ФИЗИКОХИМИЯ ПОВЕРХНОСТИ И ЗАЩИТА МАТЕРИАЛОВ, 2023, том 59, № 5, с. 485–490

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ НА МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦАХ

УДК 66.081

НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЕ РАЗДЕЛЕНИЕ N_2 И He НА МЕМБРАНЕ HKUST-1

© 2023 г. И. В. Гренев[a, b, *], В. Ю. Гаврилов[b]

[a] *Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 1, Новосибирск, 630090 Россия*

[b] *Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН, пр. Академика Лаврентьева, 5, Новосибирск, 630090 Россия*

**e-mail: greneviv@catalysis.ru*

Поступила в редакцию 17.04.2023 г.
После доработки 17.06.2023 г.
Принята к публикации 22.06.2023 г.

Технологии мембранного газоразделения могут быть интегрированы в существующие производственные процессы низкотемпературного извлечения гелия из природного газа на стадиях выделения сырца гелия из смеси N_2/He и его глубокой очистки. Эффективность таких процессов во многом определяют свойства материалов, из которых сделана мембрана. Металл-органические координационные полимеры благодаря своим уникальным свойствам являются перспективными материалами для использования в газоразделении. В данной работе с помощью методов Монте-Карло и равновесной молекулярной динамики исследована температурная зависимость мембранной селективности и коэффициентов проницаемости по азоту для разделения эквимолярной смеси N_2 и He через мембрану на основе HKUST-1 при перепадах давления в 0.1, 0.3 и 1 МПа. Показано, что подбор оптимальных температурных условий позволяет получить существенное увеличение мембранной селективности и коэффициентов проницаемости по азоту по сравнению с соответствующими параметрами при комнатной температуре.

DOI: 10.31857/S0044185623700584, **EDN:** PRNJJZ

ВВЕДЕНИЕ

Гелий, благодаря уникальным физическим свойствам, находит широкое применение в электронной, авиационной и космической промышленности, в научных исследованиях и медицине. В настоящее время гелий получают в основном из гелийсодержащего природного газа. Традиционный процесс извлечения гелия состоит из стадии предварительной очистки (удаление C_2+ углеводородов, воды, H_2S и CO_2), низкотемпературного отделения метана от газовой смеси, разделения смеси N_2/He и получения 50–70% гелиевого концентрата, стадии глубокой очистки сырца гелия до 99.995% концентрации и сжижения гелия.

Технология мембранного газоразделения является энергоэффективной альтернативой процессу низкотемпературной конденсации [1–3]. Мембранное разделение обладает рядом инженерных преимуществ: простота в эксплуатации и настройки рабочих режимов, отсутствие движущихся деталей. Особенность данного процесса в том, что он может быть использован как полноценный технологический процесс, так и быть встроенным в промежуточные стадии на уже существующих газоперерабатывающих заводах конденсационного типа. Так, по оценкам [4, 5], наиболее целесообразно использовать мембранные технологии разделения на стадиях выделения сырца гелия из смеси N_2/He и глубокой очистки. Эффективность таких процессов во многом определяют свойства материалов, из которых сделана мембрана. В случае мембранного разделения материал должен иметь высокую селективность и проницаемость по целевому компоненту. В связи с этим перспективной задачей является поиск новых эффективных материалов для мембранного разделения смеси N_2/He.

Металл-органические координационные полимеры (**МОКП**) являются перспективным классом кристаллических пористых материалов для применения в технологиях мембранного разделения газов. Огромная вариация органических и неорганических “строительных” элементов позволяет настраивать их адсорбционные свойства, величину удельной поверхности, размеры и объем пор. Отметим также, что использование МОКП в процессах мембранного разделения перспективнее, чем в процессах адсорбционного разделения, так как для изготовления мембраны требуется существенно меньшее количество МОКП. В литературе представлено большое многообразие МОКП структур, однако только для малой их части отработана методика синтеза, и только на десятке экспериментально исследована селектив-

