

УДК 541.64:539.199

**МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ЭВМ СОКРАЩЕНИЯ  
ВЫтянутой ПОЛИМЕРНОЙ ЦЕПИ**

*Даринский А. А., Клушин Л. И.*

Методом броуновской динамики исследован процесс сокращения модельной свободносочлененной протекаемой цепи, состоящей из  $N$  жестких звеньев, из полностью вытянутого состояния. Рассчитаны функции, описывающие изменение во времени размеров, формы и ориентации цепи. Изменение среднего расстояния между концами цепи хорошо описывается гантельной моделью с конечной растяжимостью. Сворачивание внутренних участков цепи различной длины происходит с практически одинаковой скоростью. Полученные результаты сопоставлены с предсказаниями аналитической теории для вязкоупругих моделей.

Процесс сворачивания полимерной цепи из вытянутого состояния в статистический клубок имеет место в различных ситуациях. Молекулы некоторых полимеров (полидиацетилен, полипептиды) в растворе имеют форму палочек, длина которой много больше диаметра. Такая конформация макромолекулы может быть обусловлена, например, наличием водородных связей. При резком изменении внешних условий (термическом ударе, изменении ионной силы раствора) водородные связи, стабилизирующие вытянутую конформацию макромолекулы, разрушаются, и палочка «ломается» на несколько жестких сегментов, после чего происходит сворачивание молекулы в клубок. Полимерная цепь сокращается также после выхода из экструдера, где достигается ее вытягивание, или при разрыве вытянутой проходной цепи в аморфной прослойке.

В настоящей работе изменение во времени размеров, формы и ориентации макромолекулы при переходе от полностью вытянутого к свернутому состоянию исследовано на модельной свободносочлененной цепи, состоящей из  $N$  жестких звеньев ( $N=10, 20$ ), методом броуновской динамики. Отдельное звено модельной цепи может изображать как жесткий участок ломающейся палочкообразной молекулы, так и кинетический сегмент гибкозцепной макромолекулы, которая была растянута внешней деформирующей силой. Окружение рассматриваемой полимерной цепи (растворитель в случае разбавленного раствора, звенья соседних цепей в расплаве или аморфной прослойке) описывается усредненно, как вязкая среда и источник случайных броуновских сил. Движение цепи в среде описывается уравнением Ланжевена (в случае большой вязкости инерционным членом можно пренебречь)

$$\xi \mathbf{r}_i + \lambda_i (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i+1}) + \lambda_{i-1} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}) = \mathbf{F}_i^B; \quad i=1, \dots, N+1, \quad (1)$$

где  $\mathbf{r}_i$  — координата  $i$ -го узла цепи,  $\xi$  — его коэффициент вязкого трения,  $\mathbf{F}_i^B$  — броуновская сила, обладающая следующими статистическими свойствами:

$$\langle F_{i\alpha}^B(t) \rangle = 0 \quad (2)$$

$$\langle F_{i\alpha}^B(t_1) F_{j\beta}^B(t_2) \rangle = 2kT\xi \delta(t_1 - t_2) \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta}$$

$$i, j=1, \dots, N+1 \quad \alpha, \beta=x, y, z$$

$\lambda_i$  — множители Лагранжа, которые находят из условий связи

$$(\mathbf{r}_{i+1} - \mathbf{r}_i)^2 = l_0^2, \quad (3)$$

где  $l_0$  — длина жесткого звена цепи. Каждое звено испытывает силу вязкого сопротивления и хаотические броуновские толчки со стороны окружения, а также силы реакции со стороны соседних звеньев. В работе рассматривается протекаемая модель цепи, что оправдано в случае не слишком разбавленных растворов [1].

