

**CHẾ TẠO, NGHIÊN CỨU VÀ KHẢ NĂNG ỨNG DỤNG
CỦA VẬT LIỆU PEROVSKITE CÓ HỆ SỐ NHIỆT ĐIỆN TRỞ DƯƠNG**

1. Họ và tên nghiên cứu sinh: Lương Văn Việt
2. Giới tính: Nam
3. Sinh ngày 03/ 02/ 1971
4. Nơi sinh: Hải Dương
5. Quyết định công nhận nghiên cứu sinh số 2259/SĐH ngày 07 tháng 12 năm 2006 của Giám đốc Đại học Quốc gia Hà Nội.
6. Các thay đổi trong quá trình đào tạo: Không
7. Tên đề tài luận án: "Chế tạo, nghiên cứu và khả năng ứng dụng của vật liệu perovskite có hệ số nhiệt điện trở dương".
8. Chuyên ngành: Vật lý Chất rắn.
9. Mã số: 62 44 07 01
10. Cán bộ hướng dẫn khoa học: GS.TS Bạch Thành Công
11. Tóm tắt các kết quả mới của luận án:

Đã chế tạo thành công vật liệu perovskite sắt điện dạng $Ba_{1-x-y}Sr_xY_yTiO_3$ có hệ số nhiệt dương của điện trở (PTCR) bằng công nghệ gốm truyền thống: Hiệu ứng PTCR thu được khá lớn (hệ số nhiệt dương của điện trở đạt tới $1,1 \cdot 10^3\% K^{-1}$ ở nhiệt độ $77^\circ C$ trong mẫu $Ba_{0,936}Sr_{0,06}Y_{0,004}TiO_3$), nhiệt độ chuyển pha kim loại - điện môi T_{MI} và nhiệt độ chuyển pha T_C khoảng $120^\circ C$.

Đã sử dụng mô hình polaron bán kính nhỏ, mô hình khoảng nhảy biến thiên để mô tả độ dẫn điện trong hệ vật liệu $Ba_{1-x-y}Sr_xY_yTiO_3$ ($x = 0,04 - 0,06$, $y = 0,004$) trong vùng nhiệt độ lớn hơn nhiệt độ chuyển pha kim loại- điện môi (T_{MI}) và xác định được năng lượng kích hoạt quá trình dẫn điện nằm trong khoảng từ $0,15eV$ đến $0,34eV$. Giá trị này khá phù hợp với các kết quả công bố của các tác giả khác. Kết quả khảo sát sự phụ thuộc của điện trở vào nhiệt độ cho thấy biên hạt đóng vai trò quan trọng trong chuyển pha kim loại- điện môi ở gần điểm chuyển pha cấu trúc.

Đã tổng hợp thành công vật liệu nano $BaTiO_3$ bằng phương pháp thủy nhiệt có bi khuấy với nhiệt độ ủ thấp hơn so với phương pháp của những công trình được công bố trên thế giới. Sản phẩm tạo ra có độ đồng nhất cao, kích thước trong khoảng $20nm - 70nm$. Hằng số điện môi của vật liệu ở nhiệt độ phòng đạt 4000, lớn hơn so với vật liệu khối chế tạo bằng phương pháp gốm thông thường (~ 3000). Đã chế tạo vật liệu nano $LaNiO_3$ bằng phương pháp đốt gel, với nhiệt độ tạo gel phù hợp nhất là $80^\circ C$. Kích cỡ hạt của sản phẩm khoảng $30nm$.

Đã chế tạo vật liệu $(BaTiO_3)_{1-x}(LaNiO_3)_x$ có tính chất đa phân cực (multiferroic) bằng cách tổ hợp hai hệ vật liệu nano sắt điện $BaTiO_3$ và nano từ tính $LaNiO_3$ với các tính chất mới sau:

- Hệ vật liệu tổ hợp đồng thời có tính sắt điện và sắt từ với giá trị trung bình của độ phân cực $P_S = 0,5 \mu C/cm^2$, độ từ hoá bão hoà $M_S = 0,1 emu/cm^3$ ở nhiệt độ phòng.
- Đặc biệt vật liệu tổ hợp với tỷ lệ thành phần $x = 0,25$ có hằng số điện môi âm trong dải tần số thấp từ $0,2 kHz$ đến $800 kHz$ và có giá trị tuyệt đối khá lớn ($cỡ 10^6$) ở tần số $1kHz$.
- Đã tổng hợp được hệ vật liệu PTCR mới $(BaTiO_3)_{1-x}(LaNiO_3)_x$ với $x = 0,2$ có hiệu ứng PTCR khá lớn ở nhiệt độ $50^\circ C$ với nhiệt độ chuyển pha kim loại điện môi $T_{MI} = 80^\circ C$. Hệ số nhiệt điện trở cực đại của mẫu này đạt $0,70 \cdot 10^3\% K^{-1}$ tại nhiệt độ $84,9^\circ C$.

12. Khả năng ứng dụng thực tiễn:

Hệ mẫu nghiên cứu này có khả năng ứng dụng để chế tạo cảm biến nhiệt điện trở và cảm biến xác định nồng độ khí CO.

13. Các hướng nghiên cứu tiếp theo:

Nghiên cứu cơ chế tạo ra vật liệu đa pha phân cực (multiferroic) và cơ chế xuất hiện hằng số điện môi âm trong hệ vật liệu tổ hợp $(\text{BaTiO}_3)_{1-x}(\text{LaNiO}_3)_x$.

14. Các công trình công bố liên quan đến luận án:

1. Lương Văn Việt, Phạm Thành Công, Nguyễn Ngọc Đình, Nguyễn Long Tuyên, Bạch Thành Công (2004), "Structural phase transition in some perovskite materials having positive thermoresistive coefficient (PTC)", VNU. Journal of science, Mathematics- Physics 20(3), pp. 149- 151.
2. Luong Van Viet and Bach Thanh Cong (2007), "Yttrium, strontium doped BaTiO_3 perovskite as material for gas sensor", Advances in Natural Sciences 8(3&4), pp. 505-511.
3. Luong Van Viet, Bach Thanh Cong (2009), "Hydrothermal synthesis and dielectric properties of BaTiO_3 nanoparticles", Tuyển tập Hội nghị Vật lý chất rắn và Khoa học vật liệu toàn quốc lần thứ 6 (SPMS- 2009)- Đà Nẵng, tr. 779- 782.
4. Nguyen Thuy Trang, Nguyen Van Chinh, Luong Van Viet and Bach Thanh Cong (2011), "Lattice and electronic structure at the surface of ultra-thin films BaTiO_3 by DFT Method", VNU Journal of Science, Mathematics- Physics 27, pp. 257- 261.
5. Nguyen Duy Huy, Nguyen Thuy Trang, Luong Van Viet, Nguyen Tien Cuong and Bach Thanh Cong (2012), "Density Functional Study of Electronic Properties of Perovskite Systems $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{FeO}_3$ ", Journal of Materials Science and Engineering B 2(2), pp. 131- 135.