Universidad Tecnológica Nacional
MAYO - AGOSTO 2025 / Año 23 - Nº 53

Revista Tecnología y Ciencia
DOI: https://doi.org/10.33414/rtyc.53.15-25.2025 - ISSN 1666-6933
licencia de Creative Commons - Reconocimiento-NoComercial 4.0 Internacional

Nanohorns de carbono de pared simple como contenedores de hidrógeno molecular

Single walled carbon nanohorns as containers for molecular hydrogen

Presentación: 16/12/2024

Aprobación: 27/05/2025

Publicación: 10/06/2025

Eduardo Ariel Crespo
Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Neuquén, Argentina.
Dpto. de Física de la Facultad de Ingeniería. Universidad Nacional del Comahue, Argentina.
cresporama@gmail.com

Juan Manuel González
Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Neuquén, Argentina.
gonzalezjuanmanuelutn@gmail.com

Mirtha Azucena Orozco
Universidad Tecnológica Nacional, Facultad Regional Neuquén, Argentina.
Instituto de Investigaciones en Tecnologías y Ciencias de la Ingeniería, Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas - Universidad Nacional del Comahue, Argentina.
mirtha.orozco@fain.uncoma.edu.ar

Eduardo Marcial Bringa
Facultad de Ingeniería. Universidad de Mendoza, Argentina.
Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas, Argentina.
Centro de Nanotecnología Aplicada. Facultad de Ciencias. Universidad Mayor de Chile, Chile.
ebringa@yahoo.com

Resumen

Los nanohorns de carbono de pared simple (SWCNHs) poseen propiedades únicas con gran potencial para aplicaciones nanotecnológicas. Entre sus posibles usos futuros destaca el almacenamiento estable de hidrógeno molecular (H_2) a escala nanométrica. La interacción entre los SWCNHs y el H_2 puede estudiarse mediante simulaciones atomísticas, que no solo ofrecen resultados comparables con datos experimentales, sino que también proporcionan información difícil de obtener por otros medios.

Revista Tecnología y Ciencia
DOI: https://doi.org/10.33414/rtyc.53.15-25.2025 - ISSN 1666-6933

En particular, la dinámica molecular (MD) resulta clave, ya que permite analizar la evolución de átomos y moléculas a lo largo del tiempo, brindando una visión detallada sobre el movimiento atómico y la termodinámica del sistema. En este trabajo, se emplea MD con el código LAMMPS y el potencial reactivo AIREBO para examinar el comportamiento de un SWCNH con un volumen aproximado de 8 nm^3, incluyendo configuraciones con 38, 76, 152 y 304 moléculas de H_2 en su interior. Se evalúa la estabilidad del sistema, la estadística energética y la topología interatómica, además de determinar la presión del H_2 dentro de los SWCNHs en un rango de temperaturas entre 200 K y 1000 K, encontrando un buen acuerdo con resultados experimentales en fase gaseosa.

Palabras claves: SWCNH, nano-almacenamiento de H_2.

Abstract

Single-walled carbon nanohorns (SWCNHs) possess unique properties with great potential for nanotechnological applications. Among their potential future uses is the stable storage of molecular hydrogen (H_2) at the nanoscale. The interaction between SWCNHs and H_2 can be studied using atomistic simulations, which not only offer results comparable with experimental data but also provide information difficult to obtain by other means.

In particular, molecular dynamics (MD) is key, as it allows the analysis of the evolution of atoms and molecules over time, providing detailed insight into the atomic motion and thermodynamics of the system. In this work, MD with the LAMMPS code and the AIREBO reactive potential are used to examine the behavior of a SWCNH with a volume of approximately 8 nm^3, including configurations with 38, 76, 152, and 304 H_2 molecules inside. The stability of the system, the energy statistics and the interatomic topology are evaluated, in addition to determining the H_2 pressure inside the SWCNHs in a temperature range between 200 K and 1000 K, finding a good agreement with experimental results in the gas phase.

Keywords: SWCNH, H_2 nano-storage.

Introducción

Los nanohorns de carbono (C) de pared simple (single wall Carbon nanohorns SWCNHs) (Ijima et al., 1999. Ijima, 2002) representan una de las nanoestructuras de C más interesantes de la próspera familia de los nanotubos de carbono de pared simple (SWCNTs) (Comisso et al., 2010). Consisten en un SWCNT, con un diámetro de 2 a 5 nm y una longitud de 20 a 50 nm, terminados con puntas en forma de cuerno (la punta cónica con un ángulo de 20º) (Kowalczyk et al.,2014). Estos se autoensamblan para formar agregados aproximadamente esféricos parecidos a flores de dalia de 80 nm de diámetro (Xie et al., 2024; Liu et al., 2020; Fresco et al., 2018; Almeida et al., 2019).

Los SWCNHs pueden fabricarse a escala industrial (Arti et al., 2024; Serban et al., 2018) sin necesidad de catalizadores metálicos, lo que los hace ambientalmente amigables. Pueden obtenerse con alta pureza mediante técnicas como la ablación/vaporización con láser de grafito, la descarga de arco, entre otras.

