

## Adsorción de hidrógeno sobre estructuras zeolíticas de ZIF-8: Análisis estructural y energético a través de simulación molecular

### Hydrogen adsorption on ZIF-8 zeolite structures: Structural and energetical analysis by molecular simulation

Florianne Castillo-Borja<sup>1,\*</sup>, Karla E. Lara-Pedroza<sup>1</sup>, Eduardo R. Flores-Vázquez<sup>1</sup>,  
Virginia Hernández-Montoya<sup>1</sup>

(1) Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Aguascalientes, Departamento de Ing. Química,  
Av. López Mateos 1801 Ote, Aguascalientes, México

\*autor de correspondencia ([florianne.cb@aguascalientes.tecnm.mx](mailto:florianne.cb@aguascalientes.tecnm.mx))

Recibido 25/06/2025

Evaluado 05/11/2025

Aceptado 30/11/2025

<https://doi.org/10.65093/aci.v16.n4.2025.42>

#### RESUMEN

En este estudio se compara la capacidad adsorción de hidrógeno a 77 K y 298 K en ZIF-8 y presiones de 0.5 hasta 80 atmósferas, empleando simulaciones de Dinámica Molecular (DM) y Grand Canonical Monte Carlo (GCMC). Los análisis incluyen isothermas de adsorción, funciones de distribución radial, mapas de densidad y energías de adsorción. La adsorción a 77 K es mayor que a 298 K, alcanzando una adsorción de 16 mmol/g y de 0.5 mmol/g, respectivamente, coincidiendo con la literatura. Los sitios de adsorción del hidrógeno no son afectados por cambios en la temperatura y presión, el sitio preferencial es el carbono C2 del ligando 2-metilimidazolato, seguido del carbono C3 del grupo metilo del ligando y a una distancia mayor del ión Zinc. Los mapas de densidad y energías indican que el hidrógeno se adsorbe sobre todos los poros del ZIF-8 y que la energía es aproximadamente de -459 kcal/mol.

Palabras clave: hidrógeno, estructura metal-orgánica, ZIF-8, Grand Canonical Monte Carlo

#### ABSTRACT

This study compares the hydrogen adsorption capacity of ZIF-8 at 77 K and 298 K and pressures from 0.5 to 80 atmospheres, using Molecular Dynamics (MD) and Grand Canonical Monte Carlo (GCMC) simulations. Analyses include adsorption isotherms, radial distribution functions, density maps, and adsorption energies. Adsorption at 77 K is greater than at 298 K, reaching 16 mmol/g and 0.5 mmol/g, respectively, consistent with the literature. Hydrogen adsorption sites are unaffected by changes in temperature and pressure; the preferential site is carbon C2 of the 2-methylimidazolate ligand, followed by carbon C3 of the ligand's methyl group, and at a greater distance, the zinc ion. Density and energy maps indicate that hydrogen is adsorbed onto all pores of ZIF-8 and that the energy is approximately -459 kcal/mol

Keyword: hydrogen, metal organic structure, ZIF-8, Grand Canonical Monte Carlo

## INTRODUCCIÓN

El hidrógeno es un prometedor combustible que tiene una alta capacidad calorífica y tiene la particularidad de que cuando se utiliza como combustible en vehículos no existen emisiones de dióxido de carbono. El hidrógeno es una forma limpia de energía con mayor capacidad energética que los productos derivados del petróleo y en su combustión, al producir agua, es menor su impacto ambiental. Sin embargo, debido a su baja densidad, representa un reto diseñar formas de almacenamiento y transporte seguras, eficientes y de bajo costo. Para almacenar hidrógeno se han buscado diferentes materiales como candidatos para su almacenamiento como los hidruros metálicos, hidruros químicos y sorbentes (Bakhshi & Farhadian, 2019) o MOFs (Rivera-Pousa *et al.*, 2023). Otras opciones de almacenamiento son los materiales de carbono, basados en grafeno, por su robustez, gran área superficial y bajo peso (Bakhshi & Farhadian, 2019; Karki & Chakraborty, 2021; Wenfeng *et al.*, 2024). Por tanto, es importante determinar que adsorbente sólido reúne las características apropiadas para adsorber una significativa cantidad de hidrógeno a presiones y temperaturas moderadas, permitiendo así un almacenamiento económico y seguro; aprovechando al hidrógeno como fuente de energía limpia.

