

Пространственное строение и параметры спектров ЯМР фрагментов полибутадиенов на основе квантово-химических расчетов

© Миннегалиев Мансур Марселевич и Аминова*⁺ Роза Мухаметовна

Кафедра химической физики. Институт физики. Казанский (Приволжский) федеральный университет. ул. Кремлевская, 18. г. Казань, 420008. Республика Татарстан. Россия.

E-mail: minnegaliev.mansur@yandex.ru, raminova@rambler.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: DFT, магнитное экранирование, химический сдвиг, ЯМР, полибутадиен, микроструктура.

Аннотация

В работе проведены вычисления пространственного, электронного строения и параметров спектров ЯМР модельных фрагментов полибутадиенов неэмпирическими методами квантовой химии в рамках теории функционала плотности (DFT). Установлено, что рассчитанные значения химических сдвигов протонов ¹H ряда модельных структур согласуются с экспериментальными данными.