

УДК 544.773.3

ВЛИЯНИЕ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ПОДВИЖНОСТЬ УГЛЕВОДОРОДА В УЗКИХ ПОРАХ В ПРИСУТСТВИИ ВОДЫ

© 2022 г. И. В. Копаничук^{1, 2}, А. М. Вишняков^{1, *}, А. А. Сизова²,
В. В. Сизов², А. А. Ванин², Е. Н. Бродская²

¹Сколковский институт науки и технологий,
Большой бульвар, 30, стр. 1, Москва, 121205 Россия

²Санкт-Петербургский государственный университет,
Университетская наб., 7, Санкт-Петербург, 199034 Россия

*e-mail: a.vishnyakov@skoltech.ru, shibboleth@list.ru

Поступила в редакцию 12.04.2022 г.

После доработки 25.05.2022 г.

Принята к публикации 26.05.2022 г.

Методом молекулярной динамики исследовалось влияние стандартных поверхностно-активных веществ и других применяющихся в нефтедобыче добавок на подвижность в жидкости, которая находится в контакте с очень тонким (сравнимым с молекулярными размерами) слоем, сорбированном на аффинной к последнему твердой подложке. Изучались как гидрофильная поверхность с тонким слоем воды в контакте с деканом, так и гидрофобная с сорбированным тонким слоем декана, находящимся в контакте с водой. ПАВ улучшают смачиваемость на границе вода–декан и тем самым понижают подвижность жидкостей. При этом не удается построить корреляцию с эффективными объемами гидрофильных и гидрофобных групп, что означает, что ограничение подвижности не обусловлено лишь механическим препятствием, создаваемым малоподвижными молекулами добавок. Влияние добавок, растворимых в декане, на подвижность оказалось незначительным.

DOI: 10.31857/S0023291222040139

ВВЕДЕНИЕ

Поверхностно-активные вещества (ПАВ) все шире применяются при добыче нефти [1]. Изначально предложенное для месторождений с преобладанием песчаников, заводнение растворами ПАВ распространилось на другие типы коллекторов, в т.ч. карбонатные [2–4]. Основное назначение ПАВ – понизить поверхностное натяжение на межфазных границах нефть–вода и нефть–минерал, и тем самым изменить контактные углы и смачиваемость, облегчая фильтрацию скважинной жидкости через поровое пространство. Актуальность ПАВ увеличилась в свете попыток извлечь углеводороды из субмикронных пор, где для вытеснения смачивающей жидкости требуется очень большое капиллярное давление, которое сильно снижается применением ПАВ.

Известно, что транспорт жидкости в узких порах ухудшается, когда взаимодействия сорбат-сорбент становятся более благоприятными. Это относится и к коэффициентам самодиффузии, и к течениям в порах, возникающим под действием внешних сил [5–7]. Например, Виноградова с соавт. [7] измеряли профили скорости жидкости в

микрочанале с несмачивающими стенками и наблюдали проскальзывание жидкости на границе со стенкой, но таких эффектов никогда не наблюдается в смачивающих порах, где плоскость сдвига может находиться внутри жидкой фазы. Особым случаем является вытеснение абсолютно смачивающей жидкости под действием капиллярных сил: она не полностью уходит из поры, но оставляет очень тонкую (сравнимую по толщине с молекулярным размером) альфа-пленку: условие механического равновесия определяется равенством поверхностных и капиллярных сил. Вытесняющая фаза такую пленку, конечно, не смачивает. Присутствие ПАВ уменьшает межфазное натяжение на такой границе, а следовательно, и мобильность жидкости. Мы полагаем, что с помощью молекулярного моделирования можно прояснить некоторые детали механизмов обоих процессов, чтобы облегчить поиск оптимальных добавок для нужд индустрии. Хотя молекулярное моделирование уже активно используется для решения подобных задач, в имеющихся работах по теме делается акцент либо на неравновесных про-

Таблица 1. Рассмотренные добавки, тип поведения

Наименование компонента	Формула	Класс	Тип поведения в порах со стенками SiO ₂ и деканом в середине	Тип поведения в порах с углеродными стенками и водой в середине
Бромид тетраэтил-аммония (ТЭАБ)	Et ₄ N ⁺ Br ⁻	Ионная жидкость	Адсорбирован на стенке	Растворен в воде и адсорбирован на поверхности вода-декан
Бромид цетилтриметиламмония (ЦТАБ)	C ₁₆ (NMe ₃) ⁺ Br ⁻	Катионное ПАВ	Хвост в декане, голова и противоион на стенке/в тонкой водной пленке	Хвост адсорбирован на стенке, голова на поверхности раздела, противоион в водной фазе (ДЭС)
Додecil-сульфат натрия (SDS)	C ₁₂ SO ₄ Na ⁺	Анионное ПАВ	—“—	—“—
Стеарат натрия	C ₁₇ COO ⁻ Na ⁺	—“—	—“—	—“—
Октанол	C ₈ OH	Неионное ПАВ	Хвост в декане, голова на стенке/в тонкой водной пленке	Хвост адсорбирован на стенке, голова на поверхности раздела
Алкиловый эфир полиэтиленгликоля	C ₁₂ (CH ₂ OCH ₂) ₈ OH	Неионное ПАВ	—“—	—“—
1,2-Дихлорэтан	Cl(CH ₂) ₂ Cl	Гидрофобная добавка	Растворение в декане, адсорбция на поверхности декан-вода	Адсорбирован на стенке
1,2-Дифторэтан	F(CH ₂) ₂ F			
1,4-Дихлорбутан	Cl(CH ₂) ₄ Cl			
1,4-Дихлорбензол	C ₆ H ₄ Cl ₂			

цессах [8–12], либо на форме и размере щели [13–15].

