**TÓM TẮT**

Việc phát triển các chất xúc tác điện hóa bền vững, hiệu quả và tiết kiệm chi phí cho phản

ứng tiến hóa hydro (HER) là điều then chốt nhằm thúc đẩy quá trình sản xuất hydro bền vững –

một yếu tố quan trọng trong việc đạt được các mục tiêu năng lượng sạch và giảm sự phụ thuộc

vào nhiên liệu hóa thạch. Các nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm gần đây đã cho thấy hiệu

suất đầy hứa hẹn của các dạng thù hình cacbon dựa trên hệ M-N-C (Kim loại – Nitơ – Cacbon)

trong vai trò là chất xúc tác điện hóa cho phản ứng HER. Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử

dụng lý thuyết hàm mật độ (DFT) để khảo sát hoạt tính xúc tác HER của vật liệu graphdiyne

(GDY) được đồng pha tạp sắt (Fe) và nitơ (N), gọi là Fe,N-GDY. Kết quả cho thấy Fe,N-GDY có độ ổn định đáng kể, độ dẫn điện được cải thiện và khoảng cách năng lượng giảm so với GDY

nguyên mẫu. Các vị trí hấp phụ hydro trên Fe,N-GDY đã được phân tích, với năng lượng tự do

hấp phụ hydro () xấp xỉ bằng 0 – cụ thể là 0,020 eV đối với mô hình H3@Fe,N3-GDY, rất gần

với giá trị của Pt(111) (-0,090 eV), vốn được xem là chất xúc tác chuẩn. Bên cạnh đó, cấu trúc

đồng pha tạp Fe,N4-GDY với Fe tại góc kết nối giữa vòng thơm và nhóm acetylenic đồng

pha tạp pyridinic-N có hiệu suất xúc tác OER nổi bật với giá trị hóa thế đạt 0.604V. Điều này

cho thấy Fe,N-GDY có hiệu suất xúc tác vượt trội cho phản ứng HER. Kết quả nghiên cứu của

chúng tôi cho thấy Fe,N-GDY như một chất xúc tác điện hóa hiệu quả cao cho phản ứng HER,

mở ra một chiến lược đầy hứa hẹn trong thiết kế các chất xúc tác tiên tiến cho quá trình sản xuất

hydro bền vững.