

УДК 539.194: 544.273

DOI: 10.15587/2313-8416.2017.89712

ЭЛЛИПТИЧЕСКИЕ КОЛЕБАНИЯ ПРОТОНОВ МОЛЕКУЛ ВОДЫ

© Н. Т. Малафаев

Проведен анализ эллиптических колебаний протонов молекул воды с помощью модели двухчастотного маятника. Определена колебательная мода, для которой средние углы отклонения маятника согласуются с углами изгибов водородных связей в воде. Доказана возможность появления в жидкой воде эллиптических и эллипсоподобных вращений протонов молекул вокруг осей связей в неоднородном по углу поле сил межмолекулярного взаимодействия

Ключевые слова: молекула воды, неоднородное поле сил, эллиптические колебания, двухчастотный маятник

1. Введение

Физические свойства вещества зависят как от взаимодействий между его атомами и молекулами, так и от спектров колебаний этих атомов и молекул, от числа колебательных мод в них. Свойства жидкой воды, подвижность ее молекул широко изучаются экспериментально, а также с помощью компьютерного моделирования методом молекулярной динамики [1–6]. Хотя результаты компьютерного моделирования статистически хорошо согласуются со свойствами воды, многие вопросы физики воды еще требуют изучения. В частности, типам колебательных мод молекул воды и их роли не уделено должного внимания.

Вопросы влияния колебательных спектров атомов и молекул на свойства веществ подробно рассматриваются в рамках теории эффекта Яна – Теллера (ЭЯТ) [7]. В работе [8] предложено применить теорию ЭЯТ к колебательным спектрам в воде. В ней показано основополагающее влияние на свойства воды появление в жидкой фазе новых коллективизированных вращательных колебаний молекул воды. Моделирование вращательных колебаний молекул воды проводилось с помощью модели двухчастотного маятника [9, 10], однако еще многие вопросы этих колебаний молекул воды требуют своего решения.

2. Литературный обзор

Хотя колебательные спектры в воде изучаются достаточно давно [2–4], однако вследствие отсутствия информации об их модах и сложности ее получения, эта проблема остается острой как для молекул воды, так и для описания траекторий колебаний ядер их атомов водорода (далее – протонов). В работе [8] в рамках теории ЭЯТ рассматривались возможные моды колебаний молекул воды в жидкой фазе и результаты их влияния на свойства воды. Было показано, что данные новые коллективизированные моды ко-

лебаний молекул в жидкой фазе относятся к классу либрационных мод и являются вращательными колебаниями молекул воды («заторможенными вращениями» [2]).

Вследствие несимметричности молекулы воды имеют 3 главных момента инерции вдоль осей x , y , z молекулы [2] и, соответственно, 3 частоты собственных вращательных колебаний. Данные частоты вращательных колебаний молекул в жидкой воде являются связанными при вращательных колебаниях законом сохранения момента импульса [8]. Траектории движения протонов молекулы, имеющих наибольшие скорости вращения, могут быть как независимыми двухчастотными, так и вращательными на общей частоте [9].

В работе [8] рассмотрено малые вращательные колебания молекул воды как многомерные колебания. Анализ показал, что вращательные колебания молекул воды не могут быть одновременно для всех трех осей вращения, а только для двух осей вращения на двух частотах, при этом, всегда присутствует самая низшая частота вращения – вокруг оси x молекулы. Для анализа двухчастотных колебаний маятника вводился параметр k , равный отношению моментов инерции молекулы для данных вращательных колебаний $k=I_x/I_i$. Для воды характерны величины этого параметра, равные $k=1,5$ и $k=3$ [9].

При двумерных вращательных колебаниях молекул воды ее протоны совершают вращения вокруг осей водородных связей (H – связей) с соседними молекулами в плоскостях, перпендикулярных к этим осям или колебания около оси. Вращения протонов около осей H – связей сопровождается изгибами связей в воде на некоторый средний угол θ , который является динамическим. Он обусловлен действием на протоны молекул воды импульсов и моментов импульсов, обусловленных тепловым движением моле-

кул, сил инерции при их вращении вокруг осей связей и законом сохранения момента импульса.

Для моделирования направленных валентных сил между молекулами предложено их описание с помощью неоднородного поля сил (НПС) [9] вида $G=g \cdot \cos^n \theta$, где угол отклонения маятника от положения равновесия θ равен углу изгиба H – связей между молекулами. Важной особенностью колебаний в НПС является быстрый рост периода колебаний с ростом угла θ (угла изгиба H – связи между молекулами θ) [9–11] и показателя (степени) НПС n (по оценкам для воды [9] $n \approx 8$), что хорошо согласуется с изменениями либрационных частот и углов изгиба