

BỘ GIÁO DỤC
VÀ ĐÀO TẠO

VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ



Phạm Duy Tân

**NGHIÊN CỨU CHẾ TẠO VẬT LIỆU BIẾN HÓA
(METAMATERIALS) ỨNG DỤNG TRONG CẢM BIẾN NDIR
PHÁT HIỆN KHÍ CO₂**

LUẬN ÁN TIẾN SĨ KHOA HỌC VẬT CHẤT

Hà Nội - 2025

BỘ GIÁO DỤC
VÀ ĐÀO TẠO

VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ

Phạm Duy Tân

NGHIÊN CỨU CHẾ TẠO VẬT LIỆU BIẾN HÓA
(METAMATERIALS) ỨNG DỤNG TRONG CẢM BIẾN NDIR
PHÁT HIỆN KHÍ CO₂

LUẬN ÁN TIẾN SĨ KHOA HỌC VẬT CHẤT

Ngành: Vật liệu điện tử

Mã số: 9 44 01 23

Xác nhận của Học viện
Khoa học và Công nghệ

Người hướng dẫn 1

Người hướng dẫn 2

PGS. TS. Bùi Xuân Khuyến TS. Hồ Trường Giang

Hà Nội - 2025

LỜI CAM ĐOAN

Tôi xin cam đoan luận án: “Nghiên cứu chế tạo vật liệu biến hóa (metamaterials) ứng dụng trong cảm biến NDIR phát hiện khí CO₂” là công trình nghiên cứu của chính mình dưới sự hướng dẫn khoa học của tập thể hướng dẫn là: PGS.TS. Bùi Xuân Khuyến và TS. Hồ Trường Giang. Luận án sử dụng thông tin trích dẫn từ nhiều nguồn tham khảo khác nhau và các thông tin trích dẫn được ghi rõ nguồn gốc. Các kết quả nghiên cứu của tôi được công bố chung với các tác giả khác đã được sự nhất trí của đồng tác giả khi đưa vào luận án. Các số liệu, kết quả được trình bày trong luận án là hoàn toàn trung thực và chưa từng được công bố trong bất kỳ một công trình nào khác ngoài các công trình công bố của tác giả. Luận án được hoàn thành trong thời gian tôi làm nghiên cứu sinh tại Học viện Khoa học và Công nghệ, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

Hà Nội, ngày.....tháng.....năm 2025

Tác giả luận án

Phạm Duy Tân

LỜI CẢM ƠN

Tôi xin được gửi lời cảm ơn trân trọng nhất tới PGS.TS. Bùi Xuân Khuyển và TS. Hồ Trường Giang đã hướng dẫn và truyền đạt cho tôi về nội dung kiến thức, kỹ năng và phương pháp nghiên cứu khoa học hiện đại. Nền tảng đó giúp tôi định hướng và giải quyết được các thách thức mới đặt ra trong quá trình triển khai ý tưởng về lý thuyết, mô phỏng và thực nghiệm, đồng thời, giúp tôi hoàn thành mục tiêu của luận án.

Tôi xin trân trọng cảm ơn GS.TS. Vũ Đình Lâm, Ban Lãnh đạo, Phòng Đào tạo, các Phòng chức năng của Học viện Khoa học và Công nghệ, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam đã truyền dạy những kiến thức cập nhật, hỗ trợ tốt nhất về điều kiện nghiên cứu trong môi trường với cơ sở vật chất, trang thiết bị hiện đại, các thủ tục hành chính chuyên nghiệp, giúp nghiên cứu sinh hoàn thành tốt nhiệm vụ học tập và nghiên cứu đề luận án được hoàn thành.

Xin trân trọng cảm ơn đồng nghiệp đang công tác tại Phòng Vật liệu biến hóa và cảm biến, và Phòng chuyên môn khác, tại Viện Khoa học vật liệu, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam đã hỗ trợ tôi về khoa học trong suốt quá trình nghiên cứu và hoàn thành luận án.

Xin trân trọng cảm ơn Viện Khoa học vật liệu đã hỗ trợ về chế độ chính sách cho nghiên cứu sinh trong suốt thời gian học tập.

Xin chân thành cảm ơn gia đình đã luôn đồng hành, tạo mọi điều kiện cho tôi trong quá trình công tác, học tập và nghiên cứu.

Hà Nội, ngày.....tháng.....năm 2025

Tác giả luận án

Phạm Duy Tân

MỤC LỤC

MỞ ĐẦU	1
CHƯƠNG 1: TỔNG QUAN VỀ VẬT LIỆU BIẾN HÓA ỨNG DỤNG TRONG CẢM BIẾN KHÍ.....	8
1.1. Tổng quan về cảm biến khí hấp thụ hồng ngoại.....	8
1.1.1. Nguyên lý hoạt động của cảm biến khí CO ₂	8
1.1.2. Các phương thức cải tiến cảm biến NDIR.....	13
1.2. Một số mô hình áp dụng MMs cho cảm biến NDIR	14
1.2.1. Vật liệu MMs tích hợp trên bề mặt nguồn phát xạ hồng ngoại ..	14
1.2.2. Vật liệu biến hóa tích hợp gần nguồn phát xạ IR (truyền qua) ..	16
1.3. Kết luận Chương 1	17
CHƯƠNG 2: PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU VẬT LIỆU BIẾN HÓA VÀ THIẾT KẾ CẤU TRÚC CẢM BIẾN NDIR.....	19
2.1. Phương pháp mô hình hóa sử dụng mạch LC tương đương.....	19
2.2. Phương pháp mô phỏng vật lý	30
2.3. Thiết kế cảm biến NDIR tích hợp MMs	33
2.3.1. Cảm biến NDIR tích hợp MMs theo cấu hình truyền qua	33
2.3.2. Cảm biến NDIR tích hợp MMs theo cấu hình phản xạ	36
2.4. Kết luận Chương 2	41
CHƯƠNG 3: THIẾT KẾ VÀ TỐI ƯU CẤU TRÚC VẬT LIỆU BIẾN HÓA VÀO TRONG NGUỒN VI NHIỆT.....	43
3.1. Nguồn vi nhiệt tạo đỉnh phát xạ đa cộng hưởng.....	43
3.1.1. Mô phỏng và thiết kế	43
3.1.2. Kết quả mô phỏng và thảo luận	45
3.2. Nguồn vi nhiệt với cấu trúc hốc cộng hưởng	49
3.2.1. Thiết kế và mô phỏng cấu trúc với vi nhiệt dạng xoắn	50
3.2.2. Kết quả và thảo luận	53
3.3. Tối ưu nguồn phát IR với vật liệu biến hóa MMs	62
3.3.1. Thiết kế và mô phỏng	62
3.3.2. Thiết kế nguồn vi nhiệt tích hợp vật liệu biến hóa	66

3.4. Kết luận Chương 3	75
CHƯƠNG 4: THIẾT KẾ VẬT LIỆU BIẾN HÓA CHO ĐIỀU KHIỂN PHÁT XẠ HỒNG NGOẠI TRONG CẢM BIẾN NDIR	76
4.1. Thiết kế cảm biến NDIR tích hợp MMs theo kiểu truyền qua	77
4.1.1. Thiết kế cấu trúc cảm biến.....	77
4.1.2. Kết quả cho cảm biến NDIR-MMs theo kiểu truyền qua.....	78
4.2. Cảm biến NDIR-MMs theo cấu hình phản xạ.....	83
4.2.1. Thiết kế cảm biến NDIR-MMs theo cấu hình phản xạ.....	83
4.2.2. Hoạt động của NDIR-MMs theo cấu hình phản xạ.....	84
4.2.3. Cơ chế hoạt động của tám MMs.....	85
4.2.4. Chế tạo gương phản xạ MMs điều khiển phổ hồng ngoại.....	89
4.2.5. Chế tạo cảm biến khí NDIR-MMs theo cấu hình phản xạ	91
4.2.5.1. Thiết kế, chế tạo bo mạch điện tử cho cảm biến	91
4.2.5.2. Thiết kế cơ khí, linh kiện sử dụng và lắp ráp cảm biến	95
4.2.5.3. Tạo nồng độ khí cho khảo sát cảm biến.....	96
4.2.5.4. Chuẩn hóa tuyến tính cho cảm biến NDIR-MMs	97
4.2.5.5. Khảo sát các đặc trưng của cảm biến NDIR-MMs	101
4.3. Kết luận Chương 4.....	109
KẾT LUẬN CHUNG	110
DANH MỤC CÔNG TRÌNH LIÊN QUAN ĐẾN LUẬN ÁN.....	112
TÀI LIỆU THAM KHẢO	113

DANH MỤC CÁC CHỮ VIẾT TẮT

Viết tắt	Tiếng Anh	Tiếng Việt
Abs	Absorption	Độ hấp thụ
CST	Computer Simulation Technology	Phần mềm mô phỏng điện từ CST
FAO	Food and Agriculture Organization	Tổ chức Lương thực và Nông nghiệp Liên Hợp Quốc
FIT	Finite Integration Technique	Kỹ thuật tích phân hữu hạn
HC	HydroCarbon	Hiđrocacbon
IoT	Internet of Things	Vạn vật kết nối
IPCC	Intergovernmental Panel on Climate Change	Ủy ban Liên chính phủ về Biến đổi Khí hậu
IR	Infrared	Hồng ngoại
Laser	Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation	Laze
LoD	Limit of Detection	Giới hạn phát hiện
MFC	Mass Flow Controller	Bộ điều khiển lưu lượng
MMs	Metamaterials	Vật liệu biến hóa
MOS	Metal Oxide Semiconductor	Bán dẫn oxit kim loại
MPAs	Metamaterial Perfect Absorbers	Vật liệu biến hóa hấp thụ hoàn hảo
MPRs	Metamaterial Perfect Reflectors	Vật liệu biến hóa phản xạ hoàn hảo
NDIR	Non-Dispersive Infrared	Hồng ngoại không tán sắc
PID	Photoionization Detector	Đầu dò quang ion hóa
ppm	Parts Per Million	Phần triệu (nồng độ)
SD	Standard Deviation	Độ lệch chuẩn

UV	Ultra Violet	Tử ngoại
----	--------------	----------

DANH MỤC CÁC BẢNG

Bảng 3.1: Độ dẫn nhiệt và độ dẫn điện của các vật liệu dùng cho vi nhiệt.	50
Bảng 3.2: So sánh nguồn phát với MMs của luận án và các tài liệu tham khảo.	61
Bảng 3.3: So sánh giữa các nguồn phát có / không có MMs.....	61
Bảng 3.4: Đặc tính của vật liệu sử dụng.	67
Bảng 3.5: So sánh giữa các thiết bị.	71
Bảng 4.1: Đặc tính cơ bản của nguồn phát hồng ngoại sử dụng.....	95
Bảng 4.2: Thông số kỹ thuật cơ bản đầu thu hồng ngoại PY0234.	96
Bảng 4.3: Thông số lưu lượng để tạo các nồng độ khí chuẩn CO ₂	97
Bảng 4.4: Điện áp kênh nhảy (U_{out}) và độ hấp thụ (Abs) của các cảm biến theo nồng độ khí CO ₂ khác nhau.	103
Bảng 4.5: Hằng số chuẩn hóa tuyến tính (b và c) của các cảm biến NDIR và NDIR-MMs.	104
Bảng 4.6: Điện áp kênh nhảy và độ hấp thụ (Abs) của cảm biến NDIR và thay đổi công suất đèn phát IR.....	106
Bảng 4.7: Điện áp kênh nhảy và độ hấp thụ (Abs) của cảm biến NDIR-MMs_3 thay đổi công suất đèn phát IR.....	107
Bảng 4.8: Thông số cơ bản của hai cảm biến NDIR và NDIR-MMs_3.....	108

DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ VÀ ĐỒ THỊ

Hình 1.1. Định luật Lambert-Beer về suy giảm cường độ khi ánh sáng đi qua một môi trường có hệ số hấp thụ (α) và chiều dài (l).	9
Hình 1.2. Phổ hấp thụ hồng ngoại đặc trưng của một số loại khí.....	10
Hình 1.3. Cấu trúc cảm biến khí dựa trên nguyên lý hấp thụ hồng ngoại với cấu hình không tán sắc (NDIR) một kênh thu (a) và hai kênh thu (b).	12
Hình 1.4. Minh họa phần phổ hồng ngoại (vùng màu đỏ) được hấp thụ bởi khí CO ₂ trong toàn phổ hồng ngoại dải rộng.....	12
Hình 1.5. Minh họa tích hợp vật liệu MMs vào cảm biến NDIR để nâng cao hiệu quả đo khí CO ₂	13
Hình 1.6. (a) Linh kiện phát hồng ngoại được tích hợp MMs, (b) cấu trúc ô cơ sở của MM, (c) phổ hấp thụ của MMs và (d) phổ phát xạ tương đối của linh kiện phát hồng ngoại được tích hợp MMs; Hình đính kèm là ảnh bức xạ nhiệt tương ứng [46].....	15
Hình 1.7. (a) Bộ phát hồng ngoại dựa trên bộ vi nhiệt được tích hợp MMs truyền qua; (b) Công suất phát xạ của bộ vi nhiệt dưới các điện áp phân cực DC khác nhau. Hình đính kèm là ảnh bức xạ nhiệt được ghi nhận bởi máy đo bức xạ nhiệt và (c) Công suất phát xạ của bộ phát hồng ngoại được tích hợp MMs truyền qua dưới các nguồn điện khác nhau [47].....	17
Hình 2.1. MMs cấu trúc đĩa tròn và mô hình mạch điện LC tương đương: (a) Cấu trúc MMs trong không gian ba chiều; (b) Cấu trúc các lớp vật liệu đĩa tròn; (c) Mô hình mạch điện LC tại tần số cộng hưởng từ và (d) Mô hình mạch điện LC tại tần số cộng hưởng điện [81].....	19
Hình 2.2. Các thông số hình học và phân cực điện trường từ trường trong trường hợp cấu trúc MMs dạng cặp đĩa.	21
Hình 2.3. Bốn bộ phát MMs hồng ngoại chuyển đổi và khả năng “bật/tắt” hấp thụ của chúng; (a)–(f) Hình minh họa cấu trúc của bốn bộ phát siêu vật liệu hồng ngoại chuyển đổi gồm lớp Ag/VO ₂ /Ag; (g)–(j) Phổ độ hấp thụ của các bộ phát với ô cơ sở dạng tam giác, vuông, lục giác và tròn trong khoảng 2.5–7 μm khi VO ₂ ở trạng thái điện môi (đường màu xanh) và trạng thái kim loại (đường màu đỏ).....	23

Hình 2.4. Phân bố trường điện từ khi VO_2 ở trạng thái điện môi: (a)–(d) Các ảnh cắt x-z đi qua tâm lớp VO_2 của ô tam giác, vuông, lục giác và tròn tại bước sóng xảy ra đỉnh hấp thụ; (e)–(h) Ảnh cắt x-z phân bố trường điện từ của các bộ phát khi VO_2 ở trạng thái kim loại tại cùng các bước sóng đó.	25
Hình 2.5. (a) Mạch dao động LC gồm các tụ điện và cuộn cảm, sẽ cộng hưởng tại tần số MP; Phần ảo của tổng trở tại tần số cộng hưởng cần bằng 0 nếu điều kiện hấp thụ hoàn hảo được thỏa mãn; (b) Phân bố trường từ khi VO_2 ở trạng thái điện môi, mặt cắt x-y đi qua trung tâm lớp VO_2 đối với các ô tam giác, vuông, lục giác và tròn tại bước sóng cộng hưởng.	27
Hình 2.6. Phổ độ hấp thụ dưới góc tới vuông góc khi thay đổi kích thước ô đơn vị Ag và VO_2 từ 0,75 đến 0,95 μm đối với các bộ phát cấu trúc tam giác (a), vuông (b), lục giác (c) và tròn (d).	28
Hình 2.7. Phổ độ hấp thụ của các bộ phát cấu trúc tam giác (a), vuông (b), lục giác (c) và tròn (d) khi thay đổi phân cực của sóng tới (0° – 90°) dưới góc tới vuông góc; Phổ độ hấp thụ của các bộ phát khi thay đổi góc tới từ 0° đến 65° đối với sóng phân cực từ (e)–(h) và phân cực điện (i)–(l).	29
Hình 2.8. Giao diện thiết kế cấu trúc MMs trong CST.	31
Hình 2.9. Cấu trúc MMs được dựng trong phần mềm CST.	31
Hình 2.10. Thiết lập điều kiện biên.	32
Hình 2.11. Lựa chọn vị trí đặt ăng ten thu – phát.	33
Hình 2.12: Các tham số tán xạ thu được sau quá trình mô phỏng.	33
Hình 2.13. Cấu hình cảm biến NDIR tích hợp MMs theo kiểu truyền qua.	35
Hình 2.14. Cấu hình cảm biến NDIR tích hợp MMs theo kiểu phản xạ.	36
Hình 3.1. Cấu trúc ô cơ sở vật liệu biến hóa (a) khi nhìn từ trên xuống, (b) nhìn từ mặt bên.	43
Hình 3.2. (a) Minh họa cấu trúc mặt cắt của bộ phận phát xạ IR; (b) hình chiếu của bộ phận phát xạ IR với lớp MMs tích hợp trên bề mặt vi nhiệt.	44
Hình 3.3. Thiết kế chi tiết nguồn phát xạ nhiệt dải rộng cho mô phỏng COMSOL.	44

Hình 3.4. Phổ hấp thụ của vật liệu biến hóa MMs với cấu trúc đĩa tròn kết hợp.	45
Hình 3.5. (a) Phân bố mật độ năng lượng từ; Phân bố dòng điện trên (b) mặt trước và (c) mặt sau của cấu trúc MM tại bước sóng $4,2 \mu\text{m}$	45
Hình 3.6. (a) Phân bố mật độ năng lượng từ; Phân bố dòng điện trên (b) mặt trước và (c) mặt sau của cấu trúc MMs tại bước sóng $3,75 \mu\text{m}$	46
Hình 3.7. Phổ hấp thụ của MM có cấu trúc đĩa tròn kết hợp khi phân cực sóng điện từ thay đổi.....	47
Hình 3.8. Phổ hấp thụ của MM có cấu trúc đĩa tròn kết hợp khi góc tới của sóng điện từ thay đổi.....	47
Hình 3.9. (a) Sự phân bố nhiệt độ trên bề mặt nguồn nhiệt với điện áp $U = 1,5 \text{ V}$; (b) Cường độ phát xạ của tấm vật liệu biến hóa ở $T = 564 \text{ K}$	48
Hình 3.10. Cường độ phát xạ của tấm vật liệu biến hóa tại nhiệt độ khác nhau.	48
Hình 3.11. (a) Cấu trúc của vi nhiệt tích hợp lớp MMs; (b) Mối quan hệ giữa nhiệt độ cao nhất trên bề mặt vi nhiệt và điện áp đặt vào; (Hình nhỏ: phân bố nhiệt mô phỏng trên bề mặt vi nhiệt tại điện áp 3.7 V)	50
Hình 3.12. Nhiệt độ phân bố bề mặt dọc theo khoảng cách xuyên tâm ở các độ dày khác nhau của đế.	53
Hình 3.13. (a) Cấu trúc của MMs với tám đĩa tròn bao quanh một hốc; (b) Phổ hấp thụ và (c) trở kháng của cấu trúc.....	54
Hình 3.14. Phân bố điện trường trong MMs ở mặt trên và dưới tại bước sóng (a) và (b) 3960 nm , và (c) và (d) 4197 nm	55
Hình 3.15. Sự phụ thuộc của phổ hấp thụ vào các tham số cấu trúc khác nhau.	55
Hình 3.16. Sự phụ thuộc phân cực của phổ hấp thụ của MMs.....	56
Hình 3.17. Sự phụ thuộc của góc tới của phổ hấp thụ của MMs.....	56
Hình 3.18. Phổ phát xạ của lớp MM tích hợp nguồn vi nhiệt, so với các nguồn IR thương mại, ở các nhiệt độ khác nhau với $\theta = 0$	58
Hình 3.19. Nhiệt độ bề mặt của MM và vật đen theo nguồn điện đầu vào. ...	60

Hình 3.20. (a) Sơ đồ cấu trúc vật liệu biến hóa đề xuất; (b) Phổ hấp thụ; (c) Sự phụ thuộc của độ phát xạ chuẩn hóa vào nhiệt độ.	63
Hình 3.21. Điều kiện biên và phân bố nhiệt độ của ô cơ sở.	65
Hình 3.22. Cấu trúc của nguồn vi nhiệt tích hợp vật liệu biến hóa: (a) nhìn từ trên xuống; (b) mặt cắt ngang.	66
Hình 3.23. (a) Sự phụ thuộc của tiêu thụ điện năng vào khoảng cách d với nhiệt độ trung bình trong khu vực hoạt động được duy trì ở 300°C ; (b) tổn thất do dẫn nhiệt, phát xạ của vật liệu biến hóa và bức xạ nền theo khoảng cách d ..	69
Hình 3.24. (a) Mặt cắt ngang của nguồn phát với lớp phủ vàng (Au); (b) Công suất đầu vào so với nhiệt độ trung bình của các loại nguồn phát khác nhau..	70
Hình 3.25. (a) Phân bố nhiệt độ bề mặt của các nguồn phát có lớp phủ; (b) Đơn giản hóa sang truyền nhiệt một chiều với cấu trúc vuông và tròn; (c) Phân bố nhiệt độ dọc theo trục x	72
Hình 3.26. Sự thay đổi nhiệt độ theo thời gian.	74
Hình 4.1. (a) Cấu hình cảm biến NDIR-MMs; (b), (c) Cấu trúc bộ lọc dựa trên vật liệu biến hóa (góc nhìn ba chiều và nhìn từ trên xuống); (d) Phổ truyền qua và phản xạ.....	77
Hình 4.2. Phổ truyền qua của cấu trúc bộ lọc MMs khi thay đổi các thông số hình học: (a) Ảnh hưởng của chu kỳ mạng p ; (b) Ảnh hưởng của chiều rộng khe w ; (c) Ảnh hưởng của chiều dài nhánh chữ thập L ; (d) Ảnh hưởng của độ dày các lớp điện môi và kim loại t	79
Hình 4.3. Phân bố cường độ điện trường tại bước sóng cộng hưởng ($\lambda \approx 4,26 \mu\text{m}$) trong cấu trúc bộ lọc metamaterial; (a) Phân bố điện trường ba chiều (3D view) của toàn bộ cấu trúc; (b) Phân bố điện trường tại lớp kim loại trên cùng; (c) Phân bố điện trường tại lớp điện môi giữa; (d) Phân bố điện trường tại lớp kim loại dưới cùng.	80
Hình 4.4. (a) Phổ truyền qua của CO_2 tại nồng độ 400 ppm trong một buồng khí dài 15 cm [49]; (b) Phổ hấp thụ của bộ dò nhiệt điện (thermopile) [141]; (c) Bức xạ phổ được hấp thụ bởi thermopile tại nhiệt độ nguồn hồng ngoại 573 K; (d) Sự phụ thuộc của độ suy giảm tín hiệu vào nhiệt độ của nguồn hồng ngoại.	81

Hình 4.5. (a) Cấu hình cảm biến khí; (b) Cấu trúc vật liệu MMs; và (c) Phổ phản xạ tương ứng.....	84
Hình 4.6. (a) Sự phụ thuộc của phần thực của độ điện thẩm hiệu dụng và độ từ thẩm hiệu dụng theo bước sóng; (b) Sự biến thiên của phần thực của trở kháng hiệu dụng và phần ảo của chiết suất hiệu dụng theo bước sóng.	85
Hình 4.7. Phân bố (a) điện trường và (b) từ trường cảm ứng tại bước sóng 4260 nm.	86
Hình 4.8. Sự phụ thuộc của phổ phản xạ vào các tham số cấu trúc: (a) chiều dài đế, (b) chiều rộng đế, (c) độ dày đế, và (d) chiều cao của các cộng hưởng dạng elip.	87
Hình 4.9. (a) Phổ truyền qua của CO ₂ tại nồng độ 400 ppm trong một buồng khí dài 15 cm [52]; (b) Phổ hấp thụ của bộ dò nhiệt điện (thermopile) [30]; (c) Bức xạ phổ được hấp thụ bởi thermopile tại nhiệt độ nguồn hồng ngoại 573 K; (d) Sự phụ thuộc của suy giảm tín hiệu vào nhiệt độ của nguồn hồng ngoại.	88
Hình 4.10. (a ₁ , b ₁ , c ₁) ảnh chụp các tấm MMs đã chế tạo ở ba điều kiện liều chiếu khác nhau; (a ₂ , b ₂ , c ₂) ảnh SEM các mẫu MMs tương ứng.	90
Hình 4.11. Phổ FTIR cho ba mẫu vật liệu MMs chế tạo.	90
Hình 4.12. Sơ đồ các khối nguyên lý của cảm biến NDIR.	91
Hình 4.13. Mạch điện điển hình cho điều khiển nguồn điện cấp cho đèn phát IR và khuếch đại hai kênh cho tín hiệu từ đầu thu hồng ngoại.	92
Hình 4.14. (a,b) Tín hiệu thô thu được trên đầu đo hồng ngoại; (c) Tín hiệu hiệu sau khi qua bộ khuếch đại và lọc thông dải tần số thấp.	93
Hình 4.15. Thiết kế bo mạch cho cảm biến NDIR tích hợp MMs.	94
Hình 4.16. Phổ phát xạ hồng ngoại của đèn EMIR200.	95
Hình 4.17. Sơ đồ nguyên lý của hệ pha trộn khí (a) và ảnh chụp tương ứng (b).	96
Hình 4.18. Sự phụ thuộc điển hình hệ số hấp thụ Abs theo nồng độ khí CO ₂ khi thay đổi kl.	98
Hình 4.19. Minh họa khớp hàm theo dữ liệu thực nghiệm của độ hấp thụ Abs vào nồng độ khí để xác định các hằng số b và c.	100

Hình 4.20. Đặc trưng điện áp lõi ra kênh nhảy biến đổi khi nồng độ khí thay đổi của các cảm biến NDIR (a); NDIR-MMs_1 (b); NDIR-MMs_2 (c); và NDIR-MMs_3. (d).	102
Hình 4.21. Độ hấp thụ của các cảm biến phụ thuộc theo nồng độ khí CO ₂	103
Hình 4.22. Đặc trưng điện áp lõi ra kênh nhảy của cảm biến NDIR và NDIR-MMs_3 khi thay đổi độ lớn nguồn dòng $i = 40\text{--}110\text{ mA}$ cấp cho đèn phát hồng ngoại IR.	105
Hình 4.23. Độ hấp thụ cho các cảm biến cảm biến NDIR và NDIR-MMs_3 phụ thuộc vào nồng độ khí CO ₂	106
Hình 4.24. Tín hiệu điện áp kênh nhảy (U_{out}) của cảm biến NDIR-MMs_3 lặp lại theo các chu kỳ cấp khí CO ₂ vào buồng đo.	107

MỞ ĐẦU

Trong bối cảnh biến đổi khí hậu ngày càng gia tăng, việc giám sát chất lượng không khí và môi trường đóng vai trò then chốt trong phát triển nông nghiệp bền vững và đảm bảo sức khỏe cộng đồng. Các loại khí như CO₂, CO, CH₄ và NO_x không chỉ ảnh hưởng đến sức khỏe con người mà còn là chỉ báo quan trọng của quá trình canh tác, chăn nuôi và ô nhiễm công nghiệp. Ở các quốc gia đang phát triển như Việt Nam, hệ thống giám sát và điều kiện vi khí hậu trong nông nghiệp còn hạn chế, do chi phí cao và thiếu các thiết bị cảm biến chính xác, nhỏ gọn, đặc biệt là cho khí CO₂ [1-5].

Khí CO₂ là quan trọng trong quá trình quang hợp và phát triển cây trồng. Ví dụ, nồng độ CO₂ tăng từ 400 ppm lên 800–1000 ppm trong nhà kính có thể tăng năng suất rau từ 20–40% (theo nghiên cứu của Đại học Wageningen, Hà Lan). Quá trình tăng trưởng và phát triển của nấm ăn, nấm dược liệu nhạy cảm với khí CO₂, vì thế việc điều chỉnh kịp thời giúp tăng năng suất và chất lượng sản phẩm. CO₂ gây biến đổi khí hậu, chiếm 76% lượng khí nhà kính từ nông nghiệp (FAO, 2021). Hậu quả là nhiệt độ môi trường tăng có thể làm rút ngắn chu kỳ sinh trưởng của nông sản, giảm năng suất 6% mỗi thập kỷ (IPCC, 2023). Quá trình thoái hóa đất, quá trình hô hấp của vi sinh vật đất giải phóng CO₂, khi đất bị xói mòn, lượng CO₂ thoát ra tăng gấp đôi, làm giảm độ phì nhiêu.

Để giám sát và quản lý các khí kể trên trong các môi trường khác nhau, các cảm biến chuyên dụng có thể được sử dụng gồm: (i) *cảm biến hoạt động theo nguyên tắc hóa học* có thể kể đến cảm biến điện hóa, cảm biến oxit kim loại (MOS, dựa trên độ dẫn điện, điện trở), và cảm biến ion quang hóa (PID); (ii) *cảm biến theo nguyên tắc vật lý* như cảm biến UV, cảm biến NDIR (hấp thụ hồng ngoại). Các cảm biến hoạt động theo nguyên tắc hóa học có giá thành rẻ và được dùng phổ biến. Tuy vậy, các loại cảm biến loại này có nhược điểm chung là tín hiệu trôi theo thời gian hoạt động, cần được thường xuyên bảo dưỡng hiệu chuẩn định kỳ, tuổi thọ ngắn, và đặc biệt tính chọn lọc vẫn là vấn đề lớn cần được giải quyết khi áp dụng trong môi trường hỗn hợp nhiều loại

khí. Cảm biến theo nguyên tắc vật lý có độ bền và tuổi thọ lớn hơn so với cảm biến nguyên tắc điện hóa, tuy vậy nó chỉ phát hiện được số ít các loại khí.

Cảm biến khí NDIR (Non-Dipersive Infrared Gas Sensor) là loại phổ biến được nghiên cứu và phát triển dựa trên đặc tính hấp thụ vùng hồng ngoại đặc trưng của một số loại khí. Cảm biến sử dụng kính lọc quang (lọc thông dải hẹp) theo cấu hình không tán sắc (không dùng lăng kính để lọc lựa bước sóng phù hợp với khí mục tiêu). Cảm biến NDIR thể hiện ưu điểm chọn lọc cao, tin cậy và thời gian sống dài. Tuy vậy, cảm biến NDIR thường có giá thành đắt và chỉ phù hợp cho một số loại khí như CO_2 , CO, N_2O và HC. Ngoài ra, do phổ hấp thụ của khí mục tiêu có thể vẫn có bị trùng một phần với phổ hấp thụ của hơi nước hoặc trùng phủ với các khí khác nhau, điều này làm giảm tính chọn lọc cảm biến NDIR. Cảm biến NDIR có thể được thiết kế với nhiều cấu hình khác nhau phù hợp với từng ứng dụng cụ thể về dải đo và độ phân giải. Về nguyên tắc chung, cấu trúc cơ bản của cảm biến NDIR gồm nguồn/đèn phát bức xạ hồng ngoại (IR), buồng chứa mẫu khí, một kính lọc quang để chỉ cho vùng bước sóng bức xạ hồng ngoại đặc trưng của khí mục tiêu hấp thụ đi qua, và đầu thu bức xạ hồng ngoại để chuyển đổi tín hiệu quang thành tín hiệu điện lối ra tương ứng [6-7].

Cảm biến NDIR cấu hình với một đầu thu hồng ngoại trong thực tế ít được áp dụng do tín hiệu điện lối ra của đầu thu là rất nhỏ và có thể chứa nhiều tạp nhiễu, dẫn đến cảm biến hoạt động thiếu tính chính xác. Vì thế, cấu trúc cho cảm biến NDIR cấu hình không tán sắc (NDIR) hai kênh thu được áp dụng phổ biến. Thông thường, nguồn bức xạ hồng ngoại thường được chọn nguồn phát có dải rộng (ví dụ đèn dây tóc) nguồn này được điều khiển bằng điện áp hoặc dòng điện ở một tần số cố định (thường ở 4 Hz), bức xạ hồng ngoại đi qua buồng chứa khí cần phân tích, và một phần bức xạ bị hấp thụ tỉ lệ với nồng độ khí trong buồng đo tại bước sóng hấp thụ đặc trưng. Hai kính lọc quang, một cho vùng bức xạ hồng ngoại truyền qua phù hợp với khí mục tiêu (ví dụ với CO_2 là 4,26 μm), và một tại cho vùng hồng ngoại không bị hấp thụ bởi các khí

nào khác đóng vai trò so sánh (thường tại $3,9\text{ }\mu\text{m}$); các bức xạ hồng ngoại sau khi đi qua kính lọc quang sẽ đến hai kênh thu và được biến đổi quang - điện để có được hai tín hiệu điện lối ra tương ứng. Từ đó nồng độ khí được tính toán qua độ suy giảm các tín hiệu điện lối ra (tuân theo định luật Lambert-Beer) [8-13].

Theo nguyên lý này, cảm biến NDIR chỉ sử dụng một dải phổ rất hẹp từ phổ hồng ngoại dải rộng của đèn phát. Hệ quả là phần lớn năng lượng bức xạ phát ra từ nguồn phát dải rộng sẽ bỏ qua, khi đó chỉ có một lượng nhỏ năng lượng bức xạ đi sau kính lọc quang được đến được đầu thu để chuyển đổi thành tín hiệu điện lối ra. Do đó, các cảm biến NDIR cần có yêu cầu rất cao về thiết kế mạch điện tử để đảm bảo về độ nhạy và độ phân giải, đặc biệt ở dải nồng độ thấp. Khi đó, các giải pháp truyền thống là tăng cường độ hồng ngoại của nguồn phát, tăng quang trình, hoặc sử dụng các nguồn phát hồng ngoại dải hẹp như laser đều gặp phải những khó khăn nhất định, ví dụ như tăng kích thước tổng thể và giá thành.

Từ những nhược điểm kể trên, cảm biến NDIR có thể được khắc phục bằng cách sử dụng các vật liệu mới tiên tiến vào trong công nghệ chế tạo cảm biến. Trong đó, vật liệu biến hóa (Metamaterials - MMs) là một trong số các vật liệu nhân tạo mới và thu hút được nhiều sự quan tâm nghiên cứu trên thế giới. MMs có các đặc tính điện từ và quang học vượt trội, cho phép điều khiển hay lọc lựa được sóng điện từ ở kích thước ô cơ sở nhỏ hơn bước sóng hoạt động. Đặc tính điện thẩm và từ thẩm của MMs có thể được điều chỉnh bằng cách thiết kế các kích thước hình học và lựa chọn thành phần vật liệu phù hợp. Hiện nay, MMs đang được nghiên cứu rộng rãi nhằm ứng dụng trong các bộ phát xạ nhiệt, bộ lọc quang, hấp thụ tuyệt đối sóng điện từ ứng dụng trong lĩnh vực năng lượng, y tế và cảm biến độ nhạy cao [14-31]. Bằng cách thay đổi cấu trúc hình học, MMs có thể được thiết kế để hoạt động ở nhiều vùng bước sóng khác nhau, từ vùng khả kiến, hồng ngoại, và sóng viba. Ưu điểm lớn nhất của

ứng dụng MMs là việc tính toán và mô phỏng được các cấu trúc cho những mục đích ứng dụng trước khi chế tạo.

Tại Việt Nam, các nghiên cứu về vật liệu biến hóa MMs đang dần được đẩy mạnh, đặc biệt trong thiết kế và mô phỏng cấu trúc bề mặt đặc biệt. Tại Học viện Khoa học và Công nghệ (GUST), và Viện Khoa học vật liệu (IMS), lĩnh vực vật liệu biến hóa MMs đang được tập trung phát triển mạnh cả về nghiên cứu cơ bản và ứng dụng. Tiên phong trong lĩnh vực này cần kể đến Nhóm nghiên cứu của GS.TS. Vũ Đình Lâm tại GUST, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam (VAST). Nhóm đã có nhiều công bố quốc tế uy tín liên quan đến vật liệu MMs, đóng vai trò nòng cốt trong phát triển hướng nghiên cứu này tại Việt Nam. Ngoài ra, các hướng nghiên cứu liên quan về vật liệu MMs đang được mở rộng tại các đơn vị khác như: PGS.TS. Trần Mạnh Cường (Đại học Sư phạm Hà Nội), GS.TS. Vũ Văn Yên (Đại học Bách khoa Hà Nội), PGS.TS. Nguyễn Thị Hiền (Đại học Thái Nguyên), TS. Lê Văn Quỳnh (Đại học VinUni), và PGS.TS. Nguyễn Thị Quỳnh Hoa (Đại học Vinh). Điển hình, từ năm 2016 đến nay, các nhóm này đã bước đầu nghiên cứu và cải tiến các cấu trúc MMs hoạt động trong vùng tần số THz, ứng dụng trong cảm biến sinh học và môi trường.

Về nghiên cứu và chế tạo cảm biến khí, Việt Nam hiện tại cũng có nhiều nhóm nghiên cứu về cảm biến khí, đặc biệt là đạt những kết quả tốt trong công bố quốc tế, chiếm phần lớn là cảm biến kiểu độ dẫn hay điện trở dựa trên bán dẫn oxit kim loại (MOS). Tuy vậy, cảm biến cho khí CO₂ là rất khiêm tốn do khó tìm được vật liệu MOS có tính chọn lọc. Ví dụ điển hình, từ những năm 2000, nhóm nghiên cứu của GS. Võ Thạch Sơn đã nghiên cứu cảm biến điện hóa hoạt động nhiệt độ cao dựa trên chất điện ly NASICON cho phát hiện khí CO₂ [32]. Năm 2013 nhóm nghiên cứu GS. Nguyễn Văn Hiếu đã có công trình nghiên cứu về cảm biến khí CO₂ trên cơ sở nguyên lý độ dẫn điện của vật liệu dây nano ZnO phủ LaOCl [33]. Gần đây, nhóm nghiên cứu của TS. Hồ Trường Giang đã có những nghiên cứu về cảm biến nguyên lý hấp thụ hồng ngoại

(NDIR) cho phân tích CO₂ dải nồng độ 0–20 vol% áp dụng cho môi trường khí thải [34].

Từ những cơ sở trên, nghiên cứu này tập trung vào vật liệu biến hóa cho tương tác, chuyển đổi phổ hồng ngoại dải rộng thành phổ hồng ngoại dải hẹp nhằm tích hợp vào cảm biến NDIR, từ đó nâng cao khả năng hoạt động của cảm biến loại này. Ở đó, cảm biến NDIR theo kiểu truyền thống được tích hợp thêm vật liệu MMs chuyển đổi, lọc lựa vùng bước sóng bức xạ hồng ngoại đặc trưng (đối với khí CO₂ tại 4,26 μm). Cách thức này đem đến những ưu việt khi có thể tăng độ nhạy (tăng cường vùng hồng ngoại mục tiêu), tăng độ chọn lọc (giảm yếu tố gây nhiễu do sự trùng phủ phổ), giảm công suất nguồn phát hồng ngoại (tăng tuổi thọ và ổn định cho nguồn phát), và giảm kích thước cảm biến. Ngoài ra, hướng nghiên cứu này cũng mở nghiên cứu về cảm biến NDIR tiên tiến cho các loại khí khác nhau. Từ đó, luận án này thực hiện nghiên cứu với tên đề tài là “**Nghiên cứu chế tạo vật liệu biến hóa (Metamaterials) ứng dụng trong cảm biến khí NDIR phát hiện khí CO₂**”. Cách tiếp cận này là hiện đại khi tích hợp vật liệu MMs với vi nhiệt tạo nguồn phát IR hoặc tạo bộ lọc quang với tính năng điều khiển bức xạ hồng ngoại dải rộng thành dải hẹp về vùng bước sóng mong muốn, từ đó sẽ tạo ra linh kiện cảm biến NDIR-MMs tiên tiến.

Mục tiêu của luận án:

- Làm rõ cơ chế tương tác của vật liệu MMs với bức xạ điện từ vùng hồng ngoại;
- Mô phỏng tính toán để tìm ra cấu trúc vật liệu MMs điều khiển hồng ngoại tại vùng bước sóng đặc trưng (4,26 μm) khí CO₂ hấp thụ;
- Thử nghiệm chế tạo được vật liệu MMs cho tích hợp vào cảm biến hấp thụ hồng ngoại cấu hình không tán sắc (NDIR) đo khí CO₂.

Đối tượng nghiên cứu của luận án: khí CO₂, bức xạ hồng ngoại (IR), cảm biến NDIR, vật liệu MMs, cảm biến NDIR tích hợp MMs cho đo khí CO₂.

Phương pháp nghiên cứu của luận án:

- Tính toán, mô phỏng cho thiết kế các loại cấu trúc vật liệu MMs cộng

hường vùng hồng ngoại 1-15 μm để tạo ra bức xạ dải hẹp, và tối ưu vào bức xạ vùng 4,26 μm .

- Thiết kế, chế tạo dựa trên vật liệu biến hóa tích hợp vào nguồn phát hồng ngoại và tạo lớp phản xạ hồng ngoại để tạo bức xạ dải hẹp liên quan đến khí CO_2 hấp thụ.
- Thử nghiệm áp dụng vật liệu MMs vào cảm biến NDIR cho đo khí CO_2 .

Ý nghĩa khoa học và thực tiễn của luận án:

- Xác định ra cơ chế tương tác của vật liệu MMs với bức xạ hồng ngoại theo kiểu tương tác điện-từ.
- Mô phỏng thành công một số cấu trúc của vật liệu MMs tương tác vùng hồng ngoại cho áp dụng vào trong cảm biến NDIR.
- Thử nghiệm chế tạo lớp vật liệu MMs cho áp dụng vào cảm biến NDIR theo cấu hình phản xạ, từ đó đem đến những khả năng ứng dụng:
 - Có thể loại bỏ bộ lọc quang học truyền thống trong cảm biến NDIR.
 - Tăng tính linh hoạt, vì lớp vật liệu biến hóa có thể được điều chỉnh cho các loại khí khác nhau.
 - Cải thiện độ nhạy, độ chính xác, tuổi thọ nhờ phổ hồng ngoại được tối ưu hóa thông qua lớp vật liệu biến hóa để chuyển đổi ánh sáng hồng ngoại dải rộng thành dải hẹp tại các đỉnh 4,26 μm (cho nhạy CO_2) và 3,9 μm (cho vài trò tham chiếu).
 - Đem đến khả năng áp dụng cho các lĩnh vực IoT, nông nghiệp công nghệ cao, nhà thông minh và y tế.

Những đóng góp mới của luận án:

Luận án này liên quan đến cảm biến khí hồng ngoại không tán sắc (NDIR) được cải tiến bằng cách tích hợp vật liệu biến hóa (MMs) để nâng cao khả năng phát hiện khí CO_2 . Những đóng góp mới của luận án là:

- Mô phỏng thành công được một số cấu trúc của vật liệu MMs tương tác vùng hồng ngoại cho áp dụng vào trong cảm biến NDIR, ở đó gồm tích

hợp trực tiếp vào nguồn phát vi nhiệt, bộ lọc quang, và lớp phản xạ để điều khiển, lọc lựa ra bức xạ hồng ngoại dải hẹp (vùng 4,26 μm) đặc trưng cho khí CO_2 .

- Chế tạo thử nghiệm lớp vật liệu MMs cho áp dụng vào cấu hình phản xạ trong cảm biến NDIR đo khí CO_2 .

Cấu trúc của luận án: Ngoài các phần Mở đầu, Kết luận và Tài liệu tham khảo, Luận án này được cấu trúc gồm 4 chương như sau:

CHƯƠNG 1: TỔNG QUAN VỀ VẬT LIỆU BIẾN HÓA ỨNG DỤNG TRONG CẢM BIẾN KHÍ

CHƯƠNG 2: PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU VẬT LIỆU BIẾN HÓA VÀ THIẾT KẾ CẤU TRÚC CẢM BIẾN NDIR

CHƯƠNG 3: THIẾT KẾ VÀ TỐI ƯU CẤU TRÚC VẬT LIỆU BIẾN HÓA VÀO TRONG NGUỒN VI NHIỆT

CHƯƠNG 4: THIẾT KẾ VẬT LIỆU BIẾN HÓA CHO ĐIỀU KHIỂN PHÁT XẠ HỒNG NGOẠI TRONG CẢM BIẾN NDIR

CHƯƠNG 1: TỔNG QUAN VỀ VẬT LIỆU BIẾN HÓA ỨNG DỤNG TRONG CẢM BIẾN KHÍ

1.1. Tổng quan về cảm biến khí hấp thụ hồng ngoại

1.1.1. Nguyên lý hoạt động của cảm biến khí CO₂

Cảm biến đo và phân tích khí CO₂ thường dựa trên ba nguyên lý là dẫn nhiệt [35], điện hóa [36,37], và hấp thụ hồng ngoại [35,38]. Các tham số yêu cầu phù hợp cho cảm biến khí CO₂ tiên tiến đáp ứng trong ứng dụng thực tế gồm khả năng hoạt liên tục (ổn định, bền bỉ và tin cậy, đặc biệt trong môi trường có độ ẩm cao và các tác nhân oxy hóa khử khác), dải đo phù hợp (vùng nồng độ thấp ppm, và vùng nồng độ cao %), độ phân giải cao, tính chọn lọc cao, thời gian phân tích nhanh, và giá thành thấp.

*** Cảm biến theo nguyên lý dẫn nhiệt**

Cảm biến nguyên lý dẫn nhiệt đo khí CO₂ dựa trên độ dẫn nhiệt của khí CO₂ (0.017 W/mK) thấp hơn so với các khí phổ biến khác trong không khí (N₂ là 0.026 W/mK, O₂ là 0.027 W/mK). Tuy nhiên, Cảm biến dựa trên độ dẫn nhiệt (TCD) có dải đo danh định rộng (0-100% vol). Tuy nhiên, do nguyên lý đo dựa trên sự chênh lệch độ dẫn nhiệt, nó chỉ đạt được độ nhạy và độ chính xác đáng tin cậy ở phần nồng độ cao của dải đo (thường >10% vol). Vì vậy, cảm biến này chủ yếu được ứng dụng trong các bài đo nồng độ CO₂ lớn hoặc kiểm tra độ tinh khiết. Cảm biến loại này khó ổn định trong môi trường có độ ẩm cao và thay đổi mạnh, có độ chọn lọc kém. Vì thế, cảm biến nguyên lý dẫn nhiệt không phù hợp cho xác định khí CO₂ với yêu cầu chính xác cao và vùng nồng độ thấp, ví dụ như các ứng dụng trong nông nghiệp công nghệ cao.

*** Cảm biến theo nguyên lý điện hóa**

Cảm biến điện hóa đo khí CO₂ dựa trên nguyên lý các phản ứng điện hóa (phản ứng hóa học tạo ra tín hiệu điện như dòng hoặc thế) tại điện cực của linh kiện cấu trúc dạng pin Galvanic [35]. So với cảm biến độ dẫn nhiệt, cảm biến điện hóa chỉ cho dải đo nồng độ thấp (vùng ppm) và phù hợp cho xác định khí CO₂ trong môi trường không khí (có khí O₂). Cảm biến loại được nghiên cứu và phát triển từ khá lâu, hiện tại được áp dụng phổ biến do giá thành rẻ. Tuy nhiên, một nhược điểm lớn mà cảm biến điện hóa dễ gặp phải là tín hiệu không ổn định/trôi theo thời gian hoạt động, đặc biệt khi hoạt động trong môi trường

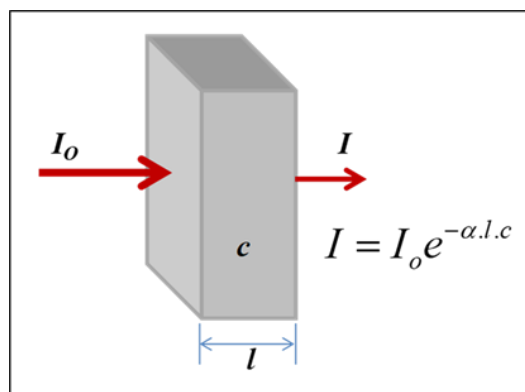
có độ ẩm lớn. Vì vậy, điều này hạn chế tính ứng dụng của cảm biến điện hóa trong hệ thống hoạt động liên tục với thời gian dài.

* Cảm biến theo nguyên lý hấp thụ hồng ngoại

Cảm biến nguyên lý hấp thụ hồng ngoại đo khí CO₂ là giải pháp tối ưu cho ứng dụng trong hệ thống đo liên tục khí CO₂ nhờ tính chọn lọc tốt, dải đo cho cả vùng nồng độ cao (%) và vùng nồng độ thấp (ppm), thời gian đáp ứng nhanh (chỉ khoảng vài giây), tuổi thọ cao và hoạt động đáng tin cậy. Thực tế, cảm biến khí dựa trên hấp thụ hồng ngoại là linh kiện được dùng phổ biến cho đo đạc, điều khiển nồng độ khí CO₂ trong nông nghiệp và công nghiệp [39-42].

Về mặt bản chất vật lý, cảm biến khí nguyên lý hấp thụ hồng ngoại dựa trên nguyên lý suy giảm cường độ hồng ngoại khi bức xạ hồng ngoại đi qua môi trường có chứa chất cần đo (ở đây là phân tử khí CO₂). Hình 1.1 minh họa định luật Lambert-Beer về sự suy giảm cường độ khi ánh sáng đi qua một môi trường khí (tuân theo hàm e mũ với α là hệ số đặc trưng hấp thụ hồng ngoại của khí, l là chiều dài quang học khi bức xạ hồng ngoại đi qua môi trường khí, c là nồng độ khí, I_0 là cường độ ánh sáng ban đầu và I là cường độ ánh sáng sau khi đi qua môi trường. Khi đó ta có công thức tính cường độ hồng ngoại I sau khi đi qua môi trường phụ thuộc vào nồng độ khí mục tiêu c theo công thức:

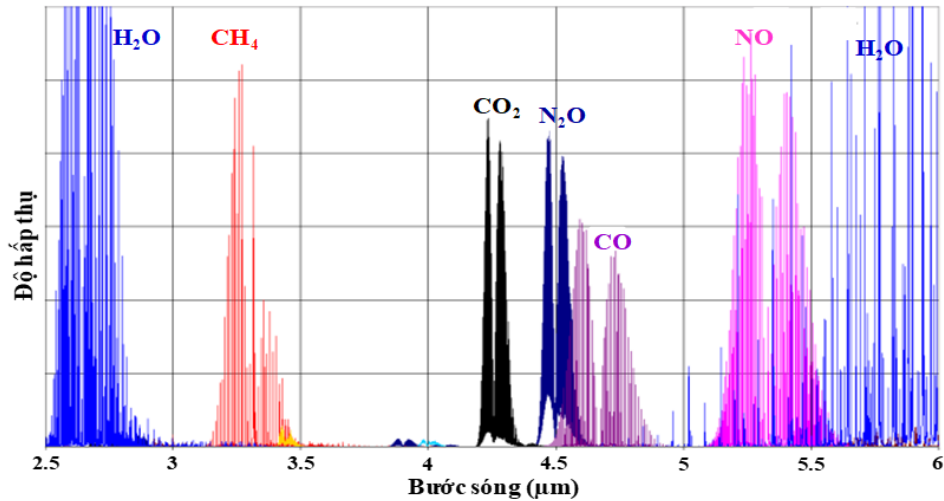
$$I = I_0 e^{-\alpha l c} \quad (1.1)$$



Hình 1.1. Định luật Lambert-Beer về suy giảm cường độ khi ánh sáng đi qua một môi trường có hệ số hấp thụ (α) và chiều dài (l).

Hình 1.2 là phổ hấp thụ bức xạ đặc trưng trong vùng hồng ngoại của một số loại khí phổ biến [43]. Dữ liệu này cho thấy mỗi loại khí có vùng phổ hấp thụ đặc trưng (tương ứng với dao động riêng của phân tử khí). Đây chính là đặc tính giúp cảm biến theo nguyên lý này có độ chọn lọc cao hơn so với cảm biến hoạt động theo các nguyên lý khác. Có thể thấy khí CO₂ bị hấp thụ mạnh tại

bước sóng lân cận 4,2 μm . Do đó, kết hợp kỹ thuật về quang học và điện tử để chọn lựa được tín hiệu hồng ngoại bị hấp thụ trong vùng 4,2 μm thì có thể đo đạc và phân tích được nồng độ khí CO_2 . Cảm biến khí dựa trên hấp thụ hồng



Hình 1.2. Phổ hấp thụ hồng ngoại đặc trưng của một số loại khí.

ngoại có thể được thiết kế với nhiều cấu hình khác nhau phù hợp với từng ứng dụng cụ thể. Mặc dù vậy, thiết kế cảm biến vẫn phải tuân theo nguyên tắc chung với cấu trúc cơ bản dựa trên nguyên lý hấp thụ hồng ngoại bao gồm nguồn/đèn phát bức xạ hồng ngoại, buồng chứa mẫu khí, một kính lọc quang để chỉ cho vùng bước sóng bức xạ hồng ngoại đặc trưng của khí mục tiêu đi qua, và đầu thu bức xạ hồng ngoại đặt sau kính lọc quang để chuyển đổi tín hiệu quang thành tín hiệu điện lối ra. Với việc sử dụng kính lọc quang (lọc thông dải hẹp), cấu hình này được gọi là cấu hình không tán sắc (Non-Dispersive Infrared – NDIR). Tuy nhiên, cấu hình với một đầu (Hình 1.3a) thu hồng ngoại trong thực tế ít được áp dụng do tín hiệu điện lối ra của đầu thu là rất nhỏ và có thể chứa nhiều tạp nhiễu, dẫn đến cảm biến hoạt động thiếu chính xác. Vì vậy, cấu hình phổ biến cho cảm biến quang hấp thụ hồng ngoại là theo kiểu không tán sắc hai kênh thu như thể hiện trên Hình 1.3b [44].

