

Kurzfassung

Die Suche nach neuen Techniken, Materialien und Ideen um hocheffiziente elektronische Bauelemente zu verbessern und zu entwickeln ist heute aktueller denn je. In dieser Doktorarbeit wird *ab-initio* Dichtefunktionaltheorie (DFT) genutzt um zwei sehr verschiedene Systeme mit sehr unterschiedlichen Eigenschaften zu untersuchen. Beiden ist gemein, dass sie von niedriger Dimension (2D und 3D) sind und dass Spin-Bahn-Kopplung (SOC) notwendig für eine akkurate Beschreibung ist. Daher wird zu Beginn dieser Dissertation ein neuer, effizienter relativistischer Ansatz eingeführt, mit dem die SOC berücksichtigt wird ohne die Grenzen der Rechenleistung zu sprengen.

Bei dem ersten untersuchten System handelt es sich um Indium Nanodrähte, die sich selbstorganisierend auf der Silizium (111) Oberfläche anordnen. Dieses quasi-eindimensionale System ist bekannt für seinen reversiblen temperaturinduzierten Phasenübergang von einer (4×1) zu einer (8×2) Struktur. Obwohl die meisten Eigenschaften bereits umfassend untersucht wurden, zeigt die Integration von SOC eine bisher unbekannte, aber große anisotrope Rashba-Aufspaltung für beide Phasen, lokalisiert an den In-Bändern.

Das zweite in dieser Arbeit untersuchte Materialsystem ist die Bismut (111) Oberfläche. Die reine Oberfläche ist schon selbst eine Herausforderung, da die elektronische Struktur stark an der korrekten Modellierung hängt. Im Gegensatz zu den In-Nanodrähten, wo die meisten Eigenschaften ohne SOC beschrieben werden können, ist sie essentiell im Falle von Bismut. Große Veränderungen in der Bandstruktur und Fermifläche sind deutlich sichtbar. Die Bismut Oberfläche besitzt spin-aufgespaltene Oberflächenzustände, eine Voraussetzung für Spintronik. Dennoch ist ein gutes Verständnis von kontrollierter Modifikation der Oberfläche nützlich für zukünftige Anwendungen. Wir zeigen, dass Übergangsmetalle (TM) sowie Edelmetalle dieselbe siebenfach koordinierte Position innerhalb der ersten Bismut Bilage der Bi(111) Oberfläche besetzen. Interessanterweise wird hierbei die Oberflächentopographie nicht verändert. Für die $3d$ TMs geschieht dieser Einbau sogar *barrierefrei*, d.h. ohne thermische Aktivierung. Durch Erhöhung der Adatomdichte ist es möglich eine δ -dotierende Lage von $3d$ TMs zu kreieren, welche, obwohl unsichtbar für STM Messungen, zu Änderungen der elektronischen und magnetischen Oberflächeneigenschaften führt.