



Tạp chí

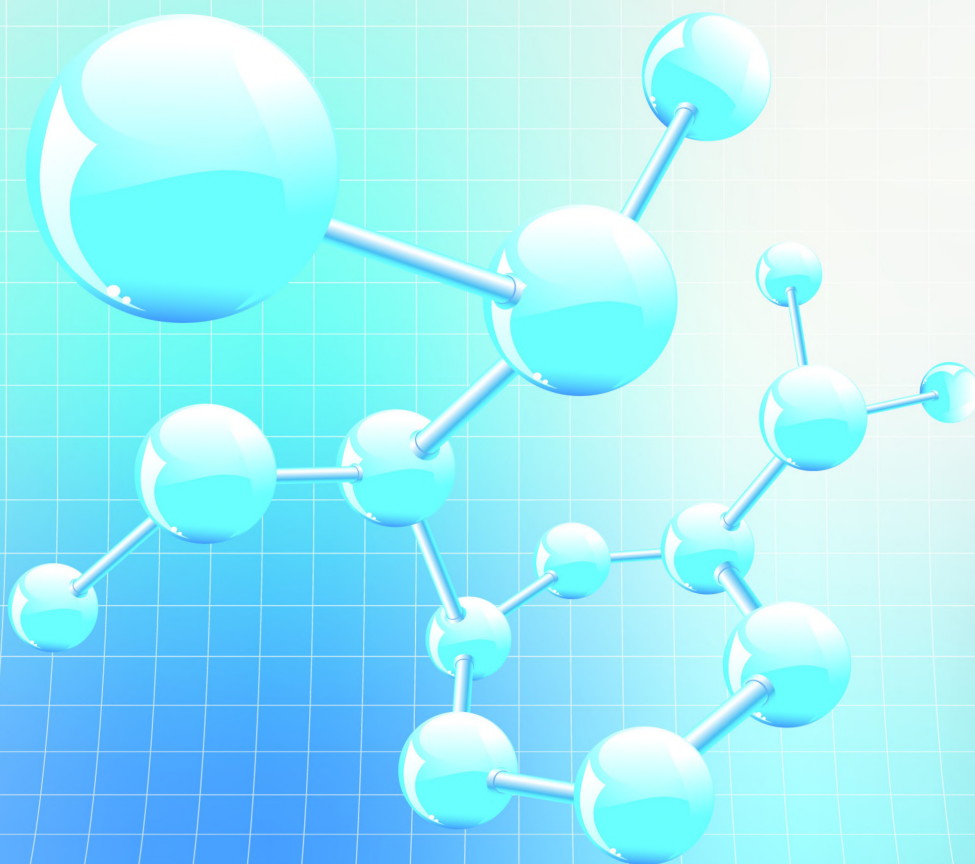
NGHIÊN CỨU KHOA HỌC

Đ A I H Ọ C S A O ĐỎ

SCIENTIFIC JOURNAL - SAO DO UNIVERSITY

P. ISSN 1859-4190

E. ISSN 2815-553X



Số 2 (89)

2025

P. ISSN 1859-4190
E. ISSN 2815-553X

■ **Tổng Biên tập**

TS. Đỗ Văn Đình

■ **Phó Tổng biên tập**

TS. Nguyễn Thị Kim Nguyễn

■ **Thư ký Tòa soạn**

PGS.TS. Ngô Hữu Mạnh

■ **Hội đồng Biên tập**

TS. Nguyễn Thị Kim Nguyễn - Chủ tịch Hội đồng

GS.TS. Phạm Thị Ngọc Yến

PGS.TSKH. Trần Hoài Linh

PGS.TS. Nguyễn Văn Liễn

GS.TSKH. Thân Ngọc Hoàn

GS.TSKH. Bành Tiến Long

GS.TS. Nguyễn Đức Toàn

PGS.TS. Lê Thu Quý

GS.TS. Lê Anh Tuấn

GS.TS. Đinh Văn Sơn

PGS.TS. Trương Thị Thủy

PGS.TS. Nguyễn Thị Bất

GS.TS. Đỗ Quang Kháng

PGS.TS. Ngô Sỹ Lương

PGS.TS. Khuất Văn Ninh

GS.TSKH. Phạm Hoàng Hải

PGS.TS. Đoàn Ngọc Hải

PGS.TS. Nguyễn Ngọc Hà

GS.TS. Yu Ming Zhang

GS.TS. Nguyễn Văn Anh

■ **Ban Biên tập**

TS. Vũ Văn Đông - Trưởng ban

ThS. Đoàn Thị Thu Hằng - Phó Trưởng ban

■ **Editor-in-Chief**

Dr. Do Van Dinh

■ **Vice Editor-in-Chief**

Dr. Nguyen Thi Kim Nguyen

■ **Office Secretary**

Assoc.Prof.Dr. Ngo Huu Manh

■ **Editorial Board**

Dr. Nguyen Thi Kim Nguyen - Chairman

Prof.Dr. Pham Thi Ngoc Yen

Assoc.Prof.Dr.Sc. Tran Hoai Linh

Assoc.Prof.Dr. Nguyen Van Lien

Prof.Dr.Sc. Than Ngoc Hoan

Prof.Dr.Sc. Banh Tien Long

Prof.Dr. Nguyen Duc Toan

Assoc.Prof.Dr. Le Thu Quy

Prof.Dr. Le Anh Tuan

Prof.Dr. Dinh Van Son

Assoc.Prof.Dr. Truong Thi Thuy

Assoc.Prof.Dr. Nguyen Thi Bat

Prof.Dr. Do Quang Khang

Assoc.Prof.Dr. Ngo Sy Luong

Assoc.Prof.Dr. Khuat Van Ninh

Prof.Dr.Sc. Pham Hoang Hai

Assoc.Prof.Dr. Doan Ngoc Hai

Assoc.Prof.Dr. Nguyen Ngoc Ha

Prof.Dr. Yu Ming Zhang

Prof.Dr. Nguyen Van Anh

■ **Editorial**

Dr. Vu Van Dong - Head

MSc. Doan Thi Thu Hang - Deputy Head

Địa chỉ Tòa soạn:

Trường Đại học Sao Đỏ.

Số 76, Nguyễn Thị Duệ, Thái Học 2, phường Sao Đỏ, thành phố Chí Linh, tỉnh Hải Dương.

Điện thoại: (0220) 3587213, Fax: (0220) 3882 921, Hotline: 0912 107858/0936 847980.

Website: <http://tapchikhcn.saodo.edu.vn/>Email: tapchikhcn@saodo.edu.vn.

Giấy phép xuất bản số: 620/GP-BTTTT ngày 17/9/2021 của Bộ Thông tin và Truyền thông.

In 2.000 bản, khổ 21 × 29,7cm, tại Công ty TNHH in Tre Xanh, cấp ngày 17/02/2011.

