

Средний квадрат дипольного момента макромолекулы как функция упорядоченности ее мономерных единиц

Mean square of the dipole moment of a macromolecule as a function of the ordering of its monomeric units

Н.Н. МАТВЕЕВ, В.И. ЛИСИЦЫН, В.В. САУШКИН, Н.С. КАМАЛОВА

N.N. MATVEEV, V.I. LISITSYN, V.V. SAUSHKIN, N.S. KAMALOVA

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный лесотехнический университет имени Г.Ф. Морозова», Воронеж, Россия
Voronezh State University of Forestry and Technologies Named after G.F. Morozov, Voronezh, Russia

viktor-lisicyn@yandex.ru

Важнейшей информацией при практическом использовании гибкоцепных полимеров является изменение структуры при наличии внешних воздействий. В работе построена конформационная модель для вычисления среднего квадрата дипольного момента макромолекулы при условии отсутствия корреляции между конформациями мономерных единиц в неоднородном температурном поле.

Ключевые слова: конформационная модель, неоднородные температурные поля, гибкоцепные полимеры, средний квадрат дипольного момента, макромолекулы

The most important information for the practical use of flexible-chain polymers is the change in structure in the presence of external influences. A conformational model for calculating the mean square of the dipole moment of a macromolecule is constructed in this work, provided that there is no correlation between the conformations of monomer units in a heterogeneous temperature field.

Keywords: conformational model, non-uniform temperature fields, flexible-chain polymers, mean square of dipole moment, macromolecules

DOI: 10.35164/0554-2901-2021-9-10-30-33

В ряде работ [1–6] нами было описано, что в неоднородном температурном поле при фазовых переходах первого рода в ряде гибкоцепных полимеров (органосилоксаны, этиленгликоли, полиэтиленоксид) изменяется структура полимера, связанная с конформационной перестройкой макромолекул. Это приводит к тому, что поверхностная плотность гетерозарядов изменяется.

Конформационный подход к построению моделей для различных процессов в полимерах обсуждается в работах [7–12]. В данной работе основным положением при построении конформационной модели является утверждение, что корреляция между конформациями соседних мономерных единиц макромолекулы отсутствует.

В работе [4] было показано, что дипольный момент макромолекулы в целом, считая каждую мономерную единицу нейтральной, $P^2 = M (\overline{P_1^T}, \overline{P_1}) + 2 (\overline{P_1^T}, \sum_{\mu=1}^{M-1} \sum_{\mu'=\mu+1}^M (\prod_{i=m+1}^{m'} T_i,) \overline{P_1})^{\text{BT}}$ (1)

где M – число мономерных единиц в макромолекуле, N – число узлов первой мономерной единицы, P_1 – дипольный момент первой мономерной единицы, символ «T» обозначает транспонирование, $m = (\mu-1)N, m' = (\mu'-1)N$: $T_i = \begin{pmatrix} \sin \theta_{i-1} & 0 & 0 \\ \sin \theta_{i-1} \cos \varphi_{i-1} & -\cos \theta_{i-1} \cos \varphi_{i-1} & \sin \varphi_{i-1} \\ \sin \theta_{i-1} \sin \varphi_{i-1} & -\cos \theta_{i-1} \sin \varphi_{i-1} & -\cos \varphi_{i-1} \end{pmatrix}$ (2)

Развивая идеи, приведенные в работах [13–17], проведем усреднение по всем конформационным состояниям молекулы для среднего значения квадрата дипольного момента.

$$\langle P^2 \rangle = M \langle P_1^2 \rangle + 2 \left(\langle \overline{P_1^T}, \sum_{\mu=1}^{M-1} \sum_{\mu'=\mu+1}^M (\prod_{i=m+1}^{m'} T_i,) \overline{P_1} \rangle \right) \quad (3)$$

В выражении (3) $\langle P_1^2 \rangle$ – усредненный по всем конформациям квадрат вектора дипольного момента первой мономерной единицы. Среднее значение дипольного момента первой мономерной единицы отлично от нуля за счет заторможенности движений внутри самой мономерной единицы. Представление каждого вектора в его системе координат не зависит от конфигурации цепи [9], в нашем случае не зависит от номера мономерной единицы, т.е.

