**TÓM TẮT THÔNG TIN VỀ LUẬN ÁN**

Tên đề tài luận án: Nghiên cứu tính chất nhiệt điện của màng mỏng ZnO đồng pha tạp Ga và In.

Ngành: Khoa học vật liệu

Mã số ngành: 62440122

Họ tên nghiên cứu sinh: Phạm Thanh Tuấn Anh

Khóa đào tạo: 2017

Người hướng dẫn khoa học: PGS.TS. Trần Cao Vinh, GS.TS. Phan Bách Thắng

Cơ sở đào tạo: Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM

**1. TÓM TẮT NỘI DUNG LUẬN ÁN**:

Mục đích của luận án nhằm giới thiệu, nghiên cứu và khảo sát tính chất nhiệt điện (thermoelectric) của vật liệu ZnO đồng pha tạp In và Ga ở cả dạng khối và màng mỏng, với khả năng chuyển đổi hiệu quả nhiệt thải thành năng lượng điện ở vùng nhiệt độ hoạt động trung bình và cao. Đặc biệt, cấu trúc và tính chất nhiệt điện của màng mỏng dựa trên nền ZnO được thay đổi thông qua điều khiển nồng độ hạt tải, độ linh động, mức năng lượng Fermi, khối lượng hiệu dụng mật độ trạng thái (density-of-state effective mass) và các sai hỏng mạng tinh thể trong màng. Nghiên cứu này đóng góp các lý luận quan trọng hướng tới phát triển các linh kiện nhiệt điện thực tế, nhất là linh kiện màng mỏng nhiệt điện. Hơn nữa, ảnh hưởng của các tạp chất lên các cơ chế truyền dẫn hạt tải và phonon được làm rõ. Các lý giải này là điều cần thiết để định hướng lựa chọn các tạp chất khác trong việc tăng cường phẩm chất nhiệt điện của vật liệu ZnO.

**2. NHỮNG KẾT QUẢ MỚI CỦA LUẬN ÁN**:

* 1. Vật liệu khối ZnO với tỷ lệ pha tạp In/Ga/Zn = 0.5/4.5/95.0 được thiêu kết theo quy trình một bước cho độ dẫn nhiệt thấp nhất. Pha spinel đóng vai trò lớn trong việc giảm độ dẫn nhiệt mạng tinh thể. Hơn nữa, nhờ vào khả năng bù trừ khuyết kẽm của nguyên tử tạp chất từ pha spinel vào mạng chủ ZnO, mẫu khối còn đạt hệ số Seebeck cao nhất, dẫn đến hệ số công suất nhiệt điện PF = 317.5 µW/mK2 tại 773 K. Kết quả mở ra khả năng điều khiển tính chất nhiệt điện thông qua sự phân tách pha thứ cấp.
  2. Tính chất nhiệt điện của màng mỏng có thể kiểm soát thông qua điều khiển sai hỏng mạng, bằng hai cách: đồng pha tạp và xử lý nhiệt. Đồng pha tạp gây ra các sai hỏng mạng tinh thể và các vùng định xứ làm giảm độ dẫn nhiệt. Việc xử lý nhiệt chủ yếu làm thay đổi tỷ lệ các sai hỏng mạng. Sự kết hợp hai phương pháp dẫn đến giá trị độ dẫn nhiệt thấp ~0.95 W/mK và chỉ số phẩm chất nhiệt điện ZT = 0.186 ở 573 K.
  3. Sự kết hợp In và Ga ở các tỷ lệ khác nhau không chỉ tối ưu nồng độ hạt tải tương ứng với vị trí mức Fermi, mà còn điều khiển sai hỏng mạng đóng góp vào các cơ chế tán xạ. Hơn nữa, sự bù lấp của In3+ thay thế Zn2+ ở nhiệt độ cao làm tăng khối lượng hiệu dụng mật độ trạng thái do sự làm phẳng vùng dẫn. Màng mỏng ZnO đồng pha tạp In và Ga đạt giá trị ZT= 0.2, tiệm cận vùng ZT cao (ZT ≥ 0.2) của khối ZnO có cấu trúc nano.
  4. Việc xác định độ dẫn nhiệt của màng mỏng là một thách thức vì độ truyền qua cao của xung nhiệt cũng như độ khuếch tán nhiệt rất nhanh dẫn đến không thể đo bằng phương pháp xung laser thông thường. Luận án này sử dụng kỹ thuật đo phản xạ nhiệt phân giải thời gian với độ nhạy và độ chính xác cao.

