М.Т. Малафаєв, канд. фіз.-мат. наук *(ХДУХТ, Харків)*

МОДЕЛЮВАННЯ ОБЕРТАЛЬНИХ КОЛИВАНЬ МОЛЕКУЛ ВОДИ

Властивості та аномалії води, що присутня у харчових продуктах, обумовлені наявністю у ній лібраційних (обертальних двовимірних) мод коливань молекул, які супроводжуються обертаннями протонів молекул води навколо осей водневих зв'язків [Малафаев Н.Т. О взаимодействиях и динамике молекул в чистой воде // ЕЕЈЕТ, Східно-Європейський журнал передових технологій. – Х., 2011. - № 4/8 (52). - С. 48–58] та призводять до відповідних динамічних вигинів цих зв'язків внаслідок відцентрових сил інерції. Оскільки в літературі відсутні розрахунки таких коливань та їх аналіз, то стоїть актуальне питання про розв’язок цієї задачі.

У повному обсязі дана задача є тривимірною і з великим числом всіх молекул і атомів. Тому в першому наближенні запропоновано, за умови відсутності теплового руху, розглянути власні коливання лише однієї молекули в однорідному полі сил і спростити задачу до двовимірного маятника – з обертаннями мас навколо однієї осі.

Найбільшою фізичної проблемою для цієї задачі є визначення механізмів, що відповідають за появу зв'язку між двома незалежними власними коливаннями молекули. Тому необхідно проаналізувати причини перетворення фізичного маятника на конічний, який здійснює вже не незалежні двохчастотні коливання, а єдині кругові обертання.

Чисельні розрахунки коливань двохчастотного фізичного маятника, проведені в пакеті MatLab, вказують на незалежність їх коливань. Якщо частоти по осях незалежні, відрізняються в 2 рази, а початкові фази коливань нульові – ми отримаємо траєкторії руху у вигляді вісімок – фігур Лісажу (рис. 1) та якщо зв’язані, як для конічного маятника – одержимо кругові обертання маятника (рис. 2).

Отже аналіз показує, що зміна характеру обертальних коливань для конічного маятника обумовлено наявністю початкової поперечної швидкості та її обертальної кінетичної енергії. Це веде до переважання кінетичної енергії обертання маятника над потенційною, що обмежує їх взаємне перетворення. Унаслідок появи значної відцентрової сили відбувається стабілізація кругових обертань для конічного маятника замість раніше незалежних власних коливань фізичного маятника.

Аналогічно розрахункам для конічного маятника можна очікувати кругові обертання в протонів води навколо осей водневих зв'язків.

Аналіз рівняння руху конічного маятника вказує, що за частот збудження більших, ніж частота математичного маятника, рішення рівняння руху дає величину кута конуса α. При частотах збудження коливань не більших за цієї частоти – одержимо для кута конуса α = 0.

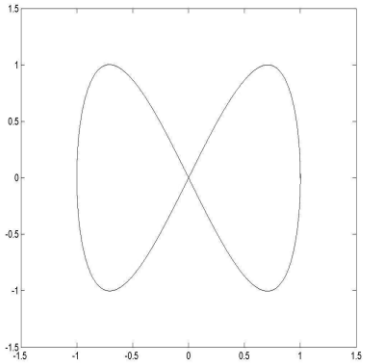

Рисунок 1 – Траєкторія коливань двохчастотного фізичного маятника з частотами кратними двійке

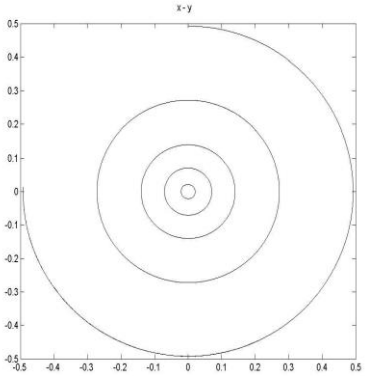

Рисунок 2 – Розрахунки траєкторій обертань двохчастотного конічного маятника за різних швидкостей

Остання ситуація для молекул води відповідає відсутності стійкого вигину осей водневих зв'язків, що й спостерігається у льоду, власні частоти коливань в якому більш високі, ніж у воді. Під час випадкових збуджень коливань протонів їх частоти будуть не більшими, порівняно з власними частотами їх коливань у льоду й тому мінімум потенціалу відповідає куту α = 0. Дані коливання протонів будуть швидко загасати внаслідок випромінювання їх зарядів.

У воді в рідкій фазі внаслідок ослаблення сил зв'язків та зниження частот власних обертальних коливань протонів молекули кут конуса α стає ненульовим, тобто плавлення льоду супроводжується появою вигинів осей водневих зв'язків. Втрати на випромінювання в рідкій воді будуть меншими, ніж у льоду, як внаслідок зниження частот коливань та інтенсивності їх випромінювання через ослаблення сил зв'язків, так і в значній мірі вони можуть компенсуватися внаслідок поглинання електромагнітної енергії від сусідніх молекул, що здійснюють аналогічні кооперативні лібраційні коливання.

Внаслідок кооперативності лібраційних коливань молекул у воді вони мають велику колективну коливальну енергію сусідніх молекул – кластера. Це також буде стабілізувати дані кооперативні кругові обертання протонів навколо осей водневих зв'язків між її молекулами.