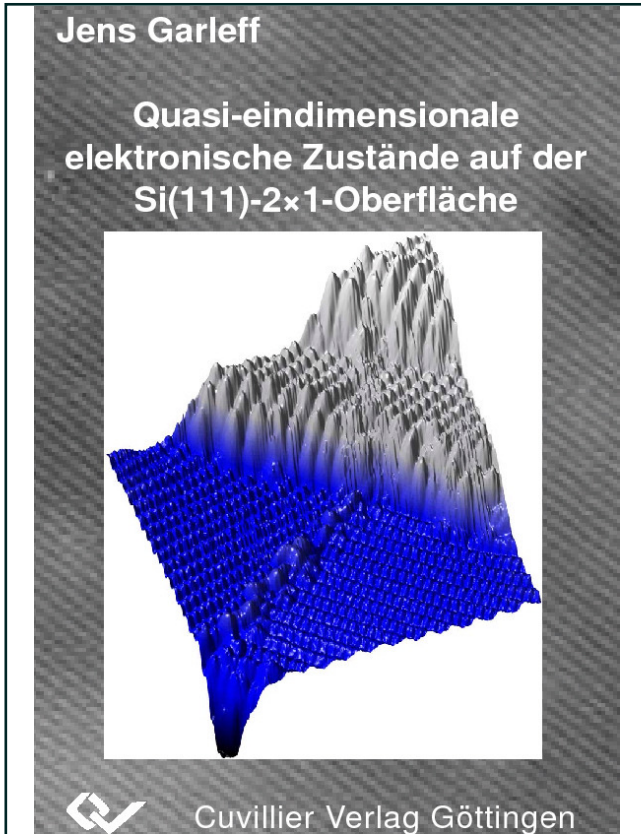




Jens Karsten Garleff (Autor)
**Quasi-eindimensionale elektronische Zustände auf
der Si(111)-2x1-Oberfläche**



<https://cuvillier.de/de/shop/publications/2548>

Copyright:
Cuvillier Verlag, Inhaberin Annette Jentsch-Cuvillier, Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen,
Germany
Telefon: +49 (0)551 54724-0, E-Mail: info@cuvillier.de, Website: <https://cuvillier.de>

2. Einleitung

Die Rastertunnelmikroskopie (STM, englisch „Scanning Tunneling Microscopy“) ermöglicht einen Einblick in die Nano-Welt einzelner Atome [Binn82]. Ein Beispiel für STM als oberflächensensitive Methode zeigt die atomar aufgelöste Si(111)-2×1-Oberfläche in Abb. 2-1 mit einer monatomaren Stufe und einem substitutionellen Phosphor (P) Atom als isolierte Defekte in der Oberfläche. Die Konstantstrom-Topographie kann mit einer energie- und ortsaufgelösten Spektroskopie der elektronischen Struktur (LDOS) verknüpft werden. In der Rastertunnelspektroskopie (STS) sind besetzte und unbesetzte Zustände in *einer* Messung zugänglich. Photoelektronenspektroskopie (PES) bzw. inverse Photoelektronenspektroskopie (IPES) bilden dagegen nur jeweils eine Sorte Zustände ab.

Das STM stellt damit eine hervorragende Methode dar, um (elektronische) Systeme und physikalische Effekte auf kleiner Größenskala zu untersuchen. Mit abnehmender Grösse und Dimension des Systems erwartet man

