

Systeme mit ein-dimensionaler (1D) Elektronenstruktur werden zur Zeit intensiv erforscht, sowohl aufgrund fundamentaler als auch technologischer Interessen. Die vorliegende Arbeit zielt auf die Erlangung soliden Wissens und detaillierten Verständnisses der physikalischen Grundlagen zukünftiger nanoelektronischer Bauelementkonzepte. Stark anisotrope Oberflächenüberstrukturen erhalten derzeit große Aufmerksamkeit in diesem Kontext. Bei der atomar-skaligen Anordnung selbstorganisierter In Nanodrähte, welche die Si(111)-(4x1)In Phase bei Raumtemperatur (RT) bildet [1], handelt es sich um ein besonders intensiv erforschtes Modellsystem dieser Art. Bereits vor 10 Jahren wurde erstmals ein reversibler Phasenübergang in dieser Nanodraht-Anordnung von (4x1)(8x2) translationaler Symmetrie bei  $T_c = 120K$  beobachtet [2]. Trotz fortwährender intensiver Diskussion in der wissenschaftlichen Literatur, verbleiben sowohl der Mechanismus des Phasenübergangs als auch der Niedrigtemperatur (NT) Grundzustand samt seiner Eigenschaften stark umstritten. In der vorliegenden Arbeit wird das In/Si(111)-(4x1)(8x2) Nanodraht-System mit Hilfe akkurate ab initio Computersimulationen untersucht. Es wird gezeigt, dass das lang bestehende Problem der Bestimmung der internen Struktur und elektronischen Eigenschaften des NT Grundzustands allein mit Hilfe der Oberflächenenergien nicht gelöst werden kann. Die mittels Dichtefunktional-Theorie (DFT) erhaltenen Gesamtenergien der In/Si(111)-(4x1)(8x2) Oberfläche hängen stark von den Details der Behandlung der Elektron-Elektron Wechselwirkung ab. Berechnungen der Elektronenstruktur und -transport Eigenschaften für die Trimer und Hexagon Modelle des NT Grundzustands deuten auf Hexagonbildung hin, wie erstmals durch González et al. vorgeschlagen [3]. Diese Ergebnisse demonstrieren den ausgeprägten Einfluss geringfügiger Geometrieveränderungen der Nanodrähte auf ihren Leitwert (vgl. Publ. [11,12]). Hinsichtlich der Mehrdeutigkeit der Gesamtenergie Rechnungen in der Bestimmung der Grundzustands-Struktur, sind weiterführende Ergebnisse durch einen Vergleich der optischen Fingerabdrücke struktureller Kandidaten mit dem Experiment zu erwarten. Das anisotrope optische Antwortverhalten der In/Si(111)-(4x1)(8x2) Nanodraht-Anordnung wurde erstmals im sichtbaren und mittleren Infrarot Bereich unter Berücksichtigung von Intrabandübergängen berechnet. Es wird gezeigt, dass Zustände nahe der Fermi-Kante für jedes der untersuchten Strukturmodelle ausgeprägte und einzigartige optische Fingerabdrücke im mittleren Infrarot-Bereich hervorrufen. Ausschließlich die Spektren des (8x2) Hexagon Modells stimmen mit aktuellen Messungen überein. Diese Ergebnisse beschließen die mehr als 10 Jahre währende Suche nach dem NT Grundzustand überzeugend (vgl. Publ. [1,6,7]). Zur Untersuchung des den Phasenübergang antreibenden Mechanismus wurden die thermischen Eigenschaften der In/Si(111)-(4x1)(8x2) Oberfläche durch frozen-phonon und Molekulardynamik (MD) Simulationen untersucht. Die Ergebnisse deuten darauf hin, dass der von González et al. vorgeschlagene Mechanismus mittels einer weichen Scherungsmodus [3] zumindest teilweise korrekt ist. Zusammen mit der Scherungsmodus unterstützen zwei weitere weiche Moden den Phasenübergang. Vergleichend mit den Raman Spektroskopie Daten von Fleischer et al. [4] konnte die Existenz dieser Moden erstmals bestätigt werden. Transport Physik wird für gewöhnlich bei niedrigen Spannungen und niedrigen Temperaturen betrieben, da der Schwerpunkt auf den grundlegenden Prinzipien liegt. Hinsichtlich der Anwendung in Bauelementen sind jedoch auch die Hochtemperatur Eigenschaften von großer Wichtigkeit. Basierend auf dem (8x2) Hexagon Modell des NT Grundzustands wird ein kombinierter frozen phonon und MD Ansatz zur Berechnung der temperaturabhängigen Transporteigenschaften inklusive des Phasenübergangs vorgestellt. Es stellt sich allerdings heraus, dass die von der MD verwendete klassische Energieverteilung eine hinreichend genaue Beschreibung der subtilen Energetik der In/Si(111)-(4x1)(8x2) Oberfläche verhindert. Stattdessen wird ein Quantum Monte Carlo Algorithmus vorgestellt, welcher sowohl die potentielle Energieoberfläche als auch die Energieverteilung korrekt beschreibt. Da das Dotieren den Grundbaustein der modernen Mikroelektronik darstellt, wurden außerdem Berechnungen der Landauer Leitfähigkeit für mit verschiedenen Fremdatomen dotierte In Nanodrähte durchgeführt. Es werden ausgeprägte Modifikationen der Leitfähigkeit vorhergesagt, welche durch Potentialtopf Streuung, Deformation der Nanodrähte oder eine Kombination beider Effekte erklärt werden können (vgl. [4,9]).