

**ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI
TRƯỜNG ĐẠI HỌC CÔNG NGHỆ**

Nguyễn Khắc Thuận

**CHẾ TẠO, NGHIÊN CỨU CẤU TRÚC VÀ TÍNH CHẤT
CỦA MỘT SỐ HỆ KIM LOẠI QUÝ CÓ KÍCH THƯỚC
NANO**

Chuyên ngành: Vật liệu và linh kiện nano
Mã số: Chuyên ngành đào tạo thí điểm

TÓM TẮT LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ

Hà Nội - 2017

Công trình được hoàn thành tại: Trường Đại học Công nghệ,
Đại học Quốc gia Hà Nội

Người hướng dẫn khoa học: PGS TS Hoàng Nam Nhật

Phản biện:.....

Phản biện:.....

Phản biện:.....

Luận án sẽ được bảo vệ trước Hội đồng cấp Đại học Quốc gia chấm
luận án tiến sĩ họp tại.....

vào hồi giờ ngày tháng năm

Có thể tìm hiểu luận án tại:

- Thư viện Quốc gia Việt Nam

Trung tâm Thông tin - Thư viện, Đại học Quốc gia Hà Nội

MỞ ĐẦU

Vàng là một trong số các kim loại trơ về mặt hóa học, nó chỉ có thể hòa tan với một số ít kim loại khác như Ag, Cu... Việc hòa tan các nguyên tố phi kim (C; H) vào Au gần như là không thể. Tuy nhiên, các hệ vàng-phi kim và hợp kim vàng-phi kim lại thể hiện nhiều tính chất mới so với hợp chất ban đầu như độ cứng, độ đàn hồi, tính chất điện và từ, cũng như tính chất quang, có thể ứng dụng trong ngành kim hoàn. Vì vậy, bằng việc pha tạp phi kim vào kim loại Au và các hợp kim của nó chúng ta có quyền mong đợi những sự thay đổi đột biến trong các đặc trưng quang-từ-điện của hợp chất pha tạp, dẫn đến những ứng dụng khả dĩ mới. Các nghiên cứu trước đây của nhóm chúng tôi đã chỉ ra một hiệu ứng khá lý thú có thể quan sát được, đó là sự tăng cường mật độ điện tử linh động trong các hệ nano Au dưới tác dụng của ánh sáng nhìn thấy. Hiệu ứng này liên quan đến hiện tượng cộng hưởng plasmon bề mặt và có thể đem lại giá trị ứng dụng lớn trong việc giải quyết bài toán năng lượng. Theo ước đoán, mật độ điện tử linh động có thể tăng gấp 100 lần nếu hạt nano được đặt trong trường điện từ thích hợp. Qua đó có thể được sử dụng để chế tạo các pin mặt trời dựa trên hiệu ứng plasmon. Hiện nay chưa có tồn tại thuật ngữ pin plasmon, và nếu như một loại pin như vậy có thể được chế tạo, hoặc chỉ ra là khả thi, thì sẽ là một bước tiến quan trọng trong việc khai thác năng lượng mặt trời.

Chương 1: TỔNG QUAN VỀ HỢP KIM VÀNG Ở VÙNG KÍCH THƯỚC NANO

1.1. Vật liệu nano vàng

1.1.1. Sơ lược về vật liệu vàng

Vàng (Au) có cấu hình điện tử lớp ngoài cùng là $6s^15d^{10}$. Nguyên tử vàng có năng lượng ở hai mức 5d và 6s xấp xỉ nhau nên

điện tử của vàng có thể dịch chuyển về cả hai trạng thái này. Các điện tử hóa trị trong kim loại vàng rất linh động, tạo nên tính dẻo dai đặc biệt của vàng và phổ của nó cũng khá phức tạp. Năng lượng liên kết $\text{Au} \rightarrow \text{Au}^{3+} + 3\text{e}^- = 1,498 \text{ V}$.

Ở trạng thái khối, vàng kim loại có nhiệt độ nóng chảy khá cao $1064,18^\circ\text{C}$, nhiệt độ sôi là 2856°C , hệ số poisson là 0,44. Tính dẫn nhiệt và dẫn điện của vàng khá tốt và không bị ảnh hưởng về mặt hoá học bởi nhiệt, độ ẩm, ôxy và hầu hết chất ăn mòn, độ dẫn nhiệt của nó là $318 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ và điện trở suất ở nhiệt độ phòng 300K là vào cỡ $2,4 \cdot 10^{-8} \Omega \cdot \text{m}$ chỉ kém bạc và đồng.

1.1.2. Cấu trúc và tính chất của vật liệu nano vàng

Tinh thể vàng có cấu trúc lập phương tâm mặt (fcc), nhóm đối xứng Fm-3m, hằng số mạng $a = 4,078(2)\text{Å}$. Khoảng cách gần nhất giữa hai nguyên tử vàng là $2,884 \text{ Å}$, bán kính vàng nguyên tử được coi là $1,442 \text{ Å}$.

Vàng là một kim loại dẫn điện rất tốt do mật độ điện tử tự do cao trong vùng dẫn (tại nhiệt độ phòng $N=5,90 \times 10^{28} \text{ m}^{-3}$). Nguyên tử Au có sự không cân bằng giữa số điện tử của spin up và spin down nhưng nó lại thể hiện tính nghịch từ ($\chi = -1,42 \cdot 10^{-7} \text{ emu/g.Oe}$). Khi kích thước của vật liệu giảm tới cỡ nm thì tính chất của vật liệu bị thay đổi đột ngột, dung dịch hạt nano Au có thể thể hiện tính sắt từ nhưng cũng có thể thể hiện tính nghịch từ hay siêu thuận từ tùy thuộc kích thước hạt và chất hoạt hóa bề mặt.

1.1.3. Hiện tượng cộng hưởng plasmon bề mặt

Plasmon bề mặt là sự dao động của điện tử tự do ở bề mặt của hạt nano dưới sự kích thích của ánh sáng tới. Cường độ điện trường của plasmon bề mặt giảm nhanh theo quy luật hàm mũ khi xa dần mặt tiếp xúc kim loại - điện môi.

Theo lý thuyết của Mie thì vị trí đỉnh cộng hưởng plasmon phụ thuộc hình dạng, kích thước các hạt; bản chất của vật liệu và môi trường bao quanh hạt nano đó (hằng số điện môi tỉ đối). Hiện tượng SPR là tính chất đặc trưng nhất của các kim loại ở kích thước nano và có tiềm năng lớn ứng dụng trong công nghệ năng lượng.

1.2. Vật liệu Au pha tạp C, H

1.2.1. Cấu trúc và tính chất của vật liệu AuC

Những nghiên cứu về các hợp chất khác nhau có chứa liên kết Au-C chủ yếu là ở lĩnh vực hóa học hữu cơ và cũng chưa có công trình thực nghiệm nào cho thấy sự tồn tại của một hợp chất vô cơ có chứa Au-C và những đặc trưng cấu trúc của nó. Việc chế tạo hợp chất vàng carbid là rất khó khăn, do đó, các đặc trưng của nó vẫn còn ít được biết đến và chưa có nhiều công bố. Theo như chúng tôi biết, có rất ít nghiên cứu có hệ thống về cấu trúc, tính chất, chủ yếu dựa trên tính toán mà chưa có những bằng chứng thực nghiệm, dẫn đến một câu hỏi quan trọng: là những cấu trúc và tính chất của chúng khác nhau giữa vàng nguyên chất và pha tạp như thế nào? Mục đích của tôi là tính toán lý thuyết và nghiên cứu thực nghiệm góp phần vào sự hiểu biết thêm về cấu trúc và tính chất điện tử của các hệ Au pha tạp C có thể hữu ích trong việc tạo ra một loại vật liệu mới cấu trúc nano của AuC.