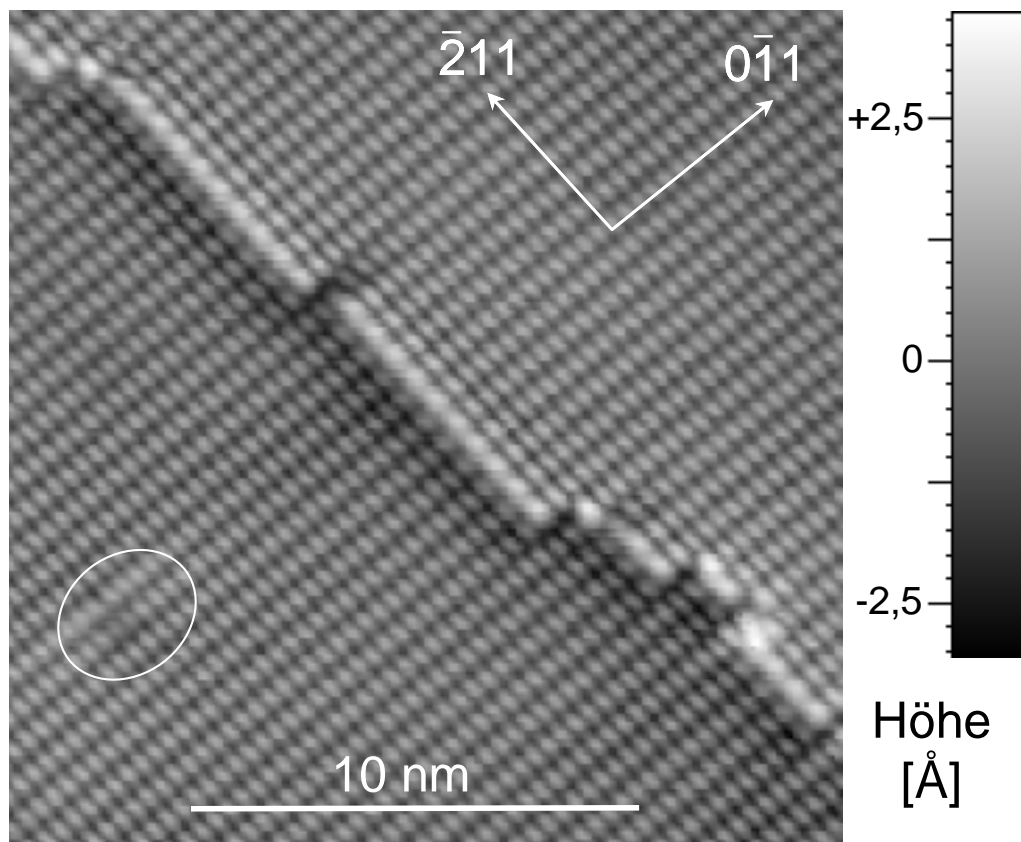


Abb. 2-1: STM-Topographie von $18 \times 18 \text{ nm}^2$ der Si(111)-2×1-Fläche mit atomarer Auflösung und typischen Defekten: Monatomare Stufe und substitutionelles Phosphoratom (weiße Markierung). $T = 8 \text{ K}$, $U_{\text{Bias}} = -1 \text{ V}$, $I_T = 0,4 \text{ nA}$.

zunehmend drastischere Abweichungen von den Eigenschaften der makroskopischen Welt. Die Näherung als „unendlich ausgedehnter Körper mit kleinen Randeffekten“ beschreibt niederdimensionale Systeme nicht angemessen.

Die periodische Anordnung der Atome im ausgedehnten Kristall führt zu einer Bandstruktur mit kontinuierlich zu besetzenden Bändern. Für grosse Systeme können die Randeffekte vernachlässigt werden. Schränkt man die Elektronen in einer Richtung auf die Grössenordnung von Nanometern ein, wird das System zweidimensional. Die Energieniveaus des Systems werden in diskrete Zustände im Abstand ΔE_{conf} quantisiert.

Jedem System endlicher Ausdehnung entspricht eine Kapazität C . Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung (ee-WW) führt zu einem Coulomb-Gap der Weite W . Über „Quantisierung“ und „Coulomb-Effekt“ hinaus wurden für Elektronen in 1D weitere, spektakuläre Effekte vorhergesagt. Die ee-WW kann in 1D nicht mehr adäquat im sonst üblichen Einteilchenbild behandelt werden. Frei bewegliche 1D-Elektronen werden als „Luttinger-Flüssigkeit“ beschrieben [Schö04]. Sie sind durch die Trennung von Spin und Ladung, sowie durch typische Potenzgesetze der LDOS und der Leitfähigkeit charakterisiert.

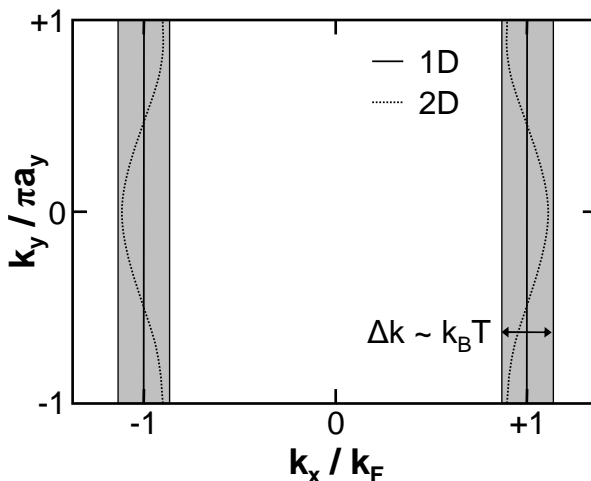


Abb. 2-2: Fermifläche des 1D bzw. quasi-1D-Systems aus parallelen Ketten in x -Richtung bei $T = 0$ K. Linien bei ± 1 : 1D ohne Kopplung zwischen den Ketten. Schwarz gestrichelt: mit Kopplung \Rightarrow 2D. Bei $T > 0$ K weicht die Fermifläche um $\Delta k \sim k_B T$ auf. Weicht die 2D-Fermifläche weniger als Δk vom 1D-Fall ab, wird das System quasi-1D.

