

## IX-P-1

### SỬ DỤNG PHIẾM HÀM MẬT ĐỘ (DFT) KHẢO SÁT SỰ HẤP PHỤ CỦA CÁC KIM LOẠI Cr, Cu TRÊN NỀN GRAPHENE

Bùi Quốc Việt, Vũ Hoàng Nam, Lê Minh Hưng

Khoa Khoa học Vật liệu, Trường ĐH KHTN, ĐHQG-HCM

#### Tóm tắt

Trong đề tài này, chúng tôi sử dụng phương pháp tính dựa trên lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) với phép xấp xỉ mật độ địa phương (LDA) và xấp xỉ gradient tổng quát (GGA), cùng với giả thể siêu mềm Vanderbilt để tối ưu hóa cho cấu trúc các nguyên tử Cr, Cu hấp phụ trên nền graphene. Các vị trí hấp phụ được khảo sát là H, T và B của tấm graphene. Các kết quả tính toán được so sánh và dự đoán năng lượng liên kết của cấu trúc Cr-graphene và Cu-graphene.

### A STUDY OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY FOR THE ADSORPTION OF Cr AND Cu ADATOMS ON GRAPHENE

#### Abstract

In this project, we use of straight density functional theory (DFT) to study of the adsorptions of Cr and Cu adatoms on graphene. DFT calculations with local-density approximation (LDA) and generalized gradient approximation (GGA) are chosen to execute the adsorptions of Cr and Cu adatoms on graphene structure with adsorption site (hollow, bridge and top positions). The optimized structures from these various calculations are compared and validated. The equilibrium structures are followed by the prediction of binding energy of Cr-graphene and Cu-graphene.

---

Email liên hệ: [mrquocviet@gmail.com](mailto:mrquocviet@gmail.com)