

## تأثیر اندازه و ساختار حفره نانوزئولیت در جذب و نگهداری هیدروژن

محمود رحمتی\* و حمید مدرس

دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مهندسی شیمی

تاریخ ثبت اولیه: ۱۳۸۷/۴/۲۹، تاریخ دریافت نسخه اصلاح شده: ۱۳۸۷/۷/۷، تاریخ پذیرش قطعی: ۱۳۸۸/۳/۵

**چکیده** نانوزئولیت‌ها، پتانسیل خوبی برای ذخیره‌سازی هیدروژن دارند. بنابراین میزان جذب هیدروژن در نانوزئولیت با ساختارهای RWY، KFI و SAS با اندازه حفره و تعداد یون متفاوت در محدوده دمایی ۷۷ تا ۹۵ درجه کلوین و محدوده فشار ۰ تا ۱۰ بار، توسط روش شبیه‌سازی مونت کارلو (GCMC) بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که تأثیر سطح و فضای داخلی نانوزئولیت‌ها بر مقدار جذب هیدروژن به خوبی تأثیر دما و فشار است. فاکتور اصلی در میزان جذب، فضای خالی است که نانوزئولیت در اختیار هیدروژن قرار می‌دهد. به طوری که بیشترین مقدار جذب هیدروژن نسبت به وزن نانوزئولیت، در نانوزئولیت با ساختار RWY وجود دارد.

**کلمات کلیدی** هیدروژن، نانوزئولیت، جذب، شبیه‌سازی مونت کارلو.

## The Effect of Pore Structure on the Adsorption and Storage of Hydrogen in Nanozeolite

M. Rahmati\* and H. Modarress

Department of Chemical Engineering, Amirkabir University of Technology

**Abstract** Zeolites have been considered as potential sorbets for hydrogen storage. So, the adsorption of molecular hydrogen on model zeolites RWY, KFI, and SAS which encompass a range of different pore structures and compositions, has been simulated employing Grand Canonical Monte Carlo (GCMC) procedure for a temperature range of 77-95K and a pressure range of 0-10 bars. The results show that the amount of adsorbed hydrogen can be affected mainly by the available volume and surface area at the same temperature and pressure. The zeolite with larger available volume shows larger adsorption capacity and the highest storage capacity were obtained for zeolite RWY.

**Keywords** Hydrogen, Nano Zeolite, Adsorption, Monte Carlo Simulation.

\*عهده‌دار مکاتبات

نشانی: دانشگاه صنعتی امیرکبیر، دانشکده مهندسی شیمی.

تلفن: ۰۲۶۱\_۶۴۵۴۳۱۷۶، دورنگار: ۰۲۶۱\_۶۶۴۰۵۸۴۷، پیام‌نگار: Mahmoud.rahmati@gmail.com

## ۱\_ مقدمه

انرژی جذب اشاره نمود. بنابراین تحقیق و بررسی تأثیر هر یک از این پارامترها ایده مناسبی در جهت ارتقاء شناخت و کاربرد این مواد به عنوان غربال مولکولی است.

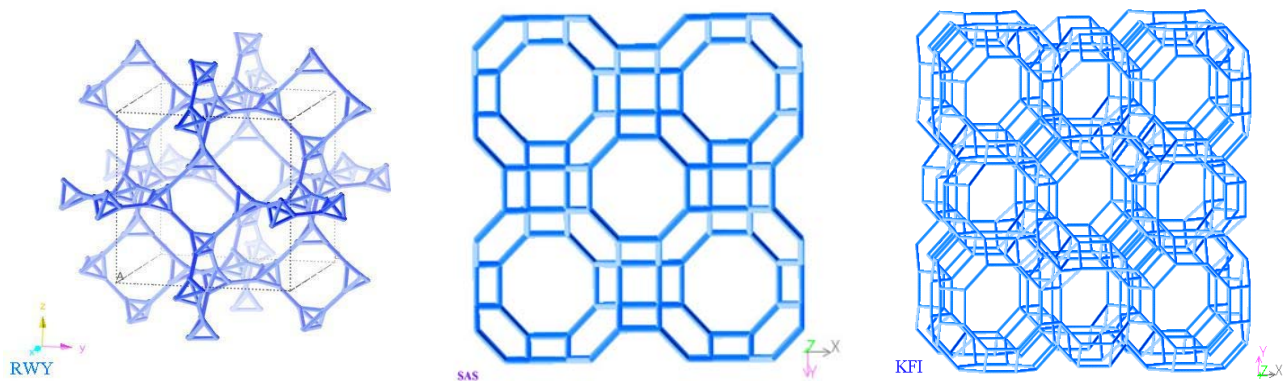
حمل و نگهداری هیدروژن یکی از چالش‌های این انرژی پاک و تجدیدپذیر است. لذا بیشتر تحقیقات اخیر درصدد رفع این مشکل بوده است. یکی از پارامترهای مؤثر در میزان جذب و نگهداری هیدروژن، فضایی است که جامد متخلخل نانوحفره‌ای در اختیار هیدروژن قرار می‌دهد [۴].

