

ISSN 1561-8323 (Print)
ISSN 2524-2431 (Online)

ХИМИЯ
CHEMISTRY

УДК 541.23/25 : 544.35 : 543.3
<https://doi.org/10.29235/1561-8323-2019-63-6-695-703>

Поступило в редакцию 17.04.2019
Received 17.04.2019

**Академик В. С. Солдатов¹, Д. Н. Давлюд², Т. В. Безъязычная¹, Е. В. Воробьева²,
Е. Г. Косандрович¹, П. Д. Воробьев²**

¹*Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси,
Минск, Республика Беларусь*

²*Институт общей и неорганической химии Национальной академии наук Беларуси,
Минск, Республика Беларусь*

**СОСТОЯНИЕ ИОНОВ И МОЛЕКУЛ ВОДЫ В ВОДНО-СОЛЕВЫХ РАСТВОРАХ
ПОЛИАКРИЛАМИДА И СОПОЛИМЕРА «АКРИЛАМИД–Na/K СОЛЬ
АКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ»**

Аннотация. Геометрические и электронные параметры молекулярных моделей микросостояний полиакриламида и сополимера акриламида с акриловой кислотой в водных растворах хлоридов натрия и калия были рассчитаны неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО с использованием базиса MINI Huzinaga. Модели содержали четыре мономерных звена полимеров, 80 молекул воды и по две пары ионов Na⁺ и Cl⁻ или K⁺ и Cl⁻. Показано, что принципиальная разница в гидратационных свойствах Na⁺ и K⁺ состоит в том, что длина связи Na⁺...O²⁻ короче суммы радиусов взаимодействующих ионов, а K⁺...O²⁻ – равна или больше. Это свидетельствует о том, что в первом случае связь частично ковалентная, а во втором – чисто электростатическая. Все элементы молекулярных моделей в обоих случаях объединены между собой межмолекулярными связями, образующими непрерывную пространственную сеть, в которую без искажения ее структуры встраиваются молекулы полимеров, имеющие в своем составе кислородсодержащие группы. Это и является причиной хорошей растворимости изученных полимеров в водно-солевых растворах.

Ключевые слова: полиакриламид, водорастворимые полимеры, анионные полимеры, квантово-химический расчет, гидратная структура, солевые растворы

Для цитирования: Состояние ионов и молекул воды в водно-солевых растворах полиакриламида и сополимера «акриламид–Na/K соль акриловой кислоты» / В. С. Солдатов [и др.] // Докл. Нац. акад. наук Беларуси. – 2019. – Т. 63, № 6. – С. 695–703. <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2019-63-6-695-703>

**Academician Vladimir S. Soldatov¹, Daria N. Davlyud², Tatiana V. Bezyazychnaya¹, Elena V. Vorobieva²,
Evgenii G. Kasandrovich¹, Pavel D. Vorobiev²**

¹*Institute Physical Organic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus*

²*Institute of General and Inorganic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Republic of Belarus*

**STATE OF IONS AND WATER MOLECULES IN THE WATER SALT SOLUTIONS OF
POLYACRYLAMIDE AND CO-POLYMER OF “ACRYLAMIDE– ACRYLIC ACID Na/K SALT”**

Abstract. Geometrical and electronic parameters of the microstates of the molecular models of polyacrylamide and co-polymers of acrylamide-acrylic acid in aqueous solutions of sodium and potassium chlorides were computed by the non-empirical SCF MO LCAO method with the use of the basis MINI Huzinaga. The models contained four monomeric units of the polymer, including two metal carboxylate groups, 80 water molecules and two pairs of ions Na⁺ and Cl⁻ or K⁺ and Cl⁻. It follows from the calculation results that there is a principal difference in the hydration of Na⁺ and K⁺: the Na⁺...O²⁻ bond is shorter than the sum of the radii of the interacting ions, while the K⁺...O²⁻ bond is equal or longer. This indicates that in the first case, the bonds are partially covalent, while in the second one they are pure electrostatic. All elements of the molecular models in the both cases are combined by the intermolecular bonds forming a spatial net. The polymer molecules have a flexible chain with oxygen containing functional groups that are built into the structure of the salt solutions without distorting it. We assume that this is the main reason for the good solubility of the studied polymers in the aqueous salt solutions.

Keywords: polyacrylamide, water-soluble polymers, anionic polymers, quantum chemical calculations, hydrate structure, saline solutions

For citation: Soldatov V. S., Davlyud D. N., Bezyazychnaya T. V., Vorobieva E. V., Kasandrovich E. G., Vorobiev P. D. State of ions and water molecules in the water salt solutions of polyacrylamide and co-polymer of “acrylamide–acrylic acid Na/K salt”. *Doklady Natsional'noi akademii nauk Belarusi = Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*, 2019, vol. 63, no. 6, pp. 695–703 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8323-2019-63-6-695-703>

Введение. Полиакриламид и сополимеры акриламида с солями акриловой кислоты широко используются в процессах обезвоживания и концентрирования дисперсных систем, для очистки природных и промышленных сточных вод от взвешенных частиц [1–3]. В частности, в калийной промышленности они применяются в качестве флокулянтов глинисто-солевых дисперсий, насыщенных хлоридами калия и натрия [4]. Особенностью этих систем является то, что полимер применяется в концентрированных солевых растворах NaCl и KCl. Данных о состоянии макромолекул полиакриламида и сополимеров акриламида с солями акриловой кислоты в концентрированных растворах солей в литературе практически нет. Известно, что при высокой концентрации электролитов сшитые полиакриламидные гидрогели коллапсируют, при этом происходит резкое снижение объема геля с выделением растворителя [5–7].