1.2.2. Cấu trúc và tính chất của vật liệu AuH

Theo nhiều nghiên cứu trên các hệ AuH_n, hệ vàng hydrid là một phân tử nhị nguyên ổn định, mà đặc trưng đã được khảo sát thông qua phổ vùng điện tử (EBS) ở trạng thái khí, tuy nhiên vẫn chưa có bằng chứng cho thấy sự ổn định của vàng hydrid ở trạng thái rắn. Các hợp chất hóa học có chứa liên kết trực tiếp Au-H là rất khó khăn trong quá trình chế tạo và duy trì tính ổn định. Do đó, các dữ

liệu thực nghiệm về các hợp chất chứa liên kết Au-H là rất hiếm. Những nỗ lực để đạt được tinh thể Au-H là chưa cho thấy kết quả và hệ Au-H hầu như chỉ được tập trung nghiên cứu dựa trên các tính toán lý thuyết và đi sâu tìm hiểu cấu trúc của hệ mà chưa đề cập nhiều đến tính chất, sự ảnh hưởng của tạp chất H khi được cấy vào vật liệu Au. Trong luận án này, bằng một phương pháp hiện đại, tôi thực hiện cấy ion H^+ vào màng mỏng Au, từ đó khảo sát một số tính chất của màng mỏng đó và nhận định ảnh hưởng của tạp chất H lên màng mỏng Au ban đầu. Bên cạnh đó tôi cũng tính toán lý thuyết cho một số hệ Au-H để giải thích những kết quả từ thực nghiệm.

1.3. Vật liệu nano hợp kim AuFe

1.3.1. Cấu trúc của hợp kim AuFe

Theo giản đồ pha, Fe và Au hòa tan rất ít vào nhau, trạng thái cân bằng là hỗn hợp của hai pha: fcc rất giàu vàng và bcc rất giàu sắt. Khi hàm lượng Fe dưới 75% thì vật liệu có cấu trúc fcc như của Au và khi hàm lượng Fe lớn hơn 80% thì hợp kim có cấu trúc bcc như của Fe. Nồng độ Fe trong khoảng 75-80% thì hệ có sự biến đổi cấu trúc của mạng tinh thể từ fcc sang bcc. Do sự khác biệt lớn giữa các kích thước nguyên tử của hai nguyên tố Au và Fe, nên việc đồng ngung tụ trong chân không của các nguyên tử sắt và vàng trên bề mặt có thể dẫn đến sự hình thành của 'hợp kim vô định hình đồng nhất, tinh thể rất nhỏ hoặc cũng có thể hình thành nên màng mỏng đa cấu trúc. Tuy nhiên, ở trạng thái kết tinh, hợp kim chỉ tồn tại ở 2 cấu trúc với công thức hóa học $AuFe_3$ và Au_3Fe .

1.3.2. Một số tính chất của hợp kim AuFe

1.3.2.1. Tính chất điện, từ

Vàng là một trong số những kim loại dẫn điện tốt nhất còn sắt là một trong số các kim loại 3d điển hình. Khi kết hợp với nhau,

các hệ hợp kim Au-Fe thể hiện tính chất điện-từ của chúng khá đa dạng, những tính chất này không những phụ thuộc vào thành phần cấu tạo nên hợp kim mà còn phụ thuộc vào cấu trúc, kích thước của hợp kim đó, như: hạt nano, màng mỏng, đám nano, dạng khối... Nhiều nghiên cứu thực nghiệm và lý thuyết đã chỉ ra rằng AuFe₃ thể hiện tính sắt từ trong khi AuFe và Au₃Fe thể hiện tính phản sắt từ. Cũng giống như Au ở kích thước nano, những thông số từ của họ vật liệu này không chỉ phụ thuộc vào thành phần cấu tạo, tỉ lệ phân tử, cách sắp xếp mà còn phụ thuộc cả vào số lượng các hạt, kích thước hạt tạo nên phân tử và môi trường bao quanh vật liệu nano đó.

1.3.2.2. Tính chất quang

Các tính chất quang học của hợp kim AuFe đã được so sánh với các vật liệu riêng rẽ. Nói chung, các phổ σ và ϵ_1 không thể hiện bất kỳ đặc trưng mới nào khác với trong Fe hoặc Au. Những thay đổi trong tính chất quang học của hợp kim Au-Fe là một minh chứng cho sự thay đổi đáng kể năng lượng điện tử gây ra bởi sự chuyển đổi cấu trúc. Tuy nhiên, ở cấu trúc nano, Au có những tính chất quang đặc trưng riêng do hiện tượng SPR, khi kết hợp với Fe, sự lai hóa các obitan sẽ làm ảnh hưởng tới những dao động của đám mây điện tử trên bề mặt hạt nano Au, điều này sẽ dẫn đến sự thay đổi tính chất, màu sắc của vật liệu này ở cấu trúc nano, và cũng cần có những nghiên cứu chi tiết hơn để giải thích hợp lý nhất những vấn đề này.

1.4. Anten siêu cao tần

Dải tần số làm việc của một anten phụ thuộc vào các tham số hình học như kích thước, hình dạng, và cấu trúc của nó. Trong dải ánh sáng nhìn thấy, tất cả các nguồn phát ra ánh sáng đều có thể được coi là các anten phát, và không có sự tương tác giữa các sóng ánh sáng trong quá trình thu phát. Tuy nhiên, khi vật liệu chế tạo

anten ở kích thước nano, các hiệu ứng lượng tử chiếm ưu thế, thì sự độc lập của các sóng này có thể sẽ không tồn tại nữa. Đối với các hạt nano kim loại, các tính chất quang học được tạo ra bởi các điện tử dẫn dẫn dao động tập thể ở tần số nhất định dưới tác dụng của trường bên ngoài (ánh sáng). Đám mây điện tử có hằng số điện môi hiệu dụng âm đóng vai trò như môi trường dẫn điện. Ở đây, chúng tôi nghiên cứu thiết kế, chế tạo một anten siêu cao tần mà bề mặt của nó được phủ bởi các hạt nano kim loại phù hợp cho phép xảy ra hiện tượng SPR. Anten này có thể thể hiện khả năng phản hồi tốt hơn, hoặc phản ứng kém hơn, dưới tác dụng của ánh sáng nhìn thấy. Hiệu ứng plasmon có thể ảnh hưởng đến đặc tính trở kháng, tần số cộng hưởng, băng thông và hiệu suất của ăngten. Do đó, việc thay đổi kích thước hạt nano kim loại, thay đổi bề dày lớp kim loại điện cực có thể ảnh hưởng không nhỏ tới khả năng phản hồi của anten.

Chương 2: CÁC PHƯƠNG PHÁP THỰC NGHIỆM CHẾ TẠO, PHÉP PHÂN TÍCH CẤU TRÚC VÀ TÍNH CHẤT VẬT LIỆU

2.1. Các phương pháp chế tạo mẫu

2.1.1. Chế tạo màng mỏng Au bằng phương pháp hóa học

Nguyên tắc của việc chế tạo màng mỏng Au chính là liên kết các hạt nano Au được tạo ra trong dung dịch trên bề mặt đế thủy tinh đã được tạo mầm, tạo ra các lớp hạt nano Au bám trên bề mặt đế, tùy thuộc nồng độ hạt bám trên đó mà ta có màng Au dày hay mỏng.

Phương pháp này gồm 4 bước chính:

Chế tạo hạt Au kích thước nhỏ (dưới 10nm).

Chức năng hóa bề mặt đế thủy tinh, để nó tích điện dương.

Gắn hạt nano Au lên đế thủy tinh đã chức năng hóa bề mặt.

Phát triển lớp màng Au từ các hạt nano Au đã gắn trên đó.