Thông thường, nguồn bức xạ hồng ngoại thường được chọn là nguồn phát dải rộng (ví dụ đèn dây tóc). Nguồn này được điều khiển bằng điện áp ở một tần số nhất định (thường ở 4 Hz), bức xạ hồng ngoại đi qua buồng chứa khí cần phân tích, một phần bức xạ bị hấp thụ tỉ lệ với nồng độ khí trong buồng đo tại bước sóng hấp thụ đặc trưng. Hai kính lọc quang, một tại 4,26 μm cho vùng bức xạ hồng ngoại truyền qua phù hợp với khí CO_2 , và một tại 3,9 μm cho vùng hồng ngoại không bị hấp thụ bởi khí (đóng vai trò so sánh); các bức

xạ hồng ngoại sau kính lọc quang sẽ đến hai đầu thu và được biến đổi quang – điện để thu được hai tín hiệu điện lối ra (dạng điện áp) tương ứng. Về mặt lý thuyết, chuẩn hóa tín hiệu theo nồng độ khí CO₂ có thể được thực hiện theo công thức từ định luật Lambert-Beer. Điện áp ra của kênh nhạy khí (U_1) và của kênh so sánh (U_2) phụ thuộc vào nồng độ khí và cường độ bức xạ hồng ngoại theo công thức:

$$U_1 = k_1 I_o e^{-kc} \quad (1.2)$$

$$U_2 = k_2 I_o \quad (1.3)$$

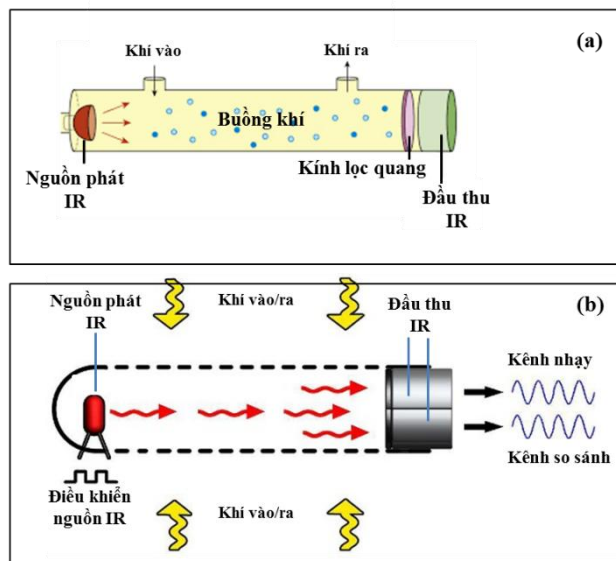
Trong đó, k_1 và k_2 là hằng số liên quan đến tính chất hấp thụ hồng ngoại ở hai kênh tương ứng, k là hằng số liên quan đến tính chất hấp thụ hồng ngoại cho cấu hình riêng của cảm biến, c là nồng độ khí và I_o là cường độ chiếu sáng ban đầu từ nguồn. Ta thực hiện phép tính để loại bỏ I_o :

$$\frac{U_1}{U_2} = \frac{k_1}{k_2} e^{-kc} \quad (1.4)$$

Khi đó nồng độ khí CO₂ sẽ được tính theo công thức:

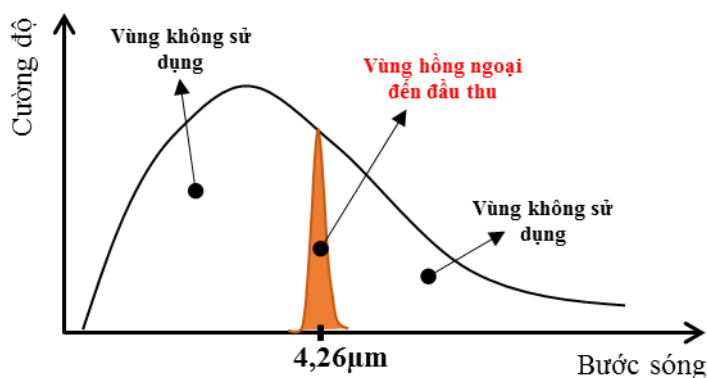
$$c = -q \ln \left(\frac{U_1}{U_2} \right) \quad (1.5)$$

Trong đó, c là nồng độ khí CO₂, q được coi là hệ số phẩm chất liên quan đến tính chất hấp thụ hồng ngoại của khí CO₂ trong một cấu hình cảm biến NDIR cụ thể. Vì vậy, các bộ số liệu điện áp lối ra thu nhận từ hai kênh sẽ được dùng để tính toán nồng độ khí CO₂.



Hình 1.3. Cấu trúc cảm biến khí dựa trên nguyên lý hấp thụ hồng ngoại với cấu hình không tán sắc (NDIR) một kênh thu (a) và hai kênh thu (b).

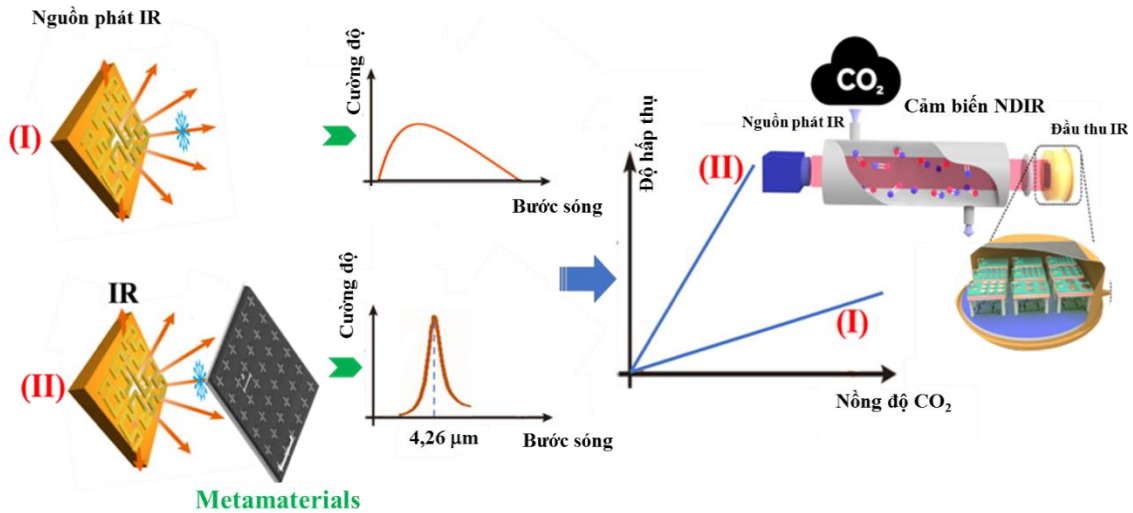
Đáng chú ý, tín hiệu từ đầu thu chuyển đổi quang-điện rất nhỏ và còn chịu ảnh hưởng rất lớn từ nhiễu tạp nhiễu và nhiệt độ môi trường. Vì vậy, để loại bỏ nhiễu cần phải điều khiển nguồn phát hồng ngoại theo tần số bằng cách cấp điện áp/dòng điện cho đèn ở dạng xung (hình sin hoặc hình vuông) với tần số thường dùng là 4 Hz. Khi đó, các kỹ thuật điện tử sẽ giúp lọc nhiễu bằng cách thu nhận tín hiệu trên đầu thu và lọc dải tần (4 Hz) tương ứng với tần số của đèn phát, từ đó có thể loại bỏ các nhiễu. Kỹ thuật điện tử cho lọc nhiễu ở tần số thấp (4 Hz) là một kỹ thuật rất khó và cần linh kiện điện tử có độ chính xác cao. Đây chính là lý do mà thiết bị đo khí chất lượng cao dựa trên nguyên lý hấp thụ hồng ngoại đều có giá thành cao. Ngoài ra, một điểm hạn chế của các cảm biến hoạt động theo nguyên tắc này là nguồn phát hồng ngoại thông thường sẽ cho phổ phát xạ dải rộng (trong vùng $1 \div 16 \mu\text{m}$) nhưng kính lọc quang (kính lọc thông dải) lại chỉ cho một vùng dải hẹp bước sóng hồng ngoại đi qua (ví dụ cho khí CO_2 chỉ là $4,26 \mu\text{m} \pm 200 \text{ nm}$), như thể hiện trên Hình 1.4.



Hình 1.4. Minh họa phân phổ hồng ngoại (vùng màu đỏ) được hấp thụ bởi khí CO_2 trong toàn phổ hồng ngoại dải rộng.

Như vậy, phần lớn năng lượng hồng ngoại bị loại bỏ không sử dụng trong cảm biến. Từ đó, nếu chuyển đổi được các phần vùng phổ ngoài $4,26 \mu\text{m}$ về vùng đặc trưng cho khí CO_2 hấp thụ sẽ đem đến hiệu quả vượt trội khi áp dụng cho cảm biến NDIR như thể hiện trên hình 1.5. Trong đó, nguồn phát hồng ngoại (IR), không có MMs sẽ có phổ hồng ngoại dải rộng khi đó cảm biến NDIR theo kiểu truyền thống, tương ứng với độ nhạy trên đường (I) của tín hiệu lỗi ra phụ thuộc vào nồng độ khí CO_2 . Trong khi đó, khi nguồn IR được

tích hợp thêm MMs sẽ tạo ra phổ hồng ngoại dải hẹp, có khả năng cải thiện về cường độ trong vùng bước sóng đặc trưng ($4,26\text{ }\mu\text{m}$). Kết quả là khi áp dụng vào trong cảm biến NDIR, tín hiệu lồi ra phụ thuộc vào nồng độ khí CO_2 (đường số II) tăng mạnh so với trường hợp không có MMs.



Hình 1.5. Minh họa tích hợp vật liệu MMs vào cảm biến NDIR để nâng cao hiệu quả đo khí CO_2 .

1.1.2. Các phương thức cải tiến cảm biến NDIR

Cảm biến khí NDIR tuy nổi bật với tin cậy và tính chọn lọc cao, đặc biệt là trong việc phát hiện nồng độ thấp (vùng ppm). Các cảm biến NDIR truyền thống thường sử dụng nguồn phát hồng ngoại theo kiểu bức xạ vật đen tuyệt đối. Tuy nhiên, cách tiếp cận này khiến cho mức tiêu hao năng lượng tăng và tuổi thọ của linh kiện nguồn hồng ngoại giảm đáng kể. Các giải pháp hiện tại được áp dụng khá phổ biến ví dụ như tăng chiều dài quang trình hay sử dụng nguồn hồng ngoại dải hẹp như laser cho cảm biến NDIR tiên tiến, đặc biệt cho vùng nồng độ thấp. Tuy vậy, các giải pháp này lại làm tăng kích thước và độ phức tạp của thiết bị cũng như làm tăng chi phí. Việc nghiên cứu một cảm biến NDIR hiệu suất cao vẫn là một nhiệm vụ quan trọng nhưng cũng đầy thách thức, đặc biệt khi xem xét các yêu cầu bổ sung như việc giảm kích thước, giảm công suất tiêu thụ điện của nguồn phát và tối thiểu hóa chi phí. Các kỹ thuật cải tiến được dùng phổ biến cho cảm biến NDIR vùng nồng độ thấp là:

Tăng cường độ bức xạ hồng ngoại của nguồn phát bằng cách tăng nguồn điện cung cấp cho linh kiện phát hồng ngoại. Tuy nhiên cách này chỉ tăng được đến một giới hạn nhất định vì sẽ làm giảm tuổi thọ của nguồn phát.

Tăng quang trình để tạo điều kiện cho khí CO₂ hấp thụ bức xạ hồng ngoại. Điều này sẽ khiến cho cấu trúc cảm biến trở nên phức tạp, khó khăn cho chế tạo và làm tăng đáng kể kích thước tổng thể.

Sử dụng nguồn bức xạ hồng ngoại dải hẹp (ví dụ nguồn laser). Nhược điểm của cách này là ưu cầu cao về kỹ thuật điện tử đi kèm và giá thành rất cao của linh kiện laser.

Mới đây, một số nghiên cứu chỉ ra rằng vật liệu biến hóa (MMs), để điều khiển được tương tác với bức xạ điện từ có thể chuyển nguồn bức xạ hồng ngoại dải rộng thành nguồn bức xạ hồng ngoại dải hẹp bằng cách tích hợp lớp vật liệu trên bề mặt một nguồn hồng ngoại dải rộng (kiểu truyền qua, như thể hiện trên Hình 1.5), hoặc theo cấu trúc gương (kiểu phản xạ). Với kỹ thuật này, bước đột phá để tạo bức xạ hồng ngoại dải hẹp chất lượng cao có thể đạt được. Khi đó, cách tiếp cận này sẽ có những ưu điểm như sau:

Năng lượng từ nguồn hồng ngoại dải rộng được lớp MMs hấp thụ và chuyển hóa để phát ra bức xạ hồng ngoại dải hẹp có bước sóng mong muốn. Điều này sẽ giúp tăng cường độ nhạy, độ phân giải, giảm được kích thước và công suất hoạt động của thiết bị.

Với ưu điểm trong tính toán và mô phỏng trước được tính chất của MMs cần chế tạo, chúng ta có thể điều khiển được dải bước sóng hồng ngoại phát xạ, tạo ra các thiết bị cảm biến thông minh không chỉ phát hiện được khí CO₂ mà còn các loại khí khác.

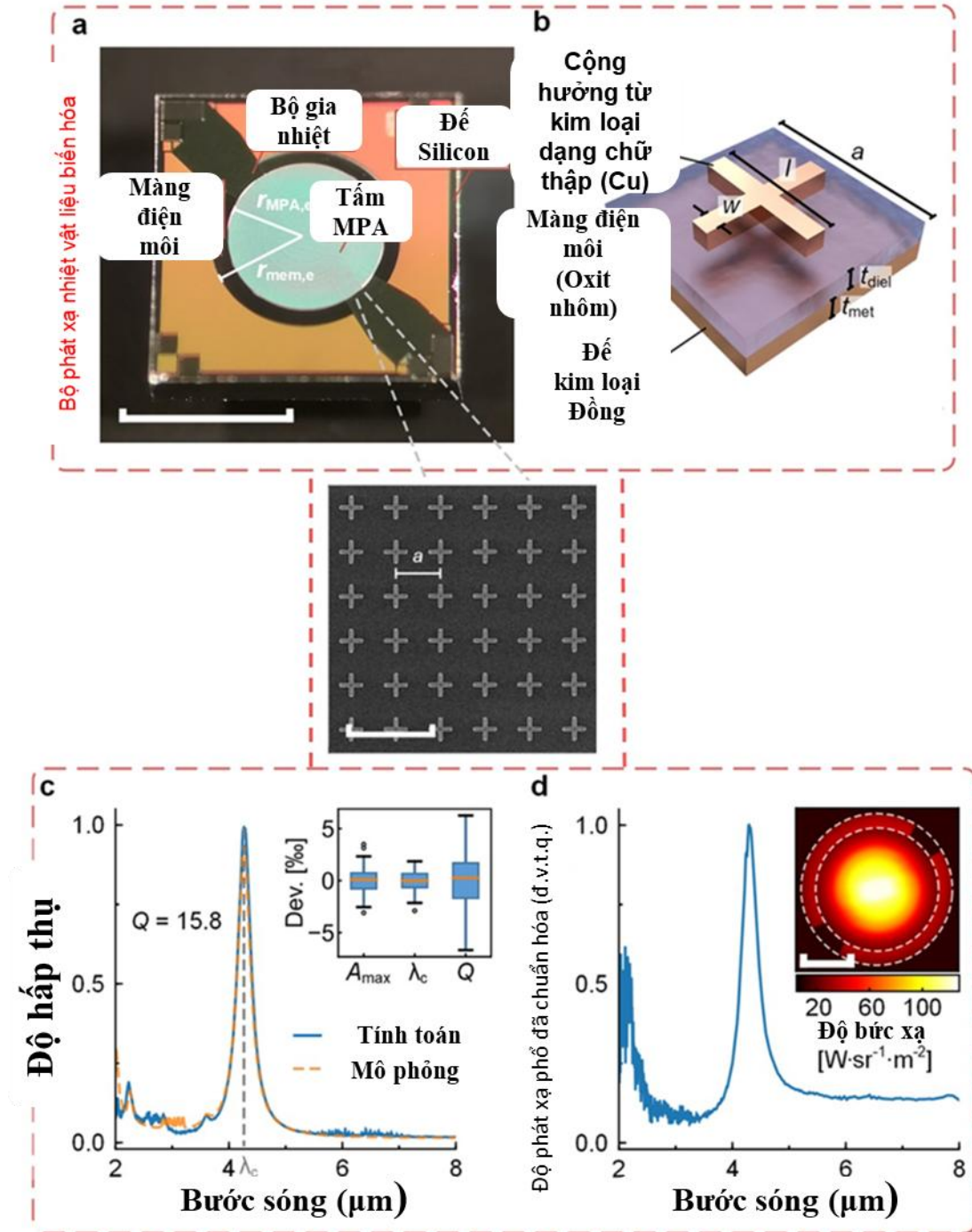
Công nghệ chế tạo lớp MMs là phù hợp khi ghép/tích hợp với nguồn hồng ngoại (vi nhiệt kiểu dây đốt) và chế tạo được số lượng lớn theo mẻ.

1.2. Một số mô hình áp dụng MMs cho cảm biến NDIR

1.2.1. Vật liệu MMs tích hợp trên bề mặt nguồn phát xạ hồng ngoại

Việc tích hợp MM vào linh kiện phát xạ hồng ngoại cho thấy khả năng tăng cường hoạt động của cảm biến CO₂ ở nồng độ thấp với độ phân giải cao. Cụ thể, năng lượng từ nguồn phát hồng ngoại dải rộng sẽ được lớp MMs hấp thụ và chuyển hóa để phát ra bức xạ hồng ngoại dải hẹp tại bước sóng mong muốn. Khi đó, phần lớn năng lượng từ nguồn bức xạ sẽ chuyển thành bức xạ dải hẹp để đến đầu thu. Điều này giúp tăng cường độ nhạy, độ phân giải, giảm được kích thước và công suất hoạt động của thiết bị. Bên cạnh đó, công nghệ chế tạo MMs cũng khá đa dạng, phù hợp với quy trình tích hợp nguồn hồng

ngoại (ví nhiệt kiểu dây đốt, kiểu màng mỏng) và có khả năng chế tạo được số lượng góp phần làm giảm chi phí sản xuất [46-65].



Hình 1.6. (a) Linh kiện phát hồng ngoại được tích hợp MMs, (b) cấu trúc ô cơ sở của MMs, (c) phổ hấp thụ của MMs và (d) phổ phát xạ tương đối của linh kiện phát hồng ngoại được tích hợp MMs; Hình đính kèm là ảnh bức xạ nhiệt tương ứng [46].

Gần đây, một số nghiên cứu trên thế giới đã chỉ ra rằng có thể chuyển nguồn bức xạ hồng ngoại dải rộng thành dải hẹp bằng cách tích hợp MMs (theo

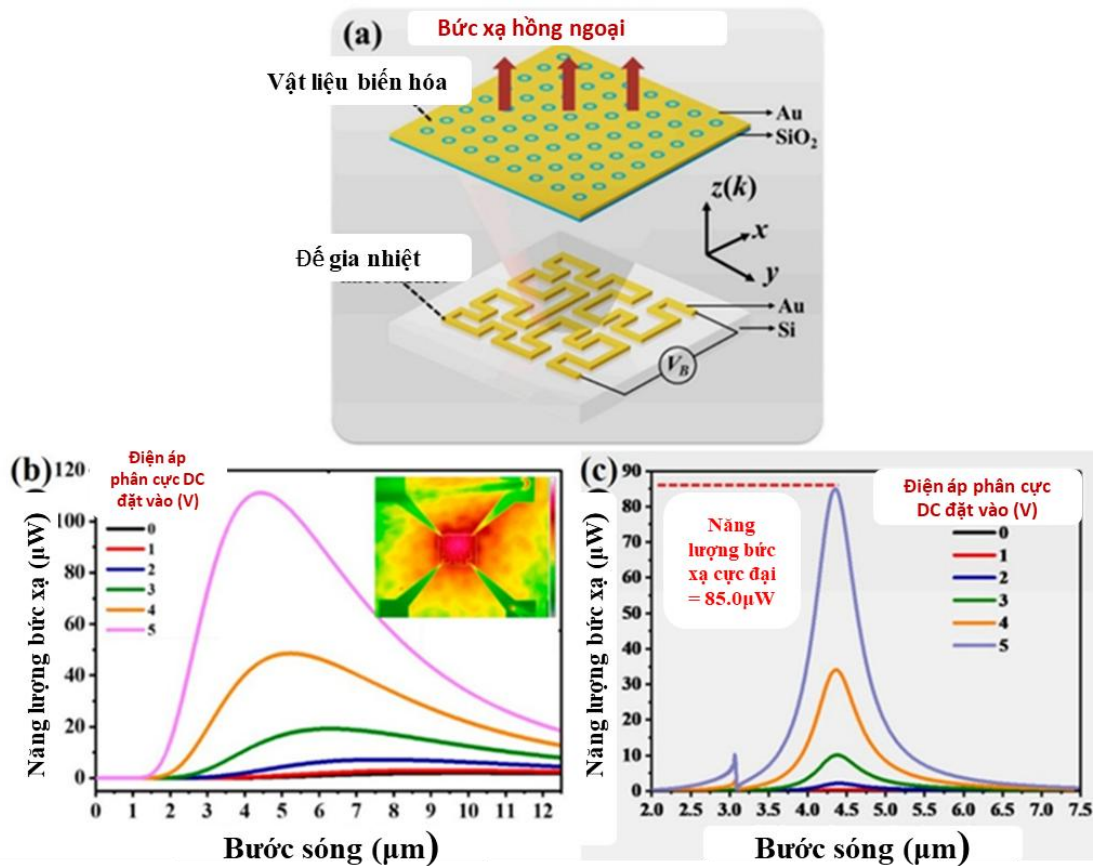
kiểu hấp thụ) lên trên bề mặt nguồn phát xạ [46,47]. Ví dụ về linh kiện phát hồng ngoại được tích hợp MMs (Hình 1.6a) bao gồm một đế Si với một màng điện môi tròn nằm phía trên. Bộ gia nhiệt kim loại được kết nối vào màng sinh ra bức xạ nhiệt dựa trên hiệu ứng đốt nóng điện trở. Trong trường hợp này, MMs có thể được chế tạo bằng phương pháp khắc chùm tia điện tử (e-beam lithography) và được tích hợp lên trên nguồn phát nhiệt đóng vai trò biến đổi phổ bức xạ thành bức xạ dải hẹp. Cấu trúc của MMs (Hình 1.6b) bao gồm ba lớp, kim loại (Cu) liên tục – điện môi (Al_2O_3) liên tục – lớp kim loại (Cu) phía trên là một chuỗi tuần hoàn của các cấu trúc cộng hưởng hình dấu cộng. Về tính chất điện từ, cấu trúc MMs ngăn chặn hoàn toàn thành phần truyền qua nhờ tấm kim loại liên tục phía sau. Trong khi đó, cấu trúc cộng hưởng tuần hoàn phía trước kết hợp với tấm kim loại phía sau tạo thành một cấu trúc cộng hưởng. Xung quanh tần số cộng hưởng, hiện tượng phối hợp trở kháng xảy ra và triệt tiêu thành phần phản xạ. Nhờ vậy, MMs có khả năng hấp thụ gần như tuyệt đối trong dải hẹp với hệ số phẩm chất $Q_{\text{factor}} = 15,8$ như trên Hình 1.6c. Theo định luật cân bằng nhiệt, vật đen hấp thụ tuyệt đối cũng tương đương với vật đen bức xạ tuyệt đối. Do đó, MMs đóng vai trò như thành phần phát xạ dải hẹp hiệu suất cao trong linh kiện phát hồng ngoại. Đặc trưng phát xạ của linh kiện phát hồng ngoại tích hợp MMs (với nhiệt độ đĩa đốt nóng là 400°C) được thể hiện trong Hình 1.6d. Kết quả cho thấy một dải phát xạ hẹp với cường độ cao đã được tạo ra tại bước sóng đặc trưng cho khí CO_2 . Năng lượng bức xạ tập trung chủ yếu tại trung tâm của bộ phát và chỉ một phần nhỏ bức xạ sinh ra tại phần rìa ngoại của màng điện môi mà không được che phủ hết bởi MMs.

1.2.2. Vật liệu biến hóa tích hợp gần nguồn phát xạ IR (truyền qua)

Một hướng nghiên cứu khác là sử dụng vật liệu biến hóa theo dạng truyền qua nhằm thu hẹp dải phát xạ do Ruijia Xu và cộng sự đề xuất cũng thu được các kết quả khả quan [47]. Linh kiện này bao gồm một cấu trúc MMs truyền qua được tích hợp trên bộ vi nhiệt (Hình 1.7). Để thu hẹp độ bán rộng của phổ phát xạ hồng ngoại, cấu trúc MMs truyền qua được tích hợp lên bề mặt bộ vi nhiệt. Công suất bức xạ của bộ phát xạ IR được tích hợp MMs ở các giá trị điện áp phân cực DC khác nhau được thể hiện trong Hình 1.7(c).

Bằng cách tăng giá trị điện áp phân cực DC, công suất bức xạ cực đại đạt 0,2; 0,4; 2,1; 10,0; 33,9 và 85,0 μW tương ứng với các giá trị điện áp 0, 1, 2, 3,

4 và 5 V. Công suất bức xạ cực đại là $85,0 \mu\text{W}$ và độ rộng bán phổ (FWHM) của phổ bức xạ giảm còn $0,65 \mu\text{m}$. Trong trường hợp được tích hợp MMs, giá trị FWHM giảm đi xấp xỉ 8,3 lần so với khi không tích hợp MMs. Nhờ đó, một phổ bức xạ dải hẹp tại bước sóng đặc trưng của CO_2 được tạo ra khiến cho bộ phát hồng ngoại tích hợp MMs có hiệu suất cao hơn khi ứng dụng trong cảm biến khí CO_2 .



Hình 1.7. (a) Bộ phát hồng ngoại dựa trên bộ vi nhiệt được tích hợp MMs truyền qua; (b) Công suất phát xạ của bộ vi nhiệt dưới các điện áp phân cực DC khác nhau. Hình đính kèm là ảnh bức xạ nhiệt được ghi nhận bởi máy đo bức xạ nhiệt và (c) Công suất phát xạ của bộ phát hồng ngoại được tích hợp MMs truyền qua dưới các nguồn điện khác nhau [47].

1.3. Kết luận Chương 1

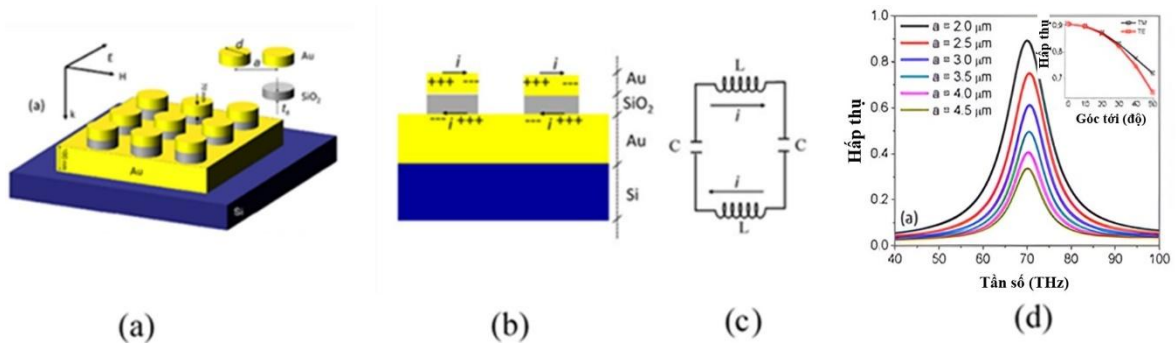
Như vậy, tích hợp MMs vào nguồn phát hồng ngoại dải rộng để tạo nguồn phát hồng ngoại dải hẹp là lĩnh vực nghiên cứu rất mới trên thế giới, đầy sôi động và chứa đựng nhiều lý thú trong khoa học. Ưu điểm trong mô phỏng thiết kế cấu trúc MMs cho phép tạo bức xạ có vùng bước sóng hồng ngoại mong muốn, không chỉ mang lại các ứng dụng trong cảm biến NDIR đo khí CO_2

nguyên lý hấp thụ hồng ngoại mà còn có thể mở ra nhiều khả năng ứng dụng trong nhiều lĩnh vực khác nhau, ví dụ cho nguy trang đa phổ [66-80]. Lớp MMs có thể được tích hợp trực tiếp trên bề mặt nguồn phát hoặc ở một khoảng cách nhất định. Khi đó, phổ hồng ngoại dải rộng từ nguồn phát khi đi qua lớp MMs được điều khiển để tạo ra phổ hồng ngoại với các đỉnh phổ hẹp đặc trưng.

CHƯƠNG 2: PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU VẬT LIỆU BIẾN HÓA VÀ THIẾT KẾ CẤU TRÚC CẢM BIẾN NDIR

2.1. Phương pháp mô hình hóa sử dụng mạch LC tương đương

Dưới tác dụng của sóng điện từ, các cấu trúc cơ sở của MMs nói chung và MPAs nói riêng hoạt động như một bộ cộng hưởng. Để xác định được tính chất điện từ của MMs một cách nhanh chóng, đơn giản và trực quan, trong nhiều trường hợp, phương pháp mô hình hóa cấu trúc của MMs bằng một mạch điện LC tương đương được sử dụng và cho hiệu quả cao. Các thành phần điện từ trong cấu trúc của MMs được mô hình hóa bằng các cuộn dây (đặc trưng bởi giá trị độ tự cảm L) và tụ điện (đặc trưng bởi điện dung C).



Hình 2.1. MMs cấu trúc đĩa tròn và mô hình mạch điện LC tương đương: (a) Cấu trúc MMs trong không gian ba chiều; (b) Cấu trúc các lớp vật liệu đĩa tròn; (c) Mô hình mạch điện LC tại tần số cộng hưởng từ và (d) Sự phụ thuộc của độ hấp thụ vào a [81].

Trong thực tế, phần lớn các cấu trúc vật liệu MMs và MPAs đều sử dụng kim loại quý (Cu, Ag, Au) nên điện trở nhỏ không đáng kể và thường được bỏ qua. Các giá trị độ tự cảm L và điện dung C tương ứng của các cuộn dây và tụ điện phụ thuộc vào các tham số hình học cấu trúc cũng như các tính chất điện từ của các vật liệu cấu thành MMs. Khi đó, vật liệu MMs hoạt động tương ứng với mạch điện LC tại tần số cộng hưởng $\omega = \frac{1}{\sqrt{LC}}$. Do đó, dựa vào mô hình mạch điện LC tương đương có thể xác định được gần như chính xác tần số cộng hưởng của MMs và MPAs. Đồng thời, có thể dự đoán được tính chất điện từ và sự ảnh hưởng của các tham số hình học cấu trúc, tham số vật liệu của MMs và MPAs [81-90]. Một trong những cấu trúc MMs phổ biến và được sử dụng nhiều trong lĩnh vực vật liệu MPAs là cấu trúc đĩa tròn như N.T. Tung và các cộng sự [81] trình bày trong Hình 2.1.

Cấu trúc gồm các đĩa tròn đồng nhất về hình dạng được sắp xếp tuần hoàn trên bề mặt của tấm điện môi như trình bày trong Hình 2.1a. Trong đó, mỗi ô cơ sở hình vuông (chiều rộng a) chứa một đĩa tròn kim loại (đường kính d), độ dày lớp kim loại và lớp điện môi tương ứng là t_m và t_s . Mô hình mạch điện LC tương đương của một ô cơ sở đĩa tròn được N.T. Tung và các cộng sự chỉ ra như ở Hình 2.1b. Trong đó, hai lớp kim loại trong một ô cơ sở của cấu trúc đĩa tròn có vai trò tương đương cuộn cảm. Các tụ điện được hình thành bởi diện tích kim loại phía đầu và cuối mỗi đĩa kim loại dọc theo hướng điện trường. Dưới tác dụng kích thích của sóng điện từ, cấu trúc đĩa tròn xuất hiện tần số cộng hưởng cơ bản là tần số cộng hưởng điện và tần số cộng hưởng từ tương ứng với sự tác động của điện trường và từ trường kích thích. Mô hình mạch điện LC tương đương tại tần số cộng hưởng từ được biểu diễn ở Hình 2.1c và tại tần số cộng hưởng điện được biểu diễn ở Hình 2.1d.

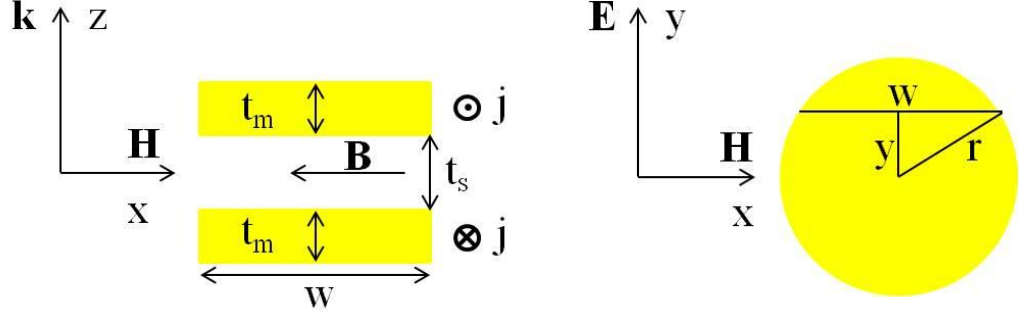
Dựa vào cấu trúc hình học của cặp đĩa kim loại, xác định được độ tự cảm L_m của các cuộn cảm và điện dung C_m của các tụ điện trong mạch điện LC tương đương của cộng hưởng từ:

$$C_m = \frac{\alpha \epsilon \epsilon_0 \pi d^2}{4t_s} \quad L_m = \frac{\mu \pi t_s}{4} \quad (2.1)$$

trong đó: ϵ_0, μ_0 lần lượt là độ điện thẩm và độ từ thẩm của chân không, ϵ là độ điện thẩm tương đối của môi trường giữa các tấm kim loại, α là hệ số hình học phản ánh phần diện tích mà điện tích phân bố tập trung ở một phần của thanh kim loại (thông thường $0,2 \leq \alpha \leq 0,3$). Tần số cộng hưởng từ f_m được xác định từ L_m và C_m :

$$f_m = \frac{1}{2\pi \sqrt{L_m C_m}} = \frac{2}{\pi^2 d \sqrt{\alpha \epsilon \mu}} \quad (2.2)$$

Phương trình (13) cho thấy f_m tỷ lệ nghịch với đường kính của đĩa, nhưng không phụ thuộc vào chiều rộng hay khoảng cách giữa chúng. Kết quả này hoàn toàn phù hợp với kết quả tính toán mô phỏng và rất hữu ích khi thiết kế, tối ưu hóa cấu trúc vật liệu MMs và MPAs



Hình 2.2. Các thông số hình học và phân cực điện trường từ trường trong trường hợp cấu trúc MMs dạng cặp đĩa.

Phương pháp tiếp cận này đã được nhóm nghiên cứu tại Viện Khoa học vật liệu kế thừa và phát triển để dự đoán vị trí tần số cộng hưởng và sự phụ thuộc của nó vào các thông số hình học, thành phần vật liệu cho nhiều cấu trúc vật liệu MMs khác nhau như cấu trúc cặp đĩa, cấu trúc lưới cá, cấu trúc lục giác, cấu trúc kim cương, cấu trúc tích hợp vật liệu InSb,... Kết quả thu được từ phương pháp này phù hợp với kết quả mô phỏng cũng như thực nghiệm. Cụ thể, đối với trường hợp cấu trúc cặp đĩa, khi bị kích thích bởi sóng điện từ tới vuông góc với bề mặt đĩa, từ trường và điện trường tác động lên cặp đĩa sinh ra cộng hưởng điện và cộng hưởng từ. Với cách tiếp cận tương tự đối với cấu trúc cặp thanh kim loại, khi từ trường đi vào giữa cặp đĩa kim loại sẽ sinh ra một dòng điện đối song j trên bề mặt cặp đĩa (Hình 2.2). Lúc này, từ thông ϕ đi qua diện tích chắn bởi cặp đĩa là:

$$\phi = \oiint B dS \quad (2.3)$$

trong đó: B là mật độ từ trường được tính bằng công thức $B = \frac{\mu\mu_0 I}{2(w + t_s)}$, với μ_0

là độ từ thẩm của không khí, I là cường độ dòng điện trên bề mặt cặp đĩa và w là chiều rộng của đĩa ở vị trí y bất kì theo phương điện trường. Khi đó, từ thông được biểu diễn như sau:

$$\Phi = \int_{-\left(\frac{t_s}{2} + t_m\right)}^{\left(\frac{t_s}{2} + t_m\right)} dz \int_{-r}^r \frac{\mu\mu_0 I}{\sqrt{r^2 - y^2}} dy \quad (2.4)$$

trong đó: $N\Phi = LI$ và $N = 1$, với N và L lần lượt là số lượt dòng điện và độ tự cảm của cặp đĩa kim loại. Thông thường, độ dày của lớp kim loại t_m rất nhỏ so

với độ dày lớp điện môi t_s ($t_m \ll t_s$), do đó độ tự cảm L của cặp đĩa được xấp xỉ bằng:

$$L = \int_0^{t_s} dz \int_{-r}^r \frac{\mu\mu_0}{\sqrt{r^2 - y^2}} dy \quad (2.5)$$

Độ tự cảm L_m của một đĩa được tính bằng:

$$L_m = \frac{L}{2} = \frac{\pi\mu\mu_0(t_s + 2t_m)}{4} \quad (2.6)$$

Do điện tích chủ yếu tập trung ở phần đầu và phần cuối mỗi đĩa dọc theo hướng điện trường nên điện dung tương đương của cấu trúc cặp đĩa có thể được ước lượng là:

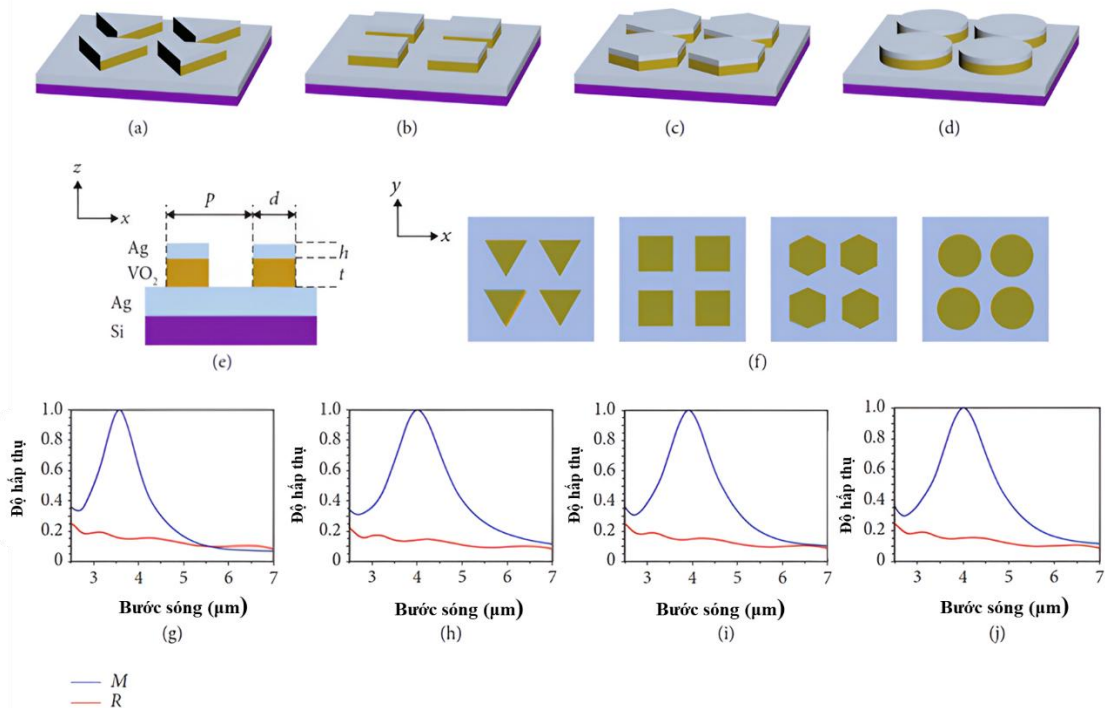
$$C_m = \varepsilon\varepsilon_0 \frac{c_1\pi r^2}{t_s} \quad (2.7)$$

với hệ số hình học $0,2 \leq c_1 \leq 0,3$ và ε là hằng số điện môi của lớp điện môi giữa hai đĩa kim loại. Trong thực tế, để ước lượng chính xác c_1 , chúng tôi tiến hành mô phỏng phân bố điện tích trên cấu trúc cặp đĩa ở tần số cộng hưởng, từ đó xác định được điện tích mà điện tích cảm ứng tích tụ. Tần số cộng hưởng từ của cấu trúc MMs cặp đĩa kim loại được xác định từ công thức $\omega = \frac{1}{\sqrt{L_m C_m}}$.

Trong trường hợp xác định tính chất hấp thụ của một MPA, điện trở của các thành phần trong MPA cần được tính đến và đưa vào mô hình mạch điện LC, khi đó mạch điện tương đương trở thành RLC. Trở kháng tương đương của cấu trúc MPA có thể được xác định thông qua mô hình mạch điện RLC. Có thể điều chỉnh các tham số cấu trúc để phối hợp trở kháng xảy ra, dẫn đến hệ số phản xạ trên bề mặt của MPA bằng không. Pang và cộng sự [143] đã áp dụng lý thuyết mạch điện LC tương đương cho MPA và làm rõ sự ảnh hưởng của điện trở bề mặt lên tần số cộng hưởng của MPA. Kết quả chỉ ra rằng dải tần hấp thụ rộng hay hẹp có thể điều chỉnh được bằng cách thay đổi điện trở bề mặt, phương pháp này có thể được sử dụng để thiết kế MPA nhanh chóng và hiệu quả.

Vào năm 2021, một số mô hình tính toán lý thuyết cập nhật khác đã được công bố bởi F.Ren và cộng sự về ảnh hưởng của hình dạng ô cơ sở lên các bộ hấp thụ/phát xạ vật liệu biến hóa hồng ngoại có thể chuyển đổi dựa trên VO₂ [82]. Hình 2.3a–d minh họa ý tưởng về bốn bộ phát MMs hồng ngoại có thể

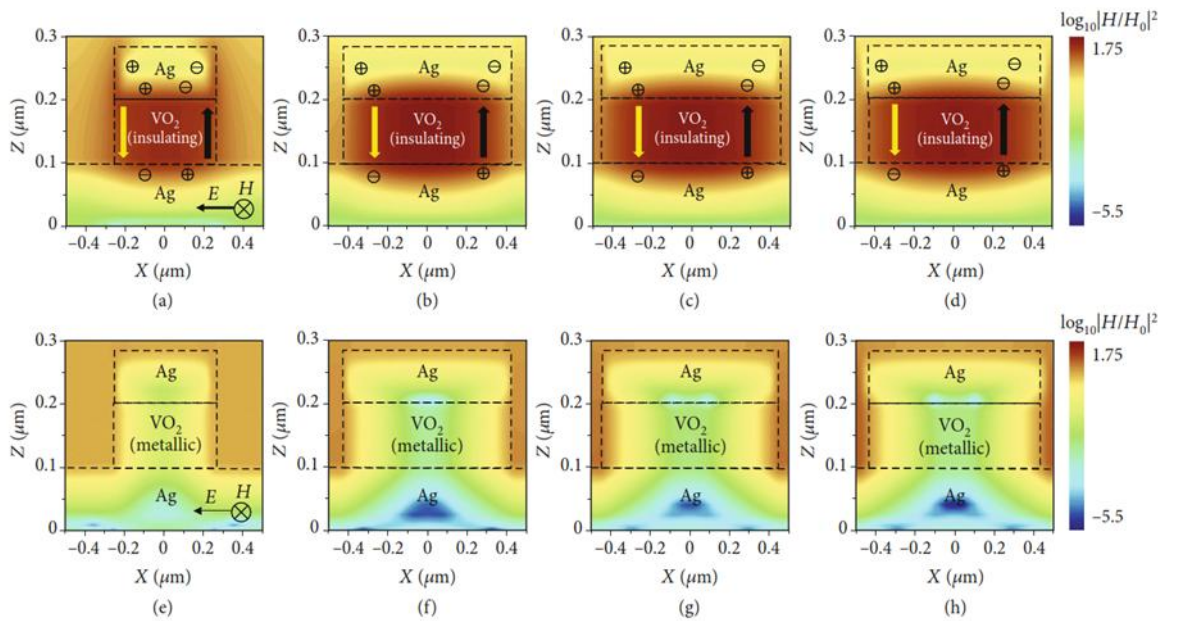
chuyển đổi dựa trên VO_2 . Trong cấu hình ô cơ sở thể hiện ở Hình 2.3(e), mỗi bộ phát chuyển đổi bao gồm một lớp Ag dày $h = 80$ nm và một lớp VO_2 dày $t = 100$ nm trên mặt phẳng Ag, tạo thành một cấu trúc kim loại–điện môi–kim loại điển hình. Mạng các cấu trúc (patch) Ag và VO_2 có chu kỳ $p = 1$ μm , và hình dạng ô cơ sở lần lượt là tam giác, vuông, lục giác và tròn (xem hình chiếu từ trên xuống theo trục x - y ở Hình 2.3f). Sau khi tối ưu hóa cấu trúc, tất cả các bộ phát đều có đỉnh hấp thụ xấp xỉ đơn vị tại khoảng bước sóng 4 μm khi nhiệt độ dưới nhiệt độ chuyển pha (T), và các đỉnh này biến mất khi nhiệt độ vượt quá T . Phổ hấp thụ mô phỏng dưới trường hợp tia tới vuông góc được thể hiện ở Hình 2.3g–j đối với các bộ phát sử dụng cấu trúc tam giác, vuông, lục giác và tròn, tương ứng. Đường liền nét màu xanh lam và đỏ thể hiện độ hấp thụ của bốn bộ phát chuyển đổi khi VO_2 ở trạng thái điện môi (VO_2 (M)) và trạng thái kim loại (VO_2 (R)).



Hình 2.3. Bốn bộ phát MMs hồng ngoại chuyển đổi và khả năng “bật/tắt” hấp thụ của chúng; (a)–(f) Hình minh họa cấu trúc của bốn bộ phát MMs hồng ngoại chuyển đổi gồm lớp Ag/ VO_2 /Ag; (g)–(j) Phổ độ hấp thụ của các bộ phát với ô cơ sở dạng tam giác, vuông, lục giác và tròn trong khoảng 2.5–7 μm khi VO_2 ở trạng thái điện môi (đường màu xanh) và trạng thái kim loại (đường màu đỏ).

Kích thước cạnh của ô cơ sở đối với bộ phát có cấu trúc tam giác dọc theo các trục x và y là 980 nm; đỉnh hấp thụ đạt tại bước sóng 3,57 μm khi VO_2 ở trạng thái điện môi, với giá trị độ hấp thụ trên 0,998. Đối với bộ phát có cấu trúc hình vuông, cạnh của ô cơ sở là 850 nm theo cả hai trục x và y, đỉnh hấp thụ ở 4,02 μm với giá trị trên 0,999. Với bộ phát cấu trúc lục giác, cạnh ô cơ sở là 900 nm và đỉnh hấp thụ ở 3,92 μm với độ hấp thụ đạt đến 0,998. Đối với bộ phát có ô tròn (hình trụ), đường kính ô cơ sở là 940 nm, đỉnh hấp thụ ở 4,02 μm với độ hấp thụ tới 0,998. Tuy nhiên, khi VO_2 chuyển sang trạng thái kim loại, độ hấp thụ của tất cả các bộ phát giảm mạnh, thể hiện trạng thái “tắt”, với độ hấp thụ khoảng 0,15; cụ thể là 0,15; 0,14; 0,15 và 0,15 lần lượt cho bốn bộ phát tại các bước sóng tương ứng.

Nhìn chung, cơ chế hình thành các đỉnh hấp thụ quang phổ là sự kích thích polariton từ (MP) hoặc các sóng đứng, hay các dạng cộng hưởng khác. Nghiên cứu này tập trung vào polariton từ (MP) trong lớp VO_2 điện môi nằm giữa các cấu trúc Ag phía trên và mặt phẳng Ag phía dưới khi VO_2 ở trạng thái điện môi, hiện tượng thường xuất hiện trong cấu trúc kim loại–điện môi–kim loại. Phân bố trường điện từ trong một ô cơ sở tại bước sóng ứng với đỉnh hấp thụ đối với bốn bộ phát chuyển đổi được thể hiện ở Hình 2.4. Ở đây, mật độ trường từ ($|H|^2$) được chuẩn hóa theo trường từ tới được biểu diễn bằng các đường đồng mức màu, và điện trường được biểu diễn qua sự phân bố điện tích cùng với các mũi tên màu vàng và đen chỉ hướng trên các lớp Ag và VO_2 .



Hình 2.4. Phân bố trường điện từ khi VO₂ ở trạng thái điện môi: (a)–(d) Các ảnh cắt x-z đi qua tâm lớp VO₂ của ô tam giác, vuông, lục giác và tròn tại bước sóng xảy ra đỉnh hấp thụ; (e)–(h) Ảnh cắt x-z phân bố trường điện từ của các bộ phát khi VO₂ ở trạng thái kim loại tại cùng các bước sóng đó.

Bốn hình cắt x-z tại mặt phẳng đi qua tâm ô cơ sở đối với các bộ phát chuyển đổi có cấu trúc tam giác, vuông, lục giác và tròn lần lượt được minh họa ở Hình 2.4a–d và Hình 2.4e–h. Đối với VO₂ ở trạng thái điện môi, khi một điện trường biến thiên theo thời gian dọc theo trục x được đặt lên các cấu trúc Ag phía trên, tại biên giữa các cấu trúc Ag và VO₂ hoặc không khí sẽ xuất hiện các điện tích biến thiên (dương hoặc âm) theo thời gian. Đồng thời, trên mặt phẳng Ag đáy sẽ xuất hiện các điện tích có dấu trái ngược với điện tích trên mép các cấu trúc Ag phía trên tại cùng một thời điểm. Ví dụ, khi điện trường dọc trục x biến thiên từ giá trị âm sang 0, các điện tích âm và dương lần lượt tích tụ tại các mép phải và trái của cấu trúc Ag phía trên (như thể hiện ở Hình 2.4a–d, và các điện tích trái dấu tương ứng tích tụ trên mặt phẳng Ag đáy. Khi đó, các điện trường có hướng ngược nhau được tạo ra ở hai bên lớp VO₂. Những điện trường đối nghịch này sẽ đảo chiều tuần hoàn khi sóng điện từ bên ngoài tác động tuần hoàn, dẫn đến việc hình thành một điện trường dao động bên trong lớp điện môi VO₂. Kết quả là MP được kích thích giữa sóng điện từ tới biến thiên theo thời gian và trường từ cảm ứng sinh ra bởi điện trường dao động bên trong chất điện môi ở một tần số xác định, tạo nên sự tăng cường hấp thụ tại tần số cộng hưởng.

Từ phân bố trường từ mô phỏng tại bước sóng cộng hưởng cho trường hợp VO₂ điện môi, ta thấy trường từ được tăng cường mạnh mẽ và bị giam giữ trong lớp VO₂ – cường độ trường từ đạt các giá trị cao hơn trường từ tới lần lượt 1,79; 1,59; 1,68 và 1,64 bậc độ lớn đối với các cấu trúc tam giác, vuông, lục giác và tròn. Ngược lại, khi VO₂ chuyển sang trạng thái kim loại (xem Hình 2.4e–h), các cấu trúc Ag phía trên và lớp VO₂ hợp nhất điện với lớp Ag đáy. Lúc này điện trường giữa các đường ranh giới (đường đứt đoạn ở giữa) không còn tồn tại, dẫn đến MP biến mất. Như vậy, các bộ phát chuyển đổi có thể được kích hoạt (bật/tắt) thông qua quá trình chuyển pha của VO₂.

Một mô hình mạch tương đương LC có thể được sử dụng để phân tích sự kích thích MP (Hình 2.5a). Để đơn giản hóa quá trình tính toán, chúng tôi

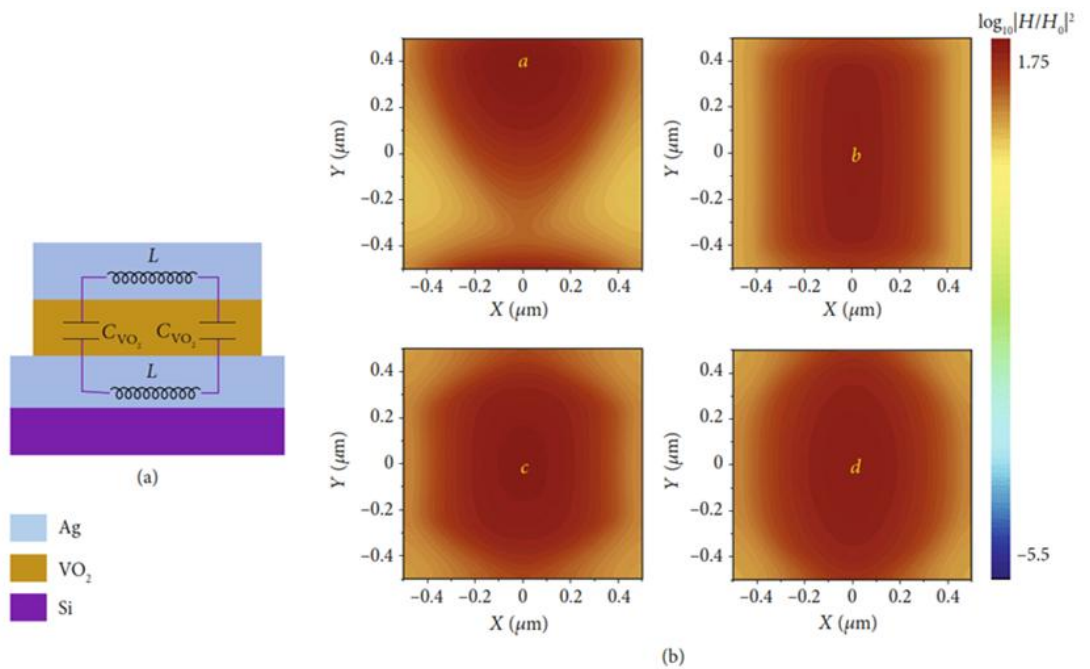
xét bộ phát với cấu trúc hình vuông để tính tần số cộng hưởng từ. Trong trường hợp của chúng tôi, các cấu trúc VO₂ điện môi kẹp giữa các lớp Ag song song có thể được coi là các tụ điện, trong khi cấu trúc Ag phía trên và mặt phẳng Ag đáy đóng vai trò như các cuộn cảm. Các điện tích trên tụ sẽ tích tụ ở bề mặt trên và dưới của lớp điện môi. Một vòng dòng điện hình thành trong mạch kín bao gồm hai tụ điện và hai cuộn cảm. Hiển nhiên rằng phần ảo của tổng trở tại tần số cộng hưởng cần triệt tiêu (tương đương điện kháng bằng 0, điện trở thuần là thành phần duy nhất) nếu điều kiện hấp thụ hoàn hảo được thỏa mãn [83]. Phần ảo của tổng trở của mạch có thể được tính theo công thức:

trong đó ω là tần số góc. Điện dung của lớp VO₂ điện môi được xác định theo công thức tụ bản song song như sau:

$$Z_{ima} = 2 \left(\frac{1}{i\omega C_{VO_2}} + i\omega L_{Ag} \right) \quad (2.8)$$

$$C_{VO_2} = \frac{c_1 \epsilon_0 \epsilon_r S}{t} \quad (2.9)$$

trong đó c_1 là hệ số hiệu chỉnh để tính đến sự phân bố điện tích không đồng đều trên các bề mặt Ag (giá trị $\sim 0,2$). ϵ_0 và ϵ_r lần lượt là phần thực của hằng số điện môi chân không và của VO₂ điện môi, với giá trị tương ứng $8,85 \times 10^{-12}$ F/m và 2,42. Ở đây $t = 100$ nm. S là diện tích ô Ag, giá trị khoảng $7,23 \times 10^{-14}$ m². Do đó, đối với cấu trúc hình vuông, C_{VO_2} ước tính khoảng $3,10 \times 10^{-17}$ F.



