NHỮNG ĐÓNG GÓP MỚI CỦA LUẬN ÁN

Họ tên NCS: **Phạm Ngọc Thạch** Khoá năm 2015

Chuyên ngành: Hoá vô cơ Mã số: 9.44.01.13

Tên luận án: **Nghiên cứu cấu trúc và tính chất của một số cluster silicon pha tạp kim loại bằng phương pháp hóa học tính toán.**

Tên người hướng dẫn: 1. PGS.TS. Vũ Thị Ngân

2. PGS.TS Trần Dương

Tên cơ sở đào tạo: Trường Đại học Sư phạm Huế, Đại học Huế

Phân tích sự phụ thuộc của cluster silicon pha tạp nguyên tử kim loại các nguyên tố nhóm A và nhóm B dãy cluster Si_2M (M = Li, Na, K, Cr, Cu) cho thấy khả năng tạo cluster của các nguyên tố chuyển tiếp tốt hơn các kim loại kiềm.

Khảo sát toàn bộ kim loại 3d cho dãy cluster Si_nM, Si_nM_2, Si_nM_2, có hai nhóm tạo cluster tiềm năng: nhóm nguyên tố pha tạp M họ sắt (Fe, Co, Ni) tạo cluster tốt và nhóm M = Sc, Ti, V tạo cluster rất tốt. Đặc biệt cluster Si pha tạp Ti có độ bền vượt trội so với các nguyên tố còn lại trong dãy. Điều này mở ra hướng nghiên cứu tiềm năng cho các cluster chứa nguyên tố pha tạp Ti.

Nghiên cứu sự phụ thuộc của cluster silicon pha tạp nguyên tử kim loại vào kích thước cho quy luật: cluster có kích thước nhỏ có cấu trúc hở, cấu trúc lồng bắt đầu xuất hiện ở một kích thước nhất định phụ thuộc vào bản chất nguyên tử pha tạp và điện tích của cluster. Tổng electron hóa trị của cluster càng lớn (anion > trung hòa > cation) thì khả năng tạo cấu trúc lồng càng sớm. Quy luật phát triển cấu trúc cluster có thể là cấu trúc cộng hoặc thế, tùy thuộc vào bản chất nguyên tử pha tạp và điện tích cluster.

Sự phụ thuộc của cluster silicon pha tạp nguyên tử kim loại vào điện tích ion cho kết quả: việc tái cấu trúc làm cho độ bền của cluster tăng lên thậm chí cả khi mất đi electron.

Các liên kết Si-Si và Si-M trong cluster pha tạp nhỏ vừa có bản chất của liên kết σ vừa có bản chất của liên kết π. Mật độ điện tích của các nguyên tử trên các cluster không hoàn toàn phụ thuộc vào hiệu số độ âm điện giữa các nguyên tử mà còn phụ thuộc vào sự chuyển electron trong toàn bộ cấu trúc.

Việc tính năng lượng HOMO-LUMO Gap cho biết các cluster khảo sát đều phù hợp cho việc chế tạo các vật liệu xúc tác quang.

Giáo viên hướng dẫn		**Nghiên cứu sinh**
PGS.TS. Vũ Thị Ngân	**PGS.TS. Trần Dương**	**Phạm Ngọc Thạch**

NEW CONTRIBUTIONS OF THE THESIS

PhD student's name: **Pham Ngoc Thach** Entrance year: 2015

Specialization: Inorganic Chemistry Code: 9.44.01.13

Thesis title: **Study on the structure and properties of some metal-doped silicon clusters by computational chemistry method.**

Advisors: 1. A/Prof. Vu Thi Ngan

2. A/Prof. Tran Duong

Name of training university: Hue University of Education, Hue University

Analysis of the dependence of metal atom-doped silicon cluster with group A and group B elements Si_2M cluster series (M = Li, Na, K, Cr, Cu) shows the ability to create clusters of transition elements better than the alkali metals.

Surveying all 3d metals for the cluster series Si_nM, Si_nM, Si_nM_2, there are two groups of potential clusters: the M doped element group, the iron family (Fe, Co, Ni) creating good clusters and the M = Sc, Ti group. V creates clusters very well. In particular, the Ti-doped Si cluster has superior strength compared to the rest of the elements in the series. This opens up a potential research direction for clusters containing Ti doped elements.

Studying the dependence of metal atom-doped silicon clusters on the size gives the rule: small-sized clusters have an open structure, a nested structure begins to appear at a certain size depending on the nature of the element. doping element and charge of the cluster. The larger the total valence electrons of the cluster (anion > neutral > cation), the sooner the ability to create a nested structure. The cluster structure development rule can be additive or substituent, depending on the nature of the doped atom and the charge of the cluster.

The dependence of the metal atom-doped silicon cluster on the ionic charge results: the reconstruction makes the stability of the cluster increase even with the loss of electrons.

The Si-Si and Si-M bonds in the small doped cluster have both the nature of the б bond and the nature of the π bond. The charge density of the atoms in the clusters does not depend entirely on the electronegativity difference between the atoms, but also on the electron transfer throughout the structure.

Calculating the band gap energy of HOMO-LUMO shows that the investigated clusters are suitable for the fabrication of photocatalytic materials.

Giáo viên hướng dẫn		**Nghiên cứu sinh**
PGS.TS. Vũ Thị Ngân	**PGS.TS. Trần Dương**	**Phạm Ngọc Thạch**