

Khảo sát lý thuyết cấu trúc và tính chất electron của các nhóm nguyên tử Na_8TM ($\text{TM} = \text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$)

Nguyễn Văn Hồng¹, Nguyễn Văn Thạt¹, Lê Thị Bông¹, Đỗ Thị Thanh Hương¹,
Huỳnh Thị Thanh Trúc²

Tóm tắt—Các nhóm nguyên tử Na_8TM ($\text{TM} = \text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$) được tối ưu hóa bằng tính toán DFT kết hợp hàm cơ sở cộng hóa trị phân cực zeta (TZVP), từ đó xác định các giá trị moment từ trên các orbital, nhóm điểm, cấu trúc electron và hình ảnh về mật độ spin của các nhóm nguyên tử. Kết quả nghiên cứu chỉ ra rằng các nguyên tử Na có trong nhóm nguyên tử Na_8TM ảnh hưởng lớn đến tổng moment từ của cả nhóm nguyên tử. Trong nhóm nguyên tử, mỗi nguyên tử Na đóng góp 1 electron hóa trị, kết hợp với các electron hóa trị của nguyên tử kim loại chuyển tiếp tạo ra tổng số electron hóa trị của cả nhóm nguyên tử. Nhóm nguyên tử có moment từ cao nhất là Na_8V ($5\mu_B$) và nhóm nguyên tử không mang từ tính là $\text{Na}_8\text{Ni}, \text{Na}_8\text{Zn}$. Các nhóm nguyên tử có sự tương đồng về cấu trúc electron và từ tính so với một số kim loại và ion kim loại chuyển tiếp. Kết quả nghiên cứu này sẽ định hướng cho việc thay thế vật liệu từ tính bằng các nhóm nguyên tử kim loại.

Từ khóa—DFT (lý thuyết phiếm hàm mật độ). Moment từ. Nhóm nguyên tử. TM (Kim loại chuyển tiếp). TZVP (cộng hóa trị phân cực zeta)

1 GIỚI THIỆU

Nhóm nguyên tử là tập hợp các nguyên tử có kích thước trong khoảng kích thước giữa các nguyên tử và các pha ngưng tụ [1]. Đây là đối tượng được nghiên cứu rộng rãi trong lĩnh vực khoa học vật liệu mới, đặc biệt là vật liệu từ tính. Các nhóm nguyên tử được ổn định bằng cách pha trộn giữa các kim loại cơ bản như kim loại kiềm với kim loại chuyển tiếp. Nghiên cứu các nhóm nguyên tử được tạo ra từ các nguyên tử Na và

nguyên tử kim loại chuyển tiếp sẽ cung cấp các thông tin hữu ích về đặc điểm từ tính của nhóm nguyên tử.

Số 8 được nhà vật lý Maria Goeppert-Mayer gọi là số kỳ diệu trong dãy số 8, 20, 28, 50, 82 và 156 vì có các ý nghĩa đặc biệt liên quan đến số này [2], khi nhóm nguyên tử có số nguyên tử Na được tạo ra từ dãy số kỳ diệu thì có độ bền đặc biệt hơn các nhóm nguyên tử khác. Các nhóm nguyên tử được xây dựng sao cho 8 nguyên tử Na bao xung quanh nguyên tử kim loại chuyển tiếp, các nguyên tử kim loại chuyển tiếp được xét trong cùng chu kỳ Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn. Bằng phương pháp tính toán lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT, Density Functional Theory) có thể xác định được cấu trúc, nhóm điểm, mật độ spin và moment từ của các orbital trong nhóm nguyên tử và của cả nhóm nguyên tử.

Một số công trình nghiên cứu liên quan đến vật liệu có từ tính, với Cs_8V là vật liệu đầu tiên. Các nghiên cứu lý thuyết liên quan đến nghiên cứu thực nghiệm ảnh hưởng lên màng mỏng của các nguyên tử Na, K, Cs có chứa các tạp chất V có giá trị moment từ tương đối lớn [3, 4]. Ngày nay các nhà khoa học đã và đang nghiên cứu theo hướng chung nhất từ nhóm nguyên tử đến vật liệu nhóm và cuối cùng là đến ứng dụng vật liệu nhóm nguyên tử.