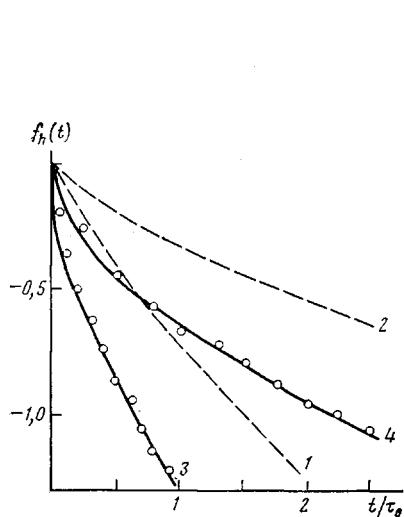


Рис. 1

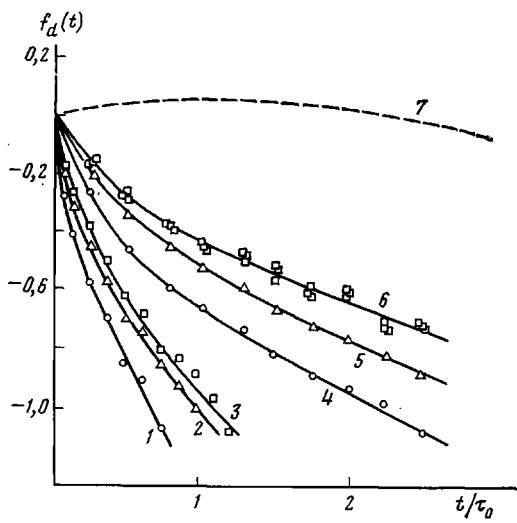


Рис. 2

Рис. 1. Зависимость от времени корреляционной функции для квадрата расстояния между концами цепи  $f_h(t) = \ln \frac{\langle h^2(t) \rangle - \langle h^2 \rangle_{eq}}{h^2(0) - \langle h^2 \rangle_{eq}}$  для моделей КС (1, 2) и FENE (3, 4)

при  $N=10$  (1, 3) и  $20$  (2, 4). Кружки — расчет методом броуновской динамики.

$$\tau_0 = \frac{\zeta l_0^2}{kT} \text{ — масштаб времени, определяемый параметрами звена}$$

Рис. 2. Временные зависимости корреляционных функций  $f_d(t) = \ln \frac{\langle d_i^2(t) \rangle - \langle d_i^2 \rangle_{eq}}{d_i^2(0) - \langle d_i^2 \rangle_{eq}}$

( $d_i$  — расстояние между концами внутреннего участка цепи, состоящего из  $i$  звеньев).  $N=10$  (1-3) и  $i=10$  (1), 6 (2), 2 (3);  $N=20$  (4-6) и  $i=20$  (4), 16 (5),  $i=12, 8, 4$  (6). 7 — модель КС,  $N=20$ ,  $i=8$

Уравнения (1) совместно с условиями связей (3) решали численно на ЭВМ на основе алгоритма, изложенного в работе [2], с начальными условиями, отвечающими полностью вытянутой цепи

$$x_i(0) = il_0, \quad y_i = z_i = 0 \quad i = 1, \dots, N+1$$

Шаг счета составлял  $5 \cdot 10^{-3} \tau_0$ , где  $\tau_0 = \frac{\zeta l_0^2}{kT}$  — масштабная единица времени для цепочки, описываемой уравнениями (1)–(3). Вычисляемые корреляционные функции усреднялись по 50 различным траекториям движения. Длина каждой траектории (1000 шагов в случае  $N=10$ , 4000 шагов в случае  $N=20$ ) была такова, что цепь успевала прийти в состояние, близкое к равновесному.

**Сокращение расстояния между концами цепи.** Изменение размеров цепи во времени можно характеризовать корреляционной функцией  $f_h(t) = \ln \frac{\langle h^2(t) \rangle - \langle h^2 \rangle_{eq}}{\langle h^2(0) \rangle - \langle h^2 \rangle_{eq}}$  (рис. 1). Равновесное значение  $\langle h^2 \rangle_{eq} = Nl_0^2$ ,

начальное значение  $\langle h^2(0) \rangle = N^2 l_0^2$ . Функция  $f_h(t)$  характеризуется относительно быстрым начальным спадом и последующей более медленной релаксацией. Первоначально цепь сворачивается за счет более подвижных

