



DOI:10.22144/ctujos.2024.332

KHẢO SÁT KHẢ NĂNG KHÁNG NGỘ ĐỘC CARBON MONOXIDE TRÊN BỀ MẶT PLATINUM VÀ PLATINUM-RUTHENIUM BẰNG MÔ PHỎNG VÀ THỰC NGHIỆM

Đặng Long Quân*, Huỳnh Hoàng Phương, Hà Thu Hoàng, Nguyễn Thị Ngọc Yến, Nguyễn Thị Tú Quyên, Nguyễn Đăng Khoa, Nguyễn Lê Khả Ái và Phan Trần Anh Thy

Bộ môn Vật lý, Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Cần Thơ

*Tác giả liên hệ (Corresponding author): dlquan@ctu.edu.vn

Thông tin chung (Article Information)

Nhận bài (Received): 03/05/2024

Sửa bài (Revised): 01/07/2024

Duyệt đăng (Accepted): 08/08/2024

Title: Study of the resistance to CO tolerance on platinum and platinum-ruthenium surfaces by simulation and experiment

Author(s): Dang Long Quan*, Huynh Hoang Phuong, Ha Thu Hoang, Nguyen Thi Ngoc Yen, Nguyen Thi Tu Quyen, Nguyen Dang Khoa, Nguyen Le Kha Ai and Phan Tran Anh Thy

Affiliation(s): Can Tho University

TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này, sự hấp phụ của carbon monoxide (CO) lên bề mặt hạt nano platinum (Pt) và hạt nano hợp kim platinum-ruthenium (PtRu) được khảo sát bằng mô phỏng sử dụng lý thuyết phiếm hàm mật độ (DFT) và thực nghiệm đo thế vòng tuần hoàn (CV). Kết quả mô phỏng cho thấy năng lượng hấp phụ của CO trên bề mặt Pt và PtRu lần lượt là $-2,03$ và $-1,86$ eV. Điều này chứng tỏ phân tử CO hấp phụ trên bề mặt Pt mạnh hơn trên bề mặt PtRu. Kết quả đo CV của hai loại xúc tác trong dung dịch methanol-sulfuric acid cũng cho thấy tỷ số j_p/j_r của PtRu (7,2) cao hơn 2,9 lần so với Pt (2,5). Điều này một lần nữa khẳng định, khi thêm kim loại ruthenium vào platinum sẽ giúp tăng khả năng kháng ngộ độc CO của chất xúc tác. Đồng thời, kết quả thực nghiệm cũng hoàn toàn phù hợp với kết quả mô phỏng.

Từ khóa: Carbon monoxide, hạt nano PtRu, mô phỏng, quét thế vòng tuần hoàn

ABSTRACT

In this study, the adsorption of carbon monoxide (CO) on the surface of platinum (Pt) and platinum-ruthenium alloy (PtRu) nanoparticles was investigated by simulation using density functional theory (DFT) and cyclic voltammetry (CV) measurement. The simulation results show that the adsorption energies of CO on Pt and PtRu surfaces are -2.03 and -1.86 eV, respectively. This proves that the CO molecule adsorbed on the Pt surface more strongly than on the PtRu surface. The results of CV measurement also show that the j_p/j_r ratio of PtRu (7.2) is 2.9 times higher than that of Pt (2.5). This once again confirms that adding ruthenium to platinum will help increase the resistance to CO tolerance. Furthermore, the experimental results are also completely consistent with the simulation results.

Keywords: Carbon monoxide, PtRu nanoparticles, simulation, cyclic voltammetry

1. GIỚI THIỆU

Hiện nay, pin nhiên liệu sử dụng methanol trực tiếp (DMFC) được xem là một trong những lựa chọn hứa hẹn nhất để giải quyết khủng hoảng năng lượng trong tương lai nhờ hiệu suất chuyển đổi năng lượng cao, ít gây phát thải ô nhiễm, nhiệt độ vận hành thấp, đơn giản và an toàn trong lưu trữ và vận chuyển (Hsieh et al., 2009). Tuy nhiên, pin DMFC có hai nhược điểm chính là sử dụng chất xúc tác platinum nên có giá thành cao và sự ngộ độc carbon monoxide ở điện cực dẫn tới hiệu suất của pin bị suy giảm (Suh et al., 2005). Để hạn chế các nhược điểm này, nhiều biện pháp đã được thực hiện như chế tạo các hạt xúc tác ở kích thước nano, sử dụng các chất nền có khả năng phân tán tốt các hạt nano và đặc biệt là chế tạo các hạt nano hợp kim của Pt với những kim loại rẻ tiền hơn (Quan & Le, 2021).