LIÊN NGÀNH ĐIỆN - ĐIỆN TỬ - TỰ ĐỘNG HÓA

- | | | |
|--|----|---|
| Dự báo tình trạng sức khỏe của pin lithium (SOH) dựa trên mô hình hình tự hồi quy phi tuyến tính có đầu vào ngoại sinh | 5 | Phạm Thành Long
Võ Duy Thành
Nguyễn Bảo Huy
Trần Hoài Linh |
| Mô hình trên máy tính bộ biến đổi hòa hợp tải DC-DC | 11 | Phạm Công Tảo
Phạm Thi Hoan |
| Thiết kế thiết bị đo thông số môi trường sử dụng mạch nhúng ARM và truyền thông LoRa để ứng dụng trong nông nghiệp | 19 | Trần Thị Phương Thảo
Đỗ Văn Đình |
| Nghiên cứu động lực học và trạng thái cơ học của sàng rung sử dụng phương pháp phần tử biên | 27 | Nguyễn Thị Phương Oanh
Nguyễn Thị Sim
Vũ Trí Võ |

LIÊN NGÀNH CƠ KHÍ - ĐỘNG LỰC

- | | | |
|--|----|---|
| Nghiên cứu ảnh hưởng của vật liệu đến chất lượng bề mặt khi miết ép dao động | 34 | Nguyễn Văn Hình
Nguyễn Đức Hải
Đào Văn Kiên |
| Nghiên cứu ảnh hưởng của tốc độ chày và góc nghiêng thành khuôn đến chất lượng sản phẩm trong quá trình dập đa điểm phôi tấm | 40 | Trần Hải Đăng
Nguyễn Hữu Chấn
Trần Văn Diện
Nguyễn Thị Thu |
| Nghiên cứu ảnh hưởng số đường may chần bông, khối lượng tấm bông và số lớp bông đến độ co áo jacket | 45 | Nguyễn Thị Hiền
Phạm Thị Kim Phúc
Đỗ Thị Làn
Nguyễn Văn Đoàn |
| Nghiên cứu ảnh hưởng của một số thông số công nghệ cơ bản đến độ co hình thù vi tính trên vải Pe/Co | 51 | Nguyễn Quang Thoại |

NGÀNH KINH TẾ

- | | | |
|--|----|---|
| Giải pháp Marketing nhằm phát triển du lịch nông thôn trên địa bàn tỉnh Hải Dương | 59 | Vũ Thị Hương
Nguyễn Thị Huế
Nguyễn Thị Thủy |
| Giải pháp truyền thông nâng cao hiệu quả công tác tuyển sinh của Trường Đại học Sao Đỏ | 65 | Ngô Thị Luyện
Nguyễn Thị Ngọc Mai |

NGÀNH KINH TẾ

- Kế toán chi phí môi trường và chi phí xã hội tại các doanh nghiệp FDI trên địa bàn tỉnh Hải Dương: Thực trạng và giải pháp 71 Đinh Thị Kim Thiết
- Các nhân tố ảnh hưởng đến sự hài lòng của du khách nội địa đối với hoạt động du lịch lễ hội tỉnh Hải Dương 77 Nguyễn Thị Huệ

NGÀNH HÓA HỌC - THỰC PHẨM

- Nghiên cứu tính chất cấu trúc của các cluster $[Mo_6X_{14}]$ ($X = F, Cl, Br, I$) ở 22 EM và năng lượng ion hóa thứ 2 của các cluster $[Mo_6X_{14}]^{2-}$ bằng phương pháp phiếm hàm mật độ 82 Phạm Thị Điệp

NGÀNH KHOA HỌC GIÁO DỤC

- Sử dụng trích đoạn phim trong việc nâng cao kỹ năng nói tiếng Trung Quốc của học sinh sinh viên trong các cơ sở giáo dục đại học 98 Phạm Thị Hồng Trang
- Nghiên cứu và vận dụng các phương pháp dạy học tích cực trong giảng dạy các học phần tiếng Anh căn bản cho sinh viên Trường Đại học Sao Đỏ 94 Tăng Thị Hồng Minh
Trần Thị Mai Hương
Đặng Thị Thanh

LIÊN NGÀNH TRIẾT HỌC - XÃ HỘI HỌC - CHÍNH TRỊ HỌC

- Giáo dục giá trị đạo đức truyền thống dân tộc cho sinh viên Trường Đại học Sao Đỏ hiện nay 101 Nguyễn Thị Hiền
Trần Thị Hồng Nhung
Nguyễn Mạnh Tường
- Đề xuất giải pháp nâng cao năng lực số cho giảng viên trong bối cảnh chuyển đổi số 107 Nguyễn Thị Nhan
- Vận dụng tư tưởng triết học trong Truyện Kiều của Nguyễn Du vào giảng dạy học phần Triết học Mác - Lênin cho sinh viên Trường Đại học Sao Đỏ 112 Đỗ Thị Thùy
Phạm Xuân Đức
Nguyễn Thị Hải Hà
- Giá trị thời đại của tác phẩm “Nâng cao đạo đức cách mạng, quét sạch chủ nghĩa cá nhân” của Chủ tịch Hồ Chí Minh và sự vận dụng của Đảng ta trong công cuộc đấu tranh chống chủ nghĩa cá nhân, xây dựng Đảng hiện nay 118 Phạm Văn Dự
Vũ Hồng Phong

NGÀNH VĂN HÓA - NGHỆ THUẬT - THỂ DỤC THỂ THAO

- Nghiên cứu, ứng dụng các bài tập bổ trợ nhằm nâng cao hiệu quả thi đấu cho đội bóng chuyền hơi nữ sinh viên Trường Đại học Sao Đỏ 124 Hà Đình Soát
Vũ Tiến Hiếu

TITLE FOR ELECTRICITY - ELECTRONICS - AUTOMATION

- | | | |
|---|----|---|
| Prediction of Lithium battery State of Health (SOH) based on a nonlinear autoregressive exogenous model | 5 | Pham Thanh Long
Vo Duy Thanh
Nguyen Bao Huy
Tran Hoai Linh |
| Computer model of the DC-DC matching converter | 11 | Pham Cong Tao
Pham Thi Hoan |
| Designing environment parameter measurement device for agricultural applications using embedded ARM and LoRa communication technology | 19 | Tran Thi Phuong Thao
Do Van Dinh |
| Dynamic and structural analysis of a vibrating sieve using the boundary element method | 27 | Nguyen Thi Phuong Oanh
Nguyen Thi Sim
Vu Tri Vo |

TITLE FOR MECHANICAL AND DRIVING POWER ENGINEERING

- | | | |
|---|----|---|
| Research on the influence of materials on surface quality in oscillating smoothing process | 34 | Nguyen Van Hinh
Nguyen Duc Hai
Dao Van Kien |
| Effect of punching speed and die wall bevel angle on product quality during incremental sheet forming process | 40 | Tran Hai Dang
Nguyen Huu Chan
Tran Van Dien
Nguyen Thi Thu |
| Research on the influence of number of quilted seams, quilted weight and number of quilted layers on jacket shrinkage | 45 | Nguyen Thi Hien
Pham Thi Kim Phuc
Do Thi Lan
Nguyen Van Doan |
| The influence of some embroidery technology factors on the shrinkage of PE/CO fabric when embroidering on computerized machines | 51 | Nguyen Quang Thoai |

