

## DF 10 Elektrische, elektromechanische und optische Eigenschaften

Zeit: Dienstag 14:00–18:30

Raum: TU EMH225

DF 10.1 Di 14:00 TU EMH225

**In-situ small-angle x-ray scattering study of interface morphology in sintered nano-ceramics** — ●RUDOLF WINTER and DANIEL A LE MESSRIER — Materials Physics, University of Wales Aberystwyth, Aberystwyth, Wales, UK

The bonding of granular ceramics depends in reactions at the grain interface. These reactions can be pure solid-state or solid-liquid interface reactions. The former require ionic diffusion and are usually diffusion limited once an interface of a certain thickness has been formed.

We report here on combined small and wide angle x-ray scattering experiments performed under *in-situ* heating conditions at beamline 6.2 at Daresbury. Sol-gel prepared  $ZrO_2$  nanoparticles were mixed with a powdered silicate ( $Na_2Si_3O_7$ ) glass, pelletised and heated up to 1000°C while acquiring data at photon energies of 8.3 keV and near the absorption edge of zirconium, 18 keV. Macroscopic grain surface scattering following Porod's law is subtracted from the raw data.

The evolution of the scattering pattern enables us to model the change of the morphology of the interface. While the original powder mixture is characterised by fractal aggregates of small primary particles, larger product particles with smoother interfaces are formed above about 550°C. The solid-state reaction kinetics is deceleratory in line with a diffusion-based model of interface growth.

DF 10.2 Di 14:20 TU EMH225

**Dependence of the band gap in the high-k dielectric  $HfO_2$  on crystalline phase** — ●K. NISHITANI<sup>1,2</sup>, P. RINKE<sup>1</sup>, P. EGGERT<sup>1</sup>, S.J. HASHEMIFAR<sup>1</sup>, P. KRATZER<sup>1</sup>, and M. SCHEFFLER<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Faradayweg 4-6, D-14195 Berlin — <sup>2</sup>Corporate Manufacturing Engineering Center, Toshiba Corporation, 33, Shin-Isogo-cho, Isogo-ku, Yokohama, Kanagawa, 235-0017, Japan

Recently  $HfO_2$  has attracted considerable attention as a gate dielectric for CMOS technology, because it combines a wide band gap and good thermal stability with a low-frequency dielectric constant much higher than that of  $SiO_2$ . While the exact values of the band gap and band alignment with Si(001) are important for the application as gate dielectric, experimental data show some scatter possibly due to ill-defined crystallinity of the samples. We analyze the structural and electronic properties of both cubic and tetragonal  $HfO_2$  employing density-functional theory within the local-density approximation (LDA) in a pseudopotentials, plane-wave approach. We find that cubic  $HfO_2$  has a direct band gap, while the tetragonal phase exhibits a slightly larger indirect gap. Applying many-body perturbation theory in the *GW* approximation corrects the underestimation of the LDA band gap and gives band gaps within the experimentally reported range. We find that the energy shifts introduced by the *GW* self-energy are largely independent of the structure and show that the differences in band structure between the two phases arise mainly from internal relaxations of the oxygen atoms in the tetragonal phase, while the *c/a* value has little effect on the character of the band gap.

DF 10.3 Di 14:40 TU EMH225

**X-ray diffraction study of the microscopic origin of dielectric and piezoelectric properties in single crystals** — ●S. GORFMAN<sup>1,2</sup>, V. TSIRELSON<sup>2</sup>, and U. PIETSCH<sup>1</sup> — <sup>1</sup>Institute of physics, Potsdam University, Am Neuen Palais 2, 14469, Potsdam, Germany — <sup>2</sup>Quantum chemistry department, Mendeleev University of Chemical Technology, 121047, Moscow, Russia

The interaction of an external electric field with a crystal generates the number of phenomena, which are of great interest both for industrial applications and fundamental theoretical and experimental research. The aim of this work is to describe the response of the crystal to the external electric field in terms of the electron density and atomic structure - the quantities which can be studied by means of the X-ray diffraction experiment. We developed a lattice dynamical theory of the atomic displacements, induced by the external electric field, and related them to the properties of the phonon spectra and the charge density redistribution inside a crystal. On the basis of this general theory various simplified models have been derived which are appropriate for the analysis of real X-ray diffraction data. The models are validated for data taken from  $GaPO_4$  single crystal, where the measurements have been performed at D3 beamline at HASYLAB.

