

Kurzfassung der Ergebnisse

In dieser Arbeit wurde die Quasiteilchen-Bandstruktur von dünnen Siliziumschichten sowie der Si(001)-Oberfläche durch die Kombination von DFT(LDA) und G_0W_0 berechnet und analysiert. Hierbei lag das Hauptinteresse in der Bestimmung der Lage von Oberflächenzuständen und Resonanzen sowie der Größe der Bandlücke.

Bei der Implementierung der G_0W_0 -Näherung wurde zum ersten Mal ein Verfahren entwickelt, dass im Rahmen des Superzellenansatzes die Richtungsabhängigkeit des makroskopischen dielektrischen Tensors sauber und transparent berücksichtigt. Hierdurch ist es möglich, nicht kubische Systeme zu beschreiben sowie Schichten, Oberflächen, Moleküle als auch Quantendrähte mit einem einheitlichen numerischen Konzept zu behandeln.

Mit der oben genannten Implementierung wurde im Rahmen von G_0W_0 eine langreichweitige Wechselwirkung zwischen den Schichten im Superzellenansatz beobachtet. Im Rahmen dieser Doktorarbeit wurde ein detailliertes Verständnis für diese Wechselwirkungen gewonnen. Mit dem Periodizitätsanteil wurde ein Konzept eingeführt, diese Wechselwirkung für hinreichend dicke Schichten im Nachhinein zu korrigieren und so mit einem kleinen Abstand zwischen diesen rechnen zu können. Trotz dieses Fortschritts wird auf die Notwendigkeit einer geeigneten Entkopplung der Schichten weiterhin aufmerksam gemacht.

Für dünne Siliziumschichten wurde zum ersten mal die Abhängigkeit der Quasiteilchen-Bandlücke von der Schichtdicke mit *ab-initio*-Methoden berechnet. Hierbei stellte sich heraus, dass die Quasiteilchen-Korrektur proportional zum Inversen der Schichtdicke ist. Durch die *ab-initio*-Daten konnte ein in der Literatur dokumentiertes elektrostatisches Modell für die Schichtdicken-Abhängigkeit der Quasiteilchen-Korrektur für hinreichend dicke Schichten voll bestätigt werden.

Oberflächenzustände weisen eine deutlich geringere Abhängigkeit von der Schichtdicke auf als Kristallzustände. Die konvergierte indirekte Quasiteilchen-Bandlücke der $p(2\times 1)$ -Oberfläche, die mit dem in dieser Arbeit vorgestellten numerischem Konzept berechnet wurde, ist mit 0,9 eV um 0,2 eV größer als der in der Literatur angegebene Wert.

Die Diskrepanz zwischen Theorie und Experiment bezüglich der besetzten Oberflächenbänder der $c(4\times 2)$ -Oberfläche in der Arbeit von Weinelt *et al.* wurde ausführlich analysiert. Es wurde gezeigt, dass auf Grundlage der theoretischen Bandstruktur allein kein eindeutiger Vergleich mit dem Experiment möglich ist. Allerdings ist durch die Berechnung der lokalen projizierten Zustandsdichte und von Anregungsspektren in das unterste unbesetzte Oberflächenband ein besserer Vergleich mit dem Experiment prinzipiell möglich.