

TRƯỜNG ĐẠI HỌC MỎ - ĐỊA CHẤT



BÁO CÁO HỌC THUẬT

NĂM HỌC 2024-2025

**NGHIÊN CỨU SỰ GIA TĂNG CỦA TỐC ĐỘ NHÂN HẠT TẢI ĐIỆN
TRONG CẤU TRÚC PLASMONIC TẠO BỞI SILIC, CÁC HẠT
NANO VÀNG VÀ TITAN ÔXIT**

Người báo cáo: Nguyễn Xuân Chung

Đơn vị: Bộ môn Vật lý, Khoa Khoa học Cơ bản

Hà Nội, 6/2025

BÁO CÁO HỌC THUẬT HỌC KỲ II, NĂM HỌC 2024-2025

Mục đích: Trình bày các kết quả nghiên cứu bằng phương pháp thực nghiệm và mô phỏng về hiện tượng nhân hạt tải điện khi sử dụng cấu trúc plasmonic tạo bởi các vật liệu silic vô định hình, các hạt nano vàng và titan oxit.

Tên báo cáo:

NGHIÊN CỨU SỰ GIA TĂNG CỦA TỐC ĐỘ NHÂN HẠT TẢI ĐIỆN TRONG CẤU TRÚC PLASMONIC TẠO BỞI SILIC, CÁC HẠT NANO VÀNG VÀ TITAN ÔXIT

Nguyễn Xuân Chung

Bộ môn Vật lý, khoa Khoa học Cơ bản

Tóm tắt

Trong báo cáo này, các tác giả trình bày kết quả nghiên cứu sự tăng cường của tốc độ nhân hạt tải điện trong cấu trúc plasmonic được cấu tạo từ lớp mẫu chứa hạt nano vàng, titan oxit và silic bằng phương pháp mô phỏng. Các tác giả sử dụng ngôn ngữ lập trình Matlab để tính toán, so sánh tốc độ nhân hạt tải của hai cấu trúc plasmonic dựa trên phổ hấp thụ năng lượng: Hạt nano vàng khuếch tán trong các hạt TiO_2 và các nguyên tử silic vô định hình khuếch tán trong các hạt vàng cùng các hạt TiO_2 . Kết quả cho thấy cấu trúc thứ hai cho tốc độ hạt tải lớn hơn dưới sự kích thích của phổ năng lượng mặt trời. Kết quả cho thấy cấu trúc nói trên có nhiều triển vọng nâng cao hiệu suất pin mặt trời.

1. MỞ ĐẦU

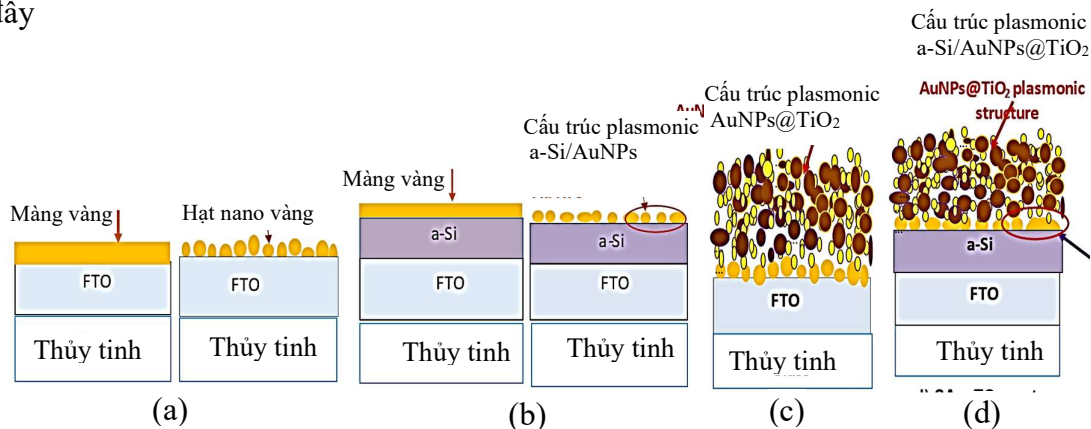
Gần đây, vấn đề an ninh năng lượng luôn là chủ đề thu hút sự quan tâm của nhiều nhà khoa học cũng như các nhà công nghệ. Năng lượng tái tạo, như năng lượng mặt trời, năng lượng gió, năng lượng thủy triều luôn là các chủ đề được tập trung nghiên cứu. Để thu được năng lượng từ các nguồn nói trên, việc nghiên cứu tìm ra các vật liệu để chế tạo các thiết bị biến đổi năng lượng với hiệu suất cao là việc quan trọng. Đối với năng lượng mặt trời, pin mặt trời hiện tại vẫn còn nhiều hạn chế do giá thành cũng như hiệu suất biến đổi năng lượng. Hiệu suất thấp của pin mặt trời bắt nguồn từ nhiều nguyên nhân như khả năng hấp thụ ánh sáng mặt trời thấp, quá trình tái hợp của các hạt tải được sinh ra, trạng thái bề mặt của các điện cực, sự thất thoát năng lượng do tỏa nhiệt ... Đối với việc hạn chế thất thoát do trạng thái bề mặt của các điện cực, việc sử dụng các công nghệ chế tạo điện cực tiên tiến kết hợp với các kim loại dẫn điện tốt như vàng, bạc ... sẽ làm nâng cao giá thành của pin. Quá trình tỏa nhiệt của pin phụ thuộc vào chất lượng của vật liệu, với pin có điện