Sus aplicaciones abarcan una amplia gama de campos, incluyendo sensores, sistemas de detección, catálisis, biomedicina, transporte de fármacos, generación de hidrógeno y almacenamiento de gases (Liao et al., 2025; Qi et al., 2025; Dubyey et al., 2024; Serban et al., 2024;

Revista Tecnología y Ciencia
DOI: https://doi.org/10.33414/rtyc.53.15-25.2025 - ISSN 1666-6933

Pandit et al., 2023; Kagkoura et al., 2023; Liu et al., 2020; Serban et al., 2018)

Diversos estudios, tanto teóricos como experimentales (Rungnim et al., 2018; Pagura et al., 2012; Chen et al., 2010; Comisso et al., 2010), han explorado las propiedades de los nanohornos de carbono de pared simple (SWCNHs) y los nanotubos de carbono de pared simple (SWCNTs) en el almacenamiento de hidrógeno. En su artículo de revisión, Dethan & Swamy (2022) presentan un análisis del estado del arte sobre investigaciones que emplean cálculos de dinámica molecular para examinar la capacidad de almacenamiento de H_2 en nanotubos de carbono, así como en estructuras híbridas y similares. En particular, cuando el H_2 se encuentra confinado dentro de los nanotubos, el autor describe este fenómeno como encapsulado de H_2. En este contexto, Dethan & Swamy (2022) citan seis estudios que analizan las propiedades mecánicas de estos sistemas mediante dinámica molecular (Chen et al., 2020; Vijayaraghavan et al., 2019; Vijayaraghavan et al., 2018a; Vijayaraghavan et al., 2018b; Chen, 2014; Zhou et al., 2002). No obstante, aunque estos trabajos examinan el impacto de la presencia de H_2 en el interior de las nanoestructuras sobre sus propiedades mecánicas, no profundizan en el estudio detallado de la termodinámica del H_2 cuando los nanotubos se emplean exclusivamente como contenedores bajo distintas condiciones de presión y temperatura. Por ejemplo, Vijayaraghavan et al. (2018b) simulan SWCNTs con tapas y H_2 encapsulado, realizando ensayos de compresión para analizar cómo distintos niveles de contenido de H_2 afectan las propiedades mecánicas de los nanotubos. Sin embargo, no examinan la estabilidad de las moléculas de H_2 ni determinan la presión del gas dentro de estas nanoestructuras.

En la introducción de su trabajo, Vijayaraghavan et al. (2018b) revisan estudios previos sobre el almacenamiento de H_2 en SWCNTs y concluye: 'Los estudios anteriores muestran que la mayor parte de la investigación fundamental en el campo de los SWCNTs para el almacenamiento de hidrógeno se ha centrado en las propiedades de adsorción de los nanotubos y en técnicas para mejorar su capacidad de almacenamiento. Hasta donde saben los autores, existen muy pocos estudios que analicen la resistencia mecánica en relación con el almacenamiento de hidrógeno.' A partir del estado tensorial del H_2 encapsulado, es posible calcular la presión del gas dentro de la nanoestructura mediante simulaciones de dinámica molecular (Shi et al., 2023).

Ante la limitada cantidad de estudios que abordan este enfoque, en este trabajo realizamos simulaciones de MD para examinar el comportamiento de un SWCNH como nano-contenedor de H_2 (Zehra et al., 2023; Nguyen et al., 2018). Nuestro estudio se centra en analizar la estabilidad y calcular la presión del gas confinado a distintas temperaturas dentro del SWCNH. Para ello, utilizamos simulaciones de dinámica molecular (MD) con el código LAMMPS (Thompson et al., 2022) y evaluamos la viabilidad del almacenamiento de H_2 en SWCNHs (Crespo et al., 2018). Analizamos el comportamiento de un SWCNH de aproximadamente 8 nm^3, compuesto por 1516 átomos de carbono, con 38, 76, 152 y 304 moléculas de H_2 en su interior. Calculamos energías y distancias interatómicas, complementadas con un análisis estadístico. Finalmente, determinamos la presión interna del H_2 en los SWCNHs en un rango de temperaturas de 200 K a 1000 K.

Metodología

Las simulaciones de MD se realizan utilizando el código LAMMPS (Thompson et al., 2022). Para describir la interacción entre los átomos, se emplean potenciales reactivos AIREBO,

Revista Tecnología y Ciencia
DOI: https://doi.org/10.33414/rtyc.53.15-25.2025 - ISSN 1666-6933

diseñados para reproducir diversas estructuras de carbono, hidrocarburos, y moléculas de H_2 (Stuart et al., 2000). El time-step empleado es de 0.1 fs, lo que permite capturar con precisión la dinámica de las moléculas de H_2. Las simulaciones se ejecutan durante 2 millones de pasos, equivalentes a 0.2 ns. Las coordenadas iniciales de los átomos de carbono corresponden a una de las configuraciones utilizadas por Kowalczyk et al. (2014), mientras que las moléculas de H_2 se distribuyen aleatoriamente y de forma aproximadamente equidistante dentro del SWCNH. Para las velocidades iniciales se utiliza una distribución gaussiana a la correspondiente temperatura. Se emplea un ensamble NVE (microcanónico) donde permanecen constantes N el número de partículas, V el volumen de una caja de simulación que contiene el SWCNH con H_2 en su interior, y E la energía total del sistema. A esto se le agrega un termostato, las temperaturas se fijan entre valores de 200 K a 1000 K rescaleando cada 500 pasos, y por tanto el ensamble se transforma en uno canónico NVT.