TITLE FOR ECONOMICS

- | | | |
|--|----|---|
| Local Marketing solutions to develop rural tourism in Hai Duong province | 59 | Vu Thi Huong
Nguyen Thi Hue
Nguyen Thi Thuy |
| The communication solutions to enhance the effectiveness of enrollment work at Sao Do University | 65 | Ngo Thi Luyen
Nguyen Thi Ngoc Mai |

TITLE FOR ECONOMICS

- Environmental cost and social cost accounting at FDI enterprises in Hai Duong province: Current situation and solutions 71 Dinh Thi Kim Thiet
- Factors affecting the satisfaction of domestic tourists with the festival tourism activities in Hai Duong province 77 Nguyen Thi Hue

TITLE FOR CHEMISTRY - FOOD

- Study of the structural properties of clusters $[Mo_6X_{14}]$ ($X = F, Cl, Br, I$) at 22 EM and the second ionization energy of clusters $[Mo_6X_{14}]^{2-}$ by the density functional method 82 Pham Thi Diep

TITLE FOR EDUCATION SCIENCE

- Using movie clips to improve the Chinese speaking skills of students in higher education institutions 88 Pham Thi Hong Trang
- Research and application of active teaching methods in teaching basic English course for students at Sao Do University 94 Tang Thi Hong Minh
Tran Thi Mai Huong
Dang Thi Thanh

TITLE FOR PHILOSOPHY - SOCIOLOGY - POLITICAL SCIENCE

- Educating traditional moral values of the nation for students at Sao Do University today 101 Nguyen Thi Hien
Tran Thi Hong Nhung
Nguyen Manh Tuong
- Proposing solutions to improve digital capacity for lecturers in the context of digital transformation 107 Nguyen Thi Nhan
- Research and apply philosophical ideas in Nguyen Du's The Tale of Kieu in teaching the Marxist-Leninist philosophy module for students at Sao Do University 112 Do Thi Thuy
Pham Xuan Duc
Nguyen Thi Hai Ha
- The contemporary value of the work "Improving revolutionary morality, wiping out individualism" by President Ho Chi Minh and its application by our Party in the current struggle against individualism and party building 118 Pham Van Du
Vu Hong Phong

TITLE FOR CULTURE - ALGORITHMS - SPORTS

- Research and application of supplementary exercises to enhance the performance of the female volleyball team of Sao Do University students 124 Ha Dinh Soat
Vu Tien Hieu

Nghiên cứu tính chất cấu trúc của các cluster $[\text{Mo}_6\text{X}_{14}]$ ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) ở 22 EM và năng lượng ion hóa thứ 2 của các cluster $[\text{Mo}_6\text{X}_{14}]^{2-}$ bằng phương pháp phiếm hàm mật độ

Study of the structural properties of clusters $[\text{Mo}_6\text{X}_{14}]$ ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) at 22 EM and the second ionization energy of clusters $[\text{Mo}_6\text{X}_{14}]^{2-}$ by the density functional method

Phạm Thị Diệp

Tác giả liên hệ: phamdiepdhdsd@gmail.com

Trường Đại học Sao Đỏ

Ngày nhận bài: 13/4/2025

Ngày nhận bài sửa sau phản biện: 26/5/2025

Ngày chấp nhận đăng: 02/6/2025

Tóm tắt

Tính chất cấu trúc của cluster Mo_6X_{14} ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) ở 22 EM đã được nghiên cứu bằng phương pháp phiếm hàm mật độ ở mức độ lý thuyết PBE/TZ2P, tính đến ảnh hưởng tương quan trong sự gần đúng ZORA và tương tác spin-orbit, ở dạng cấu hình spin singlet và triplet. Kết quả tính toán cho thấy cluster bromide ổn định ở dạng đối xứng C_{2v} và iodide ổn định ở dạng đối xứng D_{4h} ứng với cấu hình spin cao trong khi cluster $\text{Mo}_6\text{Cl}_{14}$ lại ổn định ở dạng đối xứng C_s đối với cấu hình spin thấp. Sự biến dạng lớn trong lõi kim loại của cluster flouride đã được chứng minh và của các cluster được nghiên cứu giảm dần từ flouride đến iodide. Kết quả tính toán năng lượng ion hóa thứ hai của các cluster $[\text{Mo}_6\text{X}_{14}]^{2-}$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) cho thấy năng lượng ion hóa thứ hai cao hơn nhiều so với năng lượng ion hóa thứ nhất, điều này gây khó khăn lớn trong việc oxy hóa các ion này để đạt được phân tử trung hòa.

Từ khóa: DFT; cluster; cấu trúc; đối xứng; năng lượng; năng lượng ion hóa thứ hai.

Abstract

The structural properties of the clusters Mo_6X_{14} ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) at 22 EM were studied by the density functional method at the theoretical level PBE/TZ2P, taking into account the the scalar relative effect in the ZORA approximation and the spin-orbit coupling, in singlet and triplet spin configurations. The calculations showed that the bromide cluster is stable in C_{2v} symmetry and the iodide cluster is stable in D_{4h} symmetry corresponding to the high spin configuration while the $\text{Mo}_6\text{Cl}_{14}$ cluster is stable in C_s symmetry for the low spin configuration. The large distortion in the metallic core of the fluoride cluster has been demonstrated and that of the studied clusters decreases from fluoride to iodide. The calculation results of the second ionization energy of the clusters $[\text{Mo}_6\text{X}_{14}]^{2-}$ ($\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) show that the second ionization energy is much higher than the first ionization energy, which causes great difficulty in oxidizing great these ions to obtain neutral molecules.

Keywords: DFT; cluster; structure; symmetry; second ionization potential.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Các cluster bát diện của molybden ở dạng ($\text{X} = \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ và L là các phối tử vô cơ hoặc hữu cơ) gần đây đã được nghiên cứu cho các ứng dụng mới trong pin năng lượng mặt trời [1], xúc tác quang [2] và trong các thiết bị chiếu sáng gia đình [3]. Các phức chất của những cluster này có một lõi kim loại ở 24 electron kim loại (EM) và thể hiện đặc tính phát quang đặc

trưng bởi sự phát xạ trong vùng đỏ và vùng gần hồng ngoại. Những hợp chất của molybden có chứa anion đã được biết đến nhiều và được nghiên cứu rộng rãi đặc biệt là hợp chất dựa trên những công trình nghiên cứu đã chứng minh rằng những phức chất này bị oxy hóa không thuận nghịch theo từng bước 1 electron khi $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$ và bị oxy hóa thuận nghịch khi $\text{X} = \text{I}$ [4]. Các cluster oxy hóa thể hiện một số tính chất lý hóa và tính chất quang học khác so với 24 EM. Các cluster này thường được gọi là kho chứa electron vì số lượng electron của chúng có thể thay đổi từ 20 EM đến 24 EM. Đối với những hợp chất có ứng dụng tiềm

