Tạp chí Khoa học Đại học Cần Thơ
Số chuyên đề: Khoa học tự nhiên Đồng bằng sông Cửu Long
ISSN 1859-2333 | e-ISSN 2815-5599

DOI:10.22144/ctujos.2026.200

KHẢO SÁT SỰ HẤP PHỤ CỦA PHÂN TỬ CARBON MONOXIDE TRÊN BỀ MẶT HỢP KIM RUTHENIUM-COBALT BẰNG LÝ THUYẾT PHIẾM HÀM MẬT ĐỘ

Đặng Long Quân[1,*], Nguyễn Thanh Giang[1], Nguyễn Thị Mỹ Lam[1],
Lê Hoàng Anh Quốc Thảo Nhi[1], Lê Thị Hồng Đào[1] và Nguyễn Hải Đăng[2]
[1]*Khoa Vật lý, Trường Khoa học Tự nhiên, Đại học Cần Thơ, Việt Nam*
[2]*Khoa Cơ bản, Trường Đại học Nam Cần Thơ, Việt Nam*
**Tác giả liên hệ (Corresponding author): dlquan@ctu.edu.vn*

Thông tin chung (Article Information)

Nhận bài (Received): 08/06/2026
Sửa bài (Revised): 29/06/2026
Duyệt đăng (Accepted): 24/08/2026

Title: *A density functional theory investigation of the adsorption of carbon monoxide on ruthenium-cobalt alloy*

Author(s): *Dang Long Quan[1,*], Nguyen Thanh Giang[1], Nguyen Thi My Lam[1], Le Hoang Anh Quoc Thao Nhi[1], Le Thi Hong Dao[1] and Nguyen Hai Dang[2]*

Affiliation(s): *[1]Department of Physics, College of Natural Sciences, Can Tho University, Viet Nam; [2]Faculty of Basic Department, Nam Can Tho University, Viet Nam*

TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này, lý thuyết phiếm hàm mật độ được sử dụng để khảo sát sự hấp phụ của phân tử carbon monoxide (CO) trên bề mặt hợp kim ruthenium-cobalt (RuCo). Các mẫu hấp phụ được tạo bởi phần mềm VESTA. Phần mềm VASP được sử dụng để tối ưu hóa cấu trúc và tính toán năng lượng. Bên cạnh đó, khoảng cách hấp phụ và tương tác điện tử giữa phân tử CO với đế cũng được xác định. Kết quả tìm ra được vị trí mà CO hấp phụ tốt nhất trên bề mặt RuCo. Nghiên cứu này góp phần vào việc hoàn thiện bức tranh tổng thể về sự hấp phụ của khí CO lên bề mặt các chất xúc tác có tiềm năng ứng dụng vào pin nhiên liệu methanol.

Từ khóa: *Carbon monoxide, hợp kim ruthenium-cobalt, lý thuyết phiếm hàm mật độ, VASP*

ABSTRACT

In this study, density functional theory was used to investigate the adsorption of carbon monoxide on the surface of a ruthenium-cobalt alloy. Samples were simulated using VESTA software. VASP was used to optimize the structure and calculate the energy. In addition, the adsorption distance and the electronic interaction between carbon monoxide and a substrate were determined. The results identified the optimal adsorption location for CO on the RuCo surface. This research contributes to completing the overall picture of CO adsorption on the surface of catalysts used for direct methanol fuel cells.

Keywords: *Carbon monoxide, density functional theory, ruthenium-cobalt alloy, VASP*

1. GIỚI THIỆU

Trong số các dạng năng lượng mới hiện nay, pin nhiên liệu methanol là một trong những ứng viên đầy hứa hẹn vì có kích thước nhỏ gọn, nhiên liệu methanol dễ sản xuất và tồn trữ, có mật độ năng lượng cao và hoạt động ở nhiệt độ thấp (Aricò et al., 2001; Zhang et al., 2017). Tuy nhiên, việc thương mại hóa pin nhiên liệu methanol còn gặp một số rào cản, đặc biệt là hiện tượng ngộ độc carbon monoxide (CO) ở bề mặt điện cực làm hiệu suất pin suy giảm theo thời gian và việc sử dụng kim loại quý platinum (Pt) làm chất xúc tác khiến pin có giá thành cao (Suh et al., 2005).