Нами было обнаружено, что полиакриламид и сополимеры акриламида с солями акриловой кислоты могут растворяться в концентрированных солевых растворах хлоридов калия и натрия, причем растворимость полимеров в солевых растворах не ниже, чем в воде. Для объяснения этого факта в настоящем сообщении приведены количественные данные о состоянии рассматриваемых полимеров, молекул воды и присутствующих в системе ионов, полученные с помощью квантово-химических расчетов. Экспериментальные методы, наиболее часто используемые для исследования растворов полимеров (вискозиметрия, гель-тест, фотометрия) не дают однозначной интерпретации обнаруженного экспериментального факта.

Молекулярные модели и квантово-химические расчеты. Молекулярные модели водно-солевых растворов полимеров содержали четыре мономерных звена – либо два звена акриламида и два звена акрилата металла, расположенные через один, либо четыре звена акриламида. Кроме того они содержали по 20 молекул воды на один мономерный остаток и по две пары ионов Na⁺ и Cl⁻ или K⁺ и Cl⁻. Это соответствует концентрации 1,29 моль/кг для NaCl и 1,28 моль/кг для KCl. Для краткости такие фрагменты обозначены нами P(I) – для модели сополимера акриламида с солями акриловой кислоты; PA(I) – для модели с полиакриламидом (где I = Na или K). Состав рассматриваемых молекулярных систем представлен на рис. 1.

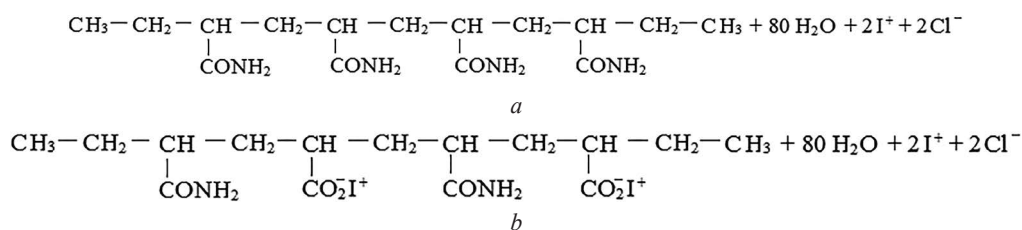


Рис. 1. Фрагмент молекулярной модели: *a* – PA(I); *b* – P(I)

Fig. 1. Fragment of the molecular model: *a* – PA(I); *b* – P(I)

Параметры моделей были рассчитаны неэмпирическим методом ССП МО ЛКАО [8] с использованием базиса MINI Huzinaga [9]. Предварительно были испытаны другие базисы [10], однако выбранный нами оказался наилучшим для описания межмолекулярных связей. Корректность расчетов подтверждается расчетными параметрами моделей натриевых солей пивалиновой и изомасляной кислот. Рассчитанные в этом базисе структурные и электронные характеристики близки к величинам, полученным с использованием более высоких уровней теории, требующих затраты значительно больших компьютерных ресурсов [10]. Однако наиболее важным преимуществом этого базиса оказалось то, что его использование приводит к правильным величинам длин межмолекулярных связей [11]. В частности, длины водородных связей в воде и их распределение полностью совпадают с литературными данными по их экспериментальному определению различными физико-химическими методами [11]. В процессе расчетов

проводилась градиентная оптимизация длин связей и углов до достижения минимума энергии системы.

Особенностью наших систем является то, что практически одно и то же значение минимальной энергии (с точностью расчета) может быть реализовано разными вариантами взаимного расположения ее элементов – молекул воды, ионов и фрагментов полимерной цепи. Разница в энергиях этих состояний незначительна и они практически равновероятны. Поэтому каждая процедура расчета может приводить к тому, что координаты конкретных элементов модели (например, молекул воды) окажутся разными. Величины геометрических параметров структуры системы не являются усредненными по времени, а возможность реализации практически одинаковой минимальной энергии разными конкретными структурами отражает подвижность системы. Они имеют вероятностный характер и относятся к одному из типичных состояний системы с энергией, практически не отличимой от минимальной. Это необходимо учитывать при сравнении расчетных величин со значениями этих же параметров, определенных экспериментально, и дающих их усредненное по времени значение (например, длины водородных или межмолекулярных связей).