2.1.2. Chế tạo màng mỏng AuFe bằng phương pháp bốc bay nhiệt trong chân không

Hợp kim Au-Fe được chế tạo bằng cách đun nóng chảy đồng thời 2 kim loại trong lò cao tần chân không. Khối hợp kim được rửa sạch bụi bẩn, dầu mỡ sau đó nó được sấy khô và đưa vào thuyền làm bằng kim loại Tantan rồi gắn vào giá trong buồng chân không để thực hiện bốc bay. Đế Lamén đã được chuẩn bị và gắn vào vị trí đặt đế, có khoảng cách không đổi so với vị trí đặt thuyền, để tránh trường hợp bốc bay không đều khi thực hiện lần tiếp theo.

2.1.3. Phương pháp cấy ion bằng máy gia tốc Pelletron

Chùm ion âm được tạo ra trong máy gia tốc Tandem Pelletron 5SDH-2 sẽ được gia tốc hai lần trước khi cấy ghép. Ngay sau khi ra khỏi nguồn, chùm ion này sẽ đi vào vùng năng lượng thấp của máy gia tốc, các ion âm sẽ bị hút bởi điện tích dương ở điện thế đầu vào và chùm hạt được gia tốc. Sau khi tới buồng gia tốc chính, các ion âm bị mất đi hai hoặc nhiều electron và biến thành các ion dương và di chuyển về tầng gia tốc thứ hai. Sau khi đi ra khỏi buồng gia tốc, chùm ion dương sẽ được hệ nam châm chuyển kênh hướng chúng ra để cấy ghép ion vào các màng mỏng đã gắn sẵn trên bia.

2.2. Các phương pháp phân tích cấu trúc điện tử

Để tính toán cấu trúc điện tử của vật liệu người ta thường sử dụng các phương pháp bán thực nghiệm và các phương pháp tính toán từ các nguyên lý ban đầu (ab initio). Mục đích của những phương pháp này là giải chính xác phương trình Schrodinger cho các toàn bộ hệ điện tử, tất nhiên điều này là không thể đối với những hệ nhiều nguyên tử. Do đó các phương pháp tính toán gần đúng được áp dụng là: gần đúng Born-Oppenheimer (gần đúng đoạn nhiệt), gần

đúng một điện tử, gần đúng bằng các phương pháp số. Bằng các phép gần đúng này ta có thể biểu diễn phương trình hệ nhiều hạt tương tác thành hệ nhiều phương trình 1 điện tử với thế năng hiệu dụng. Do đó, người ta giải quyết bài toán cho từng điện tử trong trường hiệu dụng của hệ. Trong các phương pháp gần đúng này, phương pháp Hartree-Fock và phương pháp phiếm hàm mật độ (DFT) là phổ biến và được ứng dụng rộng rãi hơn cả.

2.3. Các phép đo khảo sát cấu trúc, tính chất vật liệu

- Giảm nhiễu xạ tia X (XRD)
- Kính hiển vi điện tử quét (SEM)
- Phổ tán sắc năng lượng tia X (EDS)
- Đo độ dày màng mỏng bằng phương pháp vạch mũi dò
- Phương pháp bốn mũi dò xác định điện trở suất
- Khảo sát tính chất từ bằng từ kế mẫu rung (VSM)
- Phổ hấp thụ UV-vis
- Phổ huỳnh quang (PL)

Chương 3: CẤU TRÚC VÀ TÍNH CHẤT CỦA MÀNG MỎNG Au VÀ ẢNH HƯỞNG CỦA TẠP CHẤT C, H

3.1. Cấu trúc nano của vàng-carbon

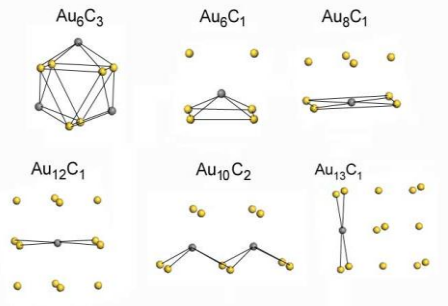
Chúng tôi đã sử dụng các gói phần mềm tính toán từ nguyên lý ban đầu cho các cấu trúc carbid và trạng thái điện tử, dựa trên cơ sở sóng phẳng CASTEP theo phương pháp DFT.

Hình 3.1 biểu diễn các đám AuC điển hình được khảo sát tính toán. Thông số cấu trúc được tối ưu hóa cho kết quả $a = 4,863\text{Å}$. Giá trị này lớn hơn khá nhiều so với của Au tinh khiết nhưng khá phù hợp với giá trị của các hạt nano AuC được hình thành trên graphene ($a = 4,74 \pm 0,14\text{Å}$). Độ dài liên kết của Au-C là $2,106\text{Å}$, lớn hơn 10% so với liên kết Au-C ($1,93\text{Å}$) trong phân tử AuC₂ nhưng

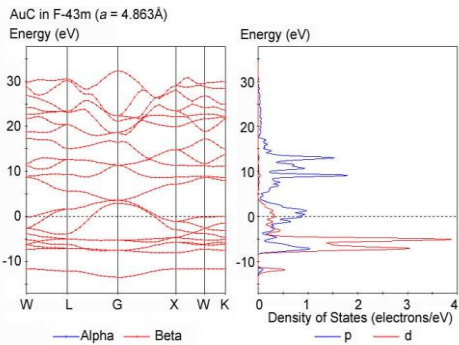
khá phù hợp với giá trị của $Au-C=2,052\text{\AA}$ trong các hạt nano Au-C. Phân tử AuC_2 này thể hiện tán xạ Raman mạnh ở khoảng 2200cm^{-1} ứng với liên kết C-C trong phân tử.

Năng lượng liên kết sẽ phụ thuộc theo khoảng cách Au-C. Sự khác biệt về năng lượng giữa các trạng thái liên kết và không liên kết (trong cấu trúc F-43m) là $18,4\text{eV}$, như vậy cấu trúc F-43m có thể tồn tại như một trạng thái giả ổn định. Trong hình 3.2 chúng tôi biểu diễn cấu trúc vùng và mật độ trạng thái cho ô cơ sở F-43m đã được tối ưu. Cấu trúc vùng cho thấy hệ thể hiện tính kim loại với trạng thái không phân cực spin. Cả hai nguyên tử Au và C đều không có mômen từ. Giá trị Mô đun đàn hồi thu được là 171 GPa đối với cấu trúc AuC này, kết quả này là nhỏ hơn so với một số hệ carbid khác như của FeC (251 GPa) và CrC (229 GPa) nhưng lớn hơn nhiều so với của vàng tinh khiết ($2,6\text{ GPa}$), như vậy khi được pha thêm C, vật liệu vàng có thể cải thiện được độ cứng cũng như độ bền cơ học.

Quá trình chuyển đổi cấu trúc cho thấy các nguyên tử có xu hướng sắp xếp để tạo thành một cấu trúc kim tự tháp Au_4C , giống như khi nguyên tử C được hấp thụ trên bề mặt của 4 nguyên tử vàng

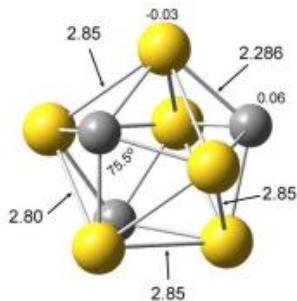


Hình 3.1. Minh họa một số đám $Au_m C_n$



Hình 3.2. Cấu trúc vùng và mật độ trạng thái cho AuC trong cấu trúc F-43m

(hình 3.4). Điều này cũng đã được thể hiện trong các nhóm khác như Au_6C_1 , Au_6C_3 , $Au_{12}C_2$, $Au_{13}C_1, \dots$. Rõ ràng là các nguyên tử C dù được đưa vào vị trí nào trong đám nguyên tử Au sẽ luôn có xu hướng liên kết với 4 nguyên tử Au tạo thành cấu trúc Au_4C . Kết quả cũng chỉ ra rằng các đám Au_6C_3 là một trong số các đám đối xứng, ổn định nhất trong các hệ AuC. Các liên kết Au-Au gần nhất có chiều dài bằng 2,80-2,85 Å, độ dài liên kết Au-C là 2,286 Å, và góc tạo bởi các nguyên tử Au-C-Au là $75,5^\circ$. Mật độ spin trên cả hai nguyên tử Au và C đều là 0 tương ứng với cặp spin lưỡng cực của phân tử.