trở nội thấp thì thường yêu cầu cấu trúc mạng tinh thể của pin phải hoàn hảo, tránh các tán xạ điện tử. Trên thực tế có nhiều loại pin mặt trời có giá thành thấp và hiệu suất ở mức độ tương đối thấp như pin DSSC (Dye-sensitized solar cell) cho hiệu suất khoảng 11% [1]. Các pin mặt trời có hiệu suất cao được nghiên cứu gần đây như pin đơn tinh thể silic cho hiệu suất 26,1%, hiệu suất này gần tới giá trị giới hạn tính theo lý thuyết 29% [2]. Bên cạnh đó, các loại pin khác như pin perovskite [3], pin Tandem [4] cho hiệu suất lớn hơn nhưng giá thành và độ bền bị hạn chế. Pin mặt trời sử dụng cấu trúc plasmonic là một trong những giải pháp nhằm làm tăng hiệu suất của pin mặt trời [5]. Cấu trúc plasmonic của pin có tác dụng “tận dụng tối đa” lượng ánh sáng tới, giúp cho pin tăng cường khả năng hấp thụ ánh sáng từ vùng cực tím đến vùng hồng ngoại gần, do vậy số lượng hạt tải tự do sinh ra được tăng lên và làm cho hiệu suất tăng theo. Trong báo cáo này, các tác giả thu được kết quả về sự gia tăng hạt tải điện trong các cấu trúc plasmonic dưới tác dụng của ánh sáng mặt trời AM 1.5 bằng phương pháp mô phỏng.

2. NỘI DUNG CHI TIẾT

2.1. Các bước chế tạo mẫu

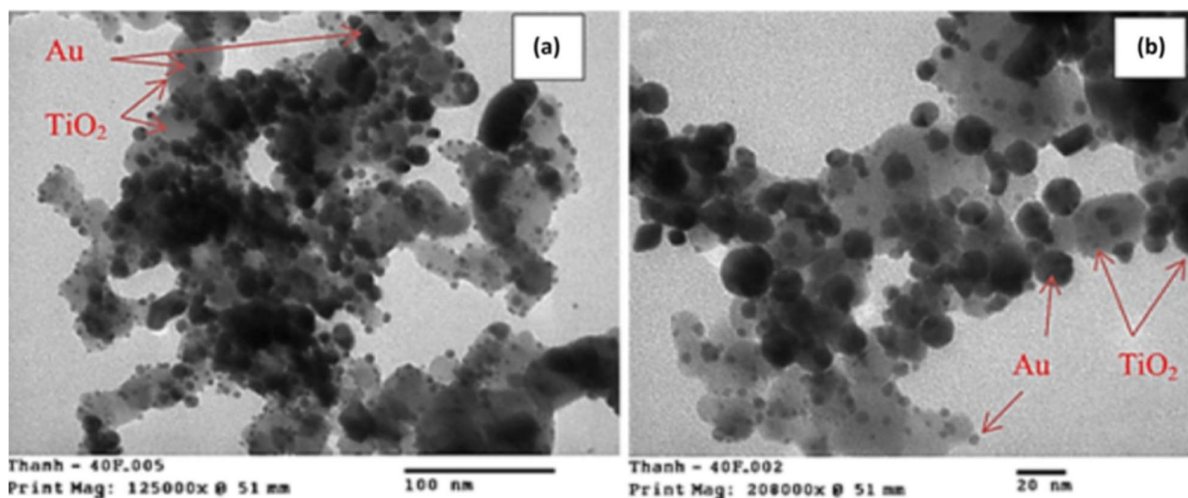
Trong báo cáo này, cấu trúc plasmonic được tạo thành từ các hạt vàng, các nguyên tử silic vô định hình và các phân tử TiO_2 . Ban đầu, các đế thủy tinh được sử dụng, trên mặt đế có một lớp FTO (Fluorine-doped oxide), các đế này được Aldrich Inc. sản xuất [6,7]. Đế có điện trở suất khoảng $7\Omega/\text{cm}^2$. Các mẫu được đặt tên FA, SA tương ứng với cấu trúc plasmonic $\text{Au}@/\text{TiO}_2$ và $\text{a-Si}/\text{Au}@/\text{TiO}_2$. Quá trình tạo mẫu được thể hiện trên Hình 1 dưới đây