Hình 2.5. (a) Mạch dao động LC gồm các tụ điện và cuộn cảm, sẽ cộng hưởng tại tần số MP; Phần ảo của tổng trở tại tần số cộng hưởng cần bằng 0 nếu điều kiện hấp thụ hoàn hảo được thỏa mãn; (b) Phân bố trường từ khi VO₂ ở trạng thái điện môi, mặt cắt x-y đi qua trung tâm lớp VO₂ đối với các ô tam giác, vuông, lục giác và tròn tại bước sóng cộng hưởng.

Độ tự cảm của cấu trúc Ag và mặt phẳng Ag bao gồm độ tự cảm tương hỗ L_m và độ tự cảm động L_k được tính theo công thức kinh nghiệm như sau:

$$L_m = \frac{k\mu_0 N^2 S}{l} = \frac{0.5\mu_0 tw}{l} \quad (2.10)$$

trong đó các tham số như k , μ_0 , N , S , w và l lần lượt là hệ số hình dạng, độ từ thẩm của chân không ($4\pi \times 10^{-7}$ H/m), số vòng dây, diện tích mặt cắt ngang của dòng điện, chiều rộng (theo x) và chiều dài (theo y) của cấu trúc. Giá trị L_m ước tính khoảng $6,28 \times 10^{-14}$ H.

Độ tự cảm động (L_k) được tính bởi công thức:

$$L_k = -\frac{w}{\omega^2 \varepsilon_0 \varepsilon_{Ag} \delta_{Ag} l} \quad (2.11)$$

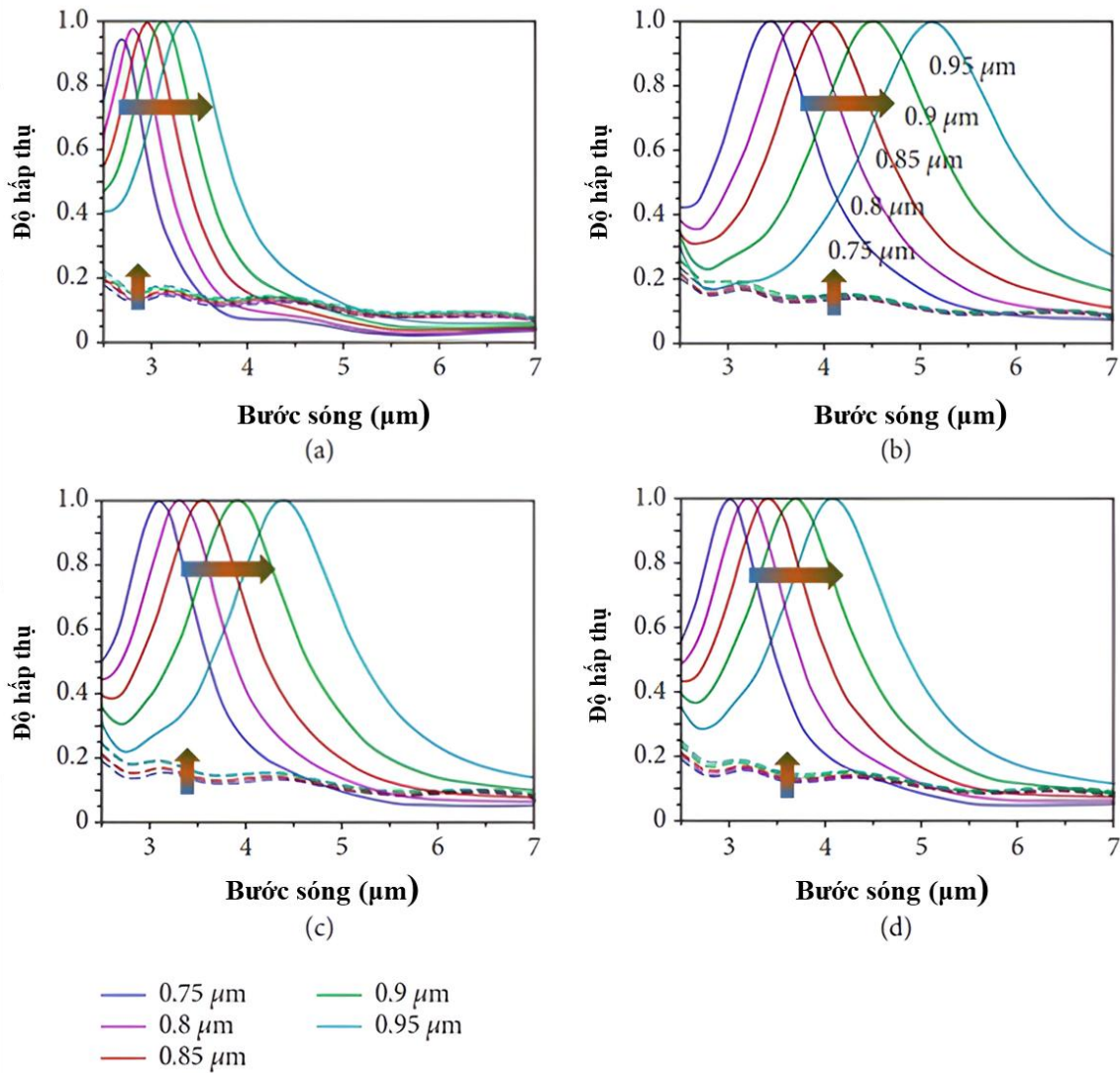
trong đó ε_{Ag} , δ_{Ag} , w , và l là phần thực của hằng số điện môi, độ sâu của Ag khối, chiều rộng, và chiều dài của khu vực tích lũy điện tích. Lưu ý rằng ε_{Ag} và δ_{Ag} là hàm của tần số góc ω . Để đơn giản hóa quá trình tính toán, hai tham số này được xác định là hằng số dựa trên bước sóng cộng hưởng mô phỏng trước đó. Đối với bộ phát xạ có cấu trúc vuông, $w = l = d = 8,5 \times 10^{-7}$ m, ε_{Ag} , δ_{Ag} lần lượt là khoảng -800 và $7,39 \times 10^{-9}$ m, L_k được ước tính khoảng $4,58 \times 10^{-14}$ H bằng cách đặt $\omega^2 LC = 1$. Bước sóng cộng hưởng có thể được tính từ phương trình:

trong đó c_0 là tốc độ ánh sáng trong chân không, và bước sóng cộng hưởng

$$\lambda = \frac{2\pi c_0}{\omega} = 2\pi c_0 \sqrt{C_{VO_2} (L_m + L_k)} \quad (2.12)$$

được tính là khoảng 4,16 μ m cho bộ phát xạ có ô vuông trong trạng thái VO₂ điện môi, với sai số tương đối 3% so với mô phỏng. Lưu ý rằng dung lượng của các bộ phát xạ tăng khi khoảng cách ô cơ sở tăng, trong khi điện cảm là hàm

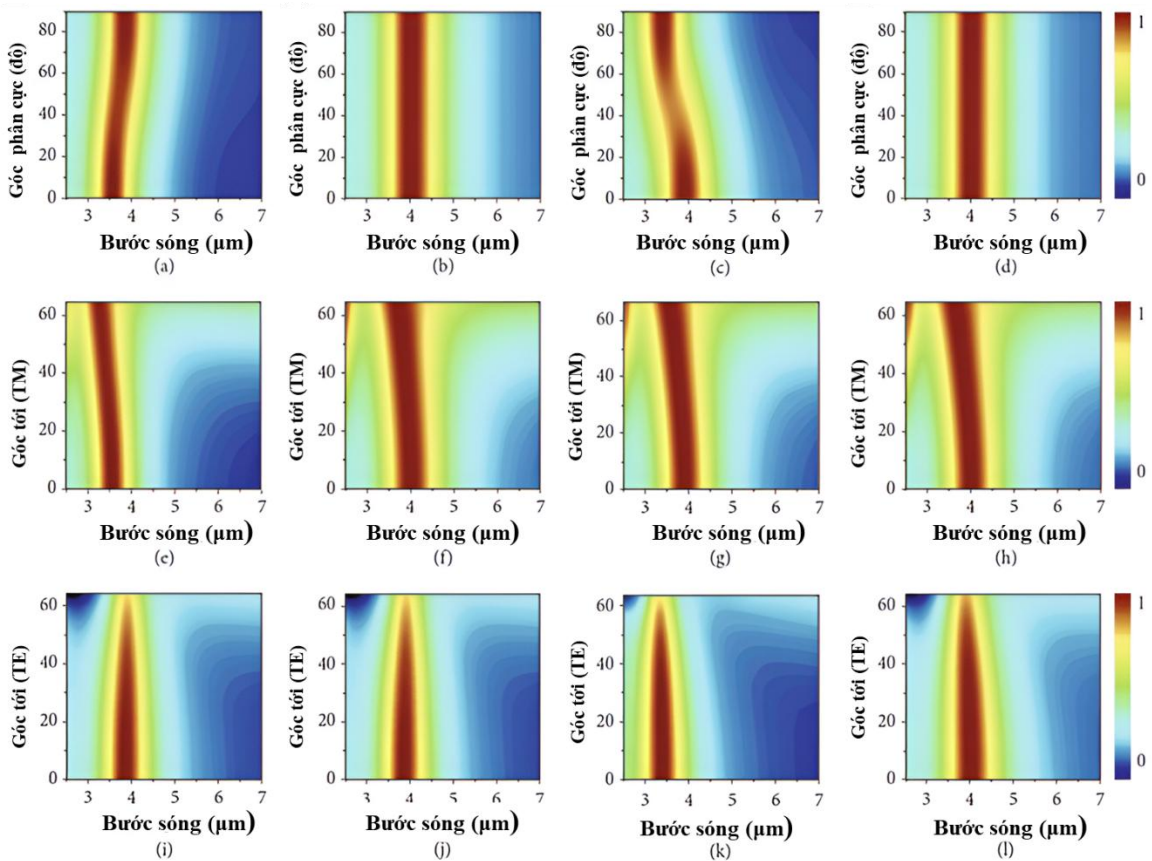
của chiều rộng và chiều dài. Hình 2.5b cho thấy phân bố trường từ ghép của bốn bộ hấp thụ/phát xạ phù hợp với kết luận trên, trong đó cường độ cao nhất (các điểm a, b, c, d) nằm ở $x = 0 \mu\text{m}$, $y = 0,385 \mu\text{m}$ cho cấu trúc tam giác, và ở $x = 0 \mu\text{m}$, $y = 0 \mu\text{m}$ cho ba trường hợp còn lại, gần tâm của khoảng cách tối đa dọc theo hướng x. So sánh, bộ phát xạ có cấu trúc ô vuông tạo ra dung lượng và điện cảm tối đa trên cùng một khoảng cách trong một chu kỳ, dẫn đến bước sóng cộng hưởng dài hơn.



Hình 2.6. Phổ độ hấp thụ dưới góc tới vuông góc khi thay đổi kích thước ô đơn vị Ag và VO₂ từ 0,75 đến 0,95 μm đối với các bộ phát cấu trúc tam giác (a), vuông (b), lục giác (c) và tròn (d).

Từ trên, có thể suy ra rằng phản ứng từ của bộ phát xạ phụ thuộc lớn vào hình học cấu trúc của Ag và VO₂ điện môi. Chúng tôi nghiên cứu độ hấp thụ phổ dưới góc tới vuông góc với khoảng cách ô cơ sở (d) của Ag và VO₂ từ 0,75

đến $0,95 \mu\text{m}$ cho các bộ phát xạ có cấu trúc tam giác, vuông, lục giác, và tròn, với kết quả được trình bày trong Hình 2.6a-d. Tính chất chuyển đổi của các đỉnh hấp thụ vẫn hoạt động khi trạng thái VO_2 chuyển đổi giữa điện môi và kim loại. Trong trường hợp VO_2 điện môi, vị trí các đỉnh hấp thụ dịch đỏ khi khoảng cách ô cơ sở tăng cho tất cả các bộ phát xạ. Ví dụ, $\lambda_{\text{tam giác}}$ thay đổi từ $2,70$ đến $3,35 \mu\text{m}$, với độ hấp thụ từ $0,94$ đến 1 . Ngược lại, $\lambda_{\text{vuông}}$, $\lambda_{\text{lục giác}}$, và $\lambda_{\text{tròn}}$ thay đổi lần lượt từ $3,44$, $3,1$; và $3,01 \mu\text{m}$ đến $5,12$; $4,38$; và $4,08 \mu\text{m}$, với độ hấp thụ của tất cả các bộ phát xạ trên $0,99$. Tuy nhiên, độ hấp thụ của tất cả các bộ phát xạ hầu như không thay đổi khi VO_2 ở trạng thái kim loại, như được biểu thị bằng đường chấm tương ứng. Các kết quả trên cho thấy cấu trúc hình học và diện tích của ô cơ sở có ảnh hưởng lớn đến vị trí tần số cộng hưởng từ mô hình mạch LC tương đương.



Hình 2.7. Phổ độ hấp thụ của các bộ phát cấu trúc tam giác (a), vuông (b), lục giác (c) và tròn (d) khi thay đổi phân cực của sóng tới (0° – 90°) dưới góc tới vuông góc; Phổ độ hấp thụ của các bộ phát khi thay đổi góc tới từ 0° đến 65° đối với sóng phân cực từ (e)–(h) và phân cực điện (i)–(l).

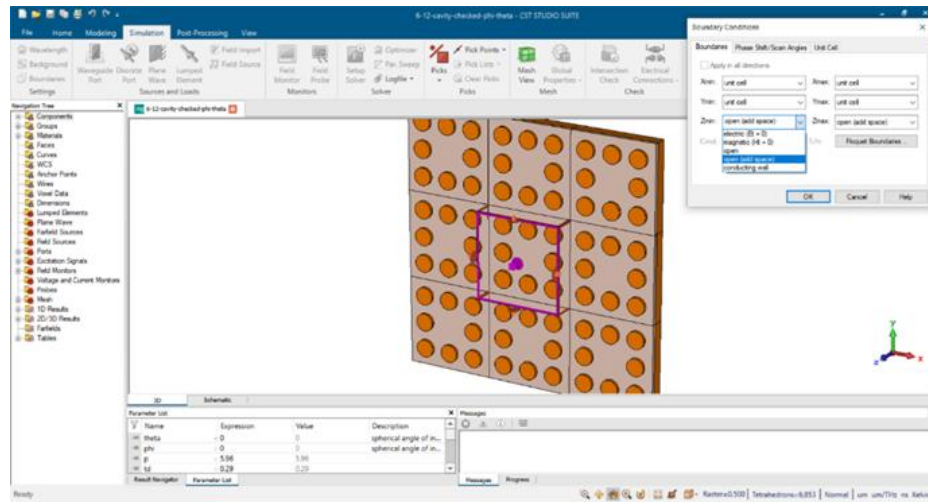
Độ ổn định hấp thụ của cấu trúc dưới sự thay đổi phân cực cũng được nghiên cứu. Hình 2.7a-d thể hiện mối quan hệ của độ hấp thụ của bốn bộ phát

xạ trong vùng 2,5–7 μm liên quan đến sóng EM phân cực dưới góc tới pháp tuyến. Có thể thấy rõ rằng hấp thụ cực cao xuất hiện quanh 4 μm cho bốn bộ phát xạ. Đối với các bộ phát xạ có cấu trúc vuông và tròn, các đỉnh hấp thụ không thay đổi khi góc phân cực thay đổi từ 0° đến 90° , cho thấy tính độc lập với phân cực nhờ cấu trúc đối xứng quay cao. Nhưng trong trường hợp cấu trúc tam giác và lục giác, vị trí đỉnh hấp thụ sẽ dịch đổi đến 3,87 μm và dịch xanh đến 3,41 μm , với sai số tương đối lần lượt là 8,4% và 13% so với bước sóng cộng hưởng ban đầu. Là một bộ hấp thụ hoặc phát xạ, khả năng khuếch tán để hấp thụ bức xạ từ mọi hướng hoặc phát xạ bức xạ đến mọi hướng rất quan trọng, đặc biệt cho các ứng dụng năng lượng như quản lý nhiệt bức xạ. Chúng tôi đã nghiên cứu độ ổn định hấp thụ của các bộ hấp thụ dưới các góc tới khác nhau từ 0 đến 65° của sóng phân cực từ ngang (TM) và điện ngang (TE), như trong Hình 2.7e-l. Trong trường hợp sóng TM tới, vị trí của tất cả các đỉnh hấp thụ sẽ dịch xanh đến 3,27; 3,75; 3,57; và 3,66 μm tại góc tới 65° . Điều này là do cường độ và phân bố của trường điện dao động có liên quan đến góc nghiêng của sóng TM tới. Nhưng đối với sóng TE tới, trong đó cường độ và phân bố của trường điện dao động không phụ thuộc vào góc tới, vị trí của các đỉnh hấp thụ hầu như không đổi và vẫn gần 4 μm . Lưu ý rằng độ hấp thụ sẽ giảm xuống 0,77; 0,79; 0,71; và 0,81 cho bốn bộ phát xạ và tạo ra các suy giảm lần lượt là 23%, 21%, 29%, và 19% tại góc nghiêng 65° , thể hiện khả năng thích ứng đáng kể.

2.2. Phương pháp mô phỏng vật lý

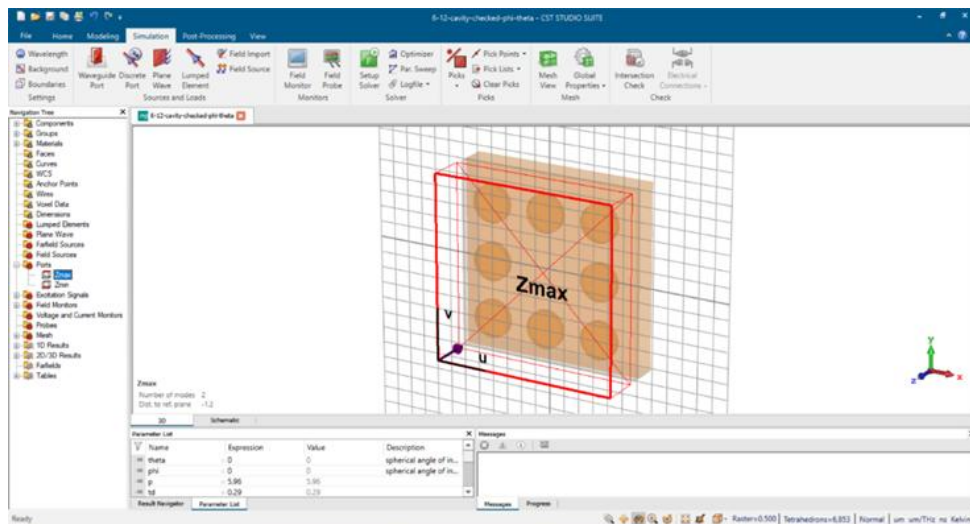
Mô phỏng các tính chất điện từ của MMs được thực hiện thông qua phần mềm CST Microwave Studio [91] và Comsol Multi Physics [92] có bản quyền được trang bị tại viện Khoa học vật liệu IMS và Học viện Khoa học và Công nghệ. Phần mềm này sử dụng kỹ thuật tích phân hữu hạn để giải phương trình truyền sóng Maxwell cho các cấu trúc và vật liệu không đồng nhất (kim loại/điện môi).

Thiết kế cấu trúc vật liệu biến hóa: Cấu trúc MMs được thiết kế với giao diện như trình bày trong Hình 2.8 dưới đây. CST cho phép lựa chọn các khối hình học cơ bản với kích thước ba chiều được lựa chọn theo mục đích và yêu cầu của người sử dụng. Trong cấu trúc lớp MMs, điện môi SiO_2 được lựa chọn có hằng số điện môi là 1,96 và độ tổn hao 0,002.

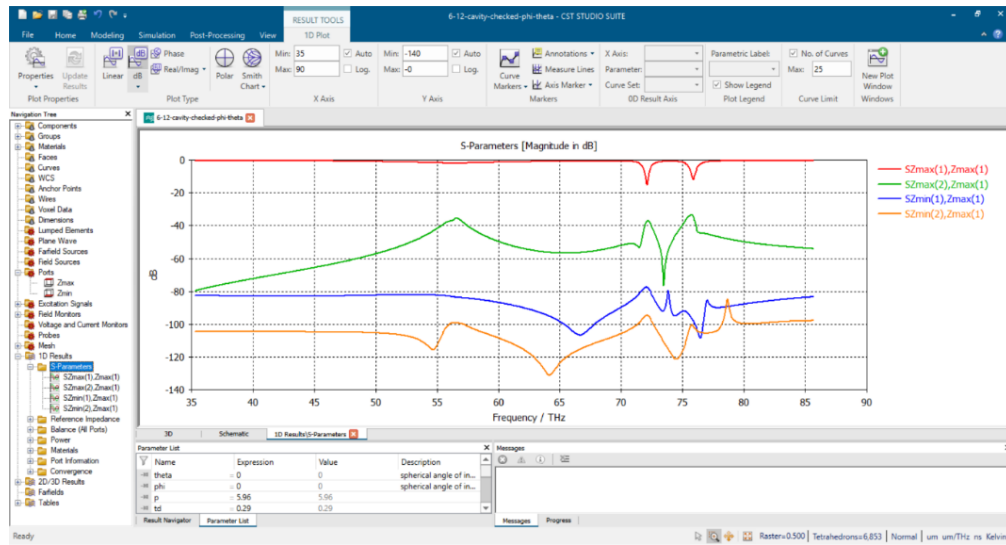


Hình 2.10. Thiết lập điều kiện biên.

Sau khi hoàn thành bước thiết kế cấu trúc của MMs, các cài đặt trước khi bắt đầu mô phỏng được thiết lập. Điều kiện biên tuần hoàn được thiết lập để cấu trúc ô cơ sở MMs được lặp lại theo chu kỳ như thể hiện trong Hình 2.10. Nhờ vậy, quá trình mô phỏng sẽ giống nhất với mẫu chế tạo trong thực tế và do đó, kết quả mô phỏng sẽ có độ chính xác cao. Tiếp theo, các ăng ten đóng vai trò thu và phát sóng điện từ sẽ được đặt ở phía trước và sau cấu trúc MMs như biểu diễn trong Hình 2.11.



Hình 2.11. Lựa chọn vị trí đặt ăng ten thu – phát.



Hình 2.12: Các tham số tán xạ thu được sau quá trình mô phỏng.

Sau khi quá trình mô phỏng kết thúc, các tham số tán xạ điện từ sẽ thu được như trên Hình 2.12. Các tham số này đặc trưng cho các tham số phản xạ và truyền qua của vật liệu. Từ đó, đặc trưng điện từ của MMs có thể được tính toán như độ hấp thụ hay hệ số chuyển đổi phân cực của sóng điện từ.

2.3. Thiết kế cảm biến NDIR tích hợp MMs

2.3.1. Cảm biến NDIR tích hợp MMs theo cấu hình truyền qua

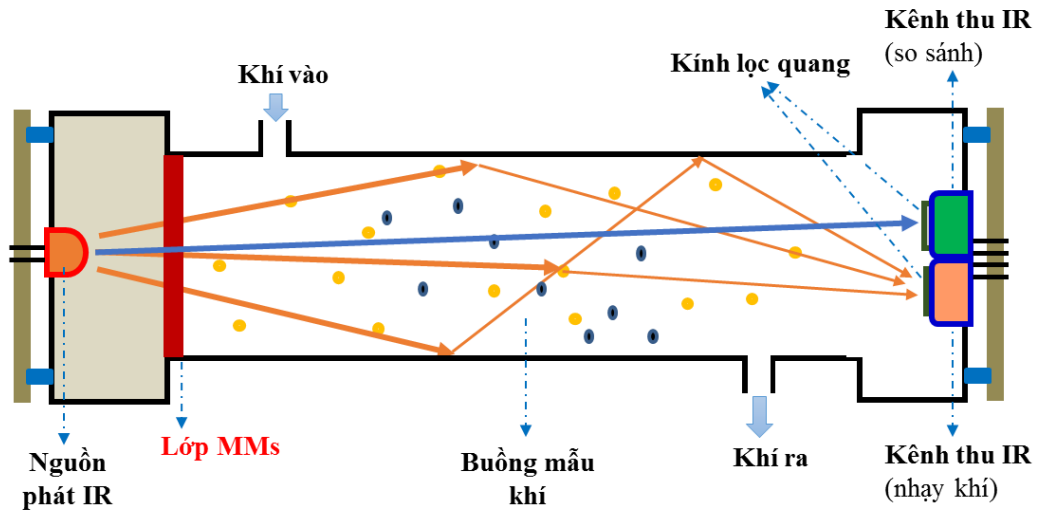
Cảm biến NDIR truyền thông được sử dụng rộng rãi để phát hiện các loại khí như CO_2 , CO , và CH_4 , nhờ vào độ tin cậy và chính xác. Cảm biến NDIR có cấu trúc trong thực tế bao gồm một nguồn hồng ngoại, một buồng chứa mẫu khí, các bộ lọc quang học và một đầu thu hồng ngoại. Bộ lọc quang học đóng vai trò quan trọng trong việc chọn lọc các bước sóng cụ thể tương ứng với dải hấp thụ của khí mục tiêu, đảm bảo độ chính xác và chọn lọc cao. Bộ lọc quang trong cảm biến NDIR hoạt động như một “cửa sổ” cho phép chỉ ánh sáng tại bước sóng mà khí mục tiêu hấp thụ (ví dụ, $4.26 \mu\text{m}$ cho CO_2) đi qua, trong khi chặn các bước sóng khác. Điều này giúp cảm biến phân biệt được khí cụ thể, tránh nhiễu từ các khí khác. Bộ lọc quang trong NDIR thường có băng thông từ 50–300 nm, đủ hẹp để cô lập vùng hấp thụ của khí nhưng vẫn cho phép đủ ánh sáng đi qua để cảm biến phát hiện.

Bộ lọc hồng ngoại băng thông hẹp hoạt động dựa trên nguyên lý giao thoa trong các cấu trúc lớp mỏng (thin-film interference). Cụ thể, bộ lọc được thiết

kế bằng cách xếp chồng nhiều lớp vật liệu mỏng có chỉ số khúc xạ khác nhau (ví dụ: germanium – Ge, silicon – Si, hoặc silicon dioxide – SiO_2). Khi ánh sáng hồng ngoại đi qua các lớp này, hiện tượng giao thoa xảy ra giữa các sóng ánh sáng phản xạ và truyền qua tại các ranh giới giữa các lớp. Sự giao thoa này được điều chỉnh thông qua độ dày và thành phần của các lớp để tạo ra vùng truyền (cho phép ánh sáng tại một dải bước sóng hẹp đi qua) và vùng phản xạ (chặn các bước sóng khác). Kết quả là chỉ ánh sáng tại bước sóng mong muốn, ví dụ $4.26\text{ }\mu\text{m}$ cho khí CO_2 trong cảm biến NDIR, được truyền qua, trong khi các bước sóng khác bị loại bỏ. Điều này đảm bảo độ chọn lọc cao, phù hợp với phổ hấp thụ của khí mục tiêu. Bằng cách sử dụng kỹ thuật phủ đa lớp với các vật liệu có chỉ số khúc xạ khác nhau, bộ lọc này đạt được khả năng chọn lọc cao, truyền ánh sáng tại một dải bước sóng hẹp và chặn các bước sóng khác. Đây là giải pháp lý tưởng cho các ứng dụng như cảm biến NDIR, đảm bảo độ chính xác và hiệu quả trong việc đo lường khí.

Tuy nhiên, việc sử dụng bộ lọc quang học gặp phải một số hạn chế, cấu trúc các lớp vật liệu phức tạp, chi phí cao (bộ lọc quang học chất lượng cao rất đắt tiền), thiếu linh hoạt cho nhiều loại khí mục tiêu, và hiệu suất truyền qua tại vùng ánh sáng mục tiêu thông thường chỉ đạt trong khoảng 70–80% (làm giảm hiệu quả nhạy khí).

Vì thế, cảm biến khí NDIR có thể được tích hợp lớp vật liệu biến hóa MMs theo cấu hình phản xạ hoặc truyền qua đối bức xạ hồng ngoại từ nguồn phát IR để đem lại những ưu thế. Luận án này hướng đến những thiết kế cho cảm biến NDIR đo CO_2 dải nồng độ thấp (trong vùng 0 – 10000 ppm) có hiệu suất cao khi có tích hợp thêm lớp vật liệu biến hóa MMs vào nguồn phát IR dải rộng để tạo ra phổ hồng ngoại với các đỉnh đặc trưng, hay các phổ hồng ngoại dải hẹp (với đỉnh đặc trưng cho khí CO_2 tại bước sóng $4,26\text{ }\mu\text{m}$).



Hình 2.13. Cấu hình cảm biến NDIR tích hợp MMs theo kiểu truyền qua.

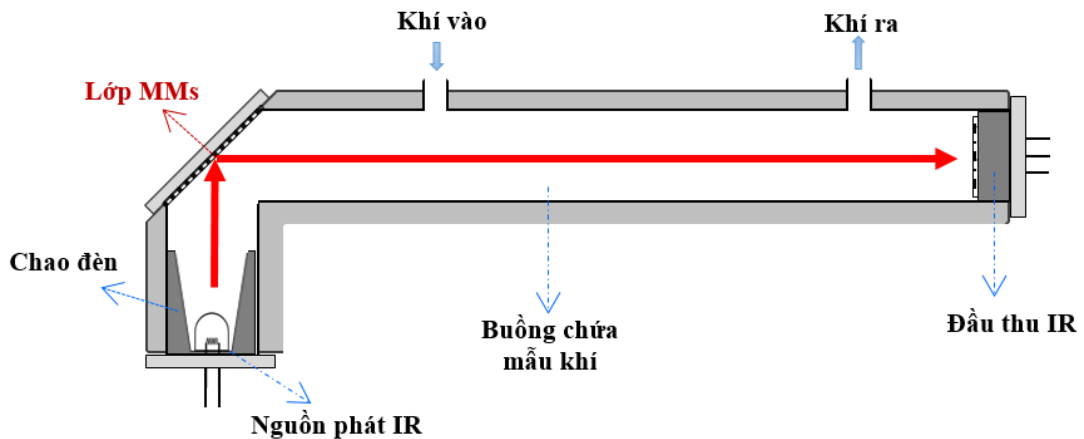
Hình 2.13 minh họa cấu trúc của cảm biến NDIR tích hợp lớp metamaterials (MMs). Ở đó, cấu trúc gồm nguồn hồng ngoại (IR) dải rộng đi qua lớp MMs để biến đổi thành các phổ đặc trưng dải hẹp, sau đó bức xạ này đi qua buồng chứa mẫu khí (khí CO₂), để đến đầu thu hồng ngoại (thường sử dụng đầu thu hai kênh với một kênh đóng vai trò nhạy, một kênh đóng vai trò so sánh). Với cấu trúc cảm biến NDIR theo kiểu truyền thống được điều chỉnh bằng lớp vật liệu MMs theo kiểu truyền qua nhằm tăng độ nhạy cho cảm biến nhờ hiệu ứng cộng hưởng điện từ, cải thiện độ chọn lọc và phát hiện khí với độ chính xác cao. Nếu lớp vật liệu MMs được thiết kế đủ tốt (với chỉ cho ra phổ hồng ngoại một đỉnh tại vùng bước sóng đặc trưng) thì cảm biến theo cấu trúc này cũng có thể dùng đầu thu IR một kênh mà không cần sử dụng kính lọc quang truyền thống.

Trong cấu trúc cảm biến này, lớp vật liệu MMs có thể được tích hợp ngay trên bề mặt của bộ phận phát IR (khi đó nguồn phát IR được sử dụng là dạng phẳng). Ưu điểm cách thức này năng lượng nhiệt và bức xạ hồng ngoại từ nguồn IR được lớp IR hấp thụ triệt để và phát ra các đỉnh hồng ngoại đặc trưng. Khi đó nguồn IR và lớp MMs có thể coi như một nguồn phát hồng ngoại thống nhất. Tuy vậy, kỹ thuật này có thể đòi hỏi việc chế tạo các lớp vật liệu khá phức tạp để tạo ra được nguồn phát hồng ngoại hoàn thiện. Một cách tiếp cận linh hoạt hơn, lớp vật liệu MMs để cách xa nguồn IR một khoảng cách nhất định. Khi đó lớp vật liệu MMs đóng vai trò hấp thụ và tương tác với bức xạ hồng ngoại để phát ra các bức xạ đặc trưng mong muốn. Cấu trúc cảm biến này có thể được sử dụng đa dạng cho các nguồn phát IR khác nhau. Trong luận án này, các

ngiên cứu mới tập trung vào việc mô phỏng và thiết kế các trúc lớp vật liệu MMs để tìm ra được một số cấu trúc tối ưu để có thể áp dụng cho cấu hình cảm biến theo kiểu truyền qua này.

2.3.2. Cảm biến NDIR tích hợp MMs theo cấu hình phản xạ

Cảm biến NDIR tích hợp MMs theo cấu hình phản xạ được thiết kế cho các bức xạ hồng ngoại từ nguồn phát IR đến đầu thu IR. Luận án tập trung thiết kế và chế tạo thử nghiệm cảm biến NDIR tích hợp lớp MMs theo cấu hình phản xạ đem đến ưu điểm khi chế tạo lớp vật liệu MMs sẽ đơn giản hơn nhiều so với cấu trúc theo kiểu truyền qua. Tuy vậy, nhược điểm của cách thức này đạt sự hoàn hảo để chuyển đổi được toàn bộ bức xạ hồng ngoại dải rộng từ nguồn IR thành phổ bức xạ hồng ngoại đặc trưng có phẩm phẩm cao.



Hình 2.14. Cấu hình cảm biến NDIR tích hợp MMs theo kiểu phản xạ.

Thiết kế cảm biến NDIR với lớp MMs theo cấu hình phản xạ nhằm khắc phục các hạn chế của các hệ thống hiện có bằng cách thực hiện chọn lọc bước sóng mục tiêu mà không phụ thuộc vào bộ lọc quang học truyền thống. Thiết kế này giới thiệu một phương pháp cải tiến thông qua việc tích hợp một lớp vật liệu biến hóa MMs, được thiết kế để chuyển đổi bức xạ hồng ngoại dải rộng thành bức xạ dải hẹp với chỉ một đỉnh mong muốn cho khí mục tiêu (với CO_2 là ở vùng $4,26 \mu\text{m}$). Không giống như các bộ lọc quang học truyền thống, vốn chỉ cho phép khoảng 70–80% ánh sáng tại bước sóng mục tiêu đi qua, lớp MMs này hoạt động như một bộ chuyển đổi quang phổ. Cụ thể, lớp vật liệu MM hấp thụ bức xạ hồng ngoại dải rộng và tái phát xạ tập trung tại các bước sóng mong muốn. Đặc trưng này được cho là nhờ vào các hiệu ứng liên quan đến tương tác điện từ của các đơn vị cấu trúc trong vật liệu biến hóa MMs, và kết hợp với hấp thụ nhiệt từ bức xạ hồng ngoại. Phương pháp này có thể loại bỏ được nhu

cầu sử dụng bộ lọc quang học truyền thống, từ đó đơn giản hóa cấu trúc hệ thống và giảm chi phí sản xuất. Về bản chất, lớp vật liệu MMs là cấu trúc nhân tạo được mô phỏng và tính toán để đạt đến tối ưu về loại vật liệu sử dụng và hình dạng các đơn vị cấu trúc (các tế bào) trên một đế để tạo thành một lớp vật liệu biến hóa MM hoàn thiện. Từ đó, lớp vật liệu biến hóa được kiểm soát để phù hợp cho tương tác hồng ngoại dải rộng và phát xạ hồng ngoại dải hẹp cho phù hợp với khí mục tiêu.

Cảm biến NDIR tích hợp vật liệu biến hóa MMs (được gọi là cảm biến NDIR-MMs) được đề xuất bao gồm các bộ phận chính (Hình 2.14):

- *Đèn phát IR và chao đèn*: tạo ra bức xạ hồng ngoại phổ rộng tập trung chiếu đến lớp vật liệu biến hóa MMs.
- *Lớp vật liệu biến hóa MMs*: tương tác với bức xạ dải rộng từ đèn phát IR để tạo ra phổ dải hẹp có đỉnh tại bước sóng hấp thụ đặc trưng của khí mục tiêu (ví dụ: 4,26 μm cho CO_2).
- *Buồng chứa mẫu khí*: là nơi chứa mẫu khí cần phân tích và bức xạ hồng ngoại (sau khi phản xạ từ lớp MMs) đi qua để tương tác với khí mục tiêu.
- *Đầu thu hồng ngoại*: chuyển đổi cường độ bức xạ hồng ngoại dải hẹp tại các bước sóng mục tiêu sang tín hiệu điện tương ứng.

Cảm biến loại này hướng đến chi phí thấp, thiết kế đơn giản, và khả năng đáp ứng tốt trong các điều kiện không yêu cầu độ chính xác cao, giống như các hệ thống cảm biến NDIR sử dụng đầu thu hồng ngoại một kênh. Điểm khác biệt ở đây là bức xạ dải rộng từ nguồn phát khi tương tác với lớp vật liệu biến hóa được biến đổi về dải hẹp (một đỉnh phát xạ) và tăng cường cường độ.

Một phương án khác đó là lớp vật liệu biến hóa MMs được cấu trúc để cộng hưởng với bức xạ hồng ngoại phát ra từ nguồn đèn, cho phép chuyển đổi hiệu quả vùng bước sóng hồng ngoại sang bức xạ dải hẹp có các đỉnh ở các vùng bước sóng đặc trưng. Quá trình này cũng tăng cường và phát xạ cho vùng bước sóng mục tiêu và vùng bước sóng tham chiếu, từ đó nâng cao hiệu quả hoạt động của cảm biến NDIR truyền thống sử dụng đầu thu hồng ngoại hai kênh (một kênh đóng vai trò nhạy khí và kênh còn lại đóng vai trò tham chiếu, giống như cảm biến NDIR thông thường). Về cấu trúc cảm biến, phương án này chỉ khác phương án đầu tiên là sử dụng đầu thu hồng ngoại hai kênh như trong các cảm biến NDIR, vẫn sử dụng các bộ lọc quang dải hẹp tương ứng cho

kênh trên đầu thu hồng ngoại. Điểm khác biệt ở đây là sử dụng lớp vật liệu biến hóa MMs cho cộng hưởng, chuyển đổi bức xạ hồng ngoại dải rộng từ đèn phát cho tăng cường bức xạ hồng ngoại tại thành hai vùng, một cho khí mục tiêu (với CO₂ tại đỉnh 4,26 μm) và vùng còn lại đóng vai trò tham chiếu tại 3,9 μm . Khi đó, tín hiệu điện lối ra trên đầu thu hồng ngoại được tăng cường, từ đó tăng hiệu quả nhận biết khí. Cách tiếp cận này đem lại điểm khác biệt đó là tăng độ nhạy của cảm biến so với cảm biến NDIR thông thường và còn thể giảm công suất đèn phát, từ đó nâng cao được tuổi thọ và độ ổn định cho đèn hồng ngoại.

Nghiên cứu này đã tiến hành nghiên cứu tính toán và mô phỏng chi tiết về lớp vật liệu biến hóa MMs. Theo đó, các nghiên cứu được tiến hành về loại vật liệu cấu thành, sự bố trí, kích thước và dạng cấu trúc của đơn vị tế bào cơ sở (đơn vị vi cấu trúc) của lớp vật liệu biến hóa MMs, để đạt mục tiêu đề ra cho hấp thụ, tương tác bức xạ hồng ngoại dải rộng và phát ra bức xạ hồng ngoại dải hẹp có đỉnh bức xạ tại bức sóng tương ứng với khí mục tiêu (CO₂ tại 4,26 μm) hoặc có thêm đỉnh bức xạ tham chiếu (tại 3,9 μm).

Đèn phát hồng ngoại là thành phần quan trọng trong các cảm biến NDIR, là nguồn cung cấp bức xạ hồng ngoại dải rộng, thường được phân loại thành hai dạng chính:

- Đèn phát dạng dây đốt: Loại đèn này có cấu trúc bao gồm một dây đốt được bao bọc bởi vỏ thủy tinh, dẫn đến cường độ phát xạ tương đối thấp và vùng phát xạ giới hạn trong khoảng từ 1 đến 5 μm . Ưu điểm của đèn phát dạng dây đốt nằm ở chi phí sản xuất thấp, khiến nó phù hợp cho các ứng dụng không đòi hỏi độ nhạy hoặc độ chính xác cao.
- Đèn phát dạng màng: Được thiết kế với một màng mỏng, chẳng hạn như các bộ phát hồng ngoại dựa trên công nghệ MEMS, loại đèn này cho phép đạt công suất phát quang cao hơn và mở rộng vùng phát xạ từ 1 đến 18 μm . Đặc điểm này giúp nâng cao độ nhạy, độ chính xác và khả năng nhận biết nhiều loại khí khác nhau khi áp dụng vào trong cảm biến NDIR. Tuy nhiên, do yêu cầu công nghệ chế tạo phức tạp, giá thành của loại đèn này thường cao hơn so với đèn phát dạng dây đốt.

Như trên Hình 2.14, cấu trúc bộ phận phát hồng ngoại gồm đèn phát IR, chao đèn, điện cực, và gá đế (14). Đèn phát IR có thể được lựa chọn là đèn phát dạng dây đốt hoặc đèn phát dạng màng phụ thuộc vào các yêu cầu cụ thể của

ứng dụng, bao gồm độ nhạy mong muốn, độ chính xác cần thiết và chi phí sản xuất. Cả hai loại đèn phát này đều có thể được sử dụng vào thiết kế của cảm biến NDIR-MMs, với các điều chỉnh phù hợp trong từng cấu hình của chao đèn nhằm tối ưu hóa hiệu suất hoạt động. Chao đèn đảm bảo việc định hướng và tập trung bức xạ hồng ngoại từ đèn phát đến lớp vật liệu biến hóa MMs. Chao đèn hỗ trợ truyền các tia bức xạ hồng ngoại với phương ưu tiên hướng song song đến bề mặt lớp vật liệu biến hóa MMs, từ đó tăng cường hiệu quả tương tác của bức xạ hồng ngoại với lớp vật liệu biến hóa. Kết quả là chao đèn để điều khiển hướng bức xạ hồng ngoại, giúp cải thiện độ đồng đều của chùm sáng hồng ngoại từ nguồn phát. Chao đèn được thiết kế của được tối ưu hóa để tương thích với các loại đèn phát hồng ngoại khác nhau, cụ thể như sau:

- Đèn phát hồng ngoại dạng dây đốt (ví dụ, dạng vi lò xo): Với đặc tính phân tán bức xạ theo mọi hướng, chao đèn được thiết kế phù hợp với phần tử dây đốt xem như nguồn phát điểm, giảm thiểu sự phân tán và đảm bảo bức xạ được truyền đến bề mặt lớp vật liệu biến hóa.
- Đèn phát dạng màng: Loại đèn này thường có cấu trúc bề mặt phẳng hình vuông (kích thước khoảng $2 \times 2 \text{ mm}^2$), chẳng hạn như các bộ phát hồng ngoại dựa trên công nghệ MEMS. Chao đèn được thiết kế phù hợp điều chỉnh để tập trung phổ hồng ngoại từ bề mặt màng đến lớp vật liệu biến hóa MMs.

Vật liệu chế tạo chao đèn phải đảm bảo khả năng phản xạ tốt bức xạ hồng ngoại và chống chịu được trong các môi trường ứng dụng. Các vật liệu phù hợp bao gồm như thép không gỉ (stainless steel), và kim loại như nhôm (Al), bạc (Ag) hoặc vàng (Au).

Từ Hình 2.14, lớp vật liệu biến hóa và gá đế được tích hợp thành một thể hoàn chỉnh thống nhất với bộ phận phát hồng ngoại và buồng chứa mẫu khí. Lớp vật liệu biến hóa được bố trí để nhận ánh sáng hồng ngoại đến với góc 45° độ so với pháp tuyến bề mặt của nó và phát xạ ánh sáng ở góc 45° độ hướng tới đầu thu IR. Theo đó, lớp vật liệu biến hóa đặt ngay gần nguồn phát hồng ngoại. Với cách bố trí này lớp vật liệu biến hóa sẽ tối ưu nhận để nhận bức xạ hồng ngoại dải rộng từ bộ phận phát hồng ngoại, sau đó phát ra bức xạ hồng ngoại dải hẹp đi qua buồng chứa mẫu khí để đến bộ phận đầu thu hồng ngoại. Cấu hình này đảm bảo đường đi của ánh sáng của phổ hồng ngoại dải hẹp được định

hướng chính xác qua buồng chứa mẫu khí tới đơn vị thu nhận, từ đó tối đa hóa sự tương tác giữa ánh sáng hồng ngoại và các phân tử khí mục tiêu, nâng cao hiệu quả phát hiện. Cấu trúc và kích thước tổng thể của bộ phận MMs được điều chỉnh kỹ lưỡng để phù hợp với buồng mẫu khí, đảm bảo hiệu suất hoạt động tối ưu. Đặc tính của lớp vật liệu biến hóa được tinh chỉnh thông qua các kỹ thuật mô phỏng và chế tạo tiên tiến, nhằm tăng cường phản xạ chọn lọc các bước sóng hồng ngoại đặc trưng, chẳng hạn như $4,26\text{ }\mu\text{m}$ để phát hiện CO_2 , đồng thời giảm thiểu hoặc loại bỏ các bước sóng không mong muốn. Điều này cải thiện đáng kể tín hiệu đặc trưng đầu ra, mang lại kết quả đo lường chính xác hơn.

Về mặt hình học, lớp vật liệu biến hóa được thiết kế dưới dạng tấm phẳng. Lớp vật liệu này gắn trên giá để được đặt ở đầu buồng hình trụ để có thể đạt được góc phản xạ 45° độ mong muốn. Nhờ ứng dụng công nghệ vật liệu biến hóa, lớp này không chỉ hoạt động như một gương phản xạ hiệu quả mà còn tích hợp khả năng lọc quang phổ, tăng cường đặc tính dải hẹp của phổ hồng ngoại tương ứng với khí mục tiêu. Điều này giúp giảm sự phụ thuộc vào các thành phần quang học bổ sung, từ đó nâng cao hiệu quả và đơn giản hóa thiết kế của cảm biến NDIR-MMs trong các ứng dụng phát hiện khí.

Hình 2.14 cũng minh họa cấu trúc của bộ phận thu hồng ngoại IR. Theo đó, cảm biến NDIR-MMs với đầu thu hồng ngoại sử dụng một kênh đo không kèm theo bộ lọc quang (bộ lọc quang băng thông hẹp). Khi đó, lớp MMs được thiết kế sao cho sau khi hấp thụ, tương tác với phổ hồng ngoại dải rộng thì phát ra một bức xạ dải hẹp với một đỉnh tại bước sóng mà khí mục tiêu hấp thụ, với ưu tiên độ rộng băng thông của phổ bức xạ dải hẹp này trong khoảng $50\text{--}300\text{ nm}$. Theo cách khác, lớp vật liệu biến hóa có thể được thiết kế để tạo các phổ bức xạ dải hẹp với một đỉnh bức xạ tại bước sóng cho khí mục tiêu, và các đỉnh khác bức xạ khác đóng vai trò tham chiếu (không bị hoặc rất ít bị các khí hấp thụ, bức xạ dải hẹp tại $3,9\text{ }\mu\text{m}$ (như yêu cầu của tín hiệu tham chiếu trong cảm biến NDIR thông thường). Cách thức này vẫn đảm bảo sự thay đổi tín hiệu lỗi ra trên đầu thu hồng ngoại liên quan sự thay đổi nồng độ khí mục tiêu trong buồng mẫu, khi đó phần đóng góp của phổ hồng ngoại tham chiếu chỉ là làm tăng độ lớn nền của tín hiệu lỗi ra trên đầu thu. Điểm ưu việt ở đây là để tạo ra

phổ hồng ngoại đa đỉnh này là dễ dàng thiết kế và chế tạo lớp MMs so với trường hợp chỉ tạo ra phổ hẹp với một đỉnh.

Theo cách khác, cảm biến NDIR-MMs với cấu hình đầu thu hồng ngoại IR với một kênh hoặc hai kênh vẫn có sử dụng bộ lọc quang băng thông hẹp (cho khí mục tiêu, hoặc/và cho tham chiếu). Cách tiếp cận này đem lại ưu thế về chế tạo cho lớp MMs. Khi đó, lớp MMs được chế tạo để tạo ra phổ bức xạ theo chiều hướng tăng về mật cường độ bức xạ đến đầu thu thay vì thu hẹp độ rộng của băng thông, như trong trường hợp của đầu thu hồng ngoại không sử dụng bộ lọc quang băng thông hẹp. Theo đó, lớp MMs có thể phát xạ phổ hồng ngoại với đỉnh bước sóng mục tiêu trong dải băng thông lớn có thể đến vài μm , khi đó sẽ dễ dàng và đơn giản cho thiết kế và chế tạo ra lớp MMs hơn nhiều với trường hợp băng thông hẹp một đỉnh (với yêu cầu 50–300 nm như đã nêu ở trên).

2.4. Kết luận Chương 2

Phương pháp mô phỏng theo mạch cộng hưởng LC và phương pháp tích phân hữu hạn để giải phương trình truyền sóng Maxwell cho các cấu trúc và vật liệu không đồng nhất (kim loại/điện môi) là công cụ hữu hiệu cho xác định các cấu trúc của MMs tương tác với bức xạ hồng ngoại. Nghiên cứu này đã thực hiện nghiên cứu tập trung vào thiết kế ra lớp MMs cho tương tác với bức xạ hồng ngoại dải rộng để tạo ra các bức xạ hồng ngoại với các đỉnh đặc trưng (4,26 μm cho khí CO_2 hấp thụ), trong đó hướng trọng tâm đến tạo ra bức xạ hồng ngoại dải hẹp cho áp dụng vào cảm biến NDIR.

Cảm biến khí hồng ngoại không tán sắc (NDIR) hoạt động dựa trên định luật Beer-Lambert, trong đó ánh sáng hồng ngoại từ một nguồn đèn được chiếu qua buồng chứa khí mẫu. Các phân tử khí hấp thụ một phần ánh sáng tại bước sóng đặc trưng, và phần còn lại được đo bằng đầu thu quang, từ đó, dựa trên độ suy cường độ ánh sáng để tính ra được nồng độ khí.

Cảm biến NDIR có thể thực hiện bằng cách tiếp cận chọn lọc bước sóng mục tiêu mà không phụ thuộc vào bộ lọc quang học truyền thống bằng cách tích hợp một lớp MMs có khả năng chuyển đổi bức xạ hồng ngoại dải rộng thành bức xạ dải hẹp tại các bước sóng mong muốn. Ngoài ra, việc sử dụng lớp MMs không chỉ đóng vai trò lọc quang thông thường, mà ở đó bức xạ hồng ngoại từ nguồn đèn có thể cộng hưởng, và chuyển đổi vùng bước hồng ngoại

khác cho tăng cường phát xạ vùng bước sóng mục tiêu (ví dụ dựa trên hiệu ứng liên quan đến hấp thụ nhiệt từ hồng ngoại). Hiệu ứng này đem lại lợi thế tăng cường bức xạ so với bộ lọc quang truyền thống.

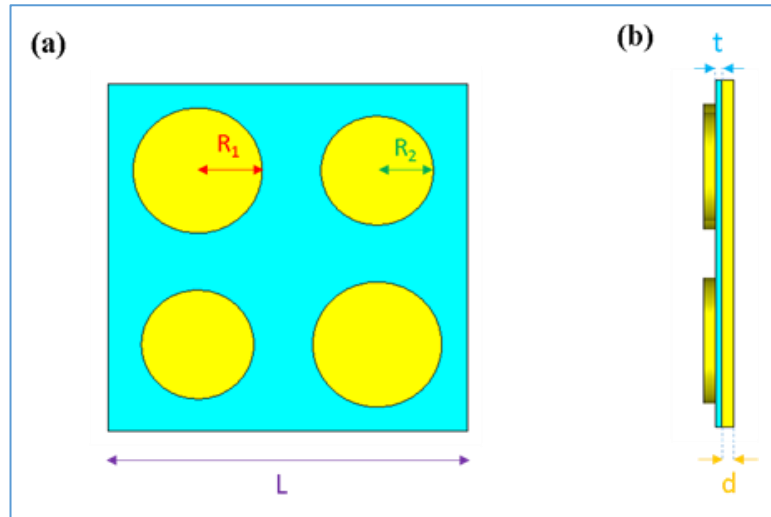
Hai cấu hình truyền qua và phản xạ của lớp vật liệu MMs vào cảm biến NDIR được tập trung nghiên cứu. Trong đó, cấu hình truyền qua tập trung vào việc thiết lập cấu hình tích hợp lớp vật liệu MMs để tạo ra một bộ phận như một nguồn phát hồng ngoại tiên tiến với các đỉnh đặc trưng cho phù hợp với khí CO₂. Trong khi đó, với cấu hình phản xạ, luận án này đi đến thiết kế để có thể chế tạo và áp dụng thử nghiệm vào cảm biến NDIR đo khí CO₂.