Полученные данные обрабатывались следующим образом. Изображения оптимизированных моделей визуализировались с помощью программы HyperChem Professional, которая отображает образование связей между атомами в виде сплошной линии, если расстояние между ними короче или превышает сумму их атомных или ионных радиусов на несколько процентов. Конкретная величина этого превышения не доступна для пользователя, поэтому расстояния между ближайшими соседними атомами измеряли вручную. Они приведены в табл. 1, 2 и использованы для построения корреляционных рядов L_i-N_L . Поскольку молекулярные модели содержали по 293 атома, их двумерные проекции на плоскость трудны для восприятия в полном виде (пример приведен на рис. 2) и в представленном сообщении не приводятся. В процессе расчетов получена важная дополнительная характеристика межатомных взаимодействий – порядок связи V_o (Bond order), являющаяся приблизительной мерой ковалентности связи ($V_o = 0$ – чисто ионная связь, $V_o = 1$ – ковалентная).

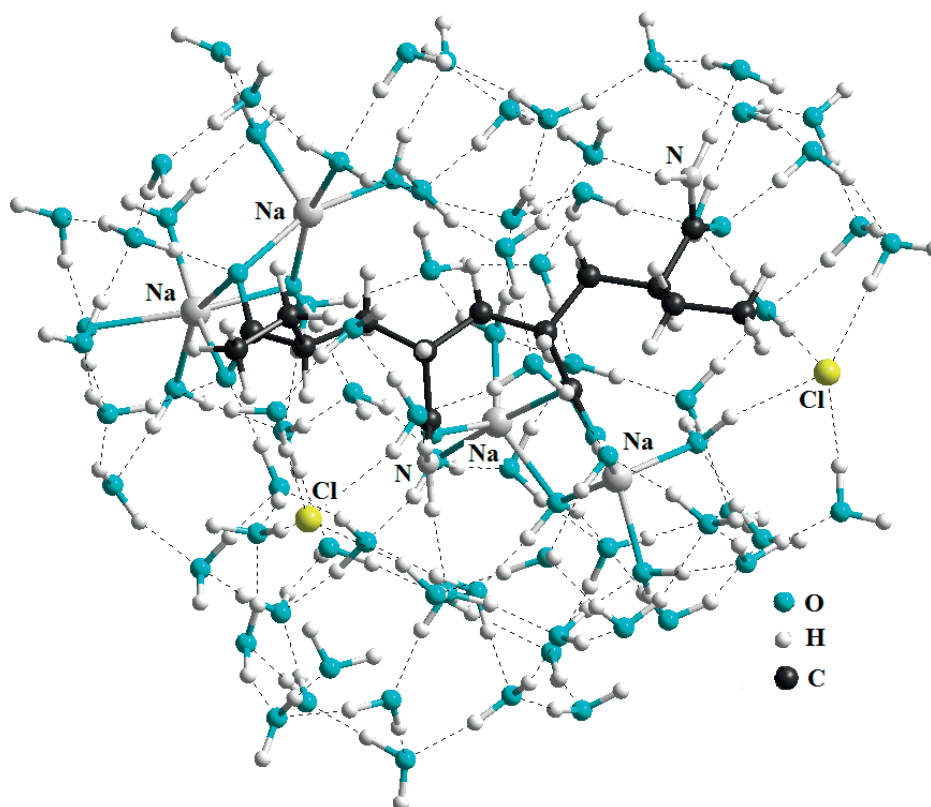


Рис. 2. Молекулярная модель оводненного фрагмента P(Na)

Fig. 2. Molecular model of a watered P(Na) fragment

Результаты и их обсуждение. В качестве примера результатов квантово-химических расчетов на рис. 2 представлена структура модели P(Na). Из рисунка видно, что все элементы системы образуют трехмерную сетку межмолекулярных связей. Два иона Na^+ связаны с атомами кислорода карбоксилатных групп, остальные связаны только с водой и находятся в окружении ее молекул. Оба иона Cl^- находятся на периферии.

Для более наглядного и понятного отображения результатов квантово-химических расчетов на рис. 3 схематично представлены структуры, отображающие основные закономерности взаимодействия всех элементов системы между собой.