концевых участков длиной 2–4 звена. Начальный наклон зависит от длины цепочки и для  $N=10$  в  $\sim 2$  раза больше, чем для  $N=20$ . Зависимость начального наклона функции  $f_h(t)$  от  $N$  при сворачивании цепочки с концов может быть оценена следующим образом: пусть концевые участки длиной  $n$  звеньев ( $n \sim 1$ ,  $n \ll N$ ) сворачиваются за время  $\Delta t$  ( $\Delta t \sim \tau_0$  и не зависит от  $N$ , так как подвижность концевых участков определяется только характеристиками отдельного звена). Тогда начальный наклон

$$\frac{f_h(0) - f_h(t)}{\Delta t} \sim \frac{1}{\Delta t} \ln \frac{N^2 - N}{(N-n)^2 - N} \sim N^{-1} \frac{n}{\tau_0}$$

Скорость последующего спада (при  $t \geq \tau_0$ ) для 20-звенной цепочки в 4 раза меньше, чем для 10-звенной. Она определяется наиболее медленным типом движения, существующим в цепи, и для полностью протекаемой модели пропорциональна  $N^{-2}$ .

**Сравнение с аналитическими теориями.** Для аналитического описания крупномасштабных движений протекаемой полимерной цепи могут быть использованы две модели: модель гауссовых субцепей Каргина – Слонимского (КС), применимая при не слишком больших отклонениях от равновесия (вязкоупругая цепь может быть неограниченно деформирована и поэтому плохо описывает поведение цепи из жестких звеньев при больших деформациях, где существует эффект конечной растяжимости цепи); модель цепи с конечной растяжимостью (гантельная модель FENE) [3]. В этой модели упругая сила, возвращающая растянутую гантель в равновесное состояние, имеет вид

$$F = \frac{Wh}{1 - h^2/h_0^2}, \quad (4)$$

где  $h_0$  – длина предельно растянутой гантели,  $W = \frac{3kT}{\langle h^2 \rangle_{eq}} \left( 1 - \frac{5}{3} \frac{\langle h^2 \rangle_{eq}}{h_0^2} \right)$

в случае  $\langle h^2 \rangle_{eq} \ll h_0^2$ .

Уравнения движения для такой модели могут быть приближенно решены; в результате величина  $\langle h^2(t) \rangle$  задается неявно уравнением

$$\frac{1}{a} \left( 1 - \frac{\langle h^2(t) \rangle}{h_0^2} \right) + \frac{1}{a^2} \ln \left( \frac{\langle h^2(t) \rangle - \langle h^2 \rangle_{eq}}{h_0^2} \right) = -\frac{t}{\tau}, \quad (5)$$

где  $a = 1 + \frac{\langle h^2 \rangle_{eq}}{h_0^2}$ ,  $\tau = \frac{\zeta_2}{8W}$ ,  $\zeta_2$  – полный коэффициент трения гантели.

Корреляционные функции  $f_h(t)$ , вычисленные для моделей КС и FENE, также приведены на рис. 1. В модели КС, состоящей из  $N$  субцепей, среднеквадратичную длину одной субцепи полагали равной длине  $l_0$  жесткого звена свободносочлененной цепи, а коэффициент трения субцепи – равным коэффициенту трения узла  $\zeta$ .

Полный коэффициент трения гантели  $\zeta_2$  в модели FENE был выбран так, чтобы при малых отклонениях от равновесия время релаксации гантельной модели совпадало со временем релаксации наиболее медленной моды вязкоупругой цепочки КС

$$\frac{\zeta_2 \langle h^2 \rangle_{eq}}{24kT \left( 1 - \frac{5}{3} \frac{\langle h^2 \rangle_{eq}}{h_0^2} \right)} \simeq \frac{\zeta l_0^2 (N+1)^2}{6kT\pi^2}; \quad (6)$$

отсюда

$$\zeta_2 \simeq \frac{4}{\pi^2} \left( N + \frac{1}{3} \right) \zeta,$$

что дает  $\zeta_2 = 4,2\zeta$  для  $N=10$  и  $\zeta_2 = 8,2\zeta$  для  $N=20$ .

Из рис. 1 видно, что при указанном выборе коэффициента трения гантели модель FENE хорошо описывает всю зависимость  $\langle h^2(t) \rangle$  за исключением начального участка, где скорость сокращения цепи завышается.

