkenését a ródiumon képződő bórazin/bór-nitrid fragmentumok aranyra történő diffúziója okozza, amelynek hatékonysága csökken a felületi Rh atomok számának fogyásával.
- 6.3. Kimutattuk, hogy a felületi ötvözeten végzett h-BN szintézises mérésekben a LEIS ródiom jel eltűnése után az Au jel további bórazin expozíciók hatására tovább csökkent; és ez csökkenés sokkal intenzívebb volt, mint a folytonos (~4 ML) arany filmen elvégzett méréseknél. Ennek magyarázata *6.2 alpontban* említettekkel összhangban az, hogy a Rh atomokon adszorbeált bórazin/bór-nitrid fragmentek átvándorolnak az Au atomokra, így gyorsítva meg az arany beborítódását h-BN-nel. Így rövid időre Rh atomok szabadulnak fel, de ezeken pillanatszerűen újra bórazin molekulák és bomlástermékeik kötődnek meg, így a Rh LEIS intenzitás nulla marad.



## 4. Summary

Model catalysts can be prepared by forming metal nanoparticles on oxide single crystals or single crystalline thin films. In the course of my work, I formed CeO<sub>2</sub>(111) thin films on Cu(111) by evaporating cerium metal in oxygen background gas. The process was investigated by X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and low-energy ion scattering spectroscopy (LEIS), with particular emphasis on the inspection of neutralization matrix effects, which can hinder quantitative analysis. We proved that helium based LEIS relative sensitivity factors, determined in separate O<sub>2</sub> and Ce deposition experiments, can be well applied to the study of CeO<sub>2</sub> layer growth as well. We have shown that at lower O<sub>2</sub> pressures ( $5 \times 10^{-7}$  mbar) the continuity of the layer is guaranteed; however, this results in a slightly more reduced oxide (4% Ce<sup>3+</sup>). Evaporating cobalt on the oxide layer at 300 K is characterized by two-dimensional (2D) growth at low coverages ( $\leq 0.3$  ML), while 3D growth is observed above. Meanwhile, ceria is partially reduced and cobalt is partially oxidized to Co<sup>2+</sup>. As a result of thermal treatments, the oxidation of cobalt (to Co<sup>2+</sup>) proceeds further, while diffusing into the deeper layers. Evaporation of cobalt to reduced ceria results in more limited redox reaction and hindered inward diffusion.

Another group of ultra-thin layers are two-dimensional materials. In my work, I investigated the interaction of hexagonal boron nitride (h-BN) monolayers (formed by decomposing borazine) and gold on Rh(111). As a first step, I studied the Au/Rh(111) system. Gold grows two-dimensionally up to 0.5 ML on Rh at a substrate temperature of 500–700 K with constant sticking coefficient. Higher doses resulted in 3D clusters, mainly for kinetic reasons. The growth of Au is two-dimensional at 300 K on h-BN prepared on Rh(111) up to a coverage of 0.2 ML, above which it shows a very strong 3D character. As a result of thermal treatments up to 1050 K, gold intercalates below h-BN, while at intermediate temperatures, gold desorption and agglomeration also take place to a limited extent. If boron nitride is synthesized on Au/Rh(111) surface alloys, decomposition of borazine occurs primarily on Rh, but via spill-over of the resulting fragments to gold, the entire surface can be covered by h-BN.