CHƯƠNG 3: THIẾT KẾ VÀ TỐI ƯU CẤU TRÚC VẬT LIỆU BIẾN HÓA VÀO TRONG NGUỒN VI NHIỆT

3.1. Nguồn vi nhiệt tạo đỉnh phát xạ đa cộng hưởng

3.1.1. Mô phỏng và thiết kế

Nguồn phát hồng ngoại dải rộng theo kiểu bức xạ vật đen tuyệt đối được dùng phổ biến trong cảm biến NDIR. Tuy vậy, một nguồn phát hồng ngoại có thể chuyển đổi được bức xạ tại một số bước sóng đặc trưng có thể đem lại lợi thế cho áp dụng trong cảm biến NDIR. Nghiên cứu này đã đưa ra một cấu trúc MMs tích hợp vào nguồn vi nhiệt để tạo ra nguồn phát hồng ngoại theo yêu cầu này. Cấu trúc MMs được đề xuất với ô cơ sở hình vuông có kích thước $L = 3 \mu\text{m}$ như được biểu diễn trong Hình 3.1.



Hình 3.1. Cấu trúc ô cơ sở vật liệu biến hóa (a) khi nhìn từ trên xuống, (b) nhìn từ mặt bên.

Mỗi ô cơ sở này bao gồm 3 lớp: hai lớp vàng có cùng độ dày $d = 100 \text{ nm}$, nằm xen giữa hai lớp vàng này là lớp điện môi Al_2O_3 có độ dày $t = 50 \text{ nm}$. Mặt trên của các ô cơ sở được thiết kế bao gồm bốn đĩa nằm đối xứng với nhau qua tâm của ô cơ sở với bán kính lần lượt là $R_1 = 0.54 \mu\text{m}$ và $R_2 = 0.47 \mu\text{m}$.

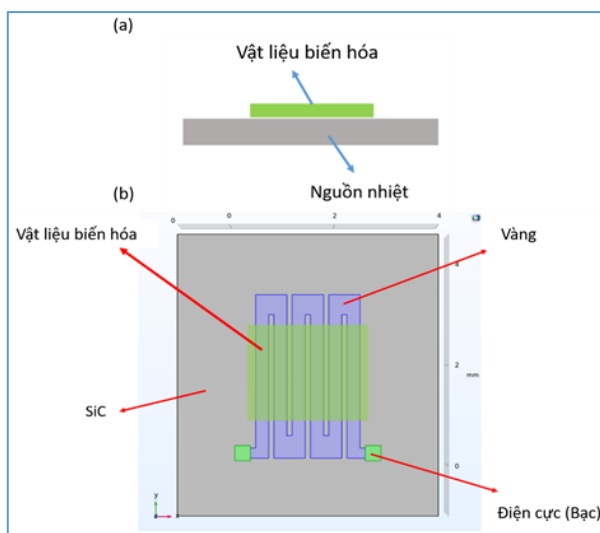
Mô phỏng cấu trúc MMs này được tiến hành bằng cách sử dụng phần mềm CST studio với điều kiện biên unitcell theo 2 phương x và y . Sóng điện từ được chiếu tới bề mặt cấu trúc MMs với góc tới θ và góc phân cực ϕ .

Độ hấp thụ của cấu trúc được tính thông qua các hệ số S-parameter trong mô phỏng theo công thức:

$$A(\omega) = 1 - S_{11}^2(\omega) - S_{21}^2(\omega) \quad (3.1)$$

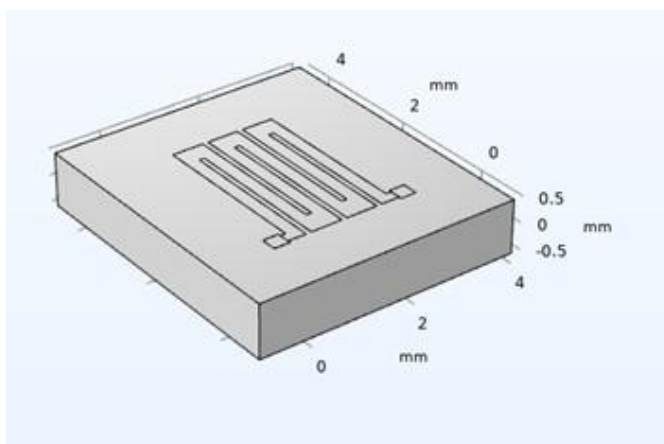
Tiếp đến, các ô cơ sở cấu trúc MMs này được mở rộng thành một tấm màng tích hợp trên bề mặt của một nguồn phát vi nhiệt. Sơ đồ cấu trúc của bộ phận này bao gồm nguồn vi nhiệt (dây đốt điện trở thuần) và tấm MMs như được biểu diễn như trong Hình 3.2.

Hình 3.2. (a) Minh họa cấu trúc mắt cắt của bộ phân phát xa IR; (b) hình



chiều của bộ phận phát xạ IR với lớp MMs tích hợp trên bề mặt vi nhiệt.

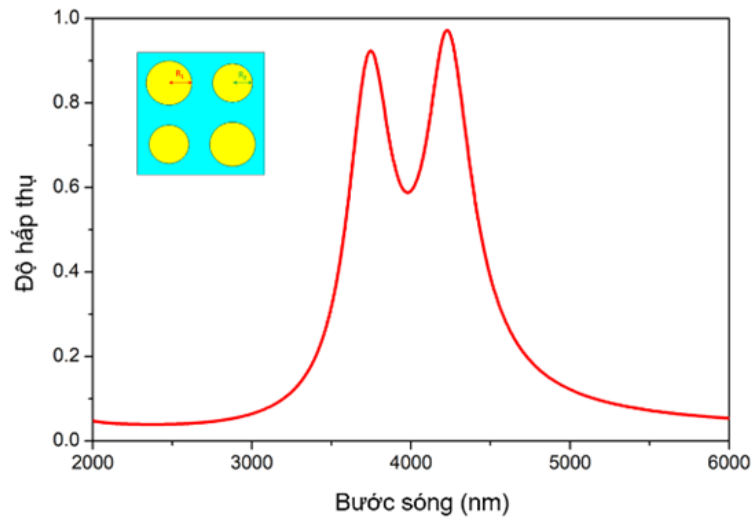
Nguồn nhiệt bao gồm đế SiC có kích thước $5 \times 5 \times 1$ mm, đặt trên đế này là một dây vàng có dạng zigzag với độ dày 50 nm, hai đầu của dây vàng được nối với các điện cực bằng bạc (Hình 3.2b). Tấm MMs có kích thước $1,9 \times 2,1$ mm được đặt tại trung tâm của nguồn phát nhiệt này (để mô phỏng kết quả được đồng nhất tấm/lớp MMs được cho che phủ tại vùng nhiệt trung tâm). Nguồn nhiệt (Hình 3.2a) được thiết kế và mô phỏng bằng phần mềm COMSOL multiphysics. Cấu trúc chi tiết của nguồn vi nhiệt được trình bày trên Hình 3.3



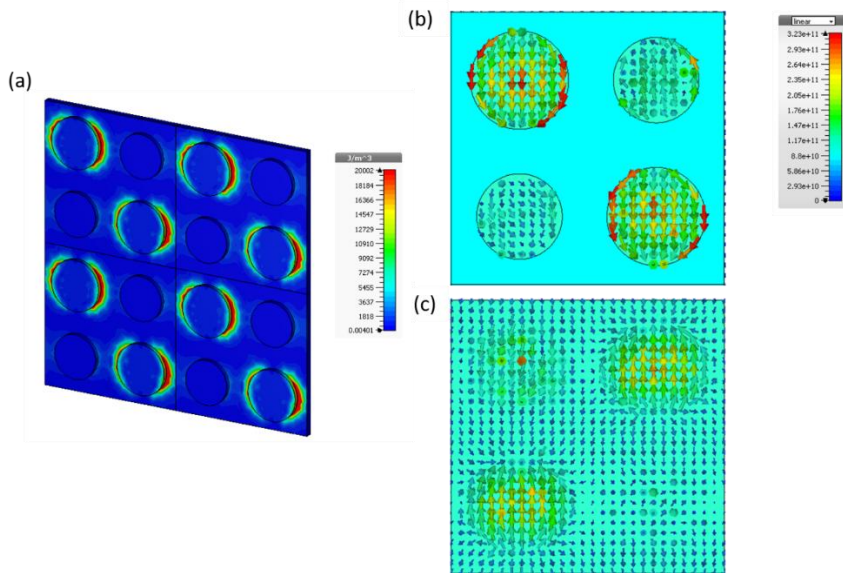
Hình 3.3. Thiết kế chi tiết nguồn phát xạ nhiệt dải rộng cho mô phỏng COMSOL.

3.1.2. Kết quả mô phỏng và thảo luận

Từ quá trình mô phỏng, kết quả về độ hấp thụ của lớp MMs (Hình 3.1) như thể hiện phụ thuộc vào bước sóng trong Hình 3.4. Độ hấp thụ của lớp MMs đạt 92% và 97% lần lượt tại các bước sóng 3,75 μm và 4,2 μm . Kết quả này phù hợp cho phát triển áp dụng trong cảm biến NDIR khi có các đỉnh đặc trưng phù hợp cho tương tác khí CO_2 .



Hình 3.4. Phổ hấp thụ của MMs với cấu trúc đĩa tròn kết hợp.

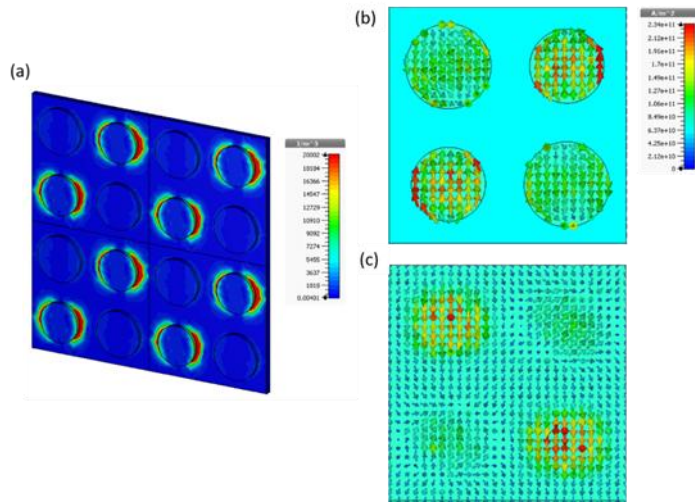


Hình 3.5. (a) Phân bố mật độ năng lượng từ; Phân bố dòng điện trên (b) mặt trước và (c) mặt sau của cấu trúc MM tại bước sóng 4,2 μm .

Để làm rõ hơn cơ chế của hai đỉnh trong phổ hấp thụ của cấu trúc MMs, chúng tôi đã thực hiện thêm các mô phỏng về phân bố năng lượng từ và phân bố dòng điện trên bề mặt MMs tại hai bước sóng cộng hưởng. Hình 3.5a biểu diễn phân bố mật độ năng lượng từ của cấu trúc MMs tại bước sóng 4,2 μm . Kết

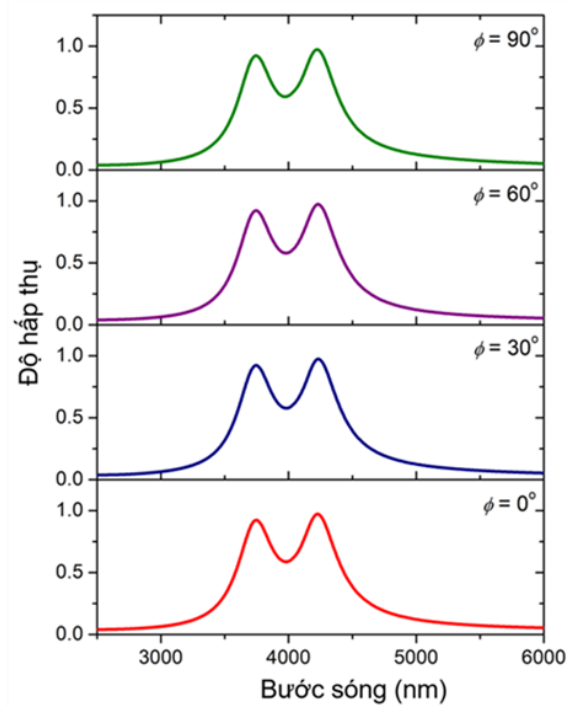
qua mô phỏng này cho thấy năng lượng từ tập trung chủ yếu xung quanh đĩa có bán kính lớn. Điều này cho thấy đỉnh hấp thụ tại bước sóng này chủ yếu gây ra bởi các đĩa lớn. Phân bố dòng điện trên bề mặt cấu trúc trong Hình 3.5b–c cho thấy dòng điện ở mặt trước và mặt sau có chiều ngược nhau chứng tỏ rằng đỉnh cộng hưởng ở bước sóng $4,2\text{ }\mu\text{m}$ là cộng hưởng từ.

Hình 3.6a biểu diễn phân bố mật độ năng lượng từ của cấu trúc MMs tại bước sóng $3,75\text{ }\mu\text{m}$. Trái với đỉnh cộng hưởng ở bước sóng $4,2\text{ }\mu\text{m}$, kết quả mô phỏng này cho thấy năng lượng từ tập trung chủ yếu xung quanh đĩa có bán kính nhỏ hơn. Vì vậy, các kết quả này đi đến kết luận rằng đỉnh hấp thụ tại các bước sóng chủ yếu gây ra bởi các đĩa có bán kính nhỏ hơn. Phân bố dòng điện trên bề mặt cấu trúc trong Hình 3.6b–c cho thấy dòng điện ở mặt trước và mặt sau có chiều ngược nhau chứng tỏ rằng đỉnh cộng hưởng ở bước sóng $3,75\text{ }\mu\text{m}$ cũng là cộng hưởng từ.

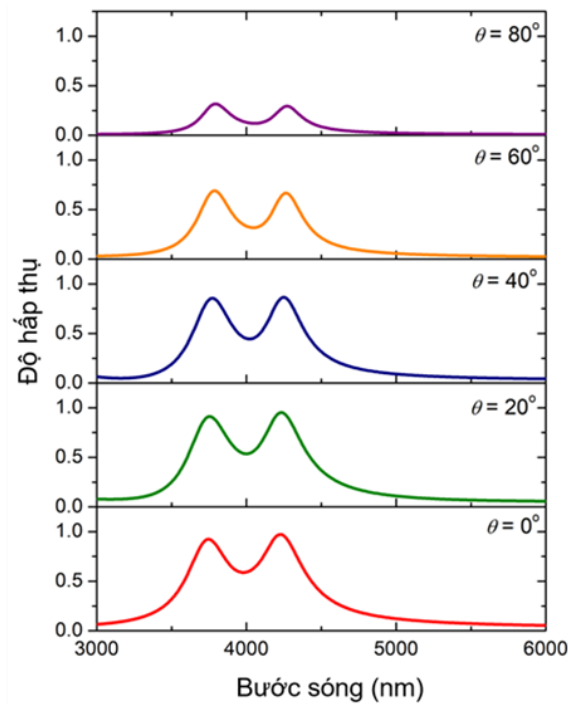


Hình 3.6. (a) Phân bố mật độ năng lượng từ; Phân bố dòng điện trên (b) mặt trước và (c) mặt sau của cấu trúc MMs tại bước sóng $3,75\text{ }\mu\text{m}$.

Để khảo sát thêm về tính khả thi khi đưa cấu trúc đề xuất vào ứng dụng thực tế, chúng tôi tiếp tục nghiên cứu sự thay đổi của phổ hấp thụ khi phân cực và góc tới của sóng điện từ thay đổi. Hình 3.7 mô tả sự thay đổi của phổ hấp thụ khi phân cực sóng điện từ thay đổi từ 0° đến 90° . Kết quả cho thấy khi phân cực sóng điện từ thay đổi, phổ hấp thụ của cấu trúc hoàn toàn không bị ảnh hưởng. Điều này có thể được giải thích do cấu trúc ô cơ sở của MMs có tính đối xứng cao nên phổ hấp thụ không phụ thuộc vào phân cực của sóng tới.



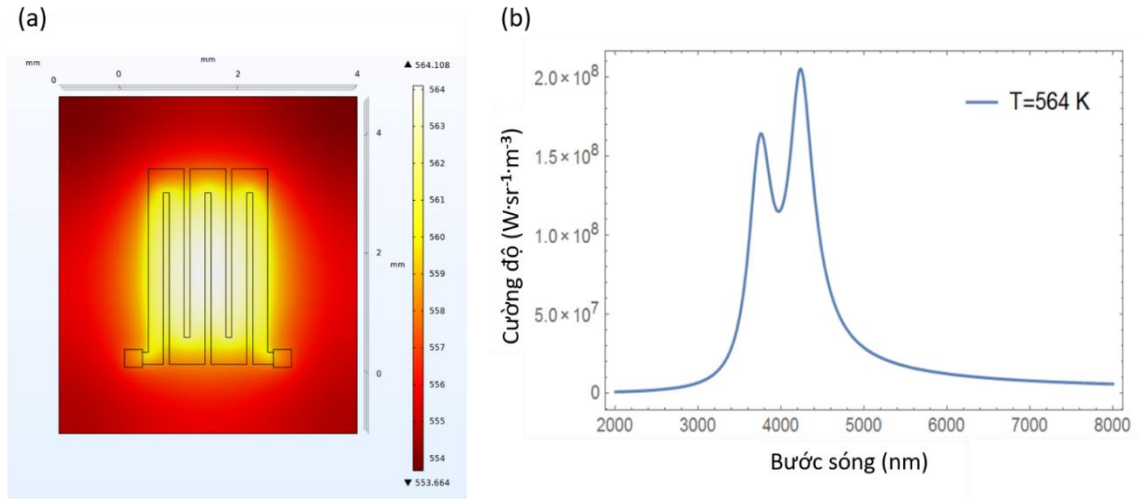
Hình 3.7. Phổ hấp thụ của MM có cấu trúc đĩa tròn kết hợp khi phân cực sóng điện từ thay đổi.



Hình 3.8. Phổ hấp thụ của MM có cấu trúc đĩa tròn kết hợp khi góc tới của sóng điện từ thay đổi.

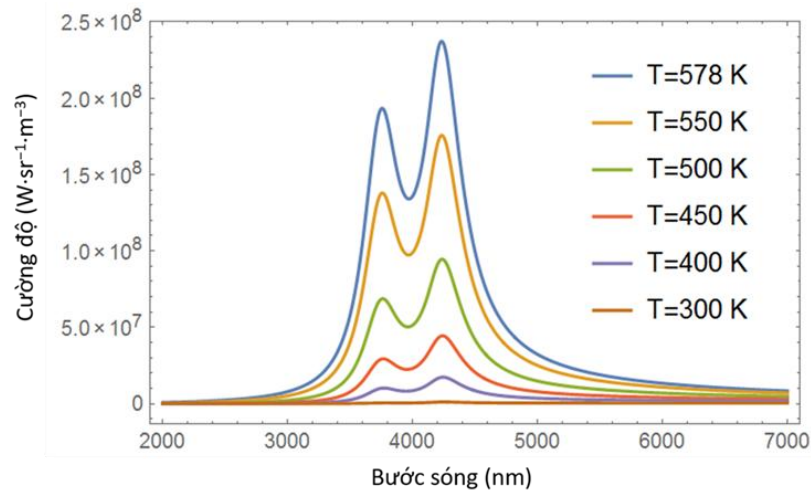
Bên cạnh đó, kết quả khảo sát lại cho thấy sự thay đổi của góc tới có gây ảnh hưởng lên độ hấp thụ của MMs. Hình 3.8 mô tả khi góc tới tăng, mặc dù bước sóng của hai đỉnh cộng hưởng trong phổ hấp thụ gần như không thay đổi nhưng độ hấp thụ tương ứng với hai đỉnh này lại có xu hướng giảm dần. Cụ thể,

khi góc tới tăng từ 0° đến 80° , trong khi đỉnh hấp thụ tại bước sóng $3,75\text{ }\mu\text{m}$ giảm từ 92% xuống 32% thì tại bước sóng $4,2\text{ }\mu\text{m}$, độ hấp thụ cũng giảm từ 97% xuống còn 29%.



Hình 3.9. (a) Sự phân bố nhiệt độ trên bề mặt nguồn nhiệt với điện áp $U = 1,5\text{ V}$; (b) Cường độ phát xạ của tấm MMs ở $T = 564\text{ K}$.

Kết quả mô phỏng phân bố nhiệt độ trên bề mặt của nguồn nhiệt theo điện áp đặt vào và phổ phát xạ tương ứng của MMs được thể hiện trong Hình 3.9a. Kết quả chỉ ra rằng khi đặt điện áp 1,5 V vào nguồn phát nhiệt có cấu trúc zigzag, nhiệt độ trên bề mặt của nó là 564 K. Từ đây, chúng tôi tính toán được phổ phát xạ tương ứng của cấu trúc MMs như thể hiện trong Hình 3.9b. Hai đỉnh phát xạ của tấm MMs xuất hiện tại hai bước sóng 3700 nm và 4200 nm với cường độ lần lượt là $1,6 \times 10^8$ và 2×10^8 $\text{W}\cdot\text{sr}^{-1}\cdot\text{m}^{-3}$ khi đặt điện áp đầu vào là 1,5 V.



Hình 3.10. Cường độ phát xạ của tấm MMs tại nhiệt độ khác nhau.

Ngoài ra, mô phỏng sự biến đổi cường độ phát xạ của MMs tại các nhiệt độ khác nhau với kết quả được biểu diễn trong Hình 3.10. Có thể thấy rằng khi nhiệt độ tăng dần, cường độ phát xạ của tấm MMs cũng tăng dần với đỉnh phát xạ luôn luôn nằm ở bước sóng 3700 nm và 4200 nm. Kết quả này cho thấy sự ổn định của tấm MMs và mở ra tiềm năng ứng dụng cấu trúc MMs này vào cảm biến NDIR đo khí CO₂.

Như vậy, với cấu trúc đĩa tròn kết hợp đơn giản, MMs đề xuất đã thu được phổ hấp thụ với hai đỉnh đạt 92% và 97% lần lượt tại bước sóng 3,75 μm và 4,2 μm . Cấu trúc thể hiện tính khả thi để đưa vào ứng dụng nhờ tính chất độc lập với phân cực của sóng điện từ. Bên cạnh đó, độ hấp thụ vẫn được duy trì gần 70% khi góc tới lên đến 60° cũng cho thấy tính ổn định của cấu trúc. Ngoài ra, nguồn phát xạ nhiệt với cấu trúc zigzac chúng tôi nghiên cứu cũng cho kết quả khả quan với điện áp đầu vào nhỏ (chỉ 1,5 V) thu được nhiệt độ bề mặt lớn (564 K). Cường độ phát xạ của tấm MM đạt $1,6 \times 10^8$ và $2 \times 10^8 \text{ W} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$ lần lượt tại hai bước sóng 3700 nm và 4200 nm. Các kết quả cho thấy khả năng ứng dụng cao của các cấu trúc bộ phận phát hồng ngoại với điều khiển phổ phát xạ trong tương lai.

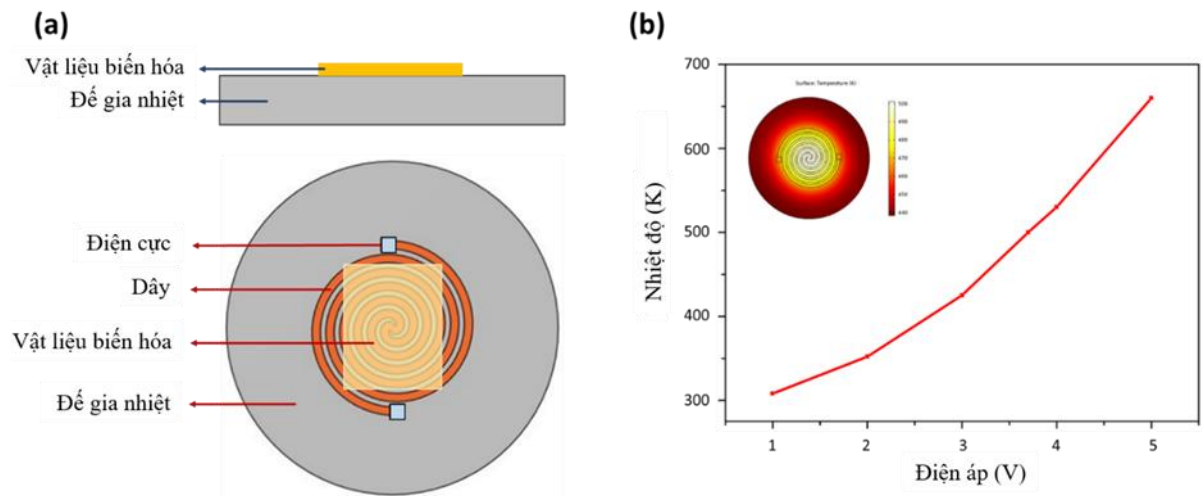
3.2. Nguồn vi nhiệt với cấu trúc hốc cộng hưởng

Nghiên cứu phần trước đã thực hiện với cấu trúc MMs là các đĩa tròn đơn giản, thu được hai đỉnh hấp thụ tại bước sóng 3960 nm và 4197 nm với độ hấp thụ lần lượt là 96,3% và 94,1%. Thiết kế này không chỉ thể hiện phù hợp cho chế tạo trong thực tế mà còn thể hiện tính ổn định hoạt động khi thay đổi của các tham số cấu trúc. Hơn nữa, cấu trúc này cũng cho thấy khả năng tích hợp trong các ứng dụng thực tế dựa trên việc không phụ thuộc vào góc phân cực của sóng điện từ.

Tương tự, nghiên cứu với thay đổi về nguồn phát vi nhiệt tích hợp MMs cho phát xạ hồng ngoại được thực hiện. Ở đó, nguồn nhiệt có cấu trúc xoắn đã được khảo sát và mang lại kết quả đáng chú ý. Bộ phát xạ hồng ngoại này được tích hợp có khả năng giảm đến 35% mức tiêu thụ năng lượng so với bề mặt phát xạ của vật đen (Blackbody). Kết quả về cường độ phát xạ tại bước sóng của cấu trúc nêu trên là $1,75 \times 10^9$ và $1,8 \times 10^9 \text{ W} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$ tương ứng, cho thấy tiềm năng của cấu trúc cho việc triển khai thực tế microheater thể hệ mới ứng dụng vào cảm biến CO₂.

3.2.1. Thiết kế và mô phỏng cấu trúc với vi nhiệt dạng xoắn

Trong nghiên cứu này, vi nhiệt (microheater) đóng vai trò như một nguồn hồng ngoại được tích hợp với MMs với cấu trúc của nó được trình bày trong Hình 3.11a. Thiết kế này bao gồm một đế Si với độ dày và bán kính lần lượt là 0,2 và 3 mm. Vi nhiệt với dây vàng được sắp xếp theo mô hình xoắn ốc với các điện cực bạc ở mỗi đầu có độ dày 50 nm và bán kính ngoài 1,5 mm được đặt trên đế Si, lớp vật liệu MMs được đặt trên cùng. Tương tự, lớp MMs không phủ toàn bộ bề vi nhiệt để mô phỏng cho kết quả được đồng nhất.



Hình 3.11. (a) Cấu trúc của vi nhiệt tích hợp lớp MMs; (b) Mối quan hệ giữa nhiệt độ cao nhất trên bề mặt vi nhiệt và điện áp đặt vào; (Hình nhỏ: phân bố nhiệt mô phỏng trên bề mặt vi nhiệt tại điện áp 3.7 V)

Trong nghiên cứu này, phần mềm COMSOL được sử dụng cho việc mô phỏng phần tử hữu hạn và mô phỏng phân bố nhiệt do mô-đun truyền nhiệt cho cung cấp các mối quan hệ thực nghiệm cho hệ số truyền nhiệt đối lưu. Các tính chất vật liệu được sử dụng trong mô phỏng và tính toán của COMSOL được liệt kê trong Bảng 3.1 dưới đây.

Bảng 3.1: Độ dẫn nhiệt và độ dẫn điện của các vật liệu dùng cho vi nhiệt.

Vật liệu	Độ dẫn nhiệt [W/mK]	Độ dẫn điện [S/m]
SiO ₂	1.38	10 ⁻¹⁴
Au	317	45.6×10 ⁶
Ag	429	61.6×10 ⁶

Ngoài ra, các tính chất điện từ được mô phỏng bằng cách sử dụng phần mềm CST Microwave Studio. Bộ giải phương trình miền được sử dụng trong phạm vi bước sóng từ 3600 đến 4800 nm. Điều kiện biên tuần hoàn được áp dụng cho các ô cơ sở theo hướng $x(\mathbf{H})$ và $y(\mathbf{E})$. Hai cổng được đặt ở phía trước và phía sau cấu trúc MMs để mô phỏng tương tác sóng - vật chất và trích xuất các tham số tán xạ. Sau đó, độ hấp thụ được tính toán bằng cách sử dụng công thức $A(\omega) = 1 - R(\omega) - T(\omega)$, trong đó $R(\omega) = |S_{11}|^2$ và $T(\omega) = |S_{21}|^2$ đại diện cho độ phản xạ và truyền qua tương ứng. Ngoài ra, một lớp kim loại liên tục được thiết kế phía sau cấu trúc để ngăn chặn hoàn toàn thành phần truyền qua. Do đó, công thức hấp thụ được đơn giản hóa thành $A(\omega) = 1 - |S_{11}|^2$.

Đối với thiết kế vi nhiệt, mô phỏng được thực hiện để phân tích phân bố nhiệt trên bề mặt. Hình nhỏ trong Hình 3.11b minh họa phân bố nhiệt ở điện áp đặt vào $U = 3,7$ V. Hình 3.11b cũng cho thấy nhiệt độ cao nhất quan sát được trên bề mặt của vi nhiệt theo điện áp đặt vào, trong khoảng từ 1,0 đến 5,0 V. Điện áp cao hơn dẫn đến nhiệt độ tối đa cao hơn, với 1,0 V tương ứng với 308 K và 5,0 V tương ứng với 660 K.

Về mặt lý thuyết, ở trạng thái cân bằng nhiệt, cường độ bức xạ của vật liệu có thể được định lượng bởi định luật Stefan-Boltzmann cho bức xạ vật đen tuyệt đối, đó là dạng đơn giản hóa của định luật Planck liên quan đến bộ phát xạ lý tưởng:

$$I_0(\lambda, T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1} \quad (3.2)$$

Ở đây, $I_0(\lambda, T)$ là cường độ bức xạ của vật liệu, h là hằng số Planck, c là tốc độ ánh sáng trong chân không, λ là bước sóng bức xạ, k_B là hằng số Boltzmann và T là nhiệt độ tính theo Kelvin.

Tiếp theo, nghiên cứu được thực hiện về phân bố nhiệt độ bề mặt dọc theo khoảng cách bán kính ở các độ dày khác nhau của đế. Đối với đế rất mỏng, các phương trình truyền nhiệt được đơn giản hóa thành bài toán một chiều với nghiệm giải tích có thể so sánh với kết quả mô phỏng. Phương trình truyền nhiệt có thể được biểu diễn bởi [93]:

$$\frac{kt}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dT}{dr} \right) + \sigma - \gamma(T - T_0) = 0 \quad (3.2)$$

$$\frac{d^2T}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dT}{dr} - \frac{\gamma}{kt} \left(T - T_0 - \frac{\sigma}{\gamma} \right) = 0 \quad (3.3)$$

Trong đó k là hệ số dẫn nhiệt, t là độ dày đế, σ là mật độ công suất gia nhiệt, và γ là hệ số tổng đối lưu nhiệt cho bề mặt hướng lên và hướng xuống. T_0 là nhiệt độ của không khí. Hệ số đối lưu nhiệt phụ thuộc vào nhiệt độ bề mặt và cấu trúc hình học của bộ gia nhiệt. Trong vi nhiệt này, hệ số tổng của đối lưu nhiệt được giả định bằng $36,1 \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-1}$. Cách nhiệt được sử dụng cho phần còn lại của bộ gia nhiệt. Khu vực gia nhiệt nằm ở trung tâm với bán kính $r_0 = 1,5 \text{ mm}$. Nghiên cứu này giả định rằng công suất gia nhiệt được phân bố đều trong khu vực này.

$$\sigma = \frac{P}{S}, P = \frac{V^2}{R}, R = \rho \frac{l}{t_1 w}, S = \pi r_0^2, l = \int_{\theta_0}^{\theta_f} b \sqrt{1 + \theta^2} d\theta \quad (3.4)$$

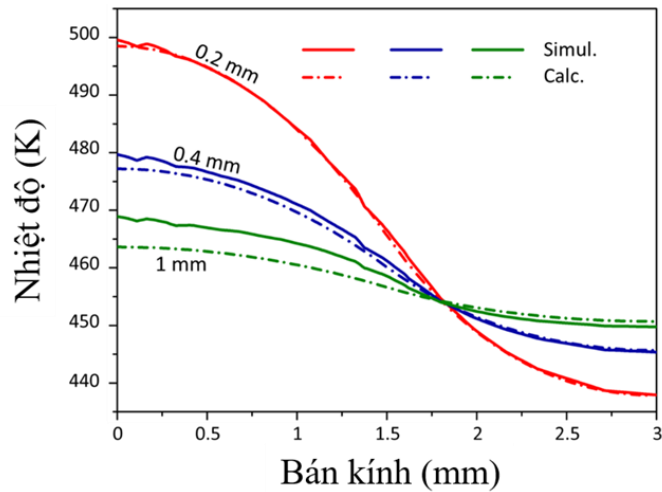
Trong đó V là điện áp đặt vào, R là điện trở của dây vàng, ρ là độ dẫn điện của dây, w là chiều rộng, l là chiều dài, và t_1 là độ dày của dây. Dây vàng là một đường xoắn ốc Archimedean với phương trình cực $r = b\theta$, trong đó $2\pi b$ là khoảng cách giữa mỗi vòng. Chiều dài của nó được xác định bởi phương trình bên trên. Trong nghiên cứu này lấy điều kiện $\pi/5 \leq \theta \leq 6\pi$, $2\pi b = 0,5 \text{ mm}$.

Phương trình khi đó là một dạng của phương trình vi phân Bessel bậc không và có nghiệm tổng quát là [94]:

$$\begin{cases} T_1(r) = T_0 + \frac{\sigma}{\gamma} + AI_0(n_0 r) + BK_0(n_0 r) & \text{if } r \leq r_0 \\ T_2(r) = T_0 + CI_0(n_0 r) + DK_0(n_0 r) & \text{if } r_0 \leq r \leq a \end{cases} \quad (3.5)$$

Trong đó a là bán kính đế. Bốn hằng số A, B, C, D có thể được tìm thấy bằng cách áp đặt các điều kiện biên:

$$\begin{aligned} T_1'(0) &= 0 \text{ (điều kiện đối xứng),} \\ T_2'(a) &= 0 \text{ (điều kiện cách ly),} \\ \begin{cases} T_1(r_0) = T_2(r_0) \\ T_1'(r_0) = T_2'(r_0) \end{cases} &\text{(điều kiện biên giao diện).} \end{aligned}$$



Hình 3.12. Nhiệt độ phân bố bề mặt dọc theo khoảng cách xuyên tâm ở các độ dày khác nhau của đế.

Sau đó, kết quả phân tích được so sánh với kết quả mô phỏng COMSOL ở điện áp cấp 3,7 V, như kết quả được trình bày trong Hình 3.12. Độ dày của đế thay đổi từ 0,2, 0,4 và 1 mm. Các phát hiện cho thấy rằng nhiệt độ tối đa tăng khi độ dày đế giảm. Do đó, công nghệ màng mỏng được sử dụng trong thực tế để giảm nhiệt và do đó giảm mức tiêu thụ điện năng. Ngoài ra, sự khác biệt giữa kết quả tính toán và mô phỏng có xu hướng tăng lên theo độ dày của đế. Điều này có thể được giải thích bởi thực tế là độ dày đế tăng lên dẫn đến sự truyền nhiệt dọc theo chiều cao thông qua dẫn nhiệt và bởi sự thay đổi hệ số đối lưu xảy ra khi nhiệt độ giữa mặt trên và dưới của đế khác nhau.

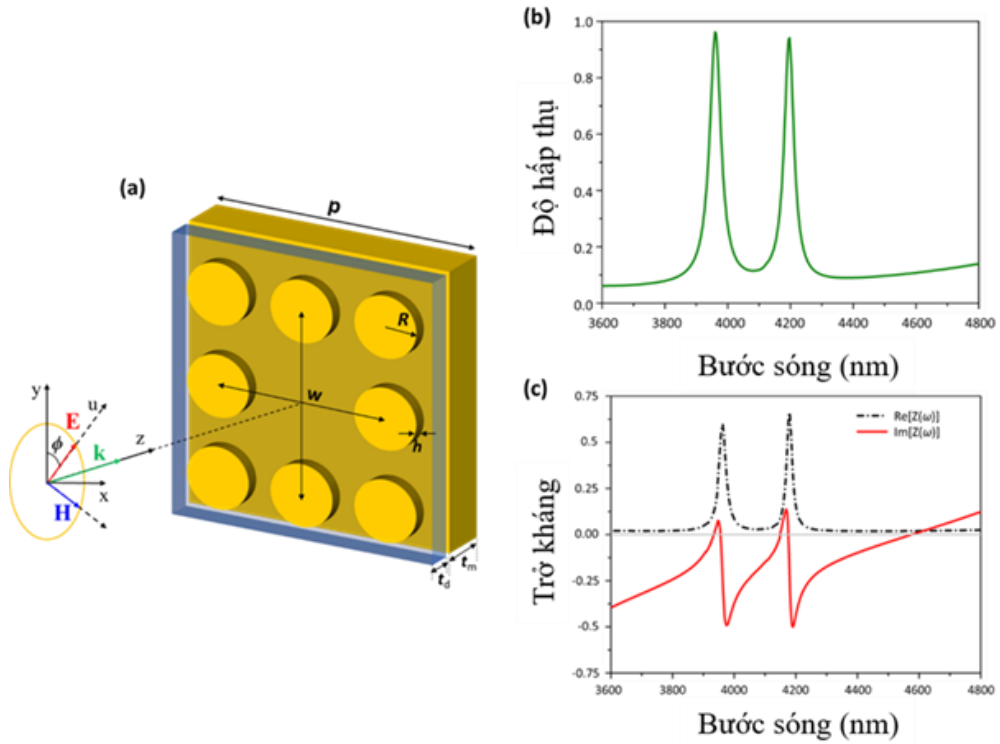
3.2.2. Kết quả và thảo luận

a) Lớp vật liệu MMs

Như đã đề cập trước đó, các bộ phát nhiệt (phát hồng ngoại) thông thường tồn tại những nhược điểm như yêu cầu công suất đầu vào cao, phát ra các bước sóng không cần thiết và có kích thước lớn. Để cải thiện những hạn chế này, chúng tôi đề xuất một thiết kế vi nhiệt tích hợp MMs trên bề mặt. Sơ đồ của cấu trúc MMs được trình bày trong Hình 3.13a.

Cấu trúc này bao gồm ba lớp; hai lớp vàng được ngăn cách bởi một vật liệu điện môi polyimide với độ dày $t_d = 0,29 \mu\text{m}$. Các mô phỏng được thực hiện bằng cách sử dụng hằng số điện môi polyimide là 3,5 và tổn hao điện môi là 0,0027. Lớp dưới cùng là một tấm vàng liên tục với độ dày $t_m = 0,75 \mu\text{m}$ và lớp trên có cấu trúc 8 đĩa tròn. Khoảng cách trung tâm được tối ưu hóa là $w = 3,68$

μm . Độ dày của đĩa là $h = 0,19 \mu\text{m}$, với bán kính $R = 0,63 \mu\text{m}$ và kích thước ô cơ sở là $p = 5,96 \mu\text{m}$.

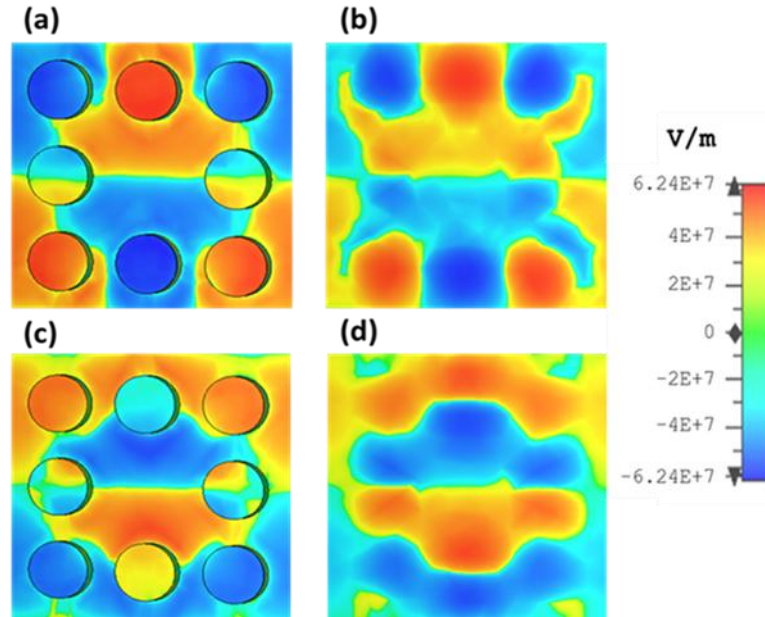


Hình 3.13. (a) Cấu trúc của MMs với tám đĩa tròn bao quanh một hốc; (b) Phổ hấp thụ và (c) trở kháng của cấu trúc.

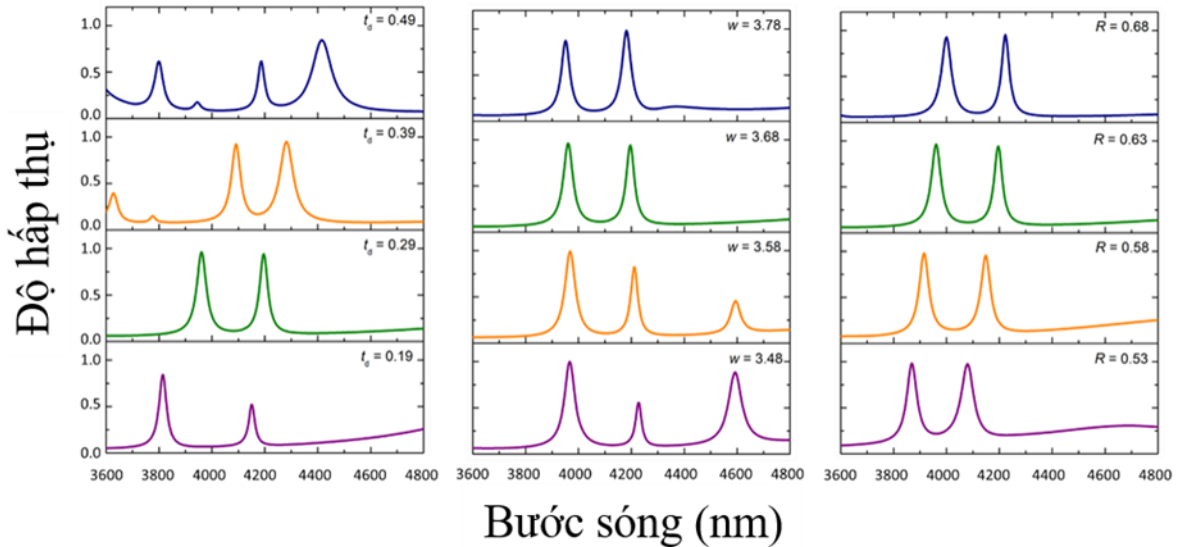
Hình 3.13b trình bày phổ hấp thụ của cấu trúc MMs này cho thấy hai đỉnh hấp thụ ở 3960 nm và 4197 nm với độ hấp thụ lần lượt là 96,3% và 94,1%. Những đỉnh này làm cho cấu trúc MMs đặc biệt phù hợp cho áp dụng vào cảm biến NDIR đo khí CO_2 , vì các phân tử CO_2 hấp thụ xung quanh 4200 nm và bước sóng tham chiếu thông thường là 3950 nm [95,96]. Chúng tôi cũng tính toán trở kháng tương đối, $Z(\omega)$, sử dụng công thức $Z(\omega) = (1 + S_{11})/(1 - S_{11})$, trong đó S_{11} là hệ số phản xạ mô phỏng của MMs. Cơ chế hấp thụ của MMs hoạt động bằng cách giảm phản xạ thông qua sự phù hợp trở kháng với không khí xung quanh. Hình 3.13c xác nhận rằng tại các bước sóng cộng hưởng trở kháng tương đối gần bằng 1,0, do đó làm giảm đáng kể sự phản xạ sóng điện từ.

Để nghiên cứu hai đỉnh trong phổ hấp thụ, chúng tôi đã mô phỏng sự phân bố điện trường trong MM ở cả hai bước sóng cộng hưởng. Hình 3.14 mô tả rằng hướng chuyển động/ phân bố của điện tử (electron) của các lớp trên và dưới là song song ở cả hai bước sóng cộng hưởng, điều này xác nhận rằng đây

là cộng hưởng điện và được gây ra bởi các dòng cảm ứng song song có trong các lớp kim loại.



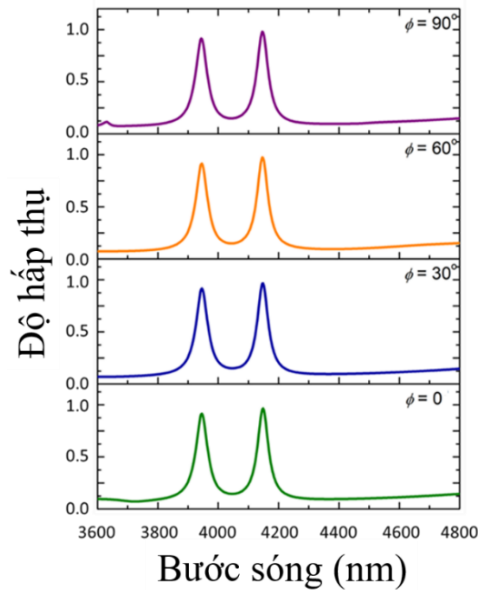
Hình 3.14. Phân bố điện trường trong MMs ở mặt trên và dưới tại bước sóng (a) và (b) 3960 nm, và (c) và (d) 4197 nm.



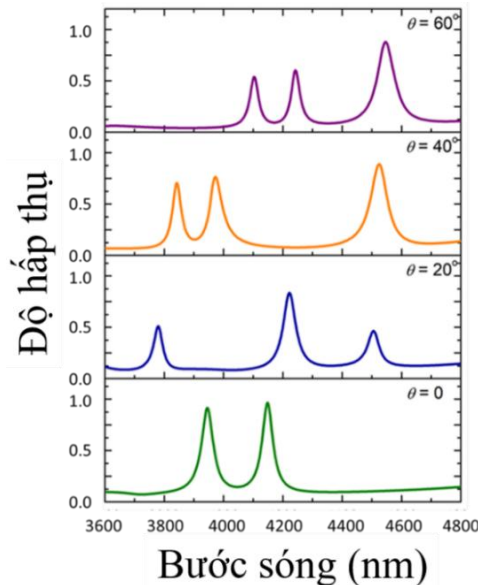
Hình 3.15. Sự phụ thuộc của phổ hấp thụ vào các tham số cấu trúc khác nhau.

Hình 3.15 cho thấy ảnh hưởng của độ dày lớp điện môi, kích thước khoảng cách trung tâm và bán kính của cấu trúc đĩa. Sự thay đổi độ dày điện môi (t_d) ảnh hưởng đáng kể đến phổ hấp thụ của MMs. Khi t_d tăng, vị trí của hai đỉnh hấp thụ thể hiện dịch chuyển đáng kể sang vùng tần số thấp. Do đó, độ dày điện môi 0,29 μm là tối ưu để đạt được các vị trí và độ hấp thụ mong muốn của hai đỉnh cộng hưởng. Ngược lại, khoảng cách khe hở (w) chỉ liên quan đến đỉnh hấp thụ thứ hai. Khi giá trị của w tăng từ 3,48 đến 3,78

μm , chúng tôi quan sát thấy rằng đỉnh thứ nhất hoàn toàn không bị ảnh hưởng. Tuy nhiên, đỉnh thứ hai thể hiện sự tăng đáng kể từ 55,4% lên 98,2% và dịch chuyển nhẹ lên vùng tần số cao từ 4227 xuống 4197 nm. Cuối cùng, bán kính đĩa (R) tạo ra tác động tối thiểu đến cường độ hấp thụ nhưng có xu hướng dịch chuyển về vùng tần số thấp khi R tăng. Vì các tính chất hấp thụ và phát xạ có thể hoán đổi cho nhau, ảnh hưởng của các thông số kích thước đến phổ phát xạ tương tự như đối với phổ hấp thụ. Điều đó có nghĩa là phổ phát xạ tối ưu của MMs có thể được dự đoán từ các thông số kích thước, ảnh hưởng đến bước sóng hoạt động, cường độ phát xạ và hiệu suất năng lượng



Hình 3.16. Sự phụ thuộc phân cực của phổ hấp thụ của MMs.



Hình 3.17. Sự phụ thuộc của góc tới của phổ hấp thụ của MMs

Hình 3.16 minh họa phổ hấp thụ của MMs vẫn ổn định khi góc phân cực (φ) thay đổi từ 0° đến 90° , ngụ ý rằng cấu trúc MMs vốn không phụ thuộc vào phân cực. Đặc tính này rất quan trọng vì nó đảm bảo sự ổn định hoạt động trước góc phân cực của sóng điện từ. Ngược lại, Hình 3.17 cho thấy phổ hấp thụ thay đổi đáng kể theo góc tới. Ở góc tới ban đầu, phổ này thể hiện hai đỉnh nổi bật ở 3946 và 4189 nm. Khi góc tới tăng lên, phổ hấp thụ trải qua những thay đổi đáng kể. Ở góc tới 20° , hai đỉnh hấp thụ ban đầu chuyển thành ba đỉnh, bao gồm hai đỉnh nhỏ hơn ở 3780 và 4510 nm với độ hấp thụ lần lượt là 51% và 46%, cùng với một đỉnh cao hơn ở 4220 nm, cho thấy độ hấp thụ 83%. Tiếp theo, khi góc tới đạt 40° , cả ba đỉnh hấp thụ đều đạt hơn 70%. Đáng chú ý, đỉnh cao nhất ở 4530 nm thậm chí còn thể hiện độ hấp thụ 89%. Hơn nữa, khi góc tới thay đổi từ 40° đến 60° , các đặc tính phổ vẫn gần như không đổi. Tuy nhiên, trong khi đỉnh hấp thụ cao hơn giữ nguyên vị trí và độ hấp thụ của nó, hai đỉnh hấp thụ nhỏ hơn có sự dịch chuyển về vùng tần số thấp, đo được ở 4105 và 4240 nm với độ hấp thụ lần lượt là 53% và 57%. Những quan sát này cung cấp cái nhìn sâu sắc về các ứng dụng tiềm năng của cấu trúc MMs đề xuất trong các ứng dụng thực tế đa dạng.

b) Bộ phát xạ hồng ngoại

Cường độ bức xạ của lớp MMs trên bề mặt của vi nhiệt được tính toán theo định luật bức xạ nhiệt Kirchhoff. Theo định luật này, độ hấp thụ (α) của một vật liệu, tại một bước sóng (λ), phân cực (φ) và hướng (θ) xác định, tương đương với độ phát xạ (ε) của nó trong điều kiện cân bằng nhiệt [97]:

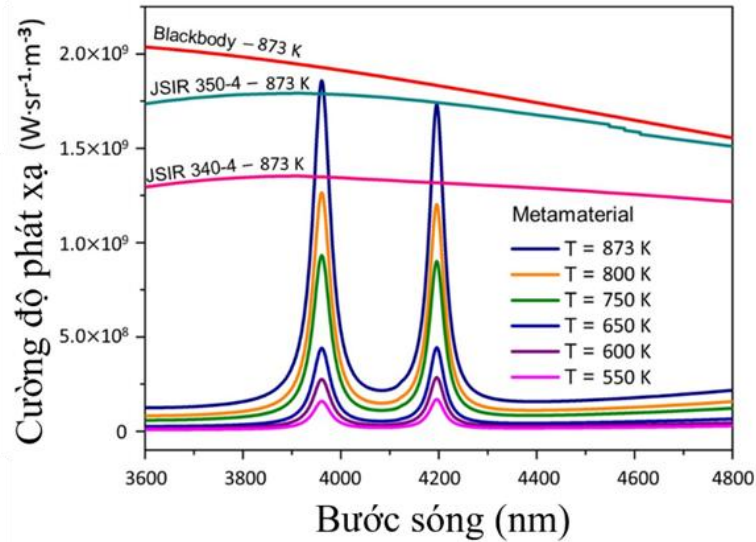
$$\alpha(\lambda, \varphi, \theta) = \varepsilon(\lambda, \varphi, \theta) \quad (3.6)$$

Như đã đề cập ở trên, độ hấp thụ của MMs đề xuất thể hiện tính độc lập với phân cực. Do đó, cường độ bức xạ (I) của MMs liên quan đến cường độ bức xạ vật đen trong không gian tự do I_0 thông qua α ở hướng vuông góc [98]:

$$I(\lambda, T) = \alpha(\lambda) \times I_0(\lambda, T) \quad (3.7)$$

Hình 3.18 trình bày phổ phát xạ thu được từ microheater MMs tích hợp ở các nhiệt độ khác nhau với $\theta = 0$. Kết quả cho thấy sự giảm đáng kể phát xạ không cần thiết, đồng thời duy trì cường độ ở các bước sóng mục tiêu. Cường độ phát xạ tăng lên đồng thời với nhiệt độ. Ở nhiệt độ cao nhất được khảo sát là 873 K, cường độ phát xạ tại hai đỉnh cộng hưởng đạt $1,75 \times 10^9$ và $1,8 \times 10^9$ $\text{W} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$ tại bước sóng 3960 và 4197 nm, tương ứng. Chúng tôi cũng so sánh

các giá trị này với các nguồn phát hồng ngoại IR thương mại như JSIR 340-4 và JSIR 350-4 từ MicroHybrid Electronics, Inc. [93]. Kết quả cho thấy bộ phát xạ hồng ngoại tích hợp MMs trong nghiên cứu của luận án với phổ phát xạ hẹp có thể tiêu thụ công suất thấp, điều này hữu ích cho phát triển nguồn IR điều khiển phổ phát xạ tiềm năng trong tương lai.