Người phản biện: 1. PGS.TS. Nguyễn Ngọc Hà
2. TS. Hoàng Thị Hòa

năng, điều quan trọng là phải xác định độ ổn định oxy hóa khử của các cluster này. Điều này có thể được nghiên cứu bằng các phép tính toán lượng tử. Để hiểu rõ hơn về cấu trúc và tính chất oxy hóa khử của các cluster bát diện có công thức chung ($X = F, Cl, Br, I$; $n = -2, -1, 0, 1, 2$), nhóm tác giả đã nghiên cứu tính chất cấu trúc ứng với $n = -2$ và $n = -1$, năng lượng ion hóa thứ nhất của các cluster nhằm giải thích các kết quả thực nghiệm và định hướng nghiên cứu. Để phân tích cấu trúc điện tử, sự biến dạng liên kết trong những cluster ứng với $n = 0$ và chọn ra dạng đối xứng bền nhất giúp giải thích các dạng tồn tại thực nghiệm chúng tôi đã thực hiện những tính toán bằng phần mềm ADF (Amsterdam Density Functional) với sự giảm đối xứng từ dạng đối xứng nhóm điểm cao nhất O_h đến dạng đối xứng nhóm điểm thấp nhất C_1 . Chúng tôi tập trung vào tính chất cấu trúc và oxy hóa khử của các cluster riêng biệt.

2. PHƯƠNG PHÁP TÍNH

Những tính toán lượng tử phân tử được thực hiện bằng phần mềm ADF [4]. Các tính toán dựa trên một toán tử Hamilton tương quan tuyến tính trong sự gần đúng ZORA [5] với việc tính toán đến tương tác spin-orbit (ký hiệu RS + SO) được thực hiện. Phiếm hàm mật độ tương quan trao đổi GGA (PBE) được sử dụng [6]. Việc tối ưu hóa hình học được thực hiện theo phương pháp được phát triển bởi Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS). Một cơ sở triplet- ζ của các hàm Slater với các hàm lưỡng cực được sử dụng cho các nguyên tử trong cluster (TZ2P). Các orbital nguyên tử từ 1s đến 4p của Mo và I, từ 1s đến 2s của Cl, từ 1s đến 3p của Br được xử lý trong sự gần đúng “lõi đông cứng” (frozen core). Những tính toán này được thực hiện trên các hệ phân tử không hạn chế tính đối xứng.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Tính chất cấu trúc của các cluster $[Mo_6X_{14}]$ $X = F, Cl, Br, I$

Chúng tôi đã thực hiện các tính toán phân tử trên các cluster bát diện trung hòa $[Mo_6X_{14}]$ ($X = F, Cl, Br, I$) ở 22 EM. Để hiểu rõ hơn về cấu trúc điện tử tương ứng với số electron này, trước tiên chúng tôi đã thực hiện các phép tính trên hợp chất trung hòa $[Mo_6Cl_{14}]$ khi xem xét các trạng thái spin khác nhau: Trạng thái singlet (với tổng spin $S = 0$) và trạng thái triplet (với tổng spin $S = 1$). Việc tối ưu hóa hình học được thực hiện trong các nhóm điểm đối xứng khác nhau $O_h, D_{3d}, D_{4h}, C_{4v}, C_{3v}, C_{2v}, C_s$ và C_1 .

Để lựa chọn cấu trúc bền vững nhất chúng tôi đã thực hiện tối ưu hóa từng dạng đối xứng và lựa chọn dạng có năng lượng tối ưu hóa nhỏ nhất.

Kết quả nghiên cứu tính chất cấu trúc của cluster $[Mo_6X_{14}]$ ($X = F, Cl, Br, I$) ở 23 EM cho thấy việc tính

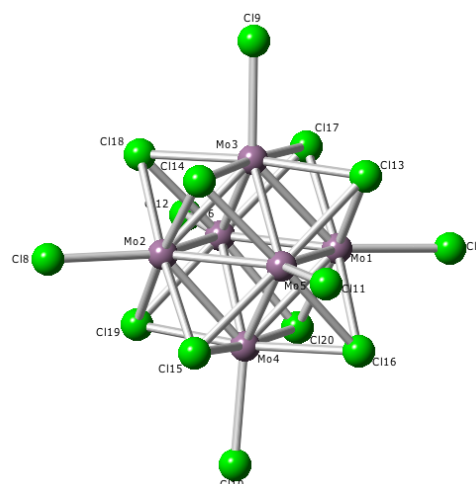
đến ảnh hưởng tương quan trong sự gần đúng ZORA và tương tác spin-orbit ít ảnh hưởng tới cấu trúc hình học trung bình của các cluster nghiên cứu [7]. Tuy nhiên, tương tác này lại có ý nghĩa trong việc tính năng lượng ion hóa thứ nhất của các cluster $[Mo_6X_{14}]^{2-}$ ($X = F, Cl, Br, I$) [8]. Chính vì vậy mà trong bài báo này chúng tôi đã nghiên cứu tính chất cấu trúc của các cluster hòa $[Mo_6X_{14}]$ ($X = F, Cl, Br, I$) ở 22 EM trong sự gần đúng ZORA và tính đến tương tác spin-orbit (RS + SO).

3.1.1. Cluster Mo_6Cl_{14}

Trước tiên chúng tôi tối ưu hóa cấu trúc của cluster Mo_6Cl_{14} ở 22 EM trong 2 trạng thái spin khác nhau: Singlet và triplet, kết quả năng lượng tối ưu hóa trong Bảng 1 cho thấy dạng đối xứng C_s đối với cấu hình spin thấp ($S = 0$) có năng lượng thấp nhất (-109,078 eV) và dạng đối xứng C_{2v} (Hình 1) đối với cấu hình spin cao ($S = 1$) có năng lượng thấp nhất (-108,996 eV) là bền vững nhất. Khoảng cách của các dạng đối xứng được tối ưu hóa thể hiện trong Bảng 2 và 3.

