

ТОРОЇДАЛЬНИЙ ПОТЕНЦІАЛ ДВОХЧАСТОТНИХ КОЛИВАНЬ МОЛЕКУЛИ ВОДИ

Аналіз двохчастотних коливань молекул води потребує правильного опису його енергетичного потенціалу. Цей потенціал повинен забезпечити дві частоти коливань, що пов'язані з відмінністю моментів інерції молекули по осям ($k = I_x / I_y$). Це веде до різної кривизни потенціалу по осям Y і X .

У моделі двохчастотного маятника маємо для нього різні ефективні довжини по осям. Це пов'язано з тим, що по вісі Y рухається центр тяжіння двох мас маятника. Тому потрібно математично правильно описати цей потенціал. Неправильний опис потенціалу двохчастотного маятника веде до невиконання для нього закону збереження енергії. Для однієї точки підвісу маятника – в нас не буде спільного мінімуму потенціалу. Для еліптичного потенціалу – буде не вірно змінюватися сили та частоти з кутом відхилення від рівноваги θ . Тому точки підвісу повинні бути на різній висоті з спільним мінімумом потенціалу. Така поверхня потенціалу (рис. 1,а) має форму тора, хоча для молекули води і без дірки всередині ($I_x / I_y < 2$). На висоті $I_y = R$ потенціал має найбільшу ширину по вісі Y , а потім звужується. Лінії сталого рівня мають поблизу мінімуму форму еліпсів (рис. 1,б).

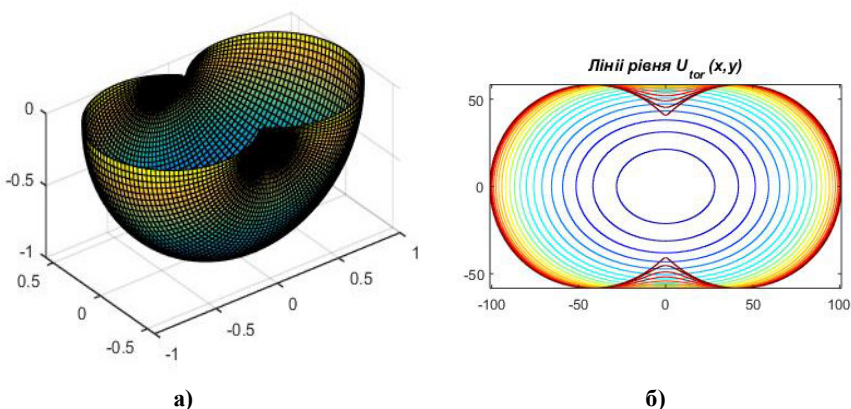


Рис. 1. Тороїдальний потенціал двохчастотних коливань молекули для відношення моментів інерції $k = 3$ у однорідному полі сил ($n = 0$, $U_o = 1$): а – вигляд потенціалу, б - лінії сталого рівня потенціалу

Даний тороїдальний потенціал задається кутами відхилення α і β по осям X і Y , відповідно:

$$\begin{cases} x = (\Delta R + R \cdot \cos \beta) \sin \alpha \\ y = R \sin \beta \\ z = (\Delta R + R \cdot \cos \beta) \cos \alpha \end{cases}$$

де $l_x = 1$, $l_y = 1/\sqrt{k} = R$, $\Delta R = 1 - R$.

Потенціал молекули дорівнює величині $U = U_o z$,

де U_o – величина потенціалу в його мінімуму.

На рис. 2,а показано залежності для цього потенціалу в неоднорідному полі сил (НПС) ($F_{НПС} = F \cos^4 \theta$), на рис. 2,б – показані сталі рівні цього потенціалу (крок $\Delta U = U_o / 20$, де $U_o = 1$).

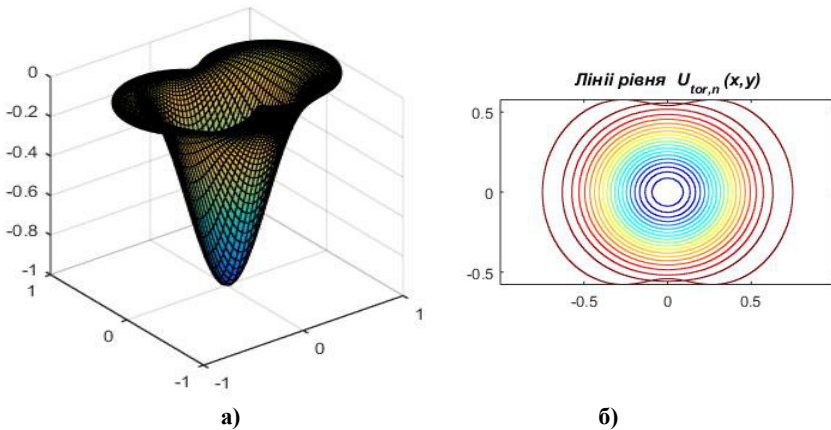


Рис. 2. Тороїдальний потенціал молекули для відношення моментів інерції $k = 3$ у НПС ($n = 8$): а – вигляд потенціалу, б - рівні сталого потенціалу

Бачимо суттєву спрямованість потенціалу вздовж осі Z (осі зв'язку молекули) у НПС та згущення ліній рівня цього потенціалу у середній його частині та малу еліптичності еліптичність на відміну рис. 1. Внаслідок НПС потенціал стає малим за відносних відхилень від рівноваги $\delta > 0,6$ та бачимо значне розширення між лініями рівня потенціалу при цьому. Зменшення еліптичності в НПС з ростом його ступеневого показника n може вести до зближення частот по осям і більшому інтервалу існування одночастотних еліпсоподібних коливань двохчастотного маятника.