Bibliography

[1] I. Chorkendorff and J. W. Niemantsverdriet, *Concepts of Modern Catalysis and Kinetics*, Wiley-VCH, 2003.

[2] Y. Shao, G. Yin, Z. Wang and Y. Gao, *J. Power Sources*, 2007, **167**, 235.

[3] http://energy.gov/eere/fuelcells/types-fuel-cells.

[4] H. A. Gasteiger, S. S. Kocha, B. Sompalli and F. T. Wagner, *Appl. Catal., B*, 2005, **56**, 9.

[5] J. Greeley, I. E. L. Stephens, A. S. Bondarenko, T. P. Johansson, H. A. Hansen, T. F. Jaramillo, J. Rossmeisl, I. Chorkendorff and J. K. Nørskov, *Nat. Chem.*, 2009, **1**, 552.

[6] J. K. Nørskov, T. Bligaard, J. Rossmeisl and C. H. Christensen, *Nat. Chem.*, 2009, **1**, 37.

[7] G. J. Kroes, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2012, **14**, 14966.

[8] D. A. King and M. G. Wells, *Proc. R. Soc. London Ser. A*, 1974, **339**, 245.

[9] M. T. M. Koper, *Nanoscale*, 2011, **3**, 2054.

[10] W. P. Ellis and R. L. Schwoebel, *Surf. Sci.*, 1968, **11**, 82.

[11] M. Henzler, *Surf. Sci.*, 1970, **19**, 159.

[12] D. A. King, *Surf. Sci.*, 1975, **47**, 384.

[13] J. W. Niemantsverdriet, *Spectroscopy in Catalysis*, Wiley-VCH, 2007.

[14] G. Attard and C. Barnes, *Surfaces*, Oxford Science Publications, 1998.

[15] C. Carbagno, A. Groß, J. Meyer and K. Reuter, O_2 *Adsorption Dynamics at Metal Surfaces: Non-Adiabatic Effects, Dissociation and Dissipation. From Dynamics of Gas-Surface Interactions.*, Springer, Berlin, 2013, vol. 50.

[16] C. Stampfl, A. Soon, S. Piccinin, H. Shi and H. Zhang, *J. Phys.: Condens. Matter*, 2008, **20**, 184021.

[17] E. Lundgren, A. Mikkelsen, J. N. Andersen, G. Kresse, M. Schmid and P. Varga, *J. Phys.: Condens. Matter*, 2006, **18**, R481.

[18] P. D. Nolan, B. R. Lutz, P. L. Tanaka, J. E. Davis and C. B. Mullins, *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **81**, 3179.

[19] P. D. Nolan, B. R. Lutz, P. L. Tanaka, J. E. Davis and C. B. Mullins, *J. Chem. Phys.*, 1999, **111**, 3696.

[20] A. C. Luntz, M. D. Williams and D. S. Bethune, *J. Chem. Phys.*, 1988, **89**, 4381.

[21] A. C. Luntz, J. Grimblot and D. E. Fowler, *Phys. Rev. B*, 1989, **39**, 12903.

[22] A. Groß, A. Eichler, J. Hafner, M. J. Mehl and D. A. Papaconstantopoulos, *J. Chem. Phys.*, 2006, **124**, 174713.

[23] A. Groß, A. Eichler, J. Hafner, M. J. Mehl and D. A. Papaconstantopoulos, *Surf. Sci.*, 2003, **539**, L542.

[24] C. T. Rettner and C. B. Mullins, *J. Chem. Phys.*, 1991, **94**, 1626.

[25] C. T. Campbell, *Surf. Sci.*, 1985, **157**, 43.

[26] P. D. Nolan, M. C. Wheeler, J. E. Davis and C. B. Mullins, *Acc. Chem. Res.*, 1998, **31**, 798.

[27] G. R. Darling and S. Holloway, *Rep. Progr. Phys.*, 1995, **58**, 1595.

[28] A. W. Kleyn, *Chem. Soc. Rev.*, 2003, **32**, 87.

[29] A. Eichler, F. Mittendorfer and J. Hafner, *Phys. Rev. B.*, 2000, **62**, 4744.

[30] P. Sjövall and P. Uvdal, *Chem. Phys. Lett.*, 1998, **282**, 355.

[31] C. Nyberg and C. G. Tengstal, *Surf. Sci.*, 1983, **126**, 163.