Resultados y discusión

En la Figura 1 se muestra en un instante representativo al SWCNH con 304 H_2 en su interior a 300 K de temperatura. Los C se representan en color rojo los H_2 en azul. Las moléculas de H_2 permanecen estables colisionando entre sí y con las paredes internas del contenedor sin escapar. Un comportamiento similar se manifiesta con los demás contenidos de H_2 y temperaturas estudiados siendo el sistema estable.

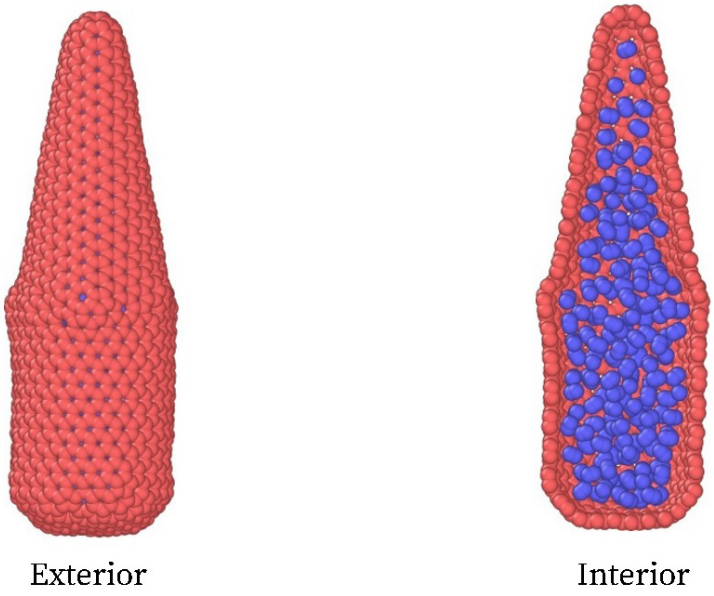


Figura 1: SWCNH con 304 H_2 en su interior a 300K de temperatura.
Los C se representan con color rojo los H_2 en azul.

Durante las simulaciones se evaluaron frecuentemente: (a) Energías cinéticas atómicas. (b) Distancia interatómicas en las moléculas de H_2. (c) Energías potenciales atómicas. En estos conjuntos muy extensos de valores, donde se suavizan fluctuaciones, se calcularon las distintas funciones de distribución.

Revista Tecnología y Ciencia
DOI: https://doi.org/10.33414/rtyc.53.15-25.2025 - ISSN 1666-6933

En la Figura 2 se comparan para cinco temperaturas las distribuciones de energías cinéticas atómicas (E_K) calculadas (círculos) con las de Maxwell Bolztamnn (líneas, equilibrio térmico) dada por la ecuación (1). Donde k_B es la constante de Boltzmann y N es el número total de átomos en cada caso

$$\frac{n(E_K)}{N} = \frac{2}{\sqrt{\pi}\left(k_B T\right)^{3/2}} E_K^{1/2} e^{-E_K/k_B T} \tag{1}$$

Para cada temperatura se muestra un contenido de H_2 diferente dentro del SWCNH.

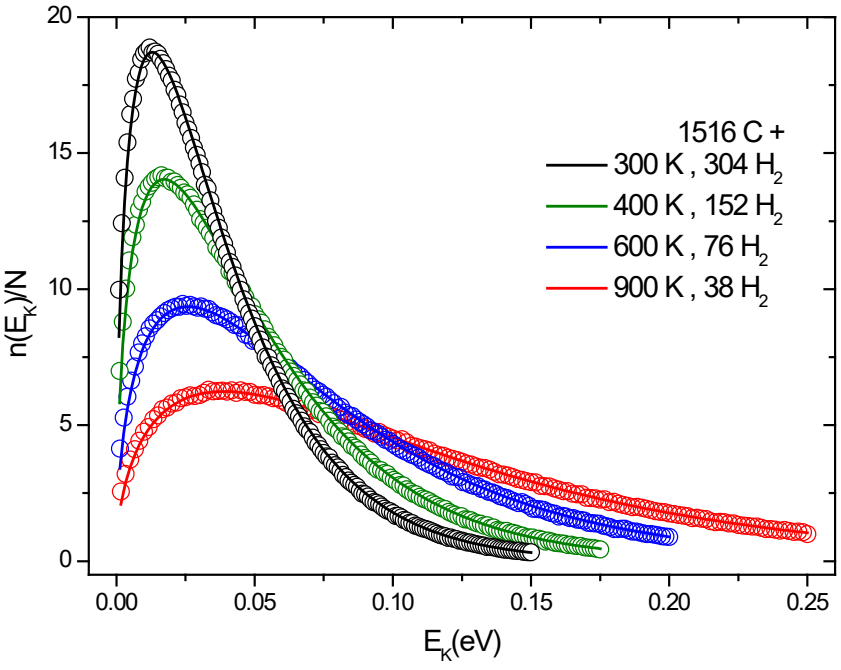


Figura 2: Distribuciones de energías cinéticas atómicas. Con círculos valores calculados (MD) con línea Maxwell Boltzmann. Cada color es una temperatura y contenido diferente.

