

Abstract

The correlation between the defect structure, the crystalline structure and the charge carrier transfer through titanium dioxide (titania) were evaluated by in-situ X-ray diffraction, in-situ resistivity characterisation, quasi-in-situ X-ray photoelectron spectroscopy and paramagnetic resonance spectroscopy in order to improve the photocatalytic efficiency of a newly invented water purification reactor.

Annealing titanium dioxide in vacuum at temperatures below the phase transition temperature while an external electrical field was applied resulted in the observation of structural, morphological and electrical anomalies. These anomalies occur in thin films, as well as, in powder samples. However, treating titanium dioxide in vacuum leads to a redistribution of lattice defects. The diffusion of these lattice defects from the centre of the lattice to the line defect area forms charge carrier trapping sites and permanent dipoles with a significant dipole strength. The alignment of these dipoles leads to the formation of anisotropic conductive channels.

The activation of a resistive switching mechanism is possible since these conductive channels can be open or closed depending on the external electrical field strength. Hence, a quasi-para-electric material is synthesised.

Furthermore, the redistribution of lattice defects driven by an external electrical field results in a new density distribution and the formation of a new highly textured crystalline phase, the arminiase, which is correlated with the conductive configuration of titanium dioxide.

Der Zusammenhang zwischen der Defektstruktur, der Kristallstruktur und dem Ladungsträgertransport durch Titandioxidproben wurde mittels in-situ Röntgendiffraktometrie, in-situ Widerstandsmessungen, quasi-in-situ Röntgenphotoelektronenspektroskopie und Elektronenspinresonanz untersucht, mit dem Ziel die photokatalytische Effizienz eines neu entwickelten Wasserwiederaufbereitungsreaktors zu verbessern.

Es wurden strukturelle, morphologische und elektrische Anomalien bei verschiedenen Proben, welche im Vacuum bei Temperaturen unterhalb der Phasentransformationstemperatur ausgeheizt wurden, während ein externes elektrisches Feld anlag, beobachtet. Dieses Ausheizen von Titandioxid im Vacuum führt zu einer Umordnung von Gitterdefekten. Es werden durch die Diffusion dieser Gitterdefekte aus dem Kristallzentrum zur Oberfläche und zu Grenzflächen Ladungsträgerfallen gebildet und es entstehen elektrische Dipole. Die Ausrichtung dieser Dipole führt zu anisotropen Leitungskanälen.

Da die Leitungskanäle durch ein externes elektrisches Feld geöffnet und geschlossen werden können, kann man zwischen leitendem und isolierendem Titandioxid wechseln. Demzufolge wurde ein quasi-paraelektrisches Material hergestellt.

Die Umordnung der Defektstruktur führt zusätzlich zu einer neuen Dichteverteilung im Material und eine neue kristalline Phase, Arminiase, konnte beobachtet werden. Diese steht im Zusammenhang mit dem elektrisch leitendem Titandioxid.