Để giảm lượng Pt sử dụng, các nghiên cứu tập trung vào chế tạo chất xúc tác hợp kim hai hoặc ba thành phần của Pt như PtRuNi (Wang et al., 2007), PtRuCo (Huang et al., 2009), PtFe (Jang et al., 2013), PtNi (Nassr et al., 2013), PtRuFe (Cai et al., 2015), PtCo (Baronia et al., 2017), PtPd (Zhao et al., 2018), PtRu (Quan & Le, 2021). Tuy nhiên, có rất ít nghiên cứu về chất xúc tác không sử dụng kim loại quý platinum.

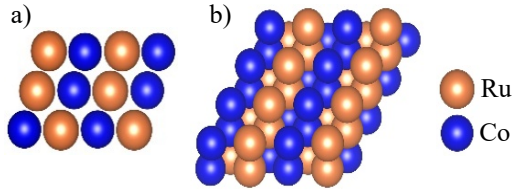
Đối với hiện tượng ngộ độc CO, các nghiên cứu đều tập trung vào việc khảo sát lý thuyết. Đã có nhiều công bố về sự hấp phụ CO trên các bề mặt như Pt(100), Pt(410) và Pt(110) (Yamagishi et al., 2005), PtCu (Lei et al., 2013), PtBi (Figueiredo et al., 2014), Pt clusters (Ramos-Sánchez & Balbuena, 2014), Pt_3M (M = Pt, Ni, Mo, Ru, Pd, Rh) clusters (Lian et al., 2015), Pt-Me (Me = Fe, Co, Ni) nanoclusters (Korniy et al., 2016), PtMo (Liu et al., 2019). Nhưng tương tự như trên, các công bố lý thuyết về sự hấp phụ CO trên bề mặt chất xúc tác định hướng ứng dụng trong pin nhiên liệu methanol mà không sử dụng kim loại quý platinum cũng gần như không xuất hiện.

Trong nghiên cứu này, sự hấp phụ của phân tử CO lên bề mặt chất xúc tác hợp kim ruthenium-cobalt (không sử dụng kim loại quý platinum) được tính toán và khảo sát. Kết quả góp phần vào việc hoàn thiện bức tranh tổng thể về sự hấp phụ của khí CO lên bề mặt các chất xúc tác có tiềm năng ứng dụng vào pin nhiên liệu methanol.

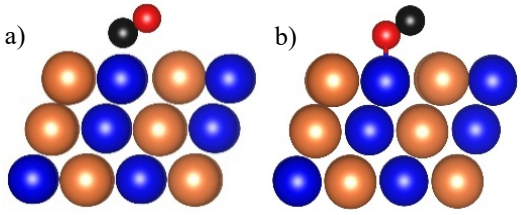
2. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Trước tiên, phần mềm VESTA được sử dụng để thiết kế các hệ mô phỏng. Phần đế hợp kim RuCo với bề mặt được thiết kế tương ứng mặt mạng (111) của cấu trúc tinh thể fcc. Đế bao gồm ba lớp, với các nguyên tử Ru xen kẽ Co theo tỷ lệ Ru:Co = 1:1 Mỗi unit cell có kích thước 10,2 Å x 10,2 Å x 22,9 Å, tuần hoàn theo hai phương x và y, khoảng chân không theo trục z được thiết kế xấp xỉ 15 Å. 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 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.

Tiếp theo, phân tử CO được thiết kế hấp phụ lên bề mặt đế RuCo tại 7 vị trí khả dĩ, bao gồm: top Ru, top Co, bridge Ru-Ru, bridge Ru-Co, bridge Co-Co, hollow Ru-Ru-Co và hollow Ru-Co-Co tương ứng với hai trường hợp là nguyên tử C quay xuống và nguyên tử O quay xuống (Hình 2). Khoảng cách ban đầu từ nguyên tử C hay O đến bề mặt đế xấp xỉ 2,0 Å cho tất cả các mẫu.