$$\langle \overline{P_1^T}, \sum_{\mu=1}^{M-1} \sum_{\mu'=\mu+1}^M (\prod_{i=m}^{m'-1} T_i,) \overline{P_1} \rangle = \langle \overline{P_1^T}, \sum_{\mu=1}^{M-1} \sum_{\mu'=\mu+1}^M (\prod_{i=m+1}^{m'} T_i,) \rangle \langle \overline{P_1} \rangle \quad (4)$$

В случае, когда отсутствуют корреляции между мономерными единицами, а сами мономерные единицы тождественны, т.е. одни и те же конформации реализуются с одинаковой вероятностью, то среднее значение суммы равно сумме средних значений каждой мономерной единицы, и выражение (4) принимает вид:

$$\langle \overline{P_1^T}, \sum_{\mu=1}^{M-1} \sum_{\mu'=\mu+1}^M (\prod_{i=m}^{m'-1} T_i,) \overline{P_1} \rangle = \langle \overline{P_1^T} \rangle \sum_{\mu=1}^{M-1} \sum_{\mu'=\mu+1}^M \langle (\prod_{i=m+1}^{m'} T_i) \rangle \langle \overline{P_1} \rangle \quad (5)$$

В выражении (5) произведение распространяется только на узлы одной мономерной единицы:

$$\langle \overline{Q} \rangle = \langle \prod_{i=1}^N T_i(\theta_{i-1}, \varphi_{i-1}) \rangle, \quad (6)$$

где θ_i – валентный угол i – связи мономерной единицы, φ_i – угол торсионного вращения.

Усреднение происходит по всем конфигурациям первой мономерной единицы в системе K_1 [18], а матрицы T_i удовлетворяют условию унитарности:

$$T_i^T T_i = I \quad (7)$$

Двойное суммирование в (5) можно преобразовать к следующему виду:

$$\sum_{\mu=1}^{M-1} \sum_{\mu'=\mu+1}^M \langle \prod_{i=m+1}^{m'} T_i \rangle = \sum_{k=1}^{M-1} (M-k) \langle \overline{Q} \rangle^k \quad (8)$$

В (8) учтено, что для матриц T_i выполняются следующие соотношения, которые следуют из условия тождественности мономерных единиц:

$$T_{m+1} = T_{m'+1}, T_{m+2} = T_{m'+2}, \dots, T_{m+N} = T_{m'+N} \quad (9)$$

Суммируя геометрическую прогрессию в (8), получаем (см., например, [19]):

$$F(Q) = \frac{(M-1)Q}{(E-Q)} - (Q^2 - Q^{M+1})/(E-Q)^2, \quad (10)$$

где E – единичная матрица.

С учетом (10) выражение (3) принимает вид:

$$\langle P^2 \rangle = M \langle P_1^2 \rangle + 2 \langle \overline{P_1} \rangle \langle F(Q) \rangle \langle \overline{P_1} \rangle \quad (11)$$

Трёхмерная матрица $\langle \overline{Q} \rangle$ осуществляет поворот вектора $\langle \overline{P_1} \rangle$ и изменяет его длину при переходе к соседней мономерной единице. Поэтому в системе координат K_2 , в которой ось OX_2 жестко связана на вектором $\langle \overline{P_1} \rangle$, преобразованная матрица (6) имеет вид:

$$R = U \langle \overline{Q} \rangle U^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \Omega & \sin \Omega & 0 \\ \sin \Omega \cos \Psi & -\cos \Omega \cos \Psi & \sin \Psi \\ \sin \Omega \sin \Psi & -\cos \Omega \sin \Psi & -\cos \Psi \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где Ω – угол между направлениями средних значений дипольных моментов соседних мономеров в плоскости этих моментов, а Ψ – угол поворота плоскости этих моментов относительно плоскости предшествующей пары векторов (рис. 1).

