

Surface reaction of Hydrogen on 2D Germanium

Phi N.M.¹, Hoa N.V.¹, Hanh T.T.T.¹

¹Ho Chi Minh University of Technology, VNU-HCM, Vietnam

thuhanhsp@hcmut.edu.vn

After producing the 2D Ge by using molecular dynamic method, the DFT study of reactions of H with 2D Ge was investigated using SIESTA calculation. The phonon frequency of H on surface also have been study, the ZPE of system was calculated. The surface reaction of H on Ge has been investigated via the onsite H stable positions included the zero point effect.

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

Tương tác bề mặt của H trên 2D Ge

Phi N.M. 1, Hoa N.V. 1, Hanh T.T.T. 1

Trường Đại học Bách Khoa, ĐHQG-HCM, Việt Nam

thuhanhsp@hcmut.edu.vn

Sau khi tạo được 2D Ge bằng phương pháp động lực học phân tử, nghiên cứu lý thuyết DFT cho tương tác giữa H và 2D Ge đã được tiến hành bằng tính toán Siesta. Dao động phonon của H trên bề mặt cũng như năng lượng điểm không đã được nghiên cứu và tính toán. Tương tác bề mặt của H trên Ge đã được tính toán thông qua các vị trí liên kết bền vững trên bề mặt khi cho ảnh hưởng của điểm không vào tính toán.

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