Bằng các phương pháp thực nghiệm có thể xác định được moment từ của cả nhóm nguyên tử nhưng việc xác định moment từ do từng orbital trong nhóm nguyên tử đóng góp là không thể, việc tính toán lý thuyết có thể cung cấp chi tiết hơn sự đóng góp của các orbital trong nhóm nguyên tử. Từ đó định hướng cho các nghiên cứu tiếp theo trong việc lựa chọn kim loại chuyển tiếp phù hợp để chế tạo vật liệu từ.

Ngày nhận bản thảo: 10-7-2017; Ngày chấp nhận đăng 10-11-2017; Ngày đăng: 30-8-2018.

Nguyễn Văn Hồng, Nguyễn Văn Thạt, Lê Thị Bông, Đỗ Thị Thanh Hương - Trường Đại học An Giang
Huỳnh Thị Thanh Trúc - Trường Đại học Bách Khoa, ĐHQG-HCM

*Email: nvhong@agu.edu.vn

2 PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Các cấu trúc ban đầu của nhóm nguyên tử Na_8TM được xây dựng bằng phần mềm Gaussview 5.08 [6] sao cho các nguyên tử Na bao xung quanh nguyên tử kim loại chuyển tiếp (TM), đây cũng là dạng cấu trúc đã được chứng minh là bền hơn so với các dạng cấu trúc khác như dạng phẳng, dạng nguyên tử kim loại chuyển tiếp nằm ở bề mặt ngoài, ... Việc tối ưu hóa cấu trúc được thực hiện với phần mềm Gaussian 09, Revision A.02 [7] theo tính toán DFT, sử dụng phiếm hàm TPSSSTPSS, với hàm cơ sở TZVP cho các nhóm nguyên tử Na_8TM .

TPSSSTPSS là phiếm hàm tính toán được Tao-Perdew-Staroverov-Scuseria thiết lập và sau đó được điều chỉnh lại với khả năng tính toán có độ chính xác cao [8, 9]. Phiếm hàm TPSSSTPSS có những ưu điểm riêng và có độ chính xác cao đặc biệt đối với các kim loại chuyển tiếp [10].

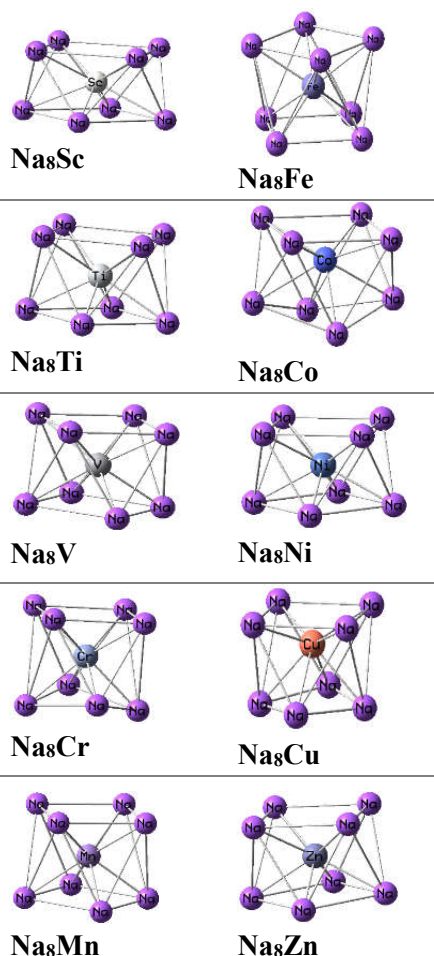
3 KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Hình 1 trình bày cấu trúc hình học của các nhóm nguyên tử Na_8TM (TM = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn).