Это связано с тем, что при  $t=0$   $h=h_0$  и упругая возвращающая сила бесконечна. В более реалистической свободносочлененной модели скорость сокращения цепи из любого начального состояния не может превышать подвижности отдельного звена.

В модели КС начальное состояние, отвечающее растянутой цепи, было выбрано следующим образом: все субцепи имеют одинаковую длину  $l_0$  и ориентированы вдоль оси  $X$ . Сокращение вязкоупругой цепи из такого состояния происходит заметно медленнее, чем сокращение свободносочлененной цепи, особенно в начальной стадии. Наклоны кривых  $f_h(t)$  близки лишь в области малых отклонений от равновесия.

**Сокращение внутренних участков цепи.** Для того, чтобы детальнее представить картину сворачивания цепи, рассмотрим поведение величин  $\langle d_i^2(t) \rangle$  ( $d_i = r_{\frac{N+i+2}{2}} - r_{\frac{N-i+2}{2}}$ ), описывающих сокращение внутренних участков цепи различной длины ( $i$  — длина участка в звеньях). Нормированные корреляционные функции

$$f_d(t) = \ln \frac{\langle d_i^2(t) \rangle - \langle d_i^2 \rangle_{eq}}{\langle d_i^2(0) \rangle - \langle d_i^2 \rangle_{eq}}$$

приведены на рис. 2. Для 10-звенной цепочки  $i=2$  и  $6$ , для 20-звенной  $i=4, 8, 12$  и  $16$ .

Скорость сокращения внутренних участков меньше, нежели всей цепочки, поскольку в этом случае не вносится вклад более подвижных концевых участков. Внутренние участки цепи, удаленные от концов на 4 звена и более (рис. 2, участки длиной 4, 8 и 12 звеньев 20-звенной цепи), сокращаются с одинаковой скоростью. Эта независимость скорости от длины участка объясняется тем, что сворачивание коротких внутренних участков растянутой цепочки требует подтягивания длинных «хвостов» цепи.

Модель КС предсказывает качественно иное временное поведение величины  $\langle d_i^2(t) \rangle$ . На рис. 2 приведена зависимость от времени функции  $f_d(t)$  для внутреннего участка 20-звенной цепи КС, состоящего из 8 звеньев. Сначала  $f_d(t)$  растет и лишь спустя некоторое время начинает уменьшаться. В то же время полная длина цепи монотонно убывает (рис. 1). Такое поведение внутренних участков цепи связано с возможностью дополнительного деформирования модели КС в вытянутом состоянии. В модели из жестких звеньев внутренние участки только сокращаются.

**Изменение формы цепи.** При сворачивании цепь меняет свою форму, превращаясь из палочки в клубок. За изменением формы цепи можно следить по изменению компонент  $\langle R_i(t) \rangle$  ( $i=1, 2, 3$ ) тензора моментов инерции. В начальный момент  $R_1(0)=0, R_2(0)=R_3(0)=\frac{l_0^2}{12}N(N+1)(N+2)$ .

В качестве характеристики формы выберем отношение  $\langle R_1(t) \rangle / \langle R_2(t) \rangle$ , представляющее собой отношение осей эквивалентного эллипсоида. Для равновесного гауссова клубка  $\langle R_1 \rangle_{gauss} / \langle R_2 \rangle_{gauss} = 1/3$  [4].

На рис. 3 представлены полученные временные зависимости  $p^0(t) = \frac{\langle R_1(t) \rangle}{\langle R_2(t) \rangle} / \frac{\langle R_1 \rangle_{gauss}}{\langle R_2 \rangle_{gauss}}$  а также  $\frac{\langle R_2(t) \rangle}{R_2(0)}$ . Во все моменты времени

значения  $\langle R_2(t) \rangle$  и  $\langle R_3(t) \rangle$  совпадают в силу осевой симметрии задачи.

**Изменение вектора расстояния между концами цепи.** Изменение вектора  $h$  в ходе сворачивания цепи описывалось двумя корреляционными функциями:  $\frac{\langle h(0)h(t) \rangle}{h^2(0)}$  и  $\langle e(0)e(t) \rangle$ , где  $e=h/|h|$  — единичный вектор,

направленный по  $h$  (рис. 4). Затухание корреляционной функции  $\langle h(0)h(t) \rangle / h^2(0)$  обусловлено двумя факторами: поворотом вектора  $h$  и сокращением его длины, тогда как функция  $\langle e(0)e(t) \rangle$  описывает «числый» поворот вектора  $h$ .