Hình 3.4. Cấu trúc tối ưu hình học cho đám Au_6C_3

Kết quả chính cho thấy có tồn tại ở vùng nanomet một cấu hình bền của carbid vàng Au_6C_3 với tỉ phần carbon khá cao 2:1. Mặc dù người ta vẫn chưa quan sát thấy cấu trúc đó bằng thực nghiệm, nhưng cũng không thể loại trừ những cấu trúc đó tồn tại trong các vật liệu vàng đơn chất hay hợp kim pha loãng carbon. Khác với carbid Au_2C_2 (tỉ lệ 1:1) là một chất kém bền tại nhiệt độ phòng thì Au_6C_3 lại là hợp chất có độ bền nhiệt rất cao. Khả năng một hợp chất như vậy có tồn tại trong tự nhiên cũng là điều có thể dự đoán trước.

3.2. Cấu trúc và tính chất của hệ Au:H

Màng mỏng Au được cấy ion H bằng máy gia tốc Pelletron với các hàm lượng khác nhau (bảng 3.4).

Bảng 3.4. Hàm lượng H được cấy trong các mẫu màng mỏng Au

Tên mẫu	M0	M100	M150	M200	M250
Hàm lượng H (μC)	0	100	150	200	250
Nồng độ H (%)	0	0,044	0,066	0,088	0,11

3.2.1. Đặc trưng cấu trúc

Hệ màng mỏng trước và sau khi cấy ion đều có cấu trúc fcc và giá trị hằng số mạng giảm dần (từ 4,051; 4,038; 4,025 đến 4,006Å) khi nồng độ H tăng lên. Điều này chứng tỏ việc cấy ion H không làm thay đổi cấu trúc tinh thể của màng mỏng Au mà chỉ làm ô mạng bị nén lại, các nguyên tử Au xích lại gần nhau hơn. Như vậy nguyên tử H gần như không ảnh hưởng quá lớn đến cấu trúc mạng tinh thể của màng mỏng ban đầu.

3.2.2. Một số tính chất của hệ màng mỏng Au:H

3.2.2.1. Tính chất quang

Đỉnh hấp thụ cực đại trong phổ hấp thụ nằm vùng ánh sáng nhìn thấy, đỉnh này mở thành một dải khá rộng nhưng vẫn có cực đại ở khoảng bước sóng 470nm. Ngoài ra còn xuất hiện đỉnh khác ở vùng tử ngoại (khoảng 380nm). Việc cấy ion H vào mẫu màng mỏng Au làm cho cả 2 đỉnh (ở vùng tử ngoại và vùng khả kiến) đều bị dịch chuyển về phía bước sóng cao. Nồng độ H càng cao thì sự dịch chuyển đỉnh hấp thụ càng rõ ràng hơn (bảng 3.5).

Bảng 3.5. Bước sóng đỉnh hấp thụ cực đại của hệ màng mỏng Au:H

	M0	M100	M150	M200	M250
Nồng độ H (%)	0	0,044	0,066	0,088	0,11
λ_{\max} (tử ngoại)	377	378	381	385	385
λ_{\max} (khả kiến)	466	467	468	472	473

3.2.2.2. Tính chất điện

Giá trị điện trở suất của màng mỏng Au đo được là lớn hơn khá nhiều so với vật liệu Au dạng khối ($2,4.10^{-6}\Omega\text{cm}$). Màng mỏng Au sau khi được cấy ion H có khả năng dẫn điện tốt hơn (điện trở suất giảm đi) so với màng mỏng ban đầu (bảng 3.6). Các kết quả từ phép đo Hall cho thấy, nồng độ hạt tải trong các mẫu M150 và mẫu

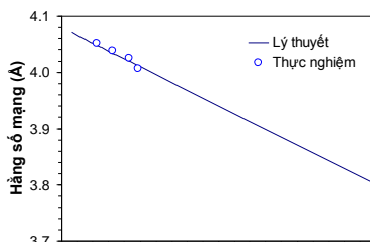
M250 tăng lên lần lượt là 1,5 lần và 1,7 lần so với mẫu không cấy ion trong khi độ linh động của hạt tải điện giảm khi màng mỏng được cấy ion H (lần lượt là 1,44 lần và 1,7 lần).

Bảng 3.6. Điện trở suất của hệ màng mỏng Au:H đo tại 300K

	M0	M100	M150	M200	M250
Nồng độ H (%)	0	0,044	0,066	0,088	0,11
$\rho(10^{-6} \Omega\text{cm})$	6,417	4,685	4,337	3,691	4,366

3.3. Mối liên hệ giữa cấu trúc và tính chất

Nhìn chung có sự co ngắn của các liên kết Au-Au khi một nguyên tử Au bị thay thế bởi H bởi quá trình tái hợp. Hiển nhiên một quá trình tái hợp như vậy làm giảm đáng kể sự chiếm thể tích không gian của đám nguyên tử. Các kết quả được chỉ ra trong Hình 3.16. Có thể thấy các giá trị thực nghiệm và lý thuyết khá khớp nhau trong vùng pha tạp thấp.



Hình 3.16. Sự suy giảm hằng số mạng trong các màng Au:H

Sự co ngắn hằng số mạng cho thấy ảnh hưởng của liên kết hydrid trong mạng tuần hoàn là khác biệt so với trong các phân tử Au:H riêng rẽ có nồng độ H lớn. Các đặc trưng của phổ IR và phổ Raman không xuất hiện trong các đám nguyên tử không có H. Các phổ này phản ánh sự dao động của liên kết hydrid và khẳng định sự tồn tại của liên kết Au-H trong các đám Au_mH_n .

Chương 4: CẤU TRÚC VÀ TÍNH CHẤT CỦA MÀNG MỎNG AuFe VÀ ẢNH HƯỞNG CỦA VIỆC CẤY ION C

Sử dụng phương pháp bốc bay nhiệt trong chân không, tôi thực hiện chế tạo 5 mẫu màng mỏng AuFe₃ có độ dày khác nhau, tên mẫu được đặt theo độ dày của chúng. Các mẫu được cấy ion C với

nồng độ C khác nhau tên những mẫu này được đặt theo hàm lượng C trong mỗi màng mỏng.

Bảng 4.2. Hàm lượng C trong các mẫu màng mỏng AuFe₃

Mẫu AuFe ₃ :C	M1200C50	M580C100	M550C150	M520C200	M380C250
Hàm lượng C (μC)	50	100	150	200	250
Nồng độ C (%)	0,0007	0,003	0,005	0,007	0,012
Nồng độ hiệu dụng C (%)	0,0002	0,0015	0,0025	0,0037	0,011

4.1. Đặc trưng cấu trúc

Hệ màng mỏng sau khi được chế tạo được khảo sát các thông số cấu trúc như độ dày, ảnh SEM, thành phần (EDS) và cấu trúc tinh thể. Các kết quả cho thấy màng mỏng được tạo ra có chất lượng tốt, bề mặt đồng đều, độ dày phụ thuộc vào thời gian bốc bay và thành phần theo công thức AuFe₃. Các màng mỏng có cấu trúc fcc giống như của vật liệu khối. Giá trị hằng số mạng cho các mẫu AuFe₃ thay đổi trong khoảng 3,98Å-4,02Å lớn hơn so với mẫu khối.