U – матрица перехода от системы $K_1(X_1Y_1Z_1)$, в которой считаются известными направляющие косинусы вектора $\langle \overline{P_1} \rangle$ к системе $K_2(X_2Y_2Z_2)$, повернутой относительно системы $K_1(X_1Y_1Z_1)$ на углы Эйлера α, β, γ . Матрица U , как известно, является унитарной матрицей [18], и в нашем случае имеет следующий вид:

$$U = \begin{pmatrix} \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \sin \alpha \sin \gamma & -(\cos \alpha \cos \beta \sin \gamma + \sin \alpha \cos \gamma) & \cos \alpha \cos \beta \\ \sin \alpha \cos \beta \cos \gamma + \cos \alpha \sin \gamma & -(\sin \alpha \cos \beta \sin \gamma - \cos \alpha \cos \gamma) & \sin \alpha \sin \beta \\ -\sin \beta \cos \gamma & \sin \beta \sin \gamma & \cos \beta \end{pmatrix} \quad (13)$$

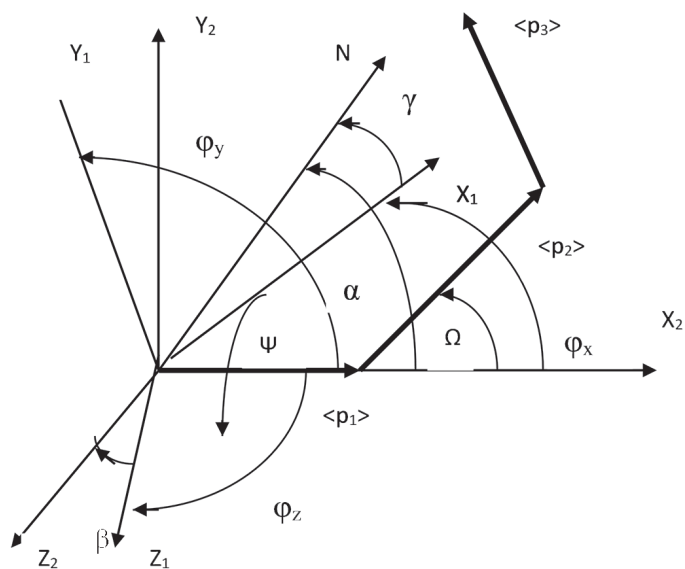


Рис. 1. Системы координат $K_1(X_1Y_1Z_1)$ и $K_2(X_2Y_2Z_2)$. Углы Эйлера α, β, γ ; направляющие углы вектора $\mathbf{p}_1 - \varphi_x, \varphi_y, \varphi_z$ в системе $K_1(X_1Y_1Z_1)$. В системе координат $K_2(X_2Y_2Z_2)$ ось OX_2 жестко связана со средним дипольным моментом первой мономерной единицы.

Направляющие косинусы задаются следующими выражениями:

$$\cos \varphi_x = \frac{\langle \overline{P_1} \rangle_x}{|\langle \overline{P_1} \rangle|}, \quad \cos \varphi_y = \frac{\langle \overline{P_1} \rangle_y}{|\langle \overline{P_1} \rangle|}, \quad \cos \varphi_z = \frac{\langle \overline{P_1} \rangle_z}{|\langle \overline{P_1} \rangle|}, \quad (14)$$

где

$$\langle \overline{P_1} \rangle_i = \sum_{n=1}^N e_n \sum_{j=0}^{n-1} (\vec{l}_i \langle \prod_{k=1}^{j+1} T_k(\theta_{k-1}, \varphi_{k-1}) \rangle \vec{l}_j), \quad i = 1, 2, 3$$

$$|\langle \overline{P_1} \rangle| = \left(\sum_{i=1}^3 \langle \overline{P_1} \rangle_i^2 \right)^{1/2}, \quad \vec{l}_1 = \begin{pmatrix} l \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{l}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ l \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{l}_3 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ l \end{pmatrix}. \quad (15)$$