Trong các cấu trúc được khảo sát, hai nhóm nguyên tử Na_8V và Na_8Zn có cấu trúc nhỏ gọn nhất, thuộc nhóm điểm D_{4d} , các cấu trúc còn lại có nhóm điểm C_{2v} . Khoảng cách giữa các trong nhóm nguyên tử dài nhất và ngắn nhất thuộc nhóm nguyên tử Na_8Cu (Cu-Na: 3,57947Å và 3,08962Å; Na-Na: 6,35717Å và 3,46804Å). Điều này có thể giải thích là do nhóm nguyên tử Na_8Cu có kiểu đối xứng C_{2v} , nguyên tử Cu bị lệch nhiều về một phía của nhóm nguyên tử, tạo khoảng cách lệch hơn so với các nhóm nguyên tử còn lại.

Bảng 1. Nhóm điểm và độ bội spin của các nhóm nguyên tử Na_8TM (TM = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn)

Na_8TM	Nhóm điểm	Độ bội spin
Na_8Sc	C_{2v}	4
Na_8Ti	C_{2v}	5
Na_8V	D_{4d}	6
Na_8Cr	C_{2v}	5
Na_8Mn	D_{4d}	4
Na_8Fe	C_{2v}	3
Na_8Co	C_{2v}	2
Na_8Ni	D_{4d}	1
Na_8Cu	C_{2v}	2
Na_8Zn	D_{4d}	1



Hình 1. Cấu trúc của các nhóm nguyên tử Na_8TM Moment từ của các orbital trong nhóm nguyên tử và của cả nhóm nguyên tử Na_8TM (TM = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn)

Spin electron được định nghĩa là sự quay electron quanh trục của nó. Spin electron là một trong ba thuộc tính của một electron (spin electron, điện tích và khối lượng). Hướng spin của hạt electron sẽ cung cấp một số đặc điểm của electron như mức độ tự do, xung lượng góc, số lượng tử, ... Trong lý thuyết lượng tử, các electron được xem như một thanh từ cực nhỏ, và các điểm spin của nó là các điểm cực bắc của thanh từ đó. Nếu hai electron gần nhau quay cùng một hướng thì lực từ được tăng cường và hình thành một từ trường lớn hơn. Còn các electron có hướng quay ngược nhau thì từ trường sẽ bị triệt tiêu.

Bảng 2. Giá trị moment từ (μ_B) trên nhóm nguyên tử Na, trên các orbital 3d, 4s, 4p của nguyên tử V và của nhóm nguyên tử Na_8TM (TM= Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) theo phương pháp TPSSTPSS/TZVP

Moment từ (μ_B) của nhóm Na_8TM							Moment từ (μ_B) của kim loại	
Nhóm Na_8TM	Na_8	TM				Na_8TM		
		<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>Tổng</i>			
Na_8Sc	1,249140	0,073070	0,223510	1,454280	1,750860	3,0	Sc	1,0
Na_8Ti	0,626680	0,193500	0,344100	2,835730	3,373320	4,0	Ti	3,0
Na_8V	0,095088	0,271300	0,378710	4,256310	4,904915	5,0	V	4,0
Na_8Cr	-1,562380	0,342130	0,391380	4,828870	5,562380	4,0	Cr	6,0
Na_8Mn	-1,597600	0,343730	0,287550	3,966120	4,597600	3,0	Mn	5,0
Na_8Fe	-0,898660	0,223970	0,132270	2,542410	2,898660	2,0	Fe	4,0
Na_8Co	-0,545820	0,115640	0,060970	1,369120	1,545730	1,0	Co	3,0
Na_8Ni	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	Ni	2,0
Na_8Cu	0,774260	0,194940	0,023000	0,007640	0,225580	1,0	Cu	1,0
Na_8Zn	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	Zn	0,0

Kết quả Bảng 2 cho thấy các nhóm nguyên tử có giá trị moment từ cao nhất là Na_8V với giá trị là $5\mu_B$, Na_8Ni và Na_8Zn không mang từ tính. Các nguyên tử Na có thể làm tăng hoặc giảm từ tính của nguyên tử kim loại chuyển tiếp.