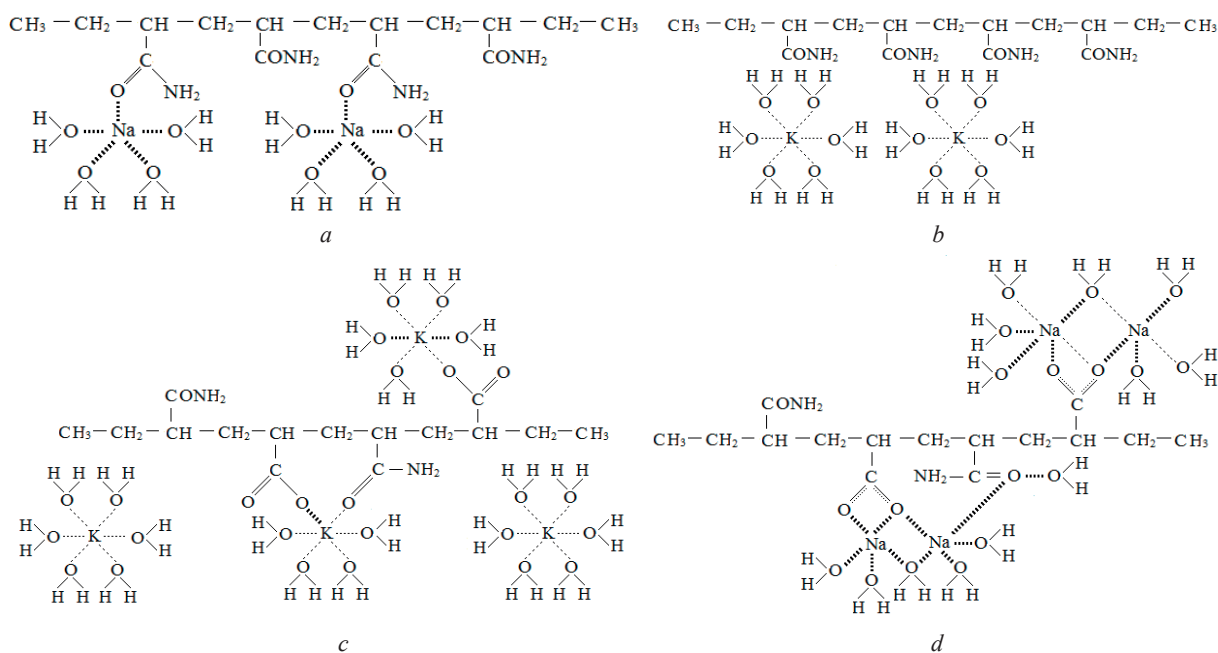


Рис. 3. Структурная схема взаимодействия в системе «полимер–водно-солевой раствор»: *a* – PA(Na), *b* – PA(K), *c* – P(Na), *d* – P(K). – длина связи длиннее суммы радиусов взаимодействующих ионов, – длина связи короче суммы радиусов взаимодействующих ионов

Fig. 3. Structure scheme of the interaction in the system “polymer–water–salt solution”: *a* – PA(Na), *b* – PA(K), *c* – P(Na), *d* – P(K). – the bond length is longer than the sum of the radii of interacting ions, – the bond length is shorter than the sum of the radii of interacting ions

Для более детального анализа полученной информации (представленной на рис. 3), мы использовали метод описания состояния молекул воды и ионов, предложенный в [11; 12]. Используя трехмерное изображение молекулярных моделей были измерены все расстояния (L_i) между катионами и атомами кислорода молекул воды, карбоксилатных фиксированных анионов и амидных групп полимера. Их величины были отсортированы и пронумерованы в порядке возрастания так, что наименьшему расстоянию $\text{I}^+ \cdots \text{O}^{2-}$ присвоен $N_L = 1$. Их последовательности образуют корреляционные ряды $L_i - N_L$, приведенные на рис. 4 и 5.

Каждый элемент такого ряда характеризуется численным значением расстояния и принадлежностью атома кислорода к структурному элементу системы: молекуле воды, карбоксилатной или амидной группе. Эти данные приведены в табл. 1 и 2, где также приведены буквенные коды молекул воды, позволяющие идентифицировать ближайшие к ней структурные элементы системы: катионы (I), другие молекулы воды (W) и функциональные группы полимера (R). Подстрочные индексы определяют число ближайших структурных элементов данного типа. Например, в табл. 1 молекула воды с номером 7 имеет буквенный код RIW_2 . Это означает, что ее ближайшими соседями являются один атом кислорода карбоксилатной группы, один катион и две другие молекулы воды.

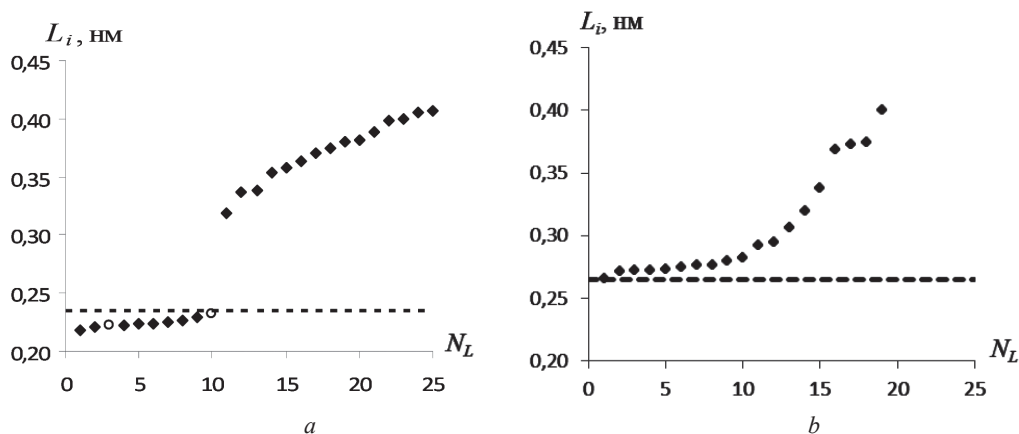


Рис. 4. Расстояние между центрами катионов и атомами кислорода ближайших молекул воды и функциональных групп фрагментов PA(I): *a* – PA + 80H₂O + 2NaCl; *b* – PA + 80H₂O + 2KCl

Fig. 4. The distance between the centers of cations and the oxygen atoms of the nearest water molecules and the functional groups of the fragments PA(I): *a* – PA + 80H₂O + 2NaCl; *b* – PA + 80H₂O + 2KCl