Hình 1. Đế hợp kim RuCo nhìn theo phương ngang (a) và theo phương từ trên xuống (b)



Hình 2. Trường hợp nguyên tử C quay xuống (a) và nguyên tử O quay xuống (b)

Sau khi các mẫu được thiết kế xong, gói phần mềm mô phỏng VASP được sử dụng để tối ưu hoá cấu trúc và tính toán năng lượng của chúng. Năng lượng hấp phụ giữa phân tử CO và bề mặt đế được tính toán theo công thức:

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

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

Bên cạnh năng lượng hấp phụ, khoảng cách giữa nguyên tử hấp phụ và bề mặt đế d_{ads} cũng được xác định. Hơn thế nữa, nhằm có một cái nhìn trực quan về sự tương tác điện tử giữa phân tử CO và bề mặt đế, giá trị sai khác mật độ điện tích $\Delta\rho$ (charge density difference – CDD) cũng được tính toán cho hai mẫu điển hình (mẫu thứ nhất ứng với trường hợp nguyên tử C quay xuống vị trí hollow Ru-Co-Co cho kết quả năng lượng hấp phụ có giá trị dương cao nhất, mẫu thứ hai ứng với trường hợp nguyên tử O quay xuống vị trí hollow Ru-Ru-Co cho kết quả năng lượng hấp phụ có giá trị âm thấp nhất) theo công thức:

$$\Delta\rho = \rho_{CO-RuCo} - \rho_{RuCo} - \rho_{CO} \quad (2)$$

Trong đó, $\rho_{CO-RuCo}$, ρ_{RuCo} và ρ_{CO} lần lượt là mật độ điện tích của hệ CO hấp phụ trên đế RuCo,

mật độ điện tích của đế RuCo và của chất trung gian hấp phụ CO.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

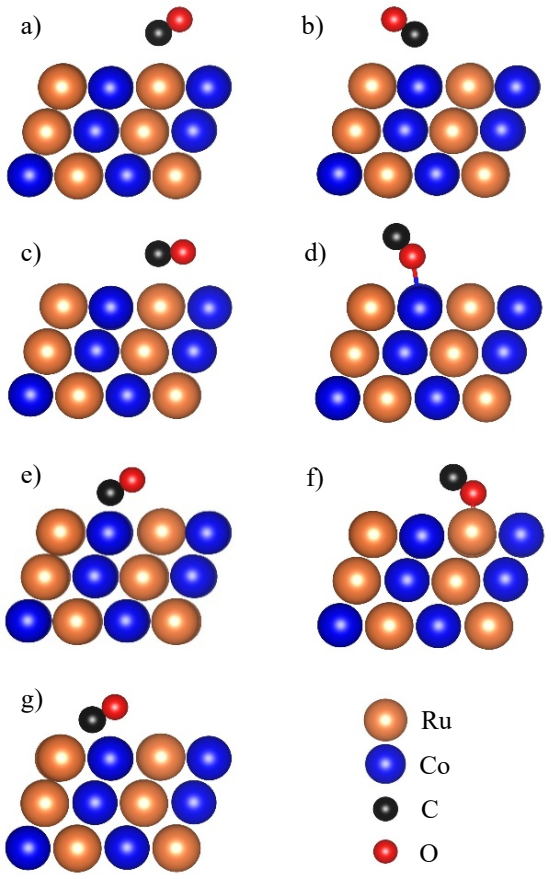
3.1. Trường hợp nguyên tử C quay xuống

Bảng 1 và Hình 3 thể hiện kết quả tính năng lượng hấp phụ và chạy tối ưu hóa cấu hình của các hệ trong trường hợp nguyên tử C quay xuống, tương ứng với 7 vị trí khác nhau của nguyên tử C trên bề mặt hợp kim RuCo như đã đề cập ở phần phương pháp nghiên cứu.

Bảng 1. Kết quả tính năng lượng hấp phụ cho trường hợp nguyên tử C quay xuống

Vị trí	$E_{CO-RuCo}$ (eV)	E_{RuCo} (eV)	E_{CO} (eV)	E_{ads} (eV)
top Ru	-372,31	-357,79	-14,80	**0,28**
top Co	-372,28	-357,79	-14,80	**0,31**
bridge Ru-Ru	-372,25	-357,79	-14,80	**0,34**
bridge Ru-Co	-372,81	-357,79	-14,80	**-0,22**
bridge Co-Co	-371,62	-357,79	-14,80	**0,97**
hollow Ru-Ru-Co	**-373,11**	**-357,79**	**-14,80**	**-0,52**
hollow Ru-Co-Co	-371,55	-357,79	-14,80	**1,04**