Временное поведение этих двух функций существенно различается. Скорость релаксации первой из них убывает со временем, что характерно

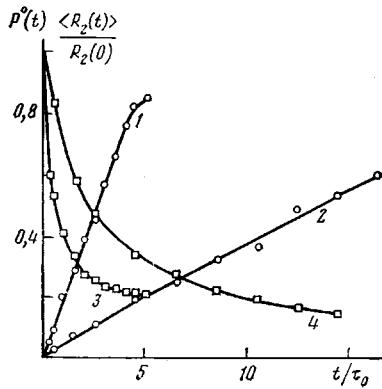


Рис. 3

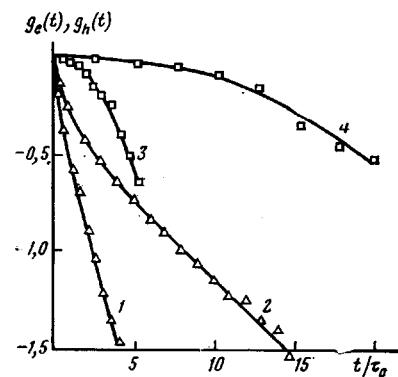


Рис. 4

Рис. 3. Изменение формы цепи: временные зависимости осевого отношения эквивалентного эллипсоида  $p^{(0)}(t) = \frac{\langle R_1(t) \rangle}{\langle R_2(t) \rangle} / \frac{\langle R_1 \rangle_{gauss}}{\langle R_2 \rangle_{gauss}}$  (1, 2) и длиной оси эквивалентного эллипсоида  $\frac{\langle R_2(t) \rangle}{R_2(0)}$  (3, 4) для  $N=10$  (1, 3) и  $20$  (2, 4)

Рис. 4. Изменение вектора  $\mathbf{h}$ : временные зависимости корреляционных функций  $g_h(t) = \ln \frac{\langle \mathbf{h}(0) \mathbf{h}(t) \rangle}{h^2(0)}$  (1, 2) и  $g_e(t) = \ln \langle \mathbf{e}(0) \mathbf{e}(t) \rangle$  (3, 4) для  $N=10$  (1, 3) и  $20$  (2, 4);  $\mathbf{e}$  — единичный вектор, направленный по  $\mathbf{h}$

для систем со спектром времен релаксации. В то же время скорость поворота вектора  $\mathbf{h}$  увеличивается со временем. Причина такого поведения состоит в следующем. Можно грубо положить, что вектор  $\mathbf{h}$  направлен вдоль длиной оси эквивалентного эллипса (в начальный момент они точно совпадают). Средняя скорость поворота длиной оси в момент времени  $t$  определяется компонентой  $\langle Z_2(t) \rangle$  тензора моментов вязкого трения, который в случае однородной цепи связан с тензором моментов инерции простым соотношением

$$\langle Z_{ik}(t) \rangle = \zeta \langle R_{ik}(t) \rangle \quad (7)$$

По мере сокращения цепи величина  $\langle R_2(t) \rangle$  уменьшается (рис. 3), и скорость поворота длиной оси и вектора  $\mathbf{h}$  возрастает.

**Ориентационная подвижность звена в цепи.** Об ориентационной подвижности отдельного звена в цепи можно судить по временной зависимости  $P_1(\cos \theta_k(t))$  и  $P_2(\cos \theta_k(t))$  [2] — полиномов Лежандра от косинуса угла  $\theta_k$  поворота  $k$ -го звена за время  $t$

$$P_1(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \langle \cos \theta_k(t) \rangle \quad P_2(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \frac{3}{2} \left\langle \cos^2 \theta_k(t) - \frac{1}{3} \right\rangle \quad (8)$$