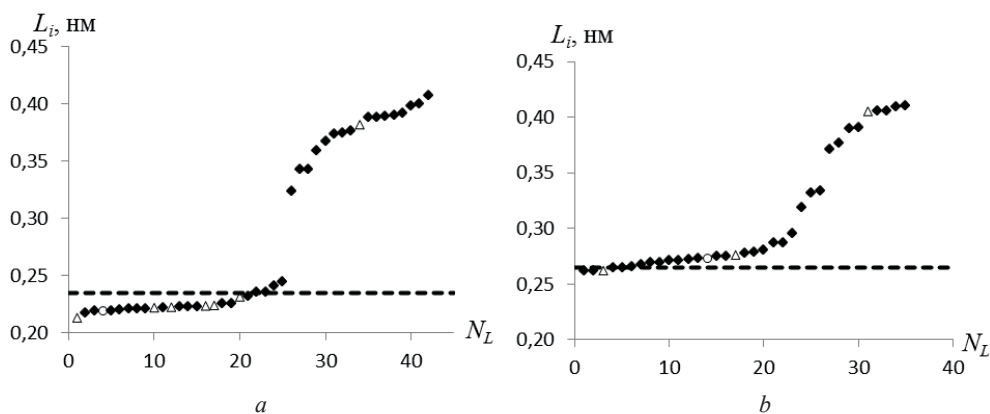


Рис. 5. Расстояние между центрами катионов и атомами кислорода ближайших молекул воды и функциональных групп фрагментов P(I): *a* – P(Na) + 80H₂O + 2NaCl; *b* – P(K) + 80H₂O + 2KCl

Fig. 5. The distance between the centers of cations and the oxygen atoms of the nearest water molecules and the functional groups of the fragments P(I); *a* – P(Na) + 80H₂O + 2NaCl; *b* – P(K) + 80H₂O + 2KCl

Далее мы рассматриваем взаимодействие каждого элемента системы только с ближайшими соседями как фактор, определяющий основные различия в гидратации ионов и их связи с функциональными группами. Поэтому рассматривались молекулы воды, находящиеся на расстоянии менее 0,4 нм от катионов, что превышает сумму радиусов катионов и кислорода в 1,5–2 раза.

Вариационные ряды L_i-N_L (рис. 4, 5) в сочетании с данными табл. 1 и 2 дают количественную информацию о состоянии молекул воды в наших системах (расстояние между ближайшим атомом и порядок связи).

Из рядов (рис. 4, 5) отчетливо видны следующие общие закономерности всех исследованных систем. Пять атомов кислорода в расчете на один ион металла, расположенных на примерно одинаковых расстояниях от катиона (0,21–0,24 нм для Na⁺ и 0,26–0,27 нм для K⁺), образуют первый молекулярный слой вокруг катиона. Он состоит из молекул воды, ориентированных атомом кислорода к центру иона, и атомов кислорода функциональных групп. Расстояния I⁺⋯OH₂, I⁺⋯OOCR и I⁺⋯O(NH₂)CR также попадают в этот интервал (исключение – системы P(K)), что свидетельствует о локализации Na⁺ и K⁺ у атомов кислорода карбоксильных и амидных групп и практически одинаковом числе сольватации (иногда называемым координационным числом) этих катионов молекулами воды и кислородом функциональных групп. Однако состояние молекул воды в первом молекулярном слое ионов натрия и калия существенно различны. Атомы кис-

Т а б л и ц а 1. Характеристики гидратной структуры PA(I) в солевой среде

T a b l e 1. Characteristics of the PA(I) hydrate structure in saline medium

Номер молекулы Molecule number	PA + 80H ₂ O + 2NaCl			PA + 80H ₂ O + 2KCl	
	-O-Na ⁺ , нм	БК	Порядок связи (B _o) Bond order (B _o)	-O-K ⁺ , нм	БК
1	0,218	IW ₃	0,063	0,266	IW ₃
2	0,222	IW ₃	0,052	0,272	RIW ₂
3	0,222	O ₃ [*] (RIW)	0,062	0,272	IW ₂
4	0,223	IW ₃	0,054	0,272	IW ₃
5	0,223	IW ₃	0,053	0,273	IW ₃
6	0,224	IW ₃	0,053	0,275	IW ₃
7	0,225	RIW ₂	0,055	0,277	IW ₂
8	0,227	IW ₂	–	0,277	IW
9	0,229	IW ₃	0,051	0,280	IW ₂
10	0,232	O ₁ [*] (RIW)	0,054	0,282	IW ₃
11	0,318	W ₄	–	0,292	IW ₃
12	0,337	W ₄	–	0,295	IW ₃
13	0,339	RW ₂	–	0,307	W ₃
14	0,354	W ₄	–	0,320	W ₂
15	0,357	W ₄	–	0,338	W ₄
16	0,364	W ₃	–	0,369	W ₄
17	0,371	RW ₃	–	0,373	W ₃
18	0,375	W ₄	–	0,375	W ₃
19	0,380	W ₂	–	0,400	W ₃
20	0,382	W ₂	–	–	–
21	0,389	W ₃	–	–	–
22	0,398	W ₃	–	–	–
23	0,400	W ₃	–	–	–
24	0,406	W ₃	–	–	–
25	0,406	RW ₃	–	–	–

П р и м е ч а н и я: * – амидная группа; БК – буквенный код молекул воды и кислорода функциональных групп.