В настоящей работе мы моделируем подвижность воды в узкой гидрофобной поре, стенки которой смочены деканом, и наоборот, декана в гидрофильных порах, смоченных водой, в присутствии типовых ПАВ и используемых в нефтедобыче добавок, изменяющих смачиваемость минеральных поверхностей. Ранее подобное исследование было проведено Жангом и соавт. [16], правда, они не рассматривали роль добавок, ограничившись деканом и водой. На практике размеры пор, в которых актуально применение ПАВ, недоступны для молекулярного моделирования. Предпринятое в данной работе моделирование границы раздела направлено на улучшение понимания молекулярной структуры поверх-

ностных слоев и мобильности компонентов вблизи границы. В работе мы рассматриваем практически применяемые ПАВ и модифицирующие смачиваемость добавки, сведенные в табл. 1. Формулы представлены на рис. 1.

МОДЕЛИ И МЕТОДЫ

Молекулярно-динамическое моделирование проводилось с использованием программного пакета GROMACS 2019.3 [17]. Для описания молекулы воды была выбрана модель SPC/E [18]. Молекулы органических веществ описывались с использованием силового поля GROMOS96 (набор параметров 53A6) [19]. Это огрубленная неполяризуемая модель, в которой каждая CH₃, CH₂ или CH-группа представлялась одним леннард-джон-

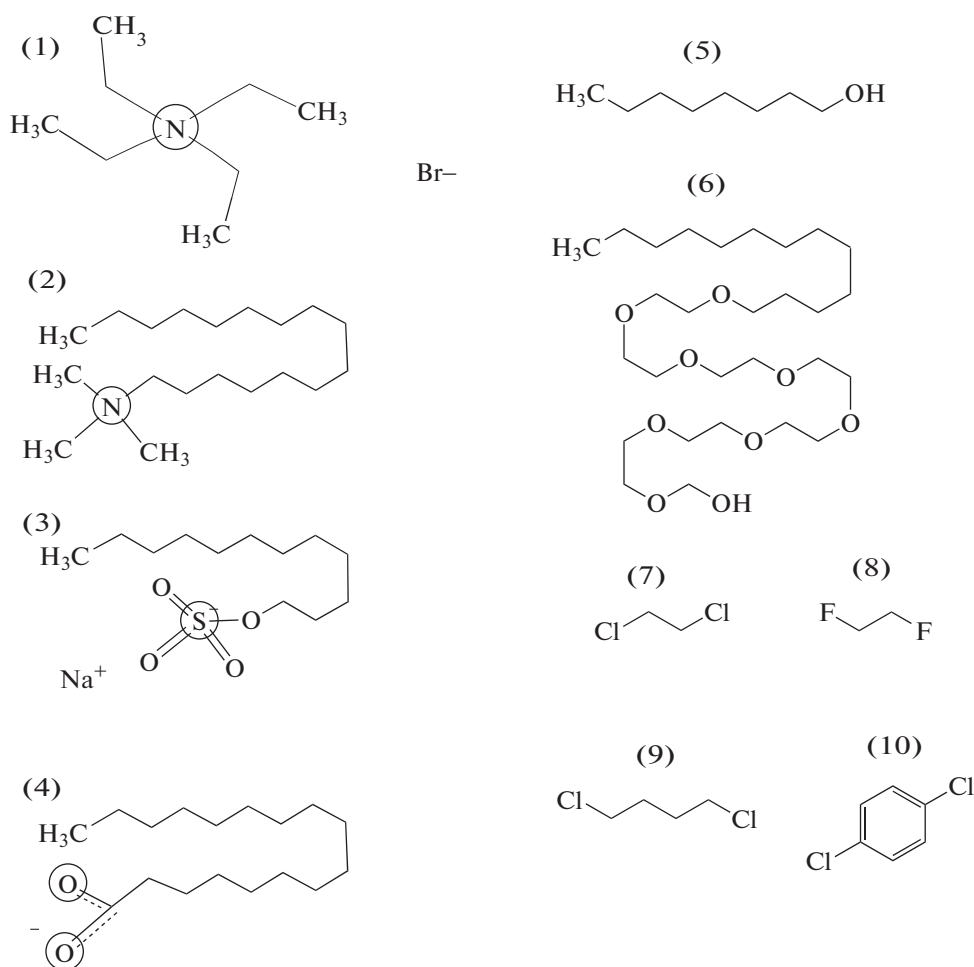


Рис. 1. Добавки, рассмотренные в статье: (1) бромид тетраэтиламмония, (2) бромид цетилтриметиламмония, (3) додецилсульфат натрия, (4) стеарат натрия, (5) октанол, (6) додециловый эфир полиэтиленгликоля $C_{12}E_8$, (7) 1,2-дихлорэтан (8) 1,2-дифторэтан, (9) 1,4-дихлорбутан, (10) 1,4-дихлорбензол.