نانوزئولیت‌ها به دلیل ساختار منظم، اندازه بسیار ریز، تنوع ساختاری، ظرفیت ذخیره سازی بالا، قیمت ارزان و ... یکی از مواد امیدبخش برای نگهداری و ذخیره سازی هیدروژن به حساب می‌آیند که به تازگی مورد توجه بسیاری قرار گرفته است [۳].

در این مقاله، تأثیر اندازه و ساختار حفره نانوزئولیت بر مقدار جذب هیدروژن در نانوزئولیت با ساختارهای SAS، RWY، KFI (شکل ۱) در محدوده دمایی ۷۷ تا ۹۵ درجه کلوین و در محدوده فشار ۰ تا ۱۰ بار با روش شبیه سازی مولکولی مونت کارلو<sup>۱</sup> (GCMC) بررسی شده است. در ادامه در مورد جزئیات شبیه سازی مطالب بیشتری ارائه می‌شود.

با کاهش منابع سوخت‌های فسیلی، استفاده از هیدروژن به منزله یک منبع انرژی دوستدار محیط زیست از گذشته تا به حال مورد بحث و بررسی بوده است. استفاده از هیدروژن به صورت سوخت در موتور اتومبیل‌ها و توربین هواپیماها، یکی از کاربردهای مهم آن به شمار می‌آید. وزن کم، گرمای احتراق بسیار بالا و آلودگی محیطی بسیار پایین از علل توجه بیش از حد به هیدروژن است. مشکل حمل و نگهداری، یکی از مهم‌ترین چالش‌ها در این زمینه به حساب می‌آید [۱].

از روش‌های مختلف برای ذخیره سازی هیدروژن استفاده می‌شود اما ذخیره سازی توسط فرآیند جذب سطحی بر روی نانوساختارها به طور ذاتی بدون خطر و همچنین برای صنایع جالب است [۳-۱]. جامدات متخلخل نانوحفره‌ای مانند نانوزئولیت، نانولوله کربنی، نانوفیبر گرافیت، کربن فعال و شبکه آلی فلزی از بهترین مواد برای جذب سطحی و ذخیره گازه‌ها به حساب می‌آیند [۴-۷]. چندین راه حل برای افزایش میزان جذب وجود دارد که می‌توان به ۱. بهینه کردن اندازه حفره، ۲. تهیه ساختارهایی با فلزات سبک زیاد و ۳. بهینه سازی



شکل ۱. طرح نانو زئولیت‌ها با ساختارهای SAS, KFI, RWY.

فراوانی دارد. برای بیان برهمکنش بین مولکول‌های هیدروژن-هیدروژن و هیدروژن با بدنه نانوزئولیت از تابع پتانسیل لنارد-جنز<sup>۳</sup> به صورت زیر استفاده می‌شود [۱۴-۲۰].

$$U_{ij} = 4\varepsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (۱)$$

$r_{ij}$  فاصله بین دو مولکول  $i$  و  $j$ ؛ پارامترهای  $\varepsilon$  و  $\sigma$  پارامترهای لنارد جنز می‌باشند که در جدول ۱ ارائه شده است. برای محاسبه  $\varepsilon$  و  $\sigma$  از رابطه زیر استفاده می‌کنیم:

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \quad \varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j} \quad (۲)$$

شعاعی که در آن برهمکنش انجام می‌شود، ۱۳ آنگستروم است. در شبیه‌سازی مولکولی باید تأثیرات کوانتومی را در نظر گرفت. برای این کار از تابع تصحیح فیمن-هییس استفاده می‌شود [۱۲، ۱۳]. این معادله همانند معادله لنارد-جنز است؛ با این تفاوت که فقط دو ترم به آن اضافه شده است.

$$U_{ij} = 4\varepsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 + \frac{\hbar^2}{24m_r k_B T} \left( \frac{132}{r_{ij}^2} \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \frac{30}{r_{ij}^2} \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right) \right]$$

جدول ۱. پارامترهای L.J برای برهمکنش هیدروژن با هیدروژن و هیدروژن با نانوزئولیت.

