

Adsorption of carbon monoxide on graphene with high titanium coverage

I. Carrillo and L.F. Magaña*

*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México,
Apartado Postal 20-364, México, 01000, D.F., México.*

Recibido el 6 de mayo de 2009; aceptado el 13 de octubre de 2009

Density functional theory and molecular dynamics were used to study the adsorption of CO on a graphene layer modified with high titanium coverage (C_2Ti) at atmospheric pressure and 300 K. We found that the CO molecule is adsorbed and dissociated.

Keywords: CO adsorption; graphene.

Por medio de la teoría de la funcional de densidad y de dinámica molecular, estudiamos la adsorción de Co en una capa de grafeno modificada con titanio con una cobertura muy alta (C_2Ti) a presión atmosférica y 300 k. Encontramos que la molécula de CO queda adsorbida y disociada.

Descriptores: Adsorción de CO; grafeno.

PACS: 68.; 68.43.-h; 68.43.Bc; 68.43.Fg