## 5. Az értekezés alapját képező publikációk

1. **G. Vári**, L. Óvári, J. Kiss, Z. Kónya  
*LEIS and XPS investigation into the growth of cerium and cerium dioxide on Cu(111)*  
Phys. Chem. Chem Phys. **17** (7). pp. 5124-5132. (2015)  
MTMT: [2811919]  
**IF: 4,449**
2. **G. Vári**, L. Óvári, C. Papp, H-P. Steinrück, J. Kiss, Z. Kónya  
*The Interaction of Cobalt with CeO<sub>2</sub>(111) Prepared on Cu(111)*  
J. Phys. Chem. C **119**:(17) pp. 9324-9333. (2015)  
MTMT: [2881646]  
**IF: 4,509**
3. L. Óvári, A. Berkó, **G. Vári**, R. Gubó, A. P. Farkas, Z. Kónya  
*The growth and thermal properties of Au deposited on Rh(111): formation of ordered surface alloy.*  
Phys. Chem. Chem Phys. **18** pp. 25230-25240. (2016)  
MTMT: [3101262]  
**IF: 4,123**
4. R. Gubó, **G. Vári**, J. Kiss, A. Farkas, L. Óvári, A. Berkó, Z. Kónya  
*Tailoring the hexagonal boron nitride nanomesh on Rh(111) by gold*  
Phys. Chem. Chem. Phys. **20** pp. 15473-15485. (2018)  
MTMT: [3368595]  
**IF: 3,567**  
**ΣIF: 16,648**

## **6. Egyéb publikációk**

1. A. Sápi, Gy. Halasi, J. Kiss, D. G. Dobó, K. L. Juhász, V. J. Kolcsár, Zs. Ferencz, **G. Vári**, V. Matolin, A. Erdőhelyi, Á. Kukovecz, Z. Kónya

*Supporting Information for - In-situ DRIFTS and NAP-XPS exploration of the complexity of CO<sub>2</sub> hydrogenation over size controlled Pt nanoparticles supported on mesoporous NiO*

J. Phys. Chem. C **122** pp. 5553-5565. (2018)

MTMT: [3339431]

**IF: 4,309**

2. Palotás Krisztián, Óvári László, **Vári Gábor**, Gubó Richárd, Farkas Arnold P, Kiss János, Berkó András, Kónya Zoltán

*Au–Rh Surface Structures on Rh(111): DFT Insights into the Formation of an Ordered Surface Alloy*

J. Phys. Chem. C **122** pp. 22435-22447. (2018)

MTMT: [3422662]

**IF: 4,309**

3. Farkas Arnold Péter, Szitás Ádám, **Vári Gábor**, Gubó Richárd, Óvári László, Berkó András, Kiss János, Kónya Zoltán

*Effect of Gold on the Adsorption Properties of Acetaldehyde on Clean and h-BN Covered Rh(111) Surface*

Top. Catal. **61** pp. 1247-1256. (2018)

MTMT: [3370969]

**IF: 2,321**

**ΣIF: 10,939**

**ΣΣIF: 27,587**

## **7. Konferencia részvételek**

1. **Vári G.**, Óvári L., Kiss J., Kónya Z.  
CeO<sub>2</sub>(111) felületen létrehozott modellkatalizátorok spektroszkópiai vizsgálata  
*I. Innováció a Természettudományban – Doktorandusz Konferencia*  
Szeged (Magyarország), 2014. **előadás**
2. **G. Vári**, **L. Óvári**, J. Kiss, Z. Kónya  
Spectroscopic investigation into the interaction of Co with CeO<sub>2</sub>(111)  
*15<sup>th</sup> Joint Vacuum Conference*  
Bécs (Ausztria), 2014. **előadás**
3. **Vári G.**, Óvári L., Kiss J., Kónya Z.  
CeO<sub>2</sub>(111) felületen létrehozott modellkatalizátorok spektroszkópiai vizsgálata  
*MTA Felületkémiai és Nanoszerkezeti Munkabizottsági ülés*  
Budapest (Magyarország), 2014. **előadás**
4. **L. Óvári**, **G. Vári**, S. Krick-Calderon, Z. Kónya, J. Kiss, C. Papp, H.-P. Steinrück  
Characterization of a Co/CeO<sub>2</sub>(111) model catalyst and its interaction with ethanol near ambient pressure  
*Berlin Rideal Conference*  
Berlin (Németország), 2015. **poszter**
5. **G. Vári**, L. Óvári, C. Papp, H.-P. Steinrück, J. Kiss, Z. Kónya  
Growth and thermal effects of Co on CeO<sub>2</sub>(111)  
*31<sup>st</sup> European Conference on Surface Science*  
Barcelona (Spanyolország), 2015. **poszter**
6. **L. Óvári**, A. Berkó, R. Gubó, **G. Vári**, J. Kiss, A. P. Farkas, Z. Kónya  
Gold on hexagonal boron nitride nanomesh prepared on Rh(111): Growth and intercalation  
*16<sup>th</sup> Joint Vacuum Conference*  
Portoroz (Szlovénia), 2016. **előadás**
7. **L. Óvári**, A. Berkó, R. Gubó, **G. Vári**, J. Kiss, A. P. Farkas, Z. Kónya  
Growth and intercalation of gold on hexagonal boron nitride nanomesh prepared on Rh(111)  
*20<sup>th</sup> International Vacuum Congress*  
Busan (Dél-Korea), 2016. **előadás**
8. **A. Berkó**, L. Óvári, A. P. Farkas, R. Gubó, **G. Vári**, J. Kiss, Z. Kónya

