

DF 16: Dielectric surfaces and interfaces

Time: Thursday 14:15–16:00

Location: MÜL Elch

DF 16.1 Thu 14:15 MÜL Elch

Ferroelectric properties of TiO₂ rutile investigated by ab initio calculations — ●ANNA GRÜNEBOHM^{1,2}, HEIKE C. HERPER^{1,2}, and PETER ENTEL^{1,2} — ¹Fachbereich Physik, Universität Duisburg-Essen, Deutschland — ²Cenide

TiO₂ rutile is an incipient ferroelectric material [1] and theoretical studies have shown that a ferroelectric transition can be triggered by a lattice expansion or a strained lattice [2]. The experimental realization of ferroelectric TiO₂ would be of great technical impact as TiO₂ is a cheap material with well optimized processing and a variety of applications like optical coating, solar cells or catalysis. Most of this applications are based on properties of the rutile (110)-surface. Therefore, the knowledge of the ferroelectric properties at this surface is the key point, which has not been addressed in literature so far.

In order to get an insight into these properties, we have performed calculations within the projector augmented wave method using VASP [3]. We present a systematic study of the ferroelectric trends in rutile for the bulk systems as well as for the rutile (110) surface and TiO₂ nanoparticles. Although, the surface reduces the ferroelectric trends we find a ferroelectric phase for strained TiO₂(110). [1] C. Lee, P. Ghosez and X. Gonze, *Phys. Rev. B* **50**, 13379 (1994) [2] B. Montanari and N. M. Harrison, *J. Phys. Condens. Matter* **16**, 273 (2004) [3] G. Kresse and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996)

DF 16.2 Thu 14:35 MÜL Elch

Polarisationsabhängige H₂O-Adsorption auf LiNbO₃ (0001) — ●REBECCA HÖLSCHER, SIMONE SANNA und WOLF GERO SCHMIDT — Theoretische Physik, Universität Paderborn

Die Polarisation von ferroelektrischen Oxidoberflächen kann kontrolliert werden, um die Oberflächenreaktivität für gewisse Anwendungen gezielt anzupassen. Dieses „domain engineering“ ermöglicht die Realisierung von molekularen Detektoren und anderen Bauteilen auf Nanoebene. Hier werden ab initio Rechnungen vorgestellt, die den Effekt der Polarisation auf die Adsorption von H₂O-Molekülen auf der (0001) Oberfläche von LiNbO₃ (LN) untersuchen. Die Adsorption wird mittels Dichtefunktionalrechnungen innerhalb der generalisierten Gradienten Approximation (GGA) modelliert, da dies realistische Strukturen und Energien für das LN Volumensmaterial und dessen Oberflächen ergibt¹. Die Adsorptionsenergie und -geometrie sowie die Oberflächenbedeckung auf der positiven und negativen (0001) Oberfläche werden bestimmt. Analog zu den Ergebnissen von TPD (temperature programmed desorption) Messungen², wird hier eine polarisationsabhängige Adsorption gezeigt (ebenso bei 2-Propanol auf LN³). Zudem zeigt sich, dass keine Adsorptionsbarriere vorliegt, im Sinne einer Physisorption und keine Dissoziation des Moleküls bei niedriger Bedeckung stattfindet.

[1] W. G. Schmidt, M. Albrecht et al., *Phys. Rev. B* **77** (2008), 035106. [2] J. Garra, J.M. Vohs, D.A. Bonnel, *Surf. Sci.* **603** (2009) 1106. [3] Y. Yun, L. Kampschulte et al., *J. Phys. Chem. C* **111** (2007) 13951.