совским центром взаимодействия, а электростатические взаимодействия описаны моделью точечных зарядов, совпадающих с центрами атомов. Шаг интегрирования в использованном в алгоритме Верле равнялся 2 фс. Электростатические взаимодействия рассчитывались по методу PME [20], мы убедились в электронейтральности системы. Радиусы обрезания для сил электростатического взаимодействия и сил Ван-дер-Ваальса составляли 1.0 нм. Хотя в целом известно, что увеличение размера ячейки и радиуса обрезания несколько уменьшает поверхностное натяжение, в рамках данной работы, где ставились лишь качественные задачи, это несущественно, поэтому эти параметры не менялись. Все траектории и конфигурации были проанализированы с использованием приложения VMD [21] и собственного программного обеспечения, разработанного с использованием библиотеки JGROMACS [22].

Начальная конфигурация во всех случаях представляла случайную смесь жидких компонентов в

силикатной или углеродной поре, получаемую с помощью собственной программы. Система уравнивалась в течение 5 нс в каноническом ансамбле при температуре 298.15 К с помощью метода Нозе. Для каждой системы объем фиксировался. Так как баростатирование в модели с постоянными координатами твердого тела невозможно, объем просто подгонялся таким образом, чтобы плотность водной или органической фазы соответствующего состава в середине поры соответствовала давлению объемной фазы около 50 МПа (типичное пластовое давление). Выход на равновесный режим был подтвержден текущим средним профилем плотности: их постоянство свидетельствовало о том, что структура системы перестала изменяться. Чистовые расчеты профилей плотности и коэффициентов диффузии были проведены по равновесной траектории длиной 30 нс с выдачей значений каждую 1 пс. На рис. 2 показано, что такой длины траектории заведомо достаточно для получения достоверных средних зна-

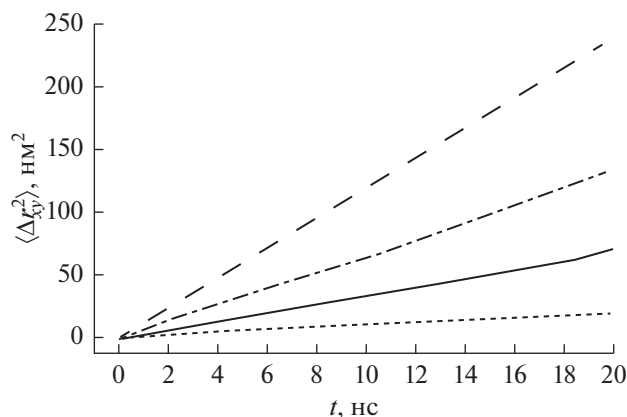


Рис. 2. Средний квадрат смещения частиц в углеродной поре. Сплошная линия — катион цетилтриметиламмония, черточки — вода, точки — декан, точкати — бромид-ионы.

чений коэффициента продольной диффузии в рассмотренных системах.

Соотношение объемных долей декана и воды в силикатных порах равнялось 4 : 1, а в углеродных порах, наоборот, 1 : 4. Соотношение было выбрано по результатам работы [23], таким образом, чтобы исключить образование капель с искривленной поверхностью, что обесмыслило бы расчеты коэффициентов продольной диффузии. Объемная доля добавки варьировалась от 2 до 10% для каждого вещества, что значительно превышает средние концентрации при практическом применении ПАВ. Такой подход обусловлен тем, что мы рассматриваем лишь поверхностных слой, где сконцентрированы ПАВ и добавки. Поверхностные концентрации при максимальной общей концентрации несколько меньше адсорбированного монослоя, то есть примерно соответствуют практическим поверхностным концентрациям.

Для моделирования гидрофобной среды мы использовали щелевидную пору с графитообразными кристаллическими стенками, параллельными оси z . Каждая стенка состояла из трех слоев атомов углерода, причем внешние слои адсорбента (т.е. те, которые находятся в непосредственном контакте с поровой жидкостью) активировались гидроксильными группами с поверхностной плотностью 0.17 нм^{-2} , чтобы нарушить идеально-слоистую структуру жидкости вблизи стенок, чего не наблюдается в экспериментах [24]. Размер графеновых плоскостей составлял $9.56 \times 9.94 \text{ нм}$. Параметры Леннард-Джонса для атомов были взяты из потенциала Стила [25] и силового поля OPLS [26, 27], в то время как заряды были получены из квантовохимических расчетов [28]. Координаты атомов твердого тела фиксировались.

Гидрофильный адсорбент был представлен кремнистым материалом со щелевыми порами

со стенками, состоящими из частично гидроксильного аморфного кремнезема. Размер каждой стенки пор кремнезема составлял $9.49 \times 9.49 \times 1.1 \text{ нм}$; поверхностная плотность ОН-групп составляла 2.25 нм^{-2} . Параметры взаимодействия были взяты из силового поля, предложенного Эмами и др. [29], которое широко используется при моделировании различных материалов на основе кремнезема. Приблизительные размеры в нормальном направлении (варьировались от системы к системе) соответствовали 7.15 нм . Таким образом, в одной системе было примерно 75000 атомов.