- Formation of Au-Rh surface alloy and the effect of Au on the structure of h-BN film grown on Rh(111) surface  
*32<sup>nd</sup> European Conference on Surface Science*  
Grenoble (Franciaország), 2016. **előadás**
9. A. P. Farkas, D. Jurdi, R. Gubó, **G. Vári**, L. Óvári, A. Berkó, J. Kiss, Z. Kónya  
Adsorption properties of ethanol on gold decorated h-BN nanomesh prepared on Rh(111) surface  
*32<sup>nd</sup> European Conference on Surface Science*  
Grenoble (Franciaország), 2016. **poszter**
10. **G. Vári**, R. Gubó, J. Kiss, A. P. Farkas, L. Óvári, A. Berkó, Z. Kónya  
Interaction of gold with the hexagonal boron nitride nanomesh prepared on Rh(111)  
*7<sup>th</sup> Szeged International Workshop on Advances in Nanoscience*  
Szeged (Magyarország), 2016. **előadás**
11. **Vári G.**, Gubó R., Farkas A. P., Óvári L., Kiss J., Berkó A., Kónya Z.  
Arany növekedése és interkalációja Rh(111)-en növesztett h-BN nanohálón  
*MTA Felületkémiái és Nanoszerkezeti Munkabizottsági ülés*  
Budapest (Magyarország), 2016. **előadás**
12. **G. Vári**, R. Gubó, J. Kiss, A. Farkas, L. Óvári, A. Berkó, Z. Kónya  
Interaction of Au, Rh and Au-Rh alloys with the Hexagonal Boron Nitride monolayer studied on Rh(111)  
*33<sup>rd</sup> European Conference on Surface Science*  
Szeged (Magyarország), 2017. **poszter**
13. A. P. Farkas, Á. Szitás, **G. Vári**, L. Óvári, A. Berkó, J. Kiss, Z. Kónya  
Effect of gold on the adsorption properties of acetaldehyde on clean and h-BN covered Rh(111) surface  
*33<sup>rd</sup> European Conference on Surface Science*  
Szeged (Magyarország), 2017. **előadás**
14. **Gábor Vári**, Richárd Gubó, János Kiss, Arnold Farkas, László Óvári, András Berkó, Zoltán Kónya  
Interaction of Au and Rh with a Hexagonal Boron Nitride monolayer studied on Rh(111)  
*17<sup>th</sup> Joint Vacuum Conference*  
Olmütz (Csehország), 2018. **poszter**