Materiales porosos como las zeolitas (Wu *et al.*, 2014; Zheng *et al.*, 2012), estructuras metal-orgánicas o MOFs (Ahmed *et al.*, 2017), nanotubos de carbono (Karki & Chakraborty, 2021) y hojas de grafeno puras o decoradas con metales (Bakhshi & Farhadian, 2019; Wenfeng *et al.*, 2024) se han utilizado para investigar la capacidad de almacenamiento de hidrógeno. A continuación, se mencionan algunos de los más recientes estudios de simulación molecular que involucran la presencia de una superficie porosa como material adsorbente para el almacenamiento de gas hidrógeno.

Bakhshi y colaboradores han combinado simulaciones de DM y MC gran canónico (GCMC) a 300 K para investigar si la modificación de hojas de grafeno con paladio o nitrógeno incrementa la capacidad de adsorción de hidrógeno, en comparación con grafeno puro, y observan un resultado favorable, incrementando la adsorción de hidrógeno (Bakhshi & Farhadian, 2019).

Las zeolitas Si-LTA y LTA-4A se han utilizado para estudiar la fisisorción de hidrógeno a 77 K, realizando simulaciones NPT-Gibbs Monte Carlo (Karki & Chakraborty, 2024). En este estudio se analizaron en detalle las densidades gravimétricas, las funciones de distribución radial, las entalpías de adsorción y las regiones específicas de adsorción para el hidrógeno. El número de moléculas de hidrógeno almacenadas en LTA-4A es mayor en comparación con Si-LTA. A 77 K a 200 bar. En estas zeolitas, aproximadamente el 3 % en peso del hidrógeno se puede almacenar y la introducción de iones de sodio incrementa el número de moléculas de hidrógeno adsorbidas en LTA-4A.

También se han estudiado las isothermas de adsorción y coeficientes de Henry para el hidrógeno en superficies de cuarzo hidroxilado. Estas superficies son predominantes en rocas de arenisca y pizarra (Muther & Kalantari Dahaghi, 2024). En este estudio, se diseñó un poro de cuarzo hidroxilado a escala molecular, se analizaron los efectos de cambios en la temperatura y presión y por medio de simulación Monte Carlo y se evaluaron las isothermas de adsorción y los coeficientes de Henry, en un rango de 323.15-403.15 K. Además, al adicionar gas CH<sub>4</sub> se logró comprender la dinámica de adsorción competitiva entre H<sub>2</sub> y CH<sub>4</sub>.

Otros autores (Otero-Lema *et al.*, 2024) combinaron simulaciones de DM y de forma híbrida DM con GCMC para analizar el mecanismo de captación de gas hidrógeno y nitrógeno dentro de nanotubos de carbono llenos de un líquido iónico a 300 K. Se consideraron varios diámetros de nanotubos (de 6 Å a 12.24 Å) y dos líquidos iónicos diferentes (nitrato de etilamonio y tetrafluoroborato de 1-etil-3-metilimidazolio) para estudiar su efecto en la capacidad de captura de gases y en la ubicación de las moléculas de gas dentro de los nanotubos. Las simulaciones mostraron que la capacidad de absorción de nitrógeno es, en general, mayor que la del hidrógeno, siendo el líquido iónico aprótico más eficiente para el confinamiento de gases. Además, se observó que la captura de gases aumentaba desde un 0.4% en líquidos iónicos hasta un 8%-25% dentro de nanotubos pequeños, y la máxima captación de gases se observó para aquellos nanotubos que permiten un mayor grado de libertad conformacional del líquido iónico. En todos los casos, las moléculas de gas son absorbidas en la región rica en líquido iónico, pero las interacciones con los otros componentes del sistema favorecen su acomodo más cerca de la pared que del centro del nanotubo.

Utilizando también un procedimiento híbrido de simulación GCMC y DM, Shang y colaboradores (Shang *et al.*, 2024), investigaron el comportamiento de adsorción y difusión de hidrógeno en una hendidura de caolinita con diferentes tamaños de poro, superficies de poro con diferentes propiedades de carga, y diferentes condiciones de presión y temperatura desde 303 hasta 423 K. Se analizó la distribución de hidrógeno, el exceso de adsorción, el coeficiente de difusión y la energía de interacción gas-sólido en relación con el tamaño de poro, la temperatura, la presión y la mineralogía. Su estudio tuvo la finalidad mejorar la comprensión de los mecanismos de almacenamiento de hidrógeno en medios porosos del subsuelo, lo cual ofrece la oportunidad de almacenar hidrógeno a gran escala y a largo plazo.

Más recientemente, Yang y colaboradores (Yang & Jin, 2025) analizaron por medio de simulaciones GCMC y de DM el efecto de materiales como la montmorillonita, illita y caolinita, así como otros factores tales como la temperatura, presión y tamaño de poro en la adsorción de hidrógeno. El estudio se realizó en un rango de 5-80 MPa y 293-353 K. De estos materiales, la illita resultó en una mayor capacidad de adsorción debido a una mayor energía de adsorción y mejores propiedades de difusión. En el caso de los otros factores estudiados, el aumento de temperatura disminuye la adsorción, mientras que el aumento de la presión y una optimización del tamaño de poro, aumentaron la adsorción de H<sub>2</sub>.