Применяя преобразование Эйлера для вектора $\langle \overline{P_1} \rangle$ получаем связь между направляющими косинусами и X-ой компонентой преобразования Эйлера (вектор $\langle \overline{P_1} \rangle$ направлен в системе $K_2(X_2Y_2Z_2)$ по оси OX_2):

$$\begin{aligned} \cos \varphi_x &= \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \sin \alpha \sin \gamma \\ \cos \varphi_y &= \sin \alpha \cos \beta \cos \gamma + \cos \alpha \sin \gamma \\ \cos \varphi_z &= -\sin \beta \cos \gamma \end{aligned} \quad (16)$$

Из (13) выражаем углы Эйлера через заданные направляющие косинусы вектора $\langle \overline{P_1} \rangle$:

$$\begin{aligned} \sin \alpha &= -\frac{1}{2} \left(\cos \varphi_y - \frac{\cos \varphi_x}{\sin \varphi_z} \sqrt{4 - (\sin \varphi_z)^2} \right) \\ \cos \alpha &= -\frac{1}{2} \left(\cos \varphi_x + \frac{\cos \varphi_y}{\sin \varphi_z} \sqrt{4 - (\sin \varphi_z)^2} \right) \\ \sin \beta &= -\frac{2 \cos \varphi_z}{1 + (\cos \varphi_z)^2} \\ \cos \beta &= -\frac{(\sin \varphi_z)^2}{1 + (\cos \varphi_z)^2} \\ \sin \gamma &= -\frac{\sin \varphi_z}{2} \sqrt{4 - (\sin \varphi_z)^2} \\ \cos \gamma &= \frac{1}{2} (1 + (\cos \varphi_z)^2) \end{aligned} \quad (17)$$

Соотношения (11)–(17) определяют матрицу R и углы Ω, Ψ через геометрию микроструктуры полимера, которая является функцией температуры.

Принятое нами предположение об отсутствии корреляции между конформациями соседних мономерных единиц макромолекулы, проявившемся в независимости $\langle \overline{Q} \rangle$ и углов Ω и Ψ от номера мономерной единицы, дает возможность утверждать, что структура полимера в пространстве имеет спиралевидную форму [6, 20]. Поэтому углы Ω и Ψ могут быть основными параметрами спирали рассматриваемого полимера.

Полученный нами результат хорошо согласуется с экспериментальными и теоретическими данными, опубликованными в работах [5–6] на примере гибкоцепного полимера – полидиметилсилоксана, макромолекула которого представляет собой спиралевидную форму.

После перехода в систему K_2 средний квадрат дипольного момента всей молекулы запишется в виде:

$$\langle P^2 \rangle = \langle P_1^2 \rangle \left(M + 2 \left(\vec{l}_1^T F(R) \vec{l}_1 \right) \right) \quad (18)$$

В выражении (18) матрица $F(R)$ определяется из соотношения (10) заменой Q на R .

Последнее соотношение (18) представляет собой обобщение на случай произвольных макромолекул известных выражений для квадрата векторных характеристик полимеров с простой структурой мономерных единиц. В работе [21] R предполагается известной матрицей углов между осями локальных систем координат, жестко связанными с соседними мономерными единицами. В настоящей работе матрица R явно зависит от микроструктуры мономерной единицы сложного полимера, а заторможенность внутренних движений явно вычисляется на основе полученных выражений (12)–(17).

Покажем, что средний квадрат дипольного момента всей макромолекулы может меняться от $M \langle P_1^2 \rangle$ до $M^2 \langle P_1^2 \rangle$, где M – степень полимеризации.

Зависимость от ориентации P^2 является достаточно сильной и определяется вторым слагаемым в соотношении (18). Для нахождения этой зависимости рассмотрим матрицу $F(R)$ (10):

$$F(R) = \frac{(M-1)R}{E-R} - \frac{(R^2 - R^{M+1})}{(E-R)^2}, \quad (19)$$

где R – матрица поворота (12), а E – единичная матрица.