Sau khi được cấy ion C, mạng fcc của Au đã bị co lại do sự có mặt của các nguyên tố Fe và C. Đặc biệt là sự xuất hiện đỉnh đại 41,8^o tương ứng với cấu trúc Orthorhombic của tinh thể Fe₂C. Các ion C được cấy vào màng mỏng không phá vỡ cấu trúc vốn có của màng mỏng này mà chỉ xen vào giữa và tạo ra liên kết với nguyên tử Fe ở tại tâm các mặt của ô cơ sở.

4.2. Một số tính chất của hệ màng mỏng

4.2.1. Tính chất điện

Các kết quả cho thấy, với các mẫu màng AuFe₃, điện trở suất của màng tăng lên (độ dẫn điện giảm) khi độ dày màng mỏng giảm đi. Điện trở suất của các màng mỏng sau khi được cấy ion C có xu hướng giảm hơn so với màng mỏng ban đầu. Hiện tượng này xảy ra

khá giống với màng mỏng Au được cấy ion H, tuy nhiên, sự gia tăng độ dẫn điện chỉ < 3%.

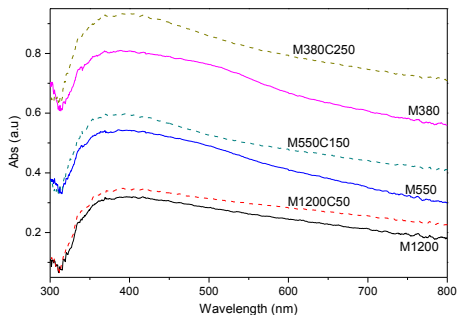
Bảng 4.4. Điện trở suất của hệ màng mỏng AuFe₃ và AuFe₃C

Mẫu	M1200 (M1200C50)	M580 (M580C100)	M550 (M550C150)	M520 (M520C200)	M380 (M380C250)
ρ $10^{-7}\Omega\text{m}$	0,966 (0,965)	2,108 (2,068)	2,437 (2,434)	2,865 (2,846)	3,393 (3,296)
$\Delta\rho$ $10^{-7}\Omega\text{m}$	-0,001	-0,04	-0,003	-0,019	-0,097

Các kết quả từ phép đo Hall cho thấy có sự tương tự với hệ AuH, đó là sự gia tăng nồng độ hạt tải cả trên bề mặt lẫn trong khối màng và sự suy giảm độ linh động của hạt tải điện khi màng mỏng được cấy ion C. Tuy nhiên, nồng độ hạt tải trong các màng mỏng này gia tăng không rõ rệt, chỉ cỡ dưới 1%, trong khi đối với hệ AuH nồng độ hạt tải có thể tăng đến 70%, đó cũng là một nguyên nhân cho sự tăng độ dẫn điện của hệ AuFe₃C là ít hơn so với hệ AuH.

4.2.2. Tính chất quang

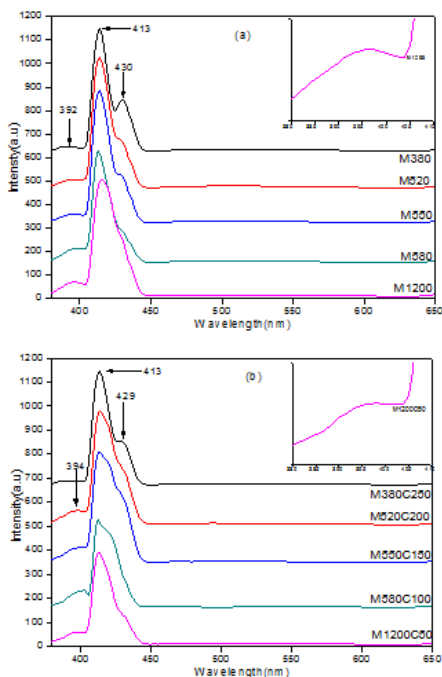
Phổ hấp thụ của hệ AuFe₃ có vai trò chủ yếu do nguyên tử Au, các nguyên tử Fe trong hệ sẽ làm nhiễu loạn dao động của đám mây điện tử trên nguyên tử Au làm giảm khả năng hấp thụ của hệ. Với các mẫu được cấy C, có một sự dịch chuyển khá nhỏ của dải hấp thụ về phía bước sóng dài, và các đỉnh hấp thụ dường như nhọn hơn. Điều này một lần nữa cho thấy rằng, khi C



Hình 4.14. Phổ hấp thụ UV-VIS của các mẫu màng mỏng AuFe₃ và AuFe₃:C

được cấy vào màng mỏng, chúng sẽ kết hợp với các nguyên tử Fe tạo nên liên kết Fe-C, giảm đi độ liên kết giữa Fe-Au, do đó sẽ giảm đi sự nhiễu loạn mà nguyên tử Fe gây ra đối với dao động của các đám mây điện tử trong các nguyên tử Au. Sự co lại của ô mạng cơ sở và hằng số mạng kéo theo sự dịch chuyển đỏ các vạch phổ trong phổ (UV-Vis), phổ (IR) và phổ Raman, đi kèm theo đó là sự tồn tại tương đối yếu của các liên kết hydrid Au-H và carbid Au-C trong các mẫu pha tạp (khi so với các liên kết này trong đơn phân tử hydrid và carbid (độ dài 1,7Å so với 1,5 Å).

Trên phổ phát quang của mẫu xuất hiện 2 đỉnh: Đỉnh phổ có cường độ cao hơn nằm xung quanh bước sóng ~ 413 nm, đỉnh này chủ yếu liên quan đến tái hợp exciton và sự phát xạ của các exciton tự do hay exciton liên kết (sự phát xạ gần đỉnh hấp thụ); Đỉnh phổ với cường độ yếu hơn có cực đại tại bước sóng cỡ 425-430nm ở phía bờ phải của cực đại chính. Sự xuất hiện của đỉnh này chủ yếu quan sát thấy trên các mẫu màng mỏng dày hơn. Như vậy, có thể kết luận rằng, đỉnh phổ này có nguyên nhân chủ yếu do những sai hỏng ở cấu trúc màng mỏng kém xếp chặt và sẽ bị mất đi khi màng mỏng dày lên tức là có



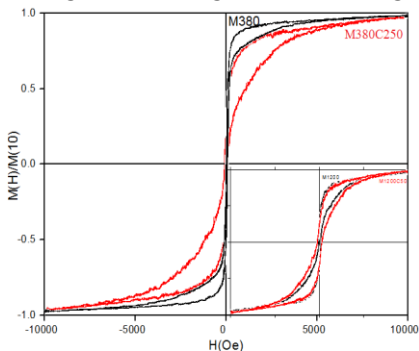
Hình 4.23. Phổ PL của hệ màng mỏng

mức độ xếp chặt cao hơn. Việc xuất hiện đỉnh phát xạ đối với các hệ kim loại là một vấn đề rất đáng chú ý. Tuy nhiên, đối với hệ chứa kim loại Au thì cũng đã có nhiều nghiên cứu cho thấy phổ PL của chúng. Nguyên nhân thực sự của phổ PL đối với vật liệu vàng vẫn còn là một câu hỏi lớn, có thể giải thích hiện tượng này bởi hai cơ chế: hiệu ứng plasmon làm tăng cường chuyển tiếp vùng-vùng và bức xạ từ các hạt plasmon bị kích thích. Một số kết quả cũng cho thấy việc phát xạ từ các hạt plasmon có vai trò quan trọng hơn nhiều so với phát xạ photon trực tiếp thông qua tái hợp điện tử-lỗ trống. Đối với các mẫu được cấy C, đỉnh phụ ở khoảng 430nm đó bị suy giảm khá nhiều về cường độ, điều này cho thấy các mẫu được cấy C có cấu trúc ổn định hơn, mức độ xếp chặt cao hơn so với các mẫu trước đó, kết quả này cũng hợp lý với những kết quả thu được từ phép phân tích cấu trúc vật liệu.

