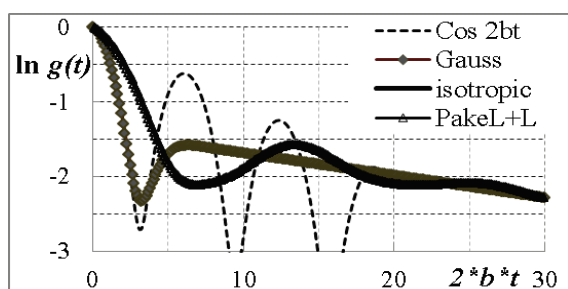


ИССЛЕДОВАНИЕ РЕПТАЦИОННОГО РЕЖИМА ДВИЖЕНИЯ ЦЕПИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ. XIII. КОГДА ПОЛИМЕРНЫЙ РАСПЛАВ МОЖНО РАССМАТРИВАТЬ КАК ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИЙ ПОРОШОК

Пестряев Е.М.

ФГБОУ ВПО «УГНТУ», Уфа, *physics_usptu@mail.ru*

Форма спада свободной индукции (ССИ) ЯМР в полимерных расплавах претерпевает качественное изменение при переходе от олигомеров к высокомолекулярным полимерам: наряду с характерной для жидкости лоренцевой экспонентой возникает и увеличивается в населенности свойственная твердым телам гауссова компонента. Давно известно, что эта компонента обусловлена анизотропией высокочастотной сегментальной подвижности, индуцированной квазистатическими в масштабе времени ЯМР зацеплениями.



ССИ для гауссова распределения локальных полей (Gauss), изотропной ориентации межспиновых векторов (isotropic) и для пейковского дублета (PakeL+L) с расщеплением $2b$ – косинус этой частоты показан пунктиром; $T_{2b} = 10/(2b)$, $T_{2a} = 3.3 \cdot T_{2b}$, $p_{2a} = 0.25$, где «а» - лоренцева компонента.

представляет собой Фурье-преобразование пейковского дублета, впервые зарегистрированного для поликристаллического порошка. Как видно по рисунку, использование такого подхода позволяет воспроизвести форму ССИ с осцилляциями, которая наблюдается в расплавах вблизи температуры стеклования, когда субцепи становятся квазистатическими.

Вследствие этого, с точки зрения ЯМР, высокомолекулярный полимерный расплав представляет собой изотропную систему, составленную из микроскопически анизотропных субцепей между соседними зацеплениями, которые и являются носителями квазистатического дипольного взаимодействия (ДВ). Для таких систем ССИ