

Literaturverzeichnis

- [1] J. Dabrowski und H.-J. Müssig, *Silicon Surfaces and Formation of Interfaces*, World Scientific, Singapore, 2000.
- [2] R. Haight, Surf. Sci. Rep. **21**, 275 (1995).
- [3] C. Jacoboni und L. Reggiani, Rev. Mod. Phys. **55**, 645 (1983).
- [4] P. Rinke, A. Qteish, J. Neugebauer, C. Freysoldt und M. Scheffler, New. J. Phys. **7**, 126 (2005).
- [5] A. Leitenstorfer, Nature **426**, 23 (2003).
- [6] J. Schwinger, Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. **37**, 452 (1951).
- [7] L. Hedin und S. Lundqvist, Solid State Physics **23**, 1 (1969).
- [8] L. Hedin, Phys. Rev. **139**, A796 (1965).
- [9] M. Hybertsen und S. Louie, Phys. Rev. Lett. **55**, 1418 (1985).
- [10] R. W. Godby, M. Schlüter und L. J. Sham, Phys. Rev. Lett. **56**, 2415 (1986).
- [11] J. E. Northrup, Phys. Rev. B **47**, 10032 (1993).
- [12] M. Rohlfing, P. Krüger und J. Pollmann, Phys. Rev. B **52**, 1905 (1995).
- [13] P. Krüger und J. Pollmann, Phys. Rev. B **38**, 10578 (1988).
- [14] M. Scheffler, C. Droste, A. Fleszar, F. Máca, G. Wachutka und G. Barzel, Physica B **172**, 143 (1991).
- [15] J. Bormet, B. Wenzien und M. Scheffler, Comput. Phys. Comm. **79**, 124 (1994).
- [16] G. Baraff und M. Schlüter, Phys. Rev. Lett. **41**, 892 (1978).
- [17] J. Bernholc, N. Lipari und S. Pantelides, Phys. Rev. Lett. **41**, 895 (1978).

- [18] M. Scheffler, J. Vigneron und G. Bachelet, Phys. Rev. Lett. **49**, 1765 (1982).
- [19] M. Scheffler, J. Vigneron und G. Bachelet, Phys. Rev. B **31**, 6541 (1985).
- [20] http://www.cs.sandia.gov/paschul/Quest/DFT_codes.html.
- [21] G. Fratesi, G. Brivio und L. Molinari, Phys. Rev. B **69**, 245113 (2004).
- [22] G. Onida, L. Reining, R. Godby, R. Sole und W. Andreoni, Phys. Rev. Lett. **75**, 820 (1995).
- [23] C. Spataru, S. Ismail-Beigi, L. Benedict und S. Louie, Appl. Phys. A **A78**, 1129 (2004).
- [24] I. White, R. Godby, M. Rieger und R. Needs, Phys. Rev. Lett. **80**, 4265 (1998).
- [25] M. Weinelt, M. Kutschera, T. Fauster und M. Rohlfing, Phys. Rev. Lett. **92**, 126801 (2004).
- [26] M. Weinelt, M. Kutschera, R. Schmidt, C. Orth, T. Fauster und M. Rohlfing, Appl. Phys. A **80**, 995 (2004).
- [27] C. Kentsch, M. Kutschera, M. Weinelt und T. Fauster, Phys. Rev. B **65**, 035323 (2001).
- [28] Antrittsvorlesung, Freie Universität Berlin am 15.05.2005.
- [29] M. Rieger, L. Steinbeck, I. White, H. Rojas und R. Godby, Comput. Phys. Commun. **117**, 211 (1999).
- [30] M. Born und R. Oppenheimer, Ann. Phys. **84**, 457 (1927).
- [31] G. Worth und L. Cederbaum, Annu. Rev. Phys. Chem. **55**, 127 (2004).
- [32] A. Williamson, R. Hood, R. Needs und G. Rajagopal, Phys. Rev. B **57**, 12140 (1998).
- [33] J. C. Hartree, Cambridge Phil. Soc. **24**, 89 (1928).
- [34] J. C. Slater, Phys. Rev. **35**, 210 (1930).
- [35] V. Fock, Z. Physik **61**, 126 (1930).
- [36] I. N. Levine, *Quantum Chemistry*, Prentice Hall, 2000.
- [37] A. Szabo und N. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry*, Dover Publications, 1996.

