

# TRÍCH YẾU LUẬN ÁN TIẾN SĨ

**Tên tác giả:** Đỗ Chí Nghĩa

**Tên luận án:** *Mô hình lý thuyết và mô phỏng tính chất plasmonic của một số cấu trúc nano ứng dụng trong quang nhiệt và cảm biến sinh học*

**Ngành khoa học của luận án:** Vật lý

**Chuyên ngành:** Vật lý lý thuyết và Vật lý toán

**Mã số:** 9 44 01 03

**Tên đơn vị đào tạo Sau đại học:** Trường Đại học Sư phạm Hà Nội 2.

## 1. Mục đích và đối tượng nghiên cứu của luận án

### 1.1. Mục đích nghiên cứu của luận án

Mục đích nghiên cứu của bản luận án là phát triển lý thuyết Mie hiện tại để nghiên cứu tính chất plasmonic của các cấu trúc nano từ đơn giản đến phức tạp, được nghiên cứu bởi các nhóm thực nghiệm và mô phỏng. Nghiên cứu sự biến thiên nhiệt độ của các cấu trúc nano plasmonic này dưới tác dụng của laser. Từ đó, tìm ra tính chất và thiết kế mới cho các hệ để tối ưu hóa hiệu quả sử dụng, đồng thời nhằm khai thác và khảo sát cách sử dụng hiệu ứng quang nhiệt của hệ trong các ứng dụng khác nhau.

### 1.2. Đối tượng nghiên cứu của luận án

Nghiên cứu lý thuyết tính chất plasmonic của các cấu trúc nano bao gồm các hạt nano cấu trúc lõi-vỏ như hoa nano, các cấu trúc nano phức hợp chứa graphene bao gồm: graphene trên đế khối, hạt nano SiO<sub>2</sub> bọc graphene và một mạng ô vuông của các đĩa graphene đa lớp đặt trên lớp điện môi mỏng nằm trên đế silicon. Khảo sát hiệu ứng quang nhiệt của các cấu trúc nano plasmonic này dưới tác dụng của laser và đề xuất cách sử dụng hiệu ứng quang nhiệt của hệ trong các ứng dụng thực tiễn khác nhau.

## 2. Các phương pháp nghiên cứu đã sử dụng

Luận án sử dụng phương pháp xây dựng mô hình lý thuyết bán thực nghiệm để nghiên cứu tính chất plasmonic của các cấu trúc nano. Cụ thể là sử dụng lý thuyết Mie và các cải tiến để xác định các phổ quang học cho hệ nano cấu trúc lõi-vỏ, đặc biệt là cho hệ hoa nano và hạt nano bọc graphene. Đối với cấu trúc nano phức hợp gồm mạng ô vuông của các đĩa graphene đa lớp đặt trên lớp điện môi

mỏng nằm trên đế silicon, luận án sử dụng mô hình lưỡng cực kết hợp với gần đúng giả tĩnh để tính độ phân cực của các đĩa graphene trên bề mặt lớp điện môi từ đó có thể tính được tiết diện hấp thụ và dập tắt. Cùng với đó là những tính toán giải tích phức tạp cho hiệu ứng quang nhiệt đã được đưa ra đó là lý thuyết cơ học liên tục và giải các phương trình truyền và tán xạ nhiệt, kết hợp phương pháp tính số, phương pháp mô phỏng và phân tích số liệu bằng các phần mềm Fortran và Matlab. Đối chiếu các kết quả thu được với các dữ liệu thực nghiệm và kết quả nghiên cứu của các tác giả khác.

### **3. Các kết quả chính và kết luận**

#### ***3.1. Các kết quả chính***

- Phát triển thành công lý thuyết Mie toàn phần nghiên cứu tính chất plasmonic (phổ hấp thụ, tán xạ và dập tắt) cho hệ hạt nano lõi-vỏ kích thước bất kỳ. Lý thuyết Mie hoàn chỉnh này có thể tính chính xác được tới hệ có kích thước 160 nm khi so sánh với các số liệu thực nghiệm.