En este trabajo, las simulaciones de Dinámica Molecular (DM) y Monte Carlo (MC) tienen como objetivo expandir el conocimiento que se tiene acerca del mecanismo bajo el cual superficies porosas como las estructuras zeolíticas del ZIF-8 adsorben hidrógeno. Para estudiar estos materiales se usaron diferentes herramientas de análisis como son isothermas de adsorción, funciones de distribución radial, mapas de densidad y energías de adsorción. En la actualidad, la herramienta de simulación molecular permite estudiar la adsorción de hidrógeno en MOFs a escala molecular y así entender las interacciones que existen entre estos compuestos, pudiendo ser esta una clave para entender el mecanismo con el cual, si se modifica la estructura del MOF, se favorezca la adsorción del gas en mayor cantidad o bajo condiciones de temperatura y presión moderadas.

## METODOLOGÍA

Las simulaciones de Dinámica Molecular (DM) y Grand Canonical Monte Carlo (GCMC) se realizaron en el programa de cómputo LAMMPS (Thompson *et al.*, 2022). La región de simulación consistió en un arreglo cristalino de 2x2x2 celdas unitarias de ZIF-8 (ChemTube3D, 2025).

Las estructuras zeolíticas de imidazolato como el ZIF-8 forman parte de las estructuras metal-orgánicas o MOFs. Estas estructuras de ZIF-8 se componen de iones zinc y ligandos imidazolato que forman poros y se caracterizan por una gran área superficial y se aplican para la separación de gases o bien como catalizadores (Vega Moreno *et al.*, 2012). La estructura del ZIF-8 es del tipo sodalita en la cual hay poros de 0.34 nm y 1.16 nm (Wang *et al.*, 2021). Los poros se forman por los anillos del ligante 2-metilimidazol coordinados tetraédricamente a átomos de Zinc. La celda unitaria del ZIF-8 tiene 276 átomos que consisten en 96 átomos de carbono, 12 átomos de zinc, 120 átomos de hidrógeno y 48 átomos de nitrógeno. La estructura cristaliza en forma cúbica con grupo espacial I43m con una constante de enrejado de 0.1699 nm (Bergaoui *et al.*, 2021; Vu *et al.*, 2023). En la Figura 1, se muestra el arreglo de 2x2x2 celdas unitarias de ZIF-8 y los tipos de átomos que forman el ZIF-8, en color rojo el Zinc, en color azul el nitrógeno, en color turquesa el carbono y en blanco los hidrógenos.

La estructura inicial del sistema se sometió a una minimización de energía, usando el algoritmo de la pendiente más pronunciada, seguido de una simulación de Dinámica Molecular en un colectivo NVT y posteriormente de un colectivo NPT, para lograr la estabilidad térmica y mecánica de la estructura ZIF-8. En la siguiente etapa se genera un reservorio hipotético de 200 moléculas de gas hidrógeno y se aplica alternadamente simulaciones de DM en los ensembles NVT y NPT y una vez estabilizadas la presión y temperatura, se usa el ensemble GCMC para estar insertando y/o eliminando de forma aleatoria moléculas de hidrógeno sobre el ZIF-8. De esta forma, se obtuvieron isothermas de adsorción del hidrógeno a 77 y 298 K.

El control de la temperatura se realizó usando un termostato de Nosé-Hoover y para mantener la presión constante se usó un barostato de Parrinello-Rahman. La integración de las ecuaciones de movimiento se realizó

con el algoritmo de velocity-Verlet con 1 fs de tamaño de paso de integración. Se aplicó un radio de corte para las interacciones de largo alcance y para corregir las interacciones electrostáticas más allá del radio de corte se aplicó el algoritmo de Particle-Particle Particle-Mesh Ewald (PPME). Para preservar la simetría del sistema se aplicaron condiciones de frontera periódicas en todas las direcciones. Todos estos algoritmos se encuentran ya implementados en el código de LAMMPS (Thompson *et al.*, 2022).