- [38] S. F. Boys, Proc. R. Soc. A **200**, 542 (1950).
- [39] R. M. Dreizler und E. K. U. Gross, *Density Functional Theory*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1990.
- [40] P. Hohenberg und W. Kohn, Phys. Rev. **136**, B864 (1964).
- [41] W. Kohn und L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
- [42] D. M. Ceperly und B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. **45**, 566 (1980).
- [43] J. P. Perdew und A. Zunger, Phys. Rev. B **23**, 5048 (1981).
- [44] O. Gunnarsson und B. I. Lundqvist, Phys. Rev. B **13**, 4274 (1976).
- [45] J. Perdew, J. Chevary, S. Vosko, K. Jackson, M. Pederson, D. Singh, and C. Fiolhais, Phys. Rev. B **46**, 6671 (1992).
- [46] J. Perdew, K. Burke und M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
- [47] A. Becke, Phys. Rev. A **38**, 3098 (1988).
- [48] F. Bechstedt, *Principles of Surface Physics*, Springer Verlag, 2003.
- [49] J. Talman und W. Shadwick, Phys. Rev A **14**, 36 (1976).
- [50] V. Sahni, J. Gruenebaum und J. Perdew, Phys. Rev. B **26**, 4371 (1982).
- [51] A. Görling, Phys. Rev. B **53**, 7024 (1996).
- [52] M. Städele, M. Moukara, J. Majewski, P. Vogl und A. Görling, Phys. Rev. B **15**, 10031 (1999).
- [53] M. Städele, J. Majewski, P. Vogl und A. Görling, Phys. Rev. Lett. **79**, 2089 (1997).
- [54] R. Jones und O. Gunnarsson, Rev. Mod. Phys. **61**, 689 (1989).
- [55] Vorlesungsskript von M. Scheffler, FU Berlin 2004,
http://www.fhi-berlin.mpg.de/th/lectures/materialscience-2004/lecture_notes.html.
- [56] C.-O. Almbladh und U. von Barth, Phys. Rev. B **31**, 3231 (1985).
- [57] M. E. Casida, Phys. Rev. B **59**, 4694 (1999).
- [58] R. G. Parr und W. Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford Science Publications, 1989.

- [59] D. P. Chong, O. V. Gritsenko und E. J. Baerends, *J. Chem. Physics* **116**, 1760 (2002).
- [60] D. R. Hamann, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 662 (1979).
- [61] G. B. Bachelet und N. L. Christensen, *Phys. Rev. B* **31**, 879 (1985).
- [62] J. P. Perdew und M. L. Levy, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1884 (1983).
- [63] L. Sham und M. Schlüter, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 1888 (1983).
- [64] R. W. Godby, M. Schlüter und L. J. Sham, *Phys. Rev. B* **36**, 6497 (1987).
- [65] R. W. Godby, M. Schlüter und L. J. Sham, *Phys. Rev. B* **37**, 10159 (1988).
- [66] J. C. Inkson, *Many-Body Theory of Solids*, Plenum Press, 1984.
- [67] R. D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*, Dover Publications, 1992.
- [68] F. Aryasetiawan und O. Gunnarsson, *Rep. Prog. Phys.* **61**, 237 (1998).
- [69] R. W. Godby und P. G. González, *A Primer in Density Functional Theorie*, editiert von C. Fiolhais, F. Nogueira und M. Marques, Springer, 2003.
- [70] E. Shirley, *Phys. Rev. B* **54**, 7758 (1996).
- [71] A. Schindlmayr und R. Godby, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1702 (1998).
- [72] B. Holm und U. von Barth, *Phys. Rev. B* **57**, 2108 (1998).
- [73] A. Schindlmayr, *Phys. Rev. B* **56**, 3528 (1997).
- [74] O. Madelung, *Landolt-Börnstein, Neue Serie 23a*, Springer Verlag Berlin, 1989.
- [75] W.-D. Schöne und A. Eguiluz, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1662 (1998).
- [76] K. Delaney, P. Garciá-González, A. Rubio, P. Rinke und R. Godby, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 249701 (2004).
- [77] W. G. Aulbur, L. Jönsson und J. W. Wilkins, *Solid States Physics* **54**, 1 (1999).
- [78] M. Rohlfing, P. Krüger und J. Pollmann, *Phys. Rev. B* **57**, 6485 (1998).
- [79] O. Pulci, F. Bechstedt, G. Onida, R. Sole und L. Reining, *Phys. Rev. B* **60**, 16758 (1999).