پارامتر	O-z	Si-z	H
$\sigma (A^\circ)$	۳.۳۰	۴.۲	۲.۷۸۲۰
$\varepsilon \left( \frac{k_B}{K} \right)$	۸۲.۹۸۴۸	۲۳.۶۱۶۴	۳۸.۷

نتایج حاصل از شبیه‌سازی در انتخاب نوع ساختار، طراحی و ساخت نانوزئولیت و شرایط دمایی و فشاری مناسب برای ذخیره‌سازی هیدروژن بسیار کارآمد و مفید است و کاهش زمان و هزینه‌ها را به همراه خواهد داشت.

## ۲- نحوه انجام آزمایش

### ۱-۲- جزئیات شبیه‌سازی

معمولاً از روش شبیه‌سازی مونت کارلو با دما، حجم و پتانسیل شیمیایی ثابت (GCMC) برای جذب دمای ثابت استفاده می‌شود [۷-۱۱]. میزان ماده جذب‌شده در نانوزئولیت تابعی از دما و فیوگاسیته گاز است که در تمام شبیه‌سازی، ثابت در نظر گرفته می‌شود. مبنای شبیه‌سازی بر سه حرکت ایجاد، حذف و انتقال یک مولکول هیدروژن با احتمال برابر قرار دارد. هر یک از حرکات مولکول‌های هیدروژن با یک بردار تصادفی ایجاد می‌شود. تمام حرکات‌های مونت کارلو با قانون متروپولیس<sup>۲</sup> پذیرفته یا رد می‌شوند. برای پذیرفتن یا رد این حرکات‌ها، از جهت‌گیری انرژی به سوی مقدار کمینه استفاده می‌شود [۱۰-۱۳]. تعداد مراحل مونت کارلو برای هر شبیه‌سازی ۱۰۰ هزار مرحله در نظر گرفته‌اند که معمولاً ۱۵ درصد آن برای شرایط تعادل است. در هر مرحله، به تعداد مولکول‌های هیدروژن جذب شده (حداقل ۲۰) حرکت تصادفی ایجاد می‌شود. تعداد مراحل تکرار زیاد به دلیل نزدیک شدن محاسبات شبیه‌سازی با نتایج واقعی است.

### ۲-۲- مدل

در بحث شبیه‌سازی مولکولی انتخاب مدل اهمیت

اهمیت ویژه‌ای دارد، تصحیح فیمن-هییس مفید و ضروری است (در فواصل کمتر از ۰/۰۵ نانومتر اختلاف دو انرژی محاسبه شده به میلیون می‌رسد).

در تمام شبیه سازی، ساختار نانوذولیت ثابت در نظر گرفته می‌شود. از  $2 \times 2 \times 2$  سلول واحد از هر ساختار برای ایجاد جعبه شبیه سازی استفاده می‌شود. اطلاعات مربوط به اندازه حفره و ترکیب اجزای نانوذولیت در جدول ۲ آمده است ( $a=b=c$  اندازه حفره در مختصات XYZ) [۲۱]. از آنجایی که شبیه سازی مونت کارلو، فیوگاسیته<sup>۴</sup> داخلی ساختار نانوذولیت که با گاز هیدروژن احاطه شده را بررسی می‌کند، دانستن رابطه فیوگاسیته با فشار برای گاز هیدروژن الزامی است. به همین دلیل از معادله حالت SRK برای به دست آوردن رابطه فیوگاسیته با فشار استفاده شده است [۲۲].

### ۳- نتایج و بحث

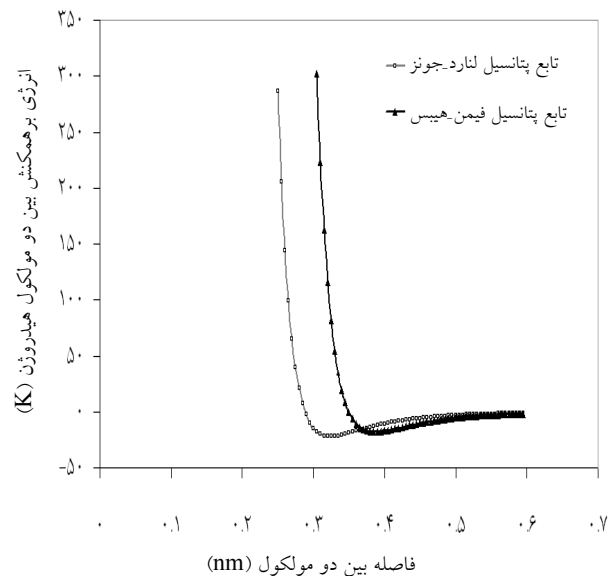
مقدار جذب دمای ثابت مولکول‌های هیدروژن در