DF 10.4 Di 15:00 TU EMH225

**Electrical, optical, and electrooptical properties of  $BaTiO_3/SrTiO_3$  superlattices with symmetric and asymmetric structures** — ●HASSAN CHAIB, LUKAS ENG, and TOBIAS OTTO — Institute of Applied Photophysics, University of Technology Dresden, D-01062 Dresden, Germany

The electrical, optical, and electrooptical properties of  $BaTiO_3/SrTiO_3$  superlattices are theoretically investigated using a microscopic quantum mechanical model based on the orbital approximation in correlation with the dipole-dipole interaction. First-, second-, and third-order electronic polarizabilities of the constituent ions have been considered in this calculation in order to obtain accurate results for both the dielectric spontaneous polarization, the relative dielectric constant, the refractive indices, and the linear electrooptic coefficients of the  $BaTiO_3/SrTiO_3$  superlattices with symmetric ( $n = m$ ) and asymmetric ( $n \neq m$ ) structures (" $n/m$ " represents the stacking periodicity of  $n$  unit cells for  $BaTiO_3/m$  unit cells for  $SrTiO_3$ ). The present calculation shows that the  $BaTiO_3$ -rich structures ( $n > m$ ) possess the largest values of the spontaneous polarization, optical birefringence, and linear electrooptic coefficients while the  $SrTiO_3$ -rich structures ( $n < m$ ) show the largest values of the relative dielectric constant.

DF 10.5 Di 15:20 TU EMH225

**Holographic reflection filters in photorefractive  $LiNbO_3$  channel waveguides for applications as add/drop multiplexers** — ●DANIEL RUNDE and DETLEF KIP — Clausthal University of Technology, Institute of Physics and Physical Technologies, Leibnizstr. 4, 38678 Clausthal-Zellerfeld

A slanted refractive index grating in a bi-modal waveguide section breaks the orthogonality of the fundamental and first order mode. It couples the forward propagating fundamental mode into the backward propagating first order mode. A mode selective coupler splits the reflected signal from the passing signal into a drop channel. In a symmetrically designed device, a second coupler works as the add channel. The gratings are recorded with the green light of a Nd:YVO<sub>4</sub> laser ( $\lambda = 532$  nm) in photorefractive  $LiNbO_3:Ti:Cu$  channel waveguides operating in the infrared wavelength region around 1.55  $\mu m$ . The bandwidth (FWHM) of these gratings is about 0.1 nm and makes the filter applicable for DWDM telecommunication devices. Due to the electrooptic effect the Bragg wavelength is adjustable by applying a bias electric field. A modulation of the electric field allows switching of the filter.

DF 10.6 Di 15:40 TU EMH225

**Thermoelektrisches Verfahren zur vollständigen Oxidation hoch eisendotierter Lithiumniobat-Kristalle** — ●MATTHIAS FALK and KARSTEN BUSE — Physikalisches Institut, Universität Bonn, Wegelerstr. 8, 53115 Bonn