Стенки были построены симметрично друг другу, и флюид был заключен между “лицевыми” поверхностями. Во всех трех направлениях (и нормальном, и латеральном) накладывались периодические граничные условия. Задние поверхности твердых блоков (т.е. не контактировавшие с флюидом) просто соприкасались друг с другом.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Рис. 3 показывает распределение компонентов по ширине поры в наиболее характерных рассматриваемых системах, а рис. 4 демонстрирует молекулярные конфигурации в системе вода–декан– C_{12}E_8 . Везде образовались системы с тонкими равномерными пленками воды (в гидрофильных порах) или декана (в гидрофобных порах) вблизи стенок. Остальное пространство занято более толстой пленкой второй (несмачивающей) фазы, на рис. 4 это декан. Добавки, рассмотренные здесь, имеют разный размер молекул и разную аффинность к декану и воде. Все они распределяются между пленками, концентрируясь в основном на поверхности раздела декан–вода. Чем меньше молекула добавки и слабее контраст между гидрофобной и гидрофильной частью, тем слабее выражено такое поведение. Очевидно также, что размер гидрофильных и гидрофобных фрагментов молекул добавок сильно отличается, поэтому влияние их на мобильность декана и воды несимметрично. Ниже мы отдельно разберем поры с гидрофильными и гидрофобными стенками.

В гидрофобных порах тонкая пленка на поверхности образована деканом, а вода образует более толстую пленку (4 нм) в центральной части. В отсутствие добавок пленка декана практически монослойная. При сорбции добавок их гидрофобные фрагменты несколько увеличивают объем углеводородной пленки, но все равно она не образует и двух полных атомных слоев, что типично для альфа-пленок. Даже самые маленькие молекулы рассмотренных добавок по размеру все же превышают толщину пленки или по крайней мере сравнимы с ней. Соответственно, физическая картина далека от сорбции ПАВ на поверхности раздела двух жидкостей: добавки сорбиру-