Đã có nhiều công trình thực nghiệm chế tạo các chất xúc tác lưỡng kim như PtFe, PtMn, PtCu, PtNi, PtCo, PtPd, PtCr để thay thế xúc tác Pt đơn (Jang et al., 2013; Jin et al., 2017; Lu et al., 2017; Kaewsai & Hunsom, 2018). Trong đó, một nghiên cứu đã công bố cho thấy xúc tác nano platinum-ruthenium cấu trúc lõi-vỏ (Ru@Pt) có tác dụng làm giảm đáng kể ngộ độc CO trên bề mặt điện cực (Chen et al., 2012). Tuy nhiên, phần nghiên cứu lý thuyết về lĩnh vực này hiện nay còn rất hạn chế. Các nghiên cứu chủ yếu tập trung khảo sát con đường phân hủy methanol trên bề mặt các chất xúc tác như Pt(111), Pd(111), Ni(111),... (Greeley & Mavrikakis, 2002; Kramer et al., 2014; Ou, 2018). Đặc biệt, chưa thấy có công bố nào thực hiện đồng thời mô phỏng kết hợp với thực nghiệm.

Từ các phân tích trên, nhằm mục đích góp phần khảo sát một cách kỹ lưỡng các dạng xúc tác có thể sử dụng cho điện cực pin nhiên liệu DMFC, trong nghiên cứu này, hai loại vật liệu xúc tác là đơn kim loại Pt và hợp kim PtRu được thực hiện chế tạo và đo phổ CV, đồng thời được thiết kế và tính toán năng lượng hấp phụ của CO lên hai bề mặt Pt và PtRu.

2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Vật liệu, hóa chất và phần mềm mô phỏng

Vật liệu được sử dụng làm chất nền cho cả hai loại xúc tác Pt/C và PtRu/C là carbon Vulcan XC-72 được mua từ hãng Fuel Cell (USA). Các hóa chất sử dụng trong nghiên cứu này đều được sản xuất bởi hãng Merck (Đức). Cụ thể, các tiền chất của Pt và Ru lần lượt là hexachloroplatinic (IV) acid hexahydrate ($H_2PtCl_6.6H_2O$) và ruthenium (III) chloride hydrate ($RuCl_3.xH_2O$). Chất khử được sử

dụng là sodium borohydride ($NaBH_4$), giá trị pH của dung dịch được điều chỉnh bởi sodium hydroxide ($NaOH$).

Phần mềm VESTA được sử dụng để thiết kế các hệ mô phỏng sự hấp phụ của CO lên bề mặt Pt và PtRu. Năng lượng của các hệ được chạy tính toán bởi gói phần mềm VASP.

2.2. Phần thực nghiệm

Có hai mẫu xúc tác được chế tạo bao gồm: Pt/C và PtRu/C (tỷ lệ nguyên tử Pt:Ru = 1:1). Ở cả hai mẫu, thành phần kim loại Pt chiếm 20 wt.% khối lượng (chất nền carbon chiếm 80 wt.%). Các mẫu được chế tạo với cùng một quy trình đồng khử, cụ thể: 80 wt.% carbon Vulcan XC-72 được cân và cho vào bình cầu, 50 mL ethylene glycol (EG) được thêm vào bình. Hỗn hợp được rung siêu âm 15 phút, sau đó được khuấy từ ở nhiệt độ phòng. Các tiền chất $H_2PtCl_6.6H_2O$ và $RuCl_3.xH_2O$ được cân theo tỷ lệ thích hợp rồi hòa với nước DI để tạo thành các dung dịch tiền chất có nồng độ 0,05 M. Các dung dịch này được rung siêu âm 15 phút. Sau đó, được hòa lẫn với nhau rồi tiếp tục rung siêu âm trong 15 phút. Dung dịch tiền chất Pt hoặc PtRu sau khi rung siêu âm sẽ được nhỏ từng giọt vào hỗn hợp đang khuấy từ. Sau đó, chất khử $NaBH_4$ 0,5 M được thêm từng giọt vào hỗn hợp. Dung dịch $NaOH$ 5 M được sử dụng để điều chỉnh pH đến giá trị 12. Hỗn hợp được tiếp tục khuấy từ ở nhiệt độ phòng trong 5 giờ. Kết thúc quá trình khuấy từ, hỗn hợp được lọc rửa bằng cách quay ly tâm trong nước khử ion đến khi trung tính (pH \approx 7) và sấy khô ở 70°C, cuối cùng thu được các mẫu vật liệu xúc tác Pt/C và PtRu/C.