Hình 1. Cấu trúc mẫu FA (a), SA(b) trước và sau khi nung, các mẫu FA (c) và SA(d) sau khi các phân tử TiO_2 được thêm vào bằng phương pháp sol-gel.

Đối với mẫu FA, màng vàng được tạo ra bằng phương pháp phún xạ trên mặt FTO, trong khi đối với các mẫu SA, màng vàng được phún xạ trên lớp màng silic vô định hình. Sau khi được nung ở nhiệt độ 350°C , các hạt nano vàng được hình thành trên các mẫu này. Mẫu SA có lớp tiếp xúc giữa silic vô định hình (a-Si), các mẫu SAxxTO có thêm lớp hạt nano vàng với TiO_2 ($\text{AuNPs}@/\text{TiO}_2$), trong khi các mẫu FA có sự hình thành lớp tiếp xúc

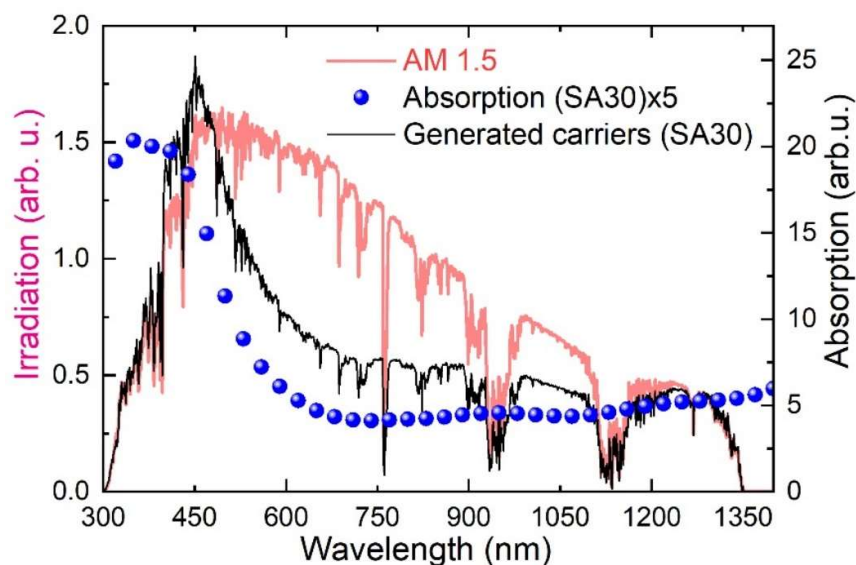
giữa FTO và các hạt nano vàng, xx thể hiện thời gian (phút) phún xạ lớp màng vàng. Các mẫu FA có chứa TiO_2 được thêm TO ở cuối tên mẫu. Các mẫu thu được được quan sát dưới kính hiển vi điện tử truyền qua, hình ảnh được thể hiện ở Hình 2 dưới đây. Các hạt nano vàng được hình thành bên trong các phân tử TiO_2 .