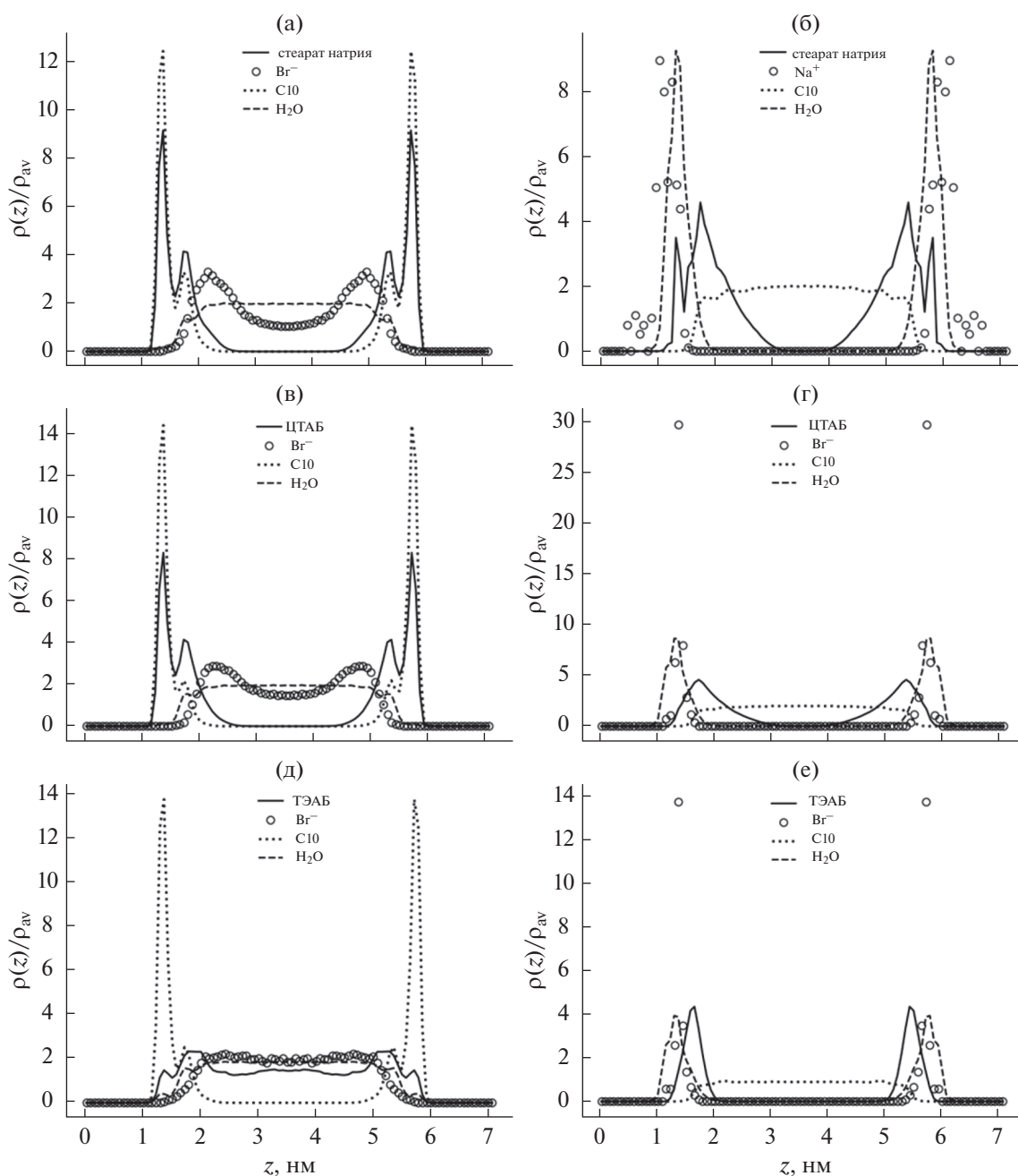


Рис. 3. Типичные профили плотности, отражающие распределение компонентов системы по ширине поры, полученные при моделировании систем декан–вода в пористых материалах различной природы с различными малыми добавками. Левый столбец – углеродный пористый материал, правый столбец – силикатный пористый материал, верхний ряд – добавка стеарата натрия, второй ряд – добавка бромид цетилтриметиламмония (ЦТАБ), нижний ряд – добавка ТЭАБ.

ются непосредственно на стенке, “разбавляя” слой декана. Их подвижность тоже крайне ограничена. Профили плотности и примеры молекулярных конфигураций показывают наличие контакта молекул добавок со стенкой для всех систем (рис. 3, 4). Гидрофильные группы либо находятся на поверхности с водной пленкой, либо погруже-

ны в нее, в зависимости от объема и формы гидрофильного сегмента. Например, для неионного ПАВ $C_{12}E_8$ с линейным гидрофильным сегментом профиль плотности ПАВ соответствует короткому гидрофильному клубку полиэтиленоксида, прикрепленному к поверхности водной пленки. Для ПАВ с меньшей длиной гидрофильного фрагмен-

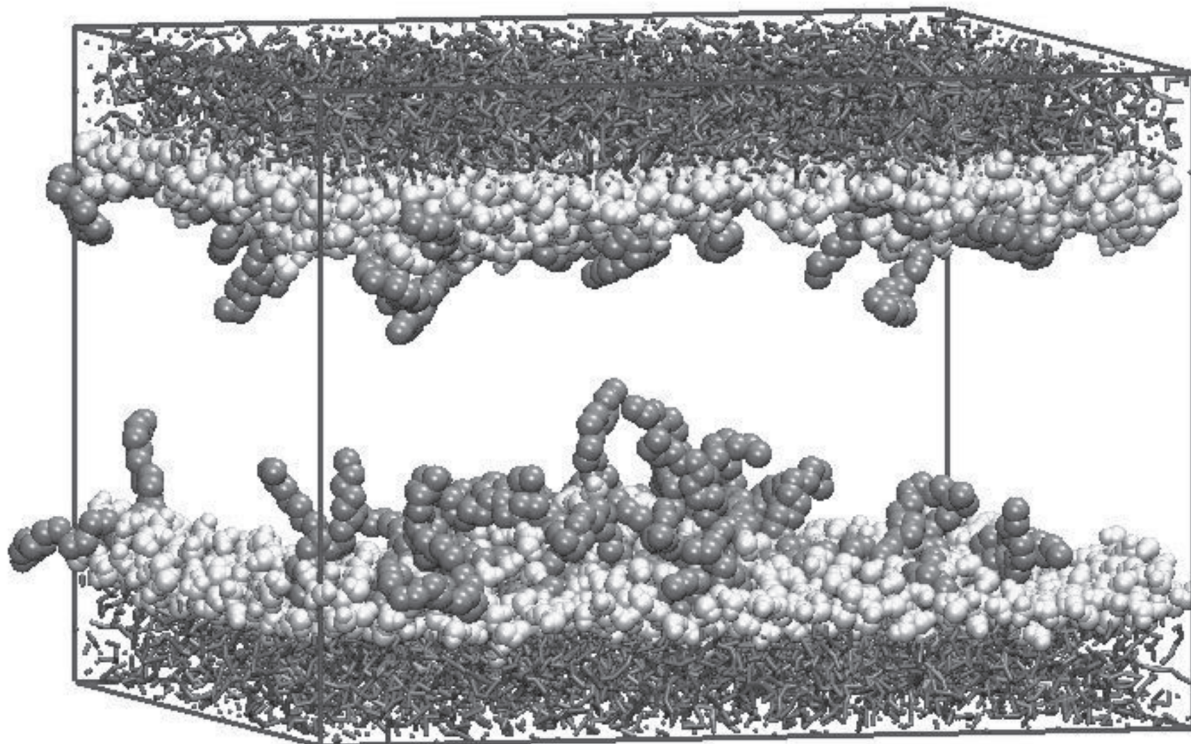


Рис. 4. Молекулярная конфигурация в силикатной поре при моделировании добавки неионного ПАВ $C_{12}E_8$. Черточки – оксид кремния, светлые молекулы – вода, темные молекулы – $C_{12}E_8$, декан не показан.