Cấu trúc tinh thể của các hạt nano trong các mẫu xúc tác được xác định thông qua phân tích nhiễu xạ tia X (Bruker D8-Advance). Kích thước và sự phân bố hạt nano trên chất nền được khảo sát bằng sử dụng kính hiển vi điện tử truyền qua (Jeol JEM 1010). Khả năng xúc tác oxy hóa methanol và kháng ngộ độc CO được đo bằng phương pháp quét thể vòng tuần hoàn (hệ máy Autolab, sử dụng phần mềm Nova 2.1.4). Điện cực so sánh được sử dụng trong hệ đo điện hóa là Ag/AgCl. Điện cực làm việc được chế tạo bằng cách quét lên 1,0 cm² giấy carbon Toray 2 mg mực xúc tác. Các điện cực được đặt trong dung dịch 0,5 M H_2SO_4 và 1,0 M CH_3OH . Khoảng quét thế từ - 0,2 V đến 1,4 V với tốc độ quét 50 mV/s.

2.3. Phần mô phỏng

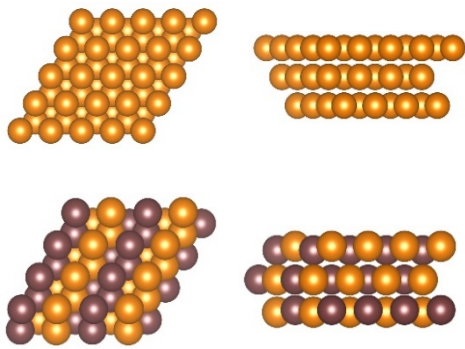
Trong nghiên cứu này, gói phần mềm mô phỏng VASP được sử dụng để tối ưu hoá các cấu trúc và tính toán năng lượng của các hệ. Tính toán được

thực hiện với các đế có cấu trúc fcc gồm 3 lớp Pt hoặc PtRu (tỷ lệ nguyên tử Pt:Ru = 1:1, tương tự với các mẫu thực nghiệm, Hình 1). Mỗi unit cell có kích thước 10,4 Å x 10,4 Å x 23,4 Å, tuần hoàn theo hai chiều x và y, khoảng chân không theo trục z được thiết kế xấp xỉ 15 Å, mô phỏng một phần bề mặt các hạt nano Pt hoặc PtRu. Bộ cơ sở sóng phẳng được sử dụng với năng lượng cắt là 400 eV, phép tính xấp xỉ Perdew-Burke-Ernzerhof được sử dụng cho năng lượng tương quan trao đổi. Mẫu lưới điểm k = 5 x 5 x 1 với kỹ thuật lấy mẫu điểm đặc biệt của Monkhorst và Pack đã được sử dụng. Tốc độ hội tụ của các phép tính được hỗ trợ bằng phương pháp Methfessel-Paxton bậc nhất với giá trị sigma là 0,2 eV.

Để khảo sát khả năng kháng ngộ độc CO, một phân tử CO được cho hấp phụ lên bề mặt các vị trí khả dĩ, cụ thể là trên: top Pt, top Ru, bridge Pt-Pt, bridge Pt-Ru, bridge Ru-Ru, hollow Pt-Pt-Pt, hollow Pt-Pt-Ru, hollow Pt-Ru-Ru và hollow Ru-Ru-Ru. Sau đó, năng lượng hấp phụ của CO lên các vị trí này sẽ được tính toán theo công thức:

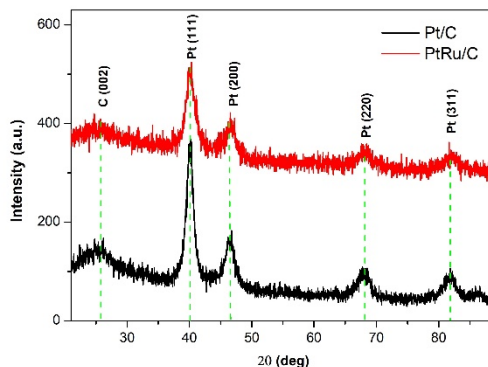
$$E_{ads} = E_{sys} - E_{sub} - E_{CO} \quad (1)$$

Với E_{ads} , E_{sys} , E_{sub} và E_{CO} lần lượt là năng lượng hấp phụ, năng lượng của hệ CO-đế, năng lượng của đế, và năng lượng của phân tử CO.