Hình 3.18. Phổ phát xạ của lớp MM tích hợp nguồn vi nhiệt, so với các nguồn IR thương mại, ở các nhiệt độ khác nhau với $\theta = 0$.

Hơn nữa, Hình 3.18 đối chiếu công suất phát xạ giữa vật đen và bộ phát xạ tích hợp MMs. Trong điều kiện cân bằng nhiệt, vật đen có công suất phát xạ cao hơn. Tuy nhiên, với giả định độ phát xạ bằng độ hấp thụ trong trường hợp lý tưởng, nguồn IR-MMs dự kiến sẽ tiêu thụ năng lượng ít hơn đáng kể so với vật đen tuyệt đối.

Tiếp theo, nghiên cứu đã được thực hiện về thiết lập mô hình lý thuyết để chứng minh vấn đề này. Giả sử thiết bị hoạt động trong chân không để bỏ qua tổn thất đối lưu. Độ dày của MMs và gia nhiệt kim loại nhỏ hơn nhiều so với độ dày của đế, do đó hệ thống có thể được coi là đồng nhất với độ dẫn nhiệt của đế. Khi MMs được tích hợp vào vi nhiệt, lớp Au dưới cùng cũng hoạt động như một đế gia nhiệt. Giả sử công suất nhiệt P sinh ra bởi hiệu ứng Joule được phân bố đều trong vùng gia nhiệt. Chúng ta chỉ xem xét tổn thất bức xạ trong vùng hoạt động. Lưu lượng bức xạ là $q_{\text{rad}} = \epsilon\sigma(T^4 - T_0^4)$. Giả sử biến thiên nhiệt độ nhỏ trong vùng nóng và tuyến tính hóa q_{rad} bằng cách sử dụng chuỗi Taylor tại $T = T_{\text{avg}}$.

$$q_{rad} = 4\sigma_B \varepsilon T_{avg}^3 \left[T - \frac{3T_{avg}}{4} - \frac{T_0^4}{4T_{avg}^3} \right] = \gamma_e (T - T_*) \quad (3.8)$$

$$\gamma_e = 4\sigma_B \varepsilon T_0^3, \quad T_* = \frac{3T_{avg}}{4} + \frac{T_0^4}{4T_{avg}^3}$$

Phương trình truyền nhiệt có cùng dạng như phương trình trên. Nhiệt độ của đế ở mép được đặt bằng nhiệt độ môi trường xung quanh T_0 (điều kiện biên Dirichlet). Nghiệm trong vùng trong là:

$$T_1(r) = T_* + \frac{P}{\gamma_e \pi r_0 t} + AI_0(n_0 r) + BK_0(n_0 r) \quad (3.9)$$

$$n_0 = \sqrt{\frac{\gamma_e}{kt}}$$

Phương trình nhiệt trong vùng ngoài được cho bởi $\frac{d}{dr}(r dT) = 0$. Nghiệm của phương trình là:

$$T_2(r) = C \ln(r) + D \quad (3.10)$$

Điều kiện biên là $T_1'(0) = 0$

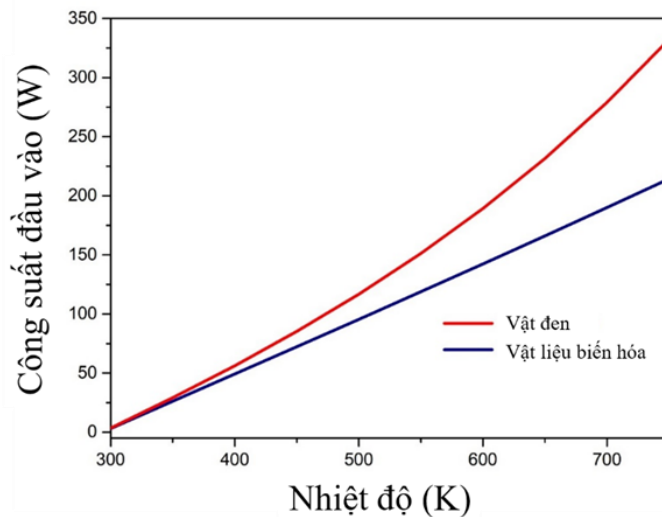
$$\begin{aligned} T_2(a) &= T_0 \\ T_1(r_0) &= T_2(r_0), \\ T_1'(r_0) &= T_2'(r_0). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Bốn hằng số chưa biết A, B, C và D có thể được xác định bằng cách giải các phương trình này. Nghiệm thu được bao gồm nhiệt độ trung bình của vùng nóng T_{avg} là dữ liệu đầu vào. Tính toán nhiệt độ trung bình trong vùng gia nhiệt và đặt nó bằng giá trị đầu vào T_{avg} . Từ đó, mối quan hệ giữa nhiệt độ trung bình T_{avg} và công suất đầu vào sẽ là:

$$\frac{T_1(0) + T_1(r_0)}{2} = T_{avg} \quad (3.12)$$

Phương trình này là phương trình tuyến tính bậc nhất với ẩn số là công suất đầu vào P. Bằng cách giải phương trình này, chúng ta thu được công suất đầu vào P cần thiết.

Để nổi bật lợi thế của bộ phát xạ tích hợp MMs so với bộ phát xạ vật đen, một so sánh đã được thực hiện giữa chúng. Bộ phát xạ vật đen tham chiếu được tạo ra bằng cách áp dụng sơn vật đen (JCS-3 Nhật Bản với độ phát xạ 0,94) lên màng gia nhiệt của bộ phát xạ tích hợp MMs tương đương thay vì lên mẫu MMs. Hình 3.19 minh họa mối quan hệ giữa công suất đầu vào và nhiệt độ trung bình của vùng hoạt động cho độ dày đế là 0,05 mm.



Hình 3.19. Nhiệt độ bề mặt của MM và vật đen theo nguồn điện đầu vào.

Tại cùng một nhiệt độ, bộ phát xạ vật đen yêu cầu công suất cao hơn so với bộ phát xạ tích hợp MMs. Bằng cách sử dụng bộ phát xạ tích hợp MMs, công suất cần thiết được giảm 35% tại 750 K. Hiệu quả năng lượng này phát sinh từ phạm vi phổ phát xạ tập trung vào vùng mục tiêu hơn của MMs.

Để làm rõ thêm lợi thế của cấu trúc MMs đề xuất, chúng tôi đã thực hiện phân tích so sánh về độ bán rộng cực đại (FWHM) giữa MMs đề xuất với các nghiên cứu khác như trình bày trong Bảng 3.2. MMs đề xuất đem lại lợi thế của dải phát xạ hẹp hơn với FWHM giảm, so với các nghiên cứu trong và công suất phát xạ của MMs tại nhiệt độ 300°C khoảng 1,04 mW, thấp hơn ba lần so với giá trị 3 mW được báo cáo trong [95].

So sánh được trình trong Bảng 3.2, trong đó lượng công suất bảo toàn được định nghĩa là hiệu số giữa công suất đầu vào của thiết bị không có MMs và công suất đầu vào của thiết bị có MMs. Công suất đầu vào của thiết bị có MMs là 129 mW, cao hơn giá trị 58 mW được đề cập trong [95]. Sự khác biệt này có thể được giải thích bởi độ dày lớn hơn của thiết bị dẫn đến lượng nhiệt và tổn thất dẫn nhiệt lớn hơn. Tuy nhiên, lượng công suất bảo toàn của thiết bị

là 38,6 mW, vượt quá giá trị 30 mW của thiết bị trong [95]. Điều này là do thiết bị có MMs của nghiên cứu trong luận án có tổn thất bức xạ nhỏ hơn.

Bảng 3.2: So sánh nguồn phát với MMs của luận án và các tài liệu tham khảo.

Cấu trúc MMs	Đỉnh hấp thụ (nm)	FWHM (nm)
MMs (luận án)	3960, 4197	45, 38
MMs [95]	3950, 4260	359, 387
MMs [99]	2500, 3174, 3633	144.06, 156.27, 279.68
MMs [100]	2440	380

Bảng 3.3: So sánh giữa các nguồn phát có / không có MMs

Nguồn phát		Năng lượng phát xạ	Năng lượng đầu vào (mW)	Công suất chuyển đổi (mW)
Luận án	Không có MMs	-	168.2	38.6
	Có MMs	1.04	129.6	
[95]	Không có MMs	-	88	30
	Có MMs	3	58	

Do đó, cấu trúc MMs có khả năng bảo toàn năng lượng, hoạt động bền bỉ trong quá trình vận hành và có kích thước nhỏ gọn. Những đặc tính này, cùng với tính năng phát xạ được cải thiện, cho thấy tiềm năng đáng kể để tích hợp vào các ứng dụng cảm biến NDIR tiên tiến.

c) Kết luận về một số cấu trúc MMs tích hợp lên nguồn vi nhiệt

Bằng cách sử dụng cấu hình đơn giản, cấu trúc của lớp MMs nghiên cứu trong luận án thu được phổ hấp thụ đặc trưng bởi hai đỉnh, với độ hấp thụ 96,3% và 94,1% tại bước sóng tương ứng là 3960 nm và 4197 nm. Với phổ phát xạ hẹp, cấu trúc đề xuất hứa hẹn tiêu thụ ít công suất hơn so với các bộ phát xạ hồng ngoại dải rộng thương mại hiện nay. Hơn nữa, thiết kế bộ phận phát xạ hồng trong luận cũng hứa hẹn về khả năng chế tạo thực tế. Ngoài ra, nó cũng phù hợp cho nhiều ứng dụng khác nhau nhờ tính độc lập với phân cực của sóng điện từ.

Hơn nữa, mô hình lý thuyết của trong luận án đã chứng minh rằng bộ phát xạ tích hợp MMs giảm 35% năng lượng tiêu thụ so với bộ phát xạ kiểu vật đen tuyệt đối. Hiệu quả năng lượng này phát sinh từ phạm vi phổ phát xạ hạn chế hơn của MMs. Cường độ phát xạ được quan sát trong cấu trúc vi nhiệt tích hợp MMs đạt $1,75 \times 10^9$ và $1,8 \times 10^9 \text{ W} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$ tại bước sóng 3960 nm và 4197 nm, tương ứng. Những kết quả này cho thấy tiềm năng để triển khai chế tạo bộ phát xạ này trong thực tế cho các ứng dụng cảm biến NDIR.

3.3. Tối ưu nguồn phát IR với vật liệu biến hóa MMs

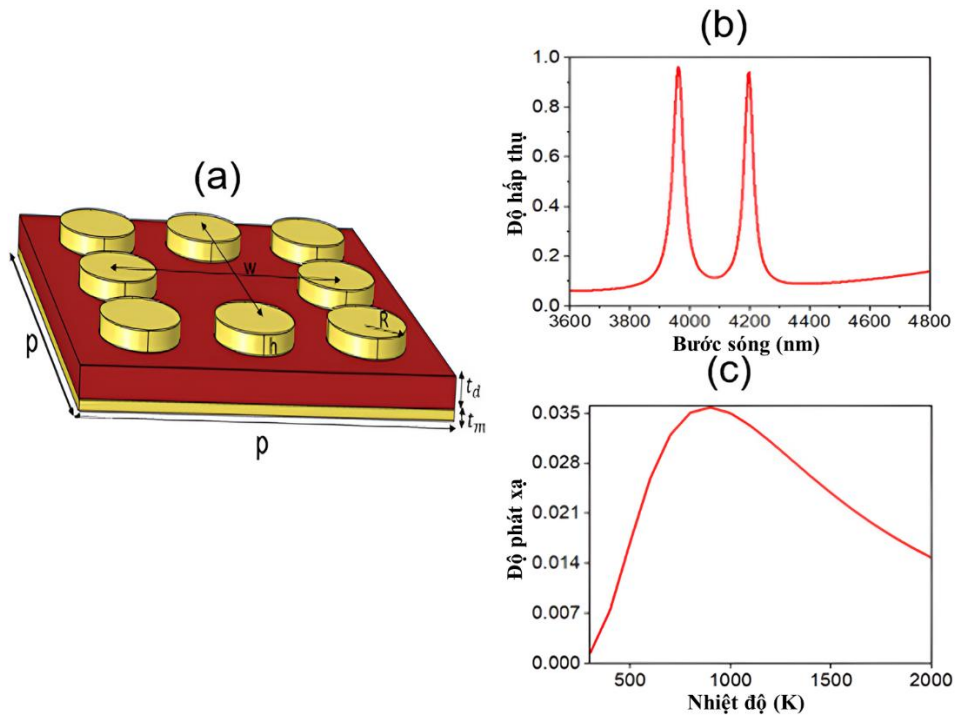
Nghiên cứu này giải quyết vấn đề tiêu thụ điện năng cao và độ phức tạp của các cảm biến khí hồng ngoại (IR) truyền thống bằng cách tích hợp MMs vào các nguồn bức xạ IR. Chúng tôi trình bày một phương pháp mới sử dụng MMs 2 chiều kết hợp với nguồn phát vi nhiệt để cải thiện hiệu suất năng lượng. Áp dụng mô hình Maxwell, cấu trúc này thay thế các cấu trúc MMs phức tạp, vốn được cấu tạo bởi vô số ô cơ sở, bằng các lớp đồng nhất tương đương trong các mô phỏng, giúp giảm tải tính toán trong khi vẫn duy trì các đặc tính nhiệt. Bằng cách tối ưu hóa hình dạng nguồn phát và chọn lựa vật liệu, chúng tôi đã giảm thiểu tổn thất do dẫn nhiệt và giảm thiểu bức xạ nền nhờ lớp phủ. Ở nhiệt độ 300°C, thiết bị của chúng tôi chỉ tiêu thụ 6,8 mW và đạt được sự đồng đều về nhiệt độ. Ngoài ra, lớp MMs hai chiều của chúng tôi cho thấy hiệu suất vượt trội với độ rộng tối đa tại nửa cực đại (FWHM) hẹp hơn ở các bước sóng 4200 nm và 3950 nm so với các thiết kế khác. Nghiên cứu này nhấn mạnh tiềm năng của các bộ phát hồng ngoại tích hợp với MMs cho các ứng dụng tiên tiến và tiết kiệm năng lượng.

3.3.1. Thiết kế và mô phỏng

Trong phần trên, chúng tôi đã đề xuất một cấu trúc MMs được tối ưu hóa cho các ứng dụng cảm biến NDIR như được trình bày trong Hình 3.20a. Cấu trúc lớp MMs được đề xuất bao gồm ba lớp: hai lớp vàng được ngăn cách bởi một lớp vật liệu điện môi polyimide. Độ dày của lớp điện môi (t_d) là 0,29 μm được xác định là tối ưu để đạt được các vị trí và hấp thụ của hai đỉnh cộng hưởng mong muốn. Khoảng cách trung tâm (w) là 3,68 μm và bán kính đĩa (R) là 0,63 μm cũng được tối ưu hóa để cải thiện hiệu suất. Các mô phỏng của chúng tôi sử dụng hằng số điện môi của polyimide là 3,5 và hệ số tổn hao là

0,0027, với lớp vàng dưới có độ dày 0,1 μm và lớp trên có độ dày 0,19 μm với mẫu gồm tám đĩa. Chu kỳ ô cơ sở được đặt là 5,96 μm .

Phân tích so sánh cho thấy cấu trúc MMs của chúng tôi có độ rộng tối đa tại nửa cực đại (FWHM) hẹp hơn ở cả 4200 nm và 3950 nm (lần lượt là 38 nm và 45 nm) so với các nghiên cứu khác [99,100]. Dải phát xạ hẹp hơn này nâng cao tính chọn lọc phổ và độ chính xác, điều này rất quan trọng cho độ nhạy cao và độ chính xác trong các hệ thống cảm biến và hình ảnh IR. Việc kiểm soát phổ do FWHM hẹp hơn mang lại tỷ lệ tín hiệu trên nhiễu (SNR) cao hơn và cải thiện khả năng phát hiện. Sự cải tiến này có nghĩa là tín hiệu quan tâm được khuếch đại trong khi nhiễu nền được giảm thiểu, dẫn đến tăng cường độ nhạy và độ tin cậy trong các ứng dụng thực tế.



Hình 3.20. (a) Sơ đồ cấu trúc MMs đề xuất; (b) Phổ hấp thụ; (c) Sự phụ thuộc của độ phát xạ chuẩn hóa vào nhiệt độ.

Hơn nữa, việc thu hẹp FWHM của cấu trúc MM của chúng tôi cải thiện hiệu quả năng lượng bằng cách thu hẹp dải bức xạ phát ra để phù hợp chính xác hơn với các bước sóng mong muốn. Để làm rõ, chúng tôi so sánh các tính chất bức xạ của MMs với các đặc tính của vật đen tuyệt đối. Theo định luật Kirchhoff, khả năng hấp thụ $\alpha(\lambda)$ của một vật liệu bằng với khả năng phát xạ $\epsilon(\lambda)$ của nó trong điều kiện cân bằng nhiệt. Tổng khả năng phát xạ của siêu bề

mặt có thể được đánh giá từ phương trình dưới đây bằng cách chuẩn hóa bức xạ của MMs so với vật đen lý tưởng [101]:

$$\varepsilon = \varepsilon(T) = \frac{E}{E_b} = \frac{\int_0^\infty \alpha(\lambda) E_{b\lambda}(\lambda, T) d\lambda}{\sigma T^4} \quad (3.13)$$

Hình 3.20c minh họa sự phụ thuộc của độ phát xạ chuẩn hóa theo nhiệt độ. Các MMs thể hiện các đặc tính triển vọng cho các ứng dụng đòi hỏi khả năng phát xạ chọn lọc các bước sóng hồng ngoại (IR) trong khi giảm thiểu tiêu thụ năng lượng. Với các giá trị độ phát xạ chuẩn hóa ε dao động từ 0,14% đến 0,35% ở các nhiệt độ khác nhau, các vật liệu này được thiết kế để phát xạ bức xạ cụ thể trong vùng IR mong muốn, điều này rất quan trọng cho các ứng dụng phát hiện IR chính xác. Việc phát xạ tập trung này làm giảm lãng phí năng lượng liên quan đến việc phát ra các bước sóng không cần thiết, dẫn đến hiệu quả năng lượng cao hơn so với các bộ phát nhiệt truyền thống dựa trên vật đen tuyệt đối. Ngoài ra, việc phát xạ tập trung còn góp phần kéo dài tuổi thọ hoạt động của các hệ thống phát hiện IR tích hợp công nghệ MM của chúng tôi.

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đối mặt với thách thức lớn trong việc mô phỏng cho các nguồn phát vi nhiệt tích hợp MMs, một nhiệm vụ phức tạp do yêu cầu tính toán cao từ các cấu trúc phức tạp của MMs bao gồm nhiều ô cơ sở. Để giảm bớt gánh nặng tính toán này, chúng tôi đề xuất một phương pháp mới trong đó lớp kim loại trên cùng, bao gồm các đĩa vàng, và lớp điện môi trung gian (polyimide) của MMs được thay thế bằng một lớp tương đương có các thông số đồng nhất.

Độ dày tương đương, mật độ và nhiệt dung riêng được tính toán bằng các công thức sau:

$$\begin{aligned} t_e &= \sum \alpha_i t_i \\ \rho_e &= \frac{\sum \alpha_i t_i \rho_i}{t_e} \\ c_e &= \frac{\sum \alpha_i \rho_i t_i c_i}{\rho_e t_e} \end{aligned} \quad (3.14)$$

trong đó, α_i là hệ số bằng tỷ lệ diện tích tổng của lớp thứ i so với diện tích toàn bộ của siêu bề mặt, ρ_i , t_i and c_i lần lượt là mật độ, độ dày và nhiệt dung riêng ở áp suất không đổi của lớp thứ i .

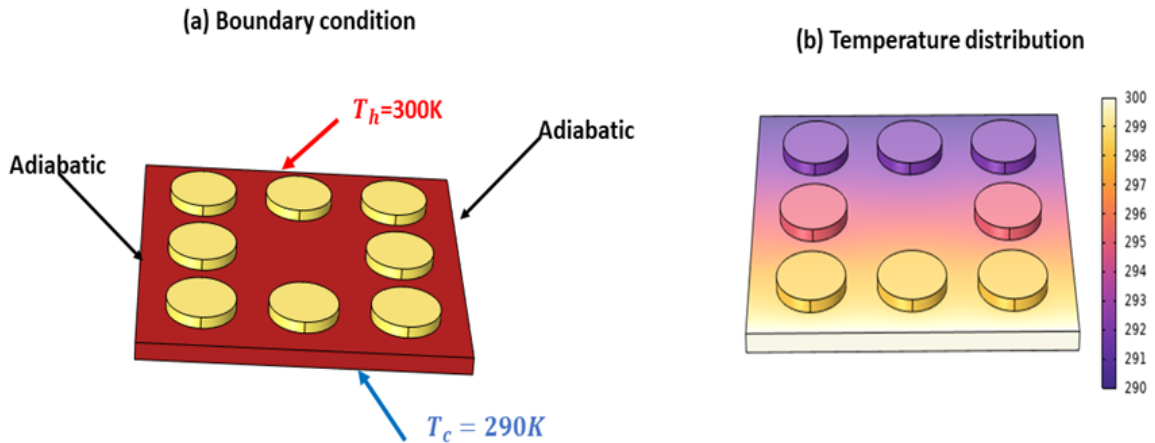
Để xác định hệ số dẫn nhiệt hiệu dụng k_e của toàn bộ tấm, chúng tôi xác định độ dẫn nhiệt của vùng vật liệu xếp chồng k_s bằng cách sử dụng công thức dẫn nhiệt song hệ số dẫn nhiệt song song [101]:

$$k_s = \frac{\sum k_i t_i}{\sum t_i} \quad (3.15)$$

trong đó, k_i là độ dẫn nhiệt của lớp thứ i . Sau đó, chúng tôi sử dụng công thức Maxwell-Eucken [102,103] để đánh giá độ dẫn nhiệt hiệu dụng của toàn bộ tấm, được biểu diễn như sau:

$$k_e = k_s \frac{2k_s + k_d - 2(k_s - k_d)\alpha}{2k_s + k_d + (k_s - k_d)\alpha} \quad (3.16)$$

trong đó k_d là hệ số dẫn nhiệt của lớp điện môi và α là tỉ lệ thể tích của lớp xếp chồng. Hệ số dẫn nhiệt hiệu dụng thu được từ phương pháp này được xác định là 0.23 W/mK.



Hình 3.21. Điều kiện biên và phân bố nhiệt độ của ô cơ sở.

Đồng thời, các mô phỏng phần tử hữu hạn sử dụng phần mềm COMSOL Multiphysics được áp dụng để mô hình hóa một ô cơ sở đại diện. Hình 3.21a minh họa các điều kiện biên, trong khi Hình 3.21b trình bày sự phân bố nhiệt độ của tấm. Độ dẫn nhiệt hiệu dụng được tính toán bằng công thức sau:

$$k_{sim} = \frac{qL}{T_h - T_c} \quad (3.17)$$

trong đó q là dòng nhiệt trong ô cơ sở, được tính bằng cách tích hợp các dòng nhiệt qua bề mặt nóng hoặc lạnh:

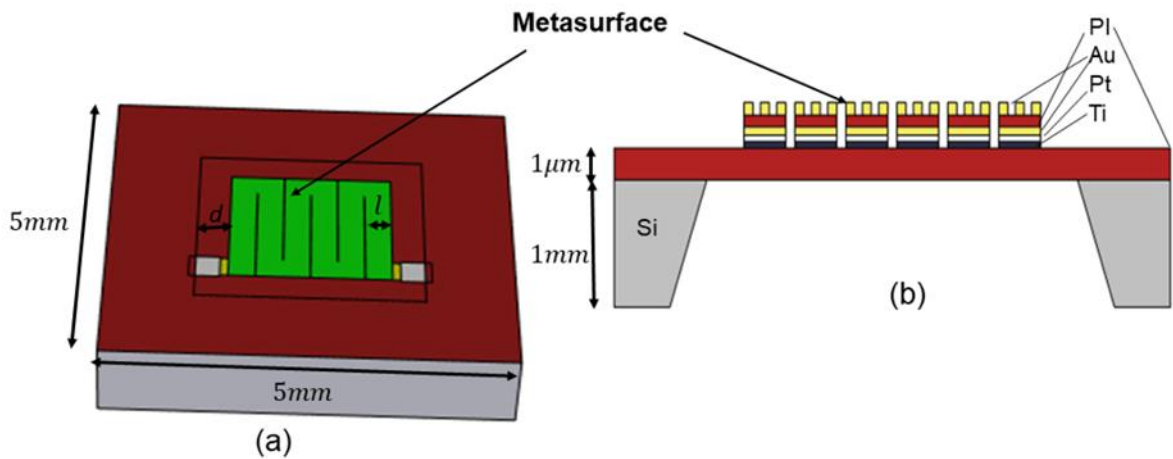
$$q = \frac{1}{A} \int k \nabla T dS \quad (3.18)$$

trong đó A là diện tích của bề mặt nóng hoặc lạnh. Độ dẫn nhiệt hiệu dụng từ mô phỏng được xác định là 0.22 W/mK, cho thấy sự tương đồng chính xác với các dự đoán lý thuyết.

3.3.2. Thiết kế nguồn vi nhiệt tích hợp vật liệu biến hóa

Cấu trúc của một cảm biến NDIR điển hình bao gồm bốn thành phần chính: nguồn phát IR dải rộng (1–15 μm), một bộ đầu đo IR, các bộ lọc quang học chỉ cho phép các bước sóng hấp thụ đặc trưng của CO_2 và các bước sóng tham chiếu đi qua, và một buồng mẫu [104]. Trong thiết kế của chúng tôi, nguồn vi nhiệt, hoạt động như nguồn phát IR, được tích hợp với MMs. Sơ đồ nguyên lý của cấu hình đề xuất này được trình bày trong Hình 3.22.

Đế của nguồn phát vi nhiệt được làm từ silicon (Si) dày 1 mm, đỡ một màng polyimide dày 1 μm với kích thước 5 mm $\times$ 5 mm. Polyimide được chọn vì độ bền cao, độ dẫn nhiệt thấp và dễ chế tạo. Hệ số giãn nở nhiệt của polyimide tương thích với silicon, làm cho nó phù hợp với các quy trình chế tạo vi mạch (IC) [105].



Hình 3.22. Cấu trúc của nguồn vi nhiệt tích hợp MMs: (a) nhìn từ trên xuống; (b) mặt cắt ngang.

Phần tử đốt nóng bao gồm một bộ đốt có hình dạng uốn lượn được làm từ titanium (Ti) và platinum (Pt). Titanium đóng vai trò là lớp kết dính, trong khi platinum được chọn vì tính trơ hóa học và khả năng đáp ứng nhiệt tốt ở điện áp thấp, có mối quan hệ tuyến tính giữa điện trở và nhiệt độ và ổn định lâu dài tuyệt vời. Ngoài ra, lớp vàng (Au) dưới cùng vừa đóng vai trò là bộ đốt vừa là

lớp phản xạ phía sau, tăng cường hiệu suất phát xạ IR bằng cách giảm khoảng cách giữa các đường uốn lượn xuống còn 4 μm . Độ rộng đường kim loại của bộ đốt là $l = 0.33 \text{ mm}$. Cấu hình các lớp của cấu trúc được minh họa theo mặt cắt ngang như thể hiện trên Hình 3.22b.

Thiết bị được mô phỏng trong điều kiện chân không để loại bỏ tổn thất đối lưu. Khi áp dụng điện năng vào bộ đốt, trạng thái cân bằng nhiệt nhanh chóng đạt được trong màng polyimide. Quá trình truyền nhiệt chủ yếu diễn ra thông qua các cơ chế dẫn nhiệt và bức xạ.

Trong nghiên cứu này, phần mềm COMSOL đã được sử dụng để mô hình hóa phần tử hữu hạn và mô phỏng phân bố nhiệt. Để giảm bớt độ phức tạp tính toán, lớp kim loại trên cùng bao gồm các đĩa vàng và lớp điện môi polyimide trung gian trong MMs đã được thay thế bằng một lớp đồng nhất có các thông số tương đương được xác định trong phần 2.1. Các tính chất vật liệu thu được từ mô phỏng và tính toán bằng COMSOL được tóm tắt trong Bảng 3.4.

Bảng 3.4: Đặc tính của vật liệu sử dụng.

Vật liệu	Độ dẫn nhiệt (W/mK)	Độ dẫn điện (S/m)	Mật độ (Kg/m ³)	Nhiệt dung (J/kg/K)	Độ phát xạ	Hệ số giãn nở nhiệt ~650 K ($\times 10^{-6} / \text{K}$)	Tài liệu
SiO ₂	1.38	10^{-14}	2200	730	0.7	~ 0.55	[106]
Si ₃ N ₄	20	0	3100	700	0.7	~3.4	[107]
Polyimide	0.15	0	1300	1100	0.7	-	[108]
Paint	1.45	0	1331	5184	0.94	~30 – 80	[108]
Au	317	45.6×10^6	19300	129	0.05	~18.5	[109]
Ag	429	61.6×10^6	10500	235		~20.0	[109]

Trong các bộ phát hồng ngoại (IR), tổn thất năng lượng chủ yếu có thể được quy cho hai cơ chế: tổn thất do bức xạ và tổn thất do dẫn nhiệt dọc theo màng. Hiểu rõ các cơ chế này và triển khai các chiến lược giảm thiểu chúng là điều cần thiết để cải thiện hiệu quả năng lượng của các thiết bị IR.

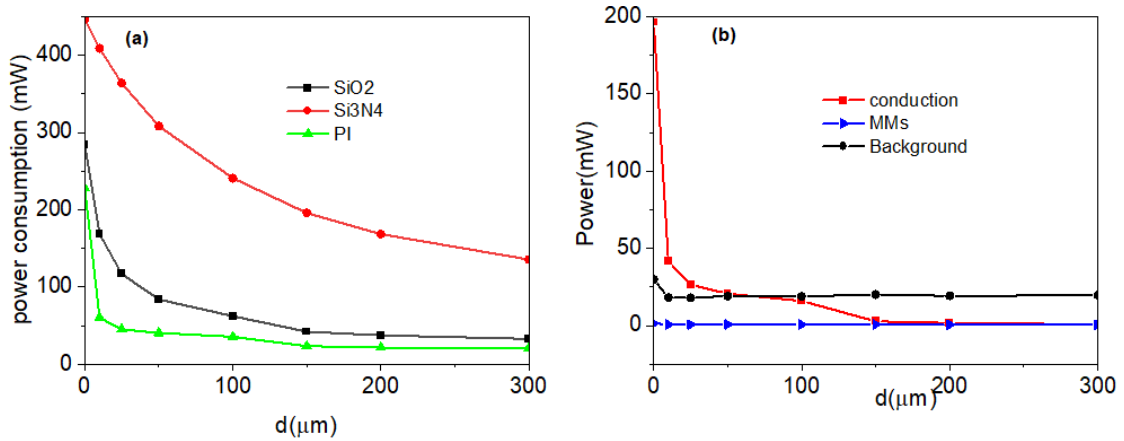
Tổn thất dẫn nhiệt trong màng có thể được tính toán gần đúng bằng cách sử dụng công thức đơn giản hóa được suy ra cho một màng có dạng hình tròn [110,111].

$$P_c = \frac{2\pi kt\Delta T}{\ln \ln \left(\frac{r_a}{r_i} \right)} \quad (3.19)$$

Ở đây, t đại diện cho độ dày của màng, k là độ dẫn nhiệt của màng, r_i và r_a lần lượt tương ứng với bán kính của vùng được đốt nóng và bán kính của khu vực màng, và ΔT biểu thị sự chênh lệch nhiệt độ giữa vùng được đốt nóng và môi trường xung quanh. Phương trình (9) nhấn mạnh rằng để giảm thiểu tổn thất do dẫn nhiệt, cần chọn vật liệu màng có độ dẫn nhiệt thấp. Trong thiết kế đề xuất của chúng tôi, polyimide được chọn do sự kết hợp thuận lợi giữa độ dẫn nhiệt thấp và quy trình chế tạo đơn giản.

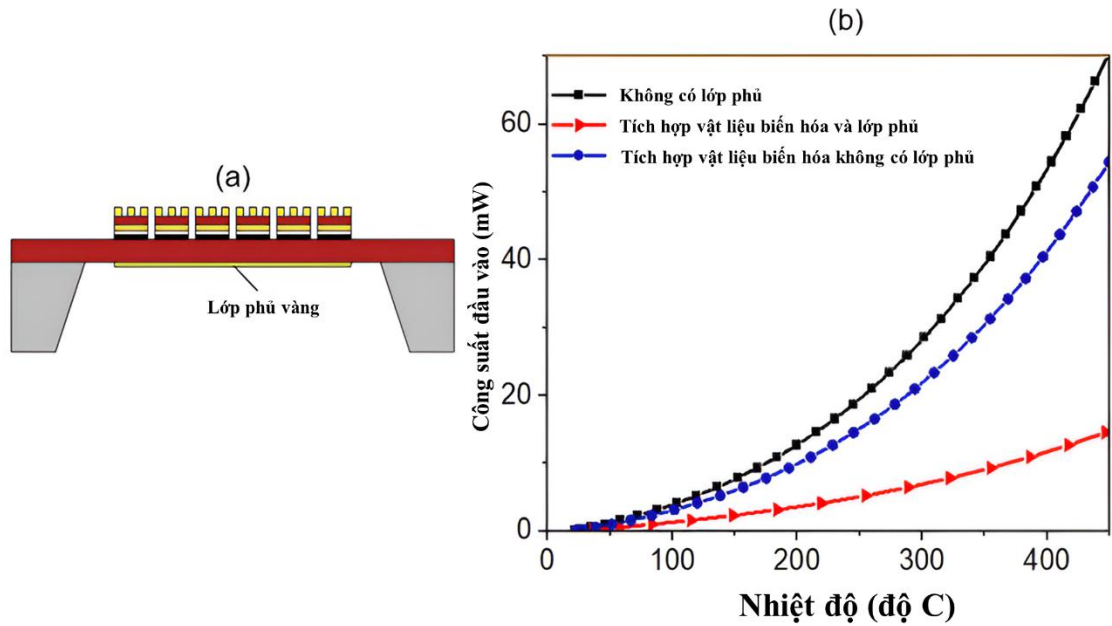
Hình 3.23a minh họa sự tiêu thụ điện năng mô phỏng theo khoảng cách d giữa vùng được đốt nóng và viền silicon cho các vật liệu khác nhau, với nhiệt độ trung bình trong khu vực hoạt động duy trì ở mức 300°C. Đáng chú ý, polyimide thể hiện mức tiêu thụ điện năng thấp nhất so với màng silicon dioxide (SiO₂) hoặc silicon nitride (SiN), nhờ vào độ dẫn nhiệt thấp vốn có. Cụ thể, ở khoảng cách 150 μm , mức tiêu thụ điện năng của polyimide là 18,7 mW. Ngược lại, SiO₂ tiêu thụ 42 mW, trong khi SiN ghi nhận mức tiêu thụ điện năng cao nhất là 196 mW, chủ yếu do độ dẫn nhiệt cao của nó, lớn hơn khoảng 20 lần so với polyimide.

Hình 3.23b cho thấy tổn thất do dẫn nhiệt ảnh hưởng đáng kể đến tổng tiêu thụ điện năng, đặc biệt là ở các khoảng cách ngắn hơn giữa khu vực được đốt nóng và viền Si. Tổn thất dẫn nhiệt giảm khi khoảng cách d tăng lên, nhấn mạnh tầm quan trọng của việc cách nhiệt để giảm thiểu tiêu thụ điện năng. Ở khoảng cách 150 μm , tổn thất dẫn nhiệt được ghi nhận là 2,6 mW, giảm đáng kể so với các tổn thất cao hơn quan sát được ở khoảng cách ngắn hơn. Tuy nhiên, việc tăng khoảng cách vượt quá 150 μm không cải thiện đáng kể thêm sự cách nhiệt, cho thấy một ngưỡng mà tại đó tổn thất dẫn nhiệt ổn định. Điều này cho thấy rằng việc tối ưu hóa khoảng cách khoảng 150 μm là rất quan trọng để đạt được quản lý nhiệt hiệu quả với tổn thất dẫn nhiệt tối thiểu.



Hình 3.23. (a) Sự phụ thuộc của tiêu thụ điện năng vào khoảng cách d với nhiệt độ trung bình trong khu vực hoạt động được duy trì ở 300°C ; (b) tổn thất do dẫn nhiệt, phát xạ của MMs và bức xạ nền theo khoảng cách d .

Ngoài việc kiểm soát tổn thất do dẫn nhiệt, việc giảm thiểu tổn thất do bức xạ cũng quan trọng không kém để tối ưu hóa tiêu thụ điện năng. Tổn thất do bức xạ, bao gồm tổn thất bức xạ nền và công suất phát xạ của MMs, vẫn tương đối ổn định bất kể khoảng cách d . Ở $d = 150\mu\text{m}$, tổn thất bức xạ nền là 18,7 mW, trong khi công suất phát xạ của phần MMs thấp hơn đáng kể, chỉ 0,5 mW. Thiết kế của MMs đảm bảo rằng nó phát xạ chọn lọc, tập trung năng lượng vào nơi cần thiết và giảm thiểu tổn thất không cần thiết, qua đó nâng cao hiệu quả năng lượng tổng thể của hệ thống. Tổn thất bức xạ nền, là thành phần chiếm ưu thế, vượt trội hơn cả tổn thất dẫn nhiệt và công suất phát xạ của phần MMs ở khoảng cách này. Để giảm thiểu tổn thất bức xạ, một lớp vàng dày 50 nm được áp dụng ở mặt sau của đế polyimide trong khu vực được đốt nóng (Hình 3.24a). Vàng, với khả năng phản xạ cao, hiệu quả trong việc giảm tổn thất bức xạ bằng cách phản xạ lại bức xạ nhiệt vào hệ thống, từ đó giảm tiêu thụ điện năng tổng thể. Ngoài ra, MMs được thiết kế để phát xạ hiệu quả, giảm tiêu thụ năng lượng so với nguồn phát nhiệt dựa trên vật đen tuyệt đối



Hình 3.24. (a) Mặt cắt ngang của nguồn phát với lớp phủ vàng (Au); (b) Công suất đầu vào so với nhiệt độ trung bình của các loại nguồn phát khác nhau.

Để minh chứng hiệu quả tích hợp MMs với các nguồn phát nhiệt và lớp phủ, chúng tôi sẽ phân tích và so sánh dữ liệu hiệu suất của các nguồn phát nhiệt khác nhau: nguồn phát tích hợp MMs không có lớp phủ, nguồn phát nhiệt vật đen có lớp phủ và nguồn phát tích hợp MMs có lớp phủ. Nguồn phát nhiệt vật đen được tạo ra bằng cách áp dụng sơn vật đen có độ phát xạ là 0.94 lên màng nguồn phát nhiệt thay vì sử dụng phần đĩa tròn bằng vàng trên cùng. Hình 3.24b minh họa sự phụ thuộc tiêu thụ điện năng của ba loại nguồn phát khác nhau theo nhiệt độ trung bình của bề mặt. Tiêu thụ điện năng của nguồn phát nhiệt vật đen là cao nhất trong số ba loại nguồn phát ở mọi nhiệt độ. Điều này là do nguồn phát nhiệt vật đen phát xạ bức xạ trên một phổ rộng, dẫn đến tổn thất năng lượng đáng kể mặc dù có lớp phủ phản xạ. Nguồn phát tích hợp MMs có lớp phủ kết hợp các đặc tính phát xạ chọn lọc của MMs với đế polyimide được phủ vàng. Nguồn phát này cho thấy mức tiêu thụ điện năng thấp nhất. MMs hiệu quả trong việc điều hướng bức xạ phát ra, giảm thiểu đáng kể tổn thất điện năng. Lớp phủ vàng còn tăng cường hiệu quả bằng cách phản xạ lại bức xạ nhiệt vào hệ thống. Hiệu ứng hiệp đồng này dẫn đến việc bảo tồn năng lượng vượt trội, khiến nó trở thành nguồn phát nhiệt hiệu quả nhất về tiêu thụ điện năng. Nguồn phát tích hợp MMs không có lớp phủ sử dụng MMs để phát xạ chọn lọc nhưng thiếu lớp phủ vàng. Mặc dù hiệu quả hơn nguồn phát nhiệt vật đen, loại nguồn phát này tiêu thụ nhiều điện năng hơn so với nguồn phát

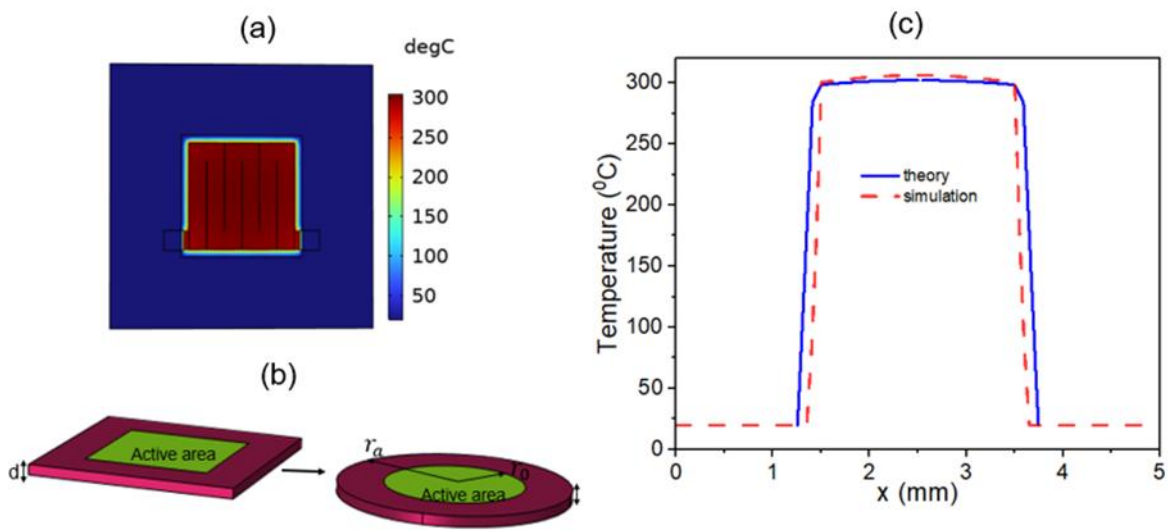
MMs có lớp phủ. Sự thiếu vắng lớp vàng phản xạ có nghĩa là một số bức xạ nhiệt không được phản xạ lại vào hệ thống, dẫn đến tiêu thụ điện năng cao hơn so với phiên bản có lớp phủ.

Bảng 3.5: So sánh giữa các thiết bị.

Cấu trúc	Công suất đầu vào (mW)	Công suất phát xạ (mW)	Bức xạ nền (mW)	Tổn thất dẫn nhiệt (mW)
Nguồn phát tích hợp MMs có lớp phủ	6.8	0.5	4.0	2.3
Nguồn phát tích hợp MMs không có lớp phủ	21.8	0.5	18.7	2.6
Nguồn phát nhiệt vật đen có lớp phủ	28.6	21.6	4.2	2.8
Cấu trúc trong [95]	58	3	-	-

Bảng 3.5 so sánh mức tiêu thụ điện năng của các thiết bị này và thiết bị trong tham chiếu [95] khi nhiệt độ trung bình của chúng là 300°C. Dữ liệu nhấn mạnh những lợi thế đáng kể của việc sử dụng MMs với lớp phủ vàng. Việc bổ sung lớp phủ này làm giảm bức xạ nền từ 18,7 mW xuống còn 4,0 mW, dẫn đến giảm đáng kể tổng tiêu thụ điện năng. Điều này chứng tỏ rằng lớp phủ rất có lợi cho việc cải thiện hiệu suất của nguồn phát. Nguồn phát nhiệt vật đen, dù có lớp phủ, tiêu thụ nhiều điện năng hơn và phát ra phổ bức xạ rộng, dẫn đến tổn thất năng lượng cao hơn. Bằng cách sử dụng nguồn phát MMs, năng lượng yêu cầu được giảm 76% ở nhiệt độ 300°C. Sự tiết kiệm năng lượng đáng kể này được gán cho các đặc tính phát xạ chọn lọc của MMs. Nguồn phát vi nhiệt do chúng tôi đề xuất (nguồn phát tích hợp MMs có lớp phủ) vượt trội đáng kể so với nguồn phát trong tham chiếu [95], khi công suất phát xạ của thiết bị được đề xuất ở nhiệt độ 300°C chỉ khoảng 0,5 mW, thấp hơn sáu lần so với 3 mW được báo cáo trong [95]. Tổng thể, ở nhiệt độ 300°C, nguồn phát của chúng tôi sử dụng 6,8 mW, thấp hơn tám lần so với giá trị báo cáo 58 mW trong [95]. Điều này chứng minh hiệu suất vượt trội của thiết kế của chúng tôi trong việc giảm cả tổn thất dẫn nhiệt và bức xạ, làm cho nó trở thành một giải pháp hiệu quả cao cho quản lý nhiệt.

Hình 3.25a minh họa phân bố nhiệt độ bề mặt của nguồn phát tích hợp MMs có lớp phủ khi nhiệt độ trung bình trong khu vực hoạt động là 300°C. Nhiệt độ được quan sát thấy phân bố đều trong khu vực hoạt động, giảm nhanh xuống nhiệt độ môi trường ở rìa của màng. Để hiểu rõ hơn về dòng nhiệt trong cấu trúc và từ cấu trúc ra ngoài, một mô hình đơn giản hóa đã được phát triển bằng cách xấp xỉ màng vuông bằng một màng tròn [111,112] (Hình 3.25b). Bán kính của hình tròn được chọn để giảm thiểu các khu vực không trùng lặp giữa hình vuông và hình tròn, như được mô tả trong [112]. Cụ thể, bán kính là $0.5412a$, trong đó a là chiều dài cạnh của hình vuông.



Hình 3.25. (a) Phân bố nhiệt độ bề mặt của các nguồn phát có lớp phủ; (b) Đơn giản hóa sang truyền nhiệt một chiều với cấu trúc vuông và tròn; (c) Phân bố nhiệt độ dọc theo trục x .

Xét rằng tổn thất bức xạ là đáng kể trong khu vực hoạt động và không đáng kể ở các vùng khác do nhiệt độ thấp hơn, chúng tôi chỉ tính đến tổn thất bức xạ trong khu vực hoạt động. Chúng tôi tuyến tính hóa dòng nhiệt tại $T = T_a$, trong đó T_a là nhiệt độ trung bình trong vùng hoạt động này [49]:

$$q_{rad} = \varepsilon\sigma(T^4 - T_0^4) = \gamma(T - T_*).$$

$$\gamma = 4\sigma_B\varepsilon T_0^3, T_* = \frac{3T_a}{4} + \frac{T_0^4}{4T_a^3}. \quad (3.20)$$

Các phương trình truyền nhiệt được đơn giản hóa thành một bài toán một chiều như trong công trình trước đây của chúng tôi [49]:

$$\frac{d^2T}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{dT}{dr} - \frac{\gamma}{kt} \left(T - T_* - \frac{\sigma}{\gamma} \right) = 0 \quad (3.21)$$

trong đó t là độ dày hiệu quả của vùng hoạt động và được tính bằng công thức (2). Tham số k biểu thị độ dẫn nhiệt hiệu quả của vùng hoạt động. Ban đầu, chúng tôi thay thế hai lớp trên cùng của cấu trúc MMs bằng một lớp tương đương sử dụng mô hình Maxwell-Eucken, như đã mô tả trong phần trên. Sau đó, độ dẫn nhiệt hiệu quả của toàn bộ vùng hoạt động được xác định bằng công thức sau [113]:

$$k = \frac{\sum \alpha_i k_i t_i}{t} \quad (3.22)$$

trong đó α_i là hệ số bằng tỷ lệ diện tích của lớp thứ i so với diện tích toàn bộ vùng hoạt động.

Nhiệt độ của mép đế được đặt bằng với nhiệt độ môi trường T_0 (điều kiện biên Dirichlet). Lời giải trong vùng bên trong là [95]:

$$T_1(r) = T_* + \frac{P}{\gamma_e \pi r_0 t} + A I_0(n_0 r) + B K_0(n_0 r), \quad (3.23)$$

$$n_0 = \sqrt{\frac{\gamma_e}{kt}}.$$

Phương trình nhiệt trong vùng bên ngoài được cho bởi: $\frac{d}{dr}(rdT) = 0$. Lời giải cho phương trình này là:

$$T_2(r) = C \ln(r) + D \quad (3.24)$$

Các điều kiện biên là:

$$\begin{aligned} T_1'(0) &= 0, \\ T_2(r_a) &= T_0, \\ T_1(r_0) &= T_2(r_0), \\ k_1 T_1'(r_0) &= k_2 T_2'(r_0). \end{aligned} \quad (3.25)$$

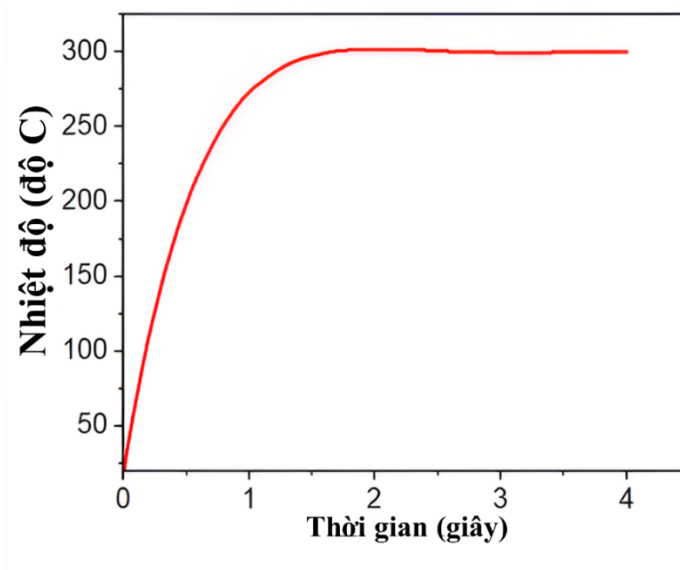
Bốn hằng số chưa biết A , B , C và D có thể được xác định bằng cách giải các phương trình này. Các nghiệm của chúng tôi bao gồm nhiệt độ trung bình của vùng nóng T_a như là dữ liệu đầu vào. Từ biểu thức (11), chúng tôi tính toán nhiệt độ trung bình trong vùng đốt nóng và đặt nó bằng với giá trị đầu vào T_a

Từ đó, chúng tôi thu được mối quan hệ giữa nhiệt độ trung bình T_a và công suất đầu vào.

$$\frac{T_1(0) + T_1(r_0)}{2} = T_a \quad (3.26)$$

Phương trình này là một phương trình tuyến tính bậc nhất với ẩn số là công suất đầu vào P . Bằng cách giải phương trình này, chúng ta thu được công suất đầu vào P .

Theo mô hình lý thuyết, công suất đầu vào cần thiết để vùng hoạt động của nguồn phát đạt được nhiệt độ trung bình 300°C là $4,5 \text{ mW}$, tương đương về bậc độ lớn với kết quả mô phỏng là $6,8 \text{ mW}$. Sự khác biệt này xuất hiện do mô hình lý thuyết đơn giản hóa quá trình tính toán bằng cách bỏ qua các phát xạ ở vùng bên ngoài. Hình 3.25c hiển thị phân bố nhiệt độ dọc theo trục x như được tính toán bởi mô hình lý thuyết (đường liền nét), bên cạnh phân bố nhiệt độ thu được từ mô phỏng (đường đứt nét). Kết quả cho thấy sự phù hợp tốt, chứng minh tính hợp lý của cách tiếp cận lý thuyết mặc dù có các đơn giản hóa.



Hình 3.26. Sự thay đổi nhiệt độ theo thời gian.

Hơn nữa, chúng tôi thực hiện phân tích nhiệt độ thay đổi theo thời gian để hiểu thời gian đáp ứng của các nguồn phát hồng ngoại (IR). Phân tích này cung cấp cái nhìn sâu sắc về tốc độ mà nguồn phát đạt được nhiệt độ trạng thái ổn định sau khi thay đổi công suất đầu vào. Như được minh họa trong Hình 3.26, một nguồn phát có lớp phủ chịu công suất đầu vào 6.8 mW mất 1.65 giây để đạt được nhiệt độ trạng thái ổn định là 300°C .

3.4. Kết luận Chương 3

Trong chương này, nghiên cứu đã thực hiện về một thiết kế tối ưu hóa nguồn vi nhiệt tích hợp MMs để tạo các nguồn phát hồng ngoại có tính chuyển đổi phổ phát xạ. Bằng cách thay thế các cấu trúc MMs phức tạp bằng các lớp đồng nhất tương đương trong các mô phỏng, chúng tôi giảm hiệu quả các yêu cầu tính toán. Kết quả của chúng tôi cho thấy polyimide, nhờ độ dẫn nhiệt thấp, làm giảm đáng kể tiêu thụ điện năng so với các vật liệu khác như SiO_2 và SiN .

Việc áp dụng lớp phủ Au lên MMs còn nâng cao hiệu quả năng lượng bằng cách giảm thiểu tổn thất do bức xạ. Phân tích so sánh cho thấy nguồn phát tích hợp MMs với lớp phủ Au vượt trội hơn các thiết kế nguồn phát khác, đạt được mức tiết kiệm điện năng đáng kể và độ đồng đều nhiệt độ cải thiện. Điều này nhấn mạnh hiệu quả của việc kết hợp MMs với các kỹ thuật kiểm soát nhiệt để tạo ra các nguồn phát nhiệt hiệu quả cao.

Thiết kế nguồn phát được đề xuất của chúng tôi cho thấy sự giảm đáng kể trong tiêu thụ điện năng, chỉ cần 6,8 mW để đạt nhiệt độ 300°C , đồng thời duy trì độ đồng đều nhiệt độ và thời gian đáp ứng tương đối nhanh. Sự cải thiện đáng kể này được gán cho các đặc tính phát xạ chọn lọc của MMs và việc tối ưu hóa các tổn thất dẫn nhiệt và bức xạ. Kết quả này nhấn mạnh tiềm năng của các nguồn phát dựa trên MMs cho các ứng dụng tiết kiệm năng lượng tiên tiến, cung cấp một giải pháp đầy hứa hẹn cho việc kiểm soát nhiệt trong các công nghệ khác nhau.

