



## GaN基SiTrO3薄膜的生长偏转模型和模拟研究

<http://www.firstlight.cn> 2010-08-15

构建了SrTiO<sub>3</sub>(STO)薄膜在GaN基底(0001)表面沿不同方向偏转10°、20°、30°、40°和50°具有不同界面结构的生长模型,采用基于密度泛函理论的平面波超软赝势法对GaN(0001)表面外延生长不同方向的STO进行了总能量模拟计算。结果表明,在晶格失配小的理想外延方向即[1--10]SrTiO<sub>3</sub>//[10--10]GaN的能量最高,结构不稳定;而随着STO[1--10]沿GaN[10--10]方向角度的偏转,能量迅速降低,偏转角度为30°时能量最低,即外延关系为[1--10]SrTiO<sub>3</sub>//[11--20]GaN时最稳定,与实验结果一致。能量计算结果表明,STO/GaN磁电薄膜有利于形成STO--Ti--GaN的界面结构。

[存档文本](#)