Der Grenzfall strenger Eindimensionalität ist experimentell nicht zu erreichen. Die mechanische Stabilität der Probe erfordert ein Substrat, über das zwangsläufig eine Kopplung an die Aussenwelt entsteht. Inwiefern 1D-Effekte wie Luttinger-Verhalten durch die unvermeidbare Wechselwirkung unterdrückt oder gestört werden, ist Gegenstand aktueller theoretischer und experimenteller Forschung. An einer Oberfläche ist auch ohne Kopplung an das Substrat keine strenge Einschränkung auf 1D möglich. Bei 0 K stellt jede Oberfläche ein 2D-System dar, die nach dem Bloch-Theorem eine 2D-Bandstruktur aufweist. Bestenfalls kann die Dispersion „längs“ und „quer“ einer speziellen Richtung („Ketten“) unterschiedlich gross sein. Die Kopplung quer zu den Ketten führt zu einer „verbeulten“ Fermifläche, die in Abb. 2-2 schematisch dargestellt ist. Sobald für $T > 0$ K die Abweichung von der idealen 1D-Fermifläche kleiner wird als die thermische Verschmierung $\Delta k \sim k_B T$, ist das „quasi-1D“ System experimentell nicht mehr vom „echten“ 1D-Fall zu

unterscheiden. Erhöht man die Temperatur weiter, wird die Fläche wieder zweidimensional, sobald man die Anisotropie der Oberfläche gegen $k_B T$ vernachlässigen kann.

Experimentell sind Forschung und Verständnis von Kohlenstoff-Nanoröhrchen, engl. Carbon-Nanotubes (CNT) am weitesten fortgeschritten. Sie sind *nicht* in eine Fläche eingebettet, so dass ihr 1D-Charakter nur von der Kopplung ans Substrat abhängt. Für CNT wurde die Spin-Ladungstrennung mit Rastertunnelspektroskopie bewiesen [JLee04]. Um neben den CNT andere (quasi-) 1D-Systeme mit STM untersuchen zu können, arbeitet man daran, lineare metallische Ketten auf Kristalloberflächen zu herzustellen. Dies geschieht entweder durch Atommanipulation mit dem STM [Nili02], oder durch selbstorganisiertes Wachstum auf vizinalen Oberflächen [Robi02, Yoon04].

In dieser Arbeit werden die π -bonded chains der Si(111)- 2×1 -Oberfläche als neues quasi-eindimensionales Elektronensystem etabliert. Aus PES und IPES ist die anisotrope Oberflächenbandstruktur der Si(111)- 2×1 -Fläche bekannt und im theoretischen Modell der Oberflächenrekonstruktion von Pandey [Pand81] berücksichtigt. Die darin vorhergesagte Anisotropie legt quasi-1D-Verhalten nahe, so dass die 2×1 -rekonstruierte Si(111)-Spaltfläche ein neues Modellsystem für die experimentelle Untersuchung von (quasi-) 1D-Physik in Aussicht stellt. Der grosse Vorteil gegenüber anderen Systemen ist die einfache Präparation: Die anisotrope 2×1 -Rekonstruktion der Oberfläche entsteht ohne weiteres Zutun beim Spalten.

STM-Daten bei Raumtemperatur [Feen86] ergeben jedoch keine Evidenz für quasi-1D-Physik, sondern bestenfalls einen vagen Hinweis auf defektinduzierte Anisotropie der elektronischen Zustände auf der Si(111)- 2×1 -Oberfläche. Diese Arbeit geht qualitativ über die RT-Untersuchungen der Vergangenheit hinaus. Bei $T = 8$ K wurde orts- und energieaufgelöst die elektronische Struktur der reinen Si(111)- 2×1 -Oberfläche und die Auswirkung von Defekten untersucht.