Собственные числа λ матрицы R определяется из уравнения:

$$(R - \lambda E) \vec{v} = 0 \quad (20)$$

И равны по модулю единице:

$$\lambda_1 = 1, \quad \lambda_{2,3} = e^{\pm i\eta} \quad (21)$$

$$\cos^2\left(\frac{\eta}{2}\right) = \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\Omega}{2}\right) \quad (22),$$

а $\vec{v} = \vec{v}(\lambda_i)$ – собственные вектора R.

При условии $\lambda = \lambda_1 = 1$ определитель системы (3) $D = \|E - R\| = 0$, и, следовательно, $F(R)$ будет неопределенной. Чтобы раскрыть эту неопределенность, обычно используют интерполяционный полином Лагранжа – Сильвестера [22]:

$$\cos^2\left(\frac{\eta}{2}\right) = \sin^2\left(\frac{\psi}{2}\right) \cos^2\left(\frac{\Omega}{2}\right) \quad (23)$$

где λ_i – корни характеристического уравнения определяются соотношениями (21). Переходя к пределу при $\lambda_1 \rightarrow 1$ для функции $F(\lambda_i)$, имеем:

$$\lim_{\lambda_1 \rightarrow 1} F(\lambda_1) = \frac{M(M-1)}{2} \quad (24)$$

Для двух других корней λ_2 и λ_3 получаем:

$$\frac{F(\lambda_2)}{(\lambda_2 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_1)} = f(\eta) \quad (25)$$

$$\frac{F(\lambda_3)}{(\lambda_3 - \lambda_2)(\lambda_3 - \lambda_1)} = f^*(\eta) \quad (26)$$

где

$$f(\eta) = \frac{i \exp(i\eta) (M-1)(1 - \exp(i\eta)) - \exp(i\eta)(1 - \exp(i(M-1)\eta))}{2 \sin \eta (1 - \exp(i\eta))^2}$$

Если $M \gg 1$, $\eta \neq 0$, что соответствует нашему случаю, выражение (24) упрощается, и матрица (19) принимает вид при $\lambda_1 \rightarrow 1$:

$$\lim_{\lambda_1 \rightarrow 1} F(R) = \frac{M(M-1)}{8 \sin^2 \eta / 2} (R^2 - 2R \cos \eta + E) \quad (27)$$

Выразим средний квадрат дипольного момента макромолекулы в виде, представляющим явную зависимость от параметров спирали Ψ и Ω , для чего перейдем к диагональной форме матрицы R:

$$R = V \Lambda V^{-1}; R^n = V \Lambda^n V^{-1}, \quad (28)$$

где Λ – матрица собственных значений характеристического уравнения (20), V – матрица преобразования, V^{-1} – ее обратная матрица:

$$V = (\vec{v}(\lambda_1), \vec{v}(\lambda_2), \vec{v}(\lambda_3)) \quad (29)$$

$$V^{-1} = \frac{1}{D(V)} \|A_{mn}\|, \quad m, n = 1, 2, 3 \quad (30)$$

В явном виде:

$$\Lambda = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \exp(i\eta) & 0 \\ 0 & 0 & \exp(-i\eta) \end{vmatrix} \quad (31)$$

$$V = \begin{vmatrix} v_{11} & v_{12} & v_{13} \\ v_{11} \operatorname{tg} \frac{\Omega}{2} & v_{12} \frac{e^{i\eta} - \cos \Omega}{\sin \Omega} & v_{13} \frac{e^{-i\eta} - \cos \Omega}{\sin \Omega} \\ v_{11} \operatorname{tg} \frac{\Omega}{2} \operatorname{tg} \frac{\Psi}{2} & v_{12} \frac{2[\sin^2 \frac{\Psi}{2} (1 - e^{i\eta} \cos \Omega) + i e^{i\eta} \sin \eta]}{\sin \Omega \sin \Psi} & v_{13} \frac{2[\sin^2 \frac{\Psi}{2} (1 - e^{-i\eta} \cos \Omega) - i e^{-i\eta} \sin \eta]}{\sin \Omega \sin \Psi} \end{vmatrix} \quad (32)$$

