

Тематический раздел: Теоретические исследования.
Подраздел: Физическая химия.

Полная исследовательская публикация

Регистрационный код публикации: 13-35-8-105

Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции “Структура и динамика молекулярных систем”. Яльчик-2013.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
Поступила в редакцию 28 июля 2013. УДК 539.143.43:539.199.

Топологическая структура и самодиффузия в линейных гибкоцепных полимерах

© Кулагина Татьяна Павловна, Карнаух*⁺ Григорий Ефимович,
Варакина Варвара Александровна, Смирнов Лев Петрович
и Кузина Анастасия Николаевна

Институт проблем химической физики РАН. Пр-т. Семенова, 1. г. Черноголовка, 142432. Московская обл. Россия. Тел.: (496) 522-18-79. E-mail: tan@icp.ac.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ядерный магнитный резонанс, линейные гибкоцепные полимеры спад свободной индукции, физическая сетка зацеплений, стимулированное эхо, самодиффузия.

Аннотация

В работе развита теория спадов свободной индукции в линейных гибкоцепных полимерах с различной средней длиной полимерной цепи в широком температурном интервале. Показано, что с ростом средней молекулярной массы межузловых цепей M_w изменяется топологическая структура линейных полимеров, и при $M_w > 10^5$ образуется физическая сетка зацеплений. Получена корреляционная функция молекулярных движений, которая применена для расчета диффузионного затухания спиновых эхо.

Предложен общий подход к вычислению сигналов диффузионного затухания спиновых эхо и его применение к определению коэффициента самодиффузии в линейных полимерах с различной топологической структурой, который позволил объяснить наблюдаемую экспериментально аномальную диффузию.