Nach der Einführung in die 2×1 -rekonstruierte Si(111)-Spaltfläche in Kap. 3 wird in Kap. 4 das benutzte Tieftemperatur-STM-System und die Theorie des Tunnelmikroskops vorgestellt. Der erfolgreiche Vergleich der experimentell ermittelten mit der ab-initio berechneten orts- und energieaufgelösten LDOS [Rohl03] auf der ungestörten Si(111)- 2×1 -Oberfläche in Kap. 5 beweist, dass das STM die elektronische Struktur innerhalb der Oberflächeneinheitszelle zuverlässig abbildet. Die gute Übereinstimmung von Theorie und Experiment auf der freien Fläche zeigt einmal mehr, dass die Si(111)- 2×1 -Oberfläche angemessen durch das Pandey-Modell beschrieben wird. Der quasi-1D-Charakter der Oberflächenzustände nahe E_F zeigt sich in Kap. 6 an der Anisotropie von defekt-induzierten Kontrasten in Topographie und Spektroskopie im Ortsraum.

Die Elektron-Elektron-Wechselwirkung führt in Verbindung mit einer kleinen Kapazität zu einem Coulomb-Gap. In dieser Arbeit wurde erstmals bei tiefer Temperatur ein Coulomb-Gap auf Si(111)- 2×1 beobachtet. Seine Grösse wird in Kap. 7 in Abhängigkeit der lokalen Umgebung bei verschiedenen

Temperaturen (8 K, 80 K) untersucht. Die Messungen ergeben, dass die Weite des Coulomb-Gaps proportional zur inversen Länge der adressierten π -bonded chain ist. Die maximal beobachtete Gap-Weite beträgt 150 meV. Die experimentellen Eigenschaften des Coulomb-Gaps lassen sich quantitativ simulieren, wenn man das Kettensegment als endliches System („Quantendraht“) auffasst, das über Tunnelkontakte an die STM-Spitze und an das Substrat gekoppelt ist. Aus der Übereinstimmung schliessen wir, dass der Oberflächenzustand auf Si(111)- 2×1 bei 8 K hinreichend streng auf 1D eingeschränkt ist.

Literatur

- [Binn82] G. Binnig, H. Rohrer, C. Gerber, and E. Weibel, *Tunneling through a controllable vacuum gap*, Appl. Phys. Lett. **40** (2), 178 (1982)
- [Feen86] R. M. Feenstra, W. A. Thompson and A. P. Fein, *Real-Space Observations of π -Bonded Chains and Surface Disorder on Si(111) 2×1* , Phys. Rev. Lett. **56** (6), 608 (1986)
- [JLee04] J. Lee, S. Eggert, H. Kim, S.-J. Kahng, H. Shinohara, and Y. Kuk, *Real Space Imaging of One-Dimensional Standing Waves: Direct Evidence for a Luttinger Liquid*, Phys. Rev. Lett. **93** 166403 (2004)
- [Nili02] N. Nilius, T. M. Wallis and W. Ho, *Development of One-Dimensional Band Structure in Artificial Gold Chains*, Science **297**, 1853 (2002)
- [Pand81] K.C. Pandey, *New π -Bonded Chain Model for Si(111)-(2×1) Surface*, Phys. Rev. Lett. **47** (26) 1913 (1981)
- [Robi02] I. K. Robinson, P. A. Bennett, and F. J. Himpsel, *Structure of Quantum Wires in Au/Si(557)*, Phys. Rev. Lett. **88** (9) 96104 (2002)
- [Rohl03] M. Rohlfing, private Mitteilung (2003)
- [Schö04] K. Schönhammer, *Luttinger liquids: the basic concepts*, in "Strong interactions in low dimensional systems", Editors: D. Baeriswyl and L. Degiorgi, Kluwer Academic Publishers (2004)
- [Yoon04] H. S. Yoon, S. J. Park, J. E. Lee, C. N. Wang and I.-W. Lyo, *Novel Electronic Structure of Inhomogeneous Quantum Wires on a Si Surface*, Phys. Rev. Lett. **92** (9), 96801 (2004)

3. 2×1-Rekonstruktion der Si(111)-Oberfläche

3.1. Geometrie der 2×1-Rekonstruktion

Den Atomen an der Kristalloberfläche fehlen in Richtung des Vakuums die Bindungspartner. Als Reaktion auf diesen Symmetriebruch ordnen sie sich in einer dünnen Randschicht neu an. Größe und Form der Einheitszelle kann an der Oberfläche verändert werden. Vergrößert sich die Oberflächeneinheitszelle im Vergleich zur Projektion der Volumeneinheitszelle, spricht man von einer rekonstruierten Oberfläche. Die genaue Strukturaufklärung einer Rekonstruktion kann kompliziert sein. Sie ist oft nur über den Vergleich von ab-initio-Rechnungen mit experimentellen Daten zu bewerkstelligen, insbesondere wenn die rekonstruierte Oberflächeneinheitszelle relativ zum unterliegenden Volumengitter verschoben ist.