جدول ۲. اندازه حفره و ترکیب اجزای نانوذولیت [۲۱].

ساختار نانوذولیت	ترکیب اجزای یک سلول واحد	$D_i(\text{nm})$
RWY	$\text{Si}_{60}\text{O}_{114}$	۱/۴۳۴
KFI	$\text{Si}_{96}\text{O}_{204}$	۱/۰۶۱
SAS	$\text{Si}_{48}\text{O}_{105}$	۰/۸۹۳

$$m_r^{-1} = m_i^{-1} + m_j^{-1} \quad \text{رابطه (۳)}$$

$k_B$  ثابت بولتزمن<sup>۴</sup>،  $T$  دما،  $m_{i,j}$  جرم مولکولی،  $\hbar$  ثابت پلانک<sup>۵</sup> است. برای درک بهتر تفاوت و کاربرد این دو تابع پتانسیل، در شکل ۲ نمودار انرژی برهمکنش بین دو مولکول هیدروژن بر حسب فاصله بین آنها برای تابع لنارد-جونز و تابع تصحیح فیمن-هییس در دمای ۷۷ درجه کلونین محاسبه شده است. زمانی که فاصله بین دو مولکول از ۰/۶ نانومتر بیشتر باشد مقادیر انرژی محاسبه شده از هر دو تابع یکسان است. چنانچه فاصله دو مولکول از هم، کمتر از ۰/۴ نانومتر شود اختلافات بسیار زیادی در مقادیر انرژی محاسبه شده از دو تابع حاصل می‌شود. تابع تصحیح فیمن-هییس برای فواصل بسیار کم و فواصل زیاد کاملاً جوابگو است. باتوجه به اینکه محاسبه انرژی برهمکنش در شبیه سازی مونت کارلو



شکل ۲. تأثیر فاصله بین دو مولکول هیدروژن در محاسبه مقدار انرژی برهمکنش از دو تابع پتانسیل.

4. Boltzmann Constant.  
5. Planck Constant.  
6. Fugacity.

باشد. نانوذرات مورد استفاده در شبیه‌سازی یک ساختار ایده آل و فقط متشکل از اتم‌های سیلیسیم است؛ ولی نانوذرات آزمایشگاه خالص نیست و علاوه بر سیلیسیم و آلومینیوم، کاتیون‌های دیگری نیز دارد که می‌تواند مهم‌ترین علت اختلاف موجود بین این نتایج باشد. در حال حاضر ساختارهایی نظیر RHO و TSC (ساختار RHO دارای ترکیب اجزاء  $\text{Si}_{384}\text{O}_{864}$  و اندازه حفره  $a=b=c=1/0.37$  نانومتر و ساختار TSC دارای ترکیب اجزاء  $\text{Si}_{384}\text{O}_{816}$  و اندازه حفره  $a=b=c=1/6.39$  نانومتر است) بیش از سه برابر ساختارهای مورد بررسی توانایی جذب دارند ولی به دلیل وزن بالایی که دارند در شرایط یکسان درصد وزنی جذب کمتری خواهند داشت [۲۳]. بنابر این در نتایج ارائه شده، فاکتور وزن نانوذرات در مقدار جذب هیدروژن در نظر گرفته شده است.

