

Tabellenverzeichnis

4.1	DFT-LDA: Abhängigkeit der direkten Bandlücke von der Vakuumdicke	65
4.2	G_0W_0 : Quasiteilchen-Korrektur der indirekten Bandlücke als Funktion der Vakuumdicke einer mit 22 Lagen simulierten Si(001) $p(2 \times 1)$ a-Oberfläche	97
5.1	Geometrie der Si(001)-Oberfläche	106
5.2	Dimer-Bildungsenergie für einfachen und doppelten \mathbf{k} -Punktsatz . . .	108
5.3	Angaben in der Literatur über den D_{up} -Zustand im Superzellenansatz	114
F.1	DFT-LDA-Anpassung Oberflächenrechnung $p(1 \times 1)$	160
F.2	DFT-LDA-Anpassung Oberflächenrechnung $p(2 \times 1)$ a	161
F.3	DFT-LDA-Anpassung Oberflächenrechnung $c(4 \times 2)$	161
F.4	G_0W_0 -Anpassung Oberflächenrechnung $p(2 \times 1)$ a	162
F.5	G_0W_0 -Anpassung Oberflächenrechnung $c(4 \times 2)$	162
G.1	G_0W_0 -Konvergenzparameter: Anzahl an Bändern für verschiedene Schicht- und Vakuumdicken $p(1 \times 1)$	167
H.1	G_0W_0 -Konvergenzparameter: Anzahl an Bändern für verschiedene Schicht- und Vakuumdicken $p(2 \times 1)$ a	169
H.2	G_0W_0 -Konvergenzparameter: Anzahl an Bändern für verschiedene Schicht- dicken $c(4 \times 2)$	170