La Figura 3 muestra las distribuciones de distancias interatómicas (D_H) de las moléculas de H_2, analizadas a tres temperaturas diferentes cuando el SWCNH contiene 304 moléculas de H_2. Con línea a trazos vertical se muestra el valor de referencia de 0.7414 Å. Dentro del SWCNH las moléculas de H_2 permanecen estables y no existe disociación y formación de hidrógeno atómico. Para los demás contenidos de H_2 resultan comportamientos muy similares.

Revista Tecnología y Ciencia
DOI: https://doi.org/10.33414/rtyc.53.15-25.2025 - ISSN 1666-6933

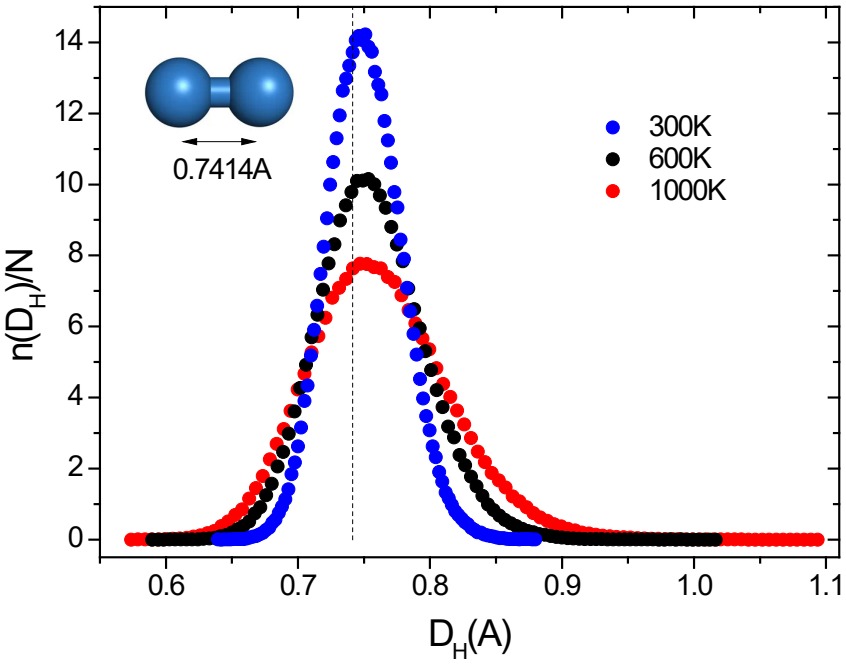


Figura 3: Distribuciones de distancias interatómicas n(D_H) en las moléculas de H_2 dentro del SWCNH para 3 temperaturas.

En la Figura 4 (a) se presentan las distribuciones de los valores de las energías potenciales (E_{pH}) de los átomos de hidrógeno que forman las moléculas de H_2, analizadas para tres temperaturas distintas, considerando un total de 304 H_2 contenidos dentro del SWCNH. Se observa un patrón con dos picos y que la población evoluciona de uno al otro con el incremento de la temperatura. En 200K para este contenido de H_2 ambos máximos son similares, el pico azul (-2.2724eV) representa a los H_2 más próximos a los C mientras que el verde (-2.2637 eV) a los más alejados, como lo revela el corte transversal realizado en el SWCNH con H_2 en un instante dado (Figura 4 (b)). La diferencia de energía potencial es ΔEpH = 0.008 eV. Cabe destacar que el potencial reactivo AIREBO considera las fuerzas intermoleculares (Stuart et al., 2000).

Cuando dentro del SWCNH hay 38 H_2, y la temperatura es de 200 K la totalidad de los H_2 se encuentran en el pico azul, esto es que los 38 H_2 se encuentran próximos a las paredes internas del SWCNH (fisisorción). Conforme aumenta la temperatura crece el pico verde y los H_2 pueblan el resto del interior del SWCNH. El comportamiento cuando dentro del SWCNH hay 78 y 152 H_2 resulta similares e intermedios a estos dos casos.

En la Figura 5 (a) se observa la distribución de valores de energías potenciales de los C (E_{pC}) para tres temperaturas cuando dentro del SWCNH hay 76 H_2. Se identifica un patrón característico de máximos y mínimos. Además, en la Figura 5 (b) se ilustra, para un instante representativo, la ubicación de los átomos de carbono en el SWCNH, vinculados a cada región de la distribución de energías potenciales. Si el SWCNH se interpreta como compuesto por un segmento tubular, uno cónico, y tapas, se tiene que el máximo absoluto corresponde a la zona tubular más la cónica, representadas en rojo en la Figura 5 (b) para 200K. Este máximo ocurre para -7.39 eV siendo un valor razonable puesto que la energía de formación de una vacancia simple es de 7.5 eV (Bhatt et al., 2022).