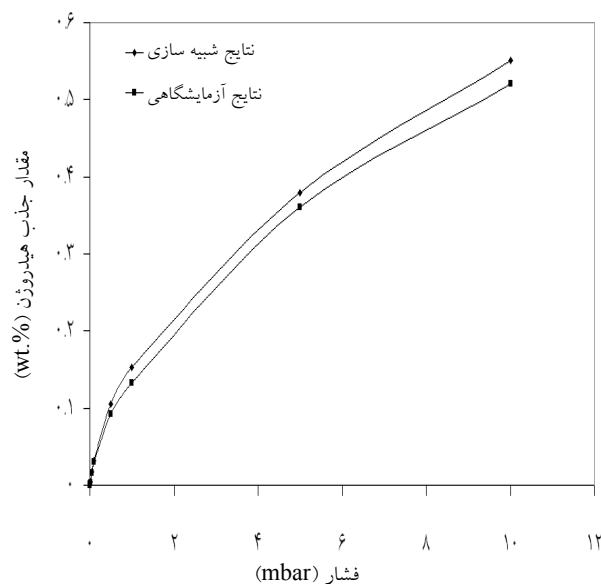
در شکل ۴، درصد وزنی هیدروژن جذب شده در نانوذرات تحت تاثیر فشار در ساختارهای SAS, KFI, RWY نشان داده شده است. نتایج به دست آمده، افزایش جذب را با افزایش فشار نشان می‌دهند. اما این افزایش جذب تحت تاثیر اندازه و نوع ساختار نانوذرات نیز می‌باشد، به طوری که برای ساختار RWY، افزایش فشار تاثیر بیشتری بر مقدار جذب هیدروژن نسبت به ساختارهای دیگر از خود نشان می‌دهد. تاثیر افزایش فشار بر افزایش جذب به صورت  $\text{RWY} > \text{KFI} > \text{SAS}$  است. در دمای ۷۷ درجه کلوین و فشار ۱۰ بار، بیشترین کمترین مقدار درصد جذب را به ترتیب در ساختارهای RWY و SAS خواهیم داشت.

تأثیر دما بر مقدار جذب در محدوده دمایی ۷۷ تا ۹۵ درجه کلوین مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج به دست آمده، کاهش مقدار جذب هیدروژن را با افزایش دما نشان می‌دهند به طوری که بهترین دمای جذب، دمای ۷۷ درجه کلوین می‌باشد.