CHƯƠNG 4: THIẾT KẾ VẬT LIỆU BIẾN HÓA CHO ĐIỀU KHIỂN PHÁT XẠ HỒNG NGOẠI TRONG CẢM BIẾN NDIR

Như đã phân tích trong chương 1, trong số các cảm biến quang học, cảm biến NDIR nổi bật với độ chọn lọc, độ nhạy cao và hoạt động tin cậy, đặc biệt là trong việc phát hiện khí ở nồng độ rất thấp (ppm) [114-127]. Tuy nhiên, bên cạnh những ưu điểm nêu trên, vẫn còn tồn tại một số thách thức. Một trong những thách thức quan trọng nhất là làm sao thu nhỏ kích thước, giảm công suất hoạt động, nâng cao tuổi thọ và hạ giá thành thiết bị mà vẫn đảm bảo duy trì được độ nhạy và độ chọn lọc cao.

Một trong những cách thức hiệu quả nhất để cải thiện hiệu suất quang học và cho phép thu nhỏ cảm biến là tích hợp các gương phản xạ trong buồng khí. Gương phản xạ giúp tận dụng ánh sáng tốt hơn bằng cách phản xạ lại các tia IR bị tán xạ, qua đó kéo dài đường truyền quang học hiệu dụng (tăng quang trình) mà không cần tăng kích thước vật lý của cảm biến [128–130]. Cách tiếp cận này nâng cao độ nhạy phát hiện, đặc biệt phù hợp với thể hệ cảm biến NDIR nhỏ gọn. Tuy nhiên, các gương phản xạ kim loại truyền thống tồn tại nhiều hạn chế, bao gồm phản xạ trên dải tần rộng, tích tụ nhiệt quá mức và độ dẫn nhiệt cao, điều này có thể ảnh hưởng tiêu cực đến hiệu suất cảm biến. Hơn nữa, việc chế tạo buồng đo theo kiểu này có thể gặp khó khăn.

Để giải quyết những thách thức này, luận án đề xuất sử dụng các gương phản xạ dựa trên vật liệu biến hoá (Metamaterial Perfect Reflectors – MPRs). Các gương phản xạ biến hoá là các bề mặt siêu mỏng được thiết kế từ các cộng hưởng điện môi có kích thước dưới bước sóng, có khả năng điều khiển biên độ và pha của ánh sáng phản xạ [131–134]. Khác với gương kim loại (gặp tổn hao điện trở) hoặc gương Bragg (cần cấu trúc nhiều lớp phức tạp), MPRs có thể đạt được độ phản xạ gần như hoàn toàn chỉ với một lớp điện môi duy nhất. Ngoài ra, MPRs có khả năng phản xạ chọn lọc theo bước sóng, cho phép chỉ phản xạ tại bước sóng hấp thụ của khí mục tiêu (ví dụ: 4,26 μm cho phát hiện CO_2), đồng thời truyền qua các thành phần quang phổ không cần thiết. Sự lọc chọn lọc này giúp giảm nhiễu quang học không mong muốn, từ đó cải thiện tỷ số tín hiệu trên nhiễu (SNR) và độ chính xác của việc phát hiện. Hơn nữa, do được cấu tạo chủ yếu từ các vật liệu điện môi có độ dẫn nhiệt thấp hơn nhiều so với kim loại, MPRs giúp giảm tích tụ nhiệt và hạn chế nhiễu do nhiệt độ. Kết quả

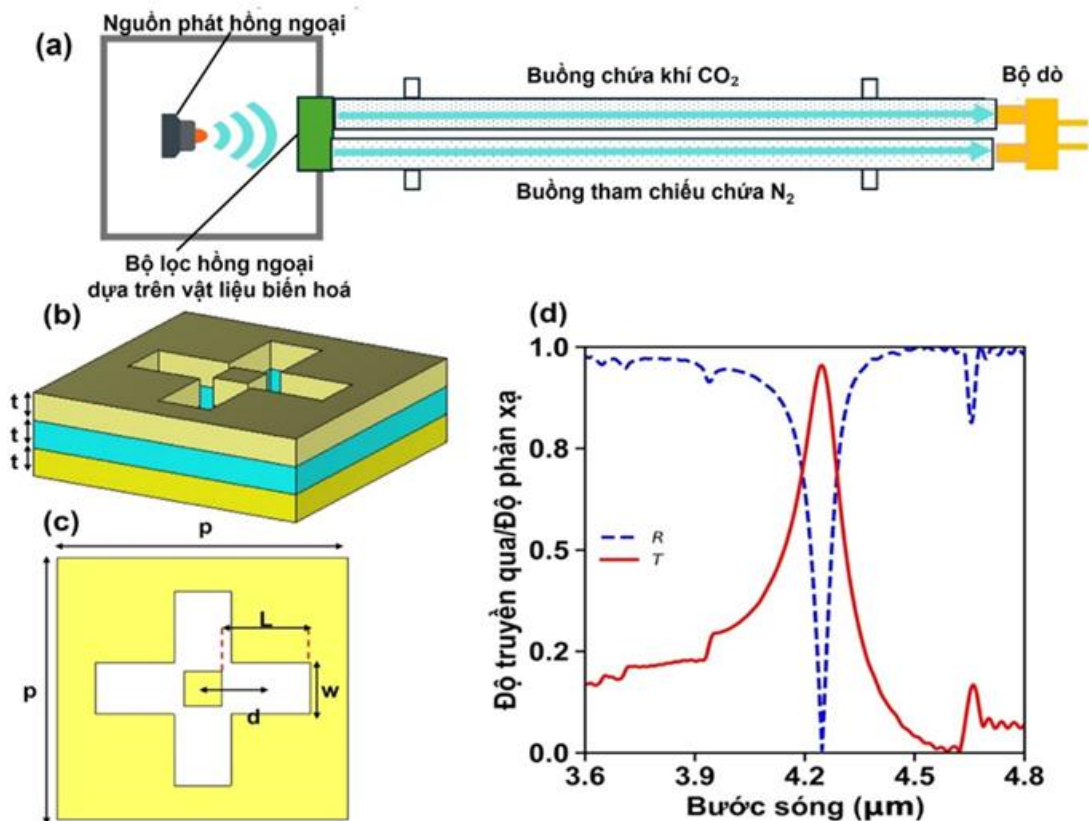
là, MPRs góp phần cải thiện độ ổn định lâu dài và nâng cao hiệu suất trong các ứng dụng cảm biến khí hồng ngoại.

Bên cạnh đó, cảm biến NDIR tích hợp MMs theo cấu hình truyền qua cũng là cách tiếp cận hiệu quả. Ở đó, lớp MMs có thể tích hợp trực tiếp trên bề mặt nguồn phát IR (nguồn vi nhiệt), hoặc đặt cách nguồn phát IR một khoảng cách để hấp thụ và chuyển đổi bức xạ hồng ngoại với các đỉnh đặc trưng. Từ đó, bức xạ hồng ngoại dải rộng từ nguồn phát IR để tạo ra bức xạ IR mong muốn cho áp dụng vào trong cảm biến NDIR.

4.1. Thiết kế cảm biến NDIR tích hợp MMs theo kiểu truyền qua

4.1.1. Thiết kế cấu trúc cảm biến

Trong cấu hình truyền qua, cảm biến NDIR tích hợp MMs đề xuất như được minh họa trong Hình 4.1a bao gồm các thành phần chính: nguồn bức xạ hồng ngoại (IR), bộ lọc quang học chọn lọc bước sóng dựa trên vật liệu biến hoá, hai buồng khí (một buồng mẫu chứa CO_2 và một buồng tham chiếu chứa khí N_2), cùng với đầu thu hồng ngoại hai kênh.



Hình 4.1. (a) Cấu hình cảm biến NDIR-MMs; (b), (c) Cấu trúc bộ lọc dựa trên vật liệu biến hoá (góc nhìn ba chiều và nhìn từ trên xuống); (d) Phổ truyền qua và phản xạ.

Bức xạ hồng ngoại phát ra từ nguồn IR trước tiên đi qua bộ lọc tích hợp MMs, được thiết kế để truyền chọn lọc bức xạ tại bước sóng $4,26\ \mu\text{m}$ – là bước sóng hấp thụ đặc trưng của khí CO_2 . Bức xạ sau đó đi qua cả hai buồng khí. Buồng tham chiếu chứa khí nitơ – vốn không hấp thụ trong vùng bước sóng quan tâm – cho phép gần như toàn bộ bức xạ đi tới kênh tham chiếu của bộ dò. Trong khi đó, nếu trong buồng mẫu có chứa CO_2 , phần bức xạ tại $4,26\ \mu\text{m}$ sẽ bị hấp thụ, dẫn đến tín hiệu suy giảm tại kênh tương ứng của bộ dò. Bộ dò hai kênh đo đồng thời cường độ bức xạ truyền qua từ cả hai buồng khí. Sự chênh lệch tín hiệu giữa hai kênh tỷ lệ thuận với nồng độ CO_2 trong buồng mẫu, tuân theo định luật Beer–Lambert.

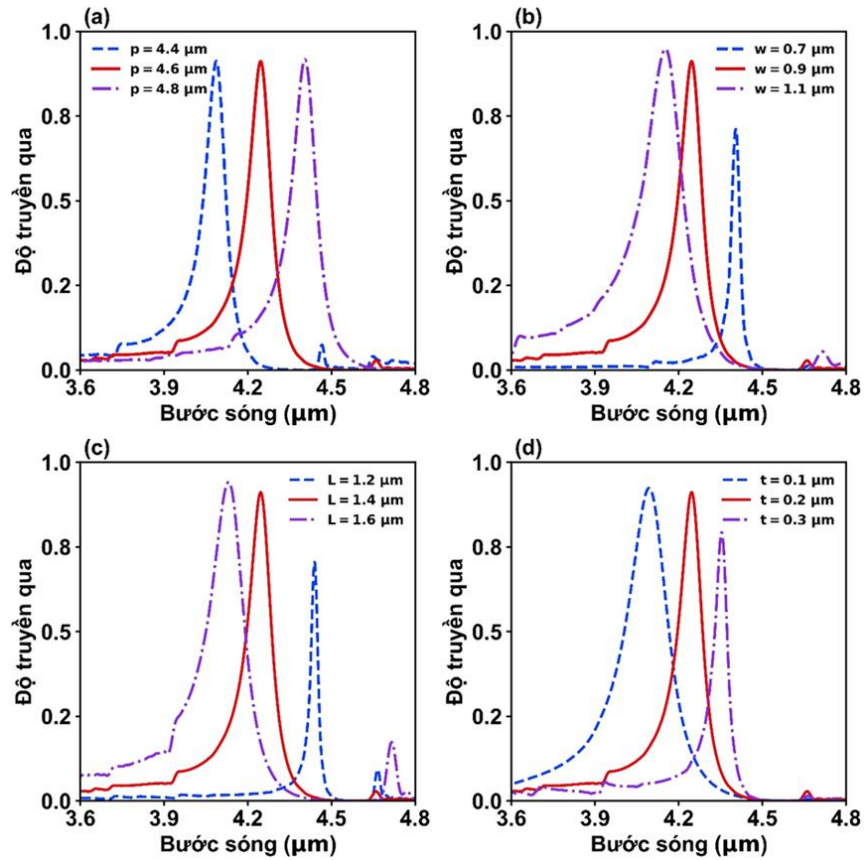
Cấu trúc bộ lọc quang học dựa trên vật liệu biến hoá được thiết kế dưới dạng mảng lỗ chữ nhật bố trí theo hình chữ thập trong mặt phẳng xy, tạo nên một cấu trúc không phân cực với khả năng truyền phổ hẹp. Trong Hình 4.1b–c, lớp kim loại trên cùng được chế tạo từ bạc (Ag), có vai trò định hình khe chữ thập (cross-shaped slot) và kích thích cộng hưởng plasmon bề mặt. Lớp điện môi ở giữa được làm bằng silicon (Si), giúp tăng cường cộng hưởng từ (magnetic polariton) và hỗ trợ truyền dẫn sóng dẫn điện từ. Lớp nền phía dưới cũng bằng bạc (Ag), đóng vai trò như một gương phản xạ toàn phần, giúp tăng mật độ điện từ nội tại và ngăn ánh sáng truyền qua. Cấu trúc ô đơn vị được xác định bởi các tham số hình học sau: chiều dài khe chữ thập $L = 1.4\ \mu\text{m}$, chiều rộng $w = 0.9\ \mu\text{m}$, khoảng cách từ tâm khe đến tâm ô $d = 1.0\ \mu\text{m}$, và chu kỳ mạng $p = 4.6\ \mu\text{m}$, đồng nhất theo cả hai phương x và y. Các lớp kim loại và điện môi được sắp xếp xen kẽ theo phương z, mỗi lớp có độ dày bằng nhau là $t = 0.2$.

4.1.2. Kết quả cho cảm biến NDIR-MMs theo kiểu truyền qua

Phổ truyền qua và phản xạ của cấu trúc vật liệu MMs đề xuất được minh họa trong Hình 4.2. Trong dải bước sóng từ $3,6\ \mu\text{m}$ đến $4,8\ \mu\text{m}$, cấu trúc cho thấy một đỉnh truyền chọn lọc rõ rệt tại khoảng $4,26\ \mu\text{m}$, với giá trị truyền qua đạt khoảng 90%, trong khi phản xạ đồng thời giảm xuống gần như bằng 0 ($R \approx 0$).

Đây là đặc trưng của hiện tượng cộng hưởng điện từ mạnh, cho phép bức xạ tại bước sóng cộng hưởng truyền xuyên hiệu quả qua bộ lọc. Ngược lại, ngoài vùng cộng hưởng, đặc biệt trong các khoảng từ $3,6$ đến $4,0\ \mu\text{m}$ và từ $4,4$

đến $4,8\ \mu\text{m}$, tín hiệu truyền qua suy giảm đáng kể trong khi phản xạ tăng gần đến 1. Điều này cho thấy cấu trúc hoạt động như một gương phản xạ phổ rộng, chỉ cho phép truyền chọn lọc tại một bước sóng duy nhất.

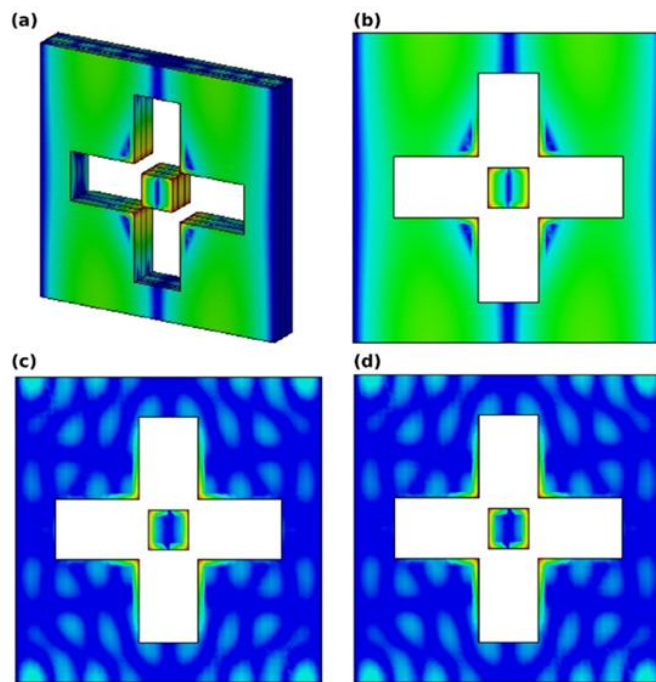


Hình 4.2. Phổ truyền qua của cấu trúc bộ lọc MMs khi thay đổi các thông số hình học: (a) Ảnh hưởng của chu kỳ mạng p ; (b) Ảnh hưởng của chiều rộng khe w ; (c) Ảnh hưởng của chiều dài nhánh chữ thập L ; (d) Ảnh hưởng của độ dày các lớp điện môi và kim loại t .

Độ rộng phổ tại nửa cực đại (FWHM) đạt khoảng $180\ \text{nm}$, phản ánh tính chọn lọc phổ cao của cấu trúc. Giá trị này đủ hẹp để phù hợp với dải hấp thụ đặc trưng của khí CO_2 tại $4,26\ \mu\text{m}$, đồng thời vẫn đảm bảo độ ổn định phổ khi có sai lệch nhỏ trong bước sóng nguồn phát. Cơ chế tạo nên đặc tính phổ chọn lọc này là sự kết hợp giữa cộng hưởng plasmon bề mặt, magnetic polariton và hiệu ứng giao thoa Fabry–Pérot trong cấu trúc nhiều lớp kim loại–điện môi [16]. Kết quả cho thấy bộ lọc đề xuất là ứng viên tiềm năng cho các cảm biến hồng ngoại đơn bước sóng có độ chính xác cao trong phát hiện khí CO_2 .

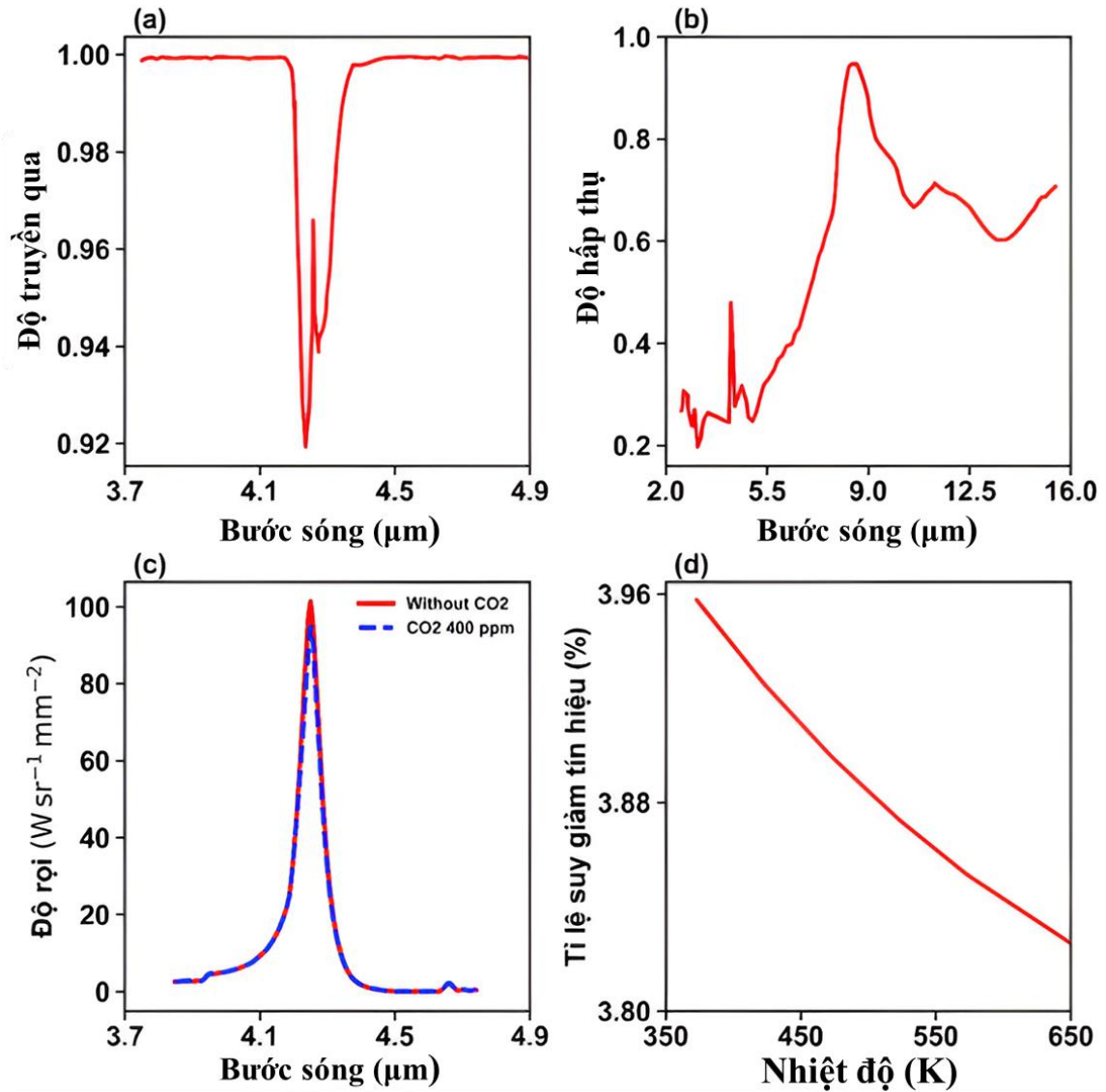
Hình 4.3 biểu diễn phân bố cường độ điện trường tại bước sóng cộng hưởng trong cấu trúc bộ lọc MMs nhằm minh họa cơ chế truyền chọn lọc. Hình 4.3a là ảnh ba chiều cho thấy điện trường tập trung mạnh tại mép các khe chữ

thập và khu vực trung tâm lớp giữa, phản ánh sự kích hoạt plasmon bề mặt cục bộ (LSPR). Hình 4.3b thể hiện phân bố điện trường tại lớp kim loại trên cùng, nơi trường tập trung rõ rệt quanh rìa khe với đối xứng cao, cho thấy hiệu ứng plasmon hoạt động đồng đều theo cả hai phương x và y. Hình 4.3c mô tả trường tại lớp điện môi, nơi cường độ vẫn được duy trì và tăng cường tại vùng lõi khe, biểu hiện vai trò của cộng hưởng từ (magnetic polariton). Hình 4.3d trình bày phân bố tại lớp kim loại dưới cùng, với trường điện tập trung yếu hơn nhưng vẫn thể hiện sự hỗ trợ phản xạ và giữ cộng hưởng nội tại. Sự phân bố đồng đều và mạnh ở cả hai hướng phân cực xác nhận cấu trúc hoạt động không phụ thuộc phân cực, phù hợp với các ứng dụng cảm biến quang học hồng ngoại.



Hình 4.3. Phân bố cường độ điện trường tại bước sóng cộng hưởng ($\lambda \approx 4,26 \mu\text{m}$) trong cấu trúc bộ lọc metamaterial; (a) Phân bố điện trường ba chiều (3D view) của toàn bộ cấu trúc; (b) Phân bố điện trường tại lớp kim loại trên cùng; (c) Phân bố điện trường tại lớp điện môi giữa; (d) Phân bố điện trường tại lớp kim loại dưới cùng.

Phổ truyền qua của bộ lọc metamaterial chịu ảnh hưởng mạnh mẽ bởi các tham số hình học trong cấu trúc ô đơn vị, bao gồm chu kỳ mạng p , chiều rộng khe w , chiều dài nhánh chữ thập L , và độ dày lớp điện môi t . Cụ thể, khi chu kỳ mạng p tăng từ $4,4 \mu\text{m}$ lên $4,8 \mu\text{m}$ (Hình 4.1a), đỉnh cộng hưởng trong phổ truyền qua dịch chuyển từ khoảng $4,1 \mu\text{m}$ sang gần $4,4 \mu\text{m}$, thể hiện xu hướng dịch về vùng bước sóng dài hơn (redshift).



Hình 4.4. (a) Phổ truyền qua của CO_2 tại nồng độ 400 ppm trong một buồng khí dài 15 cm [49]; (b) Phổ hấp thụ của bộ dò nhiệt điện (thermopile) [141]; (c) Bức xạ phổ được hấp thụ bởi thermopile tại nhiệt độ nguồn hồng ngoại 573 K; (d) Sự phụ thuộc của độ suy giảm tín hiệu vào nhiệt độ của nguồn hồng ngoại.

Sự dịch chuyển của bước sóng cộng hưởng trong phổ truyền qua có thể được lý giải dựa trên cơ chế plasmon bề mặt (surface plasmon wave – SPW). Khi ánh sáng chiếu tới bề mặt kim loại, các plasmon bề mặt được kích thích tại giao diện kim loại–điện môi và lan truyền với véc-tơ sóng được xác định bởi phương trình [142]:

$$k_{sp} = k_0 \sqrt{\frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}} \quad (4.1)$$

trong đó k_0 là số sóng trong chân không, ε_1 và ε_2 lần lượt là hằng số điện môi của kim loại và lớp điện môi. Trong cấu trúc mạng lỗ tuần hoàn hai chiều, véc-tơ sóng SPW bị điều chỉnh bởi tán xạ Bragg bậc cao, thông qua các véc-tơ mạng nghịch đảo:

$$k_{spx} = k_x + i \frac{2\pi}{p_x} + j \frac{2\pi}{p_y} \quad (4.2)$$

trong đó i, j là số nguyên. Khi chu kỳ mạng tăng, kéo theo sự dịch chuyển của đỉnh cộng hưởng về phía bước sóng dài hơn phù hợp với kết quả mô phỏng thu được.

Ngược lại, đối với các tham số hình học bên trong ô đơn vị như chiều rộng khe w (Hình 4.4b) và chiều dài nhánh chữ thập L (Hình 4.4c), khi các giá trị này tăng, đỉnh truyền qua trong phổ có xu hướng dịch về phía bước sóng ngắn hơn (blueshift). Cuối cùng, khi độ dày lớp điện môi t tăng từ 0,1 μm lên 0,3 μm (Hình 4.4d), đỉnh cộng hưởng lại dịch về phía bước sóng dài hơn, cho thấy sự điều chỉnh phổ rõ rệt theo chiều dày lớp dẫn sóng theo phương thẳng đứng.

Để đánh giá hiệu suất của hệ thống, năng lượng bức xạ được bộ dò hấp thụ có thể được tính toán bằng cách tích phân phổ bức xạ theo công thức sau [101]:

$$I = \int I_\lambda = \int B_T(\lambda, T) \cdot R(\lambda) \cdot T_C(\lambda) \cdot \alpha(\lambda) d\lambda \quad (4.3)$$

trong đó $B_{\lambda T}$ là bức xạ phổ của một vật đen lý tưởng tại nhiệt độ T , được xác định theo định luật Planck [53]. T_C biểu thị phổ truyền qua của CO_2 trong buồng khí và phụ thuộc vào nồng độ CO_2 [54] và thể hiện trong Hình 4.4a. R là phổ phản xạ của gương phản xạ metamaterial và $\alpha(\lambda)$ là phổ hấp thụ của bộ dò. Đầu đo hồng ngoại được sử dụng ở đây là theo nguyên lý cặp nhiệt điện (thermopile), với đặc tính hấp thụ được lấy từ tài liệu tham khảo [141] và minh họa trong Hình 4.4b.

Hình 4.4c minh họa độ hấp thụ bức xạ phổ hồng ngoại của đầu thu IR. Như quan sát được, bức xạ phổ giảm xung quanh bước sóng hấp thụ đặc trưng của CO_2 khi có mặt CO_2 trong buồng khí. Sự suy giảm này xảy ra do một phần bức xạ hồng ngoại phát ra từ nguồn IR bị các phân tử CO_2 hấp thụ trước khi

đến được đầu thu IR. Để định lượng hiệu ứng này, tỷ lệ suy giảm tín hiệu được tính như sau:

$$S = \frac{I_0 - I_{gas}}{I_0} \quad (4.4)$$

trong đó, I_0 là bức xạ được hấp thụ bởi đầu đo hồng ngoại khi không có CO₂, và I_{gas} là bức xạ được hấp thụ khi có CO₂ hiện diện. Tỷ lệ này cung cấp một thước đo chuẩn hóa về mức suy giảm tín hiệu tại đầu thu IR do sự hấp thụ khí, và được sử dụng để đánh giá độ nhạy của cảm biến NDIR-MMs. Hình 4.4d cho thấy mối quan hệ giữa nhiệt độ của nguồn phát IR và tỷ lệ suy giảm tín hiệu. Khi nhiệt độ của nguồn hồng ngoại tăng, tỷ lệ suy giảm tín hiệu giảm. Tại nhiệt độ nguồn IR là 573 K, tỷ lệ suy giảm tín hiệu đạt khoảng 3,8%.

4.2. Cảm biến NDIR-MMs theo cấu hình phản xạ

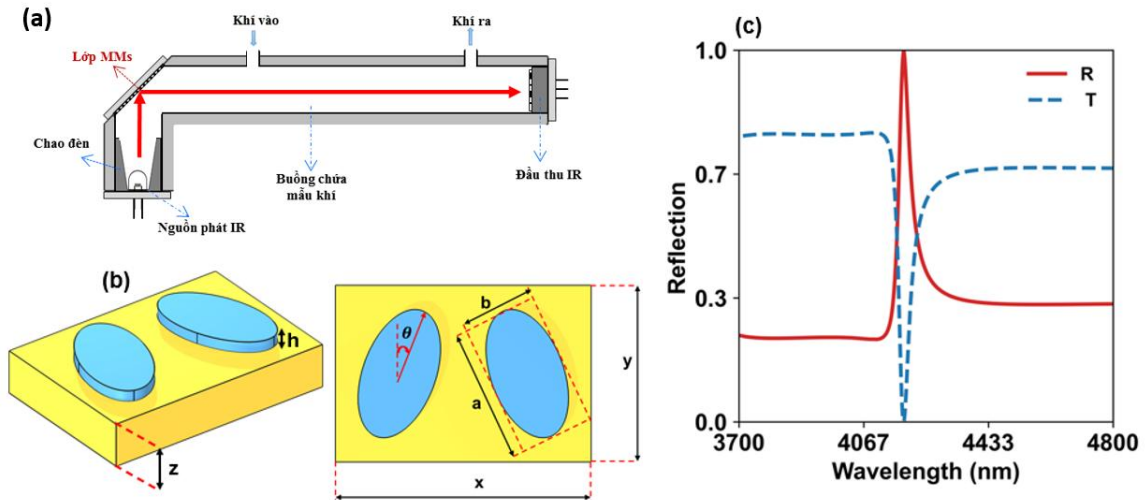
4.2.1. Thiết kế cảm biến NDIR-MMs theo cấu hình phản xạ

Các cảm biến tích hợp gương phản xạ có thể đạt được hiệu suất cao hơn nhờ việc tăng chiều dài đường truyền quang học hiệu dụng và cải thiện hiệu suất thu ánh sáng. Tuy nhiên, gương kim loại truyền thống có nhược điểm là phản xạ một dải rộng các bước sóng, bao gồm cả những bước sóng nằm ngoài dải hấp thụ mục tiêu. Điều này có thể dẫn đến hiện tượng tăng nhiệt không mong muốn và nhiệt độ hệ thống tăng cao, từ đó làm tăng nhiễu tín hiệu và giảm độ chọn lọc đối với khí CO₂. Để khắc phục những hạn chế trên, nghiên cứu này đề xuất một cảm biến tích hợp với gương phản xạ từ MMs. Cấu hình cảm biến NDIR tích hợp MMs theo cấu hình phản xạ được minh họa trong Hình 4.5a. Trong thiết kế này, nguồn hồng ngoại IR dải rộng sẽ đi đến gương phản xạ MM, và được phản xạ chọn lọc các vùng phổ đặc trưng, các bức xạ này đi qua buồng chứa mẫu khí để đến đầu thu hồng ngoại.

Gương phản xạ MMs đề xuất bao gồm một cấu trúc hai lớp, được thể hiện trong Hình 4.5b. Lớp dưới cùng là một đế CaF₂ với độ dày $z = 0,8$ mm. Lớp trên có một cấu trúc giống hình elip được làm bằng Si, cũng có độ dày $h = 0,2$ mm. Cấu trúc elip được đặc trưng bởi bán trục lớn $a = 2,2$ mm và bán trục nhỏ $b = 1,2$ mm. Ngoài ra, trục lớn được định hướng với một góc $\theta = 20^\circ$ so với trục y. Cấu trúc được sắp xếp theo chu kỳ với chiều dài $x = 4,2$ mm và chiều rộng $y = 2,9$ mm.

4.2.2. Hoạt động của NDIR-MMs theo cấu hình phản xạ

Hình 4.5c minh họa phổ phản xạ của gương phản xạ MMs, cho thấy một đỉnh phản xạ rõ rệt tại 4260 nm với độ phản xạ đạt 99,8%. Độ phản xạ gần như tuyệt đối tại bước sóng gần dải hấp thụ đặc trưng của CO₂ (~4200 nm) làm nổi bật tiềm năng của MMs trong các ứng dụng cảm biến khí CO₂ có độ nhạy cao.



Hình 4.5. (a) Cấu hình cảm biến khí; (b) Cấu trúc vật liệu MMs; và (c) Phổ phản xạ tương ứng.

Hiện tượng phản xạ gần như hoàn hảo quan sát được tại 4260 nm trong cấu trúc MMs có thể được giải thích theo lý thuyết dựa trên các điều kiện cần thiết để đạt được phản xạ toàn phần, như được mô tả trong tài liệu tham khảo [135,136]. Cụ thể, phản xạ hoàn hảo xảy ra khi phần thực của trở kháng phức bằng không, điều này yêu cầu điều kiện $\epsilon'/\mu' < 0$. Đây là dấu hiệu của trạng thái vật liệu MMs đơn âm (single-negative), trong đó hoặc độ điện thẩm (permittivity) hoặc độ từ thẩm (permeability) là âm. Trong các vật liệu điện môi, độ điện thẩm được tạo ra gần cộng hưởng điện, trong khi độ từ thẩm đạt được gần cộng hưởng từ [137]. Ngoài ra, một thành phần ảo lớn của chiết suất n'' là cần thiết để triệt tiêu sự truyền qua dạng suy biến (evanescent tunneling) và ngăn ánh sáng truyền qua lớp mỏng.

Để xác minh xem các điều kiện này có được đáp ứng trong cấu trúc của hay không, các giá trị trở kháng Z , độ điện thẩm ϵ , độ từ thẩm μ , và chiết suất được trích xuất. Các đại lượng phụ thuộc theo tần số này có thể được tính toán từ các tham số tán xạ (S-parameters) thông qua các công thức phân tích đã được thiết lập [136-139]. Trở kháng, chiết suất, độ từ thẩm và độ điện thẩm thu được từ phương trình:

$$Z(\omega) = \sqrt{\frac{(1 + S_{11}(\omega))^2 - S_{21}^2(\omega)}{(1 - S_{11}(\omega))^2 - S_{21}^2(\omega)}}$$

$$n(\omega) = \frac{1}{kL} \arccos\left(\frac{1 - S_{11}^2 + S_{21}^2}{2S_{21}}\right) \quad (4.5)$$

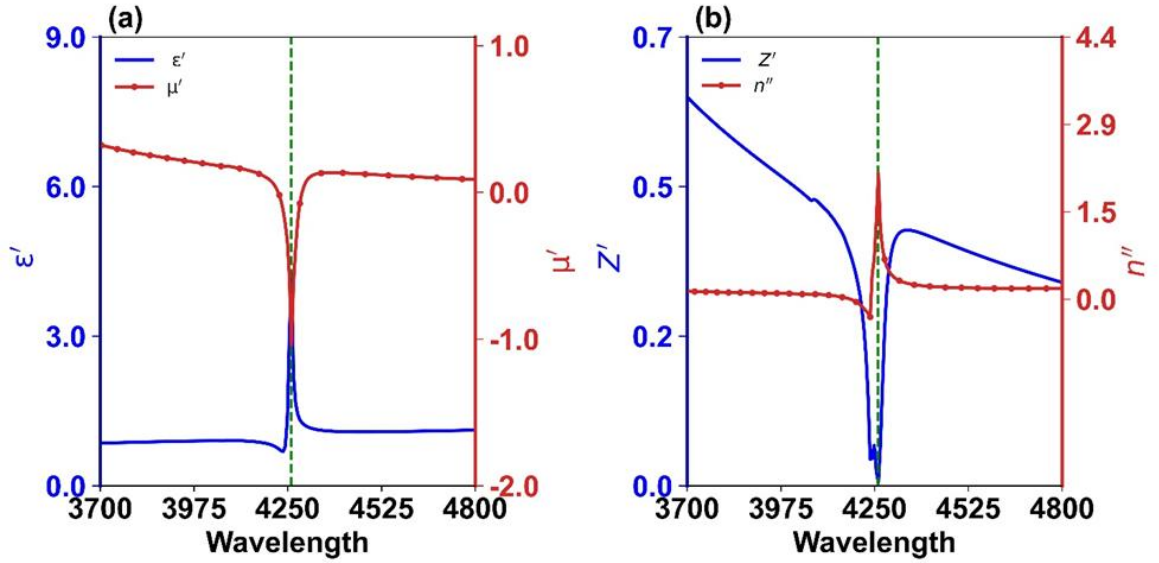
$$\mu(\omega) = n(\omega)Z(\omega)$$

$$\varepsilon(\omega) = \frac{n(\omega)}{Z(\omega)}$$

trong đó, k và L lần lượt biểu thị bước sóng và kích thước của ô cơ sở.

4.2.3. Cơ chế hoạt động của tấm MMs

Hình 4.6a thể hiện phần thực của độ điện thẩm hiệu dụng ε' và độ từ thẩm hiệu dụng μ' , trong khi Hình 4.6b hiển thị phần thực của trở kháng hiệu dụng Z' và phần ảo của chiết suất hiệu dụng n'' .

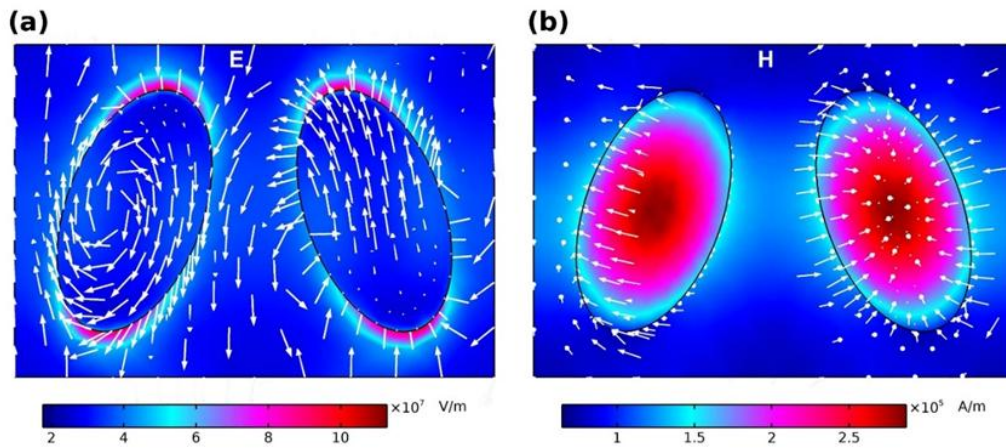


Hình 4.6. (a) Sự phụ thuộc của phần thực của độ điện thẩm hiệu dụng và độ từ thẩm hiệu dụng theo bước sóng; (b) Sự biến thiên của phần thực của trở kháng hiệu dụng và phần ảo của chiết suất hiệu dụng theo bước sóng.

Có thể quan sát thấy rằng tại bước sóng 4260 nm, phần thực của trở kháng hiệu dụng Z' xấp xỉ bằng không, phần thực của độ điện thẩm hiệu dụng ε' là dương, và phần thực của độ từ thẩm hiệu dụng μ' là âm, trong khi phần ảo của chiết suất hiệu dụng n'' đạt giá trị cực đại. Những điều kiện này cho thấy sự xuất hiện của cộng hưởng từ tại bước sóng này. Các điều kiện cần thiết cho

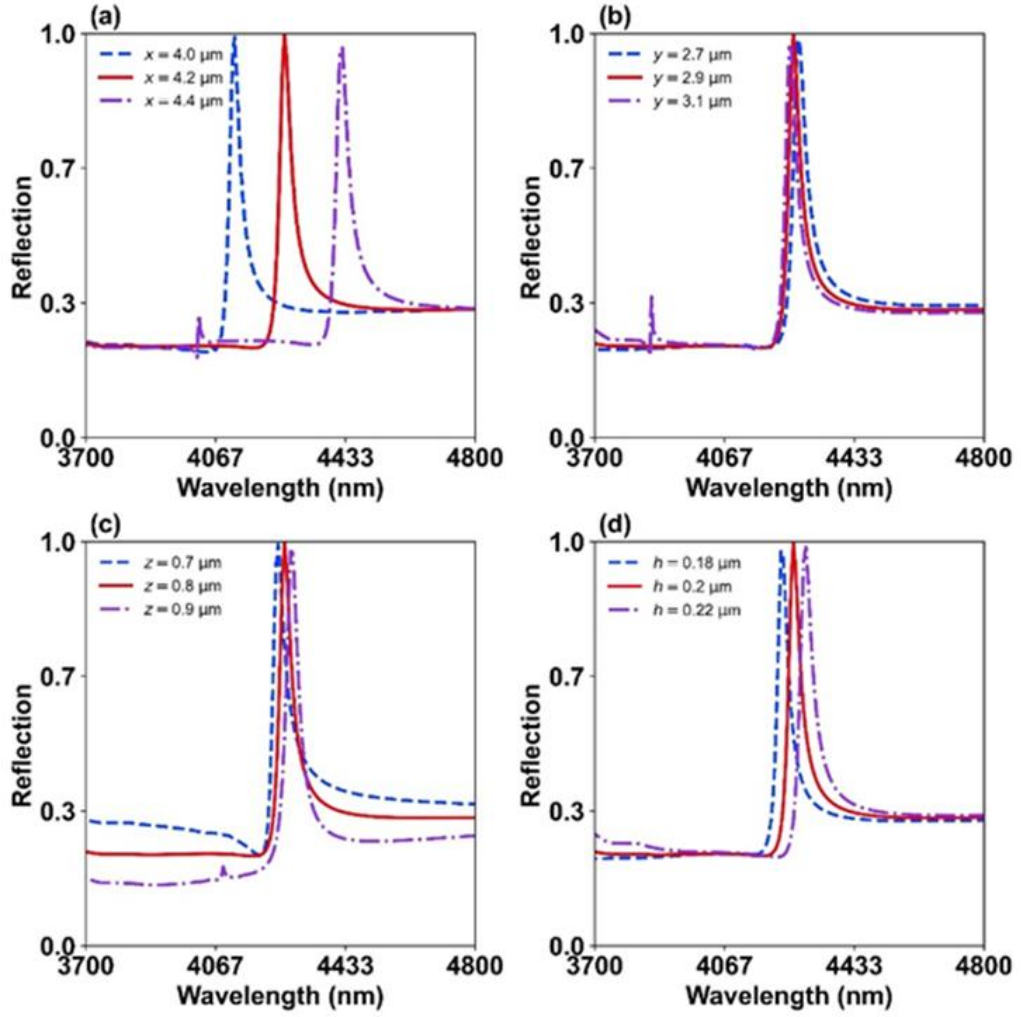
phản xạ hoàn hảo được thoả mãn, đồng nghĩa với việc có thể đạt được phản xạ toàn phần của sóng tới.

Hình 4.7a minh họa phân bố biên độ điện trường và đường sức điện tại $\lambda = 4260$ nm cho một hệ gồm hai cấu trúc elip. Trường điện cho thấy sự tập trung mạnh tại các biên của elip, với cường độ cực đại đạt khoảng $9,2 \times 10^7$ V/m. Hình 4.7b thể hiện biên độ phân bố từ trường và đường sức từ tại cùng bước sóng. Từ trường tập trung cục bộ tại vùng trung tâm của các cấu trúc elip, với cường độ cực đại đạt khoảng $3,0 \times 10^5$ A/m. Các đường sức điện thể hiện dạng xoáy, trong khi phân bố từ trường có dạng tuyến tính hơn và bị giới hạn không gian - những đặc điểm đặc trưng của cộng hưởng lưỡng cực từ.



Hình 4.7. Phân bố (a) điện trường và (b) từ trường cảm ứng tại bước sóng 4260 nm.

Hình 4.8 minh họa ảnh hưởng của các tham số hình học khác nhau đến phổ phản xạ. Việc thay đổi chiều dài đế x từ $4,0 \mu\text{m}$ đến $4,4 \mu\text{m}$ dẫn đến sự dịch đỏ rõ rệt của đỉnh cộng hưởng, cho thấy rằng việc tăng kích thước theo phương ngang của đế làm tăng đáng kể bước sóng cộng hưởng. Ngược lại, sự thay đổi chiều rộng đế y chỉ gây ra các dịch chuyển xanh nhẹ, cho thấy vai trò tương đối nhỏ của thông số này trong việc điều chỉnh vị trí phổ. Tương tự, sự thay đổi độ dày đế z tạo ra thay đổi rất nhỏ trong hành vi cộng hưởng. Việc tăng chiều cao của các cộng hưởng tử elip h gây ra một sự dịch đỏ có thể đo được của đỉnh cộng hưởng, xác nhận rằng cộng hưởng quang học nhạy với kích thước theo phương thẳng đứng của cấu trúc, mặc dù hiệu ứng này kém rõ rệt hơn so với khi thay đổi thông số x .



Hình 4.8. Sự phụ thuộc của phổ phản xạ vào các tham số cấu trúc: (a) chiều dài đế, (b) chiều rộng đế, (c) độ dày đế, và (d) chiều cao của các cộng hưởng dạng elip.

Để đánh giá thêm hiệu suất của hệ thống, lượng bức xạ được bộ dò hấp thụ có thể được tính toán bằng cách tích phân phổ bức xạ theo công thức sau [53]:

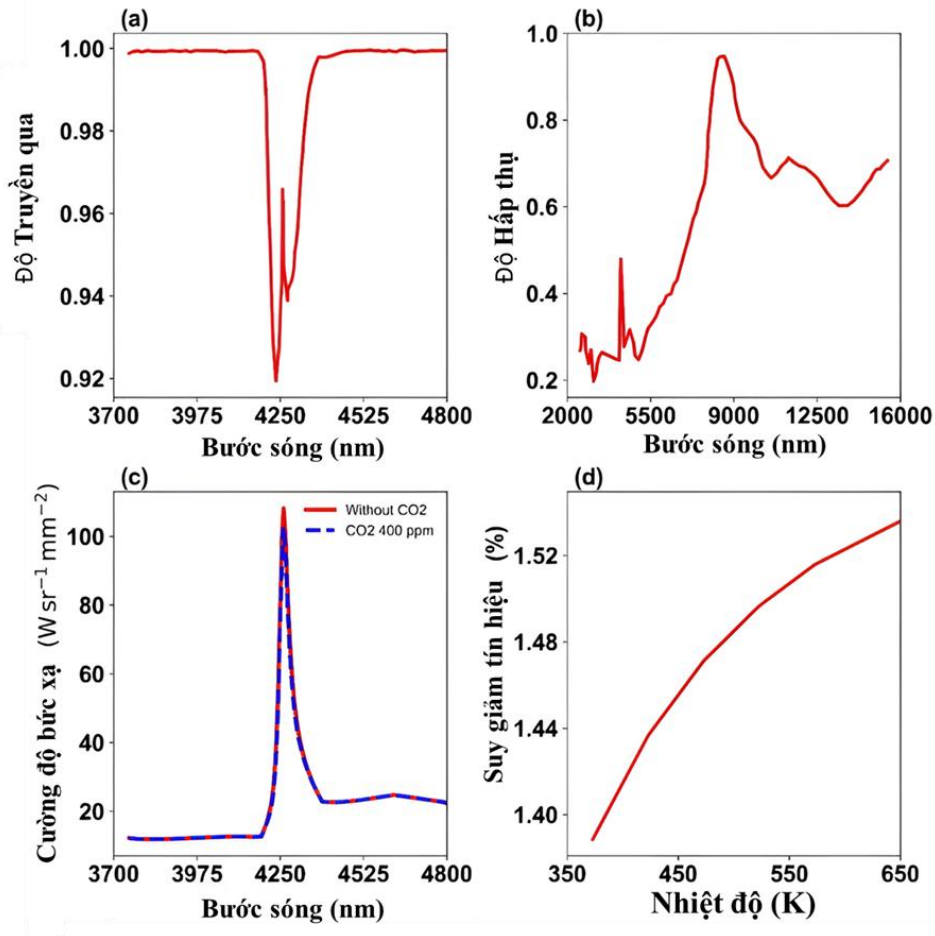
$$I = \int I_{\lambda} = \int B_T(\lambda, T) \cdot R(\lambda) \cdot T_C(\lambda) \cdot \alpha(\lambda) d\lambda \quad (4.6)$$

trong đó $B_{\lambda T}$ là bức xạ phổ của một vật đen lý tưởng tại nhiệt độ T , được xác định theo định luật Planck [140]:

$$B_{\lambda T} = B_T(\lambda, T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k_B T}} - 1} \quad (4.7)$$

T_C biểu thị phổ truyền qua của CO₂ trong buồng khí và phụ thuộc vào nồng độ CO₂. Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng phổ truyền qua tương ứng với

nồng độ CO_2 là 400 ppm trong một buồng khí dài 15 cm, như được báo cáo trong tài liệu tham khảo [52] và thể hiện trong Hình 4.9a. Đáng chú ý, phổ truyền qua giảm rõ rệt gần 4200 nm, tương ứng với dải hấp thụ chính của CO_2 . Khi không có khí trong buồng, $T_c(\lambda) = 1$. R là phổ phản xạ của gương phản xạ metamaterial và $\alpha(\lambda)$ là phổ hấp thụ của bộ dò. Đầu thu hồng ngoại được sử dụng trong phân tích này là thermopile, với đặc tính hấp thụ được lấy từ tài liệu tham khảo [141] và minh họa trong Hình 4.9b.



Hình 4.9. (a) Phổ truyền qua của CO_2 tại nồng độ 400 ppm trong một buồng khí dài 15 cm [52]; (b) Phổ hấp thụ của bộ dò nhiệt điện (thermopile) [30]; (c) Bức xạ phổ được hấp thụ bởi thermopile tại nhiệt độ nguồn hồng ngoại 573 K; (d) Sự phụ thuộc của suy giảm tín hiệu vào nhiệt độ của nguồn hồng ngoại.

Hình 4.9c minh họa bức xạ phổ được hấp thụ bởi đầu thu hồng ngoại. Như quan sát được, bức xạ phổ giảm xung quanh bước sóng hấp thụ đặc trưng của CO_2 (~4200 nm) khi có mặt CO_2 trong buồng khí. Sự suy giảm này xảy ra do một phần bức xạ hồng ngoại phát ra từ nguồn IR bị các phân tử CO_2 hấp thụ

trước khi đến được đầu thu IR. Để định lượng hiệu ứng này, tỷ lệ suy giảm tín hiệu được tính như sau:

$$Abs = \frac{I_0 - I_{gas}}{I_0} \quad (4.8)$$

trong đó, I_0 là cường độ bức xạ được hấp thụ bởi đầu thu IR khi không có CO₂, và I_{gas} là cường độ bức xạ khi có CO₂ hiện diện. Tỷ lệ này cung cấp một thước đo chuẩn hóa về mức suy giảm tín hiệu tại đầu thu IR do sự hấp thụ hồng ngoại của khí, và được sử dụng để đánh giá độ nhạy của cảm biến. Hình 4.9d cho thấy mối quan hệ giữa nhiệt độ của nguồn IR và tỷ lệ suy giảm tín hiệu. Khi nhiệt độ của nguồn hồng ngoại tăng, tỷ lệ suy giảm tín hiệu cũng tăng theo, cho thấy độ nhạy cao hơn ở mức phát xạ nhiệt lớn hơn. Tại nhiệt độ nguồn IR là 573 K, tỷ lệ suy giảm tín hiệu đạt khoảng 1,5%.

4.2.4. Chế tạo gương phản xạ MMs điều khiển phổ hồng ngoại

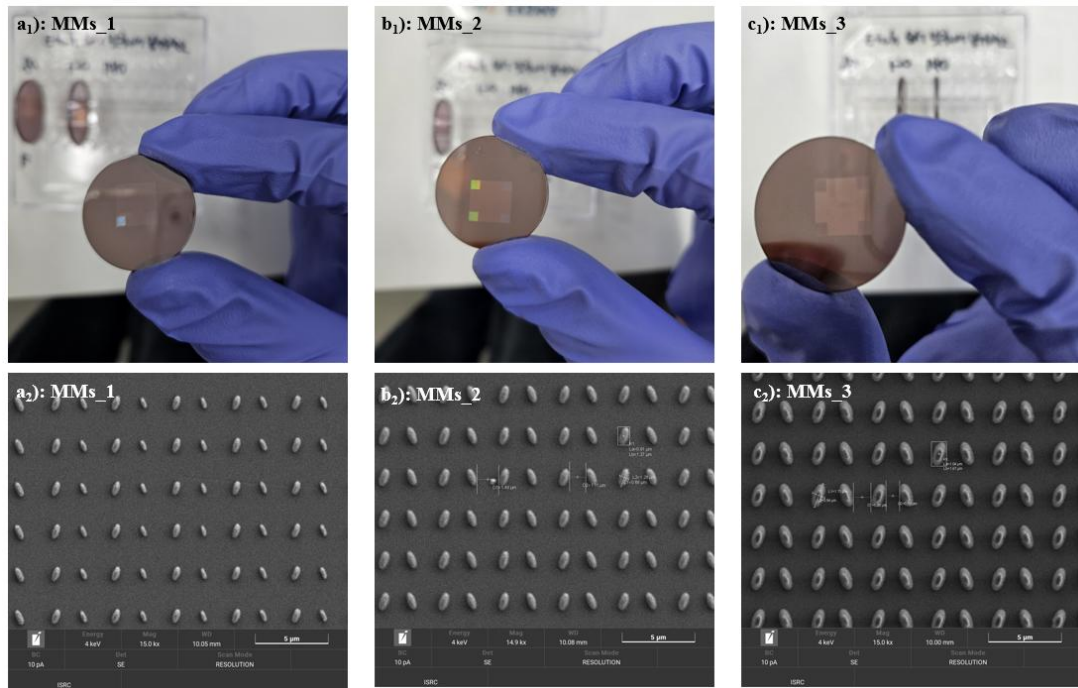
Sau quá trình thiết kế và tối ưu hóa thông qua mô phỏng, lớp MMs được chế tạo theo công nghệ quang khắc không cần dùng mặt nạ (maskless photolithography). Công nghệ này bao gồm các kỹ thuật chiếu xạ chùm tia laser để chiếu trực tiếp mẫu lên lớp vật liệu nhạy sáng và sử dụng hiển vi để quan sát. Kỹ thuật này linh hoạt hơn so với phương pháp quang khắc truyền thống (dùng mặt nạ), cho phép tạo ra mẫu và điều chỉnh nhanh chóng mà không cần chế tạo riêng mặt nạ vật lý, phù hợp cho nghiên cứu, sản xuất hàng loạt nhỏ hoặc các ứng dụng có yêu cầu thay đổi mẫu liên tục.

