

Electronic Supplementary Information (ESI)

A DFT study on structure, stabilities and electronic properties of double Magnesium doped Gold clusters

Debajyoti Bhattacharjee, Bhupesh Kr. Mishra and Ramesh Ch. Deka*

Department of Chemical Sciences, Tezpur University, Napaam, Tezpur, Assam 784 028,
India

*Corresponding author, Fax: +91 3712267005. Email address: ramesh@tezu.ernet.in (R.C.D.)

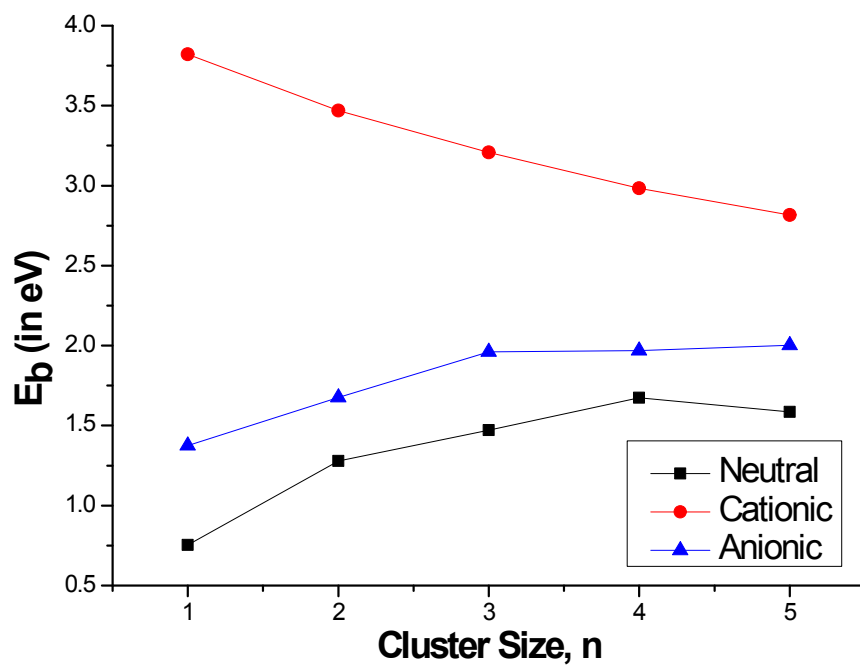


Fig. S1 Comparison of binding energy per atom among charge and neutral clusters of Au_nMg_2 clusters.

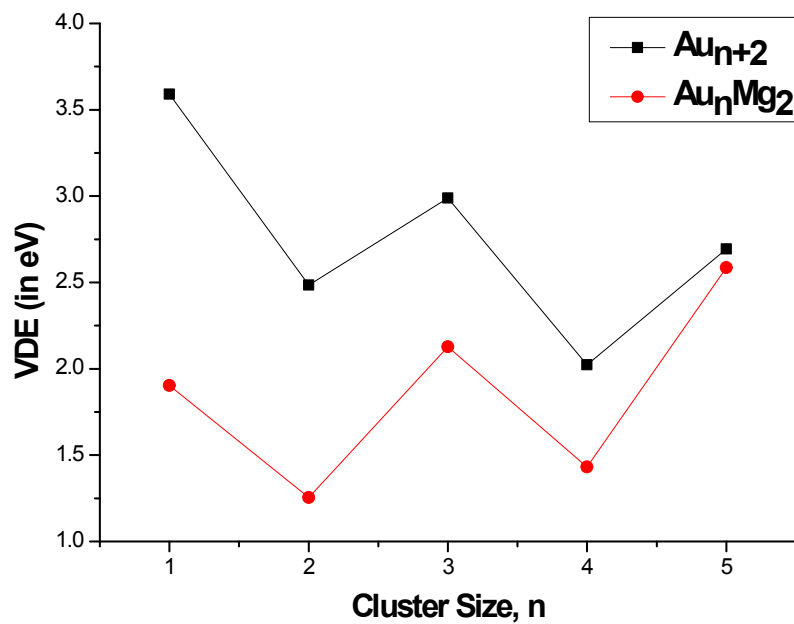


Fig. S2 Variation of VDE values with respect to cluster size for pure and Mg doped Au clusters.