Bảng 1. Năng lượng tối ưu hóa của cluster $[Mo_6Cl_{14}]$ ở các dạng đối xứng khác nhau ứng với trạng thái spin singlet ($S = 0$) và triplet ($S = 1$)

Đối xứng	E(eV, $S = 0$)	E(eV, $S = 1$)
O_h	-108,987	-108,958
D_{3d}	-108,993	-108,989
D_{4h}	-109,015	-108,987
C_{4v}	-109,054	-108,946
C_{3v}	-109,046	-108,968
C_{2v}	-109,065	-108,996
C_s	-109,078	-108,985
C_1	-109,068	-108,976



Hình 1. Cấu trúc của cluster được tối ưu hóa ở dạng đối xứng nhóm điểm C_{2v}

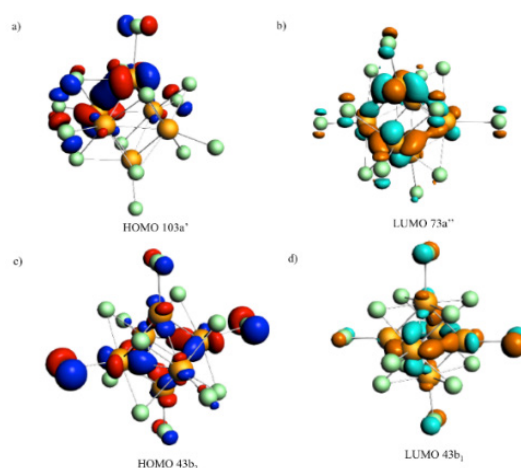
Bảng 2. Khoảng cách tối ưu của cluster $[Mo_6Cl_{14}]$ dạng đối xứng C_s , ở 22 EM, trạng thái singlet ($S = 0$)

Mo-Mo (Å)		Mo-Cl ⁱ (Å)	
Mo1-Mo3	2,711 (x2)	Mo1-Cl13	2,491 (x2)
Mo1-Mo5	2,752 (x2)	Mo5-Cl13	2,454 (x2)
Mo1-Mo4	2,716 (x2)	Mo2-Cl14	2,534 (x2)
Mo2-Mo3	2,594 (x2)	Mo3-Cl14	2,513 (x2)
Mo2-Mo4	2,593 (x2)	Mo5-Cl14	2,465 (x2)
Mo1-Mo6	2,551	Mo2-Cl18	2,474 (x2)
Mo2-Mo6	2,628	Mo2-Cl15	2,537 (x2)
Mo-Cl ^a (Å)		Mo4-Cl15	2,467 (x2)
Mo1-Cl7	2,356 (x2)	Mo5-Cl15	2,514 (x2)
Mo2-Cl8	2,361 (x2)	Mo1-Cl16	2,492 (x2)
Mo3-Cl9	2,357	Mo2-Cl19	2,475 (x2)
Mo4-Cl10	2,359	Mo6-Cl19	2,477
		Mo1-Cl20	2,467

Bảng 3. Khoảng cách tối ưu của cluster $[Mo_6Cl_{14}]$ dạng đối xứng C_{2v} , ở 22 EM, trạng thái triplet ($S = 1$). Số thứ tự của các nguyên tử tương ứng với Hình 1

Mo-Mo (Å)		Mo-Cl ⁱ (Å)		Mo-Cl ^a (Å)	
Mo1-Mo3	2,676 (x4)	Mo1-Cl13	2,471 (x4)	Mo1-Cl7	2,363 (x2)
Mo1-Mo5	2,738 (x2)	Mo3-Cl13	2,523 (x4)	Mo2-Cl8	2,362 (x2)
Mo1-Mo6	2,637 (x2)	Mo5-Cl13	2,499 (x4)	Mo3-Cl9	2,364
Mo4-Mo5	2,631 (x2)	Mo2-Cl14	2,466 (x4)	Mo4-Cl10	2,359
Mo3-Mo6	2,593 (x2)	Mo3-Cl14	2,483 (x4)		
		Mo5-Cl14	2,516 (x4)		

Từ Bảng 2 và Bảng 3 cho thấy cluster $[Mo_6Cl_{14}]$ ở trạng thái triplet có lõi kim loại ít bị biến dạng hơn so với cluster được tối ưu hóa ở trạng thái singlet: khoảng cách Mo-Mo trung bình bằng 2,66 Å bất kể cấu hình từ tính nào, nhưng độ chênh lệch về khoảng cách trong cluster spin thấp lớn hơn (0,201 Å) so với độ chênh lệch khoảng cách được đo trong cluster spin cao (0,145 Å). Sự biến dạng lớn hơn của các dạng cấu hình spin thấp cũng có thể quan sát được trên khoảng cách Mo-Clⁱ. Sự biến đổi về mặt cấu trúc phù hợp với đặc điểm của các orbital không bị chiếm so với các cluster ở 23 và 24 EM. HOMO và LUMO của 2 dạng hình học được tối ưu hóa trong các cấu hình spin khác nhau được thể hiện trong Hình 2. Đối với trạng thái đơn, HOMO là một orbital đối xứng a'' thể hiện tính chất liên kết Mo-Mo yếu và tính chất phản liên kết Mo-Cl yếu trong khi LUMO là một orbital đối xứng a' thể hiện tính chất liên kết Mo-Mo và tính chất phản liên kết Mo-Cl^a. Đối với trạng thái triplet, HOMO là orbital đối xứng b_2 thể hiện tính liên kết Mo-Mo yếu và tính phản liên kết Mo-Cl^a trong khi LUMO là một orbital đối xứng b_1 thể hiện tính liên kết Mo-Mo và tính phản liên kết Mo-Cl^a rõ rệt.



Hình 2. Biểu diễn các MO của cluster Mo_6Cl_{14} được tối ưu hóa ở 22 EM trong trạng thái singlet (a và b) và triplet (c và d). Nguyên tử molybdenum và clo được thể hiện lần lượt bằng màu cam và xanh lá cây

3.1.2. Cluster $[Mo_6X_{14}]$ ($X = Br, I$)

Trong bước thứ hai, chúng tôi đã tối ưu hóa cấu trúc hình học của các cluster khác, dạng $[Mo_6X_{14}]$ ($X = Br, I$) ở 22 EM đi từ đối xứng O_h đến C_1 khi xem xét đến trạng

thái spin singlet và triplet. Kết quả tối ưu hóa cấu trúc của các cluster có năng lượng thấp được tổng hợp trong Bảng 4 cho các cluster bromide (đối xứng C_{2v}) và iodide (đối xứng D_{4h}). Giá trị trung bình của các thông số cấu trúc chính được trình bày trong Bảng 5. Điều thú vị là cluster chloride ổn định hơn ở trạng thái cấu hình spin thấp trong khi cluster bromide và iodide ở 22 EM ổn định hơn ở cấu hình spin cao. Xét các giản

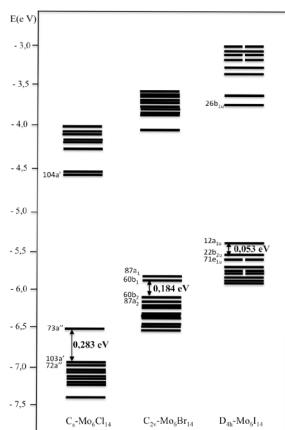
đồ MO được trình bày trong Hình 3, điều này có thể được giải thích bằng sự chênh lệch năng lượng nhỏ hơn giữa HOMO và LUMO của các cluster ở trạng thái cấu hình spin singlet với cluster iodide (0,053 eV) và bromide (0,184 eV) so với các cluster chloride (0,283 eV). Do đó, việc đưa một trong 2 electron của MO bị chiếm vị trí cao nhất lên trạng thái năng lượng cao hơn trở nên khả thi đối với các cluster bromide và iodide.