Die Si(111)-Oberfläche zeigt je nach Präparation verschiedene, z.T. metastabile Rekonstruktionen. Stellt man eine Si(111)-Fläche durch Spalten bei $T \leq 300$ K (RT) her, bildet sich die 2×1-Rekonstruktion. Bei Erwärmen auf 550 K bis 700 K entsteht über mehrere Zwischenschritte die thermodynamisch stabile 7×7-Struktur [Feen91]. Die sonst weit verbreitete Präparation sauberer Oberflächen über wiederholte Zyklen von Heizen und Sputtern liefert daher auf Si(111) stets 7×7-rekonstruierte Oberflächen. Die 2×1-Struktur ist nur auf nicht erhitzten Spaltflächen zugänglich.

Abb. 3-1 (nächste Seite) zeigt eine perspektivische Darstellung der Si(111)-2×1-Oberfläche im Pandy-Modell [Pand81]. Die geometrische Anordnung der Atomrümpfe in der rekonstruierten Oberfläche wurde ab-initio berechnet [Rohl99]; die Oberflächeneinheitszelle misst $6,65 \text{ \AA}$ in [211]-Richtung und $3,84 \text{ \AA}$ in [011]-Richtung. Das charakteristische Merkmal der Rekonstruktion stellen Zick-Zack-Reihen in [011]-Richtung dar; „ π -bonded chains“. Die beiden Gitterplätze in den π -Ketten, Up- und Down-Atom, sind nicht äquivalent, ebenso die Second-Layer-Atome ‚3‘ und ‚4‘ in den dazwischenliegenden abgesenkten Zick-Zack-Reihen. Das Second-Layer-Atom neben dem Down-Atom wird als Atom ‚3‘, das neben dem Up-Atom als Atom ‚4‘ bezeichnet. Die Höhendifferenz zwischen Up- und Down-Atom beträgt $0,5 \text{ \AA}$, und zwischen der π -bonded chain und der Second-Layer-Reihe beträgt 1 \AA [Garl04].

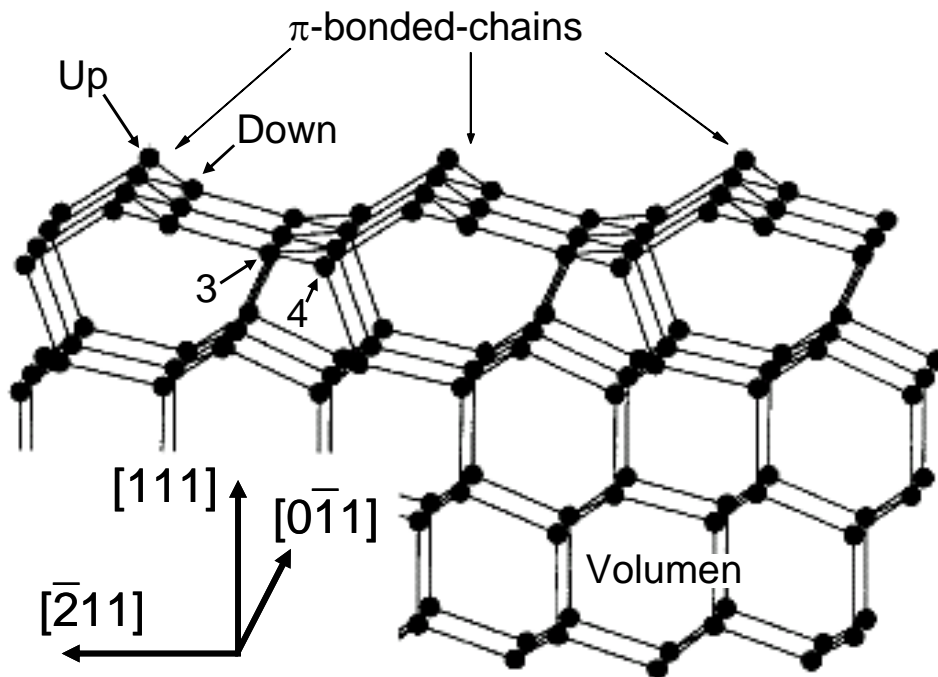


Abb. 3-1: Schema der 2×1-rekonstruierten Si-(111)-Fläche [Roh199]. Man erkennt vier nicht-äquivalente Gitterpositionen in der Oberfläche: Up- und Down-Atom in der π -bonded chain und die Atome 3 und 4 in der Second-Layer-Reihe.