[32] T. W. Orent and S. D. Bader, *Surf. Sci.*, 1982, **115**, 323.

[33] C. Nyberg and C. G. Tengstal, *Solid State Commun.*, 1982, **44**, 251.

[34] E. M. Stuve, R. J. Madix and C. R. Brundle, *Surf. Sci.*, 1984, **146**, 155.

[35] S.-L. Chang and P. A. Thiel, *Phys. Rev. Lett.*, 1987, **59**, 296.

[36] S.-L. Chang and P. A. Thiel, *J. Chem. Phys.*, 1988, **88**, 2071.

[37] S.-L. Chang and P. A. Thiel, *Surf. Sci.*, 1988, **205**, 117.

[38] G. Zheng and E. I. Altman, *Surf. Sci.*, 2002, **504**, 253.

[39] D.-J. Liu and J. W. Evans, *Phys. Rev. B*, 2014, **89**, 205406.

[40] J. Meyer and K. Reuter, *New J. Phys.*, 2011, **13**, 085010.

[41] J. Meyer, *Ph.D. thesis*, Freie Universität Berlin, Berlin, 2011.

[42] J. Meyer and K. Reuter, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2014, **53**, 4721.

[43] B. L. M. Hendriksen, S. C. Bobaru and J. W. M. Frenken, *Surf. Sci.*, 2004, **552**, 229.

[44] R. van Rijn, O. Balmes, A. Resta, D. Wermeille, R. Westerström, J. Gustafson, R. Felici, E. Lundgren and J. W. M. Frenken, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2011, **13**, 13167.

[45] B. Berenbak, D. A. Butler, B. Riedmüller, D. C. Papageorgopoulos, S. Stolte and A. W. Kleyn, *Surf. Sci.*, 1998, **414**, 271.

[46] P. Junell, K. Honkala, M. Hirsimäki, M. Valden and K. Laasonen, *Surf. Sci.*, 2003, **546**, L797.

[47] M. Beutl, M. Riedler and K. D. Rendulic, *Chem. Phys. Lett.*, 1995, **247**, 249.

[48] M. Kay, G. R. Darling, S. Holloway, J. A. White and D. M. Bird, *Chem. Phys. Lett.*, 1995, **245**, 311.

[49] A. Groß, S. Wilke and M. Scheffler, *Phys. Rev. Lett.*, 1995, **75**, 2718.

[50] I. M. N. Groot, A. W. Kleyn and L. B. F. Juurlink, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2011, **50**, 5174.

[51] R. A. Olsen, D. A. McCormack, M. Luppi and E. J. Baerends, *J. Chem. Phys.*, 2008, **128**, 194715.

[52] I. M. N. Groot, A. W. Kleyn and L. B. F. Juurlink, *J. Phys. Chem. C*, 2013, **117**, 9266.

[53] G. R. Darling, M. Kay and S. Holloway, *Surf. Sci.*, 1998, **400**, 314.

[54] A. Cassuto and D. A. King, *Surf. Sci.*, 1981, **102**, 388.

[55] H. J. Kreuzer, *J. Chem. Phys.*, 1996, **104**, 9593.

[56] A. F. Carlsson and R. J. Madix, *J. Chem. Phys.*, 2001, **114**, 5304.

[57] C. R. Brundle, J. Behm and J. A. Barker, *J. Vac. Sci. Technol., A*, 1984, **2**, 1038.

[58] J. W. Evans and D.-J. Liu, *J. Chem. Phys.*, 2014, **140**, 194704.

[59] J. E. Davis and C. B. Mullins, *Surf. Sci. Lett.*, 1997, **380**, L513.

[60] X. Guo, A. Hoffman and J. T. Yates, *J. Chem. Phys.*, 1989, **90**, 5787.

[61] R. Imbihl and J. E. Demuth, *Surf. Sci.*, 1986, **173**, 395.

[62] D. T. Vu, K. A. R. Mitchell, O. L. Warren and P. A. Thiel, *Surf. Sci.*, 1994, **318**, 129.

[63] J. W. Evans, *J. Chem. Phys.*, 1987, **87**, 3038.

[64] M. Saidy, O. L. Warren, P. A. Thiel and K. A. R. Mitchell, *Surf. Sci.*, 2001, **494**, L799.

