

УДК 539.194: 544.273

DOI: 10.15587/2313-8416.2015.51842

СИЛОВЫЕ ОСОБЕННОСТИ КОЛЕБАНИЙ ДВУХЧАСТОТНОГО СФЕРИЧЕСКОГО МАЯТНИКА В НЕОДНОРОДНОМ ПОЛЕ СИЛ

© Н. Т. Малафаев

Проведен анализ вращательных двумерных колебаний молекул воды с помощью модели двухчастотного сферического маятника в неоднородном поле сил. Рассмотрена динамика частот при переходе от независимых двумерных вращательных колебаний к вращениям на одной частоте. Показано, что согласование частот маятника обусловлено наличием направленного неоднородного по углу поля сил. Проведен Фурье-анализ орбит

Ключевые слова: молекула воды, сферический маятник, неоднородное поле сил, фазовые траектории, Фурье-анализ

It is conducted an analysis of two-dimensional rotational oscillations of water molecules using a dual frequency model of a spherical pendulum in an inhomogeneous field of forces. It is considered a frequency dynamics in the transition from independent two-dimensional rotational oscillations to the rotation at the same frequency. It is shown that the pendulum frequency matching due to the presence of the field of forces that is directed and angularly inhomogeneous. Fourier-analysis of the orbits is done

Keywords: water molecule, spherical pendulum, inhomogeneous field of forces, phase trajectories, Fourier-analysis

1. Введение

Вода, ее свойства и подвижность ее молекул широко изучаются экспериментально, а также с помощью компьютерного моделирования [1–5]. Хотя эти результаты хорошо согласуются с имеющимися свойствами воды, многие вопросы физики воды до сих пор не изучены или требуют уточнения.

В настоящее время достигнуто понимание важности колебательных спектров воды для ее свойств. Однако основное внимание при этом уделяется проблеме коллективных движений соседних частиц [3–5], временам жизни кластеров в воде, а не их конкретным модам колебаний и их особенностям. До сих пор до конца не ясна основная особенность поведения молекул в жидкой воде – причина изгибов ее водородных связей (H -связей), которые автор связывает с вращательными колебаниями молекул воды [6]. Наличие колебательных мод и их коллективной упорядоченности существенно влияет на термодинамические свойства воды. Однако колебания молекул воды, их моды и силы взаимодействия все еще остаются недостаточно изученной проблемой.

2. Анализ литературных данных и постановка проблемы

Свойства вещества зависят как от природы взаимодействий между его атомами и молекулами, так и от колебательных спектров этих атомов и молекул. Данные вопросы подробно изучаются в рамках теории эффекта Яна-Теллера (ЭЯТ) [7], рассматривающей совместные колебания электронно-ядерных подсистем, роль кооперативных колебаний и их энергии в свойствах и фазовых превращениях в системах атомов. Согласно теореме Яна-Теллера [7] в многоатомных системах линейные связи неустойчивы и с нагревом динамически изгибаются. Современная теория ЭЯТ рассматривает особенности колебаний атомов и молекул в системе, включая коопера-

тивные, их влияние на динамику ее свойств и структурные фазовые превращения в этой системе.

Проблеме изучения колебательных и, особенно, вращательных мод молекул воды до сих пор не уделено необходимого внимания, за исключением работы [6], где в рамках теории ЭЯТ было предложено рассматривать в качестве линейных связей воде H -связи между ее молекулами. В жидкой фазе роль колебаний атомов и молекул должна возрасти. Было показано, что кооперативные (коллективные) колебания H -связей молекул воды в жидкой фазе относятся к классу либрационных (вращательных). Наличие большого числа коллективных колебательных мод приводит к наличию у воды больших величин теплоемкости, теплопроводности и подвижности ее молекул.

Данные колебания протонов около осей H -связей в воде сопровождаются динамическими изгибами этих связей на некоторый средний угол θ [2]. Наличие у молекулы двух протонов может приводить к их сложным колебаниям и вращениям вокруг осей H -связей, которые можно описать как двумерные вращательные колебания вокруг собственных осей молекулы x , y , z [2, 6]. Вследствие несимметричности молекулы воды имеют три главных момента инерции I_i вдоль осей молекулы [2] и, соответственно, три частоты вращательных колебаний, что усложняет рассмотрение колебаний молекулы.

В работе [6], исходя из теории ЭЯТ, было предположено, что данные двумерные вращательные колебания являются эллиптическими, связанными, и сопровождаются вращениями протонов молекул воды вокруг осей H -связей. Однако с точки зрения механики разные частоты колебаний в двух взаимно перпендикулярных направлениях являются независимыми и лишь при совпадении частот возможны вращения протонов вокруг осей H -связей.

Поскольку H -связи являются направленными, то это также необходимо учитывать при моделирова-

нии вращательных колебаний молекул воды с помощью модели маятника. В работе [8] было предложено моделировать направленное поле сил (НПС) тяжести для маятника по углу отклонения θ от вертикали как $F = m \cdot G = m \cdot g \cdot \cos^n \theta$. Было показано, что с ростом угла θ изгиба H -связи и показателя направленности поля сил n наблюдаются быстрое уменьшение скорости и частоты вращения маятника, что согласуется с данными для либрационных частот воды [2]. В рамках данной модели была оценена величина направленности поля сил в воде как показатель НПС $n \approx 8$.

В работе [9] были промоделированы вращательные колебания молекул воды в НПС с помощью модели двухчастотного сферического маятника и изучена возможность перехода от двух вращательных независимых колебаний (НК) к единым двумерным вращениям молекул воды и ее протонов вокруг осей водородных связей. Показано, что главной причиной синхронизации частот является сильная зависимость частоты колебаний от угла изгиба H -связи для случая направленных сил связи. Были определены области существования вращательных эллипсоподобных траекторий (ЭПТ). Показано, что наличие коллективных колебаний может почти вдвое уменьшить углы изгибов H -связей, что хорошо согласуется с их измеренными величинами в воде [2].