Revista Tecnología y Ciencia
DOI: https://doi.org/10.33414/rtyc.53.15-25.2025 - ISSN 1666-6933

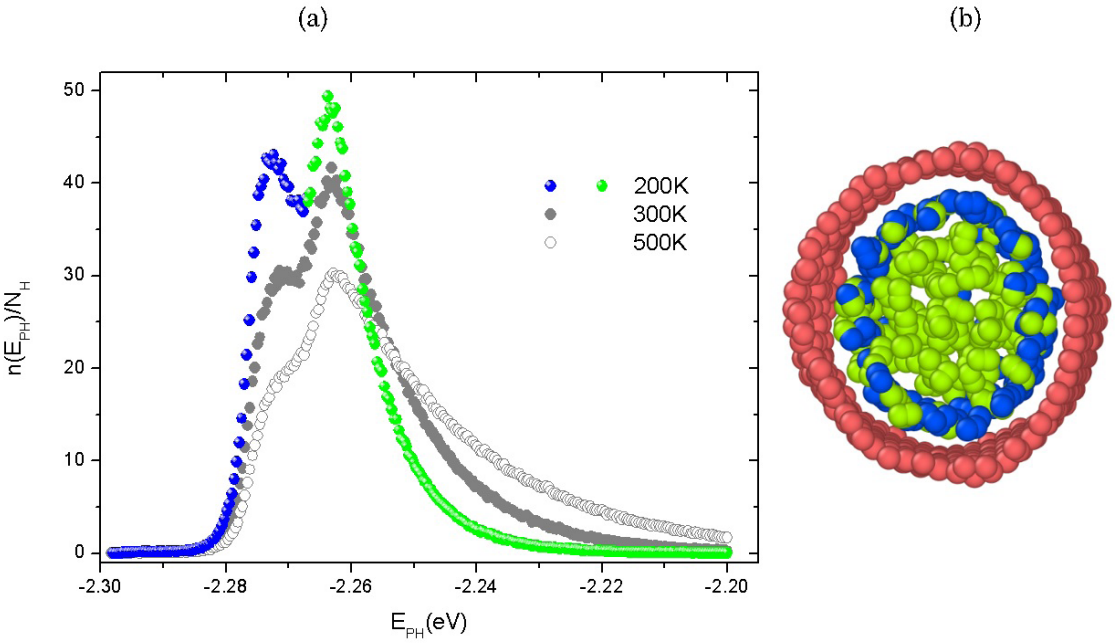


Figura 4: (a) Distribuciones de energías potenciales de los hidrógenos que conforman los H_2 para tres temperaturas, cuando dentro del SWCNH hay 304 H_2. (b) Corte transversal del SWCNH, el pico azul está asociado los H_2 más cercanos a la pared interna; el verde a los más alejados.

Los otros máximos involucran pocos átomos localizados en zonas defectuosas, átomos naranjas verdes y azules en la misma figura. El espectro de energías potenciales varía con la temperatura. Para los demás contenidos de H_2 analizados, el comportamiento observado es prácticamente idéntico.

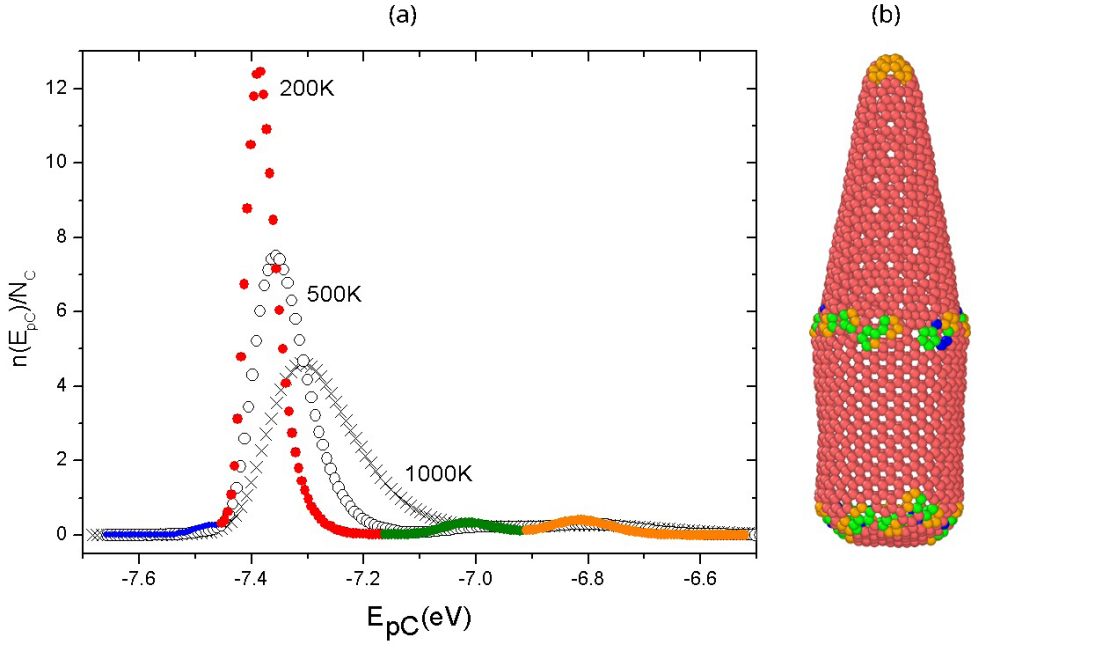
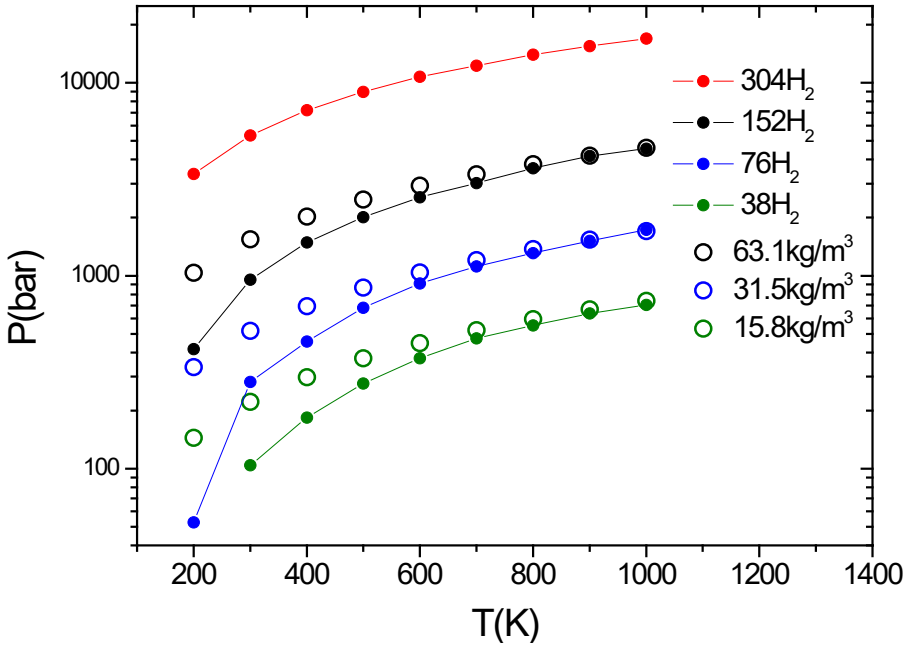