Hình 1. Hai đế Pt (phía trên) và PtRu (phía dưới) được thiết kế bởi phần mềm VESTA (bên trái là mặt nhìn từ trên xuống, bên phải là mặt nhìn ngang)

Năng lượng thấp nhất trong các giá trị E_{ads} của mỗi loại đế sẽ tương ứng với năng lượng hấp phụ của CO lên đế đó. Giá trị năng lượng hấp phụ càng âm chứng tỏ khả năng kháng ngộ độc CO càng kém và ngược lại (Yamagishi et al., 2005; Figueiredo et al., 2014).



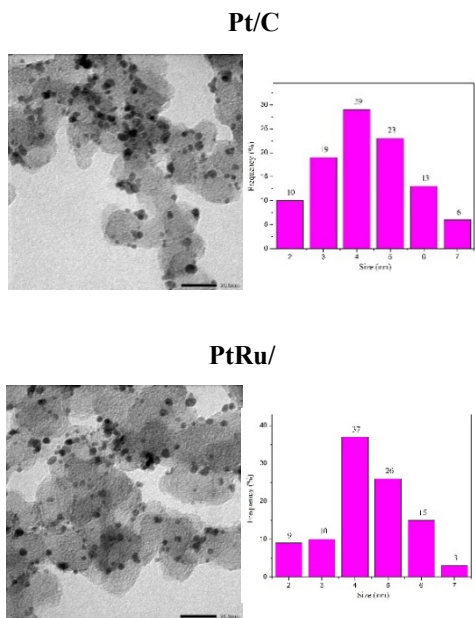
Hình 2. Phổ XRD của hai mẫu xúc tác

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

3.1. Phần thực nghiệm

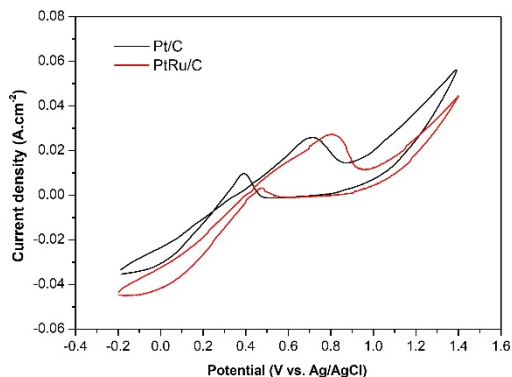
Cấu trúc tinh thể của hai mẫu vật liệu xúc tác được xác định thông qua phép đo phổ XRD (góc đo trong khoảng 20° – 90°, bước đo 0,05°, bức xạ sử dụng là Cu K α với bước sóng xấp xỉ 1,54 Å). Kết quả được thể hiện ở Hình 2. Có thể thấy rõ, dạng phổ XRD của cả hai mẫu xúc tác là tương tự nhau với năm đỉnh nhiễu xạ xuất hiện trong mỗi phổ. Trong đó, đỉnh thứ nhất tương ứng với mặt mạng (002) trong cấu trúc lục phương của tinh thể graphite (Kamali et al., 2011). Bốn đỉnh tiếp theo lần lượt tương ứng với các mặt mạng (111), (200), (220), và (311) của cấu trúc lập phương tâm mặt (face-centered cubic – fcc) ở tinh thể platinum (Shah, 2012). Ở đây, ta không thấy xuất hiện các đỉnh nhiễu xạ của cấu trúc lục giác xếp chặt (hexagonal close-packed – hcp) ở tinh thể ruthenium. Điều này có thể được giải thích là do trong các tinh thể hợp kim PtRu, các nguyên tử Ru đã thay thế các nguyên tử Pt tại các nút mạng của cấu trúc fcc (Antolini, 2003).