Для модели двухчастотного сферического маятника [9] показано, что в отличие от колебаний обычного сферического маятника два независимых колебания привязаны к осям X и Y . Поэтому для независимых собственных частот колебаний маятника не наблюдается прецессии осей эллипсов по углу, а для ЭПТ на общей частоте эллипсы изменяются со временем и колебания происходят не в круговой, а в эллиптической области, связанной с осями X – Y .

Однако еще много вопросов динамики двухчастотных вращательных колебаний молекулы воды в неоднородном поле сил, их силовые и частотные характеристики, в работе [9] не были проанализированы. Данное направление исследований является перспективным, поскольку позволяет получить качественно новые данные о влиянии направленного неоднородного поля сил взаимодействий на особенности собственных колебаний молекул воды.

3. Цель и задачи исследования

Целью работы является продолжение анализа [9] особенностей динамики вращательных колебаний молекулы воды в областях их независимых колебаний и общих двумерных эллипсоподобных вращений протонов молекул воды на примере модели двухчастотного сферического маятника.

Для достижения поставленной цели были поставлены следующие задачи:

1. Изучение динамики изменения двухчастотных колебаний маятника по осям X и Y с ростом начальной скорости и перехода от независимых колебаний к единым двумерным эллипсоподобным вращениям в направленном поле сил.

2. Изучение динамики сил с ростом величины отклонений маятника в НПС, а также влияние их ди-

намики на изменение частот свободных колебаний. Построение фазовых траекторий для скоростей и ускорений (сил).

3. Проведение Фурье-анализа эллиптических орбит маятника. Определение особенностей спектров частотных характеристик этих траекторий.

4. Компьютерная модель вращательных колебаний

Модель двухчастотного сферического маятника подробно описана в [9] и представляет собой две равные точечные массы общей единичной массы, подвешенные в точке O (начало координат модели) на одинаковых невесомых стержнях единичной длины под углом θ между ними в НПС. В равновесии массы сориентированы вдоль оси Y . Маятник имеет разные моменты инерции I_Y и I_X при их отношении $k = I_Y/I_X > 1$ и совершает колебания вокруг вертикальной оси Z как вращательные колебания вокруг осей Y и X модели. Анализ колебаний проводился в НПС для характерных для воды отношений моментов инерции $k = 1,5$ и 3 . Считаем, что центр масс маятника описывает траектории подобные для траекторий протонов молекул воды.

Локальное моделирование вращательных колебаний молекул воды было проведено в пакете *MatLab* с помощью модели двухчастотного сферического маятника, имеющего два момента инерции и, соответственно, две частоты во взаимно перпендикулярных направлениях в НПС вида $G = g \cos^n \theta$.

Было проведено моделирование свободных колебаний двухчастотного сферического маятника в неоднородном поле тяжести $G \cdot n = 8$, $g = 10$ м/с² для отношений моментов инерции $k = 1,5$ и 3 , начального относительного смещения $\delta_{y0} = 0,2$ центра масс по оси Y и его начальной скорости v_{x0} по оси X . Время моделирования составляло $20 \dots 100$ с при шаге $0,0001$ с. С ростом начальной скорости и соответствующей амплитуды колебаний по оси X наблюдается понижение более высокой частоты колебаний вдоль этой оси и переход к вращениям маятника вокруг вертикальной оси на общей частоте.

5. Моделирование колебаний двухчастотного сферического маятника

На рис. 1 представлены результаты моделирования траекторий движения двухчастотного сферического маятника в НПС в плоскости X – Y для отношения моментов инерции $k = 1,5$ в зависимости от величин начальных скоростей v_{x0} . Для отношения моментов $k = 3$ ЭПТ наблюдаются в узком интервале скоростей [9] и потому маловероятны в воде, хотя особенности колебаний маятника при этом выражены наиболее ярко.

Для малых начальных скоростей маятника v_x наблюдаются вращательные независимые колебания маятника на двух частотах в прямоугольной области X – Y (рис. 1, *a*). При дальнейшем росте скорости границы этой области начинают деформироваться: горизонтальные границы области (ось X) становятся выпуклыми, вертикальные (ось Y) –

вогнутими, а углы вдоль оси Y попарно сближаются. При слиянии углов при критической скорости $v_{кр}$ происходит качественный переход от враща-

тельных НК к эллипсоподобным вращениям маятника на общей частоте вокруг вертикальной оси Z (рис. 1, б-г).