Для равновесной динамики свободносочлененной цепи с большой точностью выполняется соотношение [2]

$$P_2(t) = P_1^3(t) \quad (9)$$

В данном случае, когда начальное состояние соответствует полностью вытянутой цепи, корреляционная функция  $P_1(t)$  совпадает с функцией  $\frac{\langle \mathbf{h}(0) \mathbf{h}(t) \rangle}{h^2(0)}$

$$P_1(t) = \frac{1}{Nl_0^2} \sum_{k=1}^N \langle \mathbf{b}_k(0) \mathbf{b}_k(t) \rangle = \frac{1}{N^2 l_0^2} \left\langle N \mathbf{b}_k(0) \sum_{k=1}^N \mathbf{b}_k(t) \right\rangle = \frac{\langle \mathbf{h}(0) \mathbf{h}(t) \rangle}{h^2(0)} \quad (10)$$

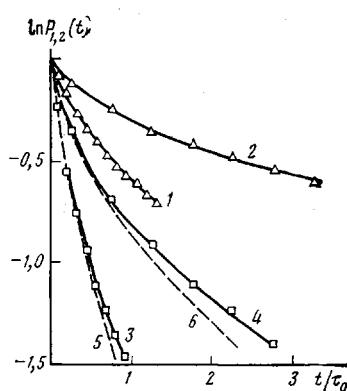


Рис. 5

Рис. 5. Ориентационная подвижность отдельных звеньев в растянутой цепочке (средняя по всем звеньям): 1, 2 –  $P_1(t)$ ; 3, 4 –  $P_2(t)$ ; 5, 6 –  $P_1^3(t)$  для  $N=10$  (1, 3, 5) и  $20$  (2, 4, 6)

Рис. 6. Релаксация нормальных мод: 1, 2 – зависимость от времени корреляционной функции  $g_Q(t) = \frac{\langle Q_i(0)Q_i(t) \rangle}{Q_i^2(0)}$ , 3, 4 – то же для  $Q_3$  при  $N=10$  (1, 3) и  $20$  (2, 4)

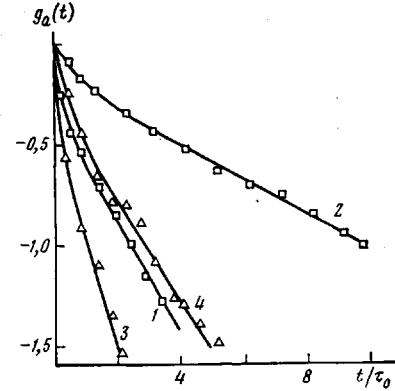


Рис. 6

( $b_k$  – вектор  $k$ -го звена цепи), и, следовательно, скорость ее релаксации определяется полной длиной цепи. Расчет показывает, что соотношение (9) удовлетворительно выполняется и в рассматриваемом случае (рис. 5), т. е. релаксация  $P_2(t)$  также определяется движением всей цепи.

Таким образом, ориентационная подвижность отдельных звеньев контролируется скоростью сворачивания цепочки.

**Релаксация нормальных мод.** При релаксации свободносочлененной цепи в случае слабых отклонений от равновесия колективные переменные

$$Q_i = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sum_{k=1}^N \sin \frac{\pi k i}{N+1} b_k$$

с хорошей точностью являются независимыми нормальными модами [2]

$$\langle Q_i(0)Q_k(t) \rangle = \delta_{ik} \langle Q_k^2 \rangle_{eq} \exp\left(-\frac{t}{\tau_k}\right) \quad (11)$$

Мы провели расчет корреляционных функций  $\langle Q_k(0)Q_k(t) \rangle$ , описывающих релаксацию крупномасштабных мод ( $k=1,3$ ;  $\langle Q_2(0)Q_2(t) \rangle = 0$ , так как  $Q_2(0) = 0$ ) и для сокращения цепи из полностью вытянутого состояния (рис. 6).

