

# 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 $D_{\text{up}}$ -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