- [80] M. Hybertsen und S. Louie, Phys. Rev. B **34**, 5390 (1986).
- [81] F. Gygi und A. Baldereschi, Phys. Rev. B **34**, 4405 (1986).
- [82] P. Rinke, *Exchange and Correlation in Small Spherical Clusters*, PhD thesis, University of York, 2003.
- [83] M. Bockstedte, A. Kley, J. Neugebauer und M. Scheffler, Comput. Phys. Commun. **107**, 187 (1997).
- [84] <http://www.sfhingx.de>.
- [85] H. Monkhorst und J. Pack, Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).
- [86] D. Hamann, Phys. Rev. B **40**, 2980 (1989).
- [87] M. Fuchs und M. Scheffler, Comput. Phys. Commun. **119**, 67 (1999).
- [88] M. C. Payne, M. Teter, D. C. Allan, T. A. Arias und J. D. Joannopoulos, Rev. Mod. Phys. **64**, 1045 (1992).
- [89] H. Rojas, R. Godby und R. Needs, Phys. Rev. Lett. **74**, 1827 (1995).
- [90] L. Steinbeck, A. Rubio, L. Reining, M. Torrent, I. White und R. Godby, Comput. Phys. Commun. **125**, 105 (2000).
- [91] S. Baroni und R. Resta, Phys. Rev. B **33**, 7017 (1986).
- [92] M. Hybertsen und S. Louie, Phys. Rev. B **35**, 5585 (1987).
- [93] G. Onida, L. Reining und A. Rubio, Rev. Mod. Phys. **74**, 601 (2002).
- [94] A. Baldereschi und E. Tosatti, Solid State Communications **29**, 131 (1979).
- [95] R. Pick, M. Cohen und R. Martin, Phys. Rev. B **1**, 910 (1970).
- [96] Die Abbildung wurde mit freundlicher Genehmigung von Christoph Freysoldt übernommen.
- [97] J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, John Wiley & Sons, 1975.
- [98] Diese Formeln wurden von Christoph Freysoldt hergeleitet.
- [99] M. Rohlfing, P. Krüger und J. Pollmann, Phys. Rev. B **48**, 17791 (1993).
- [100] R. Daling und W. van Haeringen, Phys. Rev. B **40**, 11659 (1989).

- [101] M. Rohlfing, *Quasiteilchen-Bandstrukturen von Halbleitern und Halbleiter-Oberflächen*, PhD thesis, Universität Münster, 1996.
- [102] R. Ummels, P. Bobbert und W. van Haeringen, Phys. Rev. B **58**, 6795 (1998).
- [103] O. Pulci, G. Onida, R. Sole und L. Reining, Phys. Rev. Lett. **81**, 5374 (1998).
- [104] G. Cappellini, R. Sole, L. Reining und F. Bechstedt, Phys. Rev. B **47**, 9892 (1993).
- [105] F. Bechstedt und R. Enderlein, *Semiconductor Surfaces and Interfaces*, Akademie-Verlag Berlin, 1988.
- [106] J. Neugebauer und M. Scheffler, Phys. Rev. B **46**, 16067 (1992).
- [107] C. Delerue, G. Allan und M. Lannoo, Phys. Rev. Lett. **90**, 076803 (2003).
- [108] C. Delerue, G. Allan und M. Lannoo, Phys. Rev. Lett. **84**, 2457 (2000).
- [109] C. Delerue, G. Allan und M. Lannoo, Phys. Rev. Lett. **89**, 249901 (2002).
- [110] G. Makov und M. Payne, Phys. Rev. B **51**, 4014 (1995).
- [111] D. Lockwood, Z. Lu und J.-M. Baribeau, Phys. Rev. Lett. **76**, 539 (1996).
- [112] G. Allan, C. Delerue und M. Lannoo, Appl. Phys. Lett. **71**, 1189 (1997).
- [113] M. Nishida, Phys. Rev. B **59**, 15789 (1999).
- [114] B. Agrawal und S. Agrawal, Appl. Phys. Lett. **77**, 3039 (2000).
- [115] B. Delly und E. Steigmeier, Appl. Phys. Lett. **67**, 2370 (1995).
- [116] R. Hamers und U. Köhler, J. Vac. Sci. Technol. A **7**, 2854 (1989).
- [117] Y. Chabal, S. Christman, E. Chaban und M. Yin, J. Vac. Sci. Technol. A **1**, 1241 (1982).
- [118] P. Martensson, A. Cricenti und G. Hansson, Phys. Rev. B **33**, 8855 (1986).
- [119] W. Mönch, P. Koke und S. Krueger, J. Vac. Sci. Technol. **19**, 313 (1981).
- [120] M. Jarvis, I. White, R. Godby und M. Payne, Phys. Rev. B **56**, 14972 (1997).
- [121] A. Ramstad, G. Brocks und P. J. Kelly, Phys. Rev. B **51**, 14504 (1995).
- [122] J. Fritsch und P. Pavone, Surf. Sci. **344**, 159 (1995).