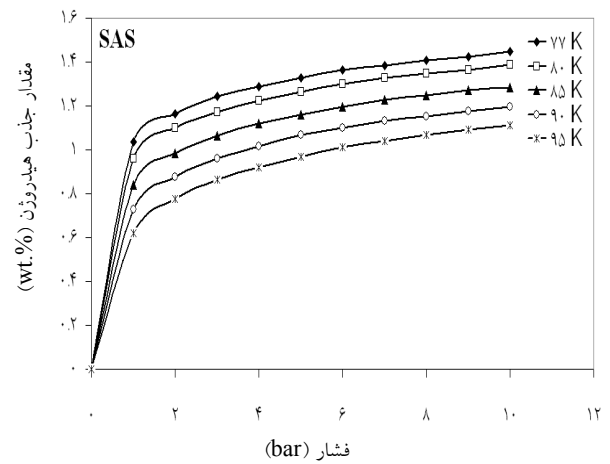
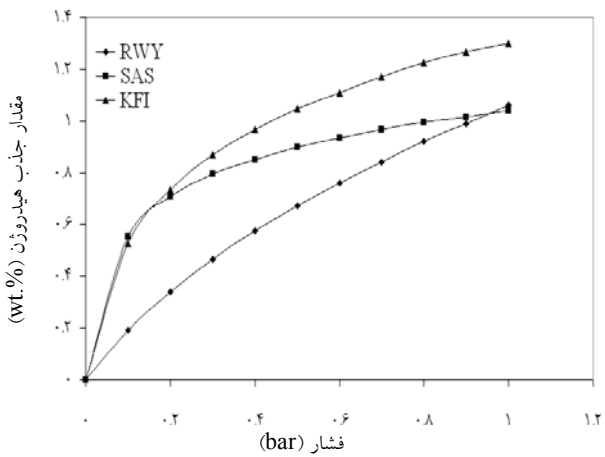
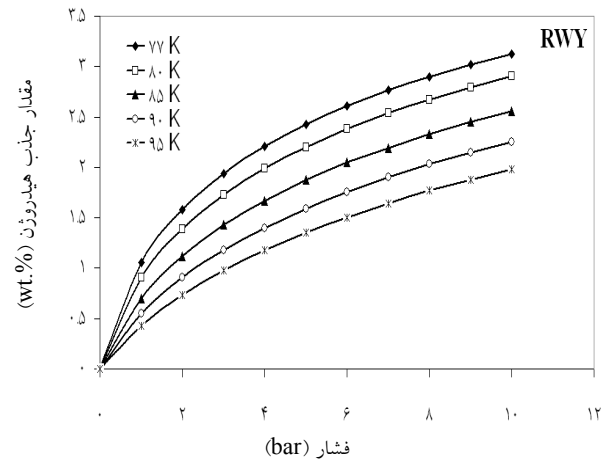
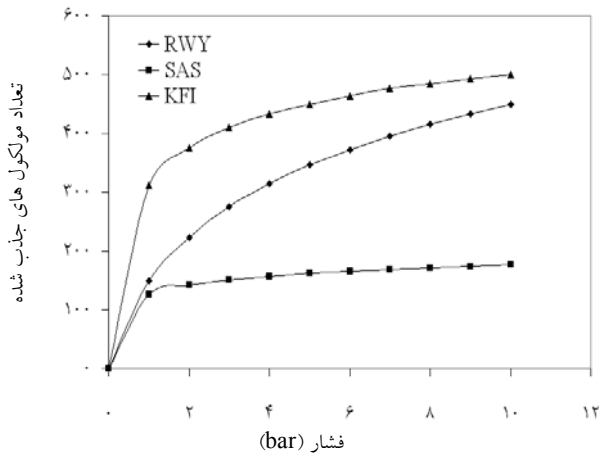
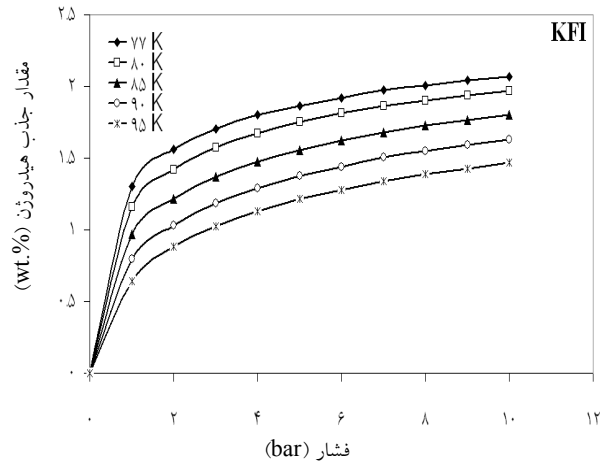
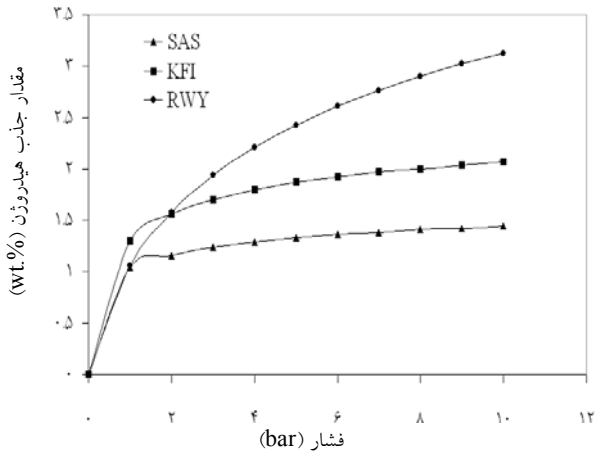
تعداد مولکول هیدروژن جذب شده و همچنین درصد جذب هیدروژن تحت تاثیر فشار در ساختارهای متفاوت در شکل ۵

نانوذرات های KFI, SAS و RWY با روش شبیه‌سازی مونت کارلو در دماهای پایین بررسی شده است. در این مطالعه تأثیر اندازه حفره نانوذرات و ترکیب اجزای آن در مقدار جذب هیدروژن نشان داده شد. در بحث حمل و نقل، استفاده از هیدروژن به جای سوخت‌های فسیلی اهمیت فراوانی دارد. بنابراین ساختارهایی برای ذخیره‌سازی مناسب هستند که بیشترین مقدار جذب و کمترین وزن را داشته باشند.

شکل ۳ جذب دمای ثابت هیدروژن در نانوذرات با ساختار RHO در دمای ۸۰ درجه کلوین و فشارهای مختلف را نشان می‌دهد. از نتایج آزمایشگاهی موجود برای مقایسه و بررسی صحت نتایج شبیه‌سازی استفاده شده است [۱۲]. نتایج حاصل از شبیه‌سازی با روش مونت کارلو (GCMC)، مطابقت نسبتاً خوبی با نتایج آزمایشگاهی موجود دارد. اختلاف موجود بین نتایج شبیه‌سازی و آزمایشگاهی می‌تواند دلایل زیادی داشته



شکل ۳. درصد وزنی هیدروژن جذب شده در نانوذرات RHO در دمای ۸۰ درجه کلوین.



