**Машин, Александр Иванович.**

## Новые аллотропные формы кремния : Получение и свойства : диссертация ... доктора физико-математических наук : 01.04.10. - Нижний Новгород, 1999. - 303 с. : ил.

## Оглавление диссертациидоктор физико-математических наук Машин, Александр Иванович

ВВЕДЕНИЕ.

ГЛАВА 1.СОСТОЯНИЕ ПРОБЛЕМЫ.

1.1. Особенности структуры ближнего порядка аморфного кремния.

1.2. Структурные особенности и мультисвязи кремния.

1.2.1.Кремниевые мультисвязи в сложных химических соединениях.

1.2.2.Влияние междоузельных атомов на формирование новых структурных модификаций в кристаллическом кремнии.

1.2.3.Гексагональный кремний.

1.2.4.Цепочечная структура поверхности >S7(100).

1.2.5.71- связанные состояния атомов кремния на поверхности «SV(1 11). 60 1.2.6.Особенности структуры и дефекты на границе раздела кристаллический - аморфный кремний.

1,2.7.Полиморфные превращения кремния при высоком давлении.

1.3. Постановка задачи исследований.

ГЛАВА 2.ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫЙ ОТЖИГ АМОРФНОГО

ГИДРОГЕНИЗИРОВАННОГО КРЕМНИЯ КАК МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ ЛИНЕЙНОЙ АЛЛОТРОПНОЙ ФОРМЫ КРЕМНИЯ.

2.1. Постановка задачи и методика получения образцов.

2.2. Влияние отжига на структуру ближнего порядка аморфного гидрогенизированного кремния.

2.3. Использование метода оптимизации информационного функционала для уменьшения ошибок при расчете параметров ближнего порядка аморфного материала.

2.4. Влияние отжига на плотность состояний в валентной зоне аморфного кремния.

2.5. Квантово - механические расчеты линейных цепочек из кремниевых атомов.

2.5.1.Методы расчета.

2.5.2.Структура линейных кремниевых цепочек атомов.

2.5.3.Энергетические и термодинамические характеристики

Si - цепочек.

2.5.4.Зонная структура.