15. **Gábor Vári**, Richárd Gubó, János Kiss, Arnold Farkas, László Óvári, András Berkó, Zoltán Kónya  
Interaction of Au, Rh and Au-Rh alloys with the Hexagonal Boron Nitride monolayer studied on Rh(111)  
*8th Szeged International Workshop on Advances in Nanoscience*  
Szeged (Magyarország), 2018. **poszter**
16. **Vári Gábor**, Gubó Richárd, Kiss János, Farkas Arnold, Palotás Krisztián, Óvári László, Berkó András, Kónya Zoltán.  
Rh(111) felületen létrehozott hexagonális bórnitrid nanoháló kölcsönhatása fémekkel  
*Magyar Fizikus Vándorgyűlés 2019*  
Sopron (Magyarország) 2019. **előadás**
17. **Vári Gábor**, Kiss János, Farkas Arnold, Palotás Krisztián, Óvári László, Berkó András, Kónya Zoltán  
Rh(111) felületen létrehozott hexagonális bórnitrid nanoháló kölcsönhatása fémekkel  
*MTA Felületkémiai és Nanoszerkezeti Munkabizottsági ülés*  
Online, 2020. **előadás**
18. **Gábor Vári**, Richárd Gubó, János Kiss, Arnold Farkas, László Óvári, András Berkó, Zoltán Kónya  
Intercalation of Au on hexagonal boron nitride monolayer prepared on Rh(111) and on gold coated Rh(111)  
*18th International Conference on Thin Films and 18th Joint Vacuum Conference*  
Online, 2020. **poszter**

## **8. Irodalom**

- [1] M.J.A. R. C. Weast, ed., CRC handbook of chemistry and physics., 60th ed., CRC Press, Boca Raton, 1979.
- [2] L. Óvári, A. Berkó, G. Vári, R. Gubó, A.P. Farkas, Z. Kónya, Phys. Chem. Chem. Phys. 18 (2016) 25230–25240. <https://doi.org/10.1039/C6CP02128J>.

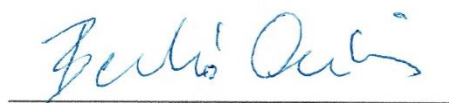
## Társszerzői nyilatkozatok

Alulírott **Dr. Óvári László** és **Prof. Dr. Berkó András** hozzájárulunk, hogy **Vári Gábor** felhasználja

*The Growth and Thermal Properties of Au Deposited on Rh(111): Formation of an Ordered Surface Alloy. László Óvári, András Berkó, Gábor Vári, Richárd Gubó, Arnold Péter Farkas, and Zoltán Kónya. Physical Chemistry Chemical Physics 18 (36): 25230–40. 2016.*

közleményünkben foglalt eredményeinket a Szegedi Tudományegyetem Környezettudományi Doktori Iskola keretében a PhD fokozat eléréseért benyújtott dolgozatának **4.1-4.3 tézispontjaihoz**, és egyúttal kijelentem, hogy ezeket az eredményeket nem használtuk fel tudományos fokozat megszerzésekor, s ezt a jövőben sem tesszük A szóban forgó közleményben a jelölt szerepe meghatározó fontosságú.

Kelt.: Szeged, 2021. szeptember 24.



Prof. Dr. Berkó András



Dr. Óvári László

Alulírott **Dr. Óvári László** hozzájárulok, hogy **Vári Gábor** felhasználja

*Tailoring the Hexagonal Boron Nitride Nanomesh on Rh(111) with Gold. R. Gubó, G. Vári, J. Kiss, A. P. Farkas, K. Palotás, L. Óvári, A. Berkó, and Z. Kónya. Physical Chemistry Chemical Physics 20 (22): 15473–85. 2018.*

közleményünkben foglalt eredményeinket a Szegedi Tudományegyetem Környezettudományi Doktori Iskola keretében a PhD fokozat eléréseért benyújtott dolgozatában, és egyúttal kijelentem, hogy ezeket az eredményeket nem használtam fel tudományos fokozat megszerzésekor, s ezt a jövőben sem teszem A szóban forgó közleményben a jelölt szerepe meghatározó fontosságú.

Kelt.: Szeged, 2021. szeptember 24.



Dr. Óvári László