Orbital d của nguyên tử kim loại chuyển tiếp đóng góp nhiều nhất vào tổng giá trị moment từ của nhóm nguyên tử. Trong các nhóm nguyên tử mang từ tính, các nguyên tử Na có sự đóng góp từ tính ít nhất trong nhóm nguyên tử Na_8V ($0,095088\mu_B$) và nhiều nhất trong nhóm nguyên tử Na_8Sc ($1,249140\mu_B$). Nếu so với các kim loại nguyên chất thì Na làm tăng từ tính nhiều nhất ở nhóm nguyên tử Na_8Sc (tăng $2\mu_B$), giảm từ tính nhiều nhất ở nhóm nguyên tử Na_8Cr , Na_8Mn , Na_8Fe , Na_8Co , Na_8Ni (giảm $2\mu_B$), và từ tính không đổi đối với nhóm Na_8Cu và Na_8Zn .

Trong nhóm nguyên tử Na_8TM , mỗi nguyên tử Na đóng góp 1 electron hóa trị, kết hợp với các electron hóa trị của nguyên tử kim loại chuyển tiếp tạo ra tổng số electron hóa trị của cả nhóm nguyên tử. Các electron hóa trị này được sắp xếp lần lượt vào các phân lớp 1S, 1P, 1D, 2S, 1F, ...

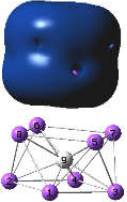
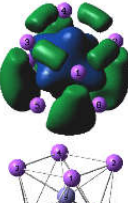
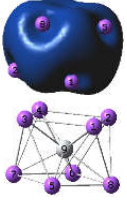
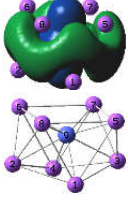
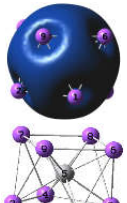
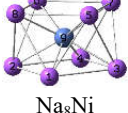
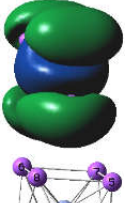

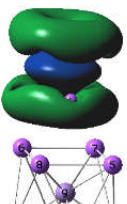

Vì vậy sự xuất hiện của các nguyên tử Na sẽ làm thay đổi số electron hóa trị dẫn đến tăng hoặc giảm giá trị moment từ so với nguyên tử kim loại nguyên chất.

Mật độ spin và moment từ của các nguyên tử trong các nhóm nguyên tử Na_8TM (TM = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn)

Moment từ trên nguyên tử mang giá trị dương (+) thì mật độ spin thể hiện trên hình là màu xanh dương, ngược lại nếu moment từ mang giá trị âm (-) thì mật độ spin thể hiện màu xanh lá. Những nhóm nguyên tử Na_8Sc , Na_8Ti , Na_8V , Na_8Cu thì phần lớn là các giá trị moment từ trên các nguyên tử trong nhóm nguyên tử mang giá trị dương nên hình dạng về mật độ spin thể hiện một màu xanh dương.

Hai nhóm nguyên tử Na_8Ni và Na_8Zn không có electron độc thân nên không mang từ tính. Các nhóm nguyên tử có cấu trúc đối xứng cao (D_{4d}) như Na_8V , Na_8Mn thì các nguyên tử Na đóng góp giống nhau về giá trị moment từ. Các nhóm nguyên tử còn lại có kiểu đối xứng C_{2v} thì các nguyên tử Na đóng góp giá trị moment từ khác nhau vào tổng giá trị của cả nhóm.

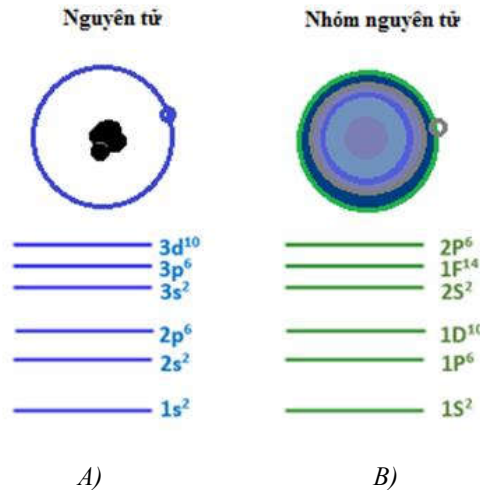
Bảng 3. Hình ảnh mật độ spin và giá trị moment từ (μ_B) trên các nhóm nguyên tử Na_8TM
($TM = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn$)

