



ESTUDO DA ADSORÇÃO DA MOLECULA CO NA SUPERFICIE DE GRAFENO DOPADO COM O METAL DE TRANSIÇÃO Ti

Cicero lima nascimento¹, Luis Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

O carbono é o elemento mais abundante na natureza e tem varios alotropos como o diamante, grafite, fullerenos, nanotubos de carbono e grafeno. Depois de sua sentetização em 2004, seu estudo e pesquisa de aplicação em varias areas foi crescendo. O grafeno é uma camada de atomos que esta distribuido em forma hexagonal como um favo de mel, suas propriedades eletronicas, mecanicas e termicas trouxe muita atenção ao mundo científico. O Monóxido de carbono (CO) é um gás toxico. Existem trabalhos da dopagem de grafeno e nanotubos de carbono com camadas de Ti para detectar moléculas de CO no medio ambiente. Neste trabalho estudamos a adsorção do CO na superficie do grafeno dopado com Ti utilizando dinamica molecular classica. Observamos que o sistema grafeno + Ti repele a molécula e vira um ângulo de 90°. A energia de adsorção é de -36.424 kcal/mol que mostra a estabilidade do sistema.

Palavras-chave: Grafeno, Monóxido de carbono, Titânio.

¹Aluno do ECI Orlando Venancio dos Santos, Cuite, PB, e-mail: limacicero5679@gmail.com

²Doutor , Professor, UAFM, UFCEG, Cuite, PB, e-mail: lterrazo@ufcg.edu.br



STUDY OF THE ADSORPTION OF MOLECULA CO ON THE SURFACE OF GRAPHENE DOPED WITH TRANSTION METAL Ti.

ABSTRACT

Carbon is the most abundant element in nature and has several allotropes such as diamond, graphite, fullerenes, carbon nanotubes and graphene. After his sentetization in 2004, his study and application research in various areas grew. Graphene is a layer of atoms that is distributed in a hexagonal shape like a honeycomb. Its electronic, mechanical and thermal properties have brought much attention to the scientific world. Carbon monoxide (CO) is a toxic gas. There are works on the doping of graphene and carbon nanotubes with Ti layers to detect CO molecules in the environment. In this work we study the adsorption of CO on the surface of graphene doped with Ti using classical molecular dynamics. We observed that the graphene + Ti system repels the molecule and turns at an angle of 90°. The adsorption energy is -36,424 kcal / mol which shows the stability of the system.

Keywords: Graphene, Carbon Monoxide, titanium.