Kích thước của các hạt nano cũng như sự phân bố của chúng trên nền carbon được thể hiện thông qua ảnh hiển vi điện tử truyền qua (TEM, Hình 3). Có thể thấy rõ, các hạt nano Pt và PtRu phân bố đồng đều trên chất nền. Điều này chứng tỏ, quá trình tổng hợp các mẫu xúc tác đã được thực hiện thành công. Kích thước hạt trung bình của hai mẫu xúc tác lần lượt là 4,3 và 4,4 nm. Trong điện cực pin nhiên liệu methanol, kích thước hạt ảnh hưởng lớn đến khả năng xúc tác, do chúng ảnh hưởng đến diện tích bề mặt tiếp xúc. Kích thước hạt tốt nhất cho xúc tác trong pin DMFC là vào khoảng 3,0 nm (Takasu et al., 2001). Như vậy, giá trị kích thước hạt trung bình trong hai mẫu nghiên cứu này là gần với giá trị kích thước hạt tối ưu đã được công bố.



Hình 3. Ảnh TEM ở thang đo 20 nm và sự phân bố kích thước hạt của hai mẫu xúc tác

Khả năng kháng ngộ độc CO của hai mẫu xúc tác được xác định thông qua khảo sát phổ điện hóa CV (Hình 4). Trong nghiên cứu này, phép đo điện hóa được thực hiện trong dung dịch CH₃OH 1,0 M + H₂SO₄ 0,5 M với khoảng quét thế từ -0,2 V đến 1,4 V, tốc độ quét 50 mV.s⁻¹. Trên mỗi đường cong điện hóa sẽ xuất hiện hai đỉnh oxy hóa, đỉnh oxy hóa methanol xuất hiện trong quá trình quét thế tới (*j_r*) và một đỉnh thấp hơn xuất hiện trong quá trình quét thế về (*j_r*) là đỉnh oxy hóa CO.



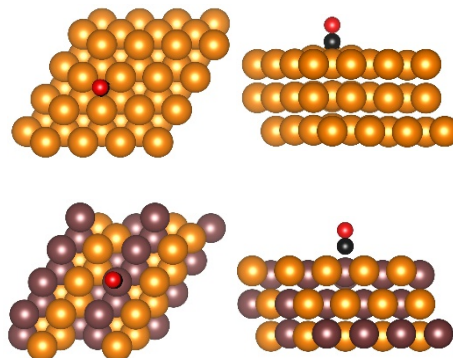
Hình 4. Phổ CV của hai mẫu xúc tác

Nguyên nhân xuất hiện đỉnh oxy hóa trong quá trình quét thế về là do trong quá trình quét thế tới các phân tử methanol bị oxy hóa chưa hoàn toàn, một số dạng trung gian của carbon (mà chủ yếu là CO) vẫn còn hấp phụ trên bề mặt chất xúc tác. Do đó, giá trị mật độ dòng tại đỉnh này đặc trưng cho

quá trình loại bỏ các dạng trung gian của carbon hình thành trong quá trình quét thế tới. Nói cách khác, giá trị *j_r* càng lớn chứng tỏ lượng carbon trung gian (chủ yếu là CO) hấp phụ trên bề mặt chất xúc tác càng nhiều. Tỷ số *j_r*/*j_r* được sử dụng để mô tả khả năng chịu đựng của chất xúc tác đối với ngộ độc CO. Tỷ số *j_r*/*j_r* càng lớn thì khả năng kháng ngộ độc CO của mẫu xúc tác càng cao và ngược lại (Liu & Hong, 2007). Ở đây, giá trị *j_r*/*j_r* của hai chất xúc tác Pt/C và PtRu/C xác định từ phổ CV ở Hình 4 lần lượt là 2,5 và 7,2. Kết quả này cho thấy, khả năng kháng ngộ độc CO của mẫu xúc tác PtRu/C là vượt trội so với mẫu Pt/C.

3.2. Phần mô phỏng

Vị trí hấp phụ của phân tử CO trên bề mặt hai đế Pt và PtRu được thể hiện ở Hình 5. Đặc điểm chung là cả hai bề mặt này đều tương tác với nguyên tử carbon (màu đen) và đây nguyên tử oxy (màu đỏ) hướng lên trên gần như thẳng đứng. Đối với bề mặt Pt, vị trí hấp phụ là hollow giữa ba nguyên tử platinum (màu vàng). Vị trí hấp phụ đối với bề mặt PtRu là trên top của nguyên tử ruthenium (màu nâu).