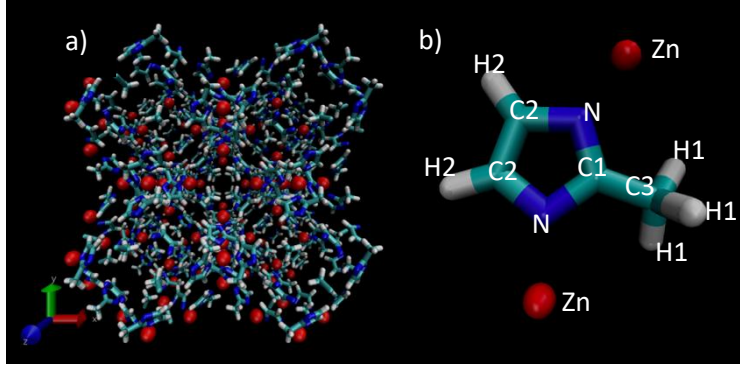


Fig. 1: a) Celda unitaria de ZIF-8 y b) tipos de átomos en el ZIF-8

Las moléculas del ZIF-8 se describieron con sitios Lennard-Jones y cargas electrostáticas en todos sus átomos, además se considerarán flexibles en sus enlaces y ángulos. El potencial intermolecular para el ZIF-8 se encuentra reportado por Zheng *et al.* (2012). Este es un modelo que predice adecuadamente el comportamiento del ZIF-8 y ha sido utilizado por otros autores (Coudert, 2017). El ZIF-8 se modela flexible debido a que se ha observado en otros trabajos (Coudert, 2017; Wu *et al.*, 2014), que el ZIF-8 puede permitir el ingreso a moléculas de mayor tamaño a sus poros debido a que la estructura muestra flexibilidad por la rotación de su enlace imidazolato causando un efecto oscilatorio que cambia de un poro más abierto a uno más cerrado (Coudert, 2017).

El hidrógeno fue modelado con un potencial intermolecular del tipo OPLS-UA (Tsimpanogiannis *et al.*, 2021), el cual reproduce adecuadamente sus propiedades termodinámicas, como son densidad y entalpías de vaporización. Se usaron reglas de mezclado de Lorentz Berthelot para las interacciones entre moléculas distintas. En general, para las moléculas analizadas, la energía total proviene de las interacciones intra e intermoleculares y se calcula a partir de los siguientes términos:

$$E_{total} = E_{bond} + E_{non-bonded} \quad (1)$$

Donde la energía de enlace incluye a los siguientes términos intramoleculares:

$$U_{bond} = U_{flex} + U_{stretch} + U_{propers} + U_{impropers} \quad (2)$$

$$U_{stretch} = \sum \frac{1}{2} k_r (r_{ij} - r_{ij}^0)^2 \quad (3)$$

$$U_{flex} = \sum \frac{1}{2} k_\theta (\theta_{ijk} - \theta_{ijk}^0)^2 \quad (4)$$

$$U_{propers} = \sum k_\phi [1 + \cos(m\phi_{ijkl} - \phi_{ijkl}^0)] \quad (5)$$

$$U_{impropers} = \sum k_\epsilon [1 + \cos(m\epsilon_{ijkl} - \epsilon_{ijkl}^0)] \quad (6)$$

Para la energía de no-enlace se usa un potencial de Lennard-Jones y uno coulombico:

$$U_{no-bonded} = \sum 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + \sum \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (7)$$

Los parámetros que aparecen en las ecuaciones 3-7 se reportan en los campos de fuerza que se indican en la bibliografía para cada especie (Tsimpanogiannis *et al.*, 2021; Zheng *et al.*, 2012).

Los resultados de las simulaciones de DM y GCMC se repitieron por duplicado para obtener los promedios de cada una de las propiedades analizadas, la etapa de equilibración de cada sistema fue de 100 ps y los promedios se obtuvieron durante otros 200 ps posteriores.

Con los resultados de las simulaciones GCMC se obtuvieron las isothermas de adsorción del hidrógeno, abarcando presiones desde 0.5 hasta 80 atm a 77 K y de 10 hasta 80 atm a 298 K. Se analizaron otras propiedades como son las funciones de distribución radial y números de coordinación. Además, se calcularon mapas de densidad y energías de adsorción, con la finalidad de analizar los sitios de adsorción preferidos por el gas y si este se adsorbe sobre la superficie o entre los poros del ZIF-8.

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La estructura del ZIF-8 fue minimizada y equilibrada en una simulación NPT a 1 atm y 298 K, se obtuvieron datos similares a los reportados en la literatura (Zheng *et al.*, 2012), con lo cual se validó que el campo de fuerza elegido para el ZIF-8 fuera adecuado. Los resultados para la celda de simulación indican que se obtiene una longitud por celda unitaria de aproximadamente 16.8 Å.