[65] M. Todorova, E. Lundgren, V. Blum, A. Mikkelsen, S. Gray, J. Gustafson, M. Borg, J. Rogal, K. Reuter, J. N. Andersen and M. Scheffler, *Surf. Sci.*, 2003, **541**, 101.

[66] D.-J. Liu and J. W. Evans, *Surf. Sci.*, 2004, **563**, 13.

[67] Y. Zhang, V. Blum and K. Reuter, *Phys. Rev. B*, 2007, **75**, 235406.

[68] K. Klier, Y. N. Wang and G. W. Simmons, *J. Phys. Chem.*, 1993, **97**, 633.

[69] A. V. Walker, B. Klötzer and D. A. King, *J. Chem. Phys.*, 1998, **109**, 6879.

[70] L. Jacobse, A. den Dunnen and L. B. F. Juurlink, *J. Chem. Phys.*, 2015, **143**, 014703.

[71] A. den Dunnen, S. Wiegman, L. Jacobse and L. B. F. Juurlink, *J. Chem. Phys.*, 2015, **142**, 214708.

[72] D. A. McCormack, R. A. Olsen and E. J. Baerends, *J. Chem. Phys.*, 2005, **122**, 194708.

[73] I. M. N. Groot, K. J. P. Schouten, A. W. Kleyn and L. B. F. Juurlink, *J. Chem. Phys.*, 2008, **129**, 224707.

[74] H. Ueta, L. Chen, R. D. Beck, I. Colón-Dìaz and B. Jackson, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2013, **15**, 20526.

[75] D. J. Miller, H. Öberg, L. Å. Näslund, T. Anniyev, H. Ogasawara, L. G. M. Pettersson and A. Nilsson, *J. Chem. Phys.*, 2010, **133**, 224701.

[76] T. Zambelli, J. V. Barth, J. Wintterlin and G. Ertl, *Nature*, 1997, **390**, 495.

[77] J. S. McEwen, J. M. Bray, C. Wu and W. F. Schneider, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2012, **14**, 16677.

[78] K. Gustafsson and S. Andersson, *J. Chem. Phys.*, 2004, **120**, 7750.

[79] B. C. Stipe, M. A. Rezaei, W. Ho, S. Gao, M. Persson and B. I. Lundqvist, *Phys. Rev. Lett.*, 1997, **78**, 4410.

[80] Z. Yang, J. Wang and X. Yu, *Phys. Lett. A*, 2010, **374**, 4713.

[81] P. Valentini, T. E. Schwartzentruber and I. Cozmuta, *J. Chem. Phys.*, 2010, **133**, 084703.

[82] J. M. Bradley, X.-C. Guo, A. Hopkinson and D. A. King, *J. Chem. Phys.*, 1996, **104**, 4283.

[83] S. Ferrer and H. P. Bonzel, *Surf. Sci.*, 1982, **119**, 234.

[84] A. T. Gee and B. E. Hayden, *J. Chem. Phys.*, 2000, **113**, 10333.

[85] H. Wang, R. G. Tobin, D. K. Lambert, C. L. DiMaggio and G. B. Fisher, *Surf. Sci.*, 1997, **372**, 267.

[86] A. Rar and T. Matsushima, *Surf. Sci.*, 1994, **318**, 89.

[87] Ž. Šljivančanin and B. Hammer, *Surf. Sci.*, 2002, **515**, 235.

[88] P. Gambardella, Ž. Šljivančanin, B. Hammer, M. Blanc, K. Kuhnke and K. Kern, *Phys. Rev. Lett*, 2001, **87**, 056103.

[89] P. J. Feibelman, S. Esch and T. Michely, *Phys. Rev. Lett.*, 1996, **77**, 2257.

[90] M. Sano, Y. Seimiya, Y. Ohno, T. Matsushima, S. Tanaka and M. Kamada, *Surf. Sci.*, 1999, **421**, 386.

[91] T. Yamanaka, T. Matsushima, S. Tanaka and M. Kamada, *Surf. Sci.*, 1996, **349**, 119.

[92] A. Winkler, X. Guo, H. R. Siddiqui, P. L. Hagans and J. T. Yates, *Surf. Sci.*, 1988, **201**, 419.

[93] X.-C. Guo, J. M. Bradley, A. Hopkinson and D. A. King, *Surf. Sci.*, 1994, **310**, 163.

