

ОСОБЛИВОСТІ ФАЗОВИХ ДІАГРАМ КОЛИВАНЬ ДВОЧАСТОТНОГО СФЕРИЧНОГО МАЯТНИКА

В попередній роботі були змодельовані обертальні коливання молекул води в неоднорідному і направленому полі сил (НПС) у пакеті *MatLab* за допомогою моделі двохчастотного сферичного маятника. Показано, що головною причиною синхронізації частот для випадку спрямованих сил зв'язку є сильна залежність частоти коливань від зміщену і кута вигину H -зв'язку. Метою цієї роботи є побудова фазових діаграм для прискорень, що дозволяє вивчити динаміку двовимірних коливань для різних кутів θ відхилення маятника в НПС вигляду $G = g \cos^n \theta$ із ступеню неоднорідності поля $n = 8$. Найбільші зміни від еліптичності для діаграм спостерігаються для більшого значення відношення моментів інерції молекул по осям $k = I_y / I_x = 3$.

Зазвичай розглядають фазові діаграми коливань як залежності швидкості від зміщень. Для гармонійних малих незатухаючих коливань сила лінійна від координати, а фазова діаграма для швидкості від зміщень є еліпсом. Двовимірні коливання зазвичай не розглядалися. Наявність НПС і двох частот у маятника повинні привести до сильної ангармонічності коливань і зміни вигляду фазових діаграм. Фазові діаграми були розглянуті тільки для еліптичних траєкторій, які є найбільш простими. Для нееліптичних траєкторій фазові діаграми більш складні та постійно змінюються з часом.

Бачимо на рис. 1, що із ростом величин швидкостей та зміщень уздовж осі X фазові діаграми змінюються і в напрямку осі X загострюються і стають ромбоподібними, а для фазової діаграми уздовж осі Y стають майже прямокутними.

На рис. 2 показані силові фазові діаграми для прискорень (і сили) маятника $a_x - x$ і $a_y - y$. Бачимо наявність максимуму сили та значне зменшення її за великих величин зміщень уздовж осі X . Дані зменшення сили залежать від початкових величин швидкостей і відповідної кінетичної енергії. Також бачимо, що силові фазові траєкторії вздовж осі Y відчувають як би великі прискорення із зростанням відхилення. Насправді це звичайні прискорення за великих відхилень по осі Y (X мало), хоча і зменшені в k разів, порівняно з прискореннями по осі X . Вони значно зменшуються поблизу осі Y , коли спостерігаються найбільші відхилення вздовж осі X і, відповідно, радіуса і кута θ та мають мінімальні прискорення у НПС при цьому. Бачимо для еліптичних орбіт відносне зменшення сили по осі X

порівняно з її максимумом для відношення моментів інерції $k = 3$ – до $0,2 \dots 0,4$. Однак для еліпсоподібних орбіт поблизу максимально можливої початкової швидкості руху зменшення сили може бути ще більш значним.

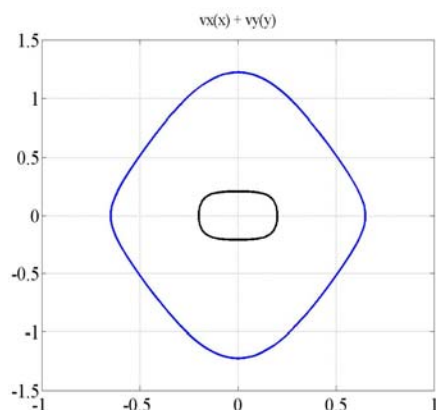


Рисунок 1 – Фазові траєкторії орбіт для осей X (зовнішня орбіта) та Y (внутрішня) для випадку $k=3, n=8$

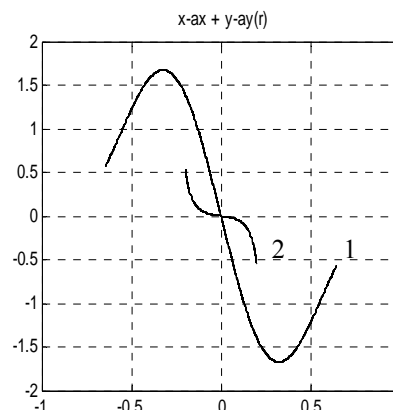


Рисунок 2 – Силкові фазові траєкторії при $n=8$ та $k=3$, крива 1 – залежність a_x-x , крива 2 – a_y-y

Зменшення з ростом відхилення маятника сил, що повертають його назад до осі Z веде за сталої кінетичної енергії до зростання амплітуди коливань та загострення діаграми біля осі X. Таким чином, головною причиною гальмування коливань двочастотного сферичного маятника у НПС є швидке зменшення сил, що повертають його назад, ведуть до більш повільного руху маятника, зростання часу його перебування в далеких точках траєкторії та зменшення його частоти із зростанням амплітуди відхилень, а також появи при цьому результуючого обертального моменту сил відносно осі Z. Це призводить також до «закруглення» кутів прямокутних областей для незалежних коливань, зближенню частот і переходу раніше незалежних двочастотних коливань до еліпсоподібних обертань навколо осі Z на загальній частоті.

Зазначені особливості коливань двочастотного сферичного маятника в неоднорідному полі сил узгоджуються з частотними особливостями лібраційних коливань молекул води, що вказує на необхідність врахування спрямованого неоднорідного поля сил в розрахунках потенціалів та сил між молекулами води під час моделювання їх коливань методом молекулярної динаміки.