ность и проницаемость для N_2 и He. В этой связи вычислительные методы, позволяющие предсказывать адсорбционные и диффузионные свойства на основе данных о кристаллической структуре адсорбента, являются удобным инструментом поиска перспективных материалов для конкретных областей газоразделения. Появление структурных баз данных CSD MOF [6] и CoRE MOF [7], содержащих параметры элементарных ячеек и координаты атомов МОКП, положило начало *in silico* поискам эффективных материалов как для адсорбционного [8–10], так и для мембранного [11–13] газоразделения. Ранее авторами [14] был проведен *in silico* скрининг 10143 МОКП и 218 силикалитных структур цеолитов для разделения эквимолярной смеси N_2 и He при комнатной температуре. Было продемонстрировано, что более перспективно проводить поиски МОКП мембран селективных по азоту, чем по гелию. Найденная наиболее перспективная структура демонстрирует мембранную селективность N_2/He около 430 при коэффициенте проницаемости по азоту 3.2×10^5 баррер.

Процесс разделения смеси N_2/He после стадии сжижения метана может быть проведен при низкой температуре (до 111 K), что позволяет уменьшить количество циклов охлаждения, необходимых для сжижения конечного гелиевого продукта [4]. Также понижение температуры системы может привести к увеличению мембранной селективности N_2/He для мембран на основе пористых материалов. Так, в работе [15] экспериментально определены температурные зависимости газовой проницаемости по азоту $P_{N_2}^{mix}$ и мембранной селективности $S_{N_2/He}^{mem}$ для разделения газовой смеси N_2 и He в соотношении 52.6 на 47.4%, соответственно, при перепаде давления в 0.4 МПа через мембрану из цеолита с топологией MFI толщиной в 0.5–1 мкм, нанесенную на подложку из пористого α-Al_2O_3. Определена оптимальная температура проведения процесса газоразделения, равная 124 K, при которой достигается мембранная селективность N_2/He равная 76 и проницаемость – 3.9×10^{-6} моль/(м^2 с Па). В работе [16] экспериментально определены температурные зависимости $P_{N_2}^{mix}$ и $S_{N_2/He}^{mem}$ для разделения эквимолярной газовой смеси CH_4, N_2 и He при перепаде давления в 0.28 МПа через мембрану из цеолита с топологией MFI толщиной в 0.45 мкм, нанесенную на подложку из пористого α-Al_2O_3. Показано, что при температуре в 174 K достигается максимальная мембранная селективность N_2/He равная 52, а проницаемость по азоту составляет 2.9×10^{-6} моль/(м^2 с Па).

Одним из первых синтезированных и хорошо изученных металл-органических координационных полимеров является HKUST-1 (Cu-BTC) [17]. Интерес к данному МОКП обусловлен высокой термической стабильностью и относительной низкой стоимостью синтеза по сравнению с другими МОКП. В литературе для данного МОКП представлены отработанные методики синтеза, а также продемонстрированы успешные попытки создания мембран на основе HKUST-1, нанесенного на пористые неорганические подложки [18–20]. Структура HKUST-1 может быть потенциально использована для низкотемпературного разделения смеси N_2/He, так как обладает высокой пористостью (0.74), что обеспечивает большую адсорбционную емкость, и лимитирующим размером пор, превышающим кинетический диаметр молекулы азота (3.64 Å), что обеспечивает высокую проницаемость. Однако, немногочисленные экспериментальные исследования проницаемости по He и N_2 мембран на основе HKUST-1 выполнены при комнатной температуре [18–20]. При недостатке экспериментальных данных методы молекулярного моделирования позволяют предсказывать адсорбционные и диффузионные свойства в широком диапазоне температур и давлений, что позволяет получать ценную информацию при оценке пригодности данного материала для низкотемпературного разделения N_2/He.

ДЕТАЛИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Для моделирования адсорбционных свойств Cu-BTC использовался метод Монте-Карло в большом каноническом ансамбле (**МК**). С помощью метода МК проводилось моделирование адсорбции эквимолярной смеси N_2 и He в жесткой идеальной структуре МОКП при давлениях 0.1, 0.3 и 1 МПа в диапазоне температур от 80 до 400 K. Межатомные взаимодействия описывались как сумма потенциалов Леннарда–Джонса 6-12 (**ЛД**) и Кулоновских взаимодействий. Параметры потенциала 6-12 для атомов линкеров задавались в соответствии с силовым полем Dreiding [21], а параметры для атомов Cu в соответствии с силовым полем UFF [22]. Молекула азота в соответствии с моделью TraPPE [23] представлялась в виде гантели с жесткой межатомной связью длинной 1.1 Å, а параметры взаимодействия ЛД для каждого атома составляли $\varepsilon_N/k_B = 36.0$ K и $\sigma_N = 3.31$ Å. Квадрупольный момент N_2 описывался тремя зарядами: два заряда $-q$, где $q = 0.482$ e, располагались в центрах атомов азота, заряд $+2q$ располагается в центре масс молекулы. Молекула гелия моделировалась одноцентовой моделью с параметрами $\sigma_{He} = 2.64$ Å и $\varepsilon_{He}/k_B = 10.9$ K [24]. Перекрестные константы ЛД взаимодействия рассчитывались с использованием правила Лоренца–Бертло. Взаимодействия ЛД обрезались на расстоянии в *Rcutoff* = 1= 2.8 Å. Дальнодействующие Кулоновские взаимодействия рассчитывались с помощью метода суммирования Эвальда. Геометрически оптимизированная модель элементарной ячейки струк-

туры HKUST-1 и эффективные заряды атомов каркаса МОКП были взяты из работ [25, 26]. Фрагмент структуры МОКП состоял из 2 × 2 × 2 элементарных ячеек, чтобы минимальное расстояние в каждом из направлений было больше, чем 2*Rcutoff*. В качестве шагов метода МК были использованы шаги смещения и вращения молекул адсорбата, случайного перемещения флюида в новые случайные позиции, смены типа молекул адсорбата, вставки молекул из виртуального резервуара и удаления молекул адсорбата из структуры. Коэффициент фугитивности рассчитывался по уравнению состояния Пенга–Робинсона. Для ускорения процесса моделирования была использована заранее рассчитанная сетка с шагом в 0.1 Å со значениями суммарного потенциала взаимодействия молекулы адсорбата со всем фрагментом структуры. Все расчеты проводились с использованием программного кода RASPA-2.0 [27].

Адсорбционная селективность $S_{i/j}^{\text{ads}}$ для смеси газов рассчитывалась как:

$$S_{i/j}^{\text{ads}} = \frac{c_i/c_j}{x_i/x_j}, \quad (1)$$

где c_i – величина абсолютной адсорбции i-той компоненты смеси, определенная из МК, а x_i – мольная доля i-того компонента смеси.

Коэффициенты самодиффузии $D_{\text{self},i}$ для каждого компонента газовой смеси были получены с помощью метода равновесной молекулярной динамики (**МД**), при концентрациях адсорбата, определенных методом МК. В изотропном трехмерном материале коэффициент самодиффузии может быть определен через среднеквадратичное смещение частиц по соотношению Эйнштейна:

$$D_{\text{self},i} = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{2dt} \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \left(\vec{r}_j(t) - \vec{r}_j(0)\right)^2, \quad (2)$$

где N – количество молекул, $\vec{r}_j(t)$ – положение j-той частицы в момент времени t, d – размерность системы. Моделирование проводилось в NVT ансамбле (при постоянном количестве частиц, объеме и температуре) с использованием термостата Нозе–Хувера. После генерации начального размещения молекул адсорбата в структуре, соответствующего величине адсорбции, полученной с помощью метода МК, в течение первых 50 пс система проходила стадию уравновешивания перед началом сбора данных. В каждом случае длительность МД моделирования составляла 20 нс, а коэффициент самодиффузии определялся после выхода на диффузионный режим. Так как гелий слабо взаимодействует с атомами адсорбента, а его концентрация, определенная из метода МК, была существенно меньше концентрации N_2, в методе МД моделировался фрагмент структуры размером 3 × 3 × 3 элементарных ячеек. В случаях слишком низкой концентрации гелия (меньше одной молекулы гелия на рассматриваемый фрагмент), моделировалась система с одной молекулой гелия. Такая ситуация характерна для низких температур при $c_{N_2} \gg c_{He}$. Для сбора статистики проводилось столько независимых МД прогонов, чтобы данные собирались в сумме не менее, чем для 20 молекул гелия.

