

## СИЛОВІ ОСОБЛИВОСТІ ДВОЧАСТОТНИХ КОЛИВАНЬ МОЛЕКУЛ ВОДИ В НЕОДНОРІДНОМУ ПОЛІ СИЛ

Проведено локальне моделювання обертальних коливань молекул води в пакеті *MatLab* із допомогою моделі двохчастотного сферичного маятника для відношень моментів інерції її молекул  $k = I_Y / I_X = 1,5$  і  $3$  в неоднорідному полі сил (НПС) виду  $G = g \cos^n \theta$  для показника  $n = 8$ . Для малих початкових швидкостей маятника спостерігаються обертальні незалежні коливання маятника на двох частотах у прямокутній області. При зростанні швидкості відбувається перехід від незалежних коливань до еліпсоподібних обертань маятника.

На рис. 1 показані часові залежності координат, швидкостей і прискорень для еліпсів уздовж осей  $X$  та  $Y$ . Якщо для координат синусоїди слабо спотворені, то для швидкостей і прискорень бачимо значні ефекти загострення або заокруглення синусоїд. Ці зміни можна трактувати як появу значних вкладів від непарних гармонік коливань.

При аналізі коливань розглянуто їх еліптичні траєкторії коливань методом фазової площини.

Для двовимірних коливань розглянуто фазові траєкторії роздільно по обох осях (швидкості від координати – рис. 2, а) і силові фазові траєкторії (прискорення від координати – рис. 2, б). З ростом швидкості і зміщень в напрямку осі  $X$  еліпси коливань стають подібними до ромба, а для осі  $Y$  – до прямокутника (рис. 2, а).

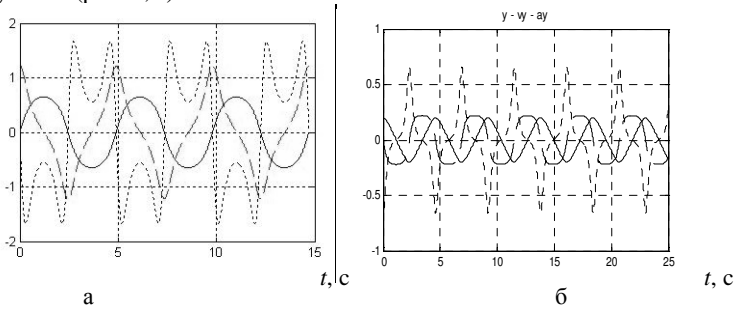
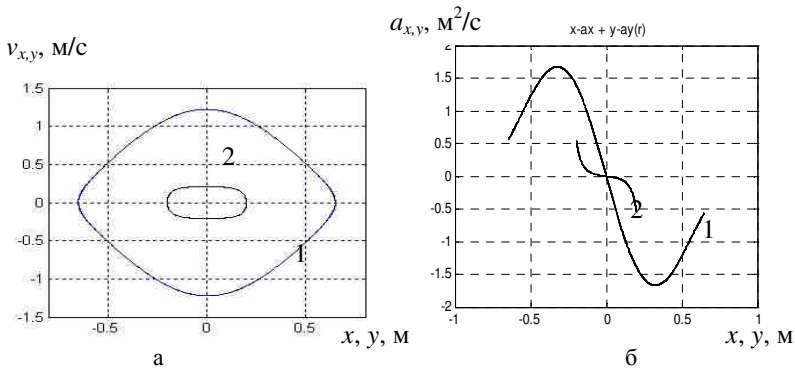


Рис. 1. Залежності для координат (—), швидкостей (---) і прискорень (····) еліптичної орбіти ( $k = 3, v_{x0} = 1,222$  м/с) вздовж осей: а –  $X$ ; б –  $Y$

Силові фазові траєкторії (рис. 2 – б) вздовж осі  $X$  мають максимум сили (прискорення) із зростанням зміщення. Зміни прискорень для зміщень по координатам (рис. 2 – б) корелюють зі змінами прискорень від часу на рис. 1 – бачимо значні зменшення прискорень вздовж осі  $X$  за

максимальних відхилень маятника. По осі  $Y$  прискорення значно зменшується поблизу осі  $Y$ , коли в нас найбільші відхилення маятника вздовж осі  $X$  і мінімальні спільні прискорення. Цей ефект зростає із зростанням відношення моментів  $k$ . Дані залежності (рис. 1 і 2) свідчать про значну ангармонійність сил під час коливань в НПС.



**Рис. 2. Фазові траєкторії еліптичної орбіти для  $k = 3, v_{x0} = 1,222$  м/с:**  
**а) фазові траєкторії:** крива 1 – залежність  $v_x - x$ , крива 2 –  $v_y - y$ ;  
**б) силові фазові траєкторії:** крива 1 – залежність  $a_x - x$ , крива 2 –  $a_y - y$

Внаслідок центральної симетричності кривих (рис. 2, б) ми можемо говорити про їх опис многочленами з непарними степенями  $x^m$ , що повинно призводити до появи непарних гармонік коливань  $\sin(m\theta)$ . Проведено Фур'є – аналіз еліптичних орбіт і встановлено вклади гармонік, що зростають у  $m$  та  $m^2$  разів для швидкостей та прискорень.

З моделі двохчастотного сферичного маятника в НПС встановлено, що найважливішою характеристикою для пояснення його особливостей коливань в НПС є його силові фазові траєкторії. Причиною аномальних коливань сферичного маятника в НПС є ангармонійність повертаючих сил від кута відхилень. Це призводить до зниження частоти коливань і можливості синхронізації раніше незалежних двох коливань на єдиній частоті обертання.

Дані особливості коливань двохчастотного сферичного маятника в неоднорідному полі сил узгоджуються з особливостями коливань молекул води, що вказує на необхідність врахування неоднорідного спрямованого поля сил в розрахунках потенціалів для молекул води під час моделювання їх коливань методом молекулярної динаміки.