Giá trị năng lượng hấp phụ (E_{ads}) ở Bảng 1 có thể cho thấy nguyên tử C không hấp phụ lên bề mặt RuCo, với các giá trị E_{ads} đều dương (trừ hai trường hợp bridge Ru-Co và hollow Ru-Ru-Co). Trong đó, giá trị dương lớn nhất tương ứng với trường hợp nguyên tử C nằm ở vị trí hollow Ru-Co-Co, với giá trị năng lượng hấp phụ bằng 1,04 eV. Điều này hoàn toàn phù hợp với kết quả chạy tối ưu hóa khi trên Hình 3, có thể thấy, không có nguyên tử C nào bắt liên kết với bề mặt RuCo. Riêng đối với hai trường hợp bridge Ru-Co và hollow Ru-Ru-Co, mặc dù kết quả tính năng lượng hấp phụ có giá trị âm, nhưng không phải do nguyên tử C hấp phụ lên bề mặt RuCo. Hình 3d và Hình 3f cho thấy nguyên tử bắt liên kết với bề mặt là O. Do ban đầu hệ được thiết lập là nguyên tử C quay xuống, nên kết quả này chứng tỏ, ứng với hai trường hợp trên, bề mặt RuCo đã đẩy nguyên tử C và hút nguyên tử O với lực tương tác khá lớn, làm xoay phân tử CO theo chiều nguyên tử O hướng xuống.



Hình 3. Kết quả chạy tối ưu hóa cho trường hợp nguyên tử C quay xuống tại 7 vị trí

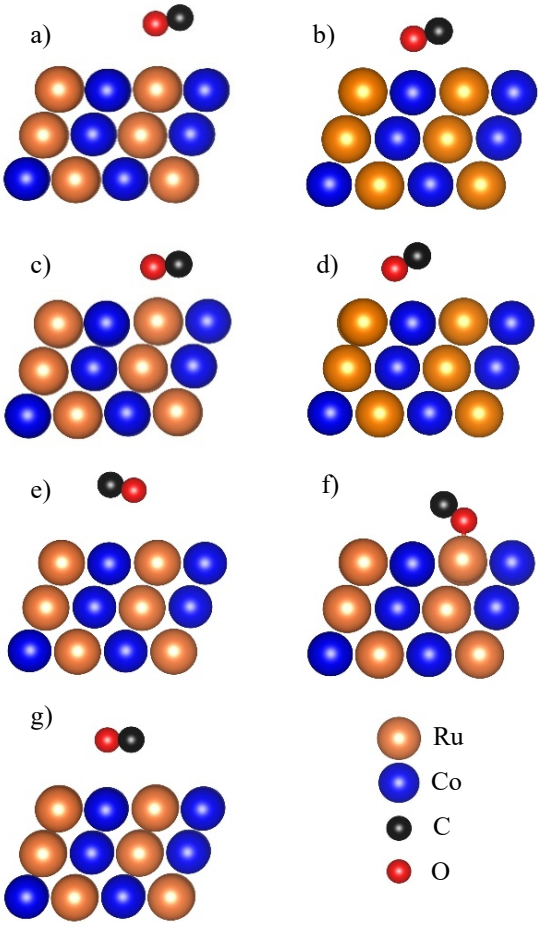
Ghi chú: a) top Ru, b) top Co, c) bridge Ru-Ru, d) bridge Ru-Co, e) bridge Co-Co, f) hollow Ru-Ru-Co và g) hollow Ru-Co-Co.

3.2. Trường hợp nguyên tử O quay xuống

Bảng 2 và Hình 4 thể hiện kết quả tính năng lượng hấp phụ và chạy tối ưu hóa của các hệ trong trường hợp nguyên tử O quay xuống, tương ứng với 7 vị trí khác nhau của nguyên tử O trên bề mặt hợp kim RuCo.