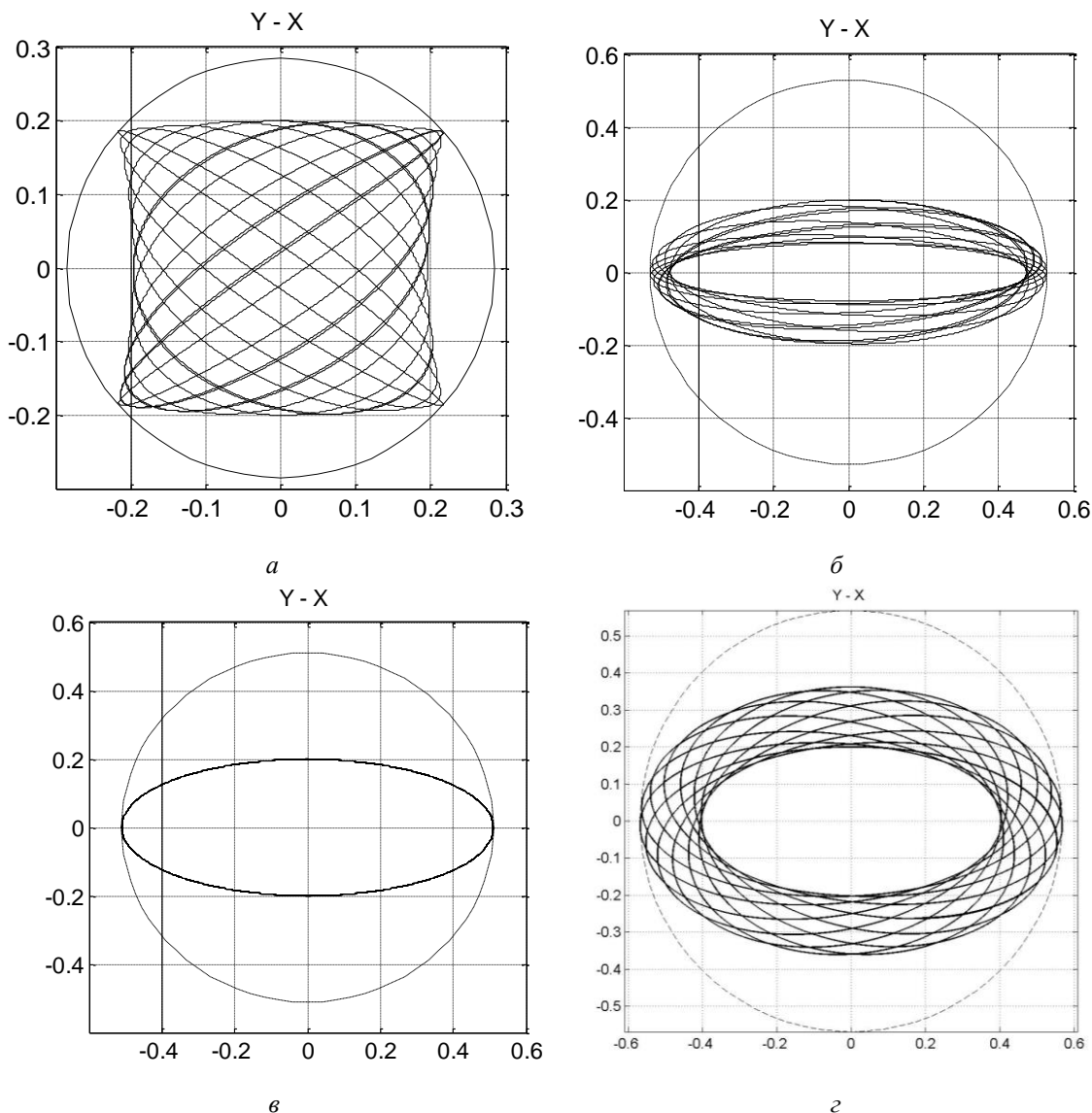


Рис. 1. Проекция траекторий движения двухчастотного сферического маятника в координатах $X - Y$ для $k=1,5$ в зависимости от величин начальных скоростей v_{x0} равных: v_{x0} : а – 0,4; б – 0,7; в – 0,757; г – 0,84 м/с

При возрастании величины начальной скорости выше критической растет минимальная амплитуда колебаний по оси Y (рис. 1, б-г). Видим, что при скорости $v_{x0} < v_{el}$ траектории (рис. 1, б) вписываются в эллипс (рис. 1, в), а при скоростях $v_{x0} > v_{el}$ (рис. 1, г) как бы описываются вокруг него, пока скорость не достигает максимального значения v_{max} , при котором маятник выходит за пределы нижней полусферы и колебания маятника срываются.

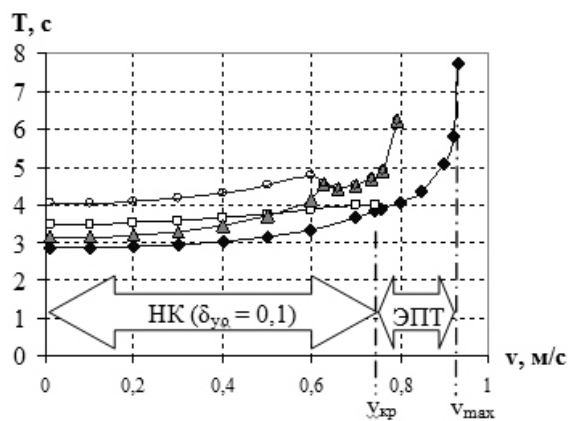
Можно отметить, что при $v_{x0} < v_{el}$ траектория через четверть периода после начала движения пересекает ось X под углом с положительным тангенсом, большая ось эллипса траектории находится при $y > 0$, а при $v_{x0} > v_{el}$ – все наоборот. Для скорости $v_{x0} = v_{el}$ через четверть периода ось X пересекается под прямым углом, и вся траектория является симметричной и эллиптической.

На рис. 2 показаны периоды колебаний двухчастотного сферического маятника в неоднородном поле сил вдоль осей X и Y в зависимости от его начальных скорости и смещения в областях НК и ЭПТ (области показаны для смещения $\delta_{y0} = 0,1$) для отношения $k=1,5$. Для $\delta_{y0} = 0,3$ дополнительное смещение изменило частоты и скорости. В критической точке слияния частот период больше, чем их начальные значения при малых скоростях. После слияния в области существования ЭПТ период несколько уменьшается, а затем быстро возрастает при v_{max} , что особенно видно для смещения $\delta_{y0} = 0,3$. Для случая $k=3$ различие частот большее, соответственно, критическая скорость выше и область ЭПТ более узкая [9], а периоды общих колебаний для нее быстрее возрастают.

