

ОБЕРТАЛЬНІ КОЛИВАННЯ МОЛЕКУЛ ВОДИ ЯК КОЛИВАННЯ СФЕРИЧНОГО МАЯТНИКА В НЕОДНОРІДНОМУ ПОЛІ СИЛ

Проведено локальне моделювання обертальних коливань молекул в пакеті *MatLab* в неоднорідному полі сил (НПС) виду $G = g \cos^n \theta$ із допомогою моделі сферичного маятника для різних показників НПС n . Аналіз одночастотних коливань сферичного маятника в НПС дозволяє розглянути загальні особливості коливань молекул води.

Повертаюча сила для маятника ($m = 1$ кг) дорівнює для сфери $F_c = G \sin \theta = g \cos^n \theta \sin \theta$. Ця сила (рис. 1, а) нелінійно зменшується з зростанням відносних відхилень маятника $\delta_r = r/l = \sin \theta$ та показника НПС n і має максимуми для $n > 1$ навіть для малих зміщень маятника δ_r .

На рис. 1, б представлено вид потенціалу маятника $U(n) = \int F_c d\theta$ в залежності від відносного відхилення маятника від осі коливань δ_r . Бачимо, що для великих значень показника НПС n потенціал швидко зменшується по модулю із зростанням величин показника n і кута θ .

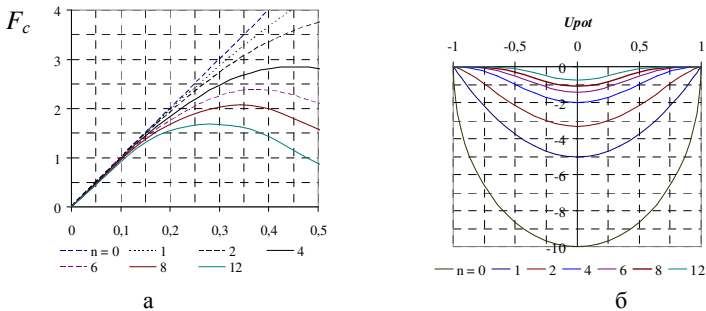


Рис. 1. Залежності від величини відносного відхилення сферичного маятника δ_r для показників НПС $n = 0, 1, 2, 4, 6, 8$ і 12 : а – сил F_c , що повертають маятник до рівноваги; б – виду потенціальних ям $U(n)$

На рис. 2 показано швидкості виходу маятника з одновимірної v_{1m} та двовимірної v_{2m} потенційних ям, швидкості обертань для кінцевого маятника v_c і отримані моделюванням швидкості виходу маятника з ями v_{exper} в залежності від відносного відхилення маятника для показників НПС $n = 0$ і 8 .

Бачимо якісну відмінність поведінки швидкостей виходу з ям v_{exper} для однорідного поля ($n = 0$, рис. 2, а – зростання швидкості) і в НПС (рис. 2, б – із зростанням швидкості відхилення зменшуються).

Бачимо також, що отримані моделюванням швидкості виходу з ями v_{exper} практично збігаються з розрахунками для v_{2m} для малих зміщень. Для великих зміщень і однорідного поля швидкості v_{exper} і v_c зближуються (рис. 2, а), а для великих величин показників НПС ($n > 1$) вони збігаються (рис. 2, б).

Зміщення, за якого криві збіглися, відповідає межі стійкості коливань маятника. Для молекули це відповідає межі розриву зв'язку, що прояснює природу розриву зв'язків у воді по величині кутів вигину H -зв'язків.

Показано, що для малих коливань сферичного маятника у неоднорідному полі і при врахуванні величини показника НПС n кути прецесії залишаються пропорційними площі еліпса орбіти.

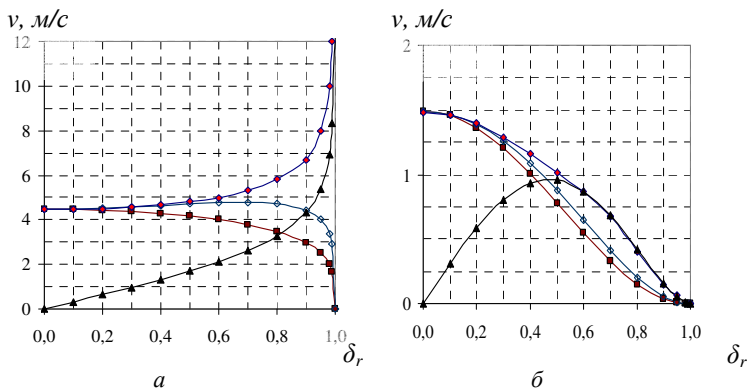


Рис. 2. Швидкості виходу маятника з одновимірної v_{1m} і двовимірної v_{2m} потенційних ям, мінімальні швидкості виходу з ями v_{exper} і швидкості кінцевого маятника v_c залежно від відносного початкового зміщення маятника для показників НПС: а – $n = 0$; б – $n = 8$

Таким чином, в роботі показано якісну відмінність коливань сферичного маятника і молекул в однорідному і неоднорідному полях сил. Із зростанням показника НПС n і відхилень маятника (кута вигину зв'язків) спостерігається швидке зменшення діючих сил, потенціалу взаємодії, зниження частот коливань. Це пояснює природу швидкого зменшення міжмолекулярної взаємодії та зниження лібраційних частот у воді при її нагріві.