Диффузионная селективность $S_{i/j}^{\text{dif}}$ для смеси газов определялась как отношение коэффициентов самодиффузии:

$$S_{i/j}^{\text{dif}} = \frac{D_{\text{self},i}}{D_{\text{self},j}}. \quad (3)$$

Коэффициент проницаемости i-того компонента смеси P_i рассчитывался как [28]:

$$P_i^{\text{mix}} = \frac{\varphi D_{\text{self},i} c_i}{f_i}, \quad (4)$$

где φ – пористость адсорбента, c_i – концентрация i-той компоненты смеси перед мембраной, определенная из МК, f_i – фугитивность i-той компоненты смеси перед мембраной. Данная модель предполагает, что за мембраной находится вакуум. Мембранная селективность определялась по соотношению:

$$S_{i/j}^{\text{mem}} = \frac{P_i^{\text{mix}}}{P_j^{\text{mix}}}. \quad (5)$$

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На первом этапе была проведена проверка валидности используемой в работе модели силового поля путем сопоставления расчетных и экспериментальных изотерм адсорбции N_2 при комнатной температуре на Cu-BTC в широком интервале давлений. Расчетные изотермы сравнивались с экспериментальными данными по адсорбции азота на HKUST-1 в диапазоне от 0 до 0.1 МПа при 298 K [29], в диапазоне 0 до 0.8 МПа при 295.25 K [30]. Результаты демонстрируют (рис. 1), что данное силовое поле с хорошей точностью предсказывает экспериментальные величины адсорбции азота. Проверить используемую модель силового поля в отношении адсорбции гелия – крайне сложная задача, так как во время проведения адсорбционного эксперимента измеряется избыточная величина адсорбции, а для этого перед началом эксперимента проводится измерение мертвого объема с помощью того же гелия. Таким образом, измерить изотерму адсорбции гелия традиционными методами не представляется возможным. Однако, в литературе присутствуют данные экспериментальных измерений однокомпонентной газопроницаемости для N_2 и He при 298 K через мембрану из HKUST-1 толщиной в 30 мкм [18], нанесенной на подложку из пористого

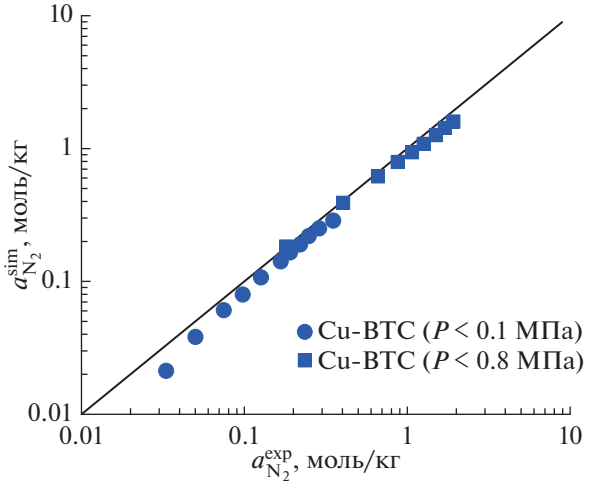

Рис. 1. Сопоставление расчетных и экспериментальных изотерм адсорбции N_2 на HKUST-1 при комнатной температуре.

α-Al_2O_3. Расчетные результаты дают завышенную оценку газопроницаемости мембран. Помимо неидеальности используемой модели силового поля, данный результат может быть обусловлен целым рядом причин: наличием структурных дефектов, наличием дефектов в упаковке кристаллитов, не равномерностью толщины мембраны. Тем не менее, на основании проведенного сопоставления расчетных и экспериментальных данных, можно полагать, что предложенная модель силового поля позволяет в целом адекватно оценивать адсорбционные и диффузионные свойства.