С появлением общих ЭПТ можно говорить об общей фазе вращения радиус-вектора траектории

двухчастотного маятника в плоскости $X-Y$ со временем: $\varphi = \arctg(y/x)$. Для независимых колебаний можно рассматривать их 2 независимые фазы α и β для собственных колебаний по осям X и Y и общую фазу φ . Легко увидеть, что для конического маятника временная зависимость $\varphi(t)$ будет прямой линией. Для круговых участков траектории маятника должен наблюдаться линейный рост фазы, а для сильно эллиптических либо для траекторий проходящих близко к оси Z маятника – ступенеподобные. Для сферического маятника зависимость будет ступенеподобной при росте фазы φ .

На рис. 3 показано изменение общей фазы вращения маятника φ в плоскости $X-Y$ от времени для случаев, показанных на рис. 1. Для независимых колебаний и малых скоростей видим кроме колебаний на собственных частотах также колебания общей фазы φ (рис. 3, а). Для двухчастотного маятника с независимыми частотами по осям ω_x и ω_y наблюдаются вращения маятника с частотой биения амплитуд $\omega_x - \omega_y$ в направлении и против вращения часовой стрелки, что и сопровождается колебаниями фазы φ в некоторых пределах.



◆ Tx1 □ Ty1 ▲ Tx3 ○ Ty3

Рис. 2. Периоды колебаний $T_{x,y}$ двухчастотного сферического маятника для отношения $k=1,5$ в зависимости от его начальных смещений: $\delta_{y0}=0,1$ (кривые T_{x1}, T_{y1}) и $\delta_{y0}=0,3$ (кривые T_{x3}, T_{y3}), от начальной скорости v_{x0} для независимых колебаний вдоль осей X и Y и общих эллипсоподобных вращений вокруг оси Z

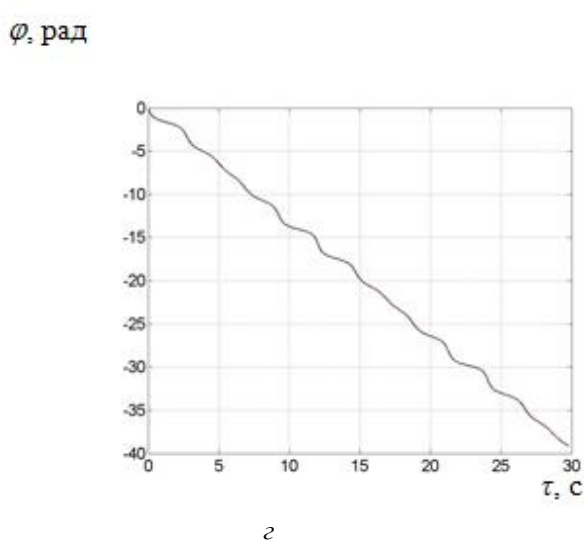
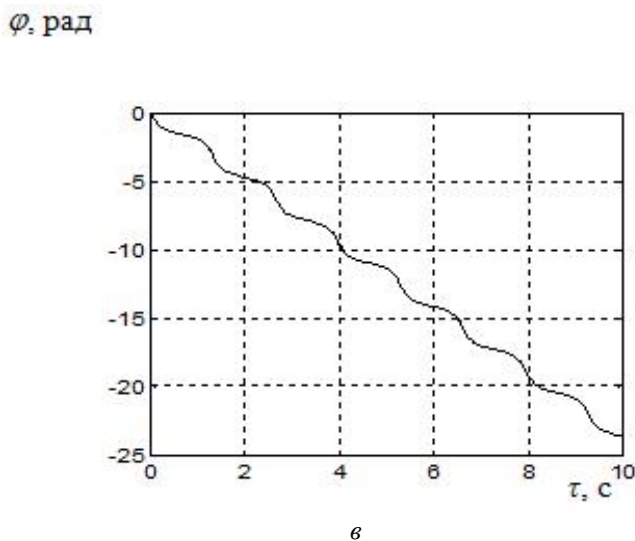
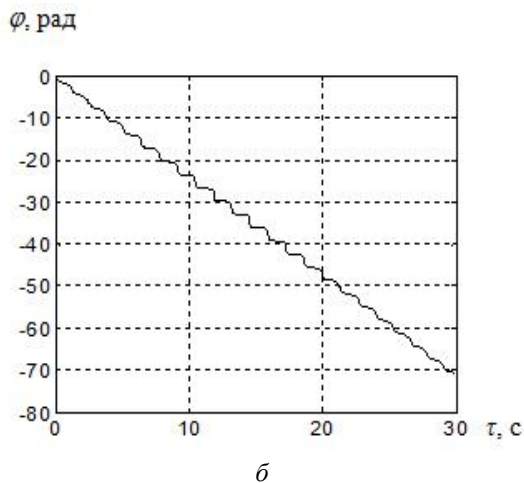
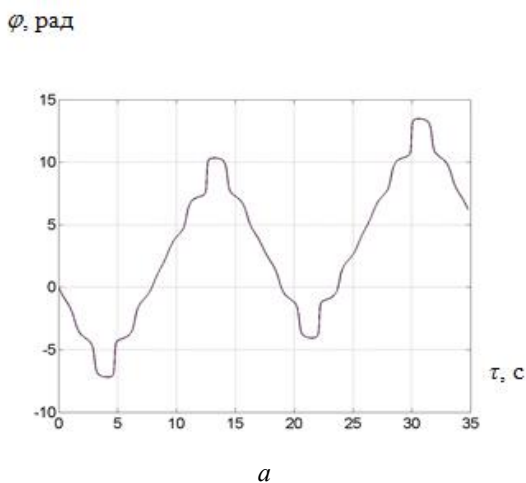


Рис. 3. Изменения фазы колебаний φ двухчастотного сферического маятника с $k=1,5$ со временем для разных начальных скоростей v_{x0} (см. рис. 1)

