

ФАЗОВІ ДІАГРАМИ КОЛИВАНЬ МОЛЕКУЛИ ВОДИ

Проведено локальне моделювання вільних обертальних коливань молекул води в пакеті *MatLab* із допомогою моделі двохчастотного сферичного маятника для відношення моментів інерції її молекул $k = I_X / I_Y = 1,5$ в неоднорідному полі сил виду $G = g \cos^n \theta$ при $n = 8$. Для малих початкових швидкостей та зміщень маятника спостерігаються обертальні незалежні коливання маятника на двох частотах. При зростанні швидкості відбувається зміна типу від незалежних коливань (НК) до складних траєкторій еліпсоподібних коливань маятника (ЕПК), що описують одночастотні обертання молекул навколо осей Н – зв'язків. Також можна виділити область ЕПК-1, коли коливання йдуть у внутрі еліпсу та ЕПК-2, коли коливання йдуть зовні еліпсу.

Фазова діаграма $V_x - X$ є еліпс або спіралі для обох типів коливань і тому не представляють інтересу при аналізі типу коливань. На рис. 1 показані змішані фазові $V_y - X$ діаграми маятника в області НК поблизу критичної точки та в області ЕПК. Ці діаграми показують хід їх трансформації при зміні типу коливань від НК до ЕПК.

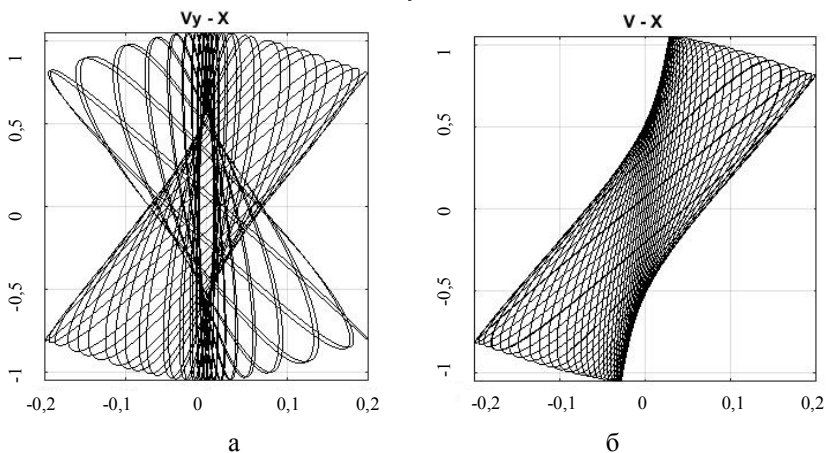


Рис. 1. Вигляд змішаних фазових діаграм двохчастотного маятника а – в області НК поблизу критичної точки; б – в області ЕПК

Для силових фазових діаграм в областях НК і ЕПК відмічено зміна виду. Вигини кривих в області НК по обох осях однакові – зменшення прискорень (сил) з ростом відхилення. В області ЕПК вигин діаграми для прискорення a_x змінюється на зменшення за малих відхилень.

Залежності для швидкостей маятника для областей коливань та у межах точках показано на рис. 2. В областях НК і ЕПК-1 швидкість v_{y0} менша за максимальну v_{ym} , що обумовлено наявністю запасу початкової потенційної енергії в цих областях і неможливістю її використання в області ЕПК-2. Зменшення швидкостей порівняно з координатами для великих відхилень маятника пов'язано з ослабленням сил в неоднорідному полі сил при зростанні зміщення.

$V_{xi}, V_{yi}, \text{ м/с}$

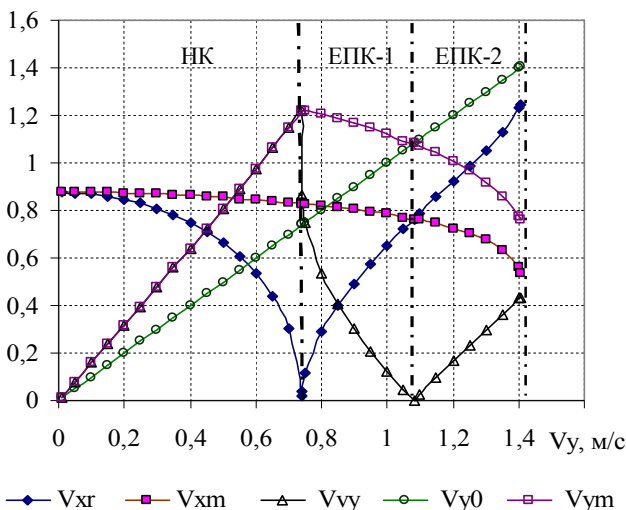


Рис. 2. Параметри фазових діаграм двочастотного маятника для зміщення $\delta_{x0} = 0,3$ залежно від величини початкової швидкості v_y

Таким чином, визначено, що при зміні типу коливань маятника від двочастотних НК до одночастотних ЕПК змінюється вигляд його змішаних і силових фазових діаграм.

Аналіз параметрів фазових діаграм двочастотного сферичного маятника в неоднорідному полі сил показують зміну типу коливань, дозволяють розрізнити області їх існування, провести експрес-аналіз і розділити області існування різних типів коливань в залежності від величин його початкових швидкостей для заданого початкового зміщення. Ці параметри добре узгоджуються з особливостями коливань молекул води, що вказує на необхідність врахування неоднорідного міжмолекулярного поля сил в розрахунках потенціалів для молекул води під час моделювання їх оберхальних коливань.