شکل ۵. درصد وزنی و تعداد مولکول‌های هیدروژن جذب شده در هشت سلول واحد نانوذرات RWY، KFI، SAS در دمای ۷۷ درجه کلوین تحت تأثیر فشارهای مختلف.

شکل ۴. درصد وزنی هیدروژن جذب شده در نانوذرات RWY، KFI، SAS تحت تأثیر دما و فشارهای مختلف.

به دلیل قوی تر بودن نیروی جاذبه دوقطبی اتم‌های اکسیژن نسبت به اتم‌های سیلیسیم است. افزایش اندازه حفره، سبب افزایش مقدار جذب می شود. به طور کلی مقدار جذب، تحت تأثیر فضای خالی نانوزئولیت است که در اختیار مولکول‌های هیدروژن قرار می گیرد. نتایج تأثیر توام ساختار و اندازه حفره نانوزئولیت را در مقدار جذب هیدروژن نشان می دهد. افزایش دما، کاهش مقدار جذب هیدروژن را به همراه دارد و در دمای ۷۷ درجه کلون بیشترین مقدار جذب وجود دارد.

### مراجع

1. Ahluwalia, R.K., Hua, T.Q. and Peng, J.K., "Fuel Cycle Efficiencies of Different Automotive On-Board Hydrogen Storage Options", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 32 Issue 15 (2007) 3592-3602.
2. Ramachandran, S., Ha, J.H. and Kim, D.K., "Hydrogen Storage Characteristics of Metal Oxide Doped Al-MCM-41 Mesoporous Materials", *Catalysis Communications*, Vol. 8 Issue 12 (2007) 1934-1938.
3. Li, Y. and Yang, R.T., "Hydrogen Storage In Low Silica Type X Zeolites", *Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 110 Issue 34 (2006) 17175-17180.
4. Georgakis, M., Stavropoulos, G. and Sakellaropoulos, G.P., "Predictions for Molecular Hydrogen Adsorption in Microporous Carbons via Molecular Dynamics Simulations and a Suggestion for a Hydrogen Storage Medium", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 32 Issue 15 (2007) 3465-3470.
5. Str'Obel, R., Garche, J., Moseley, P.T., Orissen, L.J. and Wolf, G., "Hydrogen Storage By Carbon Materials", *Journal of Power Sources*, Vol. 159 Issue 2 (2006) 781-801.
6. Yang, Q. and Zhong, C., "Molecular Simulation of Adsorption and Diffusion of Hydrogen in Metal-Organic Frameworks", *Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 109 Issue 24 (2005) 11862-11864.
7. Hassan, N.H.A., Mohamed, A.R. and Zein, S.H.S. "Study of Hydrogen Storage by Carbonaceous Material at Room Temperature", *Diamond and Related Materials*, Vol. 16 Issue 8 (2007) 1517-1523.
8. Yang, F.H., Lachawiec, A.J. and Yang, R.T., "Adsorption of Spillover Hydrogen Atoms on Single Wall Carbon Nanotubes", *Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 110 Issue 12 (2006) 6236-6244.
9. Thomas, K.M., "Hydrogen Adsorption and Storage on Porous Materials", *Catalysis Today*, Vol. 120 Issues 3-4 (2007) 389-398.

نشان داده شده است. شکل ۵ تعداد مولکول هیدروژن جذب شده در ۸ سلول واحد از ساختارهای SAS,KFI,RWY را نشان می دهد. بیشترین مقدار جذب در ساختار KFI می باشد ولی به دلیل وزن بالا، درصد جذب کمتری نسبت به ساختار RWY خواهد داشت. اندازه حفره نانوزئولیت KFI کمتر از اندازه حفره نانوزئولیت RWY است بنابراین درصد جذب کمتری دارد.

نتایج نشان می دهند که در فشار کمتر از ۰/۲ بار، مقدار جذب هیدروژن برای دو ساختار SAS و KFI یکسان است و از مقدار جذب هیدروژن برای ساختار RWY بیشتر است (شکل ۵).

با افزایش فشار، این روند تغییر می کند به طوری که برای فشارهای بیشتر از ۱ بار، مقدار جذب هیدروژن در ساختار RWY بیشتر از ساختار SAS است و با افزایش فشار بیشتر از ۲ بار، بیشترین جذب هیدروژن در ساختار RWY خواهد بود.