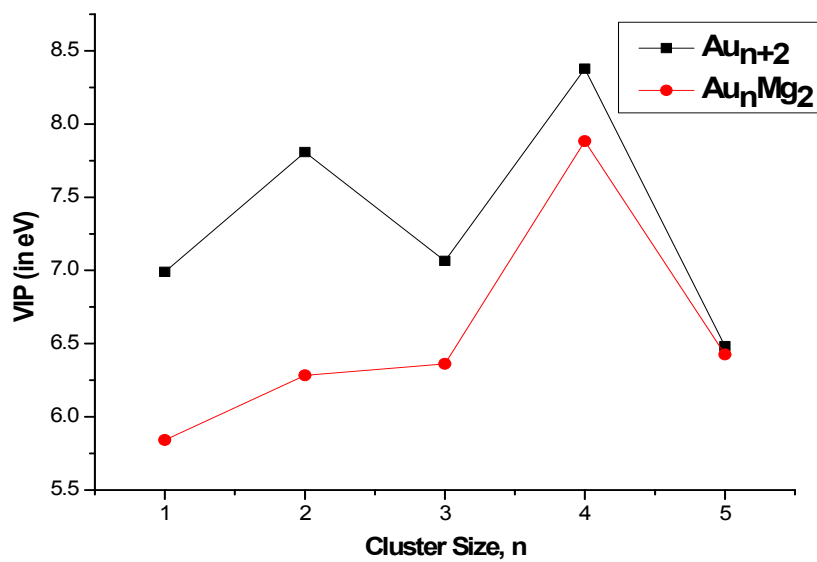


Fig. S3 Variation of VIP values with respect to cluster size for pure and Mg doped Au clusters.

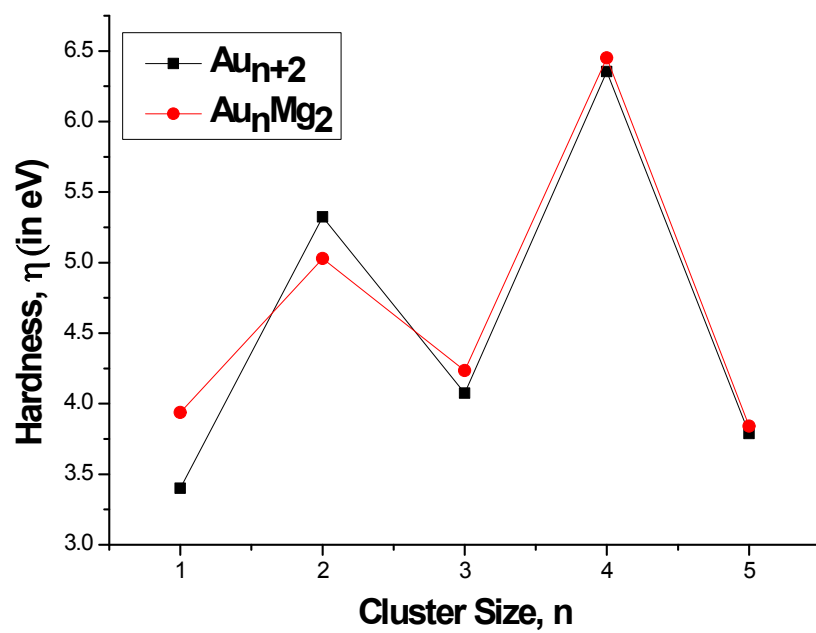


Fig. S4 Variation of hardness values with respect to cluster size for pure and Mg doped Au clusters.

Table S1 Electron density, ρ and the Laplacian of electron density, $\nabla^2\rho$ at the bond critical points (BCP) for the clusters with $n>2$

Cluster	Interaction	ρ	$\nabla^2\rho$
Neutral			
Au ₅	Au2 - Au4	0.05	0.11
	Au1 - Au2	0.05	0.12
	Au2 - Au3	0.05	0.12
	Au1 - Au4	0.06	0.13
	Au3 - Au4	0.05	0.11
	Au3 - Au5	0.05	0.12
	Au4 - Au5	0.06	0.13
Au ₆	Au1 - Au3	0.04	0.1
	Au1 - Au2	0.06	0.13
	Au2 - Au3	0.06	0.13
	Au3 - Au5	0.04	0.1
	Au3 - Au4	0.06	0.13
	Au1 - Au5	0.04	0.1
	Au4 - Au5	0.06	0.13
	Au1 - Au6	0.06	0.13
Au5 - Au6	0.06	0.13	
Au ₇	Au1 - Au2	0.05	0.12
	Au2 - Au7	0.05	0.12
	Au2 - Au3	0.05	0.11
	Au1 - Au7	0.05	0.12
	Au1 - Au4	0.05	0.11
	Au5 - Au7	0.05	0.12
	Au4 - Au5	0.05	0.11

