

THÔNG TIN
VỀ NHỮNG ĐÓNG GÓP MỚI CỦA LUẬN ÁN TIẾN SĨ

Tên luận án: **Nghiên cứu cấu trúc và tính thơm của một số cluster boron bằng phương pháp hóa học lượng tử.**

Ngành: Hóa lý thuyết và hóa lý. Mã ngành: 9440119.

Nghiên cứu sinh: Dương Văn Long

Khóa: 06

Tập thể/Người hướng dẫn khoa học:

- Hướng dẫn 1: PGS.TS. Nguyễn Phi Hùng

- Hướng dẫn 2: GS.TS. Nguyễn Minh Thọ

Cơ sở đào tạo: **Trường Đại học Quy Nhơn**

CÁC ĐÓNG GÓP MỚI CỦA LUẬN ÁN

1. Kiểm chứng sự phù hợp của mức lý thuyết TPSSh/6-311+G(d) cho việc khảo sát cấu trúc hình học của các cluster bao gồm B.

2. Giải thích tính bền của các cluster $B_2Si_3^q$ và $B_3Si_2^p$ theo mô hình ribbon và quy tắc Hückel.

3. Các quy tắc đếm electron $(4N+2M)$ và $(4N+2M-2)$ cho mô hình đĩa tròn được đưa ra trong luận án.

4. Luận án đưa ra mô hình đĩa-nón hỗn hợp giải thích cấu hình electron cho cluster có dạng hình nón. Cluster $B_{12}Li_8$ được tìm thấy với khả năng lưu trữ hydro cao.

5. Tính bền của cluster con dạng con quay $B_{14}FeLi_2$ được giải thích bởi mô hình hình trụ rỗng.

TM. Tập thể hướng dẫn

Bình Định, ngày 20 tháng 10 năm 2023

Nghiên cứu sinh



Nguyễn Phi Hùng



Dương Văn Long