Определитель матрицы V:

$$D(V) = v_{11} v_{12} v_{13} \left(-8i \frac{\sin \eta \sin^2 \frac{\Omega}{2}}{\sin^2 \Omega \sin \Psi} \right) \quad (33)$$

алгебраическое дополнение:

$$A_{11} = v_{12} v_{13} 4i \frac{\sin \eta}{\sin^2 \Omega \sin \Psi} \left(\sin^2 \left(\frac{\Psi}{2} \right) \sin^2 \Omega + \cos \Omega \cos \eta - 1 \right) \quad (34)$$

Используя (27–34), получаем для второго слагаемого в выражении (18) следующее соотношение:

$$\begin{aligned} (\vec{i}_1^T, F(R) \vec{i}_1) &= (\vec{i}_1^T, V \frac{M(M-1)}{\sin^2(\eta/2)} (2(1 - \cos \eta)) V^{-1} \vec{i}_1) = \\ &= M(M-1) \frac{1}{2} \frac{v_{11}}{D(V)} A_{11} = M(M-1) \frac{1}{2} \left[1 - \left(\frac{\sin \Omega/2}{\sin \eta/2} \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (35)$$

Итак, квадрат дипольного момента всей молекулы (18), усредненный по всем конформационным состояниям цепи, примет вид:

$$\langle P^2 \rangle = \langle P_1^2 \rangle \left(M + M(M-1) \left[1 - \left(\frac{\sin \Omega/2}{\sin \eta/2} \right)^2 \right] \right) \quad (36)$$

Из выражения (36) видно, что $\langle P^2 \rangle$ зависит от степени упорядоченности средних дипольных моментов отдельных мономерных единиц.

В случае, когда все дипольные моменты отдельных мономерных единиц вытянуты в цепочку ($\Omega = 0$) и имеют одинаковые конформации ($\Psi = 0$), то геометрический фактор:

$$g = \left(\frac{\sin \Omega/2}{\sin \eta/2} \right)^2 = \frac{\sin^2(\frac{\Omega}{2})}{\sin^2(\frac{\Omega}{2}) \sin^2(\frac{\Psi}{2}) + \cos^2(\frac{\Psi}{2})}, \quad (37)$$

обращается в нуль, и

$$\langle P^2 \rangle = M^2 \langle P_1^2 \rangle \quad (38)$$

достигает наибольшего значения, а это означает, что дипольные моменты всех мономерных единиц параллельны.

В случае, когда соседние $\langle \vec{P}_\mu \rangle$ в среднем направлены в противоположные стороны ($\Omega = \pi$), что соответствует противоположным конформациям ($\Psi = \pi$) геометрический фактор $g = 1$ и квадрат дипольного момента макромолекулы достигает минимального значения, соответствующего максимальной гибкости цепи:

$$\langle P^2 \rangle = M \langle P_1^2 \rangle \quad (39)$$

Выражение (39) упрощает задачу определения поверхностной плотности нескомпенсированных связанных зарядов при термополяризационных явлениях.

