

TRÍCH YẾU LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ

Họ và tên tác giả : Nguyễn Trọng Tĩnh

Tên luận án : *Một số vấn đề động học trong tiếp xúc chất bán dẫn (cấu trúc nano) với môi trường điện giải.*

Chuyên ngành : *Vật lý bán dẫn và điện môi*

Mã số : 1.01.12

Cơ sở đào tạo : Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học quốc gia Hà nội.

Mục đích và đối tượng nghiên cứu của luận án

Những hiệu ứng Vật lý trong tiếp xúc chất bán dẫn với môi trường điện giải, đặc biệt là hệ bán dẫn kích thước hạt nanomet (cấu trúc nano) đã và đang được ứng dụng ngày càng rộng rãi. Tuy nhiên bản chất các quá trình vật lý của chúng vẫn là đề tài tranh cãi của nhiều phòng thí nghiệm trong và ngoài nước. Vì lý do đó, luận án chọn đề tài nghiên cứu về một số quá trình động học trong tiếp xúc chất bán dẫn (hệ cấu trúc nano) khi tiếp xúc với môi trường điện giải. Đối tượng được lựa chọn nghiên cứu là bán dẫn Oxide Titan TiO_2 bởi tính ứng dụng cao trong thực tế của hệ vật liệu này.

Những phương pháp nghiên cứu sử dụng trong luận án bao gồm thực nghiệm và mô hình lý thuyết mô phỏng thực nghiệm.

Thực nghiệm : Chế tạo mẫu màng điện cực bán dẫn ; Khảo sát các tính chất về cấu trúc bằng nhiễu xạ tia X; về hình thái học bằng hiển vi điện tử quét (SEM), hiển vi lực nguyên tử (AFM). Đo đặc các đặc tính quang điện hoá của điện cực chế tạo được bằng phương pháp điện hoá ba điện cực : dòng-thế phân cực (I-V) và phổ tổng trở (EIS) .

Lý thuyết : Luận án xây dựng mô hình mô tả quá trình thiết lập cân bằng động đối với hệ bán dẫn (kích thước nhỏ) tiếp xúc với dung dịch điện giải. Mô hình dựa trên việc giải số hệ phương trình liên tục đối với cả hai loại hạt tải và phương trình Poisson mô tả điện trường trong chất bán dẫn có kích thước hạt nhỏ. Các điều kiện biên được lựa chọn sao cho không bị thay đổi khi kích thước hạt bán dẫn thay đổi, nhằm nghiên cứu ảnh hưởng của hiệu ứng kích thước. Một số tính chất được đánh giá thông qua kết quả thu được của phân bố nồng độ hạt tải, động học thời gian thiết lập cân bằng ...vv.

Luận án còn xây dựng phương pháp số để tính điện dung điện hoá của hệ điện cực bán dẫn cấu trúc nano-xốp. Phương pháp dựa trên mạch tương đương của các tụ điện thành phần tương ứng với các lớp điện tích trên tiếp xúc chất bán dẫn với môi trường điện giải. Công thức tính cho các điện dung kể trên suy ra trực tiếp từ định nghĩa điện dung và có dạng chung là tích của hai thành phần đặc trưng cho tính chất vật liệu và cấu hình phân bố điện thế trong lớp điện tích tương ứng. Bằng cách thay thế cấu hình phân bố nồng độ hạt tải trong bán dẫn khi phân cực điện thế bằng cấu hình khi dịch mức Oxy hoá khử đi một đại lượng tương đương (còn được gọi là phương pháp giả thế phân cực) có thể mô phỏng được đặc

trung điện dung điện hoá - thế phân cực (C-V) của điện cực bán dẫn tiếp xúc với môi trường điện giải. Phương pháp mới này của luận án cho phép mô phỏng đặc trưng C-V không cần sử dụng giả thuyết gần đúng Mott-Schottky như những phương pháp kinh điển. Điều này cho phép tính toán đặc tính C-V đối với điện cực bán dẫn cấu trúc nano-xốp và nghiên cứu ảnh hưởng của hiệu ứng kích thước. Dựa trên quy trình khớp kết quả tính toán lý thuyết với kết quả đo thực nghiệm, có thể thu được những thông số phản ánh các tính chất vật lý khác nhau của hệ điện cực bán dẫn cấu trúc nano-xốp.

Những kết quả chính thu được trong luận án :

*/ Chế tạo được các mẫu điện cực bán dẫn TiO_2 : dạng thể khối, cấu trúc nano-xốp bằng những phương pháp khác nhau. Khảo sát đặc tính về cấu trúc pha tinh thể, hình thái học cũng như những đặc tính quang điện hoá của các mẫu chế tạo. Kết quả cho thấy pha cấu trúc Anatase tốt hơn pha Rutile ; các mẫu điện cực nano-xốp có độ hạt, độ xốp tốt và hiệu ứng quang điện hoá đạt mức như những công bố trên thế giới về hệ này. Đồng thời phát hiện thấy sự thay đổi tính chất động học của hệ điện cực nano-xốp khi bị kích thích bằng ánh sáng tử ngoại.

*/ Mô phỏng quá trình thiết lập cân bằng động hệ tiếp xúc bán dẫn-điện giải. Kết quả thu được cho thấy phân bố nồng độ hạt tải trong hệ hạt có kích thước nhỏ hơn kích thước vùng điện tích không gian phụ thuộc vào kích thước hạt. Bản chất của tiếp xúc bán dẫn-điện giải dẫn đến tốc độ trao đổi điện tích của hai loại hạt tải chất bán dẫn với cặp Oxy hoá khử (Redox) rất khác nhau. Hậu quả là có thể tồn tại trạng thái giả cân bằng trong hệ hạt có kích thước nhỏ.

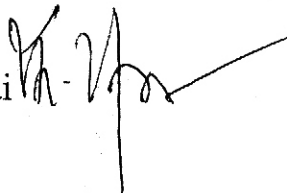
*/ Kết quả tính toán điện dung điện hoá theo phương pháp luận án xây dựng, cho thấy đặc trưng C-V của điện cực bán dẫn nano-xốp phụ thuộc vào kích thước hạt. Kết luận như vậy cũng có thể suy ra từ những kết quả đo thực nghiệm. Phương pháp giả thế phân cực của luận án áp dụng cho điện cực TiO_2 nano-xốp mô tả rất tốt đặc tính phức tạp của đặc trưng C-V điện cực nano-xốp (không giống như trường hợp kinh điển của điện cực thể khối). Quá trình khớp kết quả thực nghiệm và tính toán lý thuyết của đặc trưng C-V điện cực nano-xốp cho thấy hiện tượng thay đổi tính chất điện tử bề mặt (thay đổi điện dung Helmholtz) của hạt nano trong điện cực nano-xốp so với điện cực thể khối. Hiện tượng dịch chuyển đặc trưng C-V của điện cực TiO_2 nano-xốp về phía thế phân cực dương khi bị chiếu sáng bằng tử ngoại cho cơ sở để giả thuyết về hiện tượng dịch chuyển biên vùng khi bị kích thích trong hệ điện cực TiO_2 nano-xốp.

Hướng dẫn khoa học

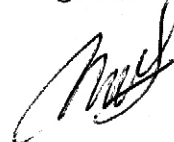
GS. Đàm Trung Đôn



TSKH. Trần Xuân Hoài



Nghiên cứu sinh



Nguyễn Trọng Tĩnh