Nhìn chung, có sự tương đồng trong xu hướng hấp phụ giữa hai trường hợp nguyên tử C quay xuống và nguyên tử O quay xuống. Trong đó, năng lượng liên kết giữa bề mặt đế với nguyên tử oxy thấp hơn một chút so với nguyên tử carbon. Kết quả được trình bày ở Bảng 2 cho thấy năng lượng hấp phụ thấp nhất ở ba vị trí là top Co (0,08 eV), bridge Ru-Co (0,02 eV) và hollow Ru-Ru-Co (-1,51 eV), tương ứng với Hình 4b, Hình 4d và Hình 4f. Trong khi đó, giá trị dương lớn nhất tương ứng với trường hợp nguyên tử oxy nằm ở vị trí hollow Ru-Co-Co, với giá trị năng lượng hấp phụ bằng 1,03 eV. Đối với

cấu hình bridge Ru-Co, trong cả hai trường hợp nguyên tử C quay xuống và nguyên tử O quay xuống đều cho giá trị năng lượng hấp phụ thấp. Tuy nhiên, trong hai trường hợp này, giá trị năng lượng này là khác nhau. Điều này có thể được giải thích là do cấu hình bridge Ru-Co chỉ là vị trí đặt ban đầu. Trong quá trình hệ máy chạy tối ưu hóa, sự dịch chuyển các vị trí khác nhau của phân tử CO đã xảy ra để tìm ra vị trí có năng lượng thấp nhất. Có khả năng ở gần vị trí bridge Ru-Co có hai vị trí hố thế ứng với hai cấu hình tối ưu trên.



Hình 4. Kết quả chạy tối ưu hóa cho trường hợp nguyên tử O quay xuống tại 7 vị trí

Ghi chú: a) top Ru, b) top Co, c) bridge Ru-Ru, d) bridge Ru-Co, e) bridge Co-Co, f) hollow Ru-Ru-Co và g) hollow Ru-Co-Co.

Như vậy, trong cả hai trường hợp nguyên tử C quay xuống và nguyên tử O quay xuống, vị trí hấp phụ tốt nhất trên bề mặt RuCo là hollow Ru-Ru-Co, với giá trị năng lượng hấp phụ bằng -1,51 eV.

Bảng 2. Kết quả tính năng lượng hấp phụ cho trường hợp nguyên tử O quay xuống

Vị trí	$E_{CO-RuCo}$ (eV)	E_{RuCo} (eV)	E_{CO} (eV)	E_{ads} (eV)
top Ru	-372,41	-357,79	-14,80	**0,18**
top Co	-372,51	-357,79	-14,80	**0,08**
bridge Ru-Ru	-372,26	-357,79	-14,80	**0,33**
bridge Ru-Co	-372,57	-357,79	-14,80	**0,02**
bridge Co-Co	-371,63	-357,79	-14,80	**0,96**
hollow Ru-Ru-Co	**-374,10**	**-357,79**	**-14,80**	**-1,51**
hollow Ru-Co-Co	-371,56	-357,79	-14,80	**1,03**

3.3. Khoảng cách từ nguyên tử hấp phụ đến bề mặt

Bảng 3 cung cấp giá trị khoảng cách (d_{ads}, tính bằng đơn vị Å) giữa nguyên tử hấp phụ (C hoặc O) và bề mặt đế RuCo.

Bảng 3. Khoảng cách từ nguyên tử hấp phụ đến bề mặt

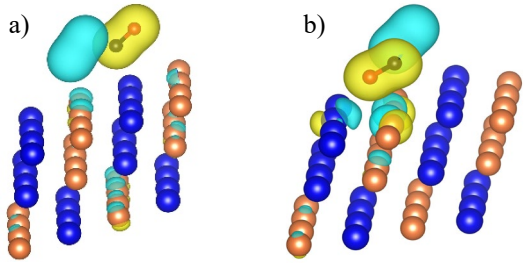
Vị trí	d_{ads} (Å)	
	C quay xuống	O quay xuống
top Ru	2,48	3,03
top Co	3,68	2,22
bridge Ru-Ru	2,46	2,45
bridge Ru-Co	1,87	1,86
bridge Co-Co	3,21	3,14
hollow Ru-Ru-Co	**1,86**	**1,73**
hollow Ru-Co-Co	2,37	2,36

Như đã trình bày ở phần phương pháp, khoảng cách từ nguyên tử C hoặc O đến bề mặt đế ban đầu được thiết lập xấp xỉ 2,0 Å cho tất cả các mẫu. Tuy nhiên, do tương tác giữa phân tử hấp phụ với đế nên khoảng cách này có sự thay đổi rõ rệt sau khi chạy tối ưu hóa. Trong đó, giá trị d_{ads} tương ứng với hai vị trí là bridge Ru-Co và hollow Ru-Ru-Co bị giảm đi. Điều này hoàn toàn phù hợp với kết quả tính năng lượng liên kết khi hai vị trí này cho giá trị E_{ads} âm. Tương tác giữa phân tử hấp phụ với bề mặt đế là lực hút làm cho khoảng cách giữa chúng giảm đi. Ngược lại, ở các vị trí khác, giá trị khoảng cách d_{ads} tăng lên do lực tương tác là lực đẩy (E_{ads} mang giá trị dương).