Figura 5: (a) Distribuciones de energías potenciales de los C. (b) Ubicación de los C en el SWCNH asociados a cada zona de la distribución de energías potenciales.

Revista Tecnología y Ciencia
DOI: https://doi.org/10.33414/rtyc.53.15-25.2025 - ISSN 1666-6933

En la Figura 6 se presentan los diagramas de presión en función de la temperatura, comparando los resultados de H_2 confinado dentro de un SWCNH, obtenidos mediante MD (Shi et al., 2023), con los datos de H_2 en fase gaseosa de densidad equivalente, extraídos de NIST Chemistry WebBook. A medida que la temperatura aumenta, las presiones de ambos sistemas se aproximan, lo que refleja la disminución de la influencia del SWCNH sobre el H_2 debido al incremento de su energía cinética.



Fígura 6: Diagramas presión temperatura. Con circulos llenos y línea continua H_2 almacenado dentro del SWCNH (MD). Con circulos abiertos H_2 en fase gaseosa de equivalente densidad.

Conclusiones

A partir de este estudio, se determinó que el SWCNH utilizado puede funcionar como un nanocontenedor de H_2 en un rango de temperaturas de 200 K a 1000 K, para los contenidos considerados. Las moléculas de H_2 permanecen estables sin sufrir disociación atómica, tal como se muestra en la Figura (3). Sin embargo, existe una interacción de tipo Van der Waals entre las moléculas de H_2 y las paredes internas del SWCNH. Esto se traduce en la presencia de dos poblaciones de energías potenciales para los átomos de hidrógeno que componen las moléculas. El valor de -2.2724 eV se asocia con los H_2 más próximos a la superficie interna del SWCNH, mientras que el valor de -2.2637 eV corresponde a los más alejados (Figura 4).

Por otro lado, las energías potenciales de los átomos de carbono que conforman el SWCNH (Figura 5) no dependen del contenido de H_2, sino de la posición específica de cada átomo en la estructura. Asimismo, se calculó la presión de H_2 dentro del SWCNH para diferentes contenidos Figura (6). Los resultados muestran que, a medida que la temperatura aumenta, este valor tiende a aproximarse al correspondiente a una fase gaseosa, en concordancia con resultados experimentales obtenidos para diversas densidades de H_2.

Agradecimientos

A la Facultad Regional Neuquén de la Universidad Tecnológica Nacional (FRN UTN).
Al Dpto. de Física de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional del Comahue.

Revista Tecnología y Ciencia
DOI: https://doi.org/10.33414/rtyc.53.15-25.2025 - ISSN 1666-6933

Referencias

Almeida, E. R., De Souza, L. A., De Almeida, W. B., & Dos Santos, H. F. (2019). Molecular dynamics of carbon nanohorns and their complexes with cisplatin in aqueous solution. Journal of Molecular Graphics and Modelling, 89, 167-177. https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2019.03.015

Arti, N., Alam, N., & Ansari, J. R. (2024). Nanostructures and fascinating properties of carbon nanohorns. En Handbook of Functionalized Carbon Nanostructures (pp. 351–389). Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-031-32150-4_10.

Bhatt, M. D., Kim, H., & Kim, G. (2022). Various defects in graphene: A review. RSC Advances, 33, 1-15. https://doi.org/10.1039/D2RA01436J.