Hình 5. Vị trí hấp phụ của phân tử CO lên hai đế Pt (phía trên) và PtRu (phía dưới) với bên trái là mặt nhìn từ trên xuống còn bên phải là mặt nhìn ngang

Bảng 1. Năng lượng của đế, của phân tử CO, của hệ CO-đế và năng lượng hấp phụ của hai hệ xúc tác Pt và PtRu

Hệ xúc tác	<i>E_{sub}</i> (eV)	<i>E_{CO}</i> (eV)	<i>E_{sys}</i> (eV)	<i>E_{ads}</i> (eV)
Pt	-274,81	-14,78	-291,62	-2,03
PtRu	-343,23	-14,78	-359,87	-1,86

Bảng 1 cung cấp thông tin chi tiết về năng lượng hấp phụ (*E_{ads}*) của phân tử CO trên hai bề mặt Pt và PtRu được tính toán theo công thức (1). Kết quả cho thấy, phân tử CO hấp phụ trên bề mặt platinum mạnh hơn so với trên bề mặt platinum-ruthenium,

với năng lượng hấp phụ lần lượt là -2,03 và -1,86 eV. Nói cách khác, xúc tác hợp kim PtRu cung cấp khả năng kháng ngộ độc CO tốt hơn so với kim loại Pt đơn chất. Kết quả này cũng hoàn toàn phù hợp với kết quả thực nghiệm đã thực hiện ở trên.

4. KẾT LUẬN

Trong nghiên cứu này, các hạt nano đơn kim loại platinum và hợp kim platinum-ruthenium đã được tổng hợp thành công bằng phương pháp đồng khử trên chất nền carbon Vulcan XC-72. Đồng thời, sự hấp phụ của phân tử CO lên hai bề mặt Pt và PtRu cũng được chạy tính toán mô phỏng thông qua gói phần mềm VASP. Kết quả phân tích XRD và ảnh TEM cho thấy, các hạt nano được tạo thành có cấu trúc lập phương tâm mặt (fcc) của tinh thể platinum, kích thước hạt trung bình lần lượt là 4,3 và 4,4 nm. Kích thước này là gần với giá trị tối ưu để sử dụng

làm chất xúc tác trong pin DMFC. Kết quả khảo sát điện hóa CV cho thấy, việc bổ sung kim loại ruthenium vào platinum đã làm tăng khả năng kháng ngộ độc CO lên 2,9 lần. Đồng thời, kết quả tính toán năng lượng hấp phụ của CO lên hai bề mặt cũng cho kết quả tương tự, với năng lượng hấp phụ trên bề mặt PtRu là -1,86 eV, thấp hơn so với trên bề mặt Pt (-2,03 eV). Như vậy, bên cạnh việc góp phần hạ giá thành sản phẩm pin DMFC do sử dụng lượng platinum ít hơn, việc thêm một lượng ruthenium vào còn giúp giảm ngộ độc CO trên bề mặt điện cực, giúp tăng hiệu suất của pin.