Hình nhóm nguyên tử và mật độ spin	Moment từ (μ_B)	Hình nhóm nguyên tử và mật độ spin	Moment từ (μ_B)
 Na₈Sc	1 Na 0,132750 2 Na 0,174740 3 Na 0,174740 4 Na 0,132750 5 Na 0,158540 6 Na 0,158540 7 Na 0,158540 8 Na 0,158540 <u>9 Sc 1,750860</u> Tổng: 3,0	 Na₈Fe	1 Na -0,123970 2 Na -0,109300 3 Na -0,109300 4 Na -0,123970 5 Na -0,108030 6 Na -0,108030 7 Na -0,108030 8 Na -0,108030 <u>9 Fe 2,898660</u> Tổng: 2,0
 Na₈Ti	1 Na 0,078310 2 Na 0,078310 3 Na 0,078310 4 Na 0,078310 5 Na 0,078360 6 Na 0,078360 7 Na 0,078360 8 Na 0,078360 <u>9 Ti 3,373320</u> Tổng: 4,0	 Na₈Co	1 Na -0,068330 2 Na -0,068160 3 Na -0,068160 4 Na -0,068330 5 Na -0,068210 6 Na -0,068210 7 Na -0,068210 8 Na -0,068210 <u>9 Co 1,545730</u> Tổng: 1,0
 Na₈V	1 Na 0,011886 2 Na 0,011886 3 Na 0,011886 4 Na 0,011886 5 V 4,904915 6 Na 0,011886 7 Na 0,011886 8 Na 0,011886 <u>9 Na 0,011886</u> Tổng: 5,0	 Na₈Ni	0,0
 Na₈Cr	1 Na -0,294160 2 Na -0,116870 3 Na -0,116870 4 Na -0,294160 5 Na -0,185080 6 Na -0,185080 7 Na -0,185080 8 Na -0,185080 <u>9 Cr 5,562380</u> Tổng: 4,0	 Na₈Cu	1 Na 0,096590 2 Na 0,096600 3 Na 0,096600 4 Na 0,096590 5 Na 0,096970 6 Na 0,096970 7 Na 0,096970 8 Na 0,096970 <u>9 Cu 0,225580</u> Tổng: 1,0
 Na₈Mn	1 Na -0,19970 2 Na -0,19970 3 Na -0,19970 4 Na -0,19970 5 Na -0,19970 6 Na -0,19970 7 Na -0,19970 8 Na -0,19970 <u>9 Mn 4,59760</u> Tổng: 3,0	 Na₈Zn	0,0

Sự tương đồng về cấu hình electron và mật độ spin của các nhóm nguyên tử Na_8TM so với kim loại và ion kim loại chuyển tiếp

Cấu hình electron của một số nhóm nguyên tử được xây dựng dựa vào mô hình Jellium, theo nguyên tắc điền các electron lần lượt vào các phân lớp 1S, 1P, 1D, 2S, 1F, ... với các số electron tối đa trên các phân lớp S, P, D, F lần lượt là 2, 6, 10 và 14.