Литература

- Евсикова Н.Ю., Матвеев Н.Н., Камалова Н.С. / Степень кристалличности целлюлозы и время релаксации сегментальной подвижности ее макромолекул в неоднородном температурном поле. // Вестник Воронежского государственного технического университета. 2011. т. 7. №8. с. 180–182.
- Евсикова Н.Ю., Камалова Н.С., Постников В.В., Матвеев Н.Н. / Возникновение неоднородного температурного поля при температурном сканировании кристаллизирующихся полимеров. // Фундаментальные проблемы радиоэлектронного приборостроения. 2007. Т. 7. №3. С. 99–102.
- Евсикова Н.Ю., Матвеев Н.Н., Постников В.В., Камалова Н.С., Лисицын В.И. / Термополяризационные явления в древесном слое. // В сборнике: Молодые ученые – 2008. Материалы международной научно-технической школы конференции. Российская академия наук; под редакцией А.С. Сивова. 2008. С. 72–74.
- Матвеев Н.Н., Лисицын В.И., Саушкин В.В., Камалова Н.С. Влияние конформаций гибкоцепных полимеров на изменение поляризованности в неоднородном температурном поле. Пластические массы. 2021, №1–2, с. 44–45. <https://doi.org/10.35164/0554-2901-2021-1-2-44-45>
- Matveev N.N., Kamalova N.S., Evsikova N.Y., Farberovich O. / Influence of structural inhomogeneities on the formation of the pyroelectric phase in polymers // Physics of the Solid State. 2015. Т. 57. №6. С. 1148–1150.
- Matveev N.N., Sidorkin A.S. / Pyroelectric properties polymer crystallization – melting phase transitions. // Physics of the Solid State. 1994. Т. 36. №8. С. 1326–1328.
- Бирштейн Т.М. / Конформации макромолекул и внутримолекулярные конформационные переходы. // Высокомолекулярные соединения, Серия А, 2019, том 61, №6, с. 542–552. DOI: 10.1134/S2308112019 0 60014
- Merekalova N.D., Merekalov A.S., Otmakhova O.A., Talroze R.V. / Conformation of block cooligomer macromolecules containing a discotic block. // Polymer Science. Series A. 2008. Т. 50. №1. С. 84–90
- Polotsky A.A., Birshtein T.M., Borisov O.V., Daond M. Conformations Amphiphilic Polyelectrolyte Stars with Diblock Copolymer Arms. // Macromolecules. 2013, V.46, №22, p. 8999–9012.
- Ельязевич Г.К., Баранов В.Г., Френкель С.Я., Равновесная степень кристалличности и температура плавления полимерных тел. // Физика твердого тела, 1974, том 16, №7, с. 2075–2077.

11. Stimuli-Responsive Brushes with Active Minority Components: Monte Carlo Study and Analytical Theory / S. Qi, F. Schmid, L. I. Klushin, Skvortsov A.M., Polotsky A.A., // *Macromolecules*. – 2015. – Vol. 48. – No 11. – P. 3775–3787. – DOI 10.1021/acs.macromol.5b00563
12. Birshtein T.M., Polotsky A.A., Glova A.D., Amoskov V.M., Mercurieva A.A., Nazarychev V.M., Lyulin S.V. How to fold back grafted chains in dipolar brushes// *Polymer*. – 2018. – V. 147. – P. 213-224. DOI: 10.1016/j.polymer.2018.05.076
13. Бирштейн Т.М., Птицин О.Б. Конформации макромолекул. / Под общ. Ред. Проф. Волькенштейна М.В. – М.: Наука, 1964. – 392 с.
14. Волькенштейн М.В. Конфигурационная статистика полимерных цепей. М.-Л.: Изд-во АН СССР, 1959.
15. Папулов, Ю.Г. Конформационные расчеты [Текст] / Ю.Г. Папулов, П.Г. Халатур. – Калинин: изд-во Калининского университета, 1980. – 88 с.
16. Флори П. Статистическая механика полимерных молекул. М.: Мир, 1971. 440 с.
17. Гросберг А.Ю., Хохлов А.Р. Статистическая физика макромолекул: Учеб. Руководство. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. – 344 с.
18. Бирштейн Т.М., Волчек Б.З., Меркурьева А.А., Шилов С.В. Конформации жидкокристаллических полимеров с мезогенами в основной цепи. Высокомолекулярные соединения 1993; том 35, №11, с. 1765–1771.
19. Градштейн, И.С., Рыжик, И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. [Текст] /И.С. Градштейн, И.М. Рыжик М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1971, – 1108с
20. Von Damaschun G./Röntgengraphische Untersuchung der Sructur von Silikongumm//*Kolloid. Zc.* – 1962. – V.18. – P. 65–67.
21. Bischoff R., Gray S.E., /Polysiloxanes in macromolecular architecture// *Progress in Polymer Science*, 1999, V. 24, №2, P. 185–219. DOI: 10.1016/S0079-6700(99)00006-4.
22. Гантмахер, Ф.Р. Теория матриц [Текст] / Ф.Р. Гантмахер. – М., 1967. – 576 с.