DF 16.3 Thu 14:55 MÜL Elch

UV-induced domain wall conductivity at room temperature in Mg-doped lithium niobate single crystals — ●MATHIAS SCHRÖDER, ALEXANDER HAUSSMANN, and LUKAS M. ENG — Institute of Applied Photophysics, Technische Universität Dresden, D-01062 Dresden, Germany

Ferroelectric 180° domain walls (DWs) may play an important role in future electronic devices. The size and position of domains and DWs can be easily controlled. In addition, DWs in lithium niobate (LiNbO₃:LNO) can be functionalized through depositing metallic and/or molecular nanowires by means of ferroelectric lithography [1,2]. Moreover,

the same DWs become conductive under super-bandgap illumination, hence manifesting switchable, tunable, and nanoscale conductive channels that extend across the whole insulating bulk material. However, a detailed understanding of the underlying processes that lead to DW conductivity is still missing to date. Here, we report on conductive-AFM (c-AFM) measurements on 5 mol% Mg-doped congruent LNO single crystals. We compare the c-AFM results with the domain distribution recorded by piezoresponse force microscopy (PFM). Surprisingly, we find an enhanced current flow inside the 180° DWs under super-bandgap UV-illumination even at ambient conditions. The DW conductivity was studied as a function of wavelength, light intensity and doping concentration. Our results suggest a hopping transport being relevant for the reported DW conductivity.

[1] S.V. Kalinin, et al., *Nano Lett.* **2**, 589 (2002).

[2] A. Haussmann et al., *Nano Lett.* **9**, 763 (2009).

DF 16.4 Thu 15:15 MÜL Elch

Investigating electronic defects in strontium titanate by surface photovoltage analysis — ●ELKE BEYREUTHER, JANA BECHERER, STEFAN GRAFSTRÖM, and LUKAS M. ENG — Institut für Angewandte Photophysik, Technische Universität Dresden, D-01062 Dresden, Germany

The energy distribution of electronic defect states within the bandgap of oxygen-reduced n-type strontium titanate has been analyzed by means of wavelength-dependent surface photovoltage (SPV) measurements using a Kelvin probe set-up. As a further result, the parameters of several surface states, i.e. the trap state density and the thermal and optical cross sections, were extracted from SPV transients.

Finally, the appropriateness of the method as a general tool for electrical characterization of complex oxide surfaces is illustrated by applying the SPV technique to comparable oxide crystals such as undoped SrTiO₃, Nb-doped SrTiO₃, or BaTiO₃.

DF 16.5 Thu 15:35 MÜL Elch

Defektanalyse in SiO₂-Schichten mit Hilfe der Positronen-Lebensdauer-Impuls-Korrelation — ●BENJAMIN LÖWE¹, WERNER EGGER¹, ANDREAS BERGMAIER¹, GOTTFRIED KÖGEL¹, LUCA RAVELLI¹, PETER SPERR¹, CHRISTOPH HUGENSCHMIDT^{2,3} und GÜNTHER DOLLINGER¹ — ¹LRT2, Universität der Bundeswehr, Neubiberg, Deutschland — ²ZWE FRM II, TU München, Deutschland — ³Physik-Department E21, TU München, Deutschland

Aus Positronenlebensdauer-messungen in Festkörpern kann auf Art und Konzentration von leerstellenartigen Defekten geschlossen werden. Messungen der Energie der Annihilationsquanten, die bei der Vernichtung von Positronen mit Elektronen im Festkörper entstehen, lassen Rückschlüsse auf die chemische Umgebung der Defekte zu.

Korrelierte Messungen der Positronenlebensdauer und der Energie der Annihilationsquanten, die vom selben Annihilationsereignis stammen (AMOC = Age Momentum Correlation) liefern ein detailreicheres Bild der Defektsituation als die unkorrelierte Messung von Lebensdauer und Energie.

Mit Hilfe des gepulsten Positronenstrahlensystem PLEPS am FRM II wurden AMOC-Messungen an SiO₂-Schichten durchgeführt. Die Positronen wurden bei einer Energie von 2 keV in 100 nm dicke, unterschiedlich hergestellte SiO₂-Schichten implantiert. Aus den gemessenen AMOC-Spektren können verschiedene Schnitte extrahiert werden. Anhand des S(t)-Plots, der die Breite der Annihilationslinie als Funktion der Lebensdauer darstellt, lässt sich z.B. die Positroniumbildung in unterschiedlich aufgetragenen SiO₂-Schichten vergleichen.

5 min. break