Видно, что при сильном растяжении цепи переменные  $Q_k$ , строго говоря, не являются нормальными модами, и их релаксация не описывается одной временной экспонентой. Это связано с тем, что в начальный момент времени перекрестные произведения  $\langle Q_i(0)Q_k(0) \rangle_{i \neq k}$  отличны от нуля. Кроме того, при больших растяжениях может сильнее сказываться нелинейность рассматриваемой системы. Когда степень растяжения цепи  $\langle h^2(t) \rangle / \langle h^2 \rangle_{eq}$  уменьшается до 3–4, временная зависимость  $\ln \frac{\langle Q_k(0)Q_k(t) \rangle}{Q_k^2(0)}$

становится линейной. В таблице приведены характерные времена релаксации первой и третьей мод  $\tau_1^{(e)}$  и  $\tau_3^{(e)}$ , определенные по спаду корреляционной функции в  $e$  раз, и  $\tau_1$  и  $\tau_3$ , определенные по наклону линейного участка при больших  $t$ .

**Времена релаксации первой и третьей нормальных мод при сворачивании вытянутой цепи**

$N$	$\tau_1^{(e)}$	$\tau_1$	$\tau_1^{eq}$	$\tau_3^{(e)}$	$\tau_3$	$\tau_3^{eq}$
10	3	4	4,1	0,8	1,0	1,58
20	11	13	15	3,2	4,0	1,75

Примечание. Времена релаксации выражены в единицах  $\tau_0 = \frac{\xi l_0^2}{kT}$ .

Время релаксации  $k$ -й нормальной моды, предсказываемое аналитической теорией для равновесной динамики свободносочлененной цепи, определяется формулой [5]

$$\frac{1}{\tau_k^{eq}} = \frac{6kT}{\xi l_0^2} \frac{1 - \cos \frac{\pi k}{N+1}}{1 + \frac{1}{2} \left( 1 - \cos \frac{\pi k}{N+1} \right)} \quad (12)$$

Значения  $\tau_1^{eq}$  и  $\tau_3^{eq}$  также приведены в таблице.

Время релаксации  $\tau_1$  первой моды при сокращении сильно растянутой цепи близко к значению  $\tau_1^{eq}$  (таблица). В то же время  $\tau_3$  для третьей моды в  $\sim 2$  раза больше соответствующего времени  $\tau_3^{eq}$ .

Релаксация первой моды происходит в основном путем сворачивания всей цепи до размеров, соответствующих равновесному состоянию, тогда как релаксация третьей моды осуществляется вследствие более мелкомасштабных движений, происходящих на фоне растянутой конформации цепи. Если свободносочлененную цепь в растянутом состоянии приближенно рассматривать как равновесную цепь со статистической корреляцией ориентации звеньев, то в такой цепи, как следует из работы [6], время релаксации нормальной моды  $\tau_3$  будет больше, чем в свободносочлененной цепи. Это может объяснить наблюдаемое замедление релаксации переменной  $Q_3$  по сравнению с равновесной динамикой.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Де Жен П. Идеи скейлинга в физике полимеров. М.: Мир, 1982, с. 236.
2. Даринский А. А., Неелов И. М., Клужин Л. И. В кн.: II Всесоюз. совещ. «Математические методы исследования полимеров». Пущино: НЦБЕИ АН СССР, 1982, с. 87.
3. Bird R. B., Hassager O. Dynamics of polymeric liquids. N. Y.: Wiley, 1977, p. 495.
4. Готлиб Ю. Я., Светлов Ю. Е. Высокомолек. соед. А, 1967, т. 9, № 5, с. 1150.
5. Gotlib Yu. Ya., Darinsky A. A., Klushin L. I., Neelov I. M. Acta Polymerica, 1984, B, 35, № 2, S. 124.
6. Готлиб Ю. Я., Даринский А. А., Неелов И. М. Высокомолек. соед. А, 1978, т. 20, № 1, с. 38.

Институт высокомолекулярных  
соединений АН СССР

Поступила в редакцию  
29.VII.1983

#### COMPUTER SIMULATION OF CONTRACTION OF STRAIGHTENED POLYMER CHAIN

*Darinskii A. A., Klushin L. I.*

S u m m a r y

The contraction of the model freely jointed permeable chain consisting of  $N$  rigid units from completely straightened state has been studied by Brownian dynamics method. The functions describing the change of dimensions, shape and orientation of the chain are calculated. The change of the average distance between the ends of the chain is described well by the dumb-bell model with finite elongation. Coiling of internal parts of the chain of various length proceeds with practically same rate. The results are compared with predictions of the analytical theory for viscoelastic models.