[94] L. Vattuone, L. Savio and M. Rocca, *Surf.Sci.Rep.*, 2008, **63**, 101.

[95] M. J. T. C. van der Niet, A. den Dunnen, L. B. F. Juurlink and M. T. M. Koper, *J. Chem. Phys.*, 2010, **132**, 174705.

[96] M. A. van Hove and G. A. Somorjai, *Surf. Sci.*, 1980, **92**, 489.

[97] J. L. Gland, B. A. Sexton and G. B. Fisher, *Surf. Sci.*, 1980, **95**, 587.

[98] D. L. Bashlakov, L. B. F. Juurlink, M. T. M. Koper and A. I. Yanson, *Catal. Lett.*, 2011, **142**, 1.

[99] N. R. Avery, *Chem. Phys. Lett.*, 1983, **96**, 371.

[100] A. E. Wiskerke, F. H. Geuzebroek, A. W. Kleyn and B. E. Hayden, *Surf. Sci.*, 1992, **272**, 256.

[101] R. P. Bell, *Proc. R. Soc. London Ser. A*, 1936, **154**, 414.

[102] J. N. Brønsted and K. J. Pedersen, *Z. Phys. Chem.-Stoch. Ve.*, 1924, **108**, 185.

[103] M. G. Evans and M. Polanyi, *Trans. Faraday Soc.*, 1936, **32**, 1333.

[104] M. Luppi, D. A. McCormack, R. A. Olsen and E. J. Baerends, *J. Chem. Phys.*, 2005, **123**, 164702.

[105] K. Besocke, B. Krahl-Urban and H. Wagner, *Surf. Sci.*, 1977, **68**, 39.

[106] O. A. Petrii, *Russ. J. Electrochem.*, 2013, **49**, 401.

[107] M. J. T. C. van der Niet, A. den Dunnen, L. B. F. Juurlink and M. T. M. Koper, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2010, **37**, 6722.

[108] M. J. T. C. van der Niet, A. den Dunnen, L. B. F. Juurlink and M. T. M. Koper, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2011, **13**, 1629.

[109] D. Chandler, *Nature*, 2005, **437**, 640.

[110] R. L. Baldwin, *Science*, 2002, **295**, 1657.

[111] K. A. Dill and J. L. MacCallum, *Science*, 2012, **338**, 1042.

[112] N. E. Levinger, *Science*, 2002, **298**, 1722.

[113] M. Wong, J. K. Thomas and T. Nowak, *J. Am. Chem. Soc.*, 1977, **99**, 4730.

[114] M. R. Hogerheijde, E. A. Bergin, C. Brinch, L. I. Cleeves, J. K. J. Fogel, G. A. Blake, C. Dominik, D. C. Lis, G. Melnick, D. Neufeld, O. Panic, J. C. Pearson, L. Kristensen, U. A. Yildiz and E. F. van Dishoeck, *Science*, 2011, **334**, 338.

[115] B. Nisini, *Science*, 2000, **290**, 1513.

[116] S. Ioppolo, H. M. Cuppen, C. Romanzin, E. F. van Dishoeck and H. Linnartz, *Astrophys. J.*, 2008, **686**, 1474.

[117] F. Schreiber, *J. Phys.: Condens. Matter*, 2004, **16**, R881.

[118] D. Schwendel, T. Hayashi, R. Dahint, A. Pertsin, M. Grunze, R. Steitz and F. Schreiber, *Langmuir*, 2003, **19**, 2284.

[119] G. Hummer, J. C. Rasaiah and J. P. Noworyta, *Nature*, 2001, **414**, 188.

[120] S. Granick and S. C. Bae, *Science*, 2008, **322**, 1477.

[121] H.-J. Wang, X.-K. Xi, A. Kleinhammes and Y. Wu, *Science*, 2008, **322**, 80.

[122] P. A. Thiel and T. E. Madey, *Surf. Sci. Rep.*, 1987, **7**, 211.

[123] M. A. Henderson, *Surf. Sci. Rep.*, 2002, **46**, 1.

[124] A. Hodgson and S. Haq, *Surf. Sci. Rep.*, 2009, **64**, 381.

[125] S. Haq, J. Harnett and A. Hodgson, *Surf. Sci.*, 2002, **505**, 171.