С ростом начальной скорости v_{x0} частоты НК и их периоды T_X и T_Y (рис. 2) вначале сближаются, что ведет к росту длительности периодов колебаний общей фазы φ (рис. 3, а). При совпадении двух частот и их периодов T_X и T_Y колебания общей фазы φ исчезают, и появляются общие эллипсоподобные вращения маятника (рис. 1, б-г), а зависимость фазы от времени становится ступенеподобной при общем линейном росте фазы (рис. 3, б-г). При скорости $v_{x0}=v_{el}$ орбиты становятся эллиптическими, а все ступени на зависимости фазы $\varphi(t)$ становятся одинаковыми (рис. 3, в) и зависят от эллиптичности данной орбиты. При дальнейшем росте скорости быстро возрастают периоды колебаний и начинают преобладать участки с горизонтальными ступенями (рис. 3, г), а также с круговыми вращениями (рис. 1, г и 3, г).

Можно отметить, что модуль средней угловой скорости изменения фазы для обоих направлений сохраняется (рис. 3, а) и осредненные кривые кусочно линейные. Биения общей фазы φ связаны с зависимостью разности фаз колебаний α и β по осям X и Y – в точках изменения направления вращений фазы наблюдается либо пучность, либо узел биений разности фаз $\alpha - \beta$.

Прекращение биений общей фазы φ и появление ее постоянной линейной составляющей (рис. 3, б-г) является главным параметром, свидетельствующем о наличии перехода между независимыми колебаниями и эллипсоподобными вращениями и позволяет проследить динамику двухчастотных колебаний маятника в зависимости от величин его параметров: n , k , δ_{y0} и v_{x0} .

Анализ влияния НПС

Малое изменение фазы φ со временем (рис. 3, г) может говорить об ослаблении сил при больших отклонениях маятника и появлении ангармонизма. На рис. 4 показаны временные зависимости координат, скоростей и ускорений вдоль осей X и Y . Видим, что для координат синусоиды слабо искажены. Но для скоростей видим эффекты заострения синусоид по оси X и закругления по оси Y , а для ускорений наоборот – видим провалы в максимумах по оси X и заострения по оси Y . Данные изменения можно трактовать как появление значительных вкладов от третьей и других нечетных гармоник колебаний.

При анализе колебаний были рассмотрены траектории колебаний методом фазовой плоскости [10]. Обычно фазовые траектории рассматриваются как зависимости скорости от координаты. Для одномерных свободных колебаний при отсутствии затуханий они представляют собой эллипсы.

Для двумерных колебаний рассмотрим фазовые траектории раздельно по обеим осям (рис. 5). С ростом скорости и смещений вдоль оси X кривые изменяются и в направлении оси X становятся ромбоподобными с практически линейным уменьшением скорости, а для смещений вдоль оси Y прямоугольноподобными. Наибольшие изменения эллипсов наблюдаются для отношения моментов $k=3$. Вблизи границы срыва колебаний для фазовой траектории по оси X наблюдаются еще большее «заострение» диа-

граммы вдоль оси X и перегибы кривых. Данные зависимости (рис. 4 и 5) свидетельствуют о наличии значительной ангармоничности колебаний маятника в НПС.

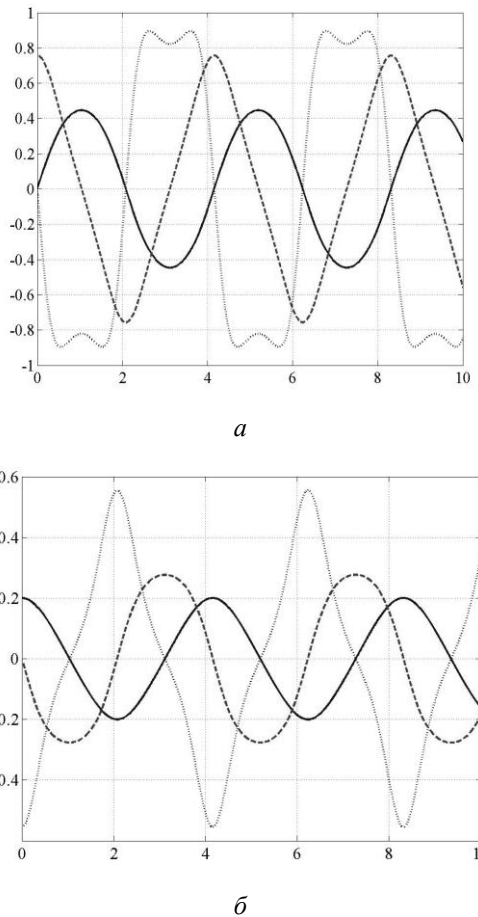


Рис. 4. Временные зависимости для координат (—), скоростей (---) и ускорений (···) эллиптической орбиты вдоль осей: а – X ; б – Y для $k=1,5$, $v_{x0}=0,757$ м/с

Причиной ангармоничности колебаний маятника является существенная нелинейность между силой и отклонениями при наличии НПС. Зависимость скатывающей силы в НПС описываются как $F=mg \cdot \sin\theta \cdot \cos^n\theta$ и зависит от значений показателя n . При малых углах θ сила пропорциональна смещению и колебания являются гармоничными. С ростом отклонений маятника при $n>0$ возможно появление максимума силы и затем ее уменьшение. Это объясняет наличие провалов для ускорений по оси X (рис. 4, а), малое изменение при этом фазы φ со временем (рис. 3, г), форму фазовых траекторий (рис. 5).

На рис. 6 показаны фазовые траектории для ускорений (сил) $a_x - x$ и $a_y - y$ для эллиптических орбит. Для неэллиптических траекторий кривые более сложные во времени, хотя и с аналогичными особенностями. Видим значительное уменьшение сил для больших смещений вдоль оси X , особенно для отношения $k=3$ с большим различием собственных частот (рис. 6, б).

