

# STUDY THE STABLE STRUCTURES OF $\text{ScGe}_n^{0/-}$ ( $n=5-6$ ) CLUSTERS BY GA-DFT AND THE CO ADSORPTION ON DOPED-CLUSTERS

*Nguyen Minh Thao*<sup>1,2</sup>, *Bui Tho Thanh*<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Chemistry, University of Science, VNU-HCM

<sup>2</sup>Dong Thap University

[nmthao@dtu.edu.vn](mailto:nmthao@dtu.edu.vn), [btthanh@hcmus.edu.vn](mailto:btthanh@hcmus.edu.vn)

## **Abstract.**

The structures of  $\text{Ge}_6^{0/-}$ ,  $\text{ScGe}_n^{0/-}$  ( $n=5-6$ ) clusters were investigated by a combination of genetic algorithm (GA) with quantum chemical calculations (DFT, DLPNO-CCSD(T)). The structural parameters, relative energy, and energetic properties of some most stable structures were reported. These doped germanium clusters were applied to study CO adsorption by calculations with PBE functional. Results indicated that CO molecule can be adsorbed at many positions of these clusters. The positions around the Sc atom can adsorb CO molecule better than others. The Sc-CO model of adsorption is more advantageous than the Sc-OC model. The adsorbed structure, the adsorption energy, and the ELF graphs of CO adsorption were also reported. Scandium doped germanium cluster can be used to produce materials that can treat CO gas by adsorption method.

**Keywords:**  $\text{ScGe}_n^{0/-}$  ( $n=5-6$ ) clusters, genetic algorithm, DFT, DLPNO-CCSD(T), CO gas

# NGHIÊN CỨU CÁC CẤU TRÚC BỀN CỦA CÁC CLUSTER $\text{ScGe}_n^{0-}$ ( $n=5-6$ ) BẰNG PHƯƠNG PHÁP GA-DFT VÀ SỰ HẤP PHỤ CO TRÊN CÁC CLUSTER PHA TẠP

*Nguyễn Minh Thảo<sup>1,2</sup>, Bùi Thọ Thanh<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Khoa Hóa học, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM

<sup>2</sup>Trường Đại học Đồng Tháp

[nmthao@dthu.edu.vn](mailto:nmthao@dthu.edu.vn), [btthanh@hcmus.edu.vn](mailto:btthanh@hcmus.edu.vn)

## **Tóm tắt.**

Cấu trúc của các cluster  $\text{Ge}_6^{0-}$ ,  $\text{ScGe}_n^{0-}$  ( $n=5-6$ ) được nghiên cứu bằng các phương pháp tra cứu theo giải thuật di truyền GA (genetic algorithm) kết hợp các tính toán lượng tử (phương pháp DFT và phương pháp DLPNO-CCSD(T)). Các thông số cấu trúc, năng lượng tương đối, các tính chất năng lượng của các đồng phân bền được báo cáo. Các cluster germani pha tạp scandi được dùng để nghiên cứu khả năng hấp phụ phân tử CO bằng các tính toán theo phiếm hàm PBE. Kết quả cho thấy phân tử CO có khả năng bị hấp phụ trên bề mặt cluster pha tạp theo nhiều dạng cấu trúc khác nhau. Các vị trí xung quanh Sc có khả năng tương tác với CO tốt hơn các vị trí khác. Kiểu hấp phụ Sc – CO thuận lợi hơn kiểu hấp phụ Sc – OC. Các cấu trúc hấp phụ, năng lượng hấp phụ, ảnh ELF của quá trình hấp phụ phân tử CO trên cluster được báo cáo. Các cluster germani pha tạp scandi có thể được dùng để xây dựng nên các vật liệu xử lý khí CO bằng phương pháp hấp phụ.

Từ khóa: cluster  $\text{ScGe}_n^{0-}$  ( $n=5-6$ ), giải thuật di truyền, DFT, DLPNO-CCSD(T), khí CO