LỜI CẢM ƠN

Đề tài này được tài trợ bởi Trường Đại học Cần Thơ, Mã số: TSV2024-10.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Antolini, E. (2003). Formation of carbon-supported PtM alloys for low temperature fuel cells: a review. *Materials chemistry and physics*, 78(3), 563-573.
[https://doi.org/10.1016/S0254-0584\(02\)00389-9](https://doi.org/10.1016/S0254-0584(02)00389-9)
- Chen, T. Y., Luo, T. J. M., Yang, Y. W., Wei, Y. C., Wang, K. W., Lin, T. L., Wen, T. C., & Lee, C. H. (2012). Core dominated surface activity of core-shell nanocatalysts on methanol electrooxidation. *The Journal of Physical Chemistry C*, 116(32), 16969-16978.
<https://doi.org/10.1021/jp3017419>
- Figueiredo, M. C., Melander, M., Solla-Gullón, J., Kallio, T., & Laasonen, K. (2014). Bismuth and CO coadsorption on platinum nanoparticles. *The Journal of Physical Chemistry C*, 118(40), 23100-23110.
<https://doi.org/10.1021/jp5063513>
- Greeley, J., & Mavrikakis, M. (2002). A first-principles study of methanol decomposition on Pt (111). *Journal of the American Chemical Society*, 124(24), 7193-7201.
<https://doi.org/10.1021/ja017818k>
- Hsieh, C. T., Lin, J. Y., & Yang, S. Y. (2009). Carbon nanotubes embedded with PtRu nanoparticles as methanol fuel cell electrocatalysts. *Physica E*, 41(3), 373-378.
<https://doi.org/10.1016/j.physe.2008.08.060>
- Jang, J. H., Lee, E., Park, J., Kim, G., Hong, S., & Kwon, Y. U. (2013). Rational syntheses of core-shell Fe_x@Pt nanoparticles for the study of electrocatalytic oxygen reduction reaction. *Scientific reports*, 3(1), 1-8.
<https://doi.org/10.1038/srep02872>
- Jin, X., Zeng, C., Yan, W., Zhao, M., Bobba, P., Shi, H., Thapa, P. S., Subramaniam, B., & Chaudhari, R. V. (2017). Lattice distortion induced electronic coupling results in exceptional enhancement in the activity of bimetallic PtM nanocatalysts. *Applied Catalysis A*, 534, 46-57.
<https://doi.org/10.1016/j.apcata.2017.01.021>
- Kaewsai, D., & Hunsom, M. (2018). Comparative study of the ORR activity and stability of Pt and PtM (M= Ni, Co, Cr, Pd) supported on polyaniline/carbon nanotubes in a PEM fuel cell. *Nanomaterials*, 8(5), 299.
<https://doi.org/10.3390/nano8050299>
- Kamali, A. R., Schwandt, C., & Fray, D. J. (2011). Effect of the graphite electrode material on the characteristics of molten salt electrolytically produced carbon nanomaterials. *Materials characterization*, 62(10), 987-994.
<https://doi.org/10.1016/j.matchar.2011.06.010>
- Kramer, Z. C., Gu, X. K., Zhou, D. D., Li, W. X., & Skodje, R. T. (2014). Following molecules through reactive networks: Surface catalyzed decomposition of methanol on Pd(111), Pt(111), and Ni(111). *The Journal of Physical Chemistry C*, 118(23), 12364-12383.
<https://doi.org/10.1021/jp503056u>
- Liu, Z., & Hong, L. (2007). Electrochemical characterization of the electrooxidation of methanol, ethanol and formic acid on Pt/C and PtRu/C electrodes. *Journal of Applied Electrochemistry*, 37, 505-510.
<https://doi.org/10.1007/s10800-006-9282-0>
- Lu, L., Chen, S., Thota, S., Wang, X., Wang, Y., Zou, S., Fan, J., & Zhao, J. (2017). Composition controllable synthesis of PtCu nanodendrites with efficient electrocatalytic activity for methanol oxidation induced by high index surface and electronic interaction. *The Journal of*

- Physical Chemistry C*, 121(36), 19796-19806.
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b05629>
- Ou, L. (2018). New insights into the Pt-catalyzed CH₃OH oxidation mechanism: first-principle considerations on thermodynamics, kinetics, and reversible potentials. *ACS omega*, 3(1), 886-897.
<https://doi.org/10.1021/acsomega.7b01725>
- Quan, D. L., & Le, P. H. (2021). Enhanced methanol oxidation activity of PtRu/C_{100-x} MWCNT_{Sx} (x = 0–100 wt.%) by controlling the composition of C-MWCNTs support. *Coatings*, 11(5), 571.
<https://doi.org/10.3390/coatings11050571>
- Shah, M. A. (2012). Growth of uniform nanoparticles of platinum by an economical approach at relatively low temperature. *Scientia Iranica*, 19(3), 964-966.
<https://doi.org/10.1016/j.scient.2012.02.027>
- Suh, D. J., Kwak, C., Kim, J. H., Kwon, S. M., & Park, T. J. (2005). Removal of carbon monoxide from hydrogen-rich fuels by selective low-temperature oxidation over base metal added platinum catalysts. *Journal of power sources*, 142(1-2), 70-74.
<https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2004.09.012>
- Takasu, Y., Itaya, H., Iwazaki, T., Miyoshi, R., Ohnuma, T., Sugimoto, W., & Murakami, Y. (2001). Size effects of ultrafine Pt–Ru particles on the electrocatalytic oxidation of methanol. *Chemical Communications*, 4, 341-342.
<https://doi.org/10.1039/B008821H>
- Yamagishi, S., Fujimoto, T., Inada, Y., & Orita, H. (2005). Studies of CO adsorption on Pt (100), Pt (410), and Pt (110) surfaces using density functional theory. *The Journal of Physical Chemistry B*, 109(18), 8899-8908.
<https://doi.org/10.1021/jp050722i>