Inwiefern auch tiefere Lagen von der Umstrukturierung durch die Oberflächenrekonstruktion betroffen sind, ist bislang nicht mit letzter Klarheit zu beantworten (vgl. positives und negatives Buckling, Kap. 3.3). Ab der vierten Lage unter der Oberfläche sind die Eigenschaften im Rahmen der numerischen Genauigkeit nicht vom Volumen zu unterscheiden [Roh103].

3.1.1. Pandey- oder TBS-Modell

Alternativ zum Pandey- wird in der Literatur das TBS-Modell (Three Bond Scission, [Hane87]) als Erklärung der 2×1-Rekonstruktion diskutiert. Die geometrische Anordnung der Oberflächenatome in den aktuell diskutierten Varianten beider Modelle der Si(111)-2×1-Rekonstruktion zeigt Abb. 3-2. Das Pandey-Modell geht davon aus, dass in jedem Tetraeder in der Spaltebene eine Bindung getrennt wird, die senkrecht auf der Spaltfläche steht. Im TBS-Modell werden beim Spalten pro Tetraeder 3 Bindungen gelöst, die nicht senkrecht zur Spaltfläche stehen. Die Si(111)-2×1-Oberfläche wurde in den letzten 30 Jahren intensiv untersucht. Die überwiegende Zahl der veröffentlichten experimentellen Arbeiten sind besser mit dem π -bonded chain als mit dem TBS-Modell vereinbar. Das Pandey-Modell wird von verschiedenen oberflächensensitiven Untersuchungen favorisiert. Dazu zählen neben Low Energy Electron Diffraction (LEED) [Geng04, Himp84], winkelaufgelöster PES und IPES [Perf87, Uhrb82] auch Protonenstreuung [Trom83] und Rastertunnelmikroskopie [Feen86]. Der Fit der experimentellen Daten erfordert allerdings jeweils abweichende Modifikationen vom ursprünglichen Pandey-Modell. Andere Veröffentlichungen unterstützen dagegen das TBS-Modell. Dabei handelt es sich um Untersuchungen mit LEED [Fede79] und dem STM

[Andr99], sowie um Arbeiten zu speziellen Effekten beim Sprödbbruch zur Herstellung der Si(111)- 2×1 -Fläche [Kaal98, DGLi94]. Die Rückschlüsse aus dem Bruchverhalten sind jedoch fraglich, weil der Sprödbbruch von Festkörpern auf atomarer Skala weitgehend unverstanden ist. Man kann kaum gesicherte Aussagen treffen über die Skala, auf der sich die Energiedichte, die an der Riss-Spitze umgesetzt wird, räumlich und zeitlich ausbreitet. Molekulardynamik-Rechnungen (z.B. [Abra94, Cram00]) zeigen, wie empfindlich bereits die makroskopische Struktur der Spaltfläche (z.B. Stufendichte) von äusseren Parametern abhängt, wie z.B. der Modellierung des bindenden Potentials zwischen den Atomen und dem Energiefluss von der Riss-Spitze in den Kristall. Haneman hat einen mikroskopischen Mechanismus vorgeschlagen [Hane87], wie beim Sprödbbruch von Si(111) die metastabile 2×1 -Rekonstruktion im TBS-Modell entsteht. In einer ab-initio-Simulation [Spen93] führt der Sprödbbruch allerdings zur Si(111)- 2×1 -Fläche mit Pandey-Struktur. Ohne genaue Kenntnis des Sprödbrechts auf der atomaren Skala gehen wir nur davon aus, dass die Spaltfläche ein lokales Energie-Minimum im Konfigurationsraum darstellt. Es muss sich aber nicht zwingend um die 2×1 -Struktur minimaler Energie handeln.

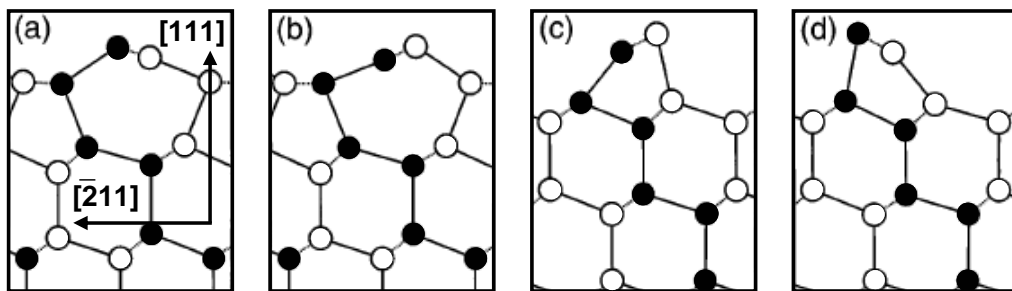


Abb. 3-2: Modelle der Si(111)- 2×1 -Oberfläche [Sung96]. (a) und (b) π -bonded chains mit Vorwärts- und Rückwärts-Buckling, (c) TBS, (d) TBS mit Rückwärts-Buckling.