4.2.3. Tính chất từ

Các phép đo $M(T)$ và $M(H)$ của hợp kim dạng khối cho thấy vật liệu thể hiện tính sắt từ mềm, nhiệt độ chuyển pha là $T_C=980K$, các thông số đo được là $M_S=97\text{emu/g}$, $M_R=3,5$, $H_C=42\text{Oe}$. Tính chất từ của AuFe sẽ phụ thuộc vào hàm lượng sắt có trong mẫu, khi trong mạng xuất hiện các nguyên tử Au thì tương tác trao đổi giữa các nguyên tử Fe sẽ bị yếu hơn, từ tính của vật liệu sẽ kém hơn.

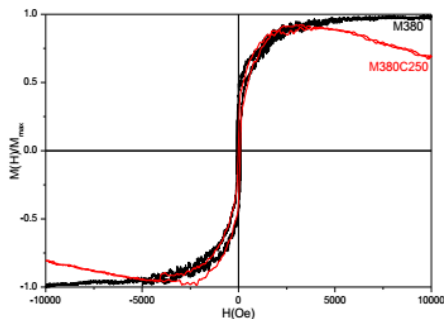
Các màng mỏng cũng thể hiện tính sắt từ giống như vật liệu dạng khối. Hình 4.29 biểu diễn các đường cong từ trễ của các màng mỏng được đo tại



Hình 4.29. Đường cong từ trễ của các mẫu màng mỏng có cùng độ dày

nhiệt độ phòng. Về cơ bản, dáng điệu của các đồ thị là khá giống nhau và các mẫu đều thể hiện tính sắt từ mềm. Tuy nhiên, Các kết quả đo được đối với hệ màng mỏng này cũng đã cho thấy sự khác biệt của các mẫu khi được cấy C. Các thông số từ cho thấy với nồng độ C trong màng mỏng tăng lên, thì độ vuông từ tăng trong khi lực kháng từ lại có xu hướng giảm đi. Sự thay đổi của S và H_C không chỉ phụ thuộc vào nồng độ C trong màng mỏng mà còn phụ thuộc vào độ dày của màng mỏng. So sánh với các kết quả của hệ màng mỏng $AuFe_3$ thì rõ ràng là ion C đã có những ảnh hưởng đáng kể đến từ tính của các màng mỏng này. Sự có mặt của C làm cho đường trễ phình rộng hơn và thấp đi, tức là có xu hướng làm cho vật liệu sắt từ trở nên cứng hơn. Khi đo ở nhiệt độ thấp (82K), những ảnh hưởng của dao động nhiệt lên các mômen từ là kém hơn, tương tác trao đổi giữa các mômen từ là ít bị ảnh hưởng bởi dao động nhiệt.

Trong trường hợp này, các màng mỏng đạt bão hòa từ ở từ trường khá thấp (cỡ 4500Oe). Ở vùng từ trường cao, mẫu $AuFe_3$ vẫn thể hiện tính sắt từ, từ độ gần như đã bão hòa nên sự thay đổi là rất ít, trong khi mẫu $AuFe_3C$ thì từ độ lại có xu hướng giảm so với ở vùng từ trường trung bình (4500-5000Oe) (hình 4.30). Nguyên nhân có thể là do những đóng góp của nguyên tố Au trong hợp chất, Au là vật liệu nghịch từ nên khi từ trường tăng thì từ độ sẽ giảm đi. Ở vùng từ trường thấp, từ độ của hệ bị chi phối mạnh bởi nguyên tố Fe (sắt từ), sau khi đạt bão hòa thì từ độ không tăng nữa, lúc này vai trò của



Hình 4.30. Đường cong từ trễ của các mẫu màng mỏng đo ở nhiệt độ thấp

ít, trong khi mẫu $AuFe_3C$ thì từ độ lại có xu hướng giảm so với ở vùng từ trường trung bình (4500-5000Oe) (hình 4.30). Nguyên nhân có thể là do những đóng góp của nguyên tố Au trong hợp chất, Au là vật liệu nghịch từ nên khi từ trường tăng thì từ độ sẽ giảm đi. Ở vùng từ trường thấp, từ độ của hệ bị chi phối mạnh bởi nguyên tố Fe (sắt từ), sau khi đạt bão hòa thì từ độ không tăng nữa, lúc này vai trò của

Au mới được thể hiện, do đó hình dáng của đường cong từ trễ lúc này sẽ thể hiện vai trò của Au. Tuy nhiên, những hiện tượng này lại không được quan sát trong hệ AuFe₃. Điều này có thể được giải thích thông qua cấu trúc của các màng mỏng này. Khi C được cấy vào màng mỏng, các nguyên tử C liên kết với các nguyên tử Fe, làm suy yếu liên kết Au-Fe, các nguyên tử Au sẽ thể hiện tính chất từ vốn có của nó, trong khi với màng mỏng AuFe₃ thì liên kết Au-Fe là khá chặt chẽ, dẫn đến tính chất từ của Au là không được thể hiện.

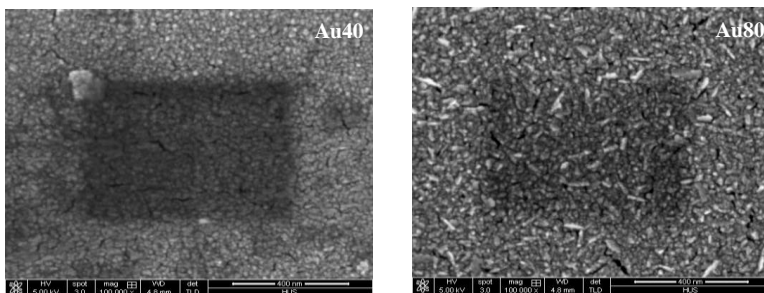
Chương 5: ỨNG DỤNG CỦA MÀNG MỎNG Au TRONG CÔNG NGHỆ SIÊU CAO TẦN

Đặc trưng cấu trúc và một số tính chất của hệ màng mỏng được chế tạo theo phương pháp hóa học ướt đã được tôi khảo sát. Sau đó, tôi nghiên cứu chế tạo một số microwave anten với các màng mỏng Au là điện cực. Tính chất và một vài thông số đặc trưng của những anten này cũng được tôi khảo sát, kết quả cho thấy có sự ảnh hưởng nhất định từ độ dày màng mỏng Au, cũng như trường điện từ bên ngoài đến tính chất của những anten này.

5.1. Đặc trưng cấu trúc của hệ màng mỏng Au

Phương pháp hóa học ướt có thể chế tạo được những màng mỏng Au có độ dày mong muốn từ 10nm đến 100nm với sai số <8%. Những màng mỏng được ngưng tụ trên đế thủy tinh có độ dày khá đồng đều, chất lượng khá tốt, không thấy xuất hiện những mấp mô ở bề mặt đế cũng như bề mặt màng mỏng. Kích thước hạt của màng mỏng tăng lên và hình dáng hạt cũng đa dạng hơn khi độ dày màng mỏng tăng. Kết quả từ phép đo XRD cho thấy, các mẫu mỏng thể hiện sự kết tinh kém, một số đỉnh nhiễu xạ không được quan sát trên giản đồ, trong khi các mẫu dày hơn kết tinh khá tốt, các đỉnh nhiễu xạ khá rõ ràng, các màng mỏng có cấu trúc fcc của tinh thể vàng. Giá

trị hằng số mạng là $4,094\text{\AA}$, lớn hơn một chút so với hằng số mạng của vật liệu Au dạng khối. Điều này cũng dễ hiểu bởi ở cấu trúc nano, mức độ xếp chặt của các nguyên tử là kém hơn khi vật liệu tồn tại dưới dạng khối.