та, например ЦТАБ (рис. 3а, 3б), на профиле плотности можно явно выделить гидрофобный хвост, сорбированный в декановой пленке, и гидрофильную голову на поверхности водной пленки, как и для стеарата натрия, октанола, SDS. Противоионы (бромид анион для ЦТАБ и ТЭАБ, натриевый катион SDS) формируют двойной электрический слой (рис. 3). Особое положение занимает ТЭАБ, который растворим в воде, но не в декане. Его молекулы почти не соприкасаются с поверхностью твердого тела. Профили плотности (рис. 3) обнаруживают определенную поверхностную активность за счет взаимодействия этиловых групп с деканом, но в целом ТЭАБ скорее растворен в воде и поэтому подвижен.

Внесение в систему поверхностно-активных или объемных добавок ожидаемо привело к уменьшению подвижности воды (рис. 5), усиливающемуся с ростом концентрации добавки. Слабее всего этот эффект выражен для гидрофобных объемных добавок, не являющихся поверхностно-активными веществами (дихлорбензол, дихлорэтан), они практически не влияют на водную фазу. Самое значительное снижение подвижности вызвал ТЭАБ, но это объемный, а не поверхностный эффект: в во-

ду добавляется компонент с большим молекулярным объемом и соответственно меньшей подвижностью. Молекулы ПАВ, концентрирующиеся на поверхности, играют роль “якоря”, зацепляющегося за обе фазы и тем самым создающего в них препятствие для движения других молекул. Можно было бы ожидать, что снижение подвижности воды симбатно объему или длине гидрофильного сегмента (например, погруженная в воду цепочка $C_{12}E_8$ с маломобильным якорем в виде хвоста вызовет наибольшее снижение подвижности воды в пленке). Однако никакой четкой зависимости от объема гидрофильного сегмента увидеть не удалось (отметим, что для ионных ПАВ эффективные гидродинамические размеры гидрофильных групп больше собственно молекулярных объемов за счет гидратации ПАВ и противоиона). Эффект ограничения подвижности воды от $C_{12}E_8$ – действительно один из сильнейших, а от октанола (ПАВ с маленькой гидрофильной группой) – самый слабый из рассмотренных. Но результаты, полученные для ионных ПАВ, не удастся объяснить геометрическими соображениями. В частности, ЦТАБ с довольно крупной гидрофильной группой (а стоит учесть еще и объемный эффект гидра-