В работе проведено исследование температурной зависимости адсорбционных свойств HKUST-1 в случае адсорбции эквимолярной смеси N_2 и He при давлениях 0.1, 0.3 и 1 МПа в диапазоне температур от 80 до 400 K (рис. 2а). Результаты демонстрируют, что при уменьшении температуры в системе наблюдается монотонный рост величины адсорбции азота. Все три изобары сходятся в области низких температур, причем данная величина адсорбции соответствует полному заполнению микропор каркаса HKUST-1 жидким азотом. В случае адсорбции гелия при уменьшении температуры в системе на изобарах адсорбции наблюдается максимум, который смещается в сторону высоких температур при увеличении давления в системе. Так, при давлении в системе 0.1 МПа максимум находится при температуре 150 K, при 0.3 МПа – 170 K, а при 1 МПа – 200 K. Так как при данных температурах на изобарах адсорбции азота величины адсорбции близки и составляют около 6.2 моль/кг, можно предположить, что наличие максимума на изобарах адсорбции гелия может быть объяснен эффектом конкурентной адсорбции. Адсорбционная селективность $S_{N_2/He}^{ads}$, рассчитанная по выражению (1), демонстрирует монотонный рост при уменьшении температуры системы (рис. 2в). Увеличение давления в системе приводит к заметному снижению $S_{N_2/He}^{ads}$ при низких температурах из-за эффекта конкурентной адсорбции. Интересно отметить, что максимальная адсорбционная селективность среди 10143 МОКП и 218 силикалитных структур цеолитов [14], рассчитанная для адсорбции эквимолярной смеси гелия и азота при комнатной температуре и давлении 0.1 МПа, практически на порядок меньше, чем $S_{N_2/He}^{ads}$ для HKUST-1 при 80 K.

Температурные зависимости коэффициентов самодиффузии D_{self} при концентрациях адсорбата, определенных методом МК, в диапазоне температур от 80 до 400 K представлены на рис. 2б и характеризуются двумя областями. В первой области при температурах до 150–170 K (в зависимости от типа газа и давления в системе) наблюдается резкий рост D_{self} для обоих газов с ростом температуры. В диапазоне температур выше 150–170 K наблюдается медленный рост D_{self}. Диффузионная селективность демонстрирует сложную температурную зависимость с наличием локальных минимума и максимума (рис. 2в). В случае системы с перепадом давления ΔP в 0.1 МПа минимальное значение $S_{N_2/He}^{dif}$, равное 0.07, достигается при 210 K, а максимальное, 0.4, при 110 K. Увеличение ΔP приводит к сглаживанию зависимостей $S_{N_2/He}^{dif}$ от температуры.

Температурная зависимость мембранной селективности $S_{N_2/He}^{mem}$ в диапазоне температур до 320 K при ΔP = 0.1 МПа демонстрирует преобладание адсорбционной селективности над диффузионной (рис. 2в). Уменьшение температуры приводит к монотонному увеличению $S_{N_2/He}^{mem}$ с 0.7 при 400 K до 1991 при 80 K в случае ΔP = 0.1 МПа. Для системы с перепадом давления ΔP = 1 МПа температура насыщенного пара азота T_S соответствует 93.995 K [31], то есть при данной температуре микропоры практически полностью заполнены азотом. При дальнейшем понижении температуры $S_{N_2/He}^{dif}$ будет падать быстрее, чем растет $S_{N_2/He}^{ads}$, что приводит к появлению максимума на температурной зависимости $S_{N_2/He}^{mem}$ при T = 90 K. Таким образом, можно предположить, что аналогичные максимумы должны наблюдаться при температурах насыщенного пара азота для других давлений (при ΔP = 0.3 МПа – T_S = 80.845 K, при ΔP = 0.1 МПа – T_S = 71.826 K).