**3.** **CÁC ỨNG DỤNG/ KHẢ NĂNG ỨNG DỤNG TRONG THỰC TIỄN HAY NHỮNG VẤN ĐỀ CÒN BỎ NGỎ CẦN TIẾP TỤC NGHIÊN CỨU**

i. Giới thiệu vật liệu màng mỏng IGZO với phẩm chất nhiệt điện được tối ưu, có thể tiếp tục được công bố và mở rộng cho các tạp chất khác khi pha tạp vào màng ZnO.

ii. Vật liệu khối IGZO có thể ứng dụng trong các pin nhiệt điện.

iii. Vật liệu màng mỏng IGZO có thể được ứng dụng trong các thiết bị có kích thước nhỏ, như cung cấp nguồn điện cho IoT, hoặc trong các thiết bị và cảm biến đeo với nguồn nhiệt từ cơ thể người.

|  |  |
| --- | --- |
| **TẬP THỂ CÁN BỘ HƯỚNG DẪN** | **NGHIÊN CỨU SINH** |

**PGS.TS. Trần Cao Vinh GS.TS. Phan Bách Thắng Phạm Thanh Tuấn Anh**

**XÁC NHẬN CỦA CƠ SỞ ĐÀO TẠO**

**HIỆU TRƯỞNG**

**THESIS INFORMATION**

**Thesis title:** Studying thermoelectric properties of Ga and In co-doped ZnO thin films.

**Speciality:** Material Science

**Code:** 62440122

**Name of PhD Student:** Pham Thanh Tuan Anh

**Academic year:** 2017

**Supervisors:** Assoc. Prof. Dr. Tran Cao Vinh

Prof. Dr. Phan Bach Thang

**At:** VNUHCM - University of Science

**1. SUMMARY**:

This thesis aims to introduce, investigate, and optimize thermoelectric In and Ga co-doped ZnO materials in both bulk and thin-film forms which can convert efficiently waste heat to electricity at medium- and high-temperature regions. In particular, the structural and thermoelectric properties of the ZnO-based thin films are modified by controlling carrier concentration, mobility, Fermi level, density-of-state effective mass, and lattice defects in the films. This research is an important step toward fabricating real TE modules, specifically thin-film devices. Furthermore, the effects of dopants on electrical and phonon transport mechanisms are clarified. This understanding can orient for other dopants in thermoelectric ZnO-based materials.

**2. NOVELTY OF THESIS**:

1. The one-step prepared IGZO bulks which were directly sintered at 1400oC obtain the lowest thermal conductivity and the highest power factor, especially at high temperature. The spinel phase segregation is found to be the main reason. The analysis of secondary phase-controlled TE performance in terms of DOS effective mass, weighted mobility, and quality factor can be viewed as a novel approach for ZnO-based system.
2. It is an effort to inherit good properties of the bulks, combined with the advantages of thin films, to optimize the TE performance of the IGZO films. The TE properties of the IGZO films are controlled through lattice-defect engineering that was conducted in two ways: dual-doping and post-thermal treatment. The combination of the dual-doping effect and post-thermal treatment is found to reduce significantly the thermal conductivity of the IGZO thin films to 0.95 W/mK, leading to the highest figure of merit *ZT* = 0.186 at 573 K.
3. Band structure modification is found one of the state-of-the-art strategies to control electrical and thermal transport properties, and optimize the TE performance. Tuning In and Ga contents is found to coupling modification of Fermi level and band flattening, leading to the *ZT* of 0.2 and *PF* of 745.2 µW/mK2 at 573 K for the IGZO films deposited from the In0.01Ga0.04Zn99.95O compound. It proposes that the IGZO thin films approach the high *ZT* region (*ZT* ≥ 0.2) of advanced nanostructured ZnO-based bulks.
4. The determination of thermal conductivity is normally challenging for thin-film materials due to their transparency, and ultra-fast thermal diffusivity, which cannot be measured by common laser flash analyses. In this thesis, the thermal diffusivity and conductivity of the IGZO thin films were estimated using the time-domain thermoreflectance (TDTR) technique with high sensitivity and accuracy.

**3**. **APPLICATIONS/ APPLICABILITY/ PERSPECTIVE**

1. The introduction of novel IGZO thin films with optimized TE performance can continue to be published, and extend to other dopants in ZnO-based materials.
2. The IGZO bulks can be applied for thermoelectric power generation batteries.
3. The IGZO thin films can be used in miniaturized devices, such as power supply for the Internet of Things and for powering wearable electronics/sensors powered by body heat.

|  |  |
| --- | --- |
| **SUPERVISORS** | **PhD STUDENT** |

**Assoc. Prof. Dr. Tran Cao Vinh Prof. Dr. Phan Bach Thang Pham Thanh Tuan Anh**

**CERTIFICATION**

**UNIVERSITY OF SCIENCE**

**PRESIDENT**