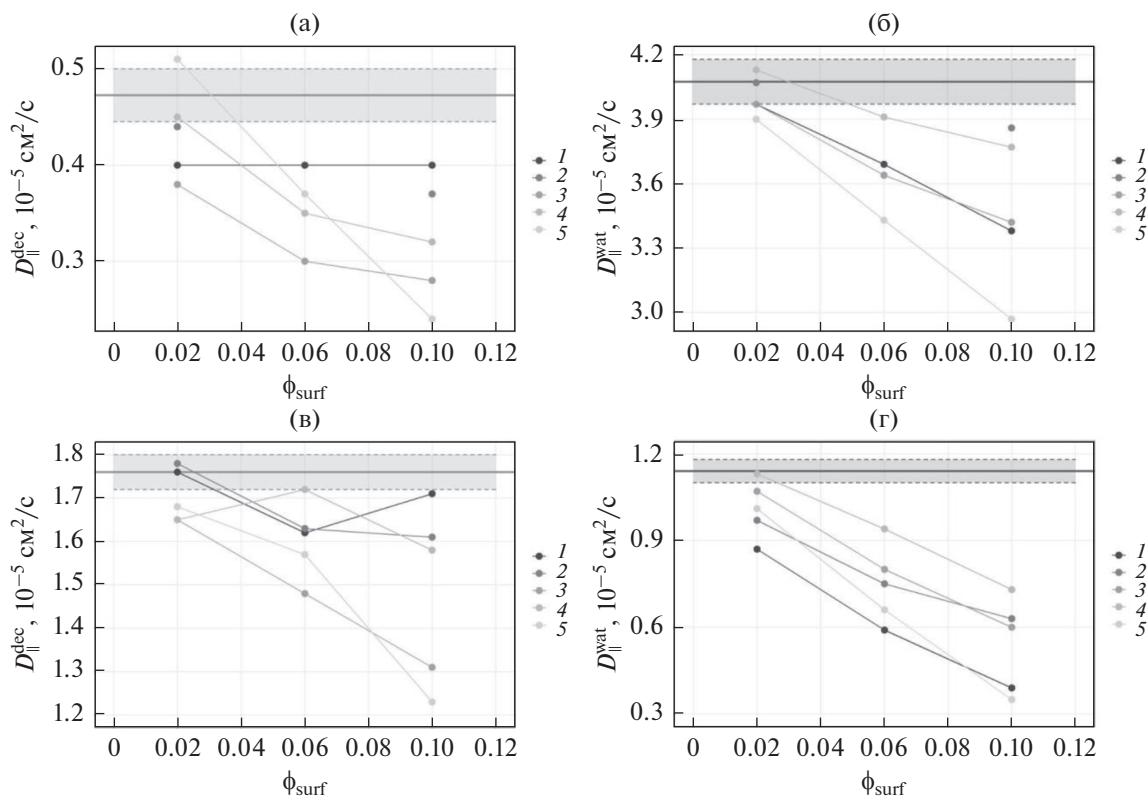


Рис. 5. Расчетные коэффициенты продольной диффузии декана (левый столбец) и воды (правый столбец), полученные при молекулярно-динамическом моделировании системы декан–вода в силикатном (верхний ряд) и углеродном (нижний ряд) пористых материалах при температуре 303 К в отсутствие и в присутствии различных добавок. Объемное соотношение декана и воды в смеси: 80/20 для силикатного материала и 20/80 для углеродного материала. По горизонтальной оси отложена объемная доля добавки в системе. Горизонтальные линии соответствуют значениям коэффициентов диффузии в системах, не содержащих добавок; заливка показывает расчетную погрешность определения этих значений. Природа добавок отражена на рисунках в легенде: 1 – ТЭАБ, 2 – C_{12}E_8 , 3 – октанол-1, 4 – стеарат натрия, 5 – ЦТАБ.

тированного противоиона) замедляет диффузию лишь незначительно, ненамного сильнее, чем октанол. Влияние SDS на подвижность воды значительно сильнее при схожем объеме группы, а замедление диффузии, вызванное добавкой стеарата натрия, близко к вызванному C_{12}E_8 , хотя объем гидрофильной группы у стеарата меньше, чем у SDS (при наличии того же противоиона) и меньше, чем у C_{12}E_8 .

Рис. 3 также сравнивает профили плотности в системах с ионными ПАВ. Видно, что прямого объяснения разного влияния на подвижность профили плотности не дают: они более-менее похожи для всех трех ПАВ, а замедление подвижности сильно отличается. Таким образом, влияние ПАВ на подвижность воды, хотя и очевидно вызвано изменением молекулярной структуры, невозможно объяснить примитивными геометрическими соображениями, и необходимо измерять или предсказывать непосредственно их моделированием.

В гидрофильных порах ситуация много сложнее, выделить влияние различных явлений зачастую невозможно. За счет относительно маленьких размеров гидрофильных фрагментов они часто не вступают в непосредственный контакт со стенками, а скорее располагаются на поверхности тонкой водной альфа-пленки и декана. Водная пленка, несмотря на сильное адсорбционное взаимодействие с поверхностью и малую толщину, не может считаться статичной: в отсутствие добавок коэффициент диффузии в ней около 1.2×10^{-9} против $1.7 \times 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$ в декане. Поэтому ПАВ не играет роль статичного якоря. Более того, заметно обратное влияние ПАВ на подвижность в водной пленке (рис. 5): оно почти незаметно для растворимых в декане добавок (галоуглеводородов) и заметнее всего для стеарата натрия и ТЭАБ. Профили плотности показывают, что именно гидрофильная группа стеарата натрия и ТЭАБ глубоко проникает в водную пленку и входит в контакт с поверхностью. Рис. 3 показы-

вает профили плотности ТЭАБ и ЦТАБ в гидрофильной поре: различие очевидно. Гидрофильная группа стеарата натрия располагается к поверхности еще ближе, чем гидрофильная голова ЦТАБ. ТЭАБ, как растворимая в воде добавка с крупной молекулой, встроена в водную пленку

Влияние стеарата натрия и ЦТАБ на подвижность декана также оказалось самым сильным. И если в случае стеарата это легко объяснимо: его молекула является “якорем” и имеет самый длинный алкильный хвост, то ТЭАБ очень ровно концентрируется на поверхности и глубоко в декановую пленку не проникает.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе изучались смачивание и мобильность компонентов в жидкости, которая находится в контакте с очень тонким (сравнимым с молекулярными размерами [30]) слоем, сорбированном на аффинной к последнему твердой подложке в присутствии ПАВ и других добавок, применяемых в нефтедобыче. Продемонстрировано три эффекта, влияющих на подвижность жидкости в пленке (1) “якорный”, возникающий ввиду адсорбции ПАВ на неподвижной стенке и тем самым понижающий мобильность жидкости в жидкой пленке; (2) поверхностный, то есть улучшение смачиваемости на границе между жидкостью и твердый адсорбентом с находящимся на ней тонким аффинным слоем, которое приводит к понижению мобильности; (3) объемный, за счет растворения добавки в жидкости, который невелик. В целом следует отметить низкую чувствительность систем “углеводород–вода–пористый материал” к внесению небольших добавок поверхностно-активных веществ. Возможно, это связано с взаимной компенсацией якорного и поверхностного факторов. При этом характер влияния поверхностно-активных веществ на подвижность декана и воды определялся не столько формальной природой ПАВ (катионные/анионные/неионные), сколько индивидуальными структурными особенностями их молекул и вытекающей из этих особенностей спецификой распределения ПАВ по объему системы.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 18-03-01238-а. Расчеты проводились на суперкомпьютере Жорес [31], построенного с помощью поддержки Фонда Сколково. Каждая задача считалась на 8 ядрах одной ноды Intel C4140 и одной GPU Nvidia Volta в течение 10 часов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Sheng J.J.* // *Petroleum*. 2015. V. 1. № 2. P. 97–105.