Bảng 4. Khoảng cách tối ưu của cluster $[Mo_6Br_{14}]$ đối xứng C_{2v} và $[Mo_6I_{14}]$ đối xứng D_{4h} ở trạng thái triplet

Mo-Mo (Å)		Mo-Br ⁱ (Å)		Mo-Br ^a (Å)	
Mo1-Mo3	2,761 (x2)	Mo1-Br13	2,624 (x4)	Mo1-Br7	2,536 (x4)
Mo1-Mo5	2,671 (x2)	Mo5-Br13	2,652 (x4)	Mo2-Br8	2,533
Mo1-Mo6	2,698 (x4)	Mo2-Br14	2,605 (x4)	Mo3-Br9	2,540
Mo1-Mo4	2,628 (x2)	Mo3-Br14	2,599 (x4)		
Mo2-Mo3	2,651 (x2)	Mo5-Br14	2,621 (x4)		
		Mo2-Br18	2,642 (x4)		
Mo-Mo (Å)		Mo-I ⁱ (Å)		Mo-I ^a (Å)	
Mo1-Mo3	2,738 (x4)	Mo1-I13	2,805 (x8)	Mo1-I7	2,792 (x4)
Mo1-Mo5	2,693 (x8)	Mo5-I13	2,793 (x16)	Mo3-I9	2,793 (x2)

Bảng 5. Khoảng cách trung bình của các cluster được tối ưu hóa $[Mo_6X_{14}]$ ($X = Cl, Br, I$)

Halogen	X = Cl	X = Br	X = I
Dạng đối xứng	C_s ($S = 0$)	C_{2v} ($S = 1$)	D_{4h} ($S = 1$)
Mo-Mo (Å)	2,66	2,68	2,71
Mo-X ⁱ (Å)	2,49	2,62	2,80
Mo-X ^a (Å)	2,36	2,54	2,79



Hình 3. Giản đồ DFT MO của các cluster năng lượng thấp nhất ($X = Cl, Br, I$) trong cấu hình spin thấp

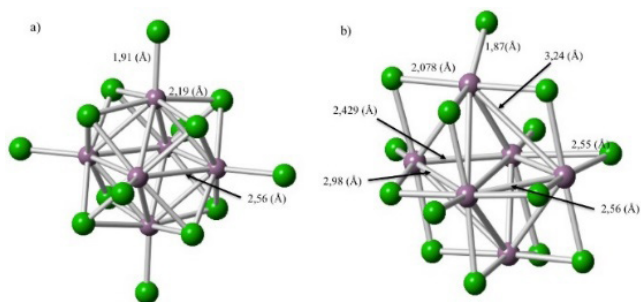
Không giống như cluster chloride, cluster bromide và iodide có lõi kim loại ít bị biến dạng hơn, điều này nằm trong dự đoán do cấu hình spin cao của chúng dẫn đến sự tương tác giữa các điện tử yếu hơn, làm cho lõi kim loại ít bị biến dạng hơn. Thật vậy, Bảng 4 cho thấy cluster $[Mo_6Br_{14}]$ ở trạng thái triplet thể hiện lõi kim loại bị biến dạng với liên kết Mo-Mo: Khoảng cách ngắn nhất là 2,628 Å, khoảng cách dài nhất là 2,761 Å

(sự thay đổi là 0,133 Å); Sự thay đổi này thấp đối với liên kết Mo-Brⁱ (0,053 Å) và Mo-Br^a (0,007 Å). Sự biến dạng của lõi kim loại ứng với cluster $[Mo_6I_{14}]$ thậm chí còn ít hơn với phạm vi khoảng cách bị biến đổi: Mo-Mo là 0,045 Å và Mo-Iⁱ là 0,012 Å; khoảng cách Mo-I^a hầu như không thay đổi. Như vậy, đối với cluster bromide và iodide lõi kim loại ít bị biến dạng hơn chloride và khả năng biến dạng giảm dần từ chloride đến iodide.

3.1.2. Cluster $[Mo_6F_{14}]$

Trường hợp cluster Mo_6F_{14} là duy nhất có sự khác biệt so với 3 cluster halide trên. Bằng cách áp đặt đối xứng bát diện O_h , quá trình tối ưu hóa hình học dẫn đến các liên kết Mo-Mo của cluster này dài hơn các liên kết Mo-Mo ở 23 và 24 EM, điều này phù hợp với việc không bị chiếm của MO có đặc tính liên kết Mo-Mo. Lõi kim loại không bị biến dạng, độ dài liên kết Mo-Mo là 2,56 Å (Hình 4a). Mặt khác, khi ràng buộc đối xứng hoàn toàn được loại bỏ, khối bát diện kim loại với mỗi mặt được phủ bằng halogen sẽ phát triển mạnh mẽ. Khối bát diện kim loại bị biến dạng rất lớn (Hình 4b): Một trong những khoảng cách Mo-Mo lớn nhất là 3,24 Å, nhỏ nhất là 2,43 Å với sự chênh lệch là 0,81 Å. Hoàn

toàn khác so với lõi kim loại của dạng đối xứng O_h . Cũng quan sát trên Hình 4 chúng ta thấy một số cạnh của nó bị che khuất, gây bất lợi cho các mặt của nó. Cấu trúc lõi kim loại ở dạng đối xứng C_s biến đổi hoàn toàn so với dạng đối xứng O_h . Kết quả này chứng minh tính không ổn định của cluster này khi số lượng EM trong cấu trúc giảm. Điều thú vị, chú ý rằng kiến trúc bát diện có cạnh bị giới hạn của cluster $Mo_6X_{12}X^a_3$ bền vững hơn. Mặc dù các halide loại $Mo_6X_{12}X^a_6$ rất phổ biến, nhưng chỉ có một cluster fluoride như vậy được chứng minh với sự biến dạng của nhân kim loại trong hợp chất Nb_6F_{15} , nơi lõi bát diện được tạo thành từ các nguyên tử niobium và các phối tử đỉnh được chia sẻ giữa các cluster lân cận [9].



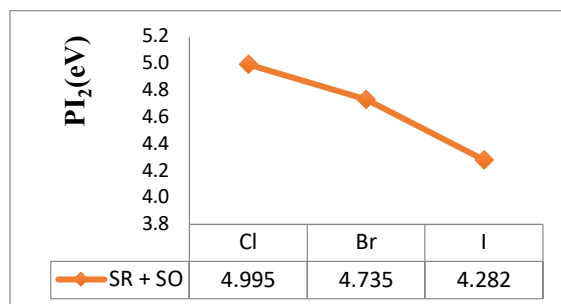
Hình 4. Cấu trúc tối ưu và khoảng cách được chỉ ra của cluster $[Mo_6F_{14}]$ ở 22 EM a) trong nhóm đối xứng O_h , b) trong nhóm đối xứng C_s ổn định nhất ở trạng thái singlet ($S = 0$)