N o t e s: * – the amide group; БК – the letter code of water molecules and oxygen of the functional groups.

Т а б л и ц а 2. Характеристики гидратных структур P(Na) и P(K) в солевой среде

T a b l e 2. Characteristics of the P(Na) and P(K) hydrate structures in saline medium

Номер молекулы Molecule number	P(Na) + 80H ₂ O + 2NaCl			P(K) + 80H ₂ O + 2KCl	
	-O-Na ⁺ , нм	БК	Порядок связи (B _o) Bond order (B _o)	-O-K ⁺ , нм	БК
1	0,213	O ₁₁ ^{**} (RI ₂)	0,067	0,262	IW ₂
2	0,217	IW ₃	0,068	0,262	IW
3	0,219	IW ₃	0,059	0,262	O ₁₁ ^{**} (RIW)
4	0,219	O ₃₁ [*] (RI)	0,065	0,265	RIW ₂
5	0,220	IW	0,057	0,265	IW ₃
6	0,221	IW ₂	0,057	0,266	IW ₃
7	0,221	IW ₃	0,055	0,267	RIW
8	0,221	IW ₂	0,059	0,269	RIW ₂
9	0,221	IW ₂	0,067	0,270	IW
10	0,222	O ₁₂ ^{**} (RIW)	0,077	0,271	IW ₂
11	0,223	IW ₂	0,063	0,271	IW ₃
12	0,223	IW ₂	0,067	0,272	IW ₂
13	0,223	O ₁₁ ^{**} (RI ₂)	0,056	0,273	IW ₃
14	0,224	I ₂ W ₂	0,055	0,273	O ₃₁ [*] (RIW)

Окончание табл. 2

Номер молекулы Molecule number	P(Na) + 80H ₂ O + 2NaCl			P(K) + 80H ₂ O + 2KCl	
	–O–Na ⁺ , нм	БК	Порядок связи (B ₀) Connection order (B ₀)	–O–K ⁺ , нм	БК
15	0,224	I ₂ W ₂	0,053	0,275	IW
16	0,226	I ₂ W ₂	0,053	0,275	RIW ₂
17	0,232	O ₄₁ ** (RI ₂ W)	0,06	0,276	O ₄₁ ** (RIW ₂)
18	0,232	O ₄₂ ** (RIW)	0,056	0,278	IW ₃
19	0,236	IW ₃	–	0,279	IW ₃
20	0,241	IW ₂	–	0,280	IW ₃
21	0,245	O ₄₁ ** (RI ₂ W)	–	0,287	IW ₃
22	0,324	W ₃	–	0,287	IW
23	0,343	IW	–	0,296	IW ₂
24	0,343	IW	–	0,319	W ₃
25	0,360	W ₄	–	0,332	W ₃
26	0,368	W ₄	–	0,334	W ₄
27	0,374	W ₄	–	0,344	W ₃
28	0,375	W ₂	–	0,371	RIW ₂
29	0,377	W ₃	–	0,377	W ₃
30	0,382	W ₃	–	0,390	W ₄
31	0,388	W ₄	–	0,391	O ₄₂ ** (RW ₃)
32	0,389	W ₃	–	0,405	W ₄
33	0,390	W ₃	–	0,409	W ₂
34	0,391	O ₁₂ ** (RIW)	–	–	–
35	0,392	W ₃	–	–	–
36	0,401	W ₃	–	–	–
37	0,408	O ₄₂ ** (RIW)	–	–	–

Примечания: * – амидная группа; ** – карбоксилатная группа.

Notes: * – the amide group; ** – the carboxyl group.

лорода молекул воды, карбоксильных и амидных групп находятся на расстояниях от иона натрия меньше, чем сумма их радиусов, и образуют с Na⁺ короткие и прочные электростатические связи с заметной долей ковалентности ($B_0 > 0,05$, табл. 1 и 2, рис. 4 и 5). Длина связей K⁺...O²⁻ равна или существенно больше сумм радиусов взаимодействующих ионов. Связь носит чисто ионный характер ($B_0 < 0,05$, табл. 1 и 2, рис. 4 и 5). Разница в длине связей I⁺...O²⁻ вокруг катиона в первом молекулярном слое и молекул, находящихся за его пределами, резко выражена для Na⁺. В случае K⁺ имеется широкая переходная зона между этими состояниями.

Видно, что все элементы молекулярной модели связаны друг с другом водородными связями (молекулы воды, атомы кислорода карбоксилатных групп и атом кислорода амидной группы) или электростатическими связями (короткими и сильными в случае Na⁺...O²⁻ и более слабыми и длинными для K⁺...O²⁻). Гибкие полимерные фрагменты полиакриламида или сополимера акриламида с акрилатами натрия или калия встраиваются в структуру воды. В [11] было показано, что, несмотря на уменьшение количества связей при внесении в нее полистиролсульфонатов щелочных металлов, количество всех межмолекулярных связей в системе не уменьшается, так как уменьшение количества водородных связей при внесении в воду электролитов компенсируется возрастающим количеством межмолекулярных и ион-молекулярных связей. С этим, вероятно, и связана высокая растворимость полиакриламида и его сополимеров с солями полиакриловой кислоты в солевых растворах.