Trong luận án, mẫu thiết kế MMs sau khi thiết kế được hỗ trợ chế tạo từ phòng thí nghiệm của GS. Young Pak Lee (Alpha ADT, Hwaseong 18469, Korea) với quy trình chế tạo chính bao gồm các thiết bị chính sau:

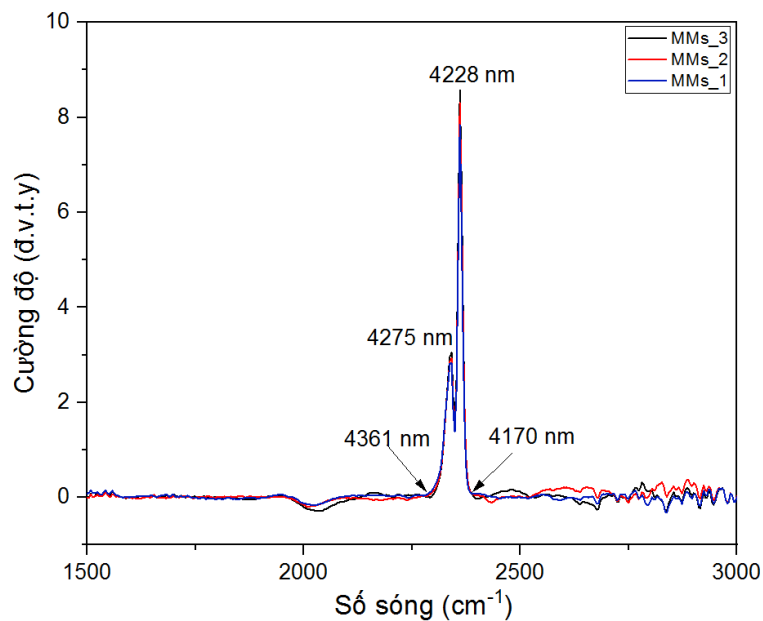
- Quá trình quang khắc (Photolithography) sử dụng hệ [NSS] DL-1000 với liều chiếu khác nhau: 80, 120, 140 dose.
- Quá trình ăn mòn (Etching) sử dụng hệ [GIGALANE] NEOGEN-MAXIS200D; Điều kiện ăn mòn: CHF₃ 10 sccm, CF₄ 30 sccm, 3.7 mT, ICP 900 W, Bias 50 W, Thời gian ăn mòn: 2 phút.
- Phổ hồng ngoại (FTIR) được tiến hành đo sử dụng hệ Microscope-IR [Bruker] LUMOS II (Light Source: Unpolarized).

Hình 4.10 là ảnh chụp quang học và ảnh hiển vi điện tử quét SEM của các mẫu MMs đã chế tạo theo ba điều kiện liều chiếu khác nhau (tương ứng các

mẫu ký hiệu là MMs_1, MMs_2 và MMs_3). Kết quả từ ảnh SEM trong Hình 4.10a₂-c₂ cho thấy các phần tử đảo elip được chế tạo dần trở lên hoàn hảo về kích thước và độ đồng đều với mong muốn từ thiết kế. Tuy vậy, có sự khác biệt trong kết quả ảnh SEM (Hình 4.10c₂) trong chế tạo thực nghiệm đó là đảo elip có bề mặt mép cạnh nhẵn thay vì sắc cạnh theo chiều đứng như trong cấu trúc thiết kế cho mô phỏng.



Hình 4.10. (a₁, b₁, c₁) ảnh chụp các tấm MMs đã chế tạo ở ba điều kiện liều chiếu khác nhau; (a₂, b₂, c₂) ảnh SEM các mẫu MMs tương ứng.



Hình 4.11. Phổ FTIR cho ba mẫu vật liệu MMs chế tạo.

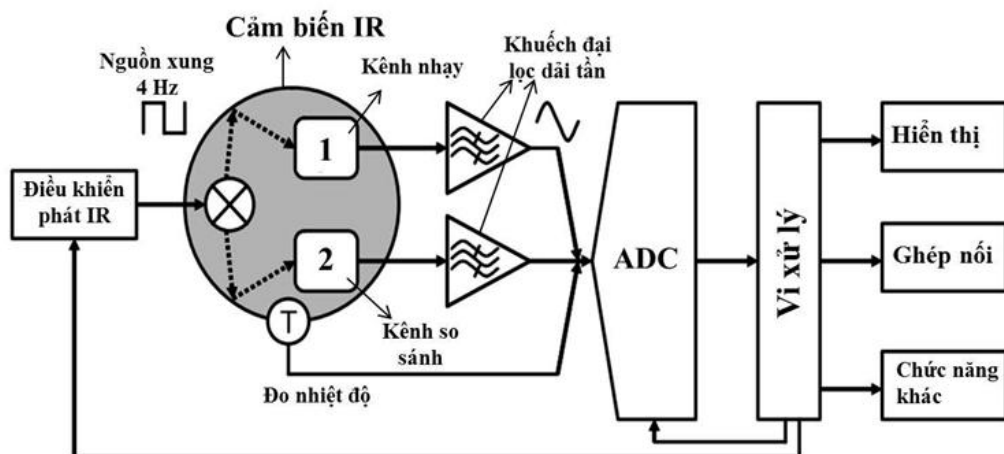
Hình 4.11 là phổ hấp thụ hồng ngoại biến đổi Fourier (FTIR) sau khi đã trừ nền cho ba mẫu MMs chế tạo MMs_1, MMs_2 và MMs_3. Kết quả này cho thấy ba mẫu vật liệu MMs có đỉnh tương đồng nhau đỉnh thứ nhất tại 4228 nm và đỉnh thứ hai tại 4275 nm. Mặc dù, cấu trúc của các đảo elip trên đế CaF_2 được chế tạo có sự khác biệt nhưng đặc trưng của phổ FTIR là khá tương đồng. Từ số liệu này, đỉnh chính của phổ FTIR được tính cho các mẫu vật liệu là 4265 ± 95 nm.

Như vậy, với kết quả này đã cho thấy lớp MMs là gương phản xạ với điều khiển bức xạ hồng ngoại có vị trí và độ rộng đỉnh phổ phù hợp cho áp dụng vào trong cảm biến NDIR. Việc chế tạo thành công này chứng minh tính khả thi của việc sản xuất hàng loạt cấu trúc MMs phức tạp bằng các công nghệ chế tạo bán dẫn tiêu chuẩn. Một số sai khác xảy ra giữa thực nghiệm và mô phỏng do quá trình quang khắc, ăn mòn và thông số vật liệu đầu vào sử dụng trong mô phỏng khác biệt nhỏ so với vật liệu được chế tạo.

4.2.5. Chế tạo cảm biến khí NDIR-MMs theo cấu hình phản xạ

4.2.5.1. Thiết kế, chế tạo bo mạch điện tử cho cảm biến

Việc chế tạo bo mạch điện tử cho cảm biến khí NDIR tích hợp MMs theo cấu hình phản xạ cũng giống như cho cảm biến NDIR truyền thống. Như trình bày ở trên, cảm biến NDIR gồm nguồn phát hồng ngoại, buồng mẫu khí, đầu thu hồng ngoại hai kênh (có thể theo nguyên tắc hỏa điện hoặc cặp nhiệt điện thermistor).



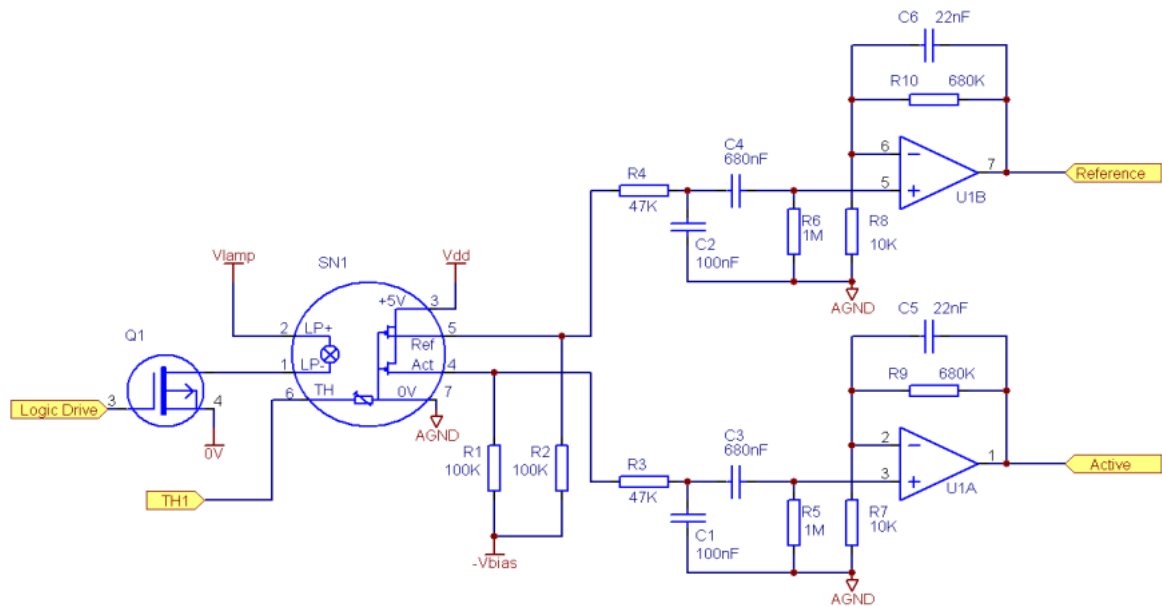
Hình 4.12. Sơ đồ các khối nguyên lý của cảm biến NDIR.

Hình 4.12 là sơ đồ khối nguyên lý cho cảm biến NDIR. Ở đó, nguồn phát hồng ngoại IR được cấp bởi điện áp dạng xung vuông 4 Hz (tần số được điều

khuyến bằng dao động của linh kiện thạch anh). Tín hiệu điện lỗi ra trên đầu thu hồng ngoại hai kênh (một kênh so sánh và một kênh đóng vai trò nhạy khí), thường được thu nhận qua linh kiện MOSFET. Các tín hiệu này tiếp đến các bộ khuếch đại vi sai (op-amp) và lọc tần số (lọc thông dải tần số thấp, tần số trùng với tần số nguồn điện cấp cho đèn phát hồng ngoại tại 4 Hz). Tín hiệu sau các bộ lọc được số hóa qua ADC, và đến vi xử lý để tính nồng độ khí cũng như ghép nối với các thiết bị ngoại vi khác (màn hình hiển thị, cổng truyền dẫn,...). Ngoài ra, để cảm biến được hoạt động chính xác một đầu đo nhiệt độ có thể được sử dụng để hiệu chỉnh và bù trừ khi nhiệt độ môi trường thay đổi.

a) Điều khiển nguồn phát hồng ngoại IR:

Nguồn điện cấp cho đèn phát hồng ngoại cần được thiết kế chuyển mạch ở tần số thấp với chu kỳ làm việc 50%. Tần số này thường được áp dụng 4 Hz. Nguồn cần ở dạng dòng hoặc điện áp cần đảm bảo không chứa gợn sóng tần số thấp để đảm bảo tín hiệu điều chế đầu ra.



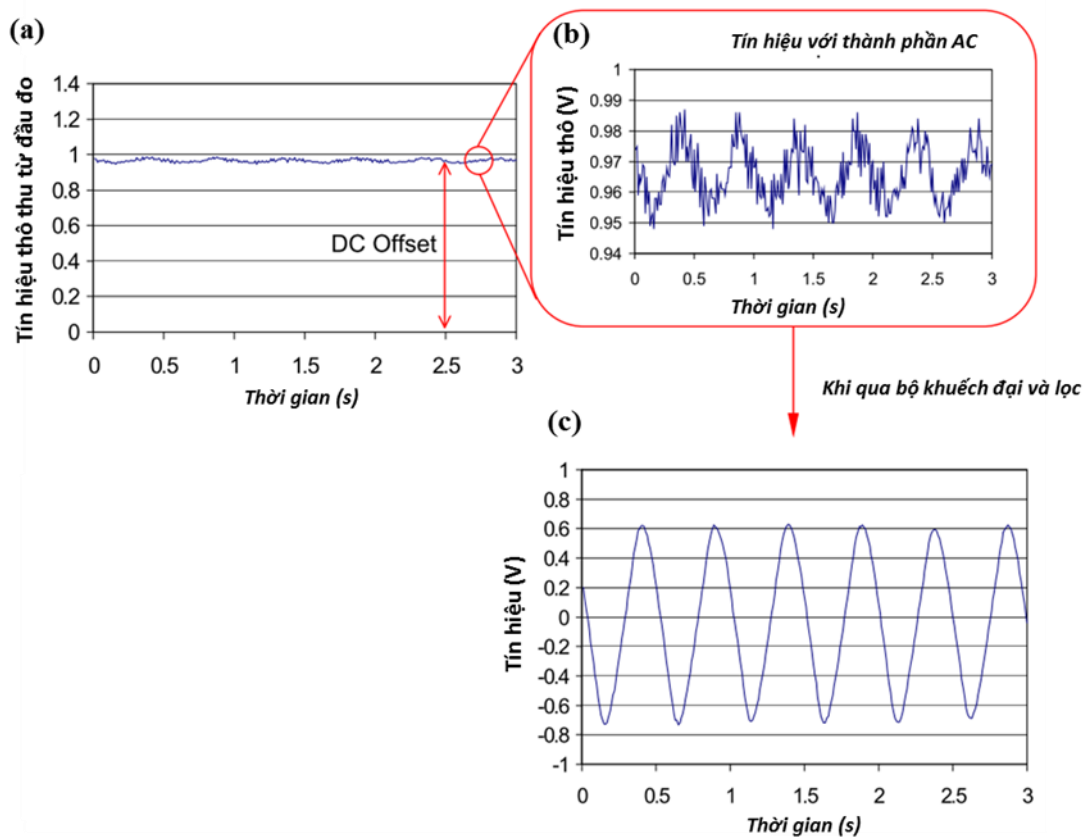
Hình 4.13. Mạch điện điển hình cho điều khiển nguồn điện cấp cho đèn phát IR và khuếch đại hai kênh cho tín hiệu từ đầu thu hồng ngoại.

Mạch điện tử điển hình cho điều khiển nguồn phát được thể hiện Hình 4.13 sử dụng linh kiện FET kênh để chuyển mạch phía thấp của nguồn với phía cao kết nối với nguồn ổn định (+5 VDC). Linh kiện FET có điện trở R_{DS_ON} thấp để giảm thiểu sụt áp. Nếu điều khiển điện áp phía cao và phía thấp nối đất, cần chú ý giữ đất của bộ dò riêng biệt với đất của nguồn để tránh nhiễu do dòng nguồn lưu thông trong đất bộ dò. Nguồn được cách ly galvanic khỏi các đầu đo

hồng ngoại trong cảm biến. Hình 4.13 cũng thể hiện mạch điện tử của bộ khuếch đại lọc thông dải tần số thấp cho tín hiệu từ đầu thu hồng ngoại hai kênh. Các điện trở tải ($R1$ và $R2$ trong Hình 4.13) được đặt để tạo dòng phân cực khoảng $30\ \mu\text{A}$ trong các linh kiện FET. Điện áp đầu ra danh nghĩa trên nguồn của FET nằm giữa 0.6 và $1.2\ \text{V}$. Các điện trở tải nên được kết nối với nguồn phân cực âm để cho phép dao động điện áp đầu ra lớn hơn, có thể cần thiết nếu cảm biến bị thay đổi nhiệt độ đột ngột. Nguồn $-2\ \text{VDC}$ được áp dụng tách nhiễu tốt với chân nối đất (AGND).

b) Khuếch đại và lọc tín hiệu cho đầu thu hồng ngoại

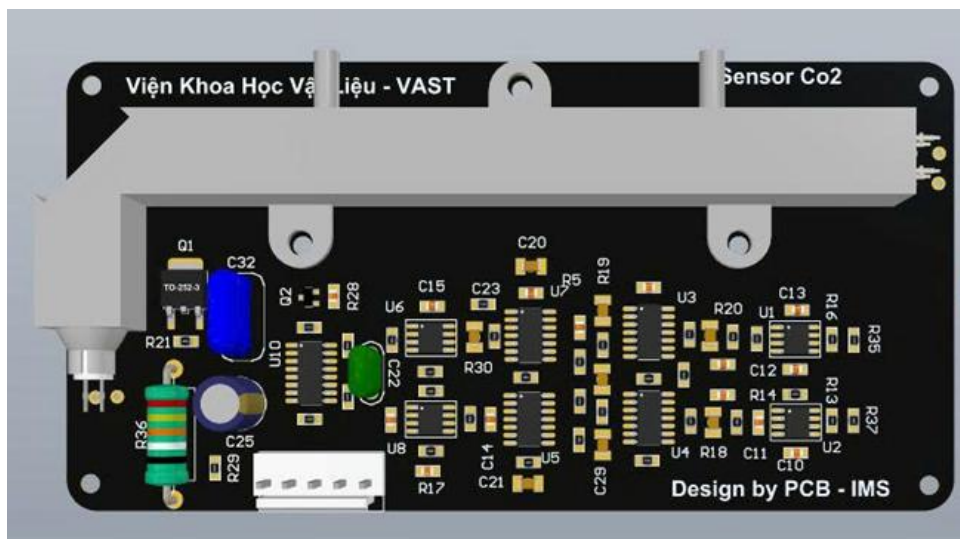
Tín hiệu thô từ hai kênh của đầu đo hồng ngoại có điện áp DC Offset lớn (thường $0.7\ \text{V} - 1.0\ \text{V}$) với thành phần phản hồi nhỏ ($\sim 20-50\ \text{mV}$ từ đỉnh tới đỉnh) chồng lẫn và xen kẽ với tín hiệu nền (Hình 4.14a-b, ví dụ thể hiện cho kênh nhạy). Tín hiệu xen kẽ được trích xuất và khuếch đại lọc lựa để thu được tín hiệu hình sin cho xác định biên độ đỉnh-đỉnh của thành phần dao động này (Hình 4.14c). Độ lớn của biên độ đỉnh-đỉnh của tín hiệu này sau đó có thể được sử dụng để xác định nồng độ khí.



Hình 4.14. (a,b) Tín hiệu thô thu được trên đầu đo hồng ngoại; (c) Tín hiệu hiệu sau khi qua bộ khuếch đại và lọc thông dải tần số thấp.

Mạch điện tử được thiết kế phù hợp để điều khiển và thu nhận tín hiệu cho cảm biến NDIR. Trong đó, hai linh kiện FET dùng cho thu tín hiệu từ kênh đo của bộ thu hồng ngoại là giống hệt nhau, thường đầu đo IR kiểu hóa điện đã được tích hợp vào bên trong. Kênh nhạy sẽ đổi tín hiệu theo nồng độ CO_2 trong khi kênh so sánh hay tham chiếu hầu như không bị ảnh hưởng bởi mức nồng độ của khí CO_2 . Cả hai kênh đều có thể bị ảnh hưởng bởi nhiệt độ môi trường và độ sáng nguồn IR. Vì thế, việc thu và xử lý tín hiệu trên hai kênh đồng thời sẽ giảm thiểu các hiệu ứng hay các nhiễu không mong muốn này.

Nguồn phát IR và đầu đo IR hai kênh có thời gian phản hồi đáng kể (lý do cho tần số xung tương đối thấp). Giai đoạn khuếch đại nên bao gồm phản hồi thông mức cao với độ dốc khoảng bốn lần tần số chuyển mạch để giảm nhiễu tần số cao, và giai đoạn thông mức thấp khoảng 0.1 Hz để loại bỏ thế phân cực (bias DC) từ các FET. Các tần số không cần chính xác, nhưng cả hai kênh đo (tham chiếu và nhạy) nên có đặc tính khớp nhau. Các kênh đo sẽ có tín hiệu đầu ra điển hình 45 mV (từ đỉnh tới đỉnh), do đó mạch điện nên cung cấp độ lợi đủ để cho đầu vào hợp lý cho bất kỳ ADC nào được sử dụng. Mạch hiển thị trong Hình 4.13 sẽ cho khoảng 3 V (đỉnh-đỉnh và lưỡng cực quanh 0 V). Đối với linh kiện ADC đơn cực, và các linh kiện C1, C2, R5, R6, R7 & R8 có thể được kết nối với nguồn được tách nhiễu tốt với AGND.



Hình 4.15. Thiết kế bo mạch cho cảm biến NDIR tích hợp MMs

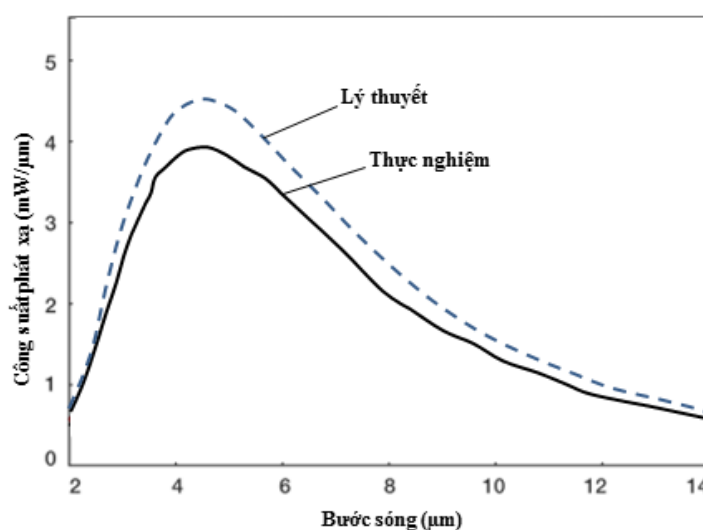
Dựa trên phân tích này, một bo mạch điện tử (Hình 4.15) đã được thiết kế chế tạo dùng cho nghiên cứu cảm biến NDIR tích hợp MMs theo cấu hình phản xạ (được phát triển tại Phòng Vật liệu biến hóa và cảm biến).

4.2.5.2. Thiết kế cơ khí, linh kiện sử dụng và lắp ráp cảm biến

Như thể hiện cấu trúc trên Hình 4.5a, cảm biến NDIR tích hợp MMs theo cấu hình phản xạ được thiết kế cơ khí với vỏ ngoài bằng hợp kim nhôm. Buồng mẫu khí hình trụ rỗng có đường kính trong là 9 mm, chiều dài 120 mm, và có hai đầu lối khí vào. Một nguồn phát hồng ngoại sử dụng là EMIRS 200 (của hãng Heimann). Đặc tính nguồn phát được thể hiện trên Bảng 4.1. Phổ bức xạ hồng ngoại được thể hiện trên Hình 4.16.

Bảng 4.1: Đặc tính cơ bản của nguồn phát hồng ngoại sử dụng.

Đặc Tính	EMIRS 200	Đơn vị
Vỏ	TO-39	
Điện trở (không cấp nguồn)	45 ± 10	Ω
Điện trở khi cấp nguồn	72 ± 18	Ω
Công suất điện đầu vào	450	mW
Điện áp hoạt động cực đại	5,6	V
Hằng số thời gian gia nhiệt ^a	18	ms
Hằng số thời gian làm nguội ^b	8	ms
Nhiệt độ hoạt động	450	°C
Độ phát xạ ^c	>0,85	
Tuổi thọ (đo) ^d	10	năm
Diện tích gia nhiệt	$2,1 \times 1,8$	mm ²
Nhiệt độ vỏ ^e	40–85	°C



Hình 4.16. Phổ phát xạ hồng ngoại của đèn EMIR200.

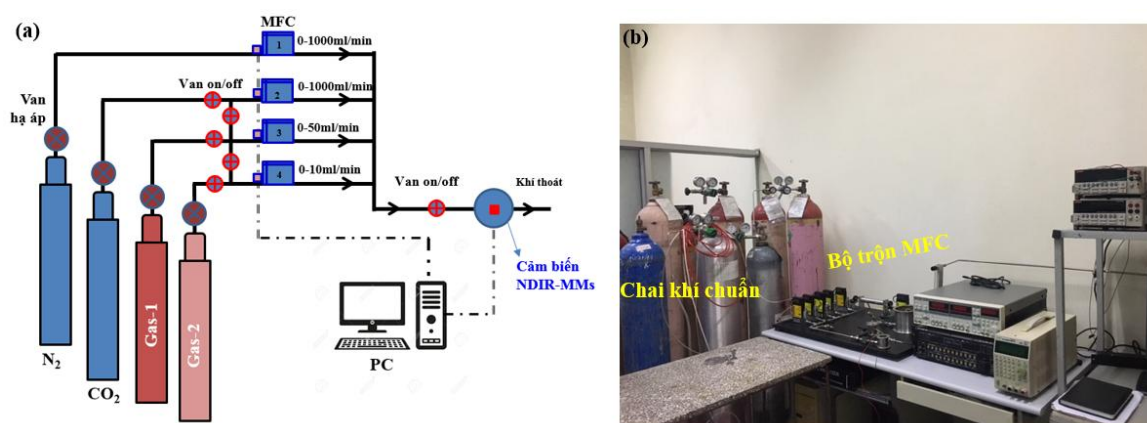
Đầu thu hồng ngoại hai kênh được sử dụng trong cấu hình cảm biến NDIR-MMs này là PY0234 (của hãng Pyreos). Đặc tính kỹ thuật của đầu thu PY0234 được thể hiện trên Bảng 4.2.

Bảng 4.2: Thông số kỹ thuật cơ bản đầu thu hồng ngoại PY0234.

Đặc Tính	PY0234	Đơn vị
Vỏ	TO-39	
Kính lọc kênh so sánh	3,91 ($\pm 0,90$)	μm
Kính lọc kênh nhạy	4,26 ($\pm 1,80$)	μm
Kích thước kính lọc	2,6	mm^2
Kích thước phần tử nhạy	1000 $\times$ 1000	μm^2
Độ đáp ứng	150.000	V/W
Độ nhạy	$3,5 \times 10^8$	$\text{cm}\sqrt{\text{Hz/W}}$
Độ nhiễu	70	$\mu\text{V}/\sqrt{\text{Hz}}$
Điện áp cấp cực đại	8,0	V
Điện áp cấp cực tiểu	2,7	V
Nhiệt độ hoạt động	-40 – +85	$^{\circ}\text{C}$

4.2.5.3. Tạo nồng độ khí cho khảo sát cảm biến

Để đánh giá được đặc trưng của cảm biến, các nồng độ khí CO_2 được tạo ra từ hệ pha trộn khí theo nguyên lý điều khiển các dòng khí. Hình 4.17a là sơ đồ minh họa nguyên lý của hệ pha trộn khí để tạo các nồng độ khí chuẩn. Hình 4.17b là ảnh chụp hệ pha trộn khí cho khảo sát các đặc trưng cảm biến NDIR-MMs.



Hình 4.17. Sơ đồ nguyên lý của hệ pha trộn khí (a) và ảnh chụp tương ứng (b).

Ở đó, các chai khí gồm CO₂ (với nồng độ 10% thể tích khí CO₂ trong N₂, hãng Air Liquide), và khí N₂ (độ sạch 99,99%) được van hạ áp và qua các hệ thống van cơ để ghép nối đến các vi điều khiển lưu lượng chính xác (MFC). Các MFC sẽ điều khiển các lưu lượng cho trộn theo thể tích để đạt các nồng độ CO₂ mong muốn. Hệ thống MFC được ghép nối và điều khiển qua máy tính PC. Bảng 4.3 liệt kê các nồng độ khí chuẩn CO₂ tạo ra cho nghiên cứu đặc trưng cảm biến.

Bảng 4.3: Thông số lưu lượng để tạo các nồng độ khí chuẩn CO₂.

Lưu lượng N ₂	Lưu lượng khí CO ₂ (10% trong N ₂)	Nồng độ CO ₂
500 ml/min	2 ml/min	797 ppm
500 ml/min	4 ml/min	1483 ppm
500 ml/min	8 ml/min	2944 ppm
500 ml/min	16 ml/min	5803 ppm
500 ml/min	32 ml/min	11278 ppm

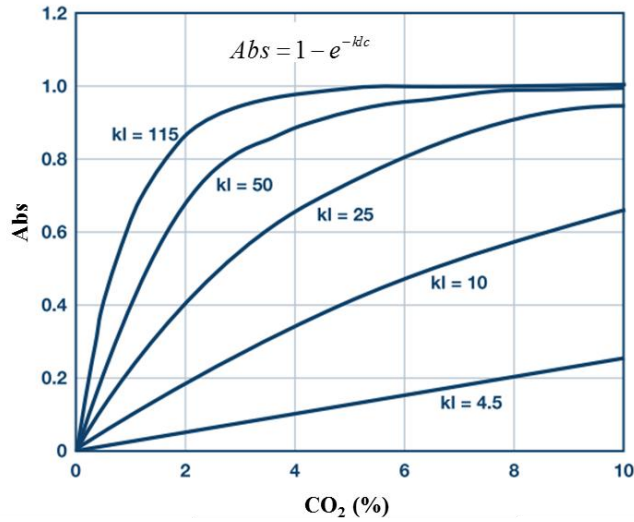
Mỗi nồng độ khí CO₂ (trong môi trường khí mang N₂) được chảy liên tục vào buồng chứa mẫu khí của biến NDIR-MMs. Cảm biến ở trạng thái hoạt động liên tục và tín hiệu điện lối ra trên hai kênh thu hồng ngoại được thu nhận qua bo mạch điện tử và gửi về máy tính PC. Dữ liệu thu được này được sử dụng để đánh giá và chuẩn hóa tuyến tính cảm biến NDIR.

4.2.5.4. Chuẩn hóa tuyến tính cho cảm biến NDIR-MMs

Đặc trưng hấp thụ hồng ngoại của khí tuân theo định luật Beer-Lambert, vì thế việc chuẩn hóa cảm biến NDIR sẽ được tính theo cường độ hồng ngoại trên đầu thu giảm theo quan hệ hàm mũ như sau:

$$I = I_0 e^{-klc} \quad (4.9)$$

trong đó: I là cường độ đo được trên đầu thu sau khi bức xạ hồng ngoại đi qua buồng chứa mẫu khí, I_0 là cường độ hồng ngoại ban đầu từ nguồn phát, k là hệ số hấp thụ đặc trưng cho khí và cấu hình của cảm biến cụ thể, l là chiều dài đường quang học (quang trình), tương đương chiều dài buồng mẫu khí, c là nồng độ của khí trong buồng đo.



Hình 4.18. Sự phụ thuộc điển hình hệ số hấp thụ Abs theo nồng độ khí CO₂ khi thay đổi kl .

Đối với tín hiệu đầu ra của đầu thu trên kênh nhảy, sự thay đổi điện áp đầu ra tương ứng là U_o và U , khi đó hệ số hấp thụ được tính là:

$$Abs = 1 - \frac{I}{I_o} = \frac{U_o - U}{U_o} = 1 - \frac{U}{U_o} \quad (4.10)$$

trong đó: Abs là độ hấp thụ, U_o là điện áp đầu ra trong môi trường không có khí CO₂, và U là điện áp đầu ra trong môi trường có khí CO₂. Kết hợp giữa hai phương trình trên cho ta hệ số hấp thụ (Abs) là:

$$Abs = 1 - e^{-klc} \quad (4.11)$$

Nếu kl thay đổi, hệ số hấp thụ Abs có thể được vẽ đồ thị so với c như trong Hình 4.18 (trong đó $kl = 115; 50; 25; 10$ và $4,5$). Giá trị của Abs tăng theo nồng độ khí c , và đạt đến bão hòa ở nồng độ khí cao. Điểm chú ý trên với kl lớn thì khả năng phân giải với sự thay đổi mức khí ở nồng độ thấp tốt hơn so với ở nồng độ cao. Tuy nhiên, kl có thể được điều chỉnh để cung cấp độ hấp thụ tối ưu cho dải nồng độ khí theo yêu cầu đo của cảm biến. Điều này có nghĩa là các quang trình dài phù hợp hơn cho nồng độ khí thấp và các quang trình ngắn phù hợp hơn cho nồng độ khí cao.

Để chuẩn hóa tuyến tính cho cảm biến NDIR-MMs, khí CO₂ được áp dụng với nồng độ thấp được chọn trong 100% N₂, tương ứng 0% khí CO₂, khi đó tín hiệu trên hai kênh thu của cảm biến với kênh nhảy là $U_{SEN-LOW}$ và kênh so sánh là $U_{REF-LOW}$. Chuẩn hóa được thực hiện tại một nồng độ khí CO₂ có giá

trị đã biết x_{CAL} . Thông thường, mức nồng độ x_{CAL} được chọn là giá trị lớn nhất hoặc điển hình của dải nồng độ đo thiết kế (ví dụ: 0,5% thể tích cho dải chất lượng không khí công nghiệp và cả áp dụng trong nông nghiệp). Khi đó, tín hiệu điện áp trên hai kênh thu tương ứng là $U_{SEN-CAL}$ và kênh so sánh là $U_{REF-CAL}$. Khi đó, chúng ta có:

$$\begin{aligned} I_{LOW} &= I_0 e^{-b(x_{LOW})} \\ I_{CAL} &= I_0 e^{-b(x_{CAL})} \end{aligned} \quad (4.12)$$

Giải hai phương trình này để tìm I_0 và b :

$$\begin{aligned} I_0 = Zero &= \frac{U_{SEN-LOW}}{U_{REF-LOW}} \times \left(\frac{U_{SEN-LOW}}{U_{REF-LOW}} \times \frac{U_{REF-CAL}}{U_{SEN-CAL}} \right)^{\frac{x_{LOW}}{x_{LOW}-x_{CAL}}} \\ b &= \frac{\ln \left[\frac{U_{SEN-LOW}}{U_{REF-LOW}} \times \frac{U_{REF-CAL}}{U_{SEN-CAL}} \right]}{x_{CAL} - x_{LOW}} \end{aligned} \quad (4.13)$$

Hệ số hấp thụ Abs tại một nồng độ khí bất kỳ sẽ là:

$$Abs = 1 - \left(\frac{I}{I_0} \right) = 1 - \frac{U_{SEN}}{U_{REF} \times Zero} \quad (4.14)$$

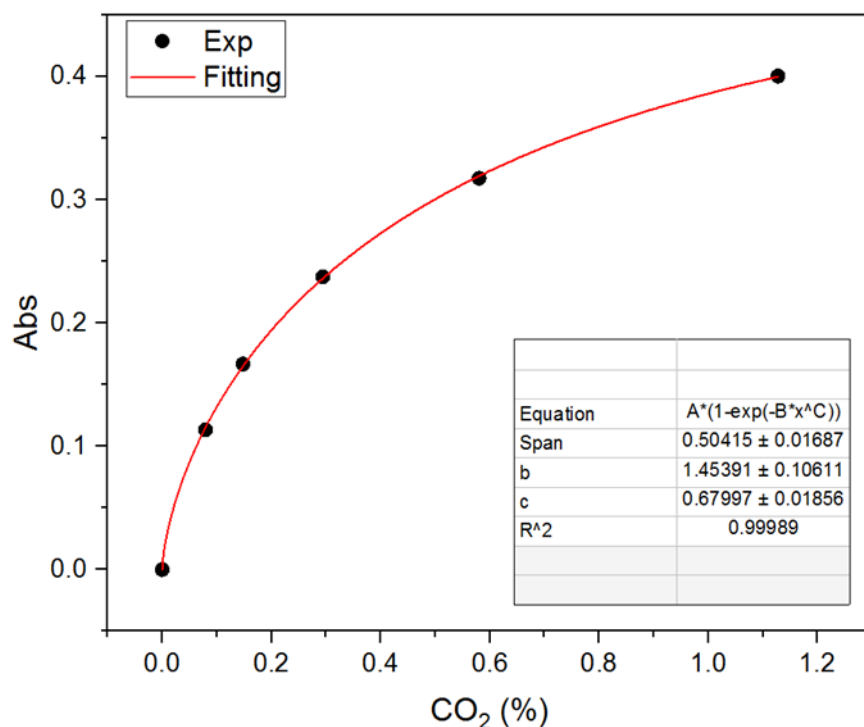
$$x = \left[\frac{\ln \left(\frac{U_{SEN}}{U_{REF} \times Zero} \right)}{-b} \right] \quad (4.15)$$

Trên đây là công thức chuẩn hóa cho trường hợp lý tưởng, tuy vậy thực tế cần có đính chính. Khi đó, định luật Beer-Lambert được sửa đổi và bổ sung như sau:

$$Abs = Span(1 - e^{-bx^c}) \quad (4.16)$$

Một hệ số “*Span*” được đưa vào công thức tính độ hấp thụ, vì không phải tất cả bức xạ hồng ngoại chiếu vào buồng đo đều có khả năng được hấp thụ bởi khí, ngay cả ở nồng độ cao, và *Span* có giá trị nhỏ hơn 1. Sự thay đổi trong quang trình và sự tán xạ ánh sáng yêu cầu thêm một hệ số của hàm mũ, đó là hệ số c . Từ đó, phương trình được dùng để khớp chính xác với dữ liệu hấp thụ đo được thực tế. Giá trị của các hệ số b , c và *Span* cũng phụ thuộc vào dải nồng độ được đo. Các giá trị của b và c cho một cảm biến cụ thể được xác định bằng

cách lấy từ một bộ số liệu với số điểm cho xây dựng đường *Abs* phụ thuộc vào nồng độ khí CO₂, và sau đó sử dụng một chương trình khớp hàm (theo phương trình 4.16) để xác định. Hình 4.19 minh họa kết quả điển hình về xác định các hằng số *b* và *c* khi thực hiện khớp hàm (Fitting) cho đường cong độ hấp thụ *Abs* phụ thuộc theo nồng độ khí CO₂.



Hình 4.19. Minh họa khớp hàm theo dữ liệu thực nghiệm của độ hấp thụ *Abs* vào nồng độ khí để xác định các hằng số *b* và *c*.

Đối với một cảm biến nhất định sau khi đã tìm được các hằng số *b* và *c* (hằng số chuẩn hóa tuyến tính), thì các giá trị của *Zero* và *Span* có thể được tính bằng phương pháp hiệu chuẩn hai điểm. Đầu tiên, quy trình hiệu chuẩn áp dụng ở một nồng độ khí thấp x_{LOW} và thu nhận các giá trị điện áp trên hai kênh của đầu thu hồng ngoại, như sau:

- $U_{SEN-LOW}$: độ lớn tín hiệu kênh nhạy ở khí nồng độ thấp
- $U_{REF-LOW}$: độ lớn tín hiệu kênh so sánh ở khí nồng độ thấp

Tiếp đến, hiệu chuẩn áp dụng khí CO₂ ở nồng độ đã biết x_{CAL} (nồng độ cao khí CO₂ dùng để khảo sát). Các giá trị điện áp trên hai kênh của đầu thu hồng ngoại khi đó như sau:

- $U_{SEN-CAL}$: độ lớn tín hiệu kênh nhạy ở khí nồng độ x_{CAL} .
- $U_{REF-LOW}$: độ lớn tín hiệu kênh so sánh ở khí nồng độ x_{CAL} .

Khi đó, các phương về độ hấp thụ sẽ được tính:

$$1 - \frac{I_{LOW}}{I_0} = Span(1 - e^{-bx_{low}^c}) \quad (4.17)$$

$$1 - \frac{I_{CAL}}{I_0} = Span(1 - e^{-bx_{CAL}^c}) \quad (4.18)$$

Giải hai phương trình để tìm *Zero* và *Span* theo các giá trị điện áp thu được như sau:

$$Zero \quad (4.19)$$

$$= \frac{U_{SEN-LOW}(e^{-bx_{CAL}^c} - 1)U_{REF-LOW} + U_{SEN-CAL}(1 - e^{-bx_{LOW}^c})U_{REF-LOW}}{(e^{-bx_{CAL}^c} - e^{-bx_{LOW}^c}) \times U_{REF-CAL} \times U_{SEN-LOW}}$$

$$Span \quad (4.20)$$

$$= \frac{U_{SEN-CAL} \times U_{REF-LOW} - U_{SEN-LOW} \times U_{REF-CAL}}{U_{SEN-LOW}(e^{-bx_{CAL}^c} - 1)U_{REF-CAL} + U_{SEN-CAL}(1 - e^{-bx_{LOW}^c})U_{REF-LOW}}$$

Đối với một nồng độ khí chưa biết (x) nào đó, cảm biến cho tín hiệu lỗi ra trên kênh nhảy là U_{SEN} và kênh so sánh sẽ là U_{REF} ; hệ số hấp thụ sẽ được tính theo các công thức là:

$$Abs = Span(1 - e^{-bx^c}) \quad (4.21)$$

$$Abs = 1 - \frac{U_{SEN}}{U_{REF} \times Zero} \quad (4.22)$$

Khi đó, nồng độ khí (x) sẽ được tính theo công thức:

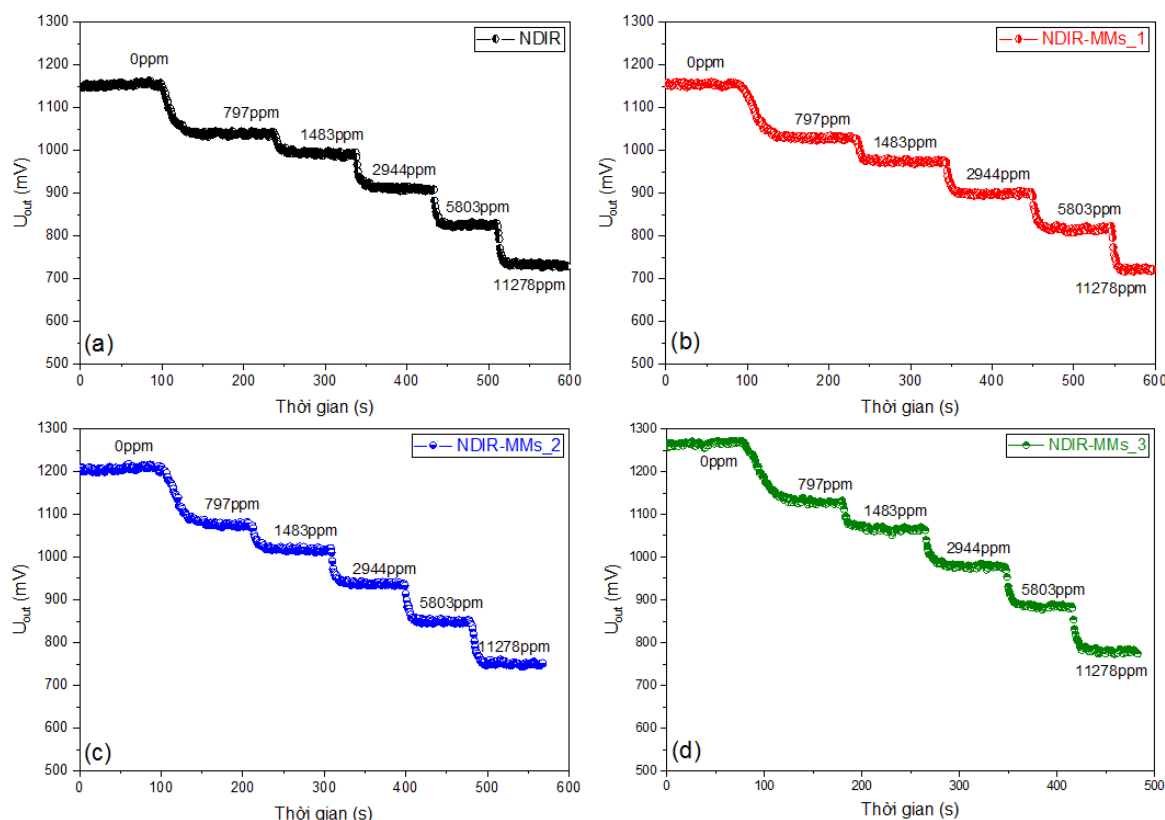
$$x = \left[\frac{\ln\left(1 - \frac{Abs}{Span}\right)}{-b} \right]^{\frac{1}{c}} \quad (4.23)$$

Như vậy với một cảm biến khi biết được các hằng số chuẩn hóa tuyến tính (b và c) và các tín hiệu điện áp trên hai kênh thu của đầu thu hồng ngoại U_{SEN} và U_{REF} thì có thể xác định được nồng độ khí theo các công thức (4.22 và 4.23) như trên.

4.2.5.5. Khảo sát các đặc trưng của cảm biến NDIR-MMs

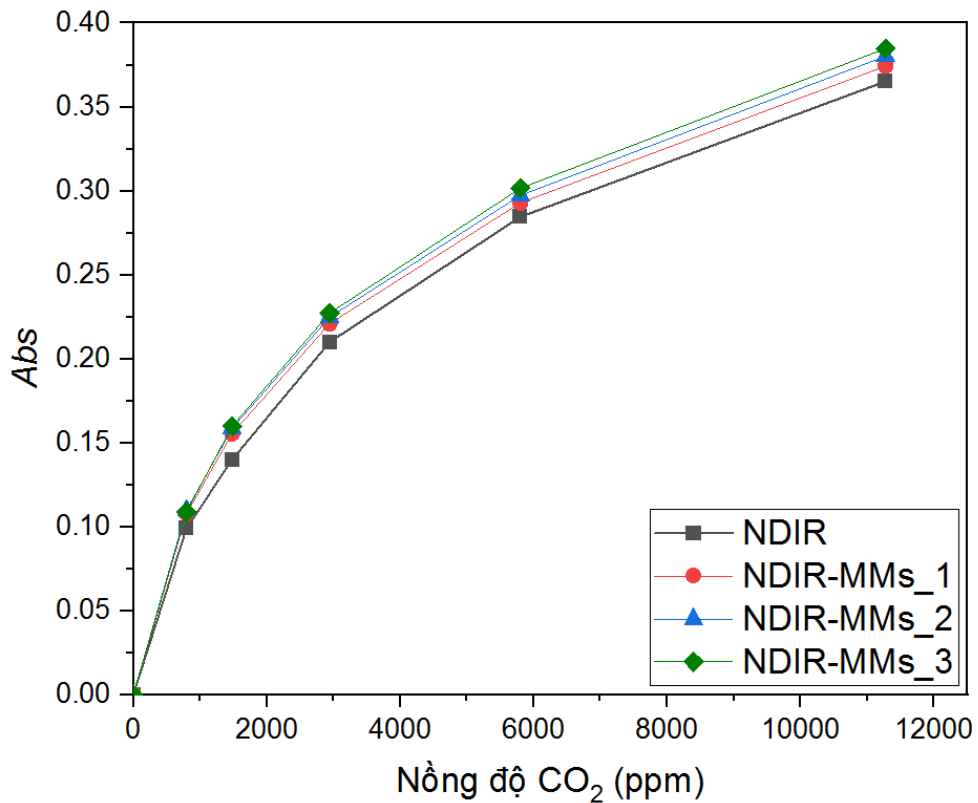
Trong mục này, cảm biến NDIR (không có lớp MMs), và các cảm biến NDIR-MMs_1, NDIR-MMs_2, và NDIR-MMs_3 (khi tích hợp các lớp MMs

MMs_1, MMs_2 và MMs_3 theo cấu hình phản xạ) được khảo sát đánh giá theo các nồng độ khí CO₂ trong vùng 0 - 12.000 ppm. Hình 4.20 minh họa kết quả diễn hình về sự biến thiên điện áp đầu ra (U_{out} , đơn vị mV) của các cảm biến NDIR, NDIR-MMs_1, NDIR-MMs_2, và NDIR-MMs_3 theo thời gian (trong khoảng 0–600 s) khi thay đổi nồng độ khí CO₂ tăng lần lượt theo các bước từ 0 ppm, 797 ppm, 1483 ppm, 2944 ppm, 5803 ppm, và 11278 ppm. Các cảm biến hoạt động ở công suất đèn phát IR với dòng điện cấp là 90.



Hình 4.20. Đặc trưng điện áp lối ra kênh nhạy biến đổi khi nồng độ khí thay đổi của các cảm biến NDIR (a); NDIR-MMs_1 (b); NDIR-MMs_2 (c); và NDIR-MMs_3. (d).

Các đường biến thiên này cho thấy các cảm biến này đều thể hiện đặc trưng khá giống nhau và diễn hình của cảm biến hoạt động theo nguyên tắc hấp thụ hồng ngoại đó là điện áp lối ra suy giảm khi nồng độ khí CO₂ tăng (khí CO₂ trong buồng mẫu đã hấp thụ một phần bức xạ hồng ngoại từ nguồn phát đến đầu thu). Kết quả cho thấy vùng điện áp lối ra của các cảm biến này biến đổi trong khoảng từ 700–1200 mV.



Hình 4.21. Độ hấp thụ của các cảm biến phụ thuộc theo nồng độ khí CO₂.

Từ các số này, độ hấp thụ (Abs) được tính từ điện áp lõi ra thể hiện phụ thuộc vào nồng độ khí CO₂ được thể hiện trên Hình 4.21. Kết quả này cho thấy độ hấp thụ (dùng để đánh giá độ nhạy của cảm biến) tăng theo trình tự từ NDIR, NDIR-MMs_1, NDIR-MMs_2, đến NDIR-MMs_3. Điều này khẳng định vai trò của MMs được sử dụng đã làm tăng cường độ nhạy và cảm biến với cấu trúc MMs đồng đều, hoàn hảo nhất (mẫu MMs_3) cho độ hấp thụ Abs mạnh nhất. Bảng 4.4 liệt kê chi tiết giá trị điện áp kênh nhạy (U_{out}) và độ hấp thụ (Abs) của các cảm biến NDIR, NDIR-MMs_1, NDIR-MMs_2, đến NDIR-MMs_3 tương ứng theo các nồng độ khí CO₂ khảo sát.

Bảng 4.4: Điện áp kênh nhạy (U_{out}) và độ hấp thụ (Abs) của các cảm biến theo nồng độ khí CO₂ khác nhau.

CO ₂ ppm	NDIR		NDIR-MMs_1		NDIR-MMs_2		NDIR-MMs_3	
	U_{out} (mV)	Abs	U_{out} (mV)	Abs	U_{out} (mV)	Abs	U_{out} (mV)	Abs
0	11536	0,0000	11534	0,0000	12088	0,0000	12659	0,0000
797	10392	0,0992	10290	0,1079	10758	0,1100	11280	0,1089
1483	9921	0,1400	9740	0,1555	10170	0,1587	10634	0,1600

2944	9112	0,2101	8984	0,2211	9369	0,2249	9782	0,2273
5803	8254	0,2845	8155	0,2930	8494	0,2973	8841	0,3016
11278	7323	0,3652	7215	0,3745	7491	0,3803	7787	0,3849

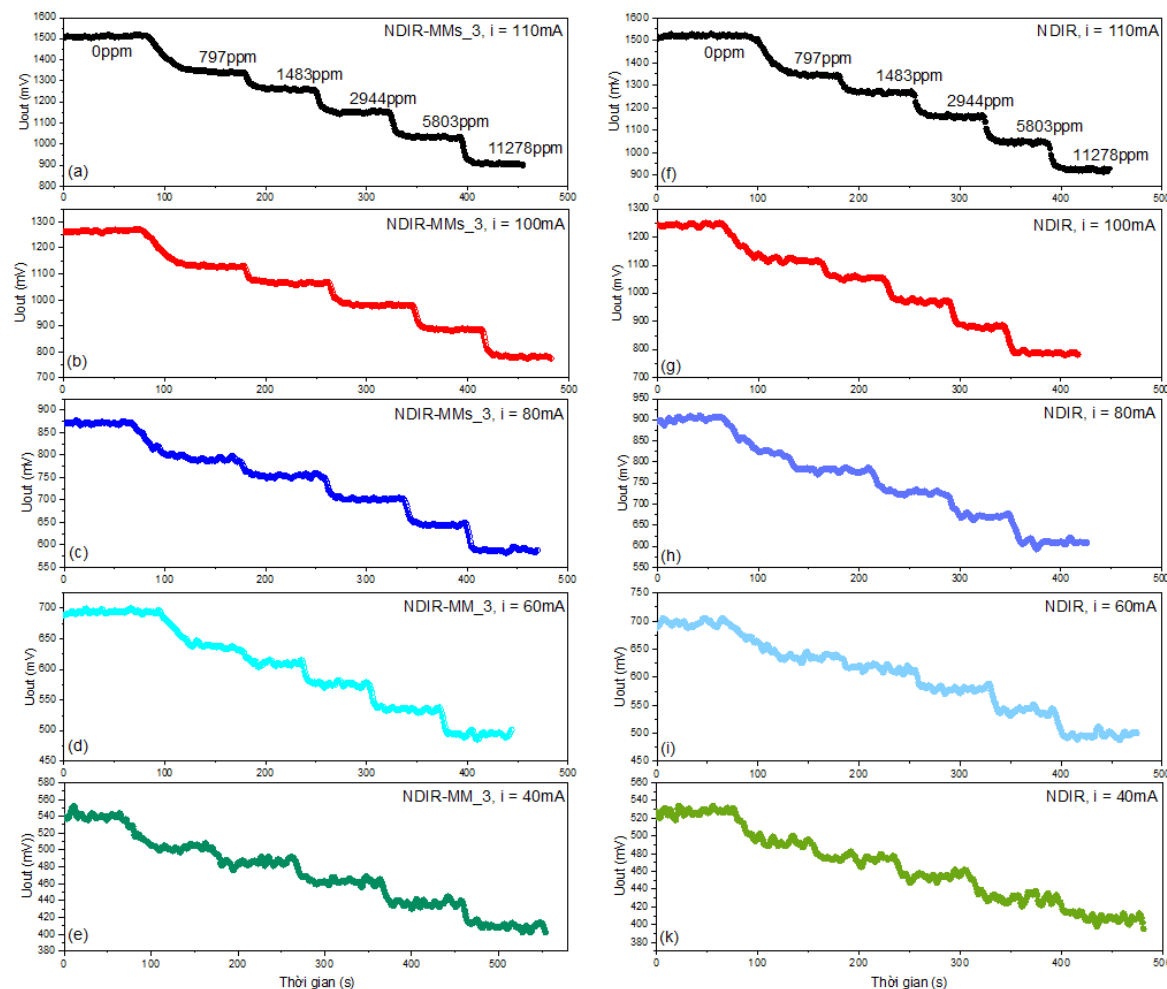
Từ số liệu này, các hằng số chuẩn hóa tuyến tính cho các cảm biến NDIR, NDIR-MMs_1, NDIR-MMs_2 và NDIR-MMs_3 được xác định theo khớp hàm (như đã trình ở mục trên). Bảng 4.5 thể hiện các giá trị cụ thể các hằng số chuẩn hóa tuyến tính (b và c) cho cảm biến NDIR, NDIR-MMs_1, NDIR-MMs_2 và NDIR-MMs_3 đã chế tạo.