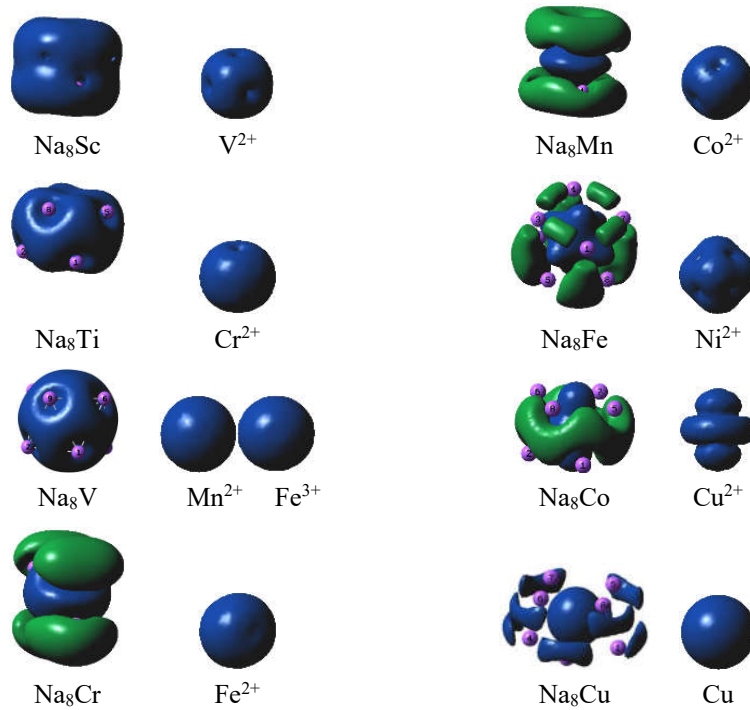
Ở Hình 2A hạt nhân mang điện tích dương nên được cố định tại tâm của nguyên tử, Hình 2B là mô hình Jellium của nhóm nguyên tử, ở đó các điện tích dương bên trong hạt nhân chuyển động hỗn loạn bên trong nhóm nguyên tử hình thành như khối cầu.



Hình 2. A) Mô hình của một nguyên tử và thứ tự các orbital nguyên tử;
B) Mô hình của một nhóm nguyên tử và thứ tự các orbital của nhóm nguyên tử

Bảng 4. Sự tương đồng về cấu hình electron giữa các nhóm nguyên tử Na_8TM so với các kim loại và ion kim loại chuyển tiếp

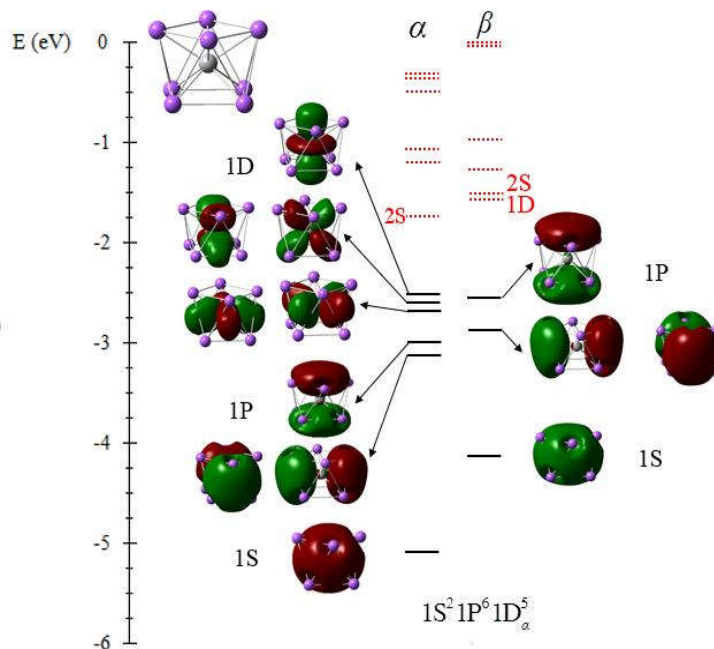
Na_8TM	Cấu hình electron	Kim loại hoặc ion kim loại	Cấu hình electron
Na_8Sc	$1S^2 1P^6 1D_a^3$	V^{2+}	$3s^2 3p^6 3d^3$
Na_8Ti	$1S^2 1P^6 1D_a^4$	Cr^{2+}	$3s^2 3p^6 3d^4$
Na_8V	$1S^2 1P^6 1D_a^5$	$\text{Mn}^{2+}, \text{Fe}^{3+}$	$3s^2 3p^6 3d^5$
Na_8Cr	$1S^2 1P^6 1D_a^5 1D_\beta^1$	Fe^{2+}	$3s^2 3p^6 3d^6$
Na_8Mn	$1S^2 1P^6 1D_a^5 1D_\beta^2$	Co^{2+}	$3s^2 3p^6 3d^7$
Na_8Fe	$1S^2 1P^6 1D_a^5 1D_\beta^3$	Ni^{2+}	$3s^2 3p^6 3d^8$
Na_8Co	$1S^2 1P^6 1D_a^5 1D_\beta^4$	Cu^{2+}	$3s^2 3p^6 3d^9$
Na_8Ni	$1S^2 1P^6 1D_a^5 1D_\beta^5$	$\text{Cu}^+, \text{Zn}^{2+}$	$3s^2 3p^6 3d^{10}$
Na_8Cu	$1S^2 1P^6 1D_a^5 1D_\beta^5 2S_\alpha^1$	Cu	$3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$
Na_8Zn	$1S^2 1P^6 1D_a^5 1D_\beta^5 2S_\alpha^1 2S_\beta^1$	Zn	$3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$