Заключение. Квантово-химические расчеты молекулярных моделей растворов полиакриламида и сополимеров акриламида с солями акриловой кислоты в водных растворах хлоридов натрия и калия позволили конкретизировать представления о характере меж-ионных и ион-моле-

кулярных взаимодействий в этих системах и получить количественные критерии структуры их микросостояний. Оказалось, что оба катиона (Na^+ и K^+) формируют вокруг себя слой из пяти атомов кислорода, относящихся к молекулам воды, карбоксилатной и/или амидной группе. Принципиальная разница в их гидратационных свойствах состоит в том, что связь $\text{Na}^+\cdots\text{O}^{2-}$ короче суммы радиусов взаимодействующих частиц, а $\text{K}^+\cdots\text{O}^{2-}$ – длиннее. Это свидетельствует о том, что в первом случае связь частично ковалентная, а во втором – чисто электростатическая. Все элементы молекулярных моделей в обоих случаях объединены между собой межмолекулярными связями, образующими непрерывную пространственную сеть, в которую без искажения ее геометрии встраиваются молекулы полимеров с кислородсодержащими функциональными группами. Это и является причиной хорошей растворимости изученных полимеров в водно-солевых растворах.

Список использованных источников

1. Куренков, В. Ф. Полиакриламидные флокулянты / В. Ф. Куренков // Соросовский образовательный журн. – 1997. – № 7. – С. 57–63.
2. Owen, A. T. The preparation and ageing of acrylamide/acrylate copolymer flocculant solutions / A. T. Owen, P. D. Fawell, J. D. Swift // *International Journal of Mineral Processing*. – 2007. – Vol. 84, N 1–4. – P. 3–14. <https://doi.org/10.1016/j.minpro.2007.05.003>
3. Влияние анионных и катионных флокулянтов праестолов на флокуляцию суспензий каолина / В. Ф. Куренков [и др.] // Журн. прикладной химии. – 1999. – Т. 72, № 11. – С. 1892–1896.
4. Особенности формирования полиэлектролитных комплексов на основе полиакриламидных соединений в процессе флокуляции глинисто-солевых дисперсий / П. Д. Воробьев [и др.] // Коллоидный журн. – 2007. – Т. 69, № 5. – С. 592–596.
5. Веснеболоцкая, С. А. Влияние формирования поверхностного слоя на набухание полиэлектролитных гидрогелей в водно-солевых растворах / С. А. Веснеболоцкая, Н. Г. Бельникович, Т. В. Будтова // Журн. прикладной химии. – 2009. – Т. 83, № 11. – С. 1874–1878.
6. Филиппова, О. Е. «Восприимчивые» полимерные гели / О. Е. Филиппова // *Высокомолекулярные соед.* – 2000. – Т. 42, № 12. – С. 2328–2352.
7. Крамаренко, Е. Ю. Полиэлектролитные сетки как высокочувствительные полимеры / Е. Ю. Крамаренко, О. Е. Филиппова, А. Р. Хохлов // *Высокомолекулярные соед.* – 2006. – Т. 48, № 7. – С. 1216–1240.
8. Clark, T. A *Handbook of Computational Chemistry: A Practical Guide to Chemical Structure and Energy Calculations* / T. Clark. – New York, 1985. – 382 p.
9. Huzinaga, S. *Gaussian Basis Sets for Molecular Calculations* / S. Huzinaga, J. Andzelm, M. Klobukowski. – Amsterdam, 1984. – 434 p.
10. Зеленковский, В. М. Компьютерное моделирование структуры полимерных ионитов / В. М. Зеленковский. – М., 2012. – 327 с.
11. Soldatov, V. S. Hydration of ion exchangers: thermodynamics and quantum chemistry calculations. IV. The state of ions and water molecules in alkali forms of sulfostyrene resins / V. S. Soldatov, E. G. Kosandrovich, T. V. Bezyazychnaya // *React. and Funct. Polym.* – 2018. – Vol. 131. – P. 219–229. <https://doi.org/10.1016/j.reactfunctpolym.2018.07.010>
12. Soldatov, V. Hydration of ion exchangers: thermodynamics and quantum chemistry calculations. III. The state of the proton and water molecules in hydrogen form of Sulfostyrene ion exchangers / V. Soldatov, V. Zelenkovskii, E. Kosandrovich // *React. Funct. Polym.* – 2016. – Vol. 102. – P. 156–164. <https://doi.org/10.1016/j.reactfunctpolym.2016.03.001>