Hình 5.2. Ảnh SEM của các mẫu màng mỏng Au

5.2. Một số tính chất của hệ màng mỏng Au

5.2.1. Tính chất điện

Điện trở của hệ màng mỏng được đo bằng thiết bị đo điện trở 4 mũi dò, điện trở suất của màng tăng lên (độ dẫn điện giảm) khi độ dày màng mỏng giảm đi. Với các màng rất mỏng, điện trở suất thay đổi khá nhiều (2,5-3 lần) và ổn định hơn khi màng dày lên.

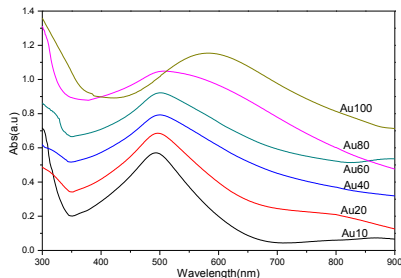
Bảng 5.1. Điện trở suất của hệ màng mỏng Au

Mẫu	Au10	Au20	Au40	Au60	Au80	Au100
$\rho \cdot 10^{-7}(\Omega\text{m})$	>1	22,1	7,775	3,108	2,31	1,864

Với mục đích ứng dụng các màng mỏng này để chế tạo một số anten, các bề mặt Au này sẽ trở thành các điện cực cho các anten đó, nên khả năng dẫn điện của điện cực cũng sẽ đóng một vai trò tương đối quan trọng đối với khả năng phản hồi của anten. Nhìn chung độ dẫn điện của các màng mỏng này đủ lớn để có sự liên kết giữa các hạt và đảm bảo cho sự di chuyển của điện tử trên bề mặt màng mỏng.

5.2.2. Tính chất quang

Hiệu ứng SPR là một trong những tính chất đặc trưng của vật liệu nano Au. Hiện tượng này được thể hiện qua các phổ đặc trưng của vật liệu. Phổ hấp thụ của hệ màng mỏng Au được khảo sát trong dải bức xạ 300-



Hình 5.5. Phổ hấp thụ UV-VIS của hệ màng mỏng Au

900nm ở điều kiện nhiệt độ phòng. Kết quả cho thấy phổ hấp thụ của hệ màng mỏng Au này đều có đỉnh hấp thụ cực đại nằm trong vùng ánh sáng nhìn thấy và vị trí đỉnh này phụ thuộc vào chiều dày màng mỏng tức là phụ thuộc vào nồng độ, kích thước hạt nano Au trên bề mặt đế thủy tinh. Khi độ dày màng mỏng tăng lên, đỉnh hấp thụ dịch về phía bước sóng dài. Trên thực tế, có những cơ chế khác nhau gây ra sự phụ thuộc các thuộc tính SPR vào kích thước của NPs. Mie đã đưa ra các tính toán và chỉ ra rằng phổ hấp thụ của hạt nano vàng ở dạng hình cầu ứng với một mode dao động lưỡng cực của điện tử trên bề mặt hạt vàng. Nếu kích thước của hạt tăng lên thì cực đại hấp thụ ứng với SPR sẽ dịch chuyển về vùng có bước sóng dài, vị trí đỉnh cộng hưởng có thể dịch chuyển đến vài chục nanomet. Tuy nhiên, khi hạt cầu lớn đến một kích thước nào đó, đỉnh cộng hưởng sẽ bị nhòe đi, đến khi vật liệu trở thành dạng khối thì hiện tượng SPR sẽ biến mất. Như vậy đối với hệ màng mỏng này, độ dày màng cũng có vai trò giống như kích thước hạt nano trong phổ hấp thụ của chúng. Có thể nhận thấy vai trò của hiện tượng SPR đối với các màng mỏng Au là vẫn khá quan trọng trong việc tạo nên phổ hấp thụ của chúng, điều này cũng sẽ có những ý nghĩa quan trọng trong việc ứng dụng màng mỏng để chế tạo các microwave anten.

5.3. Chế tạo anten siêu cao tần từ các màng mỏng Au

5.3.1. Phương pháp chế tạo

Các anten này được chế tạo có kích thước (1x1,5cm) gồm:

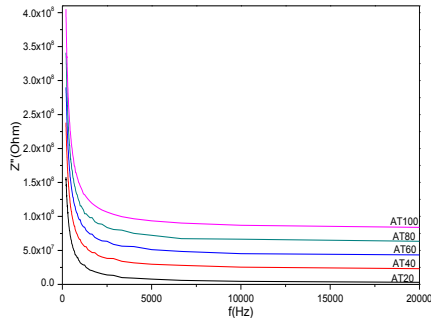
- Đế thủy tinh đóng vai trò là lớp điện môi (dày 1mm).
- Mặt trên được phủ đồng và tạo hình vuông (1x1cm), lớp đồng dày 0,35mm làm một điện cực.
- Mặt dưới là màng mỏng Au, kích thước 1x1,5cm, có độ dày thay đổi là điện cực còn lại. Với độ dày màng mỏng khác nhau tôi chế tạo 6 mẫu anten kí hiệu theo độ dày là: AT10; AT20; AT40; AT60; AT80 và AT100.



Hình 5.7. Cấu tạo của microwave anten (mặt trước; sau và mặt ngang)

5.3.2. Đo trở kháng của anten

Các anten sau khi được chế tạo đã được tôi đo tổng trở để kiểm tra độ ổn định cũng như thông số đặc trưng của chúng. Để tiến hành phép đo, chúng tôi kết nối anten (như một tụ điện) nối tiếp với một hệ mạch ngoài có điện trở R nối với thiết bị đo. Ở đây, hai mặt của anten được hàn trực tiếp vào dây điện kết nối với mạch ngoài để tránh sai số bị ảnh hưởng bởi hiệu ứng tiếp xúc.

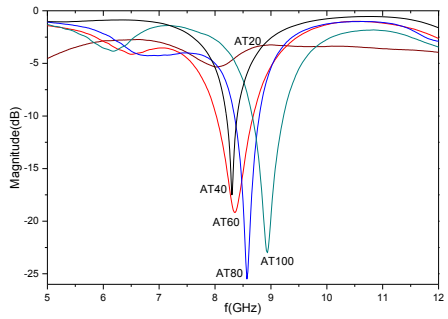


Hình 5.11. Đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của Z'' theo f của 5 mẫu anten

Mỗi anten có vai trò như một tụ điện, nên thành phần Z' (điện trở của toàn mạch) là tôi không xét đến, tôi chỉ tính toán giá trị Z'' (dung kháng của mạch), qua đó tính được thông số điện dung của anten (hình 5.11). Các đường cong cho thấy sự phụ thuộc của Z'' theo tần số của cả 5 mẫu anten là khá tương đồng, chứng tỏ các anten có độ ổn định cao theo phương pháp chế tạo và có thể bỏ qua các sai số do kết nối mạch đo và do ảnh hưởng của môi trường xung quanh. Giá trị điện dung của anten tỉ lệ nghịch với độ dày màng mỏng vàng làm điện cực.