Lithiumniobat ist für die nichtlineare Optik eines der viel versprechendsten Materialien. Anwendungen wie z. B. Frequenzverdopplung werden aber bei hohen Lichtintensitäten durch lichtinduzierte Brechungsindexänderungen („Optischer Schaden“) behindert. Ein neuer Ansatz zur Verminderung des „Optischen Schadens“ besteht in der sehr hohen Dotierung der Kristalle mit Eisen. Dadurch soll die elektrische Leitfähigkeit so weit gesteigert werden, dass Raumladungsfelder sich nicht aufbauen können. Da diese Raumladungsfelder zusammen mit dem elektrooptischen Effekt in der Regel für den „Optischen Schaden“ verantwortlich sind, sollten diese Kristalle für die nichtlineare Optik dann besser geeignet sein. Ein Problem stellt aber die durch  $Fe^{2+}$  hervorgerufene starke Absorption für sichtbares Licht dar. Wir stellen ein Verfahren zur vollständigen Oxidation des  $Fe^{2+}$  zu  $Fe^{3+}$  in Kristallen mit bis zu 2 mol% Fe durch kombinierte thermische und elektrische Behandlung vor. Die Dauer der Behandlung, die Temperatur und der elektrische Stromfluss bestimmen das Ergebnis. Bemerkenswert ist, dass die Oxidation stets von der Kathode startet und sich dann zur Anode fortsetzt. Aufnahmen von Kristallen aus unterschiedlichen Temperphasen zeigen das deutlich.

\*Gefördert von der DFG und von der Deutschen Telekom AG.

DF 10.7 Di 16:30 TU EMH225

**Elektrisches Fixieren in Lithiumniobat-Kristallen\*** — ●HELGE A. EGGERT, BENEDIKT HECKING, FELIX KALKUM und KARSTEN BUSE — Physikalisches Institut, Universität Bonn, Wegelerstr. 8, 53115 Bonn

Mit Hilfe strukturierter ferroelektrischer Domänen in eisendotierten Lithiumniobat-Kristallen ( $\text{LiNbO}_3$ ) lassen sich auf Grund des Pockels-Effekts elektrisch schaltbare diffraktive optische Elemente realisieren. Das "elektrische Fixieren" bietet die Möglichkeit beliebige, holographisch erzeugte Raumladungsfelder durch Anlegen eines externen elektrischen Feldes in ein Muster ferroelektrischer Domänen umzuwandeln. Das ist eine neue Methode, um Domänenmuster in  $\text{LiNbO}_3$  zu erzeugen. Dazu wird der Kristall mit einem Interferenzmuster beleuchtet. Ladungen werden umverteilt und ein Raumladungsmuster baut sich auf. Zusätzlich legen wir ein elektrisches Feld knapp unterhalb der ferroelektrischen Koerzitivfeldstärke an. In einigen Bereichen überschreiten Raumladungsfeld und externes Feld die Koerzitivfeldstärke und Domänen klappen um. Die Feldmuster führen über den Pockels-Effekt zu Brechungsindexmodulationen, so dass der Vorgang optisch beobachtet werden kann. Bereits eine Umorientierung von 0.01% der Domänen führt in einem 1 mm dicken Kristall zu 30% Beugungseffizienz. \*Gefördert von der DFG und von der Deutschen Telekom AG.

DF 10.8 Di 16:50 TU EMH225

**Die Existenz lichtinduzierter Polaronen in  $\text{LiNbO}_3$  auf der Femtosekunden Zeitskala\*** — OLIVER BEYER, ●THEO WOIKE und KARSTEN BUSE — Physikalisches Institut, Universität Bonn, Wegelerstraße 8, 53115 Bonn

Bestrahlt man  $\text{LiNbO}_3$  mit intensiven kurzen Laserpulsen, werden Elektronen aus dem Valenzband in das Leitungsband angeregt. Das angeregte Elektron kann eine Gitterdeformation über die Elektron-Phonon-Kopplung hervorrufen und gräbt sich damit eine stabile Potentialmulde, ein Elektronen-Polaron wird erzeugt. Das Loch wandert zu einem Sauerstoffatom des Niob-Sauerstoff-Oktaeders und bildet dort ein Loch-Polaron.