Para poder comparar el efecto de la temperatura y presión sobre la adsorción de hidrógeno en el ZIF-8 se obtuvieron las isothermas de adsorción del hidrógeno a 77 K y 298 K, usando simulaciones GCMC y comparando los resultados con datos reportados en la literatura. En la literatura se ha reportado que el ZIF-8 adsorbe aproximadamente hasta 16 mmol/g y 0.5 mmol/g de hidrógeno, respectivamente a 77 K y 298 K (Han *et al.*, 2010). En la Figura 2, se muestran estos resultados a 77 K y en la Figura 3 a 298 K. Se observa que tanto el potencial del ZIF-8 como el del hidrógeno empleados en este trabajo son adecuados para representar la adsorción sobre el material poroso pues se predice satisfactoriamente la isoterma de adsorción del hidrógeno en ambas temperaturas.

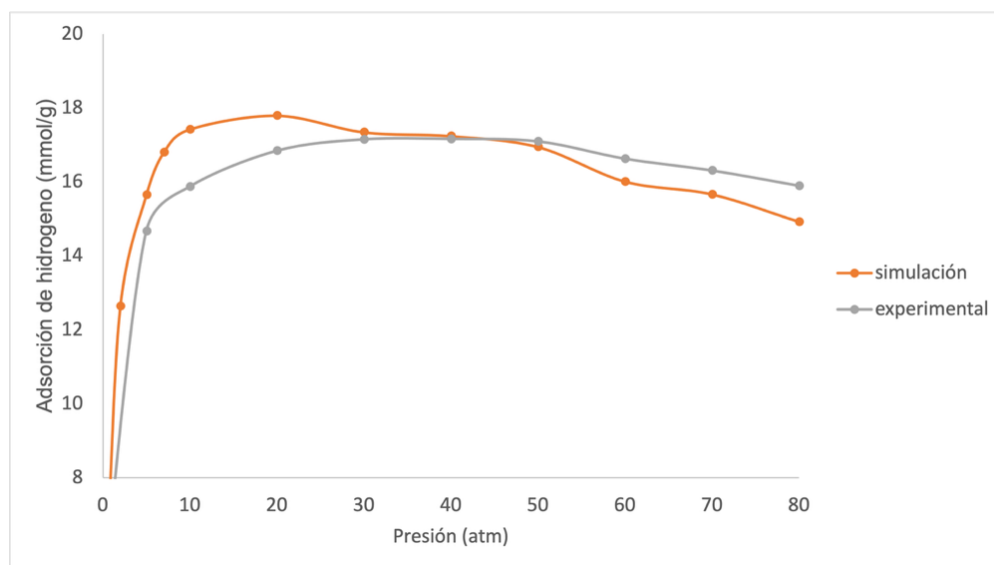


Fig. 2: Isothermas de adsorción de hidrógeno sobre ZIF-8 a 77 K

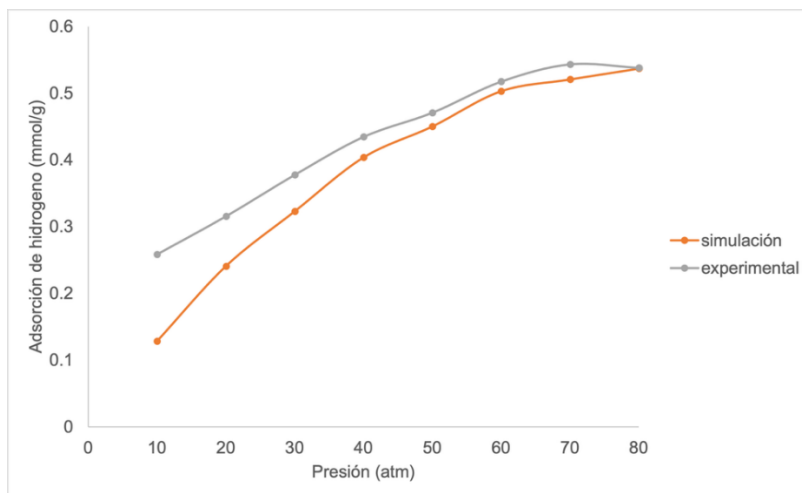
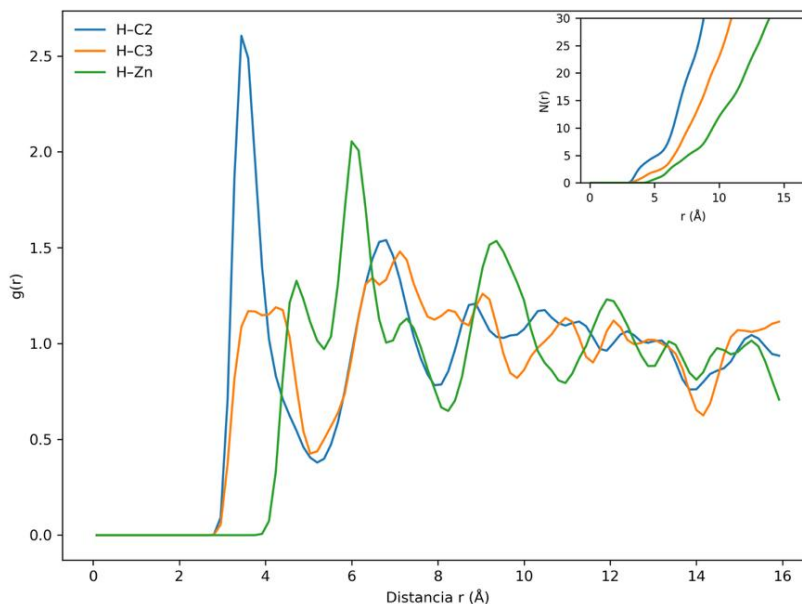