Neben dem experimentellen Zugang wurde die Si(111)- 2×1 -Fläche auch theoretisch untersucht. In LDA-Rechnungen haben sich die π -bonded chains mit Rückwärts-Buckling (siehe Abb. 3-2 b) als 2×1 -Struktur niedrigster Energie herausgestellt [Stek02]. Die π -bonded chains mit Vorwärts-Buckling (Abb. 3-2 a) weisen eine minimal höhere Gesamtenergie auf. Der Unterschied zwischen beiden Varianten übersteigt die numerische Genauigkeit von LDA nur knapp. Beide Varianten des TBS-Modells (Abb. 3-2 c,d) liegen energetisch deutlich höher, und stellen somit wenig wahrscheinliche Konfigurationen der Si(111)- 2×1 -Oberfläche dar.

Experimentell gemessene elektronische Wellenfunktionen im Ortsraum mit spektraler Auflösung wären besonders aussagekräftig für den Vergleich mit der Theorie, weil man keine weiteren Annahmen, z.B. über den Streuprozess von Elektronen, Photonen oder Protonen an der elektronischen Struktur der Oberfläche machen muss. Rastertunnelmikroskopie und -spektroskopie stellen theoretisch zunehmend gut fundierte Messmethoden dar, die experimentell wenigstens das Betragsquadrat der Oberflächenwellenfunktionen mit lateraler und spektraler Auflösung zugänglich machen.

STM-Untersuchungen der Si(111)-2×1-Fläche werden seit Mitte der 80er Jahre bei Raumtemperatur (RT) angestellt. Zunächst wurden im Konstantstrom-Modus parallele, äquidistante Streifen in [011]-Richtung entdeckt und mit den π -bonded chains identifiziert [Feen86]. Erste Versuche, die elektronische Struktur der Oberfläche lateral und spektral aufzulösen, ergaben einen spannungsabhängigen Wechsel zwischen Topographien bei +0,7 V bzw. -0,7 V [Stro87]. Bei Spannungen dieser Grösse bildet der Konstantstrom-Modus nicht einzelne Wellenfunktionen ab, so dass die Zuordnung der gefundenen Kontraste auf Zustände des Oberflächenvalenz- und -leitungsbands zu hinterfragen ist. Die spannungsabhängige Variation des topographischen Kontrasts von -1,1 V bis +1,1 V [Trap96] erweitert den untersuchten Bereich; die Verbindung der Strukturen mit den Wellenfunktionen wird jedoch nicht klarer. Die dazu unabdingbare Tunnelspektroskopie mit lateraler Auflösung innerhalb der Oberflächeneinheit zelle wurde in dieser Arbeit erstmals bei tiefer Temperatur (8 K) durchgeführt [Garl04]. Die Untersuchung gliedert sich in zwei Teile: (1) Der spannungsabhängige topographische Kontrast relativ zur Oberflächeneinheit zelle wird geradlinig im Sinne der elektronischen Oberflächenbandstruktur interpretiert. (2) Rastertunnelspektroskopie liefert die Verteilung der LDOS(x,y,E) innerhalb der Oberflächeneinheit zelle im Bereich -2 V bis +2 V. Aufgrund der guten Übereinstimmung mit ab-initio Rechnungen [Rohl03] werden die experimentellen Merkmale den Signaturen von Oberflächenvalenz- und -leitungsband in der Volumenbandlücke, sowie Resonanzen in den projizierten Volumenbändern zugeordnet.

3.2. Oberflächenbandstruktur

Die Atome der Pandey-Ketten sind dreifach koordiniert, anstatt vierfach, wie die Si-Atome in den tieferen Lagen. Längs der Pandey-Kette bilden die überzähligen Bindungen einen ausgedehnten Zustand mit π -Charakter [Pand83] aus. Die energetische Lage dieser Zustände in der Volumenbandlücke ist von herausragender Bedeutung: 1. Sie fixiert das Fermi-Niveau E_F an der Oberfläche in der Volumenbandlücke. 2. Der Transfer von Elektronen nahe E_F zwischen dem Oberflächenzustand und den Volumenzuständen wird auch im realen System mit Streuung stark unterdrückt. Die Wellenfunktionen an der Oberfläche und im Volumen sind orthogonal; ohne Streuung gibt es keinen Elektronen-Transfer zwischen Oberflächen- und Volumenzuständen. Die beiden Punkte werden in den Kapiteln 4.5.3 und 6.3.2.b intensiv diskutiert, weil sie eine entscheidende Rolle für die Interpretation der STM- und STS-Daten spielen.