3.2. Năng lượng ion hóa thứ 2 của các $[Mo_6X_{14}]^{2-}$ ($X = F, Cl, Br, I$)

Xét về kết quả thu được đối với các cluster được fluoride, chỉ có năng lượng ion hóa thứ hai (PI_2) của các cluster $[Mo_6X_{14}]$ ($X = Cl, Br, I$) được tính toán từ năng lượng của các cluster được tối ưu hóa ở 23 EM [8] và 22 EM có năng lượng thấp hơn (Bảng 6). Kết quả tính toán được thể hiện ở Hình 5; Theo hiểu biết của chúng tôi, không có giá trị thực nghiệm nào cho thể ion hóa thứ hai này. Bất kể loại halogen nào được xem xét, các giá trị tính toán cho PI_2 đều cao hơn nhiều so với PI_1 [8]; do đó nó gây ra khó khăn lớn trong việc oxy hóa các ion này để đạt được phân tử trung hòa. Điều này có thể giải thích tại sao các cluster ở 22 EM này rất hiếm khi được quan sát thấy. Điều thú vị cần lưu ý là xu hướng của PI_2 liên quan đến bản chất của halogen cũng tương tự như xu hướng của PI_1 : Halogen càng nặng thì năng lượng ion hóa được tính toán càng thấp.

Bảng 6. Năng lượng tối ưu hóa thấp hơn của các cluster $[Mo_6X_{14}]$ ($X = Cl, Br, I$) ở 23 EM và 22 EM

Halogen	X = Cl	X = Br	X = I
Đối xứng	C_{2v}	C_{2v}	D_{4h}
E (eV, 23 EM)	-114.068	-107.443	-101.469
Đối xứng	C_s	C_{2v}	D_{4h}
E (eV, 22 EM)	-109.078	-102.708	-97.187



Hình 5. Năng lượng ion hóa thứ hai của cluster $[Mo_6X_{14}]$ ($X = Cl, Br, I$) (tính toán RS+ SO)

4. KẾT LUẬN

Tính chất cấu trúc của các cluster Mo_6X_{14} ($X = F, Cl, Br, I$) ở 22 EM đã được nghiên cứu bằng phương pháp phiếm hàm mật độ, tính đến ảnh hưởng tương quan trong sự gần đúng ZORA và tương tác spin-orbit, ở 2 dạng cấu hình spin singlet và triplet. Phiếm hàm tương quan trao đổi PBE được sử dụng trong khi xem xét các dạng đối xứng nhóm điểm khác nhau: O_h , D_{3d} , D_{4h} , C_{4v} , C_{3v} , C_{2v} , C_s và C_1 . Kết quả tính toán cho thấy cluster bromide ổn định ở dạng đối xứng C_{2v} và iodide ổn định ở dạng đối xứng D_{4h} ứng với cấu hình spin cao trong khi cluster Mo_6Cl_{14} lại ổn định ở dạng đối xứng C_s đối với cấu hình spin thấp. Sự biến dạng lớn trong lõi kim loại của cluster fluoride đã được chứng minh và sự biến dạng này của các cluster được nghiên cứu giảm dần từ fluoride đến iodide. Kết quả tính toán năng lượng ion hóa thứ hai của các cluster $[Mo_6X_{14}]^{2-}$ ($X = Cl, Br, I$) cho thấy giá trị tính toán PI_2 cao hơn nhiều so với PI_1 , do đó nó gây ra khó khăn lớn trong việc oxy hóa các ion này để đạt được phân tử trung hòa. Điều đó chứng tỏ rằng các phân tử trung hòa ở dạng Mo_6X_{14} không thể tồn tại ở điều kiện thường.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. A. Renaud, F. Grasset, B. Dierre, T. Uchikoshi, N. Ohashi, T. Takei, A. Planchat, L. Cario, S. Jobic, F. Odobel, S. Cordier (2016), *Inorganic Molybdenum Clusters as Light-Harvester in All Inorganic Solar Cells: A Proof of Concept*, Chemistryselect, 1, 2284-2289.
- [2]. A. Barras, S. Cordier, R. Boukherroub (2012), *Fast photocatalytic degradation of rhodamine B over $[Mo_6Br_8(N_3)_6]^{2-}$ cluster units under sun light irradiation*, Appl. Catal, 123, 1-8.
- [3]. O. A. Efremova, K. A. Brylev, O. Kozlova, M. S. White, M. A. Shestopalov, N. Kitamura, Y. V. Mironov, S. Bauer, A. J. Sutherland (2014), *Polymerisable octahedral rhenium cluster complexes as precursors for photo/electroluminescent polymers*, J. Mater. Chem, 40, 8630-8638.

- [4]. K. Kirakci, P. Kubat, J. Langmaier, T. Polivka, M. Fuciman, K. Fejfarova, K. A. Lang (2013), *A comparative study of the redox and excited state properties of $(nBu_4N)_2[Mo_6X_{14}]$ and $(nBu_4N)_2[Mo_6X_8(CF_3COO)_6]$ ($X = Cl, Br, \text{ or } I$)*, Dalton Trans. 42 (19), 7224-7232.
- [5]. J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof (1996), *Generalized Gradient Approximation Made Simple*, Phys. Rev. Lett, 77, 3865-3868.
- [6]. E. Van Lenthe, A. Ehlers, E. J. Baerends (1999), *Geometry optimizations in the zero order regular approximation for relativistic effects*, J. Chem. Phys, 110, 8943-8953.
- [7]. Phạm Thị Điệp (2021), *Nghiên cứu tính chất cấu trúc của các cluster $[Mo_6X_{14}]^{2-}$ ($X = F, Cl, Br, I$) bằng phương pháp phiếm hàm mật độ*, Tạp chí Nghiên cứu khoa học, Trường Đại học Sao Đỏ, 1(72), 99-105.
- [8]. Pham Thi Diep, Vu Hoang Phuong, Mac Thi Le (2022), *Study of structural properties and first ionization potential of clusters $[Mo_6X_{14}]^{2-}$ ($X = F, Cl, Br, I$) by the density functional method*, Tạp chí Nghiên cứu khoa học, Trường Đại học Sao Đỏ, 4(79), 87-92.
- [9]. G. Kliche, H.-G. von Schnering (1989), *Schwingungsspektren der Clusterverbindung Nb_6F_{15} /Vibrational Spectrum of the Cluster Compound Nb_6F_{15}* , Z. Naturforsch. 44b:74-78.

AUTHOR INFORMATION

Pham Thi Diep

Corresponding Author: phamdiepdhsd@gmail.com

Sao Do University.

THỂ LỆ GỬI BÀI

TẠP CHÍ NGHIÊN CỨU KHOA HỌC, TRƯỜNG ĐẠI HỌC SAO ĐỎ

Tạp chí Nghiên cứu khoa học, Trường Đại học Sao Đỏ (P. ISSN 1859-4190, E. ISSN 2815-553X), thường xuyên công bố kết quả, công trình nghiên cứu khoa học và công nghệ của các nhà khoa học, cán bộ, giảng viên, nghiên cứu sinh, học viên cao học, sinh viên ở trong và ngoài nước.