Fig. 3: Isothermas de adsorción de hidrógeno sobre ZIF-8 a 298 K

Para detectar que sitios del ZIF-8 interactúan más favorablemente con el hidrógeno se obtuvieron diferentes funciones de distribución radial y números de coordinación para algunos de los sitios del ZIF-8 que se muestran en la Figura 1. En las Figuras 4 y 5 se indican estos resultados para algunos de los sitios del ZIF-8 a 77 K y 298 K y 30 atm, respectivamente.

Fig. 4: Funciones  $g(r)$  y números de coordinación para interacciones hidrógeno y ZIF-8 a 77 K y 30 atm

Los resultados de las figuras 4 y 5 muestran que existen múltiples interacciones del hidrógeno con el ZIF-8 y que estas no se modifican con la temperatura, siendo la misma preferencia de interacción cuando se varía la presión, por esa razón solo se muestra el resultado para una presión de 30 atm. Los sitios del ZIF-8 donde preferencialmente se encuentra el hidrógeno son los carbonos C2 y C3 del mIm o ligando 2-metilimidazolato y cerca del ión Zinc. En la Figura 4, se observa que a 77 K en promedio hay 5 y 2 moléculas de hidrógeno a distancias cercanas a los 5 Å en estos carbonos, como lo indican los números de coordinación, de forma más difusa y a distancias más lejanas

se encuentra el hidrógeno cerca de los iones Zinc. En el caso de la temperatura de 298 K, la adsorción es tan baja que las funciones de distribución radial de la Figura 5 no muestran un primer mínimo bien definido que pueda integrarse para indicar un número de coordinación a diferencia de la temperatura de 77 K.

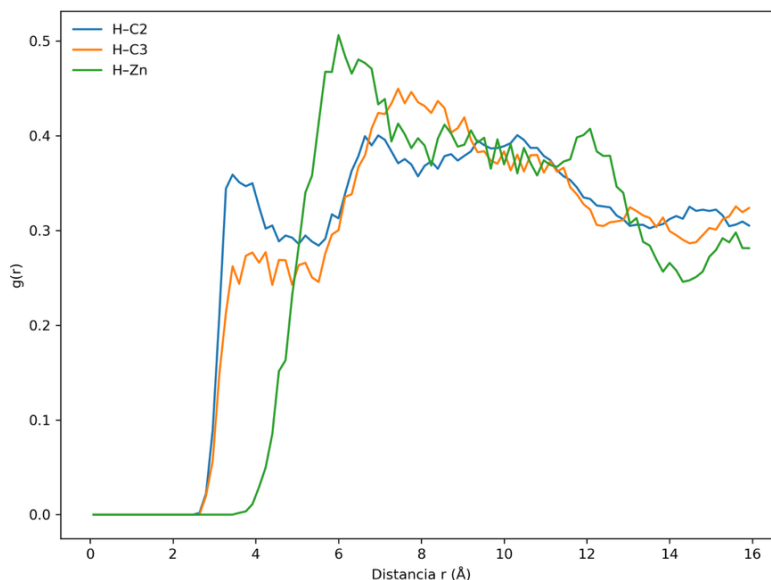


Fig. 5: Funciones  $g(r)$  para interacciones hidrógeno y ZIF-8 a 298 K y 30 atm

En la Figura 6 se muestra el mapa de densidad promedio del gas en la estructura del ZIF-8, se observa que el gas se introduce en los poros de la estructura de forma homogénea, lo que da como resultado una gran captación de gas en el ZIF-8. En la Figura 7 se indican solo algunos valores de la energía de interacción entre gas y adsorbente, para evitar que quede saturada la figura. La energía de adsorción en todos los puntos muestra valores negativos alrededor del orden de  $-459$  kcal/mol, lo cual representa una adsorción espontánea y favorable.