Вследствие центральной симметричности кривых (рис. 6) мы можем говорить об их описании полиномами с нечетными степенями x^m , что должно приводить к появлению $m - x$ (нечетных) гармоник колебаний $\sin(m\theta)$. Наибольшие вклады гармоник

должны наблюдаться для ускорений и соответствующих сил. Для скоростей и координат, вследствие интегрирования, вклады гармоник должны соответственно уменьшаться в m и m^2 раз, что подтверждается расчетами для траекторий. Сами эллиптические орбиты (рис. 1, в) содержат мало гармоник (см. далее Фурье-анализ траекторий).

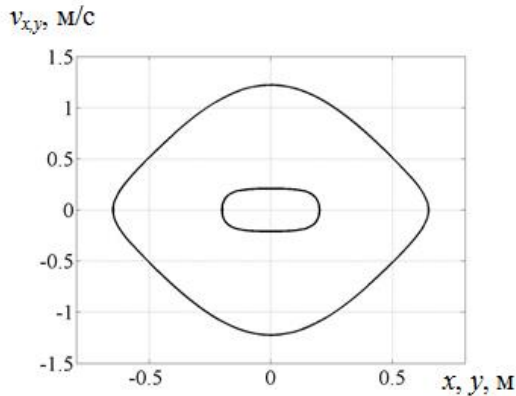
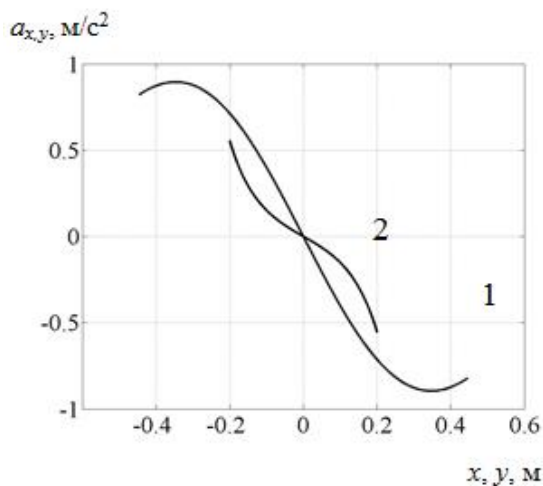
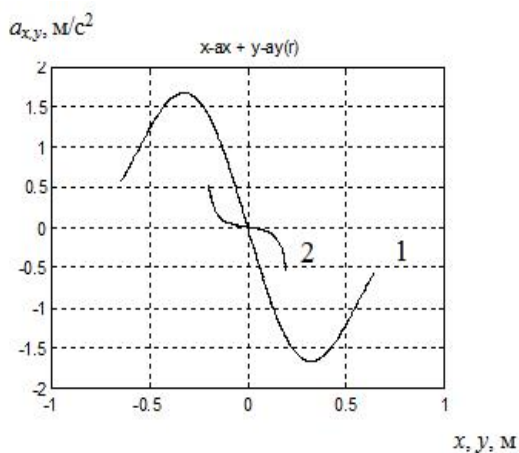


Рис. 5. Фазовые траектории эллиптической орбиты для осей X (внешняя кривая) и Y (внутренняя) для случая $k=3$, $v_{x0}=1,222$ м/с



а



б

Рис. 6. Силловые фазовые траектории: кривые 1 – зависимость $a_x - x$, кривые 2 – $a_y - y$: а – для $k=1,5$, $v_{x0}=0,757$ м/с; б – для $k=3$, $v_{x0}=1,222$ м/с

Видим на рис. 6, что силовые фазовые траектории вдоль оси Y испытывают как бы большие ускорения с ростом отклонения. На самом деле эти ускорения нормальные для больших отклонений по оси Y (X мало), хотя и уменьшены в k раз, сравнительно с ускорениями по оси X . Но они значительно уменьшаются вблизи оси Y , когда наблюдаются наибольшие отклонения маятника вдоль оси X и, соответственно, углов θ , и имеем общие минимальные ускорения при этом. Видим, что для $k=3$ уменьшение сил по осям более значительно, чем для $k=1,5$. Для эллиптических орбит относительное уменьшение силы по оси X сравнительно с ее максимумом для отношения $k=1,5$ составляет около 0,9 и для отношения $k=3$ – около 0,3 и менее (рис. 6).

Можно отметить, что вследствие различия моментов инерции маятника скатывающее ускорение по оси Y уменьшается в k раз и результирующее ускорение маятника относительно оси Z для промежуточных углов фаз ($\varphi \neq n \cdot \pi/2$) становится не центральным, а вращающим, что способствует появлению вращений и знакопеременной прецессии маятника. Хотя эта эффективная сила знакопеременная, ее роль для ЭПТ является значительной.

Таким образом, главной причиной торможения колебаний маятника и уменьшения его частоты с ростом амплитуды отклонений является быстрое уменьшение скатывающих сил в НПС. Это приводит к длительному времени пребывания маятника в дальних точках траектории и сближению частот, «закруглению» углов прямоугольных областей для НК вращающимися моментами сил и, в итоге, к переходу двухчастотных независимых колебаний к единым эллипсоподобным вращениям маятника на одной общей частоте.

Фурье-анализ траекторий

Был проведен Фурье-анализ эллиптических X – Y орбит с помощью быстрого преобразования Фурье FFT. Разложения по осям X и Y выполнялись соответственно в ряды нечетных гармоник по синусам и косинусам.

