

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Motivation	1
1.1	Ziele der Arbeit	5
1.1.1	Methodische Entwicklungen	5
1.1.2	Quasiteilchen-Rechnungen im Superzellenansatz	5
1.1.3	Anwendung auf die Si(001)-Oberfläche	6
1.2	Aufbau der Arbeit	6
2	Näherungslösungen für das quantenmechanische Vielteilchenproblem	9
2.1	Das quantenmechanische Vielteilchenproblem	9
2.1.1	Born-Oppenheimer-Näherung	10
2.2	Näherungslösungen der elektronischen Schrödingergleichung	11
2.3	Effektive Einteilchen-Theorien	12
2.3.1	Hartree-Theorie	12
2.3.2	Hartree-Fock-Theorie	13
2.3.3	Konfigurations-Wechselwirkung	14
2.3.4	Dichtefunktional-Theorie (DFT)	15
2.3.4.1	Hohenberg-Kohn-Theorem	15
2.3.4.2	Kohn-Sham-Gleichungen	16
2.3.4.3	Näherung des Austausch-Korrelations-Funktional's	18
2.3.5	Interpretation von Eigenwerten und Bandlücken-Problem	20
2.4	Green-Funktionen-Selbstenergie-Theorie	22
2.4.1	Zweite Quantisierung	22
2.4.2	Einteilchen-Green-Funktion	23
2.4.2.1	Einteilchen wechselwirkende Green-Funktion G	24
2.4.2.2	Spektraldarstellung der Green-Funktion	24
2.4.2.3	Spektralfunktion	27
2.4.3	Definition der Selbstenergie	28
2.4.4	Hedin's Gleichungen	29
2.4.5	G_0W_0 -Näherung	32
2.4.6	Quasiteilchen-Rechnung	33

2.5	Zusammenfassung der Näherungslösungen	35
3	Numerische Implementierung	37
3.1	DFT	38
3.1.1	Kohn-Sham-Gleichungen mit periodischen Randbedingungen .	38
3.1.1.1	Abschneideenergie	39
3.1.1.2	\mathbf{k} -Punktsatz	40
3.1.2	Pseudopotentiale	40
3.1.3	Berechnung der Gesamtenergie	43
3.1.4	Berechnung der Kräfte auf Atome zur Strukturoptimierung . .	43
3.2	G_0W_0	44
3.2.1	Die <i>space-time</i> -Methode	45
3.2.2	Berechnung der dielektrischen Matrix	48
3.2.3	Invertierung der dielektrischen Matrix	50
3.2.4	Berechnung der abgeschirmten Wechselwirkung	52
3.2.5	Zusammenfassung <i>space-time</i> -Methode	53
3.2.6	Erweiterung auf nicht kubische Systeme	53
3.2.6.1	Der Superzellenansatz	55
3.2.6.2	Eigenschaft des makroskopischen dielektrischen Tensors einer Schicht im Superzellenansatz	56
3.2.6.3	Abgeschirmte Wechselwirkung für nicht kubische Systeme	58
3.2.6.4	Zusammenfassung der Erweiterung auf nicht kubische Systeme	61
4	Theoretische Beschreibung von Oberflächen und dünnen Schichten	63
4.1	Untersuchung von Kristallzuständen	64
4.1.1	Parameterabhängigkeit in DFT-LDA	64
4.1.2	Parameterabhängigkeit innerhalb der G_0W_0	66
4.1.3	Modell zur Beschreibung der Parameterabhängigkeit	69
4.1.3.1	Betrachtung der isolierten Schicht	77
4.1.3.2	Betrachtung von periodisch fortgesetzten Schichten .	80
4.1.3.3	Vergleich des Modells mit den <i>space-time</i> G_0W_0 <i>ab-initio</i> -Daten	81
4.1.3.4	Bestimmung des Periodizitätsbeitrags	83
4.1.4	Korrektur des Periodizitätsbeitrags	85
4.1.5	Zusammenfassung Silizium-Kristallzustände	87
4.1.6	Elektronische Eigenschaften von ultradünnen Siliziumschichten	88
4.2	Untersuchung von Oberflächenzuständen	89
4.2.1	Vakuumabhängigkeit	93
4.2.2	Schichtdickenabhängigkeit	94

4.2.3	Zusammenfassung Oberflächenzustände Si(001) $p(2\times 1)a$	98
4.2.4	Diskussion des Werts der indirekten Oberflächen-Bandlücke	99
4.3	Diskussion des numerischen Konzepts	99
5	Geometrie und Bandstruktur der Si(001)-Oberfläche	103
5.1	Geometrie und Bildungsenergie der Si(001)-Oberfläche	105
5.1.1	Geometrie	106
5.1.2	Bildungsenergie	106
5.2	Elektronische Struktur im Bereich des $\bar{\Gamma}$ -Punkts	108
5.2.1	Experimentelle Informationen über Valenzzustände	111
5.2.2	Literatur zur elektronischen Struktur am $\bar{\Gamma}$ -Punkt	113
5.3	Rechnungen	114
5.3.1	Bandstrukturen	115
5.3.1.1	$c(4\times 2)$, 10 Lagen	115
5.3.1.2	$p(2\times 1)a$, 10 und 22 Lagen	116
5.3.1.3	$c(4\times 2)$, 10 und 22 Lagen	120
5.3.2	Anregungsspektren	122
5.4	Zusammenfassung elektronische Struktur am $\bar{\Gamma}$ -Punkt	128
6	Zusammenfassung und Ausblick	129
6.1	Zusammenfassung	129
6.2	Ausblick	131
A	Konventionen und Variablen	133
A.1	Konventionen	133
A.2	Deklaration der Variablen und Operatoren	134
A.3	Abkürzungen	135
B	Normierungen und Definitionen im G_0W_0 <i>space-time</i>-Programm	137
C	Methode der Spiegelladungen	139
C.1	Potential an der Grenzfläche zweier Halbräume	139
C.2	Potential im Bereich einer einzelnen Schicht	141
C.3	Potential im Bereich einer periodisch fortgesetzten Schicht	144
D	Volumeneigenschaften von Silizium	149
D.1	Kristall-Bandstruktur	149
D.2	Projizierte Bandstruktur	152
E	Rekonstruktion und Brillouinzone der Si(001)-Oberfläche	155

F	Anpassung der Bandstruktur von Schicht- und Kristallrechnungen	159
F.1	DFT-LDA	159
F.2	G_0W_0	162
G	Konvergenztests Silizium-Schichten	163
G.1	Vier Lagen Siliziumschicht	163
G.1.1	DFT-LDA	163
G.1.2	G_0W_0	164
G.2	Zusammenfassung	167
G.3	Konvergenzparameter für beliebige Schicht- und Vakuumdicken . . .	167
H	Konvergenzparameter für die verschiedenen Rekonstruktionen der	
	Si(001)-Oberfläche	169
H.1	$p(2 \times 1)_a$	169
H.2	$p(2 \times 1)_s$	170
H.3	$p(2 \times 2)$	170
H.4	$c(4 \times 2)$	170
H.5	Dipolkorrektur	170
I	Analyse der Einteilchen-Zustände	173
I.1	Berechnung der Übergangswahrscheinlichkeiten	173
I.2	Symmetrieanalyse	173
I.3	Projektion auf Pseudo-Atomorbitale	174
I.4	Projizierte Zustandsdichte	175
I.5	Oberflächenanteil	175