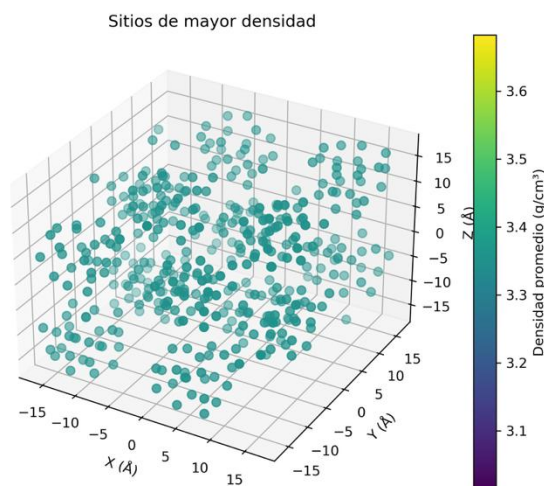


Fig. 6: Mapas de densidad del hidrógeno a 77 K y 30 atm.

## Sitios de adsorción con energía promedio (kcal/mol)

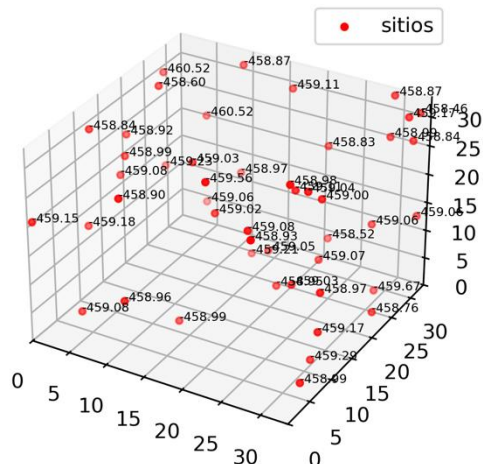


Fig. 7: Mapas de energía de interacción entre el hidrógeno y el ZIF-8 a 77 K y 30 atm.

## CONCLUSIONES

En este trabajo, con los campos de fuerza empleados para el hidrógeno y ZIF-8, así como la metodología que combina alternativamente simulaciones de DM en los colectivos NPT y GCMC para estabilizar temperatura y presión se logró analizar a un detalle a nivel molecular la adsorción del gas hidrógeno sobre estructuras de ZIF-8. Se observó que los resultados concuerdan satisfactoriamente con los reportados en la literatura para las isotermas de adsorción y que los principales sitios de adsorción se encuentran en el ligando mIm del ZIF-8. La adsorción ocurre no solo en la superficie del ZIF-8, sino que el hidrógeno se distribuye en los poros del adsorbente de manera uniforme y que las energías de interacción negativas indican que la adsorción es altamente favorable y exotérmica.

## AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen al Tecnológico Nacional de México y a la SECIHTI por el apoyo otorgado para la realización de la presente investigación.

## REFERENCIAS

- Ahmed, A., Liu, Y., Purewal, J., Tran, L., Wong-Foy, A. G., Veenstra, M., et al. (2017). Balancing gravimetric and volumetric hydrogen density in MOFs. *Energy and Environmental Science*, 10(11), 2459-2471. <https://doi.org/10.1039/c7ee02477k>
- Bakhshi, F. & Farhadian, N. (2019). Improvement of hydrogen storage capacity on the palladium-decorated N-doped graphene sheets as a novel adsorbent: A hybrid MD-GCMC simulation study. *International Journal of Hydrogen Energy*, 44(26), 13655-13665. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.04.005>
- Bergaoui, M., Khalfaoui, M., Awadallah-F, A. & Al-Muhtaseb, S. (2021). A review of the features and applications of ZIF-8 and its derivatives for separating CO<sub>2</sub> and isomers of C<sub>3</sub>- and C<sub>4</sub>- hydrocarbons. En *Journal of Natural Gas Science and Engineering* (Vol. 96). Elsevier B.V. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2021.104289>