	Au6 - Au7	0.05	0.12
	Au3 - Au6	0.05	0.11
	Au5 - Au6	0.05	0.12
	Au3 - Au7	0.04	0.09
	Au4 - Au7	0.04	0.09
Au ₃ Mg ₂	Au1 - Mg4	0.03	0.1
	Au2 - Mg4	0.04	0.15
	Au3 - Mg4	0.03	0.1
	Au1 - Mg5	0.03	0.1
	Au3 - Mg5	0.03	0.1
Au ₄ Mg ₂	Au1 - Mg5	0.03	0.11
	Au3 - Mg5	0.03	0.11
	Au4 - Mg5	0.04	0.15
	Au1 - Mg6	0.03	0.11
	Au2 - Mg6	0.04	0.15
	Au3 - Mg6	0.03	0.11
Au ₅ Mg ₂	Au3 - Mg7	0.03	0.1
	Au2 - Au3	0.04	0.08
	Au3 - Au4	0.05	0.12
	Au1 - Mg7	0.02	0.09
	Au1 - Mg5	0.03	0.11
	Au2 - Mg7	0.02	0.09
	Au2 - Mg5	0.03	0.11
	Au6 - Mg7	0.03	0.1
	Au1 - Au6	0.04	0.08
	Au4 - Au6	0.05	0.12
	Au4 - Mg7	0.03	0.1

Cationic

Au ₅	Au1 - Au2	0.06	0.14
	Au1 - Au4	0.05	0.11
	Au2 - Au4	0.05	0.11
	Au3 - Au4	0.05	0.11
	Au3 - Au5	0.06	0.14
	Au4 - Au5	0.05	0.11
	Au ₆	Au1 - Au3	0.05
Au1 - Au2		0.06	0.11
Au2 - Au3		0.06	0.13
Au3 - Au5		0.03	0.08
Au3 - Au4		0.06	0.12
Au1 - Au5		0.05	0.11
Au4 - Au5		0.06	0.12
Au1 - Au6		0.06	0.11
Au5 - Au6		0.06	0.13
Au ₇	Au1 - Au2	0.05	0.12
	Au2 - Au3	0.05	0.12
	Au1 - Au4	0.05	0.12
	Au4 - Au5	0.05	0.12
	Au3 - Au6	0.05	0.12
	Au5 - Au6	0.05	0.12
	Au1 - Au7	0.05	0.11
	Au2 - Au7	0.05	0.11
	Au3 - Au7	0.05	0.11
	Au4 - Au7	0.05	0.11

	Au5 - Au7	0.05	0.11
	Au6 - Au7	0.05	0.11
Au_3Mg_2	Au1 - Mg4	0.04	0.14
	Au3 - Mg4	0.04	0.14
	Au1 - Mg5	0.02	0.08
	Au2 - Mg5	0.04	0.16
	Au3 - Mg5	0.02	0.08
Au_4Mg_2	Au1 - Mg4	0.04	0.14
	Au3 - Mg4	0.04	0.14
	Au1 - Mg5	0.02	0.08
	Au2 - Mg5	0.04	0.16
	Au3 - Mg5	0.02	0.08
Au_5Mg_2	Au3 - Mg7	0.02	0.07
	Au2 - Au3	0.03	0.06
	Au3 - Au4	0.06	0.13
	Au1 - Mg7	0.02	0.09
	Au1 - Mg5	0.04	0.14
	Au2 - Mg7	0.02	0.09
	Au2 - Mg5	0.04	0.14
	Au6 - Mg7	0.02	0.07
	Au1 - Au6	0.03	0.06
	Au4 - Au6	0.06	0.13
	Au4 - Mg7	0.03	0.12
Anionic			
Au_5	Au2 - Au4	0.04	0.1
	Au1 - Au2	0.04	0.1