Температурные зависимости коэффициентов проницаемости по азоту $P_{N_2}^{mix}$ имеют ярко выраженный максимум (рис. 2г), положение которого зависит от давления перед мембранной. Для ΔP = = 0.1 МПа максимум находится при температуре

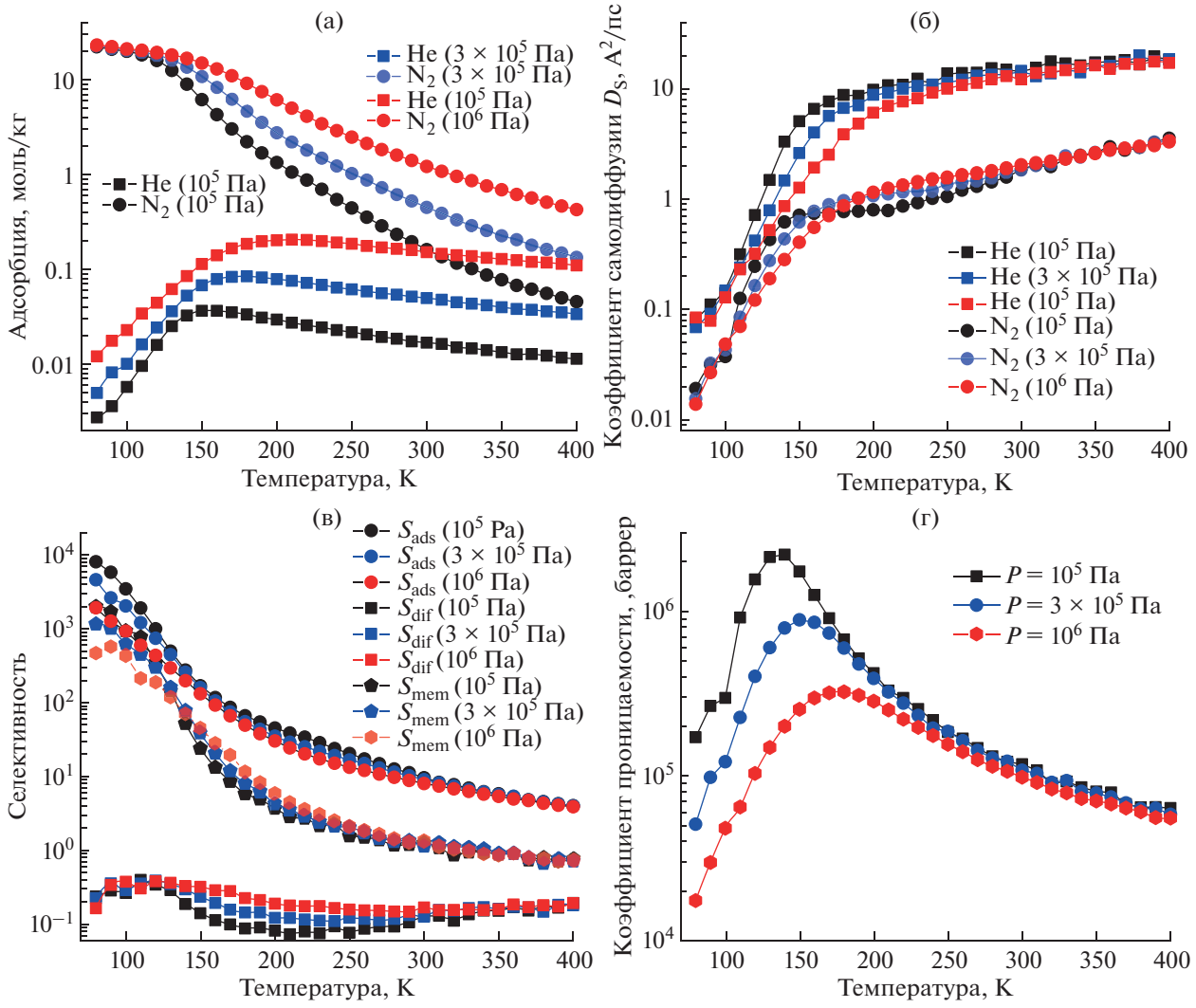

Рис. 2. Температурная зависимость расчетных величин адсорбции (а), коэффициентов самодиффузии (б), селективностей (в) и коэффициентов проницаемости по азоту (г) для эквимолярной смеси N_2 и He в структуре HKUST-1 при давлениях 0.1, 0.3 и 1 МПа в диапазоне температур от 80 до 400 K.