- ChemTube3D. (2025). ZIF Metal Organic Framework. <https://www.chemtube3d.com/mof-zif8/>
- Coudert, F.X. (2017). Molecular Mechanism of Swing Effect in Zeolitic Imidazolate Framework ZIF-8: Continuous Deformation upon Adsorption. *ChemPhysChem*, 18 (19), 2732-2738. <https://doi.org/10.1002/cphc.201700463>
- Han, S.S., Choi, S.H. & Goddard, W. A. (2010). Zeolitic imidazolate frameworks as H<sub>2</sub> adsorbents: Ab initio based grand canonical monte carlo simulation. *Journal of Physical Chemistry C*, 114(27), 12039-12047. <https://doi.org/10.1021/jp103785u>
- Karki, S. & Chakraborty, S. N. (2021). A Monte Carlo simulation study of hydrogen adsorption in slit-shaped pores. *Microporous and Mesoporous Materials*, 317. <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2021.110970>
- Karki, S. & Chakraborty, S. N. (2024). Hydrogen adsorption in Si-LTA and LTA-4A zeolites: A Gibbs Ensemble Monte Carlo simulation study. *Materials Chemistry and Physics*, 313. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2023.128722>
- Muther, T. & Kalantari Dahaghi, A. (2024). Calculation of hydrogen adsorption isotherms and Henry coefficients with mixed CO<sub>2</sub> and CH<sub>4</sub> gases on hydroxylated quartz surface: Implications to hydrogen geo-storage. *Journal of Energy Storage*, 87. <https://doi.org/10.1016/j.est.2024.111425>
- Otero-Lema, M., Lois-Cuns, R., Martínez-Crespo, P., Rivera-Pousa, A., Montes-Campos, H., Méndez-Morales, T., et al. (2024). On the molecular mechanisms of H<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> uptake in confined ionic liquids: A computational study. *Journal of Molecular Liquids*, 405. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2024.124909>
- Rivera-Pousa, A., Lois-Cuns, R., Otero-Lema, M., Montes-Campos, H., Mendez-Morales, T. & Varela, L.M. (2023). Size matters: A computational study of hydrogen absorption in ionic liquids. *Journal of chemical information and modeling*, 64, 164-177. <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.3c01688>
- Shang, Z., Yang, Y., Zhang, L., Sun, H., Zhong, J., Zhang, K., et al. (2024). Hydrogen adsorption and diffusion behavior in kaolinite slit for underground hydrogen storage: A hybrid GCMC-MD simulation study. *Chemical Engineering Journal*, 487. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2024.150517>
- Thompson, A.P., Aktulga, H.M., Berger, R., Bolintineanu, D.S., Brown, W.M., Crozier, P.S., et al. (2022). LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. *Computer Physics Communications*, 271. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>
- Tsimpanogiannis, I.N., Maity, S., Celebi, A.T. & Moulton, O.A. (2021). Engineering Model for Predicting the Intradiffusion Coefficients of Hydrogen and Oxygen in Vapor, Liquid, and Supercritical Water based on Molecular Dynamics Simulations. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 66 (8), 3226-3244. <https://doi.org/10.1021/acs.jced.1c00300>
- Vega Moreno, J., Reguera, E., Díaz Góngora, J.I. & Lemus Santana, A.A. (2012). Tecnología de membrana con enrejados tipo zeolita. | Artículos | *Mundo Nano*, 5(9), 77-80. [www.mundonano.unam.mx](http://www.mundonano.unam.mx)
- Vu, K.B., Hoang, T.K.A., Tran, V.A., Phung, T.K. & Truong, N.L.P. (2023). Elastic analysis of ZIF-8 and ZIF-8 filled with hydrogen molecules by density functional theory. *Materials Today Communications*, 35. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.105970>
- Wang, Z., Zhang, Y., Chen, S., Fu, Y., Li, X. & Pei, J. (2021). Molecular simulation of adsorption and diffusion of CH<sub>4</sub> and H<sub>2</sub>O in flexible metal-organic framework ZIF-8. *Fuel*, 286. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.119342>
- Wenfeng, H., Xiaoqiang, T., Chuanxiao, C., Shiquan, Z., Tian, Q., Xueling, Z., et al. (2024). Molecular dynamics simulation of hydrogen adsorption and diffusion characteristics in graphene pores. *International Journal of Hydrogen Energy*, 69, 883-894. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2024.05.040>

- Wu, X., Huang, J., Cai, W. & Jaroniec, M. (2014). Force field for ZIF-8 flexible frameworks: Atomistic simulation of adsorption, diffusion of pure gases as CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> and N<sub>2</sub>. *RSC Advances*, 4 (32), 16503-16511. <https://doi.org/10.1039/c4ra00664j>
- Yang, C. & Jin, Z. (2025). Hydrogen storage state in clay mineral nanopores: A molecular dynamics simulation study. *International Journal of Hydrogen Energy*, 105, 1491-1502. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2025.01.341>
- Zheng, B., Sant, M., Demontis, P. & Suffritti, G. B. (2012). Force field for molecular dynamics computations in flexible ZIF-8 framework. *Journal of Physical Chemistry C*, 116(1), 933-938. <https://doi.org/10.1021/jp209463a>