

First principles phonon calculations in H/Pt(110)-(1x2)

Hoa N.V., Phi N.M., Vi L.T., Hanh T.T.T.

The Applied Science Faculty, Ho Chi Minh City University of Technology, VNU-HCM,
Viet Nam
thuhanhsp@hcmut.edu.vn

Phonon calculation provides useful information for investigating variety of properties of materials, such as phase transition, thermal and mechanical characters. The phonon frequency and zero point energy were studied for the adsorption of hydrogen on the missing row platinum (110)-(1x2) surface using the first principle calculation. Via the calculated information of phonon, the most stable sites of H interaction on Pt surface have been showed by Siesta software calculation.

Keyword: DFT calculation, Siesta, phonon frequency, zero point energy, H adsorption

Tính toán nguyên lý ban đầu phonon cho H/Pt(110)-(1x2)

Hóa N.V., Phi N.M., Vi L.T., Hanh T.T.T.

Khoa Khoa học ứng dụng, Trường Đại học Bách Khoa, ĐHQG HCM, Việt Nam
thuhanhsp@hcmut.edu.vn

Tính toán phonon cung cấp thông tin hữu dụng cho việc nghiên cứu các tính chất vật liệu, như là sự chuyển pha, đặc tính nhiệt, đặc tính cơ. Dao động phonon và năng lượng điểm không đã được nghiên cứu cho sự hút bám của hydro trên bề mặt bạch kim khuyết dãy (110) sử dụng tính toán nguyên lý ban đầu. Thông qua dữ liệu phonon được tính, các vị trí bền vững nhất của H liên kết trên bề mặt Pt đã được chỉ ra bằng cách sử dụng phần mềm tính toán Siesta.

Từ khoá: tính toán DFT, Siesta, dao động phonon, năng lượng điểm không, hấp phụ H