Hình 2. Ảnh TEM của mẫu FA (a) và mẫu SA (b) sau khi kết thúc quá trình chế tạo. Các hạt vàng xuất hiện trong lõi các hạt TiO_2 tạo nên cấu trúc plasmonic AuNPs@TiO_2

2.2. Phương pháp mô phỏng tốc độ sinh hạt tải điện

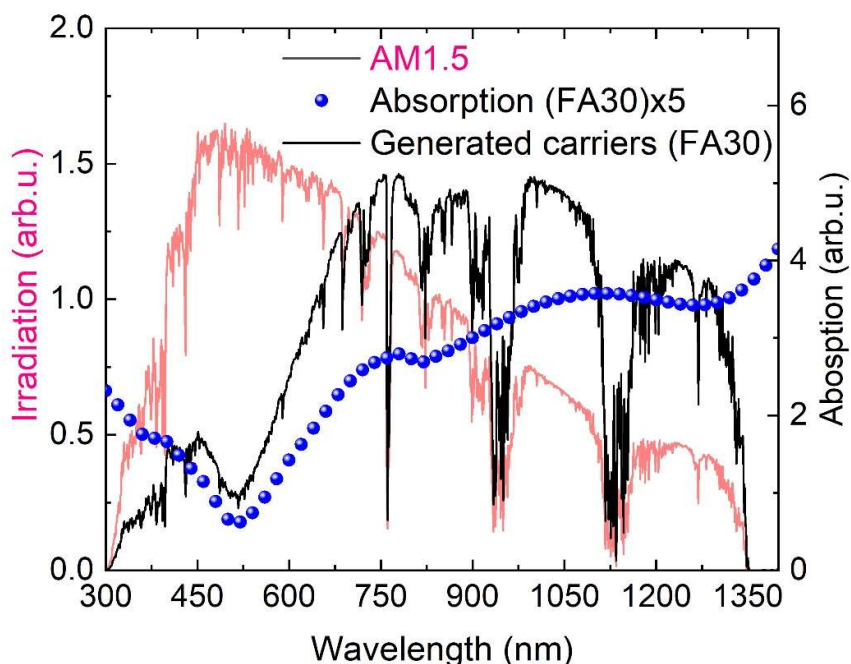
Để tính toán được tốc độ sinh hạt tải điện đối với hai cấu trúc mẫu FA và SA, phổ hấp thụ được đo kết hợp với phổ phát xạ mặt trời AM1.5. Hình 3 dưới thể hiện phổ hấp thụ của mẫu SA (được nhân 5 lần để dễ quan sát hơn), và số lượng hạt tải điện được sinh ra (đường màu đen) theo bước sóng kích thích.



Hình 3. Phổ phát xạ năng lượng mặt trời AM1.5 (màu đỏ), phổ hấp thụ của mẫu SA30 được nhân lên 5 lần (chấm xanh) và đường biểu diễn số hạt tải sinh ra trên mỗi đơn vị bước sóng kích thích (đường màu đen)

Trong phương pháp mô phỏng, số cặp điện tử- lỗ trống sinh ra được giả thiết bằng số điện tử được kích thích trên vùng dẫn. Số điện tử trên vùng dẫn được tính bằng tích giữa số photon kích thích ứng với mỗi đơn vị bước sóng và độ hấp thụ của mẫu đối với bước sóng đó.

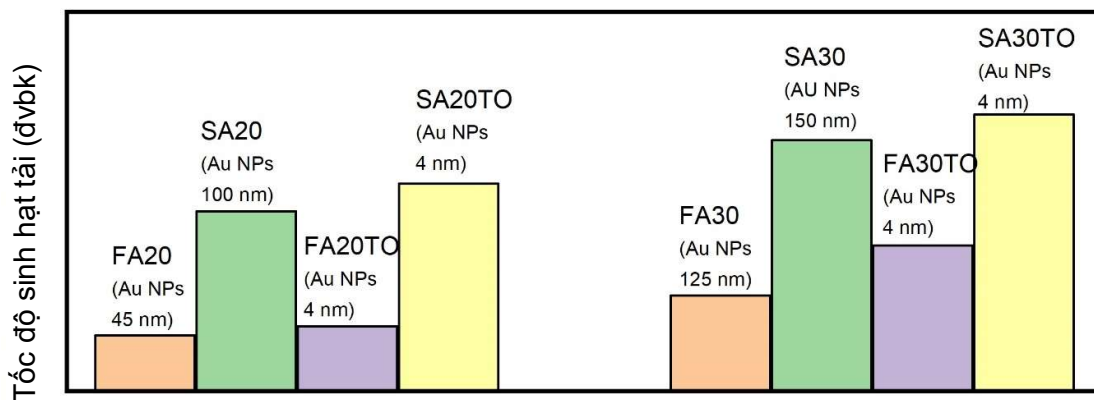
Kết quả tương tự đối với mẫu FA30 được thể hiện trên Hình 4 dưới đây.