2. *Kamal M.S., Hussein I.A., Sultan A.S.* // *Energy & Fuels*. 2017. V. 31. № 8. P. 7701–7720.
3. *Pal S., Mushtaq M., Banat F., Al Sumaiti A.M.* // *Petroleum Science*. 2018. V. 15. № 1. P. 77–102.
4. *Yao Y., Wei M.Z., Kang W.L.* // *Advances in Colloid and Interface Science*. 2021. V. 294. № P. 25.
5. *Feuillebois F., Bazant M.Z., Vinogradova O.I.* // *Physical Review Letters*. 2009. V. 102. № 2. P. 4.
6. *Malkin A.Y., Zuev K.V., Arinina M.P., Kulichikhin V.G.* // *Energy & Fuels*. 2018. V. 32. № 11. P. 11991–11999.
7. *Vinogradova O.I., Koynov K., Best A., Feuillebois F.* // *Physical Review Letters*. 2009. V. 102. № 11. P. 4.
8. *Fang T.M., Zhang Y.N., Ding B., Yan Y.G., Zhang J.* // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2020. V. 153. № P. 9.
9. *Geng X.R., Yu M., Zhang W., Liu Q.W., Yu X.P., Lu Y.* // *Scientific Reports*. 2019. V. 9. № P. 8.
10. *Wang S., Javadpour F., Feng Q.H.* // *Fuel*. 2016. V. 171. № P. 74–86.
11. *Zhan S.Y., Su Y.L., Jin Z.H., Wang W.D., Cai M.Y., Li L., Hao Y.M.* // *Journal of Molecular Liquids*. 2020. V. 311. № P. 10.
12. *Zhan S.Y., Su Y.L., Jin Z.H., Zhang M.S., Wang W.D., Hao Y.M., Li L.* // *Chemical Engineering Journal*. 2020. V. 395. P. 13.
13. *Du F.S., Nojabaei B.* // *Journal of Petroleum Science and Engineering*. 2020. V. 193. № P. 12.
14. *Simonnin P., Noetinger B., Nieto-Draghi C., Marry V., Rotenberg B.* // *Journal of Chemical Theory and Computation*. 2017. V. 13. № 6. P. 2881–2889.
15. *Zhou M.S., Li S.M., Lu L.H., Cao W., Wang S.S., Xie W.L.* // *Molecular Simulation*. 2020. V. 46. № 8. P. 604–615.
16. *Zhang W., Feng Q.H., Wang S., Xing X.D.* // *Journal of Molecular Liquids*. 2019. V. 290. № P. 9.
17. *Abraham M.J., Murtola T., Schulz R., Páll S., Smith J.C., Hess B., Lindahl E.* // *SoftwareX*. 2015. V. 1–2. P. 19–25.
18. *Berendsen H.J.C., Grigera J.R., Straatsma T.P.* // *The Journal of Physical Chemistry*. 1987. V. 91. № 24. P. 6269–6271.
19. *Oostenbrink C., Villa A., Mark A.E., Van Gunsteren W.F.* // *Journal of Computational Chemistry*. 2004. V. 25. № 13. P. 1656–1676.
20. *Essmann U., Perera L., Berkowitz M.L., Darden T., Lee H., Pedersen L.G.* // *Journal of Chemical Physics*. 1995. V. 103. № 19. P. 8577–8593.
21. *Humphrey W., Dalke A., Schulten K.* // *Journal of Molecular Graphics & Modelling*. 1996. V. 14. № 1. P. 33–38.
22. *Munz M., Biggin P.C.* // *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2012. V. 52. № 1. P. 255–259.
23. *Kopanichuk I.V., Berezhnaya A.S., Sizova A.A., Vanin A.A., Sizov V.V., Brodskaya E.N.* // *Colloids and Surfaces A – Physicochemical and Engineering Aspects*. 2020. V. 601. P. 10.

24. *Ravikovitch P.I., Vishnyakov A., Neimark A.V., Carrott M.R., Russo P.A., Carrott P.J.* Langmuir. 2006. V. 22. № 2. P. 513–516.
25. *Steele W.A.* // The Interaction of Gases with Solid Surfaces. 1974, Oxford: Pergamon Press.
26. *Jorgensen W.L.* // The Journal of Physical Chemistry. 1986. V. 90. № 7. P. 1276–1284.
27. *Jorgensen W.L., Madura J.D., Swenson C.J.* // Journal of the American Chemical Society. 1984. V. 106. № 22. P. 6638–6646.
28. *Sizov V.V., Piotrovskaya E.M., Brodskaya E.N.* // Russian Journal of Physical Chemistry A. 2007. V. 81. № 8. P. 1285–1291.
29. *Emami F.S., Puddu V., Berry R.J., Varshney V., Patwardhan S.V., Perry C.C., Heinz H.* // Chemistry of Materials. 2014. V. 26. № 8. P. 2647–2658.
30. *Vishnyakov A., Li T., Neimark A.V.* // Langmuir. 2017. V. 33. № 45. P. 13148–13156.
31. *Zacharov I., Arslanov R., Gunin M., Stefonishin D., Bykov A., Pavlov S., Panarin O., Maliutin A., Rykovanov S., Fedorov M.* // Open Engineering. 2019. V. 9. P. 512–520.