Bảng 4.5: Hằng số chuẩn hóa tuyến tính (b và c) của các cảm biến NDIR và NDIR-MMs.

Cảm biến	Hằng số tuyến tính hóa	
	b	c
NDIR	1,33895	0,69442
NDIR-MM_1	1,25493	0,64484
NDIR-MM_2	1,23954	0,63995
NDIR-MM_3	1,32543	0,65974

Như thể hiện trên Hình 2.1, cảm biến NDIR-MMs_3 có độ hấp thụ lớn nhất. Để đánh giá thêm vai trò của MMs, hai cảm biến NDIR và NDIR-MMs_3 được lựa chọn cho khảo sát thay đổi công suất đèn phát IR bằng cách thay đổi nguồn dòng đặt vào với các giá trị biên độ dòng điện là $i = 40, 60, 80, 100$ và 110 mA. Hình 4.22 là các điện áp U_{out} của kênh nhảy của các cảm biến NDIR và NDIR-MMs_3 biến đổi theo thời gian khi thay đổi các nồng độ khí CO₂ theo các bước 0 ppm, 797 ppm, 1483 ppm, 2944 ppm, 5803 ppm và 11278 ppm. Kết quả này có đặc trưng đường biến đổi của U_{out} tương tự như trên Hình 4.20 (tín hiệu lỗi ra U_{out} giảm theo nồng độ khí CO₂ trong buồng mẫu tăng). Kết quả này cũng cho thấy tính hệ thống khi nguồn dòng cấp cho đèn phát IR giảm thì vùng điện áp lỗi ra giảm theo: với dòng $i = 40$ mA điện áp U_{out} thay đổi trong vùng 350–550 V; $i = 60$ mA điện áp U_{out} thay đổi trong vùng 450–700 V; $i = 80$ mA điện áp U_{out} thay đổi trong vùng 550–900 V; $i = 100$ mA điện áp U_{out}

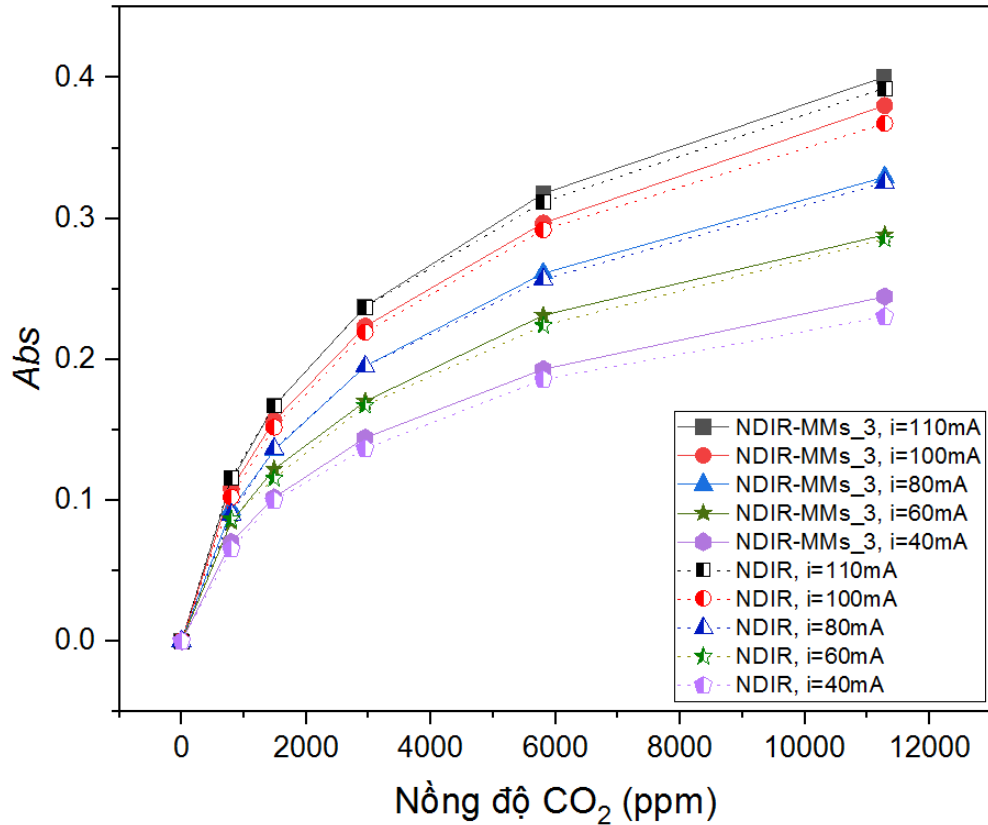
thay đổi trong vùng 800–1250 V; và $i = 110$ mA điện áp U_{out} thay đổi trong vùng 900–1500 V. Khi dòng điện cấp cho càng cao thì đường tín hiệu lỗi ra U_{out} càng sắc nét và ít tạp nhiễu do cường độ bức xạ tăng khi nguồn phát IR hoạt động ở công suất lớn.



Hình 4.22. Đặc trưng điện áp lỗi ra kênh nhạy của cảm biến NDIR và NDIR-MMs_3 khi thay đổi độ lớn nguồn dòng $i = 40\text{--}110$ mA cấp cho đèn phát hồng ngoại IR.

Từ các dữ liệu này, đường thể hiện độ hấp thụ (Abs) của các cảm biến NDIR và NDIR-MMs_3 phụ thuộc vào nồng độ khí CO_2 được tính toán và thể hiện trên Hình 4.23. Đường nét liền là của cảm biến NDIR-MMs_3 và đường nét đứt của cảm biến NDIR, được thể hiện cho các trường hợp khi đèn phát IR được cấp nguồn dòng khác nhau. Kết quả đã thể hiện tính hệ thống đó là độ hấp thụ tăng theo sự tăng nồng độ khí CO_2 . Độ hấp thụ của cảm biến NDIR-MMs_3 đều cao hơn so với cảm biến NDIR tại mỗi nồng độ khí CO_2 .

Điểm đáng chú ý trong kết quả này là tại các giá trị nhỏ của dòng i (cấp cho đèn phát IR) độ hấp thụ Abs của hai cảm biến NDIR và NDIR-MMs_3 tách nhau ra hơn một chút so với trường hợp của dòng i lớn. Đặc điểm này chứng tỏ vai trò cải thiện của vật liệu MMs khi áp dụng vào trong cảm biến NDIR khi đèn phát IR hoạt động ở công suất phát thấp.



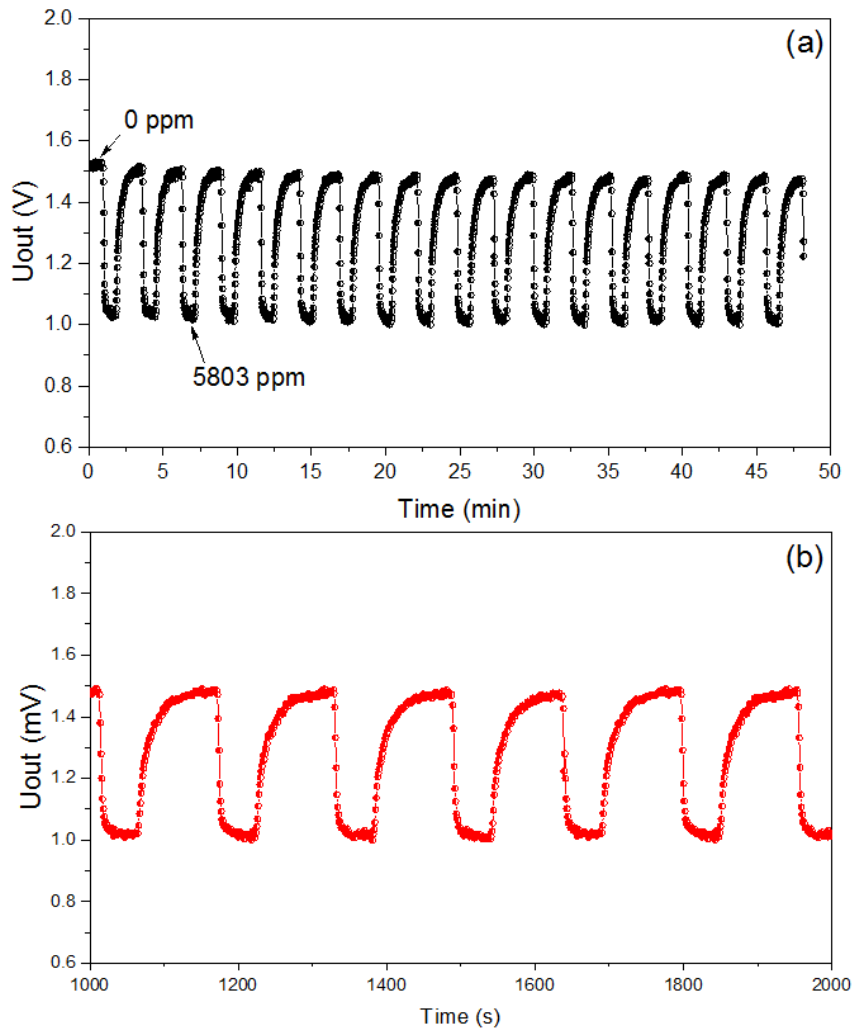
Hình 4.23. Độ hấp thụ cho các cảm biến cảm biến NDIR và NDIR-MMs_3 phụ thuộc vào nồng độ khí CO_2 .

Bảng 4.6: Điện áp kênh nhạy và độ hấp thụ (Abs) của cảm biến NDIR và thay đổi công suất đèn phát IR.

CO_2 ppm	U_{out} (mV)	Abs	U_{out} (mV)	Abs	U_{out} (mV)	Abs	U_{out} (mV)	Abs	U_{out} (mV)	Abs
	$i = 110 \text{ mA}$		$i = 100 \text{ mA}$		$i = 80 \text{ mA}$		$i = 60 \text{ mA}$		$i = 40 \text{ mA}$	
0	15204	0,000	12428	0,0000	9033	0,0000	6953	0,0000	5270	0,0000
797	13444	0,116	11160	0,1020	8219	0,0898	6352	0,0864	4927	0,0651
1483	12662	0,167	10542	0,1518	7795	0,1366	6151	0,1153	4745	0,0996
2944	11595	0,237	9703	0,2193	7267	0,1949	5777	0,1691	4550	0,1366
5803	10464	0,312	8799	0,2920	6706	0,2568	5396	0,2239	4291	0,1858
11278	9234	0,393	7860	0,3676	6083	0,3255	4969	0,2853	4056	0,2304

Bảng 4.7: Điện áp kênh nhạy và độ hấp thụ (*Abs*) của cảm biến NDIR-MMs_3 thay đổi công suất đèn phát IR.

CO ₂ ppm	<i>U</i> _{out} (mV)	<i>Abs</i>	<i>U</i> _{out} (mV)	<i>Abs</i>	<i>U</i> _{out} (mV)	<i>Abs</i>	<i>U</i> _{out} (mV)	<i>Abs</i>	<i>U</i> _{out} (mV)	<i>Abs</i>
	<i>i</i> = 110 mA		<i>i</i> = 100 mA		<i>i</i> = 80 mA		<i>i</i> = 60 mA		<i>i</i> = 40 mA	
0	15113	0,000	12449	0,0000	8707	0,0000	6940	0,0000	5405	0.0000
797	13396	0,114	11104	0,1080	7895	0,0933	6353	0,0846	5025	0,0703
1483	12590	0,167	10502	0,1564	7527	0,1355	6093	0,1220	4855	0,1018
2944	11521	0,238	9667	0,2235	7009	0,1950	5759	0,1702	4625	0,1443
5803	10312	0,318	8754	0,2968	6433	0,2612	5335	0,2313	4362	0,1930
11278	9058	0,401	7715	0,3803	5862	0,3267	4938	0,2885	4083	0,2446



Hình 4.24. Tín hiệu điện áp kênh nhạy (U_{out}) của cảm biến NDIR-MMs_3 lặp lại theo các chu kỳ cấp khí CO₂ vào buồng đo.

Bảng 4.6 và Bảng 4.7 liệt kê các giá trị điện áp U_{out} và độ hấp thụ Abs của các cảm biến NDIR và NDIR-MMs_3 khi thay đổi công suất đèn phát IR (thay đổi nguồn dòng cấp i) tại mỗi nồng độ CO_2 khảo sát. Để đánh giá tính ổn định và lặp lại, Hình 4.24 minh họa kết quả về tín hiệu điện áp trên nhạy (U_{out}) của cảm biến NDIR-MMs_3 (hoạt động tại $i = 110$ mA) biến thiên lặp lại theo các chu kỳ cấp khí CO_2 vào buồng đo với biến đổi nồng độ 0/5803 ppm. Kết quả này cho thấy tín hiệu U_{out} lặp lại tốt theo các chu kỳ cung cấp khí CO_2 , minh chứng cho tính ổn định và lặp lại tốt của cảm biến NDIR-MMs_3.

Bảng 4.8: Thông số cơ bản của hai cảm biến NDIR và NDIR-MMs_3.

Cảm biến	Dải đo	Độ nhạy (Abs tại 6000 ppm)	LoD (tại 6000 ppm)	SD (20 chu kỳ tại 5803 ppm)
NDIR	0–10.000 ppm	0,20134/ 1 ppm	0,1569 ppm	19,87
NDIR-MMs_3	0–10.000 ppm	0,20991/ 1 ppm	0,126 ppm	15,65

Để so sánh, các thông số của hai cảm biến NDIR và NDIR-MMs_3 được xác định, gồm dải đo, độ nhạy, giới hạn phát hiện (LoD), và độ lệch chuẩn (SD) được tính toán từ bộ số liệu khi khảo sát ở đèn phát IR được áp dòng $i = 110$ mA. Bảng 4.8 liệt kê các giá trị này của hai cảm biến NDIR và NDIR-MMs_3 khi độ nhạy và LoD được xác định qua hệ số hấp thụ tại nồng độ khí 6000 ppm, và Sd được tính cho 20 chu kỳ khi cảm biến đáp ứng tại 5803 ppm. Kết quả này cho thấy cảm biến NDIR-MMs_3 với lớp MMs đã cải thiện đặc trưng (độ nhạy, LoD và SD) so với cảm biến NDIR (không có lớp MMs).

Như vậy, trong luận án này cảm biến NDIR với cấu hình sử dụng MMs như một gương phản xạ lọc lựa bước sóng hồng ngoại cho vùng tương tác khí CO_2 đã chế tạo thử nghiệm và khảo sát các đặc trưng của điện áp lỗi ra và độ hấp thụ theo các nồng độ khí CO_2 khảo sát. Kết quả này đã bước đầu đã minh chứng cho tiềm năng chế tạo MMs áp dụng trong cảm biến NDIR.

4.3. Kết luận Chương 4

Trong chương này, bộ điều khiển hồng ngoại dựa trên các cấu trúc MMs được nghiên cứu và thiết kế cho áp dụng vào cảm biến NDIR đo khí CO₂ theo cấu hình phản xạ và truyền qua dải hẹp. Kết quả mô phỏng cho thấy cấu trúc theo kiểu truyền qua không chỉ đạt hiệu suất truyền cao và phổ cộng hưởng hẹp đặc trưng, mà còn duy trì tính ổn định nhờ không phải chịu nhiệt độ cao như các cấu trúc phát xạ, qua đó thể hiện tiềm năng ứng dụng thực tiễn trong các hệ thống cảm biến khí NDIR cho theo dõi tham số môi trường theo thời gian thực.

Việc sử dụng bộ điều khiển hồng ngoại dựa trên MMs có thể thay thế cho các bộ lọc quang học truyền thống góp phần đơn giản hóa thiết kế, giảm tiêu thụ năng lượng và mở ra hướng tích hợp vào cảm biến NDIR. Theo cấu hình phản xạ, lớp vật liệu MMs đã được chế tạo và áp dụng thử nghiệm vào trong cảm biến NDIR cho kết quả khả quan. Ngoài phát hiện CO₂, nguyên lý thiết kế có thể được mở rộng để phát hiện các khí hấp thụ ở các bước sóng khác nhau, thông qua điều chỉnh hình học cấu trúc.

KẾT LUẬN CHUNG

Luận án đã thực hiện nghiên cứu và đạt được một số kết quả về vật liệu biến hóa (MMs) để tích hợp vào cảm biến hấp thụ hồng ngoại không tán sắc (NDIR), như sau:

(II) Cảm biến NDIR-MMs theo cấu hình truyền qua:

(1) MMs được ghép sát trên bề mặt nguồn vi nhiệt để tạo ra nguồn phát hồng ngoại IR dải hẹp đặc trưng cho tương tác với khí CO₂. Cấu trúc ô cơ sở của MMs bao gồm các đĩa cộng hưởng dạng tròn - hốc cộng hưởng đã kích thích hai cộng hưởng từ mạnh tại bước sóng 3960 nm và 4197 nm, độ hấp thụ cao tương ứng đạt được là 96,3% và 94,1%. Cấu hình này được đề xuất tích hợp trên bề mặt nguồn vi nhiệt dạng zig-zag để tạo ra một nguồn phát hồng ngoại IR-MMs có thể giảm 35% mức tiêu thụ năng lượng so với linh kiện nguồn phát xạ hồng ngoại thông thường (theo kiểu phát xạ của vật đen tuyệt đối). Tiêu biểu, cường độ phát xạ của nguồn IR-MMs được tính toán cho kết quả là tại hai bước sóng nêu trên tương ứng là $1,75 \times 10^9$ và $1,8 \times 10^9 \text{ W} \cdot \text{sr}^{-1} \cdot \text{m}^{-3}$. Như vậy, nguồn phát xạ hồng ngoại IR-MMs đề xuất được đánh giá sẽ có khả năng nâng cao tính chọn lọc và tuổi thọ khi áp dụng vào cảm biến NDIR.

(2) Tấm MMs khe chữ thập (cross-shaped slot) được mô phỏng như bộ lọc quang thông dải hẹp để truyền qua chọn lọc ở bước sóng hấp thụ đặc trưng của khí CO₂ tại bước sóng 4,26 μm , độ truyền qua đạt trên 90%, độ rộng bán phổ tại cực đại khoảng 180 nm. Phân tích lý thuyết cho thấy tỷ lệ suy giảm tín hiệu đạt khoảng 3,8% tại điều kiện nguồn phát hồng ngoại tương ứng với nhiệt độ 573 K, đem đến khả năng phát hiện chọn lọc khí CO₂ hiệu quả. Kết quả này cho thấy tiềm năng áp dụng của bộ lọc quang từ MMs trong cảm biến NDIR, tiết kiệm năng lượng và độ chọn lọc cao.

(II) Cảm biến NDIR-MMs theo cấu hình phản xạ:

Cấu hình cảm biến NDIR được tích hợp lớp vật liệu biến hóa MMs theo cấu hình phản xạ. Trong trường hợp này, cấu trúc ô cơ sở của MMs là dạng Si-elip được chế tạo trên đế CaF₂ với độ dày $z = 0,8 \text{ mm}$. Ngoài ra, để đảm bảo độ phản xạ đạt giá trị tối ưu, trục lớn được định hướng với một góc $\theta = 20^\circ$ so với trục y. Cấu trúc elip này được sắp xếp theo chu kỳ với chiều dài $x = 4,2 \text{ }\mu\text{m}$ và chiều rộng $y = 2,9 \text{ }\mu\text{m}$. Lớp MMs đã được chế tạo và áp dụng vào trong cảm biến NDIR, các kết quả đo cho thấy độ hấp thụ (dùng để đánh giá độ nhạy của

cảm biến) tăng khi có thêm lớp MMs. Kết quả khảo sát cho thấy vai trò của MMs đã cải thiện các đặc trưng của cảm biến NDIR trong dải nồng độ 0–10.000 ppm, với độ nhạy tăng từ 0,20134 đến 0,20991/ 1ppm (tính theo độ hấp thụ *Abs* tại nồng độ 6000 ppm), LoD thay đổi giảm từ 0,1569 đến 0,126 ppm (khảo sát tại 6000 ppm), và SD thay đổi giảm từ 19,87 đến 15,65 ppm.

DANH MỤC CÔNG TRÌNH LIÊN QUAN ĐẾN LUẬN ÁN

* Tạp chí thuộc danh mục SCIE

1. **Phạm Duy Tân**, Duong Thi Ha, Bui Son Tung, Bui Xuan Khuyen, Do Thuy Chi, Vu Dinh Lam, Liangyao Chen, Haiyu Zheng and Youngpak Lee, “*Recoverable Broadband Absorption Based on Ultra-Flexible Meta-Surfaces*”, Crystals **12**, 1817 (2022).
2. Bui Xuan Khuyen, Nguyen Van Ngoc, Dinh Ngoc Dung, Nguyen Phon Hai, Nguyen Thanh Tung, Bui Son Tung, Vu Dinh Lam, Ho Truong Giang, **Phạm Duy Tân**, Liangyao Chen, Haiyu Zheng, and YoungPak Lee, “*Dual-band infrared metamaterial perfect absorber for narrow-band thermal emitters*”, Journal of Physics D: Applied Physics **57** (28), 285501 (2024).
3. Bui Xuan Khuyen, **Phạm Duy Tân**, Bui Son Tung, Nguyen Phon Hai, Pham Dinh Tuan, Do Xuan Phong, Do Khanh Tung, Nguyen Hai Anh, Ho Truong Giang, Nguyen Phuc Vinh, Nguyen Thanh Tung, Vu Dinh Lam, Liangyao Chen, YoungPak Lee, “*Numerical Optimization of Metamaterial-Enhanced Infrared Emitters for Ultra-Low Power Consumption*”, Photonics **12** (6), 583 (2025).

* Tạp chí Quốc gia

4. Trịnh Mỹ Anh, Đặng Lê Gia Hân, Mai Ngọc Linh, **Phạm Duy Tân**, Bùi Xuân Khuyến, Hồ Trường Giang, “*Nghiên cứu chế tạo cảm biến NDIR đo khí CO₂ dải nồng độ thấp để áp dụng cho điều hòa không khí trong nhà giảm tác động xấu đến sức khỏe con người*”, Tạp chí Nghiên cứu KH&CN Quân sự **77**, 120-127 (2022).

* Kỷ yếu Hội nghị Quốc gia

5. **Phạm Duy Tân**, Đinh Ngọc Dũng, Nguyễn Văn Ngọc, Vũ Thị Hồng Hạnh, Soulima Khamasath, Bùi Sơn Tùng, Bùi Xuân Khuyến, Hồ Trường Giang, Vũ Đình Lãm, “*Nghiên cứu mô phỏng vật liệu biến hóa phát xạ hồng ngoại ứng dụng cho cảm biến khí CO₂*”, Hội nghị Vật lý Chất rắn và Khoa học Vật liệu Toàn quốc lần thứ 12 (SPMS 2021), 13-15/8, Thành phố Cần Thơ, Việt Nam, Quyển 2, 640-644 (2022), ISBN: 978-604-316-838-9.
6. **Phạm Duy Tân**, Đặng Tuấn Đạt, Phạm Quang Ngân, Phạm Đình Tuấn, Nguyễn Ngọc Khải, Bùi Xuân Khuyến, Hồ Trường Giang, Vũ Đình Lãm, “*Tích hợp ESP32 vào bo mạch cho cảm biến NDIR đo khí CO₂ để ứng dụng nền tảng IoT trong nuôi trồng nấm ăn*”, Hội nghị Vật lý Chất rắn và Khoa học Vật liệu Toàn quốc lần thứ 13 (SPMS 2023), 5-7/11, Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam, Quyển 1, 315-319 (2023), ISBN: 978-604-471-702-9.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Tubiello F.N., Karl K., Flammini A., Gütschow J., Obli-Laryea G., Conchedda G., Pan X., Qi S.Y., Heiðarsdóttir H.H., Wanner N., Quadrelli R., Rocha S.M.R., Benoit P., Hayek M., Sandalow D., Mencos Contreras E., Rosenzweig C., Rosero Moncayo J., Sánchez M.J.S., Srivastava N., and Rossi S., 2021, Greenhouse gas emissions from food systems: Building the evidence base, *Environmental Research Letters*, 16(6), pp. 065007.
2. FAO, 2022, Greenhouse gas emissions from agrifood systems – Global, regional and country trends, 2000–2020, *FAOSTAT Analytical Briefs*, No. 50, 12 pages.
3. FAO, 2021, The share of agri-food systems in total greenhouse gas emissions – Global, regional and country trends 1990–2019, *FAOSTAT Analytical Briefs*, No. 31, 12 pages.
4. Bouwman A.F., Boumans L.J.M., and Batjes N.H., 2002, Global estimates of gaseous emissions of NH₃, NO and N₂O from agricultural land, *FAO Report*.
5. Zhang Y., Liu X.J., Xu J., Wei J., Zhang F.S., and Wu L., 2021, Exploring global changes in agricultural ammonia emissions and their contribution to nitrogen deposition since 1980, *Proceedings of the National Academy of Sciences (PNAS)*, 118(21), pp. e2121998119.
6. Wadgaonkar B.C., Acharyya S.G., Bhattacharya S., Mukherji S., and Tiwary C.S., 2019, A metamaterial-based NDIR CO₂ gas sensor, *Materials Research Express*, 6(10), pp. 105075.
7. Kim D. et al., 2014, Highly sensitive infrared detection using resonant metamaterials, *Optics Express*, 22(16), pp. 19145–19155.
8. Bass M. et al., 2010, Handbook of Optics (Vol. 2), McGraw-Hill.
9. Costa M.B. et al., 2018, Infrared absorption spectroscopy for gas detection: NDIR principles and applications, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 268, pp. 42–50.
10. Guo L. et al., 2019, Development of low-cost NDIR sensor modules, *Sensors*, 19(7), pp. 1536.

11. Farmer K.R. et al., 2020, Challenges in designing agricultural gas sensors, *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 68(3), pp. 634–641.
12. Le T. et al., 2021, Development of low-power and compact CO₂ sensors for smart farming, *IEEE Internet of Things Journal*, 8(12), pp. 9875–9884.
13. Feng S. et al., 2019, Review on smart gas sensing technology, *Sensors*, 19(17), pp. 3760.
14. Ou H., Lu F., Xu Z., and Lin Y.-S., 2020, Terahertz Metamaterial with multiple resonances for biosensing application, *Nanomaterials*, 10, pp. 1038.
15. Huang W., Xu R., Lin Y.-S., and Chen C.-H., 2020, Three-dimensional pyramid metamaterial with tunable broad absorption bandwidth, *AIP Advances*, 10(3), pp. 035125.
16. Liang Z., Wen Y., Zhang Z., Liang Z., Xu Z., and Lin Y.-S., 2019, Plasmonic metamaterial using metal-insulator-metal nanogratings for high-sensitive refraction index sensor, *Results in Physics*, 15, pp. 102602.
17. Xu R., Liu X., and Lin Y.-S., 2019, Tunable ultra-narrowband terahertz perfect absorber by using metal-insulator-metal microstructures, *Results in Physics*, 13, pp. 102176.
18. Luo J. and Lin Y.-S., 2019, High-efficiency of infrared absorption by using composited metamaterial nanotubes, *Applied Physics Letters*, 114(5), pp. 051601.
19. Xu Z., Xu R., Sha J., Zhang B., Tong Y., and Lin Y.-S., 2018, Infrared metamaterial absorber by using chalcogenide glass material with a cyclic ring-disk structure, *OSA Continuum*, 1(2), pp. 573–580.
20. Xu R. and Lin Y.-S., 2018, Characterizations of reconfigurable infrared metamaterial absorbers, *Optics Letters*, 43(19), pp. 4783–4786.
21. Xu R., Luo J., Sha J., Zhong J., Xu, Tong Y., and Lin Y.-S., 2018, Stretchable IR metamaterial with ultra-narrowband perfect absorption, *Applied Physics Letters*, 113(10), pp. 101907.

22. Lin Y.-S. and Chen W., 2018, Perfect meta-absorber by using pod-like nanostructures with ultra-broadband, omnidirectional, and polarization-independent characteristics, *Scientific Reports*, 8, pp. 7150.
23. Landy N.I., Sajuyigbe S., Mock J.J., Smith D.R., and Padilla W.J., 2008, Perfect metamaterial absorber, *Physical Review Letters*, 100(20), pp. 207402.
24. Watts C.M., Liu X., and Padilla W.J., 2012, Metamaterial electromagnetic wave absorbers, *Advanced Materials*, 24, pp. OP98–OP120.
25. Soukoulis C.M. and Wegener M., 2011, Past achievements and future challenges in the development of three-dimensional photonic metamaterials, *Nature Photonics*, 5(9), pp. 523–530.
26. Chen H.-T., 2012, Interference theory of metamaterial perfect absorbers, *Optics Express*, 20(7), pp. 7165–7172.
27. Alaei R., Farhat M., Rockstuhl C., and Lederer F., 2012, A perfect absorber made of a graphene micro-ribbon metamaterial, *Optics Express*, 20(27), pp. 28017–28024.
28. Livingood A. et al., 2021, Filterless Nondispersive Infrared Sensing using Narrowband Infrared Emitting Metamaterials, *ACS Photonics*, 8(2), pp. 472–480.
29. Popa D. and Udrea F., 2019, Towards Integrated Mid-Infrared Gas Sensors, *Sensors*, 19(9), 2076.
30. Dao T.D., Ishii S., Doan A.T., Wada Y., Ohi A., Nabatame T., Saitoh K. and Nagao T., 2019, An On-Chip Quad-Wavelength Pyroelectric Sensor for Spectroscopic Infrared Sensing, *Advanced Science*, 6(20), 1900579.
31. Doan A.T. et al., 2019, A MEMS-Based Quad-Wavelength Hybrid Plasmonic–Pyroelectric Infrared Detector, *Micromachines*, 10(6), pp. 413.
32. Vo Thach Son, Tran Viet Luc, Tran Kim Lan, Phan Quoc Pho, and Nguyen Tuyet Nga, 2001, CO₂ sensor using perovskite Oxide/NASICON structure, *Proceedings of the 4th German-Vietnamese Seminar on Physics and Engineering*, Dresden - Germany, pp. 153-155.

33. Nguyen Van Hieu, Nguyen Duc Khoang, Do Dang Trung, Le Duc Toan, Nguyen Van Duy, and Nguyen Duc Hoa, 2013, Comparative study on CO₂ and CO sensing performance of LaOCl-coated ZnO nanowires, *Journal of Hazardous Materials*, 244-245, pp. 209-216.
34. Hồ Trường Giang, 2021, Báo cáo đề tài "Nghiên cứu, thiết kế, chế tạo các cảm biến để xây dựng hệ thống thiết bị đo nồng độ khí thải và điều khiển quá trình đốt cháy nhiên liệu", mã số KC05.13/16-20.
35. Hale J., Stehle G., and Bals I., 1992, Gas analysis using a thermal conductivity method, *Sensors and Actuators B*, 7, pp. 665-671.
36. Guth Ulrich, Shuk Pavel, and McGuire Chad, 2020, Gas sensing technologies in combustion: A comprehensive review, *Journal of Electrochemical Science and Engineering*, 10, pp. 103-110.
37. Cretescu Igor, Lutic Doina, and Manea Liliana Rosemarie, 2017, Electrochemical sensors for monitoring of Indoor and outdoor air pollution, *Electrochemical Sensors Technology*, Chapter 4, pp. 65–84.
38. Hodgkinson Jane and Tatam Ralph P., 2013, Optical gas sensing: a review, *Measurement Science and Technology*, 24, pp. 012004.
39. <https://senseair.com/products/>.
40. <https://edaphic.com.au/carbon-dioxide/>.
41. <https://www.valarm.net/blog/essential-elements-for-your-mushroom-monit>.
42. <https://www.valarm.net/blog/essential-elements-for-your-mushroom-monitoring-needs-remotely-monitoring-temperature-humidity-air-quality-co2-soil-moisture-of-your-mushrooms-with-industrial-iot-sensors/>.
43. <https://www.rotronic.com/de-ch/>.
44. Edinburgh Instruments, 2012, Non-Dispersive Infrared Sensing Technology, *Technical Note*.
45. <https://www.azosensors.com/article.aspx?ArticleID=544>.

46. Lochbaum A., Dorodnyy A., Koch U., Koepfli S.M., Volk S., Fedoryshyn Y., Wood V., and Leuthold J., 2020, Compact mid-infrared gas sensing enabled by an all-metamaterial design, *Nano Letters.*, 20, pp. 4169–4176.
47. Xu R. and Lin Y.-S., 2020, Tunable infrared metamaterial emitter for gas sensing application, *Nanomaterials*, 10, pp. 1442.
48. Miyazaki H.T., Kasaya T., Iwanaga M., Choi B., Sugimoto Y., and Sakoda K., 2014, Dual-band infrared metasurface thermal emitter for CO₂ sensing, *Applied Physics Letters*, 105, pp. 121107.
49. Khuyen B.X., Ngoc N.V., Dung D.N., Hai N.P., Tung N.T., Tung B.S., Lam V.D., Giang H.T., Tan P.D., Chen L., Zheng H., and Lee Y.P., 2024, Dual-band infrared metamaterial perfect absorber for narrow-band thermal emitters, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 57, pp. 285501.
50. Khuyen B.X., Tan P.D., Tung B.S., Hai N.P., Tuan P.D., Phong D.X., Tung D.K., Anh N.H., Giang H.T., Vinh N.P., Tung N.T., Lam V.D., Chen L., and Lee Y.P., 2025, Numerical optimization of metamaterial-enhanced infrared emitters for ultra-low power consumption, *Photonics*, 12(6), pp. 583.
51. Wu X.C., Xu X., Cai C., Wu H., and Bi G., 2023, Non-polarized and ultra-narrow band filter in MIR based on multilayer metasurface, *Heliyon*, 9(11), pp. e21303.
52. Tan H., Cadusch J.J., Meng J., and Crozier K.B., 2022, Genetic optimization of mid-infrared filters for a machine learning chemical classifier, *Optics Express*, 30(11), pp. 18330–18344.
53. Pitts D. and Sissom L.E., 2011, *Schaum's Outline of Heat Transfer*, 2nd ed., McGraw-Hill.
54. Livingood A., Nolen J.R., Folland T.G., Potechin L., Lu G., Criswell S., Maria J.-P., Shelton C.T., Sachet E., and Caldwell J.D., 2021, Filterless nondispersive infrared sensing using narrowband infrared emitting metamaterials, *ACS Photonics*, 8, pp. 1477–1486.
55. Paun C., Tomescu R., Parvulescu C., Ionescu O., Gavrilă D.E., and Cristea D., 2021, Microheater optimized for the integration with

- metasurface-based IR sources for gas sensing application, *Romanian Journal of Information Science and Technology*, 24, pp. 201–212.
56. Mason J.A., Smith S., and Wasserman D., 2011, Strong Absorption and Selective Thermal Emission from a Midinfrared Metamaterial, *Applied Physics Letters*, 98, pp. 241105.
 57. Lochbaum A., Fedoryshyn Y., Dorodnyy A., Koch U., Hafner C., and Leuthold J., 2017, On-Chip Narrowband Thermal Emitter for Mid-IR Optical Gas Sensing, *ACS Photonics*, 4(6), pp. 1371–1380.
 58. Li Kunye, Liang Yuhao, Liu Yuxin, and Lin Yu-Sheng, 2025, Tunable MEMS-based meta-absorbers for nondispersive infrared gas sensing applications, *Microsystems & Nanoengineering*, 11, pp. 2.
 59. He Z., Fang D., and Yi Y., 2025, Design of a Tunable Metamaterial Absorption Device with an Absorption Band Covering the Mid-Infrared Atmospheric Window, *Photonics*, 12, pp. 148.
 60. Argirusis N., Achilleos A., Alizadeh N., Argirusis C., and Sourkouni G., 2025, IR Sensors, Related Materials, and Applications, *Sensors*, 25, pp. 673.
 61. Liu Yixin, Li Chenxia, Fang Bo, Chen Liang, Xu Jianfeng, Liu Fuhai, Xu Lizhen, Li Xiao, Tang Ying, Hong Zhi, and Jing Xufeng, 2024, Research Progress in Tunable Metamaterial Absorbers, *Advanced Photonics Research*, 5, pp. 2300258.
 62. Meng J., Balendhran S., Sabri Y. et al., 2024, Smart mid-infrared metasurface microspectrometer gas sensing system, *Microsystems & Nanoengineering*, 10, pp. 74.
 63. Li D., Wu X., Chen Z. et al., 2025, Surface-enhanced spectroscopy technology based on metamaterials, *Microsystems & Nanoengineering*, 11, pp. 60.
 64. Wang Shudong et al., 2025, Design and fabrication of a three-dimensional folded MEMS infrared emitter for photoacoustic spectroscopy gas sensor, *AIP Advances*, 15, pp. 075311.

65. Ankit, Kishor Kamal, and Sinha Ravindra Kumar, 2024, Design and analysis of a far-infrared metamaterial perfect absorber with sensing applications, *Applied Optics*, 63, pp. 8994-9001.
66. Zhang Wenqian et al., 2025, Long-wavelength infrared metamaterial absorber with polarization and angle insensitivity using compact hybrid cylindrical structures, *Nanoscale*, 17, pp. 3353-3359.
67. Li C. et al., 2025, Large-Area near infrared metamaterial emitters based on Si nanodisk arrays, *Infrared Physics & Technology*, 147, pp. 105827.
68. Lan Huiping, Ge Jiahao, Li Dong, Zhang Yaqiang, Wei Ziming, Zhou Yongjin, Chen Shula, Chang Hao, and Dong Hongxing, 2025, Transparent and Tunable Radar-Infrared Bi-Stealth Metamaterial Based on Water and Metallic Mesh for Optical Window Applications, *Advanced Materials Technologies*, 10(15), pp. 2500265.
69. Wang Xinyu, Liang Zhongzhu, Yang Fuming, Shi Xiaoyan, Li Jinhuan, Dong Yongjun, Liu Weizhen, Jia Yan, Sun Wenwen, Wu Zhe, Chen Xiangtao, and Guo Siyu, 2025, Chain-type multi-mode polarization-sensitive metamaterial absorber in infrared band, *Results in Physics*, 68, pp. 108105.
70. Han Mengqi et al., 2025, A hybrid metamaterial with broadband radar cross section reduction and low infrared emissivity for multispectral stealth, *Journal of Applied Physics*, 137, pp. 153106.
71. Sun H.T., Jun W., Zhu R.C., Chu Z.T., Fu X.M., Jia Y.X., Cui Y.N., Han Y.J., Qiu T.S., Sui S., Wang J.F., and Qu S.B., 2024, Noninvasive inset-integrated meta-atom for achieving single-layer metasurface simultaneously with coded microwave reflectivity and digitalized infrared emissivity, *Nanophotonics*, 13, pp. 3113–3122.
72. Zhong S.M., Jiang W., Xu P.P., Liu T., Huang J., and Ma Y.G., 2017, A radarinfrared bi-stealth structure based on metasurfaces, *Applied Physics Letters*, 110, pp. 063502.
73. Liu S.J., Zhu F.J., Huang J.G., Zhao H., Han M.Q., Fan K.B., and Chen P., 2024, Fast inverse design of microwave and infrared Bi-stealth

- metamaterials based on equivalent circuit model, *Journal of Applied Physics*, 136, pp. 113106.
74. Zhang W.B., Xu C.L., Cheng A.N., Fan Q., Wang J.F., and Qu S.B., 2022, Infrared stealth and the flexible metasurface of radar backscattering suppression, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 55, pp. 465102.
 75. Wang Y.D., Wu G.Z., Wang Y.B., Jia Q.Q., and Liu J.G., 2023, Single-layer metasurface: Optical transparency, microwave scattering reduction and infrared emissivity decrease, *Optical Materials*, 135, pp. 113380.
 76. Chang Q., Ji J.Z., Chen K., Wu W.X., and Ma Y.P., 2024, Transparent and ultrathin flexible checkerboard metasurface for radar–infrared bi-stealth, *Sensors*, 24, pp. 1531.
 77. Wang Jiao, 2025, Infrared band ultra-wideband metamaterial absorption device based on cylindrical multiscale resonator, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 27, pp. 13645-13652.
 78. Meng Zhen, Liu Dongqing, Wang Jiafu, Pang Yongqiang, Liu Tianwen, Jia Yan, Gui Boheng, and Cheng Haifeng, 2024, Metamaterial-inspired infrared electrochromic devices with wideband microwave absorption for multispectral camouflage, *Photonics Research*, 12, pp. 2435-2446.
 79. Hou Shicong et al., 2025, On-Chip Metamaterial-Enhanced Mid-Infrared Photodetectors with Built-In Encryption Features, *Advanced Science*, 12(9), pp. 2415518.
 80. Wang F., Liu H., Ma T., Qian M., Liu Y., 2025, Sensor Based on Infrared Dual-Band Polarization Insensitive Metamaterial Absorber, *Photonic Sensors*, 15, pp. 250322.
 81. Tung Nguyen Thanh and Tanaka Takuo, 2018, Characterizations of an infrared polarization-insensitive metamaterial perfect absorber and its potential in sensing applications, *Photonics and Nanostructures - Fundamentals and Applications*, 28, pp. 100-105.
 82. Ren Feifei, Gu Jinxin, Wei Hang, Xu Gaoping, Zhao Jiupeng, Dou Shuliang, and Li Yao, 2021, Effect of Unit Cell Shape on Switchable Infrared Metamaterial VO₂ Absorbers/Emitters, *Research*, pp. 9804183.

83. Long L., Taylor S., Ying X., and Wang L., 2019, Thermally-switchable spectrally-selective infrared metamaterial absorber/emitter by tuning magnetic polariton with a phase-change VO₂ layer, *Materials Today Energy*, 13, pp. 214–220.
84. Sun R., Zhou P., Ai W., Liu Y., Li Y., Jiang R., Li W., Weng X., Bi L., and Deng L., 2019, Broadband switching of mid-infrared atmospheric windows by VO₂-based thermal emitter, *Optics Express*, 27(8), pp. 11537–11546.
85. Wang H., Yang Y., and Wang L., 2014, Switchable wavelength-selective and diffuse metamaterial absorber/emitter with a phase transition spacer layer, *Applied Physics Letters*, 105(7), pp. 071907.
86. Zhen G., Zhou P., Luo X., Xie J., and Deng L., 2017, Modes coupling analysis of surface plasmon polaritons based resonance manipulation in infrared metamaterial absorber, *Scientific Reports*, 7(1), pp. 46093.
87. Yang L., Zhou P., Huang T., Zhen G., Zhang L., Bi L., Weng X., Xie J., and Deng L., 2017, Broadband thermal tunable infrared absorber based on the coupling between standing wave and magnetic resonance, *Optical Materials Express*, 7(8), pp. 2767–2776.
88. Yadav Radha and Chowdhury Rajib, 2024, Impact of unit cell variation on visible spectrum multiband metamaterial absorbers, *2024 IEEE Microwaves, Antennas, and Propagation Conference (MAPCON)*, pp. 1-5.
89. Li Kunye, Liang Yuhao, and Lin Yu-Sheng, 2024, MEMS-based meta-emitter with actively tunable radiation power characteristic, *Discover Nano*, 19, pp. 1.
90. Liang Shuhui, Guan Huan, Zhang Hainan, Han Xiangge, and Gao Jia, 2024, Intelligent Off/On switchable electromagnetic wave absorbing material based on VO₂ nanowires, *Chemical Engineering Journal*, 489, pp. 151025.
91. <https://www.3ds.com/products/simulia/cst-studio-suite>.
92. <https://www.comsol.com/>.

93. Yu S., Wang S., Lu M., and Zuo, 2017, A novel polyimide based micro heater with high temperature uniformity, *Sensors and Actuators A: Physical*, 257, pp. 58.
94. Dennery P. and Krzywicki A., 1995, Mathematics for physicists, *Dover Publications*, pp. 324-325.
95. Miyazaki H.T., Kasaya T., Iwanaga M., Choi B., Sugimoto Y., and Sakoda K., 2014, Dual-band infrared metasurface thermal emitter for CO₂ sensing, *Applied Physics Letters*, 105, pp. 12.
96. Duan J., Hao J., Wang J., Qu Z., and Zhang B., 2023, Transparent radar-infrared stealth based on multilayer metamaterial structures, *Physica Scripta*, 98, pp. 055512.
97. Rytov S.M., 1959, Theory of Electric Fluctuations and Thermal Radiation, *Air Force Cambridge Research Center*.
98. Li Y., Li W., Han T., Zheng X., Li J., Li B., Fan S., and Qiu C.W., 2021, Transforming heat transfer with thermal metamaterials and devices, *Nature Reviews Materials*., 6, pp. 6.
99. Mihai L., Mihalcea R., Tomescu R., Paun C., and Cristea D., 2022, Selective Mid-IR Metamaterial-Based Gas Sensor System: Proof of Concept and Performances Tests, *Nanomaterials*, 12, pp. 1009.
100. Xu R. and Lin Y.-S., 2020, Tunable infrared metamaterial emitter for gas sensing application, *Nanomaterials*, 10, pp. 1442.
101. Pitts, D.; Sissom, L.E. *Schaum's Outline of Heat Transfer*, second ed., 2011, *McGraw Hill*, New York.
102. Wang J., Carson J.K., North M.F., and Cleland D.J., 2008, A new structural model of effective thermal conductivity for heterogeneous materials with co-continuous phases, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51, pp. 2389–2397.
103. Xue Q., 2003, Model for effective thermal conductivity of nanofluids, *Physics Letters A*, 307, pp. 313–317.
104. Jia X., Roels J., Baets R., and Roelkens G., 2019, On-chip non-dispersive infrared CO₂ sensor based on an integrating cylinder, *Sensors*, 19, pp. 426.

105. Yu S., Wang S., Lu M., and Zuo L., 2017, A novel polyimide based micro heater with high temperature uniformity, *Sensors and Actuators A: Physical*, 257, pp. 58–64.
106. Sanowitz S., 2016, Radiative properties of silicon related materials, Thesis, *New Jersey Institute of Technology*.
107. Okada T., Ishige R., and Ando S., 2016, Analysis of thermal radiation properties of polyimide and polymeric materials based on ATR-IR spectroscopy, *Journal of Photopolymer Science and Technology*, 29, pp. 251–254.
108. Raghu O. and Philip J., 2006, Thermal properties of paint coatings on different backings using a scanning photo acoustic technique, *Measurement Science and Technology*, 17, pp. 2945.
109. Dewitt D.P., Bergman T.L., and Lavine A.S., 2006, Fundamentals of Heat and Mass Transfer, sixth ed., *John Wiley*.
110. Dibbern U., 1990, A substrate for thin-film gas sensors in microelectronic technology, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2(1), pp. 63–70.
111. Simon I., Bârsan N., Bauer M., and Weimar U., 2001, Micromachined metal oxide gas sensors: Opportunities to improve sensor performance, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 73(1), pp. 1–2.
112. Bhattacharyya P., Sen S., Chatterjee A., and Saha H., 2005, Design of the optimum microheater for smart MEMS gas sensor, *Proceedings of ISSS 2005 International Conference on Smart Materials, Structures and Systems*, Bangalore, India, pp. 486-491.
113. Kozlov A.G., 2002, Analytical modelling of steady-state temperature distribution in thermal microsensors using Fourier method: Part 1. Theory, *Sensors and Actuators A: Physical*, 101(3), pp. 283–298.
114. Tang Y., Zhao Y., and Liu H., 2022, Room-Temperature Semiconductor Gas Sensors: Challenges and Opportunities, *ACS Sensors*, 7(12), pp. 3582-3597.
115. Dey A., 2018, Semiconductor metal oxide gas sensors: A review, *Materials Science and Engineering: B*, 229, pp. 206-217.

116. Krishna K.G., Parne S., Pothukanuri N., Kathirvelu V., Gandhi S., and Joshi D., 2022, Metamaterial-based highly sensitive microwave sensor for the detection of lung cancer cells, *Sensors and Actuators A: Physical*, 341, pp. 113578.
117. Khan S., Wasfi A., Mushtaq M., Awwad F., and Tit N., 2022, Transition-metal single atom catalyst embedded in C₂N for toxic-gas reduction reaction and selective gas-sensing application: Atomic-scale study, *Applied Surface Science*, 599, pp. 154037.
118. Xu M., Peng B., Zhu X., and Guo Y., 2022, Multi-Gas Detection System Based on Non-Dispersive Infrared (NDIR) Spectral Technology, *Sensors*, 22, pp. 836.
119. Hodgkinson J. and Tatam R.P., 2013, Optical gas sensing: a review, *Measurement Science and Technology*, 24(1), pp. 012004
120. Li J., Yan H., Dang H., and Meng F., 2021, Structure design and application of hollow core microstructured optical fiber gas sensor: A review, *Optics and Laser Technology*, 135, pp. 106658.
121. El Shamy R.S., Khalil D., and Swillam M.A., 2020, Mid Infrared Optical Gas Sensor Using Plasmonic Mach-Zehnder Interferometer, *Scientific Reports*, 10, pp. 1293.
122. Stanley R., 2012, Plasmonics in the mid-infrared, *Nature Photonics*, 6, pp. 409–411.
123. Kumar P., Morawska L., Martani C., Biskos G., Neophytou M., Di Sabatino S., Bell M., Norford L., and Britter R., 2015, The rise of low-cost sensing for managing air pollution in cities, *Environment International*, 75, pp. 199–205.
124. Lochbaum A., Dorodnyy A., Koch U., Koepfli S.M., Volk S., Fedoryshyn Y., Wood V., and Leuthold J., 2020, Compact mid-infrared gas sensing enabled by an all-metamaterial design, *Nano Letters*, 20(6), pp. 4169–4176.
125. Karaduman I., Yıldız D.E., Sincar M.M., and Acar S., 2014, UV light activated gas sensor for NO₂ detection, *Materials Science in Semiconductor Processing*, 28, pp. 43–47.

126. Suematsu K., Shin Y., Hua Z., Yoshida K., Yuasa M., Kida T., and Shimano K., 2014, Nanoparticle Cluster Gas Sensor: Controlled Clustering of SnO₂ Nanoparticles for Highly Sensitive Toluene Detection, *ACS Applied Materials & Interfaces*, 6(7), pp. 5319-5326.
127. Hodgkinson J. and Tatam R.P., 2013, Optical gas sensing: a review, *Measurement Science and Technology*, 24(1), pp. 1-60.
128. Han J.H., Han S.W., Kim S.M., Pak J.J., and Moon S., 2013, High detection performance of NDIR CO₂ sensor using stair-tapered reflector, *IEEE Sensors Journal*, 13(8), pp. 3090–3097.
129. Salim M.R., Yaacob M., Marcus T.C.E., David M., Hussin N., Ibrahim M.H., Azmi A.I., Ngajikin N.H., Dooly G., and Lewis E., 2015, An optical spectroscopic based reflective sensor for CO₂ measurement with signal to noise ratio improvement, *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, 17(5-6), pp. 519-525.
130. Feng L., Liu Y., Wang Y., Zhou H., Lu Z., and Li T., 2024, Ultra-compact dual-channel integrated CO₂ infrared gas sensor, *Microsystems & Nanoengineering*, 10, pp. 151.
131. Matushechkina M., Evlyukhin A.B., Malureanu R., Zenin V.A., Yezekyan T., Laurynenka A., Bozhevolnyi S.I., Chichkov B.N., and Heurs M., 2025, Design and experimental demonstration of wavelength-selective metamirrors on sapphire substrates, *Advanced Photonics Research*, 6(3), pp. 2400116.
132. Matushechkina M., Evlyukhin A.B., Zenin V.A., Chichkov B.N., and Heurs M., 2024, Perfect mirror effects in metasurfaces of silicon nanodisks at telecom wavelength, *Advanced Optical Materials*, 12(18), pp. 2400191.
133. Zhang Y., Liang Z., Meng D., Shi X., Qin Z., Yang F., Zhang L., Qin Y., Lv J., Wang X., Xu X., and Yu H., 2020, A long wavelength infrared narrow-band reflection filter based on an asymmetric hexagonal structure, *Optics Communications*, 475, pp. 126264.

134. Dhara A., Choudhuri M., Roy A.B., Banerjee P., and Kundu A., 2018, Metamaterial mirror as back reflector for thin silicon solar cell application, *Materials Today: Proceedings*, 5(3), pp. 9635–9640.
135. Zhang Y., Zhao Z., Xia Z., Wu H., Guo P., and Li L., 2024, Near-infrared metamaterials for tunable wide-band perfect reflection, *Optical Materials*, 152, pp. 115450.
136. Moitra P., Slovick B.A., Li W., Kravchenko I.I., Briggs D.P., Krishnamurthy S., and Valentine J., 2015, Large-scale all-dielectric metamaterial perfect reflectors, *ACS Photonics*, 2(6), pp. 692–698.
137. Slovick B., Yu Z.G., Berding M., and Krishnamurthy S., 2013, Perfect dielectric-metamaterial reflector, *Physical Review B*, 88(16), pp. 165116.
138. Chen X., Grzegorczyk T.M., Wu B.-I., Pacheco J. Jr., and Kong J.A., 2004, Robust method to retrieve the constitutive effective parameters of metamaterials, *Physical Review E*, 70(1), pp. 016608.
139. Smith D.R., Vier D.C., Koschny T., and Soukoulis C.M., 2005, Electromagnetic parameter retrieval from inhomogeneous metamaterials, *Physical Review E*, 71(3), pp. 036617.
140. Bergman T.L., Incropera F.P., Dewitt D.P., and Lavine A.S., 2011, Fundamentals of heat and mass transfer, *John Wiley & Sons*.
141. Popa D., Ali S.Z., Hopper R., Dai Y., and Udrea F., 2019, Smart CMOS mid-infrared sensor array, *Optics Letters*, 44(17), pp. 4111–4114.
142. Wu X.C., Xu X., Cai C., Wu H., and Bi G., 2023, Non-polarized and ultra-narrow band filter in MIR based on multilayer metasurface, *Heliyon*, 9(11), pp. e21303.
143. Pang Y. Q., Zhou Y. J., and Wang J., 2011, Equivalent circuit method analysis of the influence of frequency selective surface resistance on the frequency response of metamaterial absorbers, *Journal of Applied Physics*, 110, pp. 023704.