Chen, B.-H. (2014). Mechanical response of hydrogen-filled single-walled carbon nanotubes under torsion. International Journal of Hydrogen Energy, 39(3), 1382-1389. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2013.10.121.

Chen, B.-H., & Kung, C. (2020). Quantum confinement and torsional responses of single-wall carbon nanotubes filled with hydrogen molecules. International Journal of Hydrogen Energy, 45(58), 33798-33806. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.09.092.

Chen, G., Peng, Q., Mizuseki, H., & Kawazoe, Y. (2010). Theoretical investigation of hydrogen storage ability of a carbon nanohorn. Computational Materials Science, 49(4, Supplement), S378-S382. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2009.12.013.

Crespo, E. A., Braschi, F. U., & Bringa, E. M. (2018). Almacenamiento de H_2 a escala nanométrica: Un estudio por dinámica molecular. Rumbos Tecnológicos, 10, 45-60. https://rumbostecnologicos.utnfrainvestigacionyposgrado.com/volumenes/rumbos-10/almacenamiento-de-h2-a-escala-nanometrica-un-estudio-por-dinamica-molecular/

Comisso, N., Berlouis, L. E. A., Morrow, J., & Pagura, C. (2010). Changes in hydrogen storage properties of carbon nano-horns submitted to thermal oxidation. International Journal of Hydrogen Energy, 35(17), 9070-9081. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.06.034.

Dubyey, L., Ukrainczyk, N., Yadav, S., Izadifar, M., Schneider, J. J., & Koenders, E. (2024). Carbon nanotubes and nanohorns in geopolymers: A study on chemical, physical and mechanical properties. Materials & Design, 240, 112851. https://doi.org/10.1016/j.matdes.2024.112851.

Dethan, J. F. N., & Swamy, V. (2022). Mechanical and thermal properties of carbon nanotubes and boron nitride nanotubes for fuel cells and hydrogen storage applications: A comparative review of molecular dynamics studies. International Journal of Hydrogen Energy, 47(59), 24916-24944. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2022.05.240.

Fresco-Cala, B., López-Lorente, Á. I., & Cárdenas, S. (2018). Monolithic solid based on single-walled carbon nanohorns: Preparation, characterization, and practical evaluation as a sorbent. Nanomaterials, 8(6), 370. https://doi.org/10.3390/nano8060370.

Liao, R.-Z., Wei, S., Yi, W.-J., Chen, J.-H., & Yue, X.-Z. (2025). Synergistic effect of RuNi alloy supported by carbon nanohorns for boosted hydrogen evolution from ammonia borane hydrolysis. Journal of Colloid and Interface Science, 690, 137264. https://doi.org/10.1016/j.jcis.2025.137264.

Liu, X., Ying, Y., & Ping, J. (2020). Structure, synthesis, and sensing applications of single-walled carbon nanohorns. Biosensors and Bioelectronics, 167, 112495. https://doi.org/10.1016/j.bios.2020.112495.

Revista Tecnología y Ciencia
DOI: https://doi.org/10.33414/rtyc.53.15-25.2025 - ISSN 1666-6933

Iijima, S. (2002). Carbon nanotubes: past, present, and future. Physica B: Condensed Matter, 323(1–4), 1-5. https://doi.org/10.1016/S0921-4526(02)00869-4.

Iijima, S., Yudasaka, M., Yamada, R., Bandow, S., Suenaga, K., Kokai, F., & Takahashi, K. (1999). Nano-aggregates of single-walled graphitic carbon nano-horns. Chemical Physics Letters, 309(3–4), 165-170. https://doi.org/10.1016/S0009-2614(99)00642-9.

Kagkoura, A., Ojeda-Galván, H. J., Quintana, M., & Tagmatarchis, N. (2023). Carbon dots strongly immobilized onto carbon nanohorns as non-metal heterostructure with high electrocatalytic activity towards protons reduction in hydrogen evolution reaction. Small, 19(31), 2208285. https://doi.org/10.1002/smll.202208285.

Kowalczyk, P., Terzyk, A. P., Gauden, P. A., Furmaniak, S., & Kaneko, K. (2014). Toward in silico modeling of palladium–hydrogen–carbon nanohorn nanocomposites. Physical Chemistry Chemical Physics, 16(23), 11763-11769. https://doi.org/10.1039/C4CP01345J.

Nguyen, T. A., & Assadi, A. A. (2018). Smart nanocontainers: Preparation, loading/release processes and applications. Kenkyu Journal of Nanotechnology & Nanoscience, 4(S1), 1-6. https://doi.org/10.31872/2018/KJNN-S1-100101.

National Institute of Standards and Technology. (s.f.). NIST Chemistry WebBook. Recuperado el 22 de mayo de 2025, de https://webbook.nist.gov.

Pagura, C., Barison, S., Mortalò, C., Comisso, N., & Schiavon, M. (2012). Large scale and low cost production of pristine and oxidized single wall carbon nanohorns as material for hydrogen storage. Nanoscience and Nanotechnology Letters, 4(2), 160-164. https://doi.org/10.1166/nnl.2012.1308.