- [123] K. Inoue, Y. Morikawa, K. Terakura und M. Nakayama, Phys. Rev. B **49**, 14774 (1994).
- [124] W. Schmidt, F. Bechstedt und J. Bernholc, Phys. Rev. B **63**, 045322 (2001).
- [125] S. Healy, C. Filippi, P. Kratzer, E. Penev und M. Scheffler, Phys. Rev. Lett. **87**, 016105 (2001).
- [126] T. Tabata, T. Aruga und Y. Murata, Surf. Sci. **179**, L63 (1987).
- [127] R. Wolkow, Phys. Rev. Lett. **68**, 2636 (1992).
- [128] H. Tochiohara, T. Amakusa und M. Iwatsuki, Phys. Rev. B **50**, 12262 (1994).
- [129] K. Seino, W. Schmidt und F. Bechstedt, Phys. Rev. Lett. **93**, 036101 (2004).
- [130] J. Pollmann, P. Krüger und A. Mazur, J. Vac. Sci. Technol. B **5**, 945 (1987).
- [131] R. Uhrberg, G. Hansson, J. Nicholls und S. Flodström, Phys. Rev. B **24**, 4684 (1981).
- [132] L. Johansson, R. Uhrberg, P. Mårtensson und G. Hansson, Phys. Rev. B **42**, 1305 (1990).
- [133] M. Rohlfing und S. Louie, Phys. Rev. Lett. **83**, 856 (1999).
- [134] http://www.intel.com/technology/itj/2004/volume08issue02/art06_siliconphoto/p05_photodetectors.htm.
- [135] G. Somorjai, *Chemistry in Two Dimensions: Surfaces*, Ithaca: Cornell, 1981.
- [136] D. Chadi, Phys. Rev. Lett. **43**, 43 (1979).
- [137] J. Ihm, M. L. Cohen und D. Chadi, Phys. Rev. B **21**, 4592 (1980).
- [138] J. Dabrowski und M. Scheffler, Appl. Surf. Sci. **56**, 15 (1992).
- [139] E. Pehlke und M. Scheffler, Phys. Rev. Lett. **71**, 2338 (1993).
- [140] H. Tütüncü, S. Jenkins und G. Srivastava, Phys. Rev. B **56**, 4656 (1997).
- [141] R. Asahi, W. Mannstadt und A. Freeman, Phys. Rev. B **62**, 2552 (2000).
- [142] A. Stekolnikov, J. Furthmüller und F. Bechstedt, Phys. Rev. B **65**, 115318 (2002).
- [143] P. Krüger und J. Pollmann, Phys. Rev. B **47**, 1898 (1993).

- [144] P. Krüger und J. Pollmann, Phys. Rev. Lett. **74**, 1155 (1995).
- [145] Persönliches Gespräch DPG 2005.
- [146] R. D. Sole und R. Girlanda, Phys. Rev. B **48**, 11789 (1993).
- [147] M. Kumagai und T. Takagahara, Phys. Rev. B **40**, 12359 (1989).
- [148] U. Müller, *Anorganische Strukturchemie*, Teubner Stuttgart, 1996.
- [149] U. Scherz, *Quantenmechanik*, Teubner Stuttgart, Leipzig, 1999.
- [150] P. Kratzer, B. Hammer und J. Nørskov, Phys. Rev. B **51**, 13 432 (1995).
- [151] O. Madelung, *Landolt-Börnstein, Neue Serie III/17a*, Springer Verlag Berlin, 1981.