

Abbildungsverzeichnis

1.1	Darstellung des direkten und indirekten Photoemissions-Experiment	2
1.2	Elektronen-, Teilchen- und Quasiteilchensystem	3
2.1	Spektraldarstellung der Green-Funktion	26
2.2	Schematische Darstellung der Spektralfunktion	27
3.1	Flussdiagramm DFT-Programm	38
3.2	Schematische Darstellung eines Pseudopotential	42
3.3	Flussdiagramm des G_0W_0 <i>space-time</i> -Programms	54
3.4	Superzellenmethode	55
3.5	Illustration des makroskopischen dielektrischen Tensors	56
3.6	Dielektrischer Tensor als Funktion von $1/a_z$	57
3.7	Abhängigkeit der Quasiteilchen-Bandlücke vom Entwicklungsparameter l_{\max}	61
3.8	Gemittelte und exakte Behandlung der Anisotropie des dielektrischen Tensors	62
4.1	Bandstruktur einer mit Wasserstoff passivierten zehn-Lagen Siliziumschicht	65
4.2	Wellenfunktionsquadrate für zwei sechs und zehn Lagen	66
4.3	DFT-LDA: Bandlücke als Funktion der Schichtdicke	67
4.4	Isolierte Schicht mit propagierendem Elektron und Langreichweitigkeit des Coulomb-Potentials	67
4.5	Induktion von Dipolen in benachbarten Schichten	68
4.6	Kopplung von benachbarten Schichten dargestellt mit Feynman-Diagrammen	70
4.7	Zerlegung von W in Kristall- und Oberflächenbeitrag	71
4.8	Potential innerhalb und außerhalb einer Siliziumschicht $z = z'$	73
4.9	Potential innerhalb und außerhalb einer Siliziumschicht $z \neq z'$	74
4.10	Periodizitäts- und Restbeitrag des induzierten Potentials	75
4.11	Induziertes Potential für eine isolierte Schicht	78

4.12	Oberflächenbeitrag der Quasiteilchen-Korrektur als Funktion der Schichtdicke	80
4.13	Induziertes Potential und Wellenfunktion bei Verdoppelung der Schichtdicke	81
4.14	Oberflächenbeitrag der Quasiteilchen-Korrektur als Funktion der Schicht- und Vakuumdicke	82
4.15	Vergleich des Oberflächenbeitrags der Quasiteilchen-Korrektur zwischen Modell- und <i>ab-initio</i> -Daten	83
4.16	Periodizitätsbeitrag für verschiedene Schichtdicken	84
4.17	Korrektur der Vakuumabhängigkeit für Siliziumschichten	86
4.18	Direkte Bandlücke von ultradünnen mit Wasserstoff abgesättigten Siliziumschichten als Funktion der Schichtdicke	88
4.19	DFT-LDA: Direkte und indirekte Bandlücke der Si(001) $p(2\times 1)$ -Oberfläche	90
4.20	Wellenfunktionsquadrate der höchsten besetzten und tiefsten unbesetzten Zustände der $p(2\times 1)$ a-Oberfläche für 10 und 30 Lagen Schichtdicke	91
4.21	Direkte und indirekte Bandlücke der $p(2\times 1)$ a-Oberfläche als Funktion der Vakuumdicke	93
4.22	Direkte und indirekte Bandlücke der $p(2\times 1)$ a-Oberfläche als Funktion der Schichtdicke	95
4.23	Abhängigkeit der Quasiteilchen-Korrektur einer Silizium-Schicht und der Si(001) $p(2\times 1)$ a-Oberfläche von der Schichtdicke	96
4.24	z -Abhängigkeit der makroskopischen Abschirmung an der Si(001) $p(2\times 1)$ a-Oberfläche	100
5.1	Die $c(4\times 2)$ -Struktur	103
5.2	2PPE-Spektrum und Bandstruktur der Si(001) $c(4\times 2)$ -Oberfläche	105
5.3	DFT-LDA: Dimer-Bildungsenergie als Funktion der Abschneidenenergie	107
5.4	Abhängigkeit des dem D_{up} -Zustand zugeordneten 2PPE-Spektrums von der Polarisation des Laserpulses und Charaktertafel der Punktgruppe C_{2v}	111
5.5	Quasiteilchen-Bandstruktur Si(001) $c(4\times 2)$ für 10 Lagen Silizium in der Nähe des $\bar{\Gamma}$ -Punkts	115
5.6	DFT-LDA: Bandstruktur Si(001) $p(2\times 1)$ a für 10 und 22 Lagen Si in der Nähe des $\bar{\Gamma}$ -Punkts	117
5.7	PDOS der $p(2\times 1)$ a-Oberfläche für 10 und 22 Lagen Si am $\bar{\Gamma}$ -Punkt.	118
5.8	DFT-LDA: Bandstruktur Si(001) $p(2\times 1)$ a für 10 und 22 Lagen Si	119
5.9	DFT-LDA: Bandstruktur Si(001) $c(4\times 2)$ für 10 und 22 Lagen Si in der Nähe des $\bar{\Gamma}$ -Punkts	120
5.10	Lokale projizierte Zustandsdichte für $c(4\times 2)$	121

