

Nghiên cứu về độ rộng vùng cấm quang học và sự dịch chuyển bờ hấp thụ từ vùng tử ngoại đến vùng khả kiến của ZnO pha tạp các kim loại chuyển tiếp

Nguyễn Hữu Khoa,¹ Nguyễn Văn Cát Hạ,¹ Lại Thị Ngọc Huyền,¹ Nguyễn Thị Mỹ Hoa,^{1,2} Phạm Hoài Nhân,¹ Hồ Thị Kim Ngân,^{1,2} Nguyễn Thị Thảo Nguyên,¹ Phan Bách Thăng,² Đặng Vinh Quang^{1,2,}*

1. Bộ môn Vật Liệu Nano và Màng Mỏng, Khoa Khoa Học và Công Nghệ Vật Liệu, Trường Đại Học Khoa Học Tự Nhiên ĐHQG-HCM
2. Trung tâm nghiên cứu vật liệu nano và phân tử (Inomar), ĐHQG-HCM, Khu Phố 6, Phường Linh Trung, Quận Thủ Đức, Thành Phố Hồ Chí Minh, Việt Nam.

* Corresponding author: vinhquangntmk@gmail.com

Tóm tắt

Thanh nano kẽm oxit (ZnO NRs) pha tạp các kim loại chuyển tiếp (Cu, Ag, Au, Co và Mn) được tổng hợp trên đế thủy tinh bằng phương pháp thủy nhiệt. Nồng độ các kim loại được tối ưu hóa và khảo sát cấu trúc, hình thái cũng như các tính chất quang của chúng. Giảm độ nhiễu xạ tia X cho thấy ZnO NRs pha tạp định hướng tốt ở mặt mạng (002) tương ứng với pha lục giác. Ảnh kính hiển vi điện tử quét (SEM) thể hiện chiều dài, đường kính, mật độ và độ đồng đều của thanh nano. Độ rộng vùng cấm quang học (E_g) của ZnO NRs pha tạp, được tính từ phổ UV-Vis, sử dụng phương pháp Tauc, chỉ ra sự giảm xuống của E_g dẫn tới sự dịch chuyển bờ hấp thụ ánh sáng tới vùng khả kiến. Kim loại tốt nhất được tối ưu hóa là đồng, làm giảm E_g xuống 3.08 eV tại nồng độ pha tạp là 3%. Vì vậy, việc pha tạp các kim loại vào ZnO NRs là nền móng để phát triển các linh kiện quang điện tử trong tương lai

Từ khóa: kim loại chuyển tiếp, phương pháp thủy nhiệt, độ rộng vùng cấm quang học, ZnO NRs pha tạp, sự hấp thụ khả kiến

Study of optical band gap and shift the absorption edge from the ultraviolet to the visible region of ZnO doping transition metals

Huu Khoa Nguyen¹, Van Cat Ha Nguyen¹, Thi Ngoc Huyen Lai¹, Thi My Hoa Nguyen^{1,2}, Hoai Nhan Pham¹, Thi Kim Ngan Ho^{1,2}, Thi Thao Nguyen Nguyen,¹ Bach Thang Phan,² and Vinh Quang Dang^{1,2,}*

1. Department of Thin Film and Nanomaterials, Faculty of Materials of Science and Technology, University of Science, VNU-HCM
2. Center for Innovative Materials and Architectures (Inomar), VNU-HCM, Quarter 6, Linh Trung Ward, Thu Duc District, Hochiminh City, Viet Nam.

* Corresponding author: vinhquangntmk@gmail.com

Abstract

Undoped and transition metals doped zinc oxide nanorods (ZnO NRs) are prepared onto glass substrates by using hydrothermal method. Transition metals (Cu, Ag, Au, Co and Mn) are intended to create states within the band gap of ZnO NRs. We have optimized the concentration of metals doping and investigated their structural, morphology and optical properties. The X-ray diffraction (XRD) pattern not only reveals that ZnO NRs doping are well oriented in the (002) plane which correspond to the hexagonal phase but also confirms that metal ions were highly dispersed within the ZnO NR arrays. The scan electron microscopy (SEM) images show the length, diameter with high density and uniform nanorods. The optical band gap of ZnO NRs doping, calculated from UV-Vis spectra using Tauc's method, exhibits the reduction of optical band gap leading to extend the optical absorption and shift the absorption edge toward visible light. The best dopant is copper that reduces the optical band gap of ZnO NRs down to 3.08 eV at 3% concentration doping. Since, transition metals doped ZnO NRs materials could be the foundation for the development of optoelectronic devices, such as OLED, water splitting, solar cells.

Keywords: transition metal, hydrothermal method, optical band gap, ZnO NRs doping, visible absorption