CỘNG HÒA XÃ HỘI CHỦ NGHĨA VIỆT NAM
Độc lập – Tự do – Hạnh phúc

BẢN THÔNG TIN VỀ NHỮNG ĐÓNG GÓP MỚI CỦA LUẬN ÁN

Họ và tên NCS: **HUỲNH THỊ PHƯƠNG LOAN**
Tên đề tài luận án: **"Nghiên cứu cấu trúc và tính chất của hệ phức nhóm 13 diyl và 14 ylidone bằng tính toán hóa lượng tử"**
Ngành: Hóa lý thuyết và Hóa lý Mã số: 9.44.01.19
Người hướng dẫn: 1. PGS.TS. Nguyễn Thị Ái Nhung
2. PGS.TS. Hoàng Văn Đức
Cơ sở đào tạo: Trường Đại học Khoa học – Đại học Huế
Thời gian thực hiện luận án: Từ năm 2016 đến năm 2020

Những đóng góp mới của luận án:

1. Tập hợp dữ liệu về cấu trúc với trạng thái năng lượng thấp nhất của các hệ phức tạo bởi các phối tử tự do và hợp chất: YCp* với Y = B – Tl; nhóm 13 diyl và nhóm 14 ylidone $X(YCp^*)_2$ với Y = B – Tl, X = C – Pb; nhóm 14 ylidone và tetrylene: $X(PR_3)_2$, $(NHX)_2$ với X = C – Pb; và hợp chất $Mo(CO)_5$, $W(CO)_5$, AlH^{2+}, $Ni(CO)_2$, AgCl, ...
2. Kết quả về sự biến thiên năng lượng phân ly liên kết khi xét DFT-D3 ($kcal.mol^{-1}$) và không xét DFT-De ($kcal.mol^{-1}$) đến tương tác phân tán đối với hệ phức nhóm 13 diyl YCp* và phức ylidone $X(YCp^*)_2$ tăng dần theo chiều tăng của nguyên tử khối Y và X. Tuy nhiên, khi so sánh hệ ylidone và tetrylene kết hợp với $Ni(CO)_2$, cho thấy sự tương tự nhau trong xu hướng năng lượng phân ly liên kết, giảm dần khi nguyên tử khối của X càng tăng.
3. Kết quả về dạng năng lượng điển hình (năng lượng tương tác nội tại, năng lượng phân ly liên kết, năng lượng tương tác tĩnh điện, ...), đồ thị mô phỏng các mẫu orbital liên kết hóa trị (NOCV pairs) mô tả trạng thái dịch chuyển điện tử giữa các mảnh của phức chất và so sánh các hệ phức về cấu trúc, tính chất.
4. Đề nghị cơ chế hình thành cấu trúc và tính chất của các hệ phức nghiên cứu.
5. Kết quả mô phỏng ức chế protein ACE2 và 6LU7 của SARS-CoV-2 bằng hệ phức AgCl-NHX và $(AgCl\text{-}NHX)_2$ cho thấy hiệu quả rất tốt khi so sánh với hai thuốc ribavirin và remdesivir.

Huế, ngày 4 tháng 6 năm 2021

Đại diện cán bộ hướng dẫn	**Nghiên cứu sinh**
PGS. TS. Nguyễn Thị Ái Nhung	**Huỳnh Thị Phương Loan**

SOCIALIST REPUBLIC OF VIETNAM

Independence – Freedom – Happiness

THE NEW CONTRIBUTIONS OF THE THESIS

Full name of student research: **HUYNH THI PHUONG LOAN**

Title of thesis: "**Study structure and property of the complexes group 13 diyl and 14 ylidone by calculation quantum chemistry**"

Major: Physical chemistry and Theoretical chemistry Code: 9440119

Instructor: 1. Assoc. Prof. Dr. Nguyen Thi Ai Nhung

2. Assoc. Prof. Dr. Hoang Van Duc

Training institutions: University of Science – University of Hue

Time course: 2016 – 2020

The new contributions of the thesis:

1. The results data of structure of the complexes of ligands: group13 diyl $(YCp^*)_2$ with Y = B – Tl; and group 14 ylidone $X(YCp^*)_2$ with Y = B – Tl, X = C – Pb; group 14 ylidone and tetrylene: $X(PR_3)_2$, $(NHX)_2$ with X = C – Pb; and compounds $Mo(CO)_5$, $W(CO)_5$, AlH_2^+, AgCl, $Ni(CO)_2$, ...

2. The results of the DFT-D3 ($kcal.mol^{-1}$) and DFT-D_e ($kcal.mol^{-1}$) for complexes group 13-diyl YCp* and complexes ylidone increases from the lighter to the heavier homologues. However, the trend of the bond dissociation energies (BDEs) is observed for the ylidone with $Ni(CO)_2$ which has the same trend BDEs compared with tetrylene complexes with $Ni(CO)_2$.

3. A comparison was made to investigate the structures and bonding of complexes ylidone and tetrylene. The obtained results energy (instantaneous interaction energy, Pauli repulsion, attractive electrostatics interaction, and orbital interactions, ...), the charge transfer and energy levels to get insight into the chemical bonding in the variation of the donor-acceptor capacity in complexes between the substituted ligands and metal fragment.

4. Propose the mechanism to form the structure and properties of the complexes studied in the thesis.

5. This study suggests Ag-NHC and $(Ag\text{-}NHC)_2$ complexes as potential candidates to inhibit ACE2 and 6LU7, potentially conducive to prevention of infection caused by virus SARS-CoV-2.

Hue, June 4th, 2021

Supervisor **Ph.D. Student**

Assoc.Prof. Dr. Nguyen Thi Ai Nhung **Huỳnh Thị Phương Loan**