**TRANG THÔNG TIN LUẬN ÁN**

Tên đề tài luận án: *Tính toán cấu trúc của các cụm nguyên tử boron, silicon và germanium pha tạp kim loại chuyển tiếp*.

Ngành: Hóa lý thuyết và hóa lý

Mã số ngành: 62440119

Họ tên nghiên cứu sinh: Nguyễn Minh Thảo

Khóa đào tạo: 2017

Người hướng dẫn khoa học:

- PGS.TS. Bùi Thọ Thanh

- PGS.TS. Trần Văn Tân

Cơ sở đào tạo: Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG.HCM

**1. TÓM TẮT NỘI DUNG LUẬN ÁN**:

Vật liệu boron, silicon và germanium pha tạp kim loại chuyển tiếp được nghiên cứu do khả năng ứng dụng trong các lĩnh vực vật liệu bán dẫn, vật liệu hấp phụ, xúc tác... Tính chất và độ bền của vật liệu đóng vai trò quan trọng trong việc ứng dụng thực tiễn. Bên cạnh các đóng góp của các nghiên cứu trong thực nghiệm, các nghiên cứu tính toán trong thời gian gần đầy đã đạt nhiều kết quả đáng ghi nhận từ việc giải thích đến khả năng dự đoán các kết quả thực nghiệm về cấu trúc, tính chất, khả năng ứng dụng của các cụm nguyên tử.

Các cụm nguyên tử boron, silicon và germanium pha tạp kim loại chuyển tiếp có nhiều cấu trúc với năng lượng gần như suy biến do các orbital *d* của kim loại chuyển tiếp. Các phương pháp tính toán hóa học lượng tử như lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT), lý thuyết chùm tương tác (CCSD(T)), các phương pháp tính đa cấu hình CASSCF/CASPT2 được sử dụng tính toán cấu trúc và tính chất của cụm nguyên tử. Các cấu trúc cực tiểu về mặt năng lượng trên bề mặt thế năng được tính toán. Tuy nhiên, việc tính toán cấu trúc càng khó khăn khi kích thước hệ tăng, chứa các nguyên tố kim loại chuyển tiếp. Các thuật toán dự doán cấu trúc như giải thuật di truyền, phương pháp tối ưu hóa dòng hạt góp phần dự đoán các cấu trúc ban đầu của hệ nghiên cứu. Từ đó, các cấu trúc cực tiểu trên bề mặt thế năng được xác định với độ tin cậy cao.

Luận án đã tính toán cấu trúc và tính chất của các cụm nguyên tử chứa hai nguyên tố như cụm nguyên tử boron pha tạp scandium, boron pha tạp manganese, cụm nguyên tử germenium pha tạp scandium, một số cụm nguyên tử gồm ba nguyên tố. Các cụm nguyên tử silicon pha tạp scandium được tính toán cấu trúc electron, các tính chất năng lượng. Các giá trị năng lượng tách electron trong phổ quang electron của cụm nguyên tử VSi2− được dự đoán theo phương pháp tính đa cấu hình. Một số cụm nguyên tử được nghiên cứu mô hình tương tác với phân tử khí H2, CO và CO2, góp phần cung cấp thông tin về vị trí tương tác, kiểu tương tác.

Kết quả nghiên cứu cung cấp thông tin cấu trúc (cấu trúc hình học và cấu trúc electron), các tính chất năng lượng (năng lượng ion hóa, ái lực electron, các giá trị năng lượng tách electron) và một số mô hình hấp phụ khí.

**2. NHỮNG KẾT QUẢ MỚI CỦA LUẬN ÁN**:

Đã tính toán được cấu trúc của các cụm nguyên tử của boron, silicon và germanium pha tạp kim loại chuyển tiếp scandium, vanadium và manganese bằng cách kết hợp phép tính toán hóa học lượng tử và thuật toán dự đoán cấu trúc. Các cấu trúc cực tiểu về mặt năng lượng trên bề mặt thế năng thu được bao gồm cấu trúc cực tiểu toàn bộ và các cấu trúc cực tiểu cục bộ. Một số cấu trúc của các cụm nguyên tử (Sc2B8, ScGe6−) có độ bền cao được công bố mới so với công trình khác đã công bố (Jianfeng et al. (2014). *Comput. Theor. Chem., 1027*, 128-134; Borshch et al. (2015). *Russ. J. Phys. Chem. B, 9*(1), 9-18).

Đã tính toán được các tính chất năng lượng như các giá trị năng lượng ion hóa, ái lực electron, năng lượng tách electron của các cụm nguyên tử của boron, silicon và germanium pha tạp kim loại chuyển tiếp scandium, vanadium và manganese.

Đã dự đoán các quá trình tách electron của cụm nguyên tử VSi2− có thể cho các peak trên phổ quang electron bằng các dữ liệu tính từ phép tính CASSC/CASPT2.

Đã tính toán được một số mô hình hấp phụ khí H2, CO và CO2 trên một số cụm nguyên tử của boron và germanium pha tạp kim loại chuyển tiếp scandium, vanadium và manganese. Các tâm hấp phụ tập trung xung quanh vị trí nguyên tố kim loại chuyển tiếp pha tạp.