3.4. Tương tác điện tử giữa phân tử hấp phụ với đế

Hình 5 thể hiện sai khác mật độ điện tích (CDD) của hai mẫu điển hình. Mẫu thứ nhất ứng với trường hợp nguyên tử C quay xuống vị trí hollow Ru-Co-Co, cho kết quả năng lượng hấp phụ có giá trị dương cao nhất. Mẫu thứ hai ứng với trường hợp nguyên tử O quay xuống vị trí hollow Ru-Ru-Co, cho kết quả năng lượng hấp phụ có giá trị âm thấp nhất. Trong hình, khu vực có màu lam và vàng lần lượt biểu thị sự suy giảm và tăng cường điện tử, tương ứng với điện tích có giá trị dương và âm ở các khu vực đó. Có thể thấy rõ, trong trường hợp nguyên tử C quay xuống vị trí hollow Ru-Co-Co (Hình 5a), ở khu vực xung quanh phân tử CO tập trung một lượng lớn điện tích (màu vàng). Trong khi đó, ở bề mặt các nguyên tử Co gần như không xuất hiện sự trao đổi điện tích nào. Do đó, không có điều kiện để thiết lập tương tác giữa phân tử CO với đế. Thậm chí, bên trái phân tử CO xuất hiện một vùng mất điện tích (màu lam) nằm ngay phía trên các nguyên tử Ru, mà trên các nguyên tử Ru này lại tồn tại các vùng bị mất điện tích. Điều này dẫn đến tương tác đẩy giữa bề mặt đế và phân tử CO (do cùng mang điện tích dương).

Ngược lại, ở trường hợp nguyên tử O quay xuống vị trí hollow Ru-Ru-Co (Hình 5b), phía trên cụm ba nguyên tử Ru-Ru-Co xuất hiện các vùng suy giảm điện tích (màu lam). Các vùng suy giảm điện tích này và đám mây tích tụ điện tích (màu vàng) xung quanh phân tử CO sẽ hút nhau. Do đó, tại đây xảy ra sự hấp phụ mạnh mẽ của phân tử CO lên bề mặt đế.



Hình 5. Kết quả tính toán sai khác mật độ điện tích cho trường hợp nguyên tử C quay xuống vị trí hollow Ru-Co-Co (a) và trường hợp nguyên tử O quay xuống vị trí hollow Ru-Ru-Co (b)

4. KẾT LUẬN

Khi phân tử CO hấp phụ trên bề mặt hợp kim RuCo thì xảy ra tương tác đẩy nếu nguyên tử carbon ở gần bề mặt đế đối với tất cả các vị trí. Trong trường hợp nguyên tử oxy ở gần bề mặt, năng lượng hấp phụ luôn thấp hơn so với trường hợp nguyên tử carbon quay xuống cho tất cả các vị trí tương ứng. Vị trí có năng lượng hấp phụ thấp nhất ứng với hollow Ru-Ru-Co, với E_{ads} = -1,51 eV và khoảng cách từ nguyên tử oxy đến bề mặt là d_{ads} = 1,73 (Å).