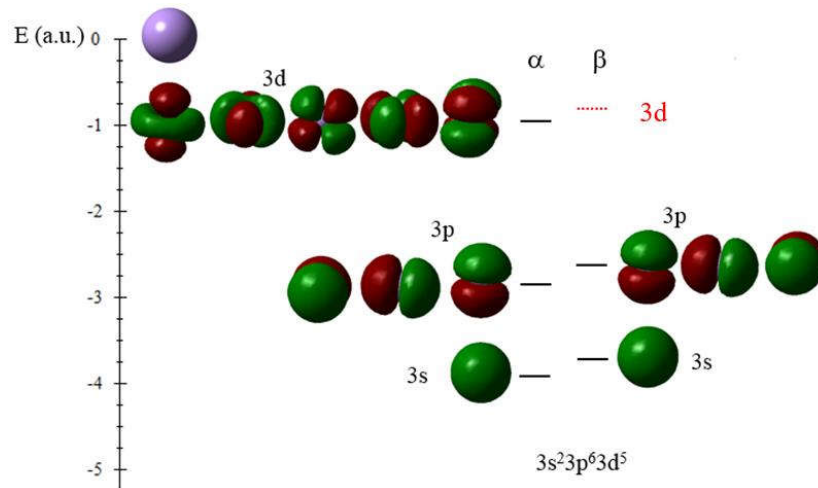
Hình 3. Hình dạng về mật độ spin giữa các nhóm nguyên tử Na_8TM và các kim loại hoặc ion kim loại chuyển tiếp

Kết quả Bảng 4 và Hình 3 cho thấy các nhóm nguyên tử có sự tương đồng về cấu hình electron và trạng thái moment từ với các nguyên tử hoặc

ion của kim loại chuyển tiếp. Kết quả nghiên cứu mở ra hướng thay thế các kim loại chuyển tiếp trong các vật liệu từ bằng các nhóm nguyên tử.



Hình 4. Hình dạng các orbital của nhóm nguyên tử Na_8V theo phương pháp TPSSSTPSS/TZVP



Hình 5. Hình dạng các orbital của ion Mn^{2+} theo phương pháp TPSSTPSS/TZVP

4 KẾT LUẬN

Các nhóm nguyên tử được khảo sát có kiểu đối xứng khác nhau D_{4d} hoặc C_{2v} , tùy thuộc vào cấu trúc của nhóm nguyên tử mà sự đóng góp các giá trị moment từ của các nguyên tử vào nhóm khác nhau. Nguyên tử kim loại chuyển tiếp khi pha trộn với các kim loại Na có thể làm tăng hoặc giảm giá trị moment từ so với nguyên tử kim loại chuyển tiếp ban đầu. Nhóm nguyên tử Na_8V có giá trị moment từ cao nhất ($5\mu_B$), hai nhóm nguyên tử không mang từ tính là Na_8Ni và Na_8Zn . Các nguyên tử Na làm tăng từ tính nhiều nhất trong nhóm nguyên tử Na_8Sc .

Kết quả nghiên cứu chỉ ra rằng các nhóm nguyên tử có cấu hình electron và từ tính tương đồng với một số kim loại và ion kim loại chuyển tiếp.