Для ЭПТ времена обращений маятника вокруг оси Z зависят от его текущих максимальных отклонений и все время изменяются, что ведет к большому числу локальных частот, изменению частот и их фаз с ростом начальной скорости. Для независимых колебаний частоты более стабильны, но также начинают сильно изменяться при приближении начальной скорости к критической. Поэтому имеет смысл рассматривать только эллиптические орбиты, для которых наблюдается строгая периодичность и повторяемость траекторий. Для неэллиптических траекторий силовые особенности колебаний сохраняются, хотя и дополнительно усложняются вследствие постоянных изменений как угла θ , так и разности фаз колебаний по осям X и Y .

Для времени моделирования колебаний в 20...50 с и при кратности его периоду колебаний, с относительной точностью порядка 10^{-4} и лучше, наблюдалось хорошее разрешение частот. Среди первой десятки наибольших амплитуд в быстром

преобразовании Фурье наблюдались гармоники для $k=3$ до $m=15$ и для $k=1,5$ – до $m=9$, амплитуда для последней гармоники составляла менее 0,1 % от первой. Установлено, что все амплитуды для данных гармоник являются положительными. На рис. 7 показана гистограмма для амплитуд первых 5 нечетных гармоник ($m=1\dots9$) относительно первой для ускорений маятника вдоль осей X и Y эллиптических орбит для отношения моментов $k=3$ и показателей НПС $n=2, 4$ и 8.

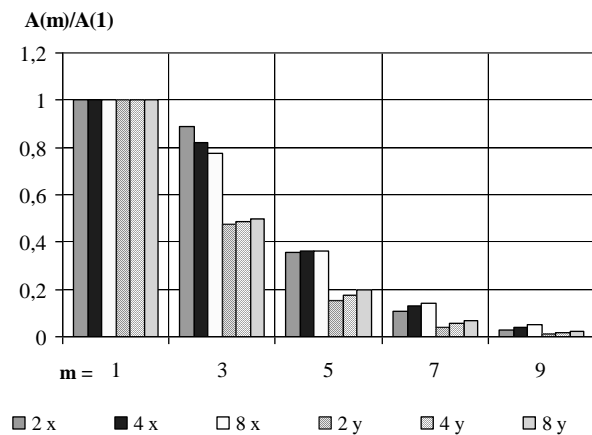


Рис. 7. Относительные вклады гармоник для ускорений на эллиптической орбите с $k=3$, $v_{xo}=1,222$ м/с от их номера m для показателей НПС $n=2, 4$ и 8 вдоль осей X (однородная окраска столбцов) и Y (штрихованные столбцы)

Видим, что роль гармоники обычно растет с ростом показателя НПС n . Для координат (орбит) вклады от гармоник в m^2 раз меньше и они соответственно значительно быстрее убывают с ростом номера гармоники m . Гистограмма вкладов гармоник показывает (рис. 7), что при $k=3$ для траекторий (координат) вклады гармоник по оси X будут менее 10 % и 1,5 %, соответственно, для третьей и пятой гармоник. Видим, что относительные абсолютные вклады гармоник по оси X примерно вдвое больше по величине, чем по оси Y . Для отношения $k=1,5$ вклады гармоник примерно вдвое меньше сравнительно с отношением $k=3$ и быстрее убывают с ростом их номера m .

Необходимо отметить, что в данном Фурье – анализе X – Y орбит маятника пренебрегается их изменениями вдоль оси Z .

6. Обсуждение результатов моделирования двухчастотного сферического маятника в неоднородных полях сил

Результаты моделирования двухчастотного сферического маятника в неоднородных полях сил показывают, что для объяснения особенностей его колебаний служит его силовая фазовая траектория, показывающая значительное ослабление результирующих сил при максимальных отклонениях маятника.

Медленное вращение молекул воды при максимальных отклонениях в НПС также приводит к длительному их пребыванию в крайних точках при быстром процессе их движения между ними. В ре-

зультате понижается частота, а средние углы изгибов H -связей будут близкими к максимальным.

Для несвободных колебаний молекул в среде других молекул их скорости будут сильно промодулированы взаимодействиями с соседями, что будет давать значительный вклад в локальное изменение средней кинетической энергии молекулы и ее результирующую траекторию. Поскольку для областей существования ЭПТ с отношением $k=3$ диапазон изменений кинетической энергии не превышает 10 % [9], то маловероятно совершение даже одного вращательного колебания для молекул. Для отношения $k=1,5$ дополнительный рост кинетической энергии для областей существования ЭПТ составляет 70... 100 %, а потому для него такие вращения более вероятны.

Для случая синхронных и кооперативных вращений молекул их оси X и Y вращаются также и становятся динамическими. Относительно этих осей отклонения и скорости для соседних молекул малы, а в идеале – нулевые. Поэтому силы между ними уменьшаются слабо. Такую группу сильно связанных соседних молекул и называют кластером. Относительно соседних молекул внутренняя молекула кластера обладает малой кинетической энергией, а, следовательно, она отдает свою исходную кинетическую энергию соседям. Поэтому вначале кластер обладает повышенной кинетической энергией относительно других «свободных» молекул. После релаксационного перераспределения энергии кластер с коллективными колебаниями будет иметь меньшую энергию и его состояние будет энергетически более стабильным.

Таким образом, в воде становится возможным существование кластеров вблизи точки плавления. Их вклад в энергию активации воды экспоненциально уменьшается с нагревом [6], одновременно уменьшается энергия H -связей, а сами кластеры разрушаются [2]. Если для линейных систем более-менее понятно, что такое кооперативные синхронные колебания молекул, то для водных кластеров, состоящих из гексагонально упорядоченных объемных слоев молекул, это пока совсем непонятно и требует анализа.