[126] J. Carrasco, A. Michaelides, M. Forster, S. Haq, R. Raval and A. Hodgson, *Nat. Mater.*, 2009, **8**, 427.

[127] J. L. Daschbach, B. M. Peden, R. S. Smith and B. D. Kay, *J. Chem. Phys.*, 2004, **120**, 1516.

[128] K. Thürmer and S. Nie, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.*, 2013, **110**, 11757.

[129] M. Morgenstern, T. Michely and G. Comsa, *Phys. Rev. Lett.*, 1996, **77**, 703.

[130] K. Morgenstern, *Surf. Sci.*, 2002, **504**, 293.

[131] J. A. Blackman, *Metallic Nanoparticles, Handbook of Metal Physics*, Elsevier, 2009.

[132] G. B. Fisher and J. L. Gland, *Surf. Sci.*, 1980, **94**, 446.

[133] B. A. Sexton, *Surf. Sci.*, 1980, **94**, 435.

[134] E. Langenbach, A. Spitzer and H. Lüth, *Surf. Sci.*, 1984, **147**, 179.

[135] U. Starke, K. Heinz, N. Materer, A. Wander, M. Michl, R. Döll, M. A. van Hove and G. A. Somorjai, *J. Vac. Sci. Technol. A*, 1992, **10**, 2521.

[136] X. Su, L. Lianos, Y. R. Shen and G. A. Somorjai, *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **80**, 1533.

[137] A. L. Glebov, A. P. Graham and A. Menzel, *Surf. Sci.*, 1999, **427**, 22.

[138] M. Nakamura, Y. Shingaya and M. Ito, *Chem. Phys. Lett.*, 1999, **309**, 123.

[139] H. Ogasawara, J. Yoshinobu and M. Kawai, *J. Chem. Phys.*, 1999, **111**, 7003.

[140] K. Jacobi, K. Bedürftig, Y. Wang and G. Ertl, *Surf. Sci.*, 2001, **472**, 9.

[141] G. Zimbitas and A. Hodgson, *Chem. Phys. Lett.*, 2006, **417**, 1.

[142] G. Zimbitas, S. Haq and A. Hodgson, *J. Chem. Phys.*, 2005, **123**, 174701.

[143] G. A. Kimmel, N. G. Petrik, Z. Dohnálek and B. D. Kay, *J. Chem. Phys.*, 2006, **125**, 044713.

[144] D. C. Skelton, R. G. Tobin, G. B. Fisher, D. K. Lambert and C. L. DiMaggio, *J. Phys. Chem. B*, 2000, **104**, 548.

[145] M. L. Grecea, E. H. G. Backus, B. Riedmüller, A. Eichler, A. W. Kleyn and M. Bonn, *J. Phys. Chem. B*, 2004, **108**, 12575.

[146] N. G. Petrik and G. A. Kimmel, *J. Chem. Phys.*, 2004, **121**, 3727.

[147] M. J. T. C. van der Niet, A. den Dunnen, M. T. M. Koper and L. B. F. Juurlink, *Phys. Rev. Lett.*, 2011, **107**, 146103.

[148] A. den Dunnen, M. J. T. C. van der Niet, M. T. M. Koper and L. B. F. Juurlink, *J. Phys. Chem. C*, 2012, **116**, 18706.

[149] M. J. T. C. van der Niet, I. Dominicus, M. T. M. Koper and L. B. F. Juurlink, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2008, **10**, 7169.

[150] A. Cordoba and J. J. Luque, *Phys. Rev. B*, 1982, **26**, 4028.

[151] P. Löfgren, P. Ahlström, D. V. Chakarov, J. Lausmaa and B. Kasemo, *Surf. Sci.*, 1996, **367**, L19.

[152] D. Lackey, J. Schott, J. K. Sass, S. I. Woo and F. T. Wagner, *Chem. Phys. Lett.*, 1991, **184**, 277.

[153] N. Kizhakevariam and E. M. Stuve, *Surf. Sci.*, 1992, **275**, 223.

[154] C. Hahn, J. Shan, Y. Liu, O. T. Berg, A. W. Kleyn and L. B. F. Juurlink, *J. Chem. Phys.*, 2012, **136**, 114201.

[155] R. Mom, C. Hahn, L. Jacobse and L. B. F. Juurlink, *Surf. Sci.*, 2013, **613**, 15.