Pandit, J., Alam, M. S., Javed, M. N., Waziri, A., & Imam, S. S. (2023). Emerging roles of carbon nanohorns as sustainable nanomaterials in sensor, catalyst, and biomedical applications. En Handbook of Green and Sustainable Nanotechnology (pp. 1721-1747). Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-031-16101-8_48.

Qi, Y., & Miyako, E. (2025). Multifunctional magnetic ionic liquid-carbon nanohorn complexes for targeted cancer theranostics. Small Science, 5(3), 202400640. https://doi.org/10.1002/smsc.202400640.

Rungnim, C., Faungnawakij, K., Sano, N., Kungwan, N., & Namuangruk, S. (2018). Hydrogen storage performance of platinum supported carbon nanohorns: A DFT study of reaction mechanisms, thermodynamics, and kinetics. International Journal of Hydrogen Energy, 43(52), 23336-23345. https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.10.211.

Serban, B. C., Bumbac, M., Buiu, O., Cobianau, C., Brezeanu, M., & Nicolescu C. (2018) Carbon nanohorns and their nanocomposites synthesis, properties and aplications. A concise review. Annals of the Academy of Romanian Scientists Series on Science and Technology of Information Volume 11, Number 2/2018. https://www.researchgate.net/publication/329782184.

Serban, B. C., Buiu, O., Dumbravescu, N., Brezeanu, M., Cobianu, C., Bumbac, M., & Nicolescu, M. (2024). Some considerations about the sensing mechanisms and electrical response of carbon nanohorns–based gas sensors. Romanian Journal of Information Science and Technology, 27(2), 137-150. https://doi.org/10.59277/ROMJIST.2024.2.02.

Shi, K., Smith, E. R., Santiso, E. E., & Gubbins, K. E. (2023). A perspective on the microscopic pressure (stress) tensor: History, current understanding, and future challenges. The Journal of Chemical Physics, 158(4), 040901. https://doi.org/10.1063/5.0132487.

Stuart, S. J., Tutein, A. B., & Harrison, J. A. (2000). A reactive potential for hydrocarbons with

Revista Tecnología y Ciencia
DOI: https://doi.org/10.33414/rtyc.53.15-25.2025 - ISSN 1666-6933

intermolecular interactions. The Journal of Chemical Physics, 112(14), 6472-6486. https://doi.org/10.1063/1.481208.

Thompson, A. P., Aktulga, H. M., Berger, R., Bolintineanu, D. S., Brown, W. M., Crozier, P. S., in 't Veld, P. J., Kohlmeyer, A., Moore, S. G., Nguyen, T. D., Shan, R., Stevens, M. J., Tranchida, J., Trott, C., & Plimpton, S. J. (2022). LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales. Computer Physics Communications, 271, 108171. https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171.

Vijayaraghavan, V., Dethan, J. F. N., & Gao, L. (2019). Torsional mechanics of single walled carbon nanotubes with hydrogen for energy storage and fuel cell applications. Science China Physics, Mechanics & Astronomy, 62, 34611. https://doi.org/10.1007/s11433-018-9270-7.

Vijayaraghavan, V., Dethan, J. F. N., & Garg, A. (2018a). Nanomechanics and modelling of hydrogen stored carbon nanotubes under compression for PEM fuel cell applications. Computational Materials Science, 146, 176-183. https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.01.041.

Vijayaraghavan, V., Dethan, J. F. N., & Garg, A. (2018b). Tensile loading characteristics of hydrogen stored carbon nanotubes in PEM fuel cell operating conditions using molecular dynamics simulation. Molecular Simulation, 44(9), 736-742. https://doi.org/10.1080/08927022.2018.1445246.

Zehra, S., Mobin, M., Aslam, R., & Bhat, S. U. I. (2023). Nanocontainers: A comprehensive review on their application in the stimuli-responsive smart functional coatings. Progress in Organic Coatings, 176, 107389. https://doi.org/10.1016/j.porgcoat.2022.107389.

Xie, Z., Lu, S., Peng, H., Liu, Y., Chen, J., Zhang, D., Liu, Y., Yang, B., & Liang, F. (2024). Regulating the structure of single-walled carbon nanohorns for impedance matching and electromagnetic wave absorption. ACS Applied Nano Materials, 7(22), 25921–25930. https://doi.org/10.1021/acsanm.4c05090.

Zhou, L. G., & Shi, S. Q. (2002). Molecular dynamic simulations on tensile mechanical properties of single-walled carbon nanotubes with and without hydrogen storage. Computational Materials Science, 23(1–4), 166-174. https://doi.org/10.1016/S0927-0256(01)00233-6.

Contribución de los Autores

	Colaboración Académica													
Nombres y Apellidos del autor	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Eduardo Ariel Crespo	x	x	x	x	x	x	x		x	x				x
Juan Manuel Gonzalez					x	x								
Mirtha Azucena Orozco					x	x								
Eduardo Marcial Bringa			x	x		x	x	x				x	x	

1-Administración del proyecto, 2-Adquisición de fondos, 3-Análisis formal, 4-Conceptualización, 5-Curaduría de datos, 6-Escritura - revisión y edición, 7-Investigación, 8-Metodología, 9-Recursos, 10-Redacción - borrador original, 11-Software, 12-Supervisión, 13-Validación, 14-Visualización.