

МОДЕЛИРОВАНИЕ СИГНАЛОВ СПИНОВЫХ ЭХО ЯМР И ДИФФУЗИОННОГО ЗАТУХАНИЯ В ПОЛИМЕРАХ

Т. П. Кулагина, Г. Е. Карнаух, А. Н. Кузина

Институт проблем химической физики РАН

Работа посвящена моделированию сигналов спиновых эхо в трех-импульсной спектроскопии ЯМР с произвольным градиентом магнитного поля и получению данных о процессе самодиффузии в полимерах. Для определения коэффициента самодиффузии в полимерах применяется метод стимулированного эха ЯМР [1,2] с импульсным градиентом магнитного поля, в котором обычно используются только два из пяти сигналов спиновых эхо. В данной работе разработан общий подход для вычисления сигналов спиновых эхо и диффузионного затухания для различных последовательностей РЧ импульсов, указан критерий расстановки импульсов градиента магнитного поля и способы получения корреляционной функции молекулярных движений $k(t)$ из сигналов спада свободной индукции и стимулированного эха. Проведено моделирование сигналов спиновых эхо и диффузионного затухания (рис.1) в полимерных сетках с различной длиной полимерной цепи и молекулярно-массовым распределением. Установлено качественное соответствие модельных и экспериментальных сигналов ЯМР и зависимости среднего квадрата смещений $\langle s^2(t) \rangle$ и коэффициента самодиффузии от средней молекулярной массы полимера.

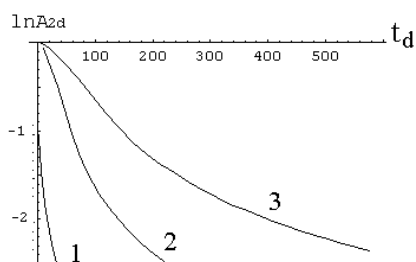


Рис.1. Зависимость логарифма амплитуды диффузионного затухания от времени диффузии. Средняя длина полимерной цепи N_0 : 7 (1), 37 (2), 97 (3).

Литература

1. А. И. Маклаков, В.Д. Скирда, Н.Ф. Фаткуллин, Самодиффузия в растворах и расплавах полимеров, КГУ, 1987 с.224.
2. Т.П. Кулагина, Г.Е.Карнаух, Л.П. Смирнов, ДАН, 2008, т. 421, №4, с.511-514.