LỜI CẢM TẠ

Đề tài này được tài trợ bởi Đại học Cần Thơ, Mã số: T2025-09.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Aricò, A. S., Srinivasan, S., & Antonucci, V. (2001). DMFCs: from fundamental aspects to technology development. *Fuel cells*, *1*(2), 133-161. https://doi.org/10.1002/1615-6854(200107)1:2<133::AID-FUCE133>3.0.CO;2-5

Baronia, R., Goel, J., Tiwari, S., Singh, P., Singh, D., Singh, S. P., & Singhal, S. K. (2017). Efficient electro-oxidation of methanol using PtCo nanocatalysts supported reduced graphene oxide matrix as anode for DMFC. *International Journal of Hydrogen Energy*, *42*(15), 10238-10247. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.03.011

Cai, Z., Kuang, Y., Qi, X., Wang, P., Zhang, Y., Zhang, Z., & Sun, X. (2015). Ultrathin branched PtFe and PtRuFe nanodendrites with enhanced electrocatalytic activity. *Journal of Materials Chemistry A*, *3*(3), 1182-1187. https://doi.org/10.1039/C4TA04698F

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

Huang, T., Wang, X., Zhuang, J., Cai, W. B., & Yu, A. (2009). Preparation of porous PtRuCo catalyst by one-step codeposition and its electrocatalytic performance for methanol oxidation. *Electrochemical and Solid-State Letters*, *12*(7), B112-B115. https://doi.org/ 10.1149/1.3125286

Jang, J. H., Lee, E., Park, J., Kim, G., Hong, S., & Kwon, Y. U. (2013). Rational syntheses of core-shell Fex@Pt nanoparticles for the study of electrocatalytic oxygen reduction reaction. *Scientific Reports*, *3*(1), 1-8. https://doi.org/10.1038/srep02872

Korniy, S., Pokhmurskii, V., & Kopylets, V. (2016). A theoretical study of CO adsorption on Pt-Me

(Me-Fe, Co, Ni) nanoclusters. *J Thermodyn Catal*, *7*(169), 2. http://dx.doi.org/10.4172/2157-7544.1000169

Lei, X. L., Wu, M. S., Liu, G., Xu, B., & Ouyang, C. Y. (2013). The role of Cu in degrading adsorption of CO on the Pt n Cu clusters. *The Journal of Physical Chemistry A*, *117*(34), 8293-8297. https://doi.org/10.1021/jp4042292

Lian, X., Guo, W., Liu, F., Yang, Y., Xiao, P., Zhang, Y., & Tian, W. (2015). DFT studies on Pt_3M (M= Pt, Ni, Mo, Ru, Pd, Rh) clusters for CO oxidation. *Computational Materials Science*, *96*, 237-245. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.09.025

Liu, Y., Duan, Z., & Henkelman, G. (2019). Computational design of CO-tolerant Pt3M anode electrocatalysts for proton-exchange membrane fuel cells. *Physical Chemistry Chemical Physics*, *21*(7), 4046-4052. https://doi.org/10.1039/C8CP07086E

Nassr, A. B. A. A., Sinev, I., Grünert, W., & Bron, M. (2013). PtNi supported on oxygen functionalized carbon nanotubes: in depth structural characterization and activity for methanol electrooxidation. *Applied Catalysis B: Environmental*, *142*, 849-860. https://doi.org/10.1016/j.apcatb.2013.06.013

Quan, D. L., & Le, P. H. (2021). Enhanced methanol oxidation activity of $PtRu/C_{100-x}$ $MWCNTs_x$ (x = 0–100 wt.%) by controlling the composition of C-MWCNTs support. *Coatings*, *11*(5), 571. https://doi.org/10.3390/coatings11050571

Ramos-Sánchez, G., & Balbuena, P. B. (2014). CO adsorption on Pt clusters supported on graphite. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, *716*, 23-30. https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2013.09.025

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

Wang, Z. B., Yin, G. P., Shao, Y. Y., Yang, B. Q., Shi, P. F., & Feng, P. X. (2007). Electrochemical impedance studies on carbon supported PtRuNi and PtRu anode catalysts in acid medium for direct methanol fuel cell. *Journal of Power Sources*, *165*(1), 9-15. https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2006.12.027

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

Zhang, C., Shen, X., Pan, Y., & Peng, Z. (2017). A review of Pt-based electrocatalysts for oxygen reduction reaction. *Frontiers in Energy*, *11*, 268-285. https://doi.org/10.1007/s11708-017-0466-6

Zhao, H., Qi, W., Zhou, X., Wu, H., & Li, Y. (2018). Composition-controlled synthesis of platinum and palladium nanoalloys as highly active electrocatalysts for methanol oxidation. *Chinese Journal of Catalysis*, *39*(2), 342-349. https://doi.org/10.1016/S1872-2067(18)63020-7