7. Выводы

Проанализирована модель колебаний двухчастотного сферического маятника в неоднородном поле сил и ее особенности и установлено:

1. Важнейшей характеристикой двухчастотного сферического маятника для объяснения его аномалий и особенностей колебаний в неоднородном поле сил является его силовая фазовая траектория.

2. Главной причиной торможения колебаний маятника является быстрое уменьшение возвращающих сил с ростом амплитуды отклонений и наличие максимума НПС, что приводит к долгому времени пребывания маятника в дальних точках траектории и понижению частот колебаний.

3. Проведен Фурье-анализ для эллиптических орбит, имеющих четкие частоты. Расчеты проведены для ускорений маятника, имеющих наибольшие вклады гармоник и показывающих рост вкладов гар-

моник с ростом скорости, угла отклонения, отношения моментов k и показателя n .

Данные особенности колебаний двухчастотного сферического маятника в неоднородном поле сил согласуются с особенностями колебаний молекул воды, что указывает на необходимость учета моментов инерции и неоднородного направленного поля сил в расчетах потенциалов для молекул воды при моделировании их колебаний методом молекулярной динамики.

Литература

1. Антонченко, В. Я. Основы физики воды [Текст] / В. Я. Антонченко, А. С. Давыдов, В. В. Ильин. – К.: Наук. Думка, 1991. – 672 с.
2. Эйзенберг, Д. Структура и свойства воды [Текст] / Д. Эйзенберг, В. Кауцман; пер. с англ. – Л.: Гидрометеоздат, 1975. – 280 с.
3. Маленков, Г. Г. Структура и динамика жидкой воды [Текст] / Г. Г. Маленков // ЖСХ. – 2006. – Т. 47. – С. 5–35.
4. Kumar, P. Molecular dynamics study of orientational cooperativity in water [Text] / P. Kumar, G. Franzese, S. V. Buldyrev, H. E. Stanley // Physical Review E. – 2006. – Vol. 73, Issue 4. – P. 041505. doi: 10.1103/physreve.73.041505
5. Voloshin, V. P. Collective motions in computer models of water. large-scale and long-time correlations [Text] / V. P. Voloshin, G. G. Malenkov, Yu. I. Naberukhin // Journal of Structural Chemistry. – 2013. – Vol. 54, Issue S2. – P. 233–251. doi: 10.1134/s0022476613080052
6. Малафаев, Н. Т. О взаимодействиях и динамике молекул в чистой воде [Текст] / Н. Т. Малафаев // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – 2011. – Т. 4, № 8 (52). – С. 48–58. – Режим доступа: <http://journals.uran.ua/eejet/article/view/1465/1363>
7. Берсукер, И. Б. Эффект Яна – Теллера и вибронные взаимодействия в современной химии [Текст] / И. Б. Берсукер; пер. с англ. – М.: Наука, 1987. – 344 с.
8. Малафаев, М. Т. Обертання молекул води як рух сферичного маятника в неоднорідному полі сил [Текст] /

М. Т. Малафаєв // Прогресивні техніка та технології харчових виробництв ресторанного господарства і торгівлі. – 2014. – Вип. 1. – С. 291–298.

9. Малафаев, Н. Т. Моделирование вращательных колебаний молекул воды [Текст] / Н. Т. Малафаев, Н. И. Погожих // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – 2015. – Т. 2, № 5 (74). – С. 27–35. doi: 10.15587/1729-4061.2015.40569

10. Марчуков, Б. А. Проектирование систем управления методами фазовой плоскости [Текст] / Б. А. Марчуков. – М.: Машиностроение, 1976. – 248 с.

References

1. Antonchenko, V. Ya, Davydov, A. S, Iiin, V. V. (1991). *Osnovy fizyky vody*. Kyiv: Naukova Dumka, 672.
2. Eisenberg, D., Kauzmann, W. (2005). *The structure and properties of water*. Oxford University press, 308.
3. Malenkov, G. G. (2006). Structure and dynamics of liquid water /Journal structural chemistry, 47, 5–35.
4. Kumar, P., Franzese, G., Buldyrev, S. V., Stanley, H. E. (2006). Molecular dynamics study of orientational cooperativity in water. Physical Review E, 73 (4), 041505. doi: 10.1103/physreve.73.041505
5. Voloshin, V. P., Malenkov, G. G., Naberukhin, Yu. I. (2013). Collective motions in computer models of water. large-scale and long-time correlations. Journal of Structural Chemistry, 54 (S2), 233–251. doi: 10.1134/s0022476613080052
6. Malafaev, N. T. (2011). About interactions and dynamics of molecules in pure water. Eastern-European Journal of Enterprise Technologies, 4/8 (52), 48–58. Available at: <http://journals.uran.ua/eejet/article/view/1465/1363>
7. Bersuker, I. (1984). *The Jahn-Teller Effect and Vibronic Interactions in Modern Chemistry*. Plenum. New York, 319.
8. Malafaev, M. T. (2014). Obertannya molekul vodi yak ruh sferichnogo mayatnika v neodnorodnomu poli syl., 1, 291–298.
9. Malafayev, N., Pogozhikh, N. (2015). Features rotational of vibrations of water molecules. Eastern-European Journal of Enterprise Technologies, 2/5 (74), 27–35. doi: 10.15587/1729-4061.2015.40569
10. Marchukov, A. B. (1976). *Proektirovanie sistem upravleniya metodami fazovoy ploskosti*. Moscow: Mashinostroenie, 248.

*Рекомендовано до публікації д-р техн. наук Погожих М. І.
Дата надходження рукопису 21.09.2015*

Малафаєв Николай Тимофеевич, кандидат фізико-математических наук, доцент, кафедра фізико-математических и инженерно-технических дисциплин, Харьковский государственный университет питания и торговли, ул. Клочковская, 333, г. Харьков, Украина, 61051
E-mail: mnt49@mail.ru