5.3.3. Khảo sát khả năng phản hồi của anten

Hệ số phản hồi của 5 anten này được kiểm tra trong khoảng tần số từ 5-12GHz lần lượt trong điều kiện không chiếu sáng và chiếu sáng. Trong điều kiện được chiếu sáng bằng 8 bóng đèn huỳnh

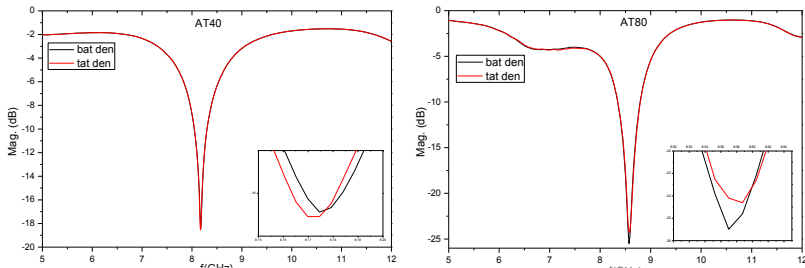


Hình 5.13. Hệ số phản hồi của 5 mẫu anten khi được chiếu sáng

quang công suất 40W cho diện tích phòng là 30m², anten

AT80 cho khả năng phản hồi tốt nhất (26dB), lớn hơn khá nhiều so với anten AT60 và AT40 (<20dB) và cũng lớn hơn so với anten AT100 có độ dày màng lớn nhất. Chỉ với mẫu AT20 là đặc trưng phản hồi rất yếu, tín hiệu phản hồi của đỉnh đặc trưng khá thấp, chỉ cỡ 5dB, giá trị này là gần như không thể được ứng dụng trong chế tạo anten. Có thể thấy rằng, màng mỏng Au80 có cấu trúc bề mặt phù hợp nhất trong việc ứng dụng để chế tạo các microwave anten. Ngoài các yếu tố nói trên, hiện tượng cộng hưởng plamon trên bề mặt màng mỏng cũng đóng một vai trò quan trọng đối với phản hồi của các

anten này khi sử dụng trong điều kiện có trường điện từ bên ngoài. Khi có ánh sáng chiếu tới bề mặt anten, tùy thuộc các yếu tố mà hiệu ứng SPR xảy ra mạnh hay yếu, mật độ điện tử tăng hay giảm ở mỗi anten, do đó khả năng thu phát của các anten cũng sẽ bị ảnh hưởng bởi trường bên ngoài.



Hình 5.14. Phản hồi của các mẫu anten khi có và không có ánh sáng

Các kết quả khảo sát phản hồi cho thấy khả năng phản hồi của các anten AT20; AT40 và AT60 khi bật đèn và khi tắt đèn là không có nhiều khác biệt, anten AT20 cho khả năng phản hồi rất kém; anten AT40 và AT60 thì đỉnh phản hồi khi được chiếu sáng có cường độ nhỏ hơn so với khi không được chiếu sáng khoảng 3,6% và 1,2%. Trong khi với các anten AT80 và AT100 thì tín hiệu phản hồi khi được anten được chiếu sáng đã tăng khoảng 4.2% và 2.6% tương ứng. Mặc dù những sự thay đổi này là rất nhỏ nhưng có thể nhận thấy đã có ảnh hưởng của hiệu ứng SPR đến tín hiệu phản hồi của anten. Từ những kết quả nghiên cứu ảnh hưởng của độ dẫn cũng như ảnh hưởng của hiệu ứng SPs đến đặc trưng phản hồi của anten, chúng ta có thể nhận thấy không phải anten có điện dung lớn thì sẽ cho hệ số phản hồi lớn, mà hệ số phản hồi còn phụ thuộc vào nhiều yếu tố khác. Ngoài ra ta còn cần quan tâm đến yếu tố kích thước hạt và dải tần hoạt động của anten cho phù hợp với mục đích sử dụng.

KẾT LUẬN

- Luận án đã nghiên cứu các hệ nano vàng và nano vàng hợp kim có pha tạp phi kim thể hiện các đặc tính vật lý mới chưa xuất hiện trong các nghiên cứu trước đây. Cụ thể, hệ carbid vàng Au-C dạng khối và dạng đám nano luận án đã chỉ ra rằng cấu trúc tuần hoàn dạng khối tối ưu tồn tại trong nhóm không gian F-43m và đám bền vững Au₆C₃ có độ bền nhiệt động tốt, thể hiện tính kim loại và phi từ. Trong khi đó, các màng mỏng Au được cấy ion H có cấu trúc ổn định, phản hồi quang học tốt, đỉnh hấp thụ cực đại có xu hướng dịch về phía năng lượng thấp theo nồng độ H được cấy. Đặc biệt là độ dẫn của hệ sau khi cấy ion tăng lên và xuất hiện tính sắt từ tốt.

- Hệ màng mỏng AuFe₃ được chế tạo bằng phương pháp bốc bay nhiệt trong chân không, sau đó được cấy ion C bằng phương pháp bắn phá nguồn ion nặng trên máy gia tốc Pelletron tại Khoa Vật lý, trường Đại học KHTN, ĐHQGH, có cấu trúc fcc như của Au nguyên chất. Việc cấy ion C không ảnh hưởng nhiều đến cấu trúc, tuy nhiên sự thay đổi các thông số vật lý khác là khá rõ rệt. Điện trở của mẫu cấy nhỏ hơn so với ban đầu khoảng 4%. Hệ thể hiện tính sắt từ rõ trong tất cả các mẫu. Việc cấy ion C đã làm tăng tính từ cứng của vật liệu. Phổ hấp thụ của hệ mẫu vẫn thể hiện đặc trưng hấp thụ của màng mỏng Au và cộng hưởng Plasmon vẫn được duy trì. Đặc biệt, hệ thể hiện phát quang quang học trong vùng xanh rất rõ.

- Luận án cũng trình bày các kết quả nghiên cứu ứng dụng các anten plasmon trong xác định ảnh hưởng của plasmon lên đặc trưng phản hồi của các anten plasmon. Các anten siêu cao tần được chế tạo từ các màng mỏng Au với độ dày khác nhau có dải tần hoạt động trong vùng GHz. Đặc trưng phản hồi của những anten này phụ thuộc vào độ dày màng mỏng, độ dẫn điện của màng, và cấu trúc nano trên bề mặt của anten. Tuy nhiên, sự thay đổi của hệ số phản hồi là < 5%.

DANH MỤC CÔNG TRÌNH ĐÃ CÔNG BỐ

1. Nguyen Khac Thuan and Hoang Nam Nhat (2014), “Structure and electrical properties of the thin gold leaves fabricated by Vietnam traditional laminating technology”, *Communications in Physics*, Vol. 24, pp. 29-32.
2. Nguyen Khac Thuan, Vuong Van Hiep, Do Thi Kim Anh, Hoang Nam Nhat (2015), “Stable Gold Carbide Nanostructures”, *Materials Transactions*, Vol. 56, No. 9, pp. 1383 - 1386.
3. Nguyen Van Hai, Nguyen Khac Thuan, Nguyen Duc Tho and Dang Thi Thanh Thuy (2015), “Characterization of a Linear-Structured Meta-Antenna”, *Journal of Scientific Research & Reports*, Vol. 4(1), pp. 28-34.
4. Ngo Hai Yen, Dang Thi Thanh Thuy, Nguyen Khac Thuan (2016), “Gold Nanoparticle Based Plasmonic Microwave-antenna”, *American Journal of Applied Scientific Research*, Vol. 2(6), p82-86.
5. Vuong Van Hiep, Do Thi Kim Anh, Nguyen Khac Thuan, Le Van Hong, Hoang Nam Nhat (2016), “Magnetocaloric Effect and Influence of Pressure on Magnetic Properties of La excess Pseudo-Binary Alloys $\text{La}_{1+\delta}(\text{Fe}_{0.85}\text{Si}_{0.15})_{13}$ ”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 120(14), p.142120.
6. Khac-Thuan Nguyen, The-Nghia Nguyen, Trong-Tinh Nguyen, Nam-Nhat Hoang, Tomoyuki Yamamoto (2017), “Effects of implanted C ions on the structure of Fe-Au alloy thin film series”, *Journal of Science of HNUE, Material Sci.*, Vol. 61, No. 9A, p37-41.
7. L. V. Cuong, N. K. Thuan, P. D. Thang (Nov. 2017), “Fabrication of micro-sized magnetic materials by ink-jet printing”, accepted *Materials Transactions*.
8. Nguyen Khac Thuan, Nguyen The Nghia, Nguyen Trong Tinh, Vuong Van Hiep, Tomoyuki Yamamoto, Hoang Nam Nhat (2017), “Gold magnetic alloys: Carbon doped Fe-Au thin films from heavy ion implantation”, submitted *Physica B*.