Hình 4. Phổ phát xạ năng lượng mặt trời AM 1.5 (màu đỏ), phổ hấp thụ của mẫu FA được nhân lên 5 lần (chấm xanh) và đường biểu diễn số hạt tải sinh ra trên mỗi đơn vị bước sóng kích thích (đường màu đen)

2.3. Các kết quả

Từ các Hình 3 và Hình 4, sự phụ thuộc của số lượng hạt tải điện sinh ra trong mỗi đơn vị thời gian ứng với mỗi đơn vị bước sóng được thể hiện trên toàn dải bước sóng từ vùng cực tím đến vùng hồng ngoại gần. Tổng số hạt tải điện sinh ra trong mỗi đơn vị thời gian trên toàn dải bước sóng kích thích được tính bằng diện tích tạo bởi đường màu đen với trục bước sóng. Kết quả so sánh số hạt tải điện sinh ra đối với 2 cấu trúc được thể hiện trên Hình 5. Kết quả cho thấy các mẫu SA luôn cho tốc độ sinh hạt tải điện lớn hơn các mẫu FA, điều này có thể lý giải từ phổ hấp thụ của các mẫu SA và FA. Các mẫu SA luôn hấp thụ cao hơn so với mẫu FA. Điều này có thể lý giải do có sự có mặt của lớp tiếp xúc giữa a-Si và các hạt nano vàng và TiO₂ tạo nên cấu trúc plasmonic, tăng cường sự hấp thụ ánh sáng trong dải bước sóng của năng lượng phát xạ của mặt trời.



Hình 5. Kết quả tính toán tốc độ sinh hạt tải điện đối với các mẫu SA và FA. Ký hiệu TO thể hiện các mẫu có chứa các phân tử TiO_2 .

Kết quả trên cho thấy cấu trúc plasmonic a-Si/AuNPs và a-Si/AuNPs@ TiO_2 có nhiều khả năng ứng dụng trong việc tăng cường hiệu suất chuyển đổi của pin mặt trời đối với các pin sử dụng hiệu ứng plasmonic.

3. KẾT LUẬN

Các tác giả đã xây dựng mô hình và mô phỏng tính toán tốc độ sinh hạt tải điện của các cấu trúc plasmonic dưới dụng kích thích của năng lượng mặt trời. Cấu trúc plasmonic a-Si/AuNPs @ TiO_2 cho tốc độ sinh hạt tải điện nhiều nhất so với các cấu trúc khác. Sự gia tăng tốc độ sinh hạt tải điện của thể được giải thích thông qua sự tăng cường hấp thụ ánh sáng của cấu trúc plasmonic này. Từ kết quả này, các nhà sản xuất pin mặt trời có thể sử dụng cấu trúc này trong việc chế tạo pin năng lượng mặt trời với hiệu suất cao hơn so với các pin plasmonic hiện tại với giá thành tốt và độ ổn định cao.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Review on dye-sensitized solar cells (DSSCs): Fundamental concepts and novel materials, J. Gong, J. Liang, K. Sumathy, Renewable and Sustainable Energy Reviews 16(8), 2012.
2. High efficiency silicon solar cell, A. Blaker, N. Zin, K.R. McIntosh, K. Fong, Energy Procedia 33, 2013.
3. The emergence of perovskite solar cells, M.A. Green, A.H. Baillie, Nature Photonics 8(43), 2014.
4. Organic tandem solar cells: A review, T. Ameri, G. Dennler, C. Lungenschmied, C.J. Brabec, Royal Society of Chemistry 2, 2009.
5. Plasmonic solar cells, K.R. Catchpole, A. Polman, Optics Express 16(26), 2008.

6. Investigating the contribution effect of carrier generation rates to enhance optical absorption in single /a-Si/AuNPs/, /AuNPs@TiO₂/ plasmonic structures and their dual combined /a-Si/AuNPs/AuNPs@TiO₂/ plasmonic structure for possible application in solid-state plasmonic solar cells, D.K. An, N.X. Chung, T.T. Nguyen, [Journal of Materials Science: Materials in Electronics](#) 36(4), 2025.
7. The synthesis and some optical absorption investigation of the dual combined glass/FTO/a-Si/Au NPs/Au NPs@TiO₂ plasmonic structure, K.A. Dao, T.T. Nguyen, N.X. Chung, [Journal of Materials Science: Materials in Electronics](#), 34 (282), 2023.