References

1. Kurenkov V. F. Polyacrylamide flocculants. *Sorosovskii obrazovatel'nyi zhurnal = Soros Educational Journal*, 1997, no. 7, pp. 57–63 (in Russian).
2. Owen A. T., Fawell P. D., Swift J. D. The preparation and ageing of acrylamide/acrylate copolymer flocculant solutions *International Journal of Mineral Processing*, 2007, vol. 84, no. 1–4, pp. 3–14. <https://doi.org/10.1016/j.minpro.2007.05.003>
3. Kurenkov V. F., Snigirev S. V., Dervoedova E. A., Churikov F. I. The effect of praestols anionic and cationic floraculants on the flocculation of kaolin suspensions. *Zhurnal prikladnoi khimii = Russian Journal of Applied Chemistry*, 1999, vol. 72, no. 11, pp. 1892–1896 (in Russian).
4. Vorob'ev P. D., Krut'ko N. P., Vorob'eva E. V., Cherednichenko D. V., Basalyga I. I. Peculiarities of the formation of polyacrylamide compound-based polyelectrolyte complexes in the course of the flocculation of clay-salt dispersions. *Colloid Journal*, 2007, vol. 69, no. 5, pp. 552–556. <https://doi.org/10.1134/s1061933x07050031>
5. Vesnebolotskaya S. A., Bel'kevich N. G., Budtova T. V Influence of surface layer formation on swelling of polyelectrolytic hydrogels in aqueous salt solutions. *Russian Journal of Applied Chemistry*, 2010, vol. 83, no. 11, pp. 2003–2010. <https://doi.org/10.1134/s1070427210110212>
6. Filippova O. E. «Sensitive» Polymer Gels. *Vysokomolekulyarnye soedineniya = Polymer science*, 2000, vol. 42, no. 12, pp. 2328–2352 (in Russian).

7. Kramarenko E. Yu., Filippova O. E., Khokhlov O. R. Polyelectrolyte networks as highly sensitive polymers. *Polymer Science Series C*, 2006, vol. 48, no. 1, pp. 1–20. <https://doi.org/10.1134/s1811238206010012>
8. Clark T. *A Handbook of Computational Chemistry: A Practical Guide to Chemical Structure and Energy Calculations*. New York, 1985. 382 p.
9. Huzinaga S. *Gaussian Basis Sets for Molecular Calculations*. Amsterdam, 1984. 434 p.
10. Zelenkovskiy V. M. *Computer simulation of the structure of polymeric ion exchangers*. Minsk, 2012. 327 p. (in Russian).
11. Soldatov V. S., Kosandrovich E. G., Bezyazychnaya T. V. Hydration of ion exchangers: thermodynamics and quantum chemistry calculations. IV. The state of ions and water molecules in alkali forms of sulfostyrene resins. *Reactive and Functional Polymers*, 2018, vol. 131, pp. 219–229. <https://doi.org/10.1016/j.reactfunctpolym.2018.07.010>
12. Soldatov V., Zelenkovskii V., Kosandrovich E. Hydration of ion exchangers: thermodynamics and quantum chemistry calculations. III. The state of the proton and water molecules in hydrogen form of Sulfostyrene ion exchangers. *Reactive and Functional Polymers*, 2016, vol. 102, pp. 156–164. <https://doi.org/10.1016/j.reactfunctpolym.2016.03.001>

Информация об авторах

Солдатов Владимир Сергеевич – академик, д-р хим. наук, профессор, гл. науч. сотрудник. Институт физико-органической химии НАН Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: soldatov@ifoch.bas-net.by.

Давлюд Дарья Николаевна – науч. сотрудник. Институт общей и неорганической химии НАН Беларуси (ул. Сурганова, 9/1, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: davlud.d@tut.by.

Безъязычная Татьяна Владимировна – канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник. Институт физико-органической химии НАН Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: kvant@ifoch.bas-net.by.

Воробьева Елена Викторовна – д-р хим. наук, доцент, заведующий лабораторией. Институт общей и неорганической химии НАН Беларуси (ул. Сурганова, 9/1, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: evorobieva@igic.bas-net.by.

Косандрович Евгений Генрихович – канд. хим. наук, доцент, заведующий лабораторией. Институт физико-органической химии НАН Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: kosandrovich@ifoch.bas-net.by.

Воробьев Павел Дмитриевич – канд. хим. наук, ст. науч. сотрудник. Институт общей и неорганической химии НАН Беларуси (ул. Сурганова, 9/1, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: pdvc@tut.by.

Information about the authors

Soldatov Vladimir Sergeevich – Academician, D. Sc. (Chemistry), Professor, Chief researcher. Institute Physical Organic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus (13, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: soldatov@ifoch.bas-net.by.

Davlyud Daria Nikolaevna – Researcher. Institute of General and Inorganic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus (9/1, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: davlud.d@tut.by.

Bezyazychnaya Tatyana Vladimirovna – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior researcher. Institute Physical Organic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus (13, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: kvant@ifoch.bas-net.by.

Vorobieva Elena Viktorovna – D. Sc. (Chemistry), Associate professor, Head of the Laboratory. Institute of General and Inorganic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus (9/1, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: evorobieva@igic.bas-net.by.

Kosandrovich Evgenii Genrikhovich – Ph. D. (Chemistry), Associate professor, Head of the Laboratory. Institute Physical Organic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus (13, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: kosandrovich@ifoch.bas-net.by.

Vorobiev Pavel Dmitrievich – Ph. D. (Chemistry), Senior researcher. Institute of General and Inorganic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus (9/1, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: pdvc@tut.by.