

УДК 541.143
ББК 22.37

Гайсин Н. К.

Ядерная магнитная релаксация и молекулярное движение в органических кристаллах : монография / Н. К. Гайсин; М-во образ. и науки России, Казан. нац. исслед. технол. ун-т. — Казань : Изд-во КНИТУ, 2016. — 112 с.

ISBN 978-5-7882-2050-5

Рассмотрены основные положения теории ядерной магнитной релаксации в молекулярных кристаллах. Представлены результаты разделения внутри- и межмолекулярного вкладов в протонную спин-решеточную релаксацию в кристаллических циклогексане и бензоле. Исследована динамика и коррелированность вращательного и поступательного движения молекул в этих кристаллах.

Предназначена для студентов старших курсов и аспирантов физических, химических и других специальностей вузов, а также для научных работников, интересующихся молекулярной динамикой в кристаллах.

Подготовлена на кафедре физики.

Печатается по решению редакционно-издательского совета Казанского национального исследовательского технологического университета

Рецензенты: действительный член АН РТ, д-р физ.-мат. наук, профессор *А. В. Ильясов*
зав. каф. физики молекулярных систем КФУ,
д-р физ.-мат. наук, профессор *В. Д. Скирда*

ISBN 978-5-7882-2050-5 © Гайсин Н. К., 2016
© Казанский национальный исследовательский
технологический университет, 2016

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
Глава 1. ЯДЕРНАЯ СПИН-РЕШЕТОЧНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ И МЕХАНИЗМЫ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДВИЖЕНИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ЦИКЛОГЕКСАНЕ	6
1.1. Ядерная спин-решеточная релаксация и вращательное движение молекул в пластической фазе циклогексана.....	6
1.1.1. Необходимость разделения внутри- и межмолекулярного вкладов в ядерную магнитную релаксацию в пластическом циклогексане.....	6
1.1.2. Эксперимент и его результаты.....	9
1.1.3. Межмолекулярный вклад в релаксацию ядер, обусловленный изотропными переориентациями молекул в кристалле.....	11
1.1.4. Времена корреляции и механизмы вращательного движения молекул в пластическом циклогексане.....	18
1.2. Ядерная спин-решеточная релаксация и поступательное движение молекул в пластической фазе циклогексана.....	24
1.2.1. Элементы теории ядерной магнитной релаксации, обусловленной поступательным движением молекул.....	25
1.2.2. Анализ результатов изучения характера и коррелированности поступательного движения молекул в пластическом циклогексане различными методами ЯМР-релаксации.....	34
Глава 2. ЯДЕРНАЯ СПИН-РЕШЕТОЧНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ И МЕХАНИЗМЫ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДВИЖЕНИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ БЕНЗОЛЕ	44
2.1. Изучение механизмов внутреннего вращения в кристаллическом бензоле по данным о межмолекулярном вкладе в протонную спин-решеточную релаксацию.....	44
2.1.1. О кристаллической структуре твердого бензола.....	45

2.1.2. Эксперимент и его результаты.....	47
2.1.3. Механизмы вращательного движения молекул в твердом бензоле.....	49
2.1.4. Модели вращения.....	51
2.1.5. Внутримолекулярный вклад в спин-решеточную релаксацию протонов в твердом бензоле.....	60
2.1.6. Межмолекулярный вклад в спин-решеточную релаксацию протонов в твердом бензоле.....	61
2.1.7. Межмолекулярный вклад в спин-решеточную релаксацию протонов в твердом бензоле при вращениях под действием «сильных» возмущений.....	68
2.2. Изучение поступательного движения молекул в кристаллическом бензоле методом ядерной магнитной релаксации.....	75
Глава 3. ТОНКАЯ СТРУКТУРА ПРОТОННОГО МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА ТВЕРДОГО БЕНЗОЛА И БЕНЗОЛЦИКЛОГЕКСАНОВЫХ СМЕСЕЙ.....	85
3.1. Сведения о наблюдении узкой линии на широкополосных спектрах кристаллов и причинах ее возникновения.....	85
3.2. Экспериментальная часть.....	86
3.2.1. Результаты эксперимента.....	87
3.2.2. Обсуждение экспериментальных результатов.....	91
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	95
Литература.....	96
Приложение А.....	102
Приложение Б.....	106