5.11	DFT-LDA: Anregungsspektrum in den D_{down} -Zustand der $c(4\times 2)$ Struktur als Funktion der Schichtdicke	123
5.12	DFT-LDA: In x , y - und z -Komponente aufgeschlüsseltes Anregungsspektrum in den D_{down} -Zustand der $c(4\times 2)$ -Struktur	124
5.13	DFT-LDA: Konturflächen des Wellenfunktionsquadrats der $c(4\times 2)$ -Struktur	124
5.14	DFT-LDA: Anregungsspektrum in den D_{down} -Zustand der $p(2\times 1)a$ - und $c(4\times 2)$ -Struktur	125
5.15	Berechnete Resonanz im Valenzbereich im Vergleich mit 2PPE-Daten	127
C.1	Zwei Halbräume mit unterschiedlicher Dielektrizitätskonstante	140
C.2	Positionen der Spiegelladungen im Fall der isolierten Schicht	141
C.3	Schema zur Berechnung der Spiegelladungen der isolierten Schicht	142
C.4	Positionen der Spiegelladungen im Fall der periodisch fortgesetzten Schicht	144
C.5	Schema zur Berechnung der Spiegelladungen der periodisch fortgesetzten Schicht	145
C.6	Abhängigkeit der Spiegelladung von der Entfernung	146
D.1	Einheitszelle und erste Brillouinzone des Siliziumkristalls	149
D.2	Zustandsgleichung von Murnaghan	150
D.3	DFT- und G_0W_0 -Bandstruktur des Siliziumkristalls	151
D.4	Abhängigkeit der elektronischen Eigenschaften des Siliziumkristalls von der Gitterkonstanten	152
D.5	Schema projizierte Bandstruktur	153
D.6	Projizierte Bandstruktur der $\text{Si}(001)p(1\times 1)$ -Oberfläche	154
E.1	Rekonstruktionen der $\text{Si}(001)$ -Oberfläche	156
E.2	Brillouinzone der $\text{Si}(001)$ -Oberfläche	157
F.1	Elektrostatistisches Potential eines Kristall- und Schichtsystems	160
G.1	DFT-LDA-Konvergenztest: \mathbf{k} -Punktsatz vier Lagen Si-Schicht	164
G.2	DFT-LDA-Konvergenztest: Direkte Bandücke vier Lagen Si-Schicht	164
G.3	G_0W_0 -Konvergenztest: \mathbf{k} -Punktfaltung	165
G.4	G_0W_0 -Konvergenztest: Abschneideenergie	165
G.5	G_0W_0 -Konvergenztest: Anzahl an Bändern	166
G.6	G_0W_0 -Konvergenztest: Dielektrischer Tensor	166
I.1	Definition Oberflächenanteil	176