### ۴- نتیجه گیری

جذب دمای ثابت مولکول‌های هیدروژن در نانوزئولیت با ساختارهای متفاوت توسط روش شبیه سازی مونت کارلو مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج به دست آمده، افزایش مقدار جذب هیدروژن را با افزایش فشار نشان می دهد. روند این افزایش به نوع ساختار و اندازه حفره نانوزئولیت بستگی دارد. به طوری که در ساختار RWY این افزایش تأثیر بیشتری نسبت به سایر ساختارها دارد. مقدار جذب مولکول‌های هیدروژن به اندازه حفره نانوزئولیت و ترکیب اجزا بستگی دارد. نتایج نشان دهنده افزایش مقدار جذب با افزایش تعداد مولکول اکسیژن موجود در ساختار نانوزئولیت است و این

- Today*, Vol. 120 Issues 3-4 (2007) 374-382.
17. Hu, N., Sun, X. and Hsu, A. "Monte Carlo Simulations of Hydrogen Adsorption in Alkali-Doped Single-Walled Carbon Nanotubes", *Journal of Chemical Physics*, Vol. 123 Issue 4 (2005) 044708.
  18. Van Den Berge, A.W.C., Bromley, S.T., Wojdel, J.C. and Jansen, J.C., "Adsorption Isotherms of H<sub>2</sub> in Microporous Materials with the SOD Structure: A Grand Canonical Monte Carlo Study", *Microporous and Mesoporous Materials*, Vol. 87 Issue 3 (2006) 235-242.
  19. Shao, X., Wang, W., Xue, R. and Shen, Z. "Adsorption of Methane and Hydrogen on Mesocarbon Microbeads by Experiment and Molecular Simulation", *Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 108 Issue 9 (2004) 2970-2978.
  20. Bromley, S.T. and Jansen, J.C., "Thermodynamic Limits on Hydrogen Storage in Sodalite Framework Materials: A Molecular Mechanics Investigation", *Microporous and Mesoporous Materials*, Vol. 78 Issue 1 (2005) 63-71.
  21. [Http://www.iza-structure.org](http://www.iza-structure.org).
  22. Zhou, L. and Zhou, Y., "Determination of Compressibility Factor and Fugacity Coefficient of Hydrogen in Studies of Adsorptive Storage", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 26 Issue 5 (2001) 597-601.
  23. Jhung, S.H., Yoon, J.W., Lee, J.S. and Chang, J.S., "Low-Temperature Adsorption/Storage of Hydrogen on FAU, MFI, and MOR Zeolites with Various Si/Al Ratios: Effect of Electrostatic Fields and Pore Structures", *Chemistry - A European Journal*, Vol. 13 Issue 22 (2007) 6502-6507.
  10. Macdonald, B.D., Rowe, A.M., "Experimental and Numerical Analysis of Dynamic Metal Hydride Hydrogen Storage Systems", *Journal of Power Sources*, Vol. 174 Issue 1 (2007) 282-293.
  11. Cheng, J., Zhang, L., Ding, R., Ding, Z., Wang, X. and Wang, Z., "Grand Canonical Monte Carlo Simulation of Hydrogen Physisorption in Single-Walled Boron Nitride Nanotubes", *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol. 32 Issue 15 (2007) 3402-3405.
  12. Kumar, A.V.A., Jobic, H. and Bhatia, S.K., "Quantum Effects on Adsorption and Diffusion of Hydrogen and Deuterium in Microporous Materials", *Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 110 Issue 33 (2006) 16666-16671.
  13. Tanaka, H., Kanoh, H., Yudasaka, M. and Iijima, S., "Quantum Effects on Hydrogen Isotope Adsorption on Single-Wall Carbon Nanohorns", *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 127 Issue 20 (2005) 7511-7516.
  14. Mitchell, M.C., Gallo, M. and Nenoff, T. M., "Computer Simulations of Adsorption and Diffusion for Binary Mixtures of Methane and Hydrogen in Titanosilicates", *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 121 Issue 4 (2004) 22.
  15. Pantatosaki, E. and Papadopoulos, G.K., "On the Computation of Long-Range Interactions in Fluids under Confinement: Application To Pore Systems with Various Types of Spatial Periodicity", *Journal of Chemical Physics*, Vol. 127 Issue 16 (2007) 164723.
  16. Song, M.K. and Tai, K., "Molecular Simulation of Hydrogen Adsorption in Organic Zeolite", *Catalysis*