- Luận án đã xây dựng mô hình và tính toán theo lý thuyết Mie toàn phần cho phổ hấp thụ của các hoa nano  $Ag@Fe_3O_4$ , đồng thời tính nhiệt độ tăng lên và trường đàn hồi tạo ra bởi sự sai khác trong giãn nở nhiệt giữa hạt nano và môi trường. Kết quả cho thấy trường đàn hồi có dạng nghịch đảo của lập phương khoảng cách tính từ tâm hạt nano. Kết quả này phù hợp với kết quả thực nghiệm và có thể đề xuất ứng dụng chế tạo máy dò tìm khuyết tật và vùng pha tạp dựa trên cơ chế cơ-quang nhiệt do sự nóng lên của hạt hoa nano dưới tác dụng của ánh sáng laser.

- Nghiên cứu tính chất plasmonic của graphene trên đế khối và của hạt nano được bọc graphene. Nghiên cứu khả năng ứng dụng của linh kiện plasmonic dựa trên cấu trúc của hạt nano  $SiO_2$  bọc graphene bằng việc khai thác các tần số cộng hưởng plasmon trong vùng ánh sáng nhìn thấy và vùng terahertz, có thể được sử dụng để tạo ra các bộ chuyển đổi năng lượng sử dụng hiệu ứng plasmon-điện.

- Đưa ra phương pháp tính lý thuyết cho quá trình tăng nhiệt plasmonic của hệ phức hợp graphene bao gồm một mạng ô vuông của các đĩa graphene đa lớp đặt trên lớp điện môi mỏng nằm trên đế silicon dưới tác dụng của laser hồng ngoại. Kết quả thu được cho thấy sự có mặt của các lớp graphene làm tăng mạnh sự hấp thụ quang học. Nhiệt độ của hệ do chuyển hóa quang năng bị hấp thụ thành nhiệt năng

tăng lên khi số lớp graphene tăng, đồng thời cũng tăng tuyến tính với công suất của chùm sáng chiếu tới và giảm theo nghịch đảo của bình phương độ rộng chùm laser nếu cố định số lớp graphene. Các kết quả này trùng với kết quả thực nghiệm.

### **3.2. Kết luận**

- Các kết quả nghiên cứu của bản luận án là đáng tin cậy, có ý nghĩa khoa học và thực tiễn, đã được công bố trong 02 bài báo trên tạp chí chuyên ngành uy tín trong danh mục ISI: *Physica Status Solidi-Rapid Research Letters* (Q1), *Journal of the Physical Society of Japan* (Q2) và 01 bài trên tạp chí thuộc Scopus *Journal of Science: Advanced Materials and Devices* (Q1).

- Luận án đưa ra một hướng nghiên cứu lý thuyết bán thực nghiệm đầu tiên tại Việt Nam về tính chất plasmonic của các cấu trúc nano và ứng dụng quang nhiệt của nó, để có thể kết hợp với các nhóm thực nghiệm ở Việt Nam nhằm giải thích kết quả và cùng nhau đề xuất ra những ứng dụng mới. Không chỉ dừng lại ở việc tính toán lý thuyết Mie cho hệ lõi-vỏ bình thường với các bề mặt tròn và nhẵn tuyệt đối, phương pháp của chúng tôi cho phép tính toán các hệ lõi-vỏ có bề mặt nhám và có thể áp dụng cho các hệ hoa nano, sao nano. Từ đó, đưa ra một phương pháp nghiên cứu hiệu ứng quang nhiệt tổng quát cho các cấu trúc khác nhau. Phương pháp này khá đơn giản, hiệu quả, đã được đăng trên các tạp chí khoa học chuyên ngành ISI uy tín và hoàn toàn có thể giúp các nhóm thực nghiệm kiểm chứng số liệu và dự đoán kết quả của các cấu trúc nano thế hệ mới. Hướng đi của luận án này chính là tạo ra một cách tiếp cận lý thuyết cho các nhóm thực nghiệm khác nhau mà không cần quá nhiều tài nguyên tính toán.