1. Tạp chí xuất bản 01 số/quý bằng hai ngôn ngữ tiếng Việt và tiếng Anh. Tạp chí nhận đăng các bài báo khoa học thuộc các lĩnh vực: Điện - Điện tử - Tự động hóa; Cơ khí - Động lực; Kinh tế; Triết học - Xã hội học - Chính trị học; Các lĩnh vực khác gồm: Công nghệ thông tin; Hóa học - Công nghệ thực phẩm; Ngôn ngữ học; Toán học; Vật lý; Văn hóa - Nghệ thuật - Thể dục thể thao...
2. Bài nhận đăng là những công trình nghiên cứu khoa học chưa công bố trong bất kỳ ấn phẩm khoa học nào.
3. Tòa soạn chỉ nhận bài báo gửi online trên website <http://tapchikhcn.saodo.edu.vn>. Bài báo gửi về tòa soạn dưới dạng file điện tử (*.doc *.docx và *.pdf); cuối bài báo, tác giả ghi rõ thông tin địa chỉ liên hệ, số điện thoại, email và cập nhật thông tin trên website. Bài báo phải được trình bày đúng định dạng, rõ ràng; Trường hợp bài báo phải chỉnh sửa theo thể lệ hoặc theo yêu cầu của Phản biện thì tác giả sẽ cập nhật trên website. Người phản biện sẽ do tòa soạn mời. Tòa soạn không gửi lại bài nếu không được đăng.
4. Các công trình thuộc đề tài nghiên cứu có Cơ quan quản lý cần kèm theo giấy phép cho công bố của cơ quan (Tên đề tài, mã số, tên chủ nhiệm đề tài, cấp quản lý,...).
5. Tên bài báo trình bày bằng hai ngôn ngữ (tiếng Việt và tiếng Anh), font Arial, cỡ chữ 14, in đậm, căn giữa.
6. Tên tác giả (không ghi học hàm, học vị), font Arial, cỡ chữ 10, in đậm, căn lề phải; cơ quan công tác của các tác giả, font Arial, cỡ chữ 9, in nghiêng, căn lề phải.
7. Chữ "Tóm tắt" in đậm, font Arial, cỡ chữ 10; Nội dung tóm tắt của bài báo không quá 10 dòng, trình bày bằng hai ngôn ngữ (tiếng Việt và tiếng Anh), font Arial, cỡ chữ 10, in thường.
8. Chữ "Từ khóa" in đậm, nghiêng, font Arial, cỡ chữ 10; Có từ 03÷05 từ khóa, font Arial, cỡ chữ 10, in nghiêng, ngăn cách nhau bởi dấu chấm phẩy, cuối cùng là dấu chấm.
9. Nội dung bài báo viết bằng tiếng Việt hoặc tiếng Anh; Nếu là bài báo viết bằng tiếng Việt: Tiêu đề tiếng Việt trước, tiếng Anh sau; Tóm tắt tiếng Việt trước, tiếng Anh sau; Từ khóa tiếng Việt trước, tiếng Anh sau; Nếu là bài báo viết bằng tiếng Anh: Tiêu đề tiếng Anh trước, tiếng Việt sau; Tóm tắt tiếng Anh trước, tiếng Việt sau; Từ khóa tiếng Anh trước, tiếng Việt sau.
10. Bài báo được đánh máy trên khổ giấy A4 (21 × 29,7cm) có độ dài không quá 8 trang, font Arial, cỡ chữ 10, giãn dòng At least 12pt, Before 3pt, After 3pt; căn lề trên 2.5cm, dưới 2.5cm, trái 3cm, phải 2cm; hình vẽ phải rõ ràng, đủ nét và được định dạng dưới dạng file ảnh (*.jpg); Phương trình, công thức phải soạn thảo bằng Mathtype hoặc Equation; Phần nội dung bài báo được chia thành 02 cột, khoảng cách cột là 1cm; Trong trường hợp hình vẽ, hình ảnh có kích thước lớn, bảng biểu có độ rộng lớn hoặc công thức, phương trình dài thì cho phép trình bày dưới dạng 01 cột.
11. Tài liệu tham khảo được sắp xếp theo thứ tự tài liệu được trích dẫn trong bài báo.
 - Nếu là sách/luận án: Tên tác giả (năm), Tên sách/luận án/luận văn, Nhà xuất bản/Trường/Viện, lần xuất bản/tái bản.
 - Nếu là bài báo/báo cáo khoa học: Tên tác giả (năm), Tên bài báo/báo cáo, Tạp chí/Hội nghị/Hội thảo, Tập/Kỷ yếu, số, trang.
 - Nếu là trang web: Phải trích dẫn đầy đủ tên website và đường link, ngày cập nhật.
12. Định dạng mẫu bài báo tham khảo tại địa chỉ http://tapchikhcn.saodo.edu.vn/news/detail/198/format_paper
Bài báo sau khi xuất bản sẽ được công bố trên <http://tapchikhcn.saodo.edu.vn>.

THÔNG TIN LIÊN HỆ:

Ban Biên tập Tạp chí Nghiên cứu khoa học, Trường Đại học Sao Đỏ

Phòng 203, Tầng 2, Nhà B1, Trường Đại học Sao Đỏ.

Địa chỉ: Số 76, Nguyễn Thị Duệ, Thái Học 2, phường Sao Đỏ, thành phố Chí Linh, tỉnh Hải Dương.

Điện thoại: (0220) 3587213, Fax: (0220) 3882921, Hotline: 0912 107858/0936 847980.

Website: <http://tapchikhcn.saodo.edu.vn>

Email: tapchikhcn@saodo.edu.vn



BỘ CÔNG THƯƠNG

TRƯỜNG ĐẠI HỌC SAO ĐỎ

Địa chỉ:

- **Số 1:** Số 76, Nguyễn Thị Duệ, Thái Học 2, phường Sao Đỏ, thành phố Chí Linh, tỉnh Hải Dương.
- **Số 2:** Số 72, đường Nguyễn Thái Học, phường Thái Học, thành phố Chí Linh, tỉnh Hải Dương.
- **Điện thoại:** (0220) 3882 269 **Fax:** (0220) 3882 921 **Website:** <http://saodo.edu.vn> **Email:** info@saodo.edu.vn

P. ISSN 1859-4190
E. ISSN 2815-553X

Số 2 (89)
2025

Địa chỉ Tòa soạn:

Trường Đại học Sao Đỏ.

Số 76, Nguyễn Thị Duệ, Thái Học 2, phường Sao Đỏ, thành phố Chí Linh, tỉnh Hải Dương.

Điện thoại: (0220) 3587213, Fax: (0220) 3882 921, Hotline: 0912 107858/0936 847980.

Website: <http://tapchikhcn.saodo.edu.vn/> Email: tapchikhcn@saodo.edu.vn.

Giấy phép xuất bản số: 620/GP-BTTTT ngày 17/9/2021 của Bộ Thông tin và Truyền thông.
In 2.000 bản, khổ 21 × 29,7cm, tại Công ty TNHH in Tre Xanh, cấp ngày 17/02/2011.