Wir zeigen, dass beide Polaronen über eine Zwei-Photonen-Anregung erzeugt werden und dass sie bereits nach ca. 200 fs existieren. Ihr zeitlicher Zerfall wird mit einer gestreckten Exponentialfunktion beschrieben, da in den ungeordneten oxydischen Materialien eine Summe von exponentiellen Zerfällen auftritt. Wir erklären an Hand eines Bandschemas die Erzeugungs- und Rekombinationsprozesse. Die Messungen zeigen, dass bereits im Leitungsband große Polaronen gebildet werden, die als kleine Elektronen-Polaronen an einem Nb-Atom auf Li-Platz stabilisiert werden.

\*Gefördert von der DFG und von der Deutschen Telekom AG.

DF 10.9 Di 17:10 TU EMH225

**Holographische Streuphänomene in  $\text{LiNbO}_3\text{:Fe}$ -Kristallen bei Beleuchtung mit kurzen Laserpulsen** — ●A. SELINGER<sup>1</sup>, U. VÖLKER<sup>1</sup>, M. IMLAU<sup>1</sup> und M. GOULKOV<sup>2</sup> — <sup>1</sup>Fachbereich Physik, Universität Osnabrück, Barbarastraße 7, D-49069 Osnabrück — <sup>2</sup>Institute of Physics, Academy of Sciences, Kiev, Ukraine

In dünnen eisendotierten  $\text{LiNbO}_3$ -Kristallen haben wir bei Untersuchungen zur holographischen Streuung mit Puls laserlicht eine in der Literatur bislang nicht dokumentierte Streufigur beobachtet. Diese ist durch eine ellipsenförmige Streuverteilung um den direkt transmittierten Laserstrahl gekennzeichnet und weist eine zum einfallenden Licht orthogonale Polarisierung auf. Die Vielzahl der Eigenschaften dieser neuen Streufigur, wie die Kinetik und Abhängigkeit von der Intensität, der Wellenlänge, der Lichtpolarisation und der Kristalldicke werden vorgestellt. Weiter präsentieren wir Untersuchungen zur Rolle des Puls laserlichts bei der Entstehung der Streufigur. Im Vergleich zeigen wir die Eigenschaften des anisotropen Streuringes, des 'beam fannings' und der domäneninduzierten Lichtstreuung, die in diesen Kristallen - auch mit Dauerstrichlicht - beobachtet werden. Die Entstehung der ellipsenförmigen Streufigur wird zunächst im Rahmen der bekannten Streuprozesse, insbesondere der parametrischen Streuung, diskutiert. Es zeigt sich aber, dass ferroelektrische Domänen, die sich im Kristallvolumen durch die intensive Laserlichtbestrahlung ausbilden, bei der Erklärung der neuen Streufigur berücksichtigt werden müssen. Gefördert durch die DFG (Projekt IM-37/2-1).

DF 10.10 Di 17:30 TU EMH225

**Starke, absorptionsinduzierte Brechungsindexgitter in kupferdotierten Lithiumniobat-Kristallen\*** — ●ULRICH HARTWIG<sup>1</sup>, KONRAD PEITHMANN<sup>1</sup>, KARSTEN BUSE<sup>1</sup> und BORIS STURMAN<sup>2</sup> — <sup>1</sup>Physikalisches Institut, Universität Bonn, Wegelerstraße 8, D-53115 Bonn, Germany — <sup>2</sup>Institute of Automation and Electrometry, 630090 Novosibirsk, Russia

