III-P-1.19

NGHIÊN CỨU LÝ THUYẾT VỀ NHÓM ScSin

Phùng Quán, Phạm Tấn Hùng
Khoa Hóa học, Trường ĐH Khoa học Tự nhiên - ĐHQG Tp.HCM

Tóm tắt

Nghiên cứu về tính chất vật lý và hóa học của các nhóm silic là một lĩnh vực nghiên cứu chính hiện nay do được sử dụng rộng rãi trong các thiết bị bán dẫn. Đã có những nỗ lực rất lớn vào sự nghiên cứu cấu trúc và tính chất vật lý của nhóm silic nhỏ.

Trạng thái hình học tối ưu của cấu trúc, năng lượng nối, cấu trúc điện tử, năng lượng ion hóa, ái lực điện tử của nhóm ScSin (n=1-12) được tính toán bằng chương trình G03 với hai bộ hàm cơ sở là LANL2DZ và 6-311+G(d).

A THEORETICAL STUDY STUDY OF SCSin CLUSTERS

Phung Quan, Pham Tan Hung
Faculty of Chemistry, University of Science - VNU HCMC

Abstract

The study of the physical and chemical properties of silicon clusters is a major research area nowadays due to its wide use in semiconductor devices. There have been enormous efforts invested in understanding the size-dependent structural and physical properties of small silicon clusters.

Equilibrium geometries, binding energies, electronic structures, ionization potentials and electron affinities of ScSin clusters (n=1-12) have been calculated using the G03 program with LANL2DZ and 6-311+G(d) basis set.