Pandey- und TBS-Modell führen wegen der unterschiedlichen geometrischen Anordnung der Atomrümpfe in der Oberfläche zu verschiedenen Oberflächenbandstrukturen. Abb. 3-3 zeigt die Oberflächenbandstruktur von

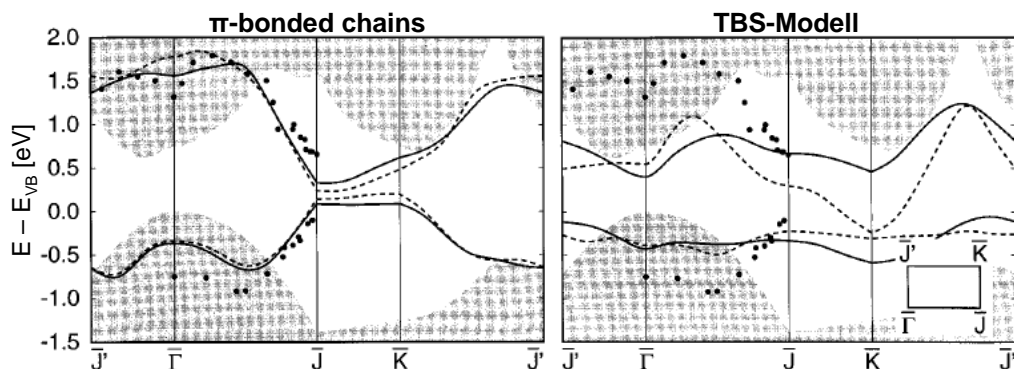


Abb. 3-3: Elektronische Oberflächenbandstruktur von Si(111)-2×1 [Sung96]. Links π -bonded chain, rechts TBS-Modell. Die durchgezogene Linie stellt jeweils die Variante mit Vorwärts-, die gestrichelte Linie mit Rückwärts-Buckling dar. Die schwarzen Punkte geben Messwerte aus PES und IPES wieder [Uhrb82, Perf87].

Si(111)-2×1 aus DFT-LDA-Rechnungen [Sung96]; links Pandey, rechts TBS. Die Ergebnisse für Vorwärts- und Rückwärts-Buckling sind als durchgezogene, bzw. gestrichelte Linie, die PES / IPES-Daten als Punkte dargestellt. Die Theorie zur Berechnung der Geometrie minimaler Energie und der zugehörigen elektronischen Struktur wird im folgenden Kap. 3.3 näher beschrieben.

3.3. Ab-initio berechnete LDOS

Die Berechnung der elektronischen Struktur der Si(111)-2×1-Oberfläche ist aktueller Forschungsgegenstand der theoretischen Physik. Im Rahmen einer Kooperation hat uns Prof. M. Rohlfing (International University Bremen) ab-initio berechnete, *unveröffentlichte* LDOS-Karten zur Verfügung gestellt. Seine Ergebnisse stellen das Maximum an Genauigkeit und Zuverlässigkeit dar, mit dem die elektronische Struktur der Oberfläche zur Zeit berechnet werden kann. Die zugrundeliegende Theorie wird in diesem Kapitel kurz vorgestellt.

Zur Berechnung der theoretischen LDOS-Karten müssen ausgehend vom π -bonded-chain Modell zunächst die genauen Rumpf-Positionen in der rekonstruierten Oberfläche mit Hilfe der Dichte-Funktional-Theorie (DFT) bestimmt werden. DFT benutzt die Lokale-Dichte-Approximation (LDA), normerhaltende Pseudopotentiale und an den Rümpfen zentrierte Gauss-Orbitale, um deren geometrische Anordnung in der Si(111)-2×1-Fläche zu ermitteln. Obwohl *ab-initio* Rechnungen per Definition nicht von Annahmen abhängen, muss man in diesem Fall das Pandey-Modell als Voraussetzung hineinstecken, denn die 2×1-Rekonstruktion ist metastabil. Das Programm sucht speziell nach lokalen Energieminima des Konfigurationsraumes in der Nähe der π -bonded-chain Struktur. Parallel zur Oberfläche besteht Translationssymmetrie, so dass die Berechnung einer Oberflächeneinheitszelle mit periodischen Randbedingungen ausreicht. Man verwendet eine Superzelle mit einem Slab aus 8