Elementare Volumenphasenhologramme können in kupferdotierten Lithiumniobat-Kristallen geschrieben werden, ohne den üblichen photorefraktiven Mechanismus zu nutzen, der auf dem elektrooptischen Effekt basiert. Dazu werden die Kristalle bei hohen Temperaturen (ca. 180 °C) mit einem Interferenzmuster beleuchtet. Das Licht verteilt Elektronen um, und die entstehenden Raumladungsfelder werden durch Ionen kompensiert. Daher setzt sich die lichtinduzierte Elektronenumverteilung fort, und es resultiert eine starke räumliche Modulation von  $\text{Cu}^+/\text{Cu}^{2+}$ -Zentren, die ein Absorptionsgitter zur Folge hat. Aus diesem Absorptionsgitter ergibt sich über einen weiten Wellenlängenbereich eine Brechungsindexmodulation, denn beide Gitter sind über die Kramers-Kronig-Relation miteinander verknüpft. Diese permanenten und zugleich reversiblen Brechungsindexgitter erreichen eine Amplitude bis zu  $\Delta n \simeq 10^{-4}$  und können unabhängig von der Orientierung der c-Achse realisiert werden. Die Gitter sind z. B. für Resonatoren in nichtlinear-optischen Anwendungen von großem Interesse.

\*Gefördert von der DFG (FOR 557) und von der Deutschen Telekom AG.

DF 10.11 Di 17:50 TU EMH225

**Integrated optical sensors based on photorefractive  $\text{LiNbO}_3$  channel waveguides** — ●CHRISTIAN E. RÜTER, FLORIAN WERUNSKY, and DETLEF KIP — Clausthal University of Technology, Institute of Physics and Physical Technologies, Leibnizstr. 4, 38678 Clausthal-Zellerfeld

We present results of simulations and preliminary measurements of an integrated interferometric optical sensor based on singlemode  $\text{LiNbO}_3\text{:Ti:Fe}$  channel waveguides. The sensor is designed to work in the near infrared wavelength region around  $\lambda = 1.55 \mu\text{m}$ . The evanescent field of the guided mode senses changes in the refractive index of the layer covering the waveguide. This changes the effective refractive index of the guided mode which alters the transfer function of the interferometer in dependence of the light wavelength. Phase change of the interferometer can be compensated by applying an electric field and utilizing the electro-optic effect. Thus the applied field is the measurement signal of the sensor. Covering the waveguide with a thin layer of higher refractive index than the refractive index of the waveguide region (e.g.  $\text{TiO}_2$ ) leads to an increase of the evanescent field and therefore to higher sensitivity. In combination with an additional functional layer that is sensitive only to, e.g., specific molecules a highly sensitive sensor with a resolution in the ppb range may be realized.

DF 10.12 Di 18:10 TU EMH225

**Einfluss von Raumladungsfeldern auf das ferroelektrische Verhalten von Lithiumniobatkristallen\*** — ●FELIX KALKUM, HELGE A. EGGERT, BENEDIKT HECKING und KARSTEN BUSE — Physikalisches Institut, Universität Bonn, Wegelerstr. 8, 53115 Bonn

Kürzlich wurde gezeigt, dass als Raumladungsfelder gespeicherte Hologramme in eisendotierten Lithiumniobat-Kristallen durch Anlegen eines äußeren elektrischen Feldes dauerhaft in ferroelektrische Domänenmuster überführt werden können (H.A.Eggert et al., Opt. Lett. **29**, 2476 (2004)). Die so realisierbaren stabilen Strukturen ermöglichen elektrisch kontrollierte diffraktive optische Elemente oder Datenspeicher. Durch den Richtungswechsel der Spontanzpolarisierung entstehen an Grenzen aufeinander zulaufender entgegengesetzter Domänen sehr große elektrische Felder. Diese kompensieren das Raumladungsfeld und verhindern, dass die Ladungsträger durch Beleuchtung umverteilt werden können. Für ein besseres Verständnis dieses als "elektrisches Fixieren" bezeichneten Prozesses beschreiben wir die Wechselwirkung zwischen Raumladungsfeld und Domänenmuster und entwickeln eine quantitative Modellvorstellung zur Erklärung der experimentellen Ergebnisse.

\* Gefördert von der DFG und von der Deutschen Telekom AG.