	Au2 - Au3	0.06	0.14
	Au1 - Au4	0.06	0.13
	Au3 - Au4	0.04	0.1
	Au3 - Au5	0.04	0.1
	Au4 - Au5	0.06	0.13
Au ₆	Au1 - Au3	0.05	0.11
	Au1 - Au2	0.05	0.11
	Au2 - Au3	0.05	0.11
	Au3 - Au5	0.05	0.11
	Au3 - Au4	0.05	0.11
	Au1 - Au5	0.05	0.11
	Au4 - Au5	0.05	0.11
	Au1 - Au6	0.05	0.11
	Au5 - Au6	0.05	0.11
Au ₇	Au1 - Au7	0.06	0.13
	Au1 - Au2	0.05	0.12
	Au2 - Au7	0.05	0.12
	Au2 - Au3	0.02	0.06
	Au1 - Au4	0.06	0.13
	Au5 - Au7	0.05	0.12
	Au4 - Au5	0.02	0.06
	Au6 - Au7	0.06	0.13
	Au3 - Au6	0.06	0.13
	Au5 - Au6	0.05	0.12
	Au3 - Au7	0.03	0.07
	Au4 - Au7	0.03	0.07
Au ₃ Mg ₂	Au1 - Mg4	0.03	0.09

	Au2 - Mg4	0.03	0.09
	Au3 - Mg4	0.03	0.09
	Au1 - Mg5	0.03	0.09
	Au2 - Mg5	0.03	0.09
	Au3 - Mg5	0.03	0.09
Au ₄ Mg ₂	Au1 - Mg5	0.03	0.08
	Au3 - Mg5	0.03	0.08
	Au4 - Mg5	0.03	0.13
	Au1 - Mg6	0.03	0.08
	Au2 - Mg6	0.03	0.13
	Au3 - Mg6	0.03	0.08
	Au1 - Au3	0.02	0.05
Au ₅ Mg ₂	Au3 - Mg7	0.03	0.11
	Au2 - Au3	0.04	0.09
	Au3 - Au4	0.05	0.1
	Au1 - Mg7	0.02	0.08
	Au1 - Mg5	0.03	0.09
	Au2 - Mg7	0.02	0.08
	Au2 - Mg5	0.03	0.09
	Au6 - Mg7	0.03	0.11
	Au1 - Au6	0.04	0.09
	Au4 - Au6	0.05	0.1
	Au4 - Mg7	0.02	0.09

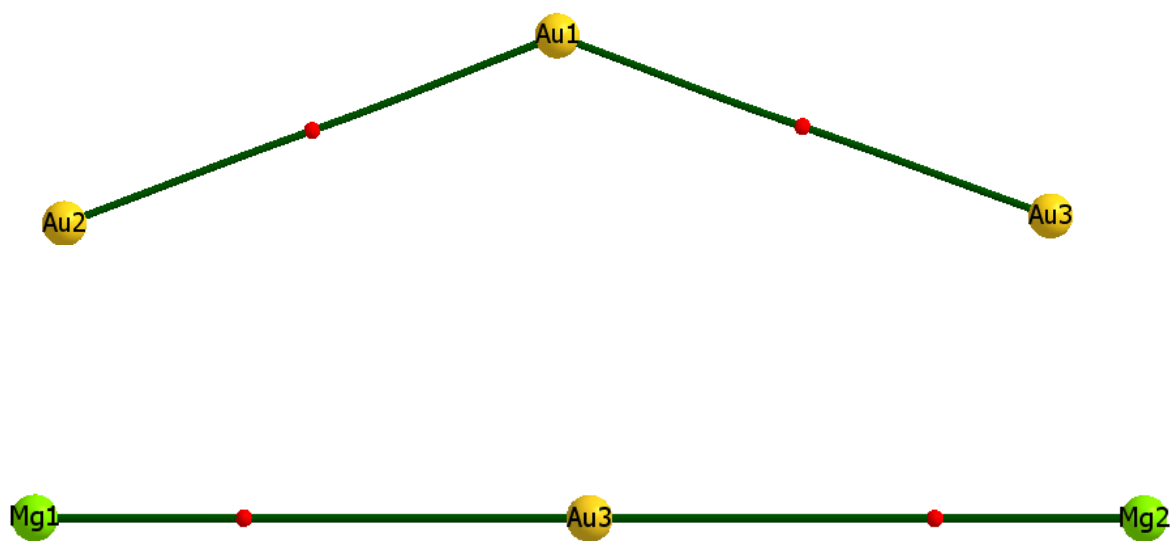


Fig. S5 Shifting of BCP in Au-Au and Au-Mg bonds. The red dots indicate BCP.