V této práci jsem stručně shrnul *ab-initio* metody výpočtů atomární a elektronové struktury molekul, pevných látek a jejich povrchů, obvzláště jsem se pak zabýval metodou funkcionálu hustoty. Dále jsem zde popsal výpočetní program Fireball, který je na metodě funkcionálu hustoty založen. S programem Fireball jsem následně prováděl výpočty elektronové struktury krystalického křemíku a atomární a elektronové struktury rekonstrukcí 2×1, p(2×2) a c(4×4) povrchu Si (100). Výsledky těchto výpočtů jsem zde porovnal s již publikovanými výpočty a provedenými experimenty. Následně jsem provedl STM simulace na těchto rekonstrukcích. Výsledky STM simulací jsem opět porovnal s experimentálními daty.