Phương pháp tính toán lý thuyết DFT có thể xác định được các giá trị moment từ của từng orbital có trong nhóm nguyên tử và của cả nhóm nguyên tử. Việc nghiên cứu thực nghiệm các nhóm nguyên tử còn gặp nhiều khó khăn vì vậy phương pháp tính toán bằng lý thuyết sẽ cung cấp các thông tin hữu ích, định hướng cho các nghiên cứu thực nghiệm liên quan đến các vật liệu từ.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. P. Jena, A.W. Castleman, "Clusters: a bridge between disciplines", *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, vol. 103, pp. 10552–10553, 2006.
- [2]. R. Kanungo, "A new view of nuclear shells", *The Royal Swedish Academy of Sciences*, vol. 152, pp. 1–14, 2013.
- [3]. S.A. Claridge, A.W. Castleman, S.N. Khanna, C.B. Murray, A. Sen, P.S. Weiss, "Cluster-Assembled Materials", *ACS (American Chemical Society) Nano*, vol. 3, pp. 244–255, 2009.
- [4]. X. Zhang, Y. Wang, H. Wang, A. Lim, G. Gantefoer, K. H. Bowen, J. U. Reveles, S. N. Khanna, "On the Existence of Designer Magnetic Superatoms", *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 135, pp. 4856–4861, 2013.
- [5]. P. Jena, "Beyond the Periodic Table of Elements: Role of Superatoms", *The Journal of Physical Chemistry Letter*, vol. 1021, pp. 2–34 (2013).
- [6]. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, A.F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J.L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J.A. Montgomery, Jr., J.E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J.J. Heyd, E. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J.M. Millam, M. Klene, J.E. Knox, J.B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R.E. Stratmann, O. Yazyev, A.J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, V.G. Zakrzewski, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, S. Dapprich, A.D. Daniels, O. Farkas, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, J. Cioslowski, and D.J. Fox, Gaussian 09, Revision A.1, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
- [7]. H.P. Hratchian. GaussView 5.0. Copyright © 2009–2013, Gaussian, Inc, 2013.
- [8]. J.P. Perdew, A. Ruzsinszkyl, G.I. Csonka, L. A. Constantin and J. Sun, "Workhorse Semilocal density functional for condensed matter physics and quantum

- chemistry”, *Physical Review Letters*, vol. 103, pp. 1–4, 2009.
- [9]. V.N. Staroverov, G.E. Scuseria, J. Tao, and J.P. Perdew, “Comparative assessment of a new nonempirical density functional: Molecules and hydrogen-bonded complexes”, *J. Chem. Phys.*, vol. 119, pp. 12129–12137, 2003.
- [10]. N.E. Schultz, Y. Zhao and D.G. Truhlar, Databases for Transition Element Bonding: Metal-Metal Bond Energies and Bond Lengths and Their Use To Test Hybrid, Hybrid Meta, and Meta Density Functionals and Generalized Gradient Approximations. *J. Phys. Chem. A*, vol. 109, pp. 4388–4403, 2005.

Theoretical study on structures and electronic properties of Na_8TM clusters (TM = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn)

Nguyen Van Hong^{1,*}, Nguyen Van That¹, Le Thi Bong¹, Do Thi Thanh Huong¹,
Huynh Thi Thanh Truc²

¹An Giang University, ²Ho Chi Minh City University of Technology - VNUHCM

*Corresponding author: nvhong@agu.edu.vn

Received: 10-07-2017; Accepted: 10-11-2017; Published: 30-8-2018

Abstract— Na_8TM (TM = Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn) clusters are optimized by DFT calculations combining the Triple zeta valence plus polarization (TZVP) method to determine magnetic torque values on orbits, point groups, electron structures, and spin density images of the atomic groups. The results indicate that Na atoms in Na_8TM cluster strongly affect the total magnetic moment of the whole group of atoms. In a cluster, each Na atom contributes one electron which

combines with valence electron of transition metal for creating a sum of valence electron of the cluster. Atomic groups with the highest magnetic moments are Na_8V ($5\mu_B$) and non-magnetic clusters are Na_8Ni and Na_8Zn . The electronic structure and magnetic properties of the clusters resemble those of some metals and transition metal ions. This study will orientate to substitution in magnetic materials by metal clusters.

Keywords—DFT (Density Functional Theory), magnetic moment, clusters, TM (transition metal), TZVP (Triple- ζ valence plus polarization)