140 K, для $\Delta P = 0.3$ МПа – 150 K и для $\Delta P = 1$ МПа – 180 K. Такая форма температурной зависимости $P_{N_2}^{mix}$ характерна для микропористых мембран [32–34]. В диапазоне от 80 K до локального максимума на температурной зависимости $P_{N_2}^{mix}$ система характеризуется более быстрым ростом подвижности молекул азота при увеличении температуры по сравнению с уменьшением количества адсорбированного компонента. При дальнейшем увеличении температуры наблюдается обратный процесс в результате чего проницаемость падает. При высоких температурах, по всей видимости больше 400 K для данной системы, влияние адсорбции становится незначительным, и температурная зависимость коэффициента проницаемости $P_{N_2}^{mix}$ достигнет локального минимума. Дальнейшее увеличение температуры будет приводить к росту $P_{N_2}^{mix}$.

Рассчитанные температурные зависимости позволяют определить оптимальные условия использования мембран на основе HKUST-1 для разделения эквимолярных смесей гелия и азота. В случае перепада давлений $\Delta P = 0.1$ МПа наибольший коэффициент проницаемости $P_{N_2}^{mix} = 2.1 \times 10^6$ баррер будет наблюдаться при температуре 130 K, причем такая мембрана будет обладать $S_{N_2/He}^{mem} = 145$. Интересно сравнить результаты, полученные в данной работе, с литературными данными. Так, $P_{N_2}^{mix}$ и $S_{N_2/He}^{mem}$ мембраны на основе HKUST-1 при температуре 110 K и $\Delta P = 0.1$ МПа превосходят соответствующие параметры для наиболее перспективных структур, определен-

ных в результате *in silico* скрининга азот-селективных мембран на основе МОКП и силикалитных цеолитов при комнатной температуре для разделения смесей N_2 и He [14]. Мембрана на основе HKUST-1 при температуре 110 K демонстрирует большие значения $S^{mem}_{N_2/He}$ и $P^{mix}_{N_2}$, чем мембраны, изготовленные из цеолита с топологией MFI при оптимальной температуре [15, 16]. Необходимо отметить, что в данной работе рассматривалась модель идеальной мембраны, которая не содержит дефектов упаковки кристаллитов. Наличие таких дефектов будет неизбежно снижать мембранную проницаемость.

ВЫВОДЫ

В работе предложен подход на основе методов молекулярного моделирования, который позволяют предсказывать адсорбционные и диффузионные свойства в широком диапазоне температур и давлений и получать ценную информацию о пригодности данного материала для низкотемпературного разделения N_2/He. На примере мембраны на основе HKUST-1 показано, что подбор оптимальных температурных условий позволяет получить существенное увеличение мембранной селективности и коэффициентов проницаемости по азоту по сравнению с соответствующими параметрами при комнатной температуре. Полученные результаты наглядно демонстрирует, что при проведении исследований по скринингу материалов для задач газоразделения необходимо учитывать условия реального технологического процесса.