**3.** **CÁC ỨNG DỤNG/ KHẢ NĂNG ỨNG DỤNG TRONG THỰC TIỄN HAY NHỮNG VẤN ĐỀ CÒN BỎ NGỎ CẦN TIẾP TỤC NGHIÊN CỨU**

Ứng dụng các cấu trúc bền để hấp phụ thêm nguyên tử lên bề mặt để tính toán cấu trúc của các cụm nguyên tử kích thước lớn hơn.

Ứng dụng các cấu trúc bền để nghiên cứu mô hình tương tác với các phân tử khí.

Ứng dụng các cấu trúc bền của các cụm nguyên tử để nghiên cứu các quá trình tách electron, dự đoán các vị trí peak trong phổ quang electron.

Sử dụng các phương pháp có độ tin cậy cao trên hệ máy tính cấu hình cao để tính toán các tính chất năng lượng, đánh giá độ bền của các cấu trúc có năng lượng gần như suy biến.

|  |  |
| --- | --- |
| **TẬP THỂ CÁN BỘ HƯỚNG DẪN**  **PGS.TS. Bùi Thọ Thanh PGS.TS. Trần Văn Tân** | **NGHIÊN CỨU SINH**  **Nguyễn Minh Thảo** |

**XÁC NHẬN CỦA CƠ SỞ ĐÀO TẠO**

**HIỆU TRƯỞNG**

**THESIS INFORMATION**

Thesis title: *Calculating the structure of the transitional metal-doped boron, silicon, and germanium clusters.*

Speciality: The Theoretical Chemistry and Physical Chemistry

Code: 62440119

Name of PhD Student: Nguyen Minh Thao

Academic year: 2017

Supervisor:

- Assoc. Prof. Bui Tho Thanh

- Assoc. Prof. Tran Van Tan

At: VNUHCM - University of Science

**1. SUMMARY**:

Transition metal-doped boron, silicon, and germanium materials are studied due to their potential applications in semiconductor materials, adsorbent materials, catalysts, etc. The properties and durability of materials play an important role in practical applications. In addition to the contributions of experimental studies, the computational studies have achieved many remarkable results, from the explanation to the ability to predict experimental results on the structure, properties, and applicability of clusters.

The transitional metals doped boron, silicon, and germanium clusters have many structures in degenerate energies due to the *d* orbitals of the transitional metals. Quantum chemical computational methods such as density functional theory (DFT), coupled-cluster theory (CCSD(T)), and multiconfiguration calculations (CASSCF/CASPT2) are used to calculate the structure and properties of clusters. The energy-minimum structures on the potential energy surface are calculated. However, the structure calculation becomes more difficult when the system size increases, containing transition metal elements. The structure prediction algorithms are built using genetic algorithms and particle swarm optimization methods to contribute to predicting the initial structures of the studied system. From there, the energy-minimum structures on the potential energy surface are determined with high reliability.

The thesis has calculated the structure and properties of clusters containing two elements, such as boron clusters doped with scandium, boron clusters doped with manganese, germanium clusters doped with scandium, and some clusters consisting of 03 elements. The scandium-doped silicon clusters' electron structure and energy properties are calculated. The multi-configuration calculation predicts the electron separation energy values ​​in the electron photoelectron spectrum of VSi2− clusters. Some clusters were studied for interaction with H2, CO, and CO2 gas molecules, contributing to providing information on the interaction sites and interaction types.

The research results provide structural information (geometric structure and electron structure), energetic properties (ionization energy, electron affinity, electron separation energy values), and some gas adsorption models.

**2. NOVELTY OF THESIS**:

The structures of many clusters of boron, silicon, and germanium doped with the transition metals scandium, vanadium, and manganese were calculated. The energy minima on the potential energy surface were obtained, including the global and local minima. Some structures of clusters (Sc2B8, ScGe6−) with high stability were published in addition to other published works (Jianfeng et al. (2014). *Comput. Theor. Chem., 1027*, 128-134; Borshch et al. (2015). *Russ. J. Phys. Chem. B, 9*(1), 9-18).

The energy properties of boron, silicon, and germanium doped with the transitional metals scandium, vanadium, and manganese clusters, such as ionization energy values, electron affinity, and electron separation energy were calculated.

The electron separation processes of VSi2− clusters can give peaks on the photoelectron spectrum, which can be predicted by the obtained data from CASSCF/CASPT2 calculations.

Several adsorption models for H2, CO, and CO2 gases on clusters of boron, silicon, and germanium doped with the transition metals scandium, vanadium, and manganese were calculated. The adsorption centers are concentrated around the doped transition metal element sites.

**3**. **APPLICATIONS/ APPLICABILITY/ PERSPECTIVE**

The stable structures can be used to adsorb more atoms onto the surface to calculate the structure of larger clusters.

The stable structures are applied to study the interaction model with gas molecules.

Study electron separation processes and predict peak positions in the electron photoelectron spectroscopy of the stable structures of clusters.

Using the more reliable methods on high-configuration computer systems to calculate energy properties and evaluate the stability of structures with nearly degenerate energy.

|  |  |
| --- | --- |
| **SUPERVISOR**  **Assoc. Prof. Bui Tho Thanh Assoc. Prof. Tran Van Tan** | **PhD STUDENT**  **Nguyen Minh Thao** |

**CERTIFICATION**

**UNIVERSITY OF SCIENCE**

**PRESIDENT**