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы выражают благодарность Информационно-вычислительному центру Новосибирского государственного университета (ИВЦ НГУ) и Сибирскому суперкомпьютерному центру СО РАН (ЦКП ССКЦ СО РАН) за предоставление суперкомпьютерного оборудования.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-60087.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Rufford T.E. et al.* // Adsorpt. Sci. Technol. 2014. V. 32. № 1. P. 49–72.
2. *Scholes C.A., Ghosh U.* // J. Membr. Sci. 2016. V. 520. P. 221–230.
3. *Dai Z. et al.* // Sep. Purif. Technol. 2021. V. 274. P. 119044.
4. *Scholes C.A.* // Ind. Eng. Chem. Res. 2018. V. 57. № 10. P. 3792–3799.
5. *Alders M., Winterhalder D., Wessling M.* // Sep. Purif. Technol. 2017. V. 189. P. 433–440.
6. *Moghadam P.Z. et al.* // Chem. Mater. 2017. V. 29. № 7. P. 2618–2625.
7. *Chung Y.G. et al.* // J. Chem. Eng. Data. 2019. V. 64. № 12. P. 5985–5998.
8. *Altintas C. et al.* // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2018. V. 10. № 20. P. 17257–17268.
9. *Altintas C. et al.* // J. Mater. Chem. A. 2019. V. 7. № 16. P. 9593–9608.
10. *Solanki V.A., Borah B.* // J. Phys. Chem. C. 2020. V. 124. № 8. P. 4582–4594.
11. *Zarabadi-Poor P., Marek R.* // J. Phys. Chem. C. 2019. V. 123. № 6. P. 3469–3475.
12. *Daglar H., Keskin S.* // Adv. Theory Simul. 2019. V. 2. № 11. P. 1900109.
13. *Budhathoki S. et al.* // Energy Environ. Sci. 2019. V. 12. № 4. P. 1255–1264.
14. *Grenev I.V., Gavrilov V.Yu.* // Molecules. 2022. V. 28. № 1. P. 20.
15. *Ye P. et al.* // AIChE J. 2016. V. 62. № 8. P. 2833–2842.
16. *Yu L. et al.* // J. Membr. Sci. 2022. V. 644. P. 120113.
17. *Chui S.S.* // Science. 1999. V. 283. № 5405. P. 1148–1150.
18. *Cao F. et al.* // Ind. Eng. Chem. Res. 2012. V. 51. № 34. P. 11274–11278.
19. *Lu C. et al.* // Materials. 2018. V. 11. № 7. P. 1207.
20. *Guo Y. et al.* // Chemistry Select. 2016. V. 1. № 1. P. 108–113.
21. *Mayo S.L., Olafson B.D., Goddard W.A.* // J. Phys. Chem. 1990. V. 94. № 26. P. 8897–8909.
22. *Rappe A.K. et al.* // J. Am. Chem. Soc. 1992. V. 114. № 25. P. 10024–10035.
23. *Potoff J.J., Siepmann J.I.* // AIChE J. 2001. V. 47. № 7. P. 1676–1682.
24. *Hirschfelder J.O., Curtiss C.F., Bird R.B.* Molecular theory of gases and liquids. New York: Wiley, 1954. 1219 p.
25. *Nazarian D., Camp J.S., Sholl D.S.* // Chem. Mater. 2016. V. 28. № 3. P. 785–793.
26. *Nazarian D. et al.* // Chem. Mater. 2017. V. 29. № 6. P. 2521–2528.
27. *Dubbeldam D. et al.* // Mol. Simul. 2016. V. 42. № 2. P. 81–101.
28. *Krishna R., van Baten J.M.* // J. Membr. Sci. 2010. V. 360. № 1–2. P. 323–333.
29. *Sava Gallis D.F. et al.* // Chem. Mater. 2015. V. 27. № 6. P. 2018–2025.
30. *Chowdhury P. et al.* // Microporous Mesoporous Mater. 2009. V. 117. № 1–2. P. 406–413.
31. *Span R. et al.* // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2000. V. 29. № 6. P. 1361–1433.
32. *Vaezi M.J. et al.* // Current Trends and Future Developments on (Bio-) Membranes. Elsevier, 2019. P. 185–203.
33. Handbook of Membrane Separations: Chemical, Pharmaceutical, Food, and Biotechnological Applications. 0 ed. / ed. Pabby A.K., Rizvi S.S.H., Requena A.M.S. CRC Press, 2008.
34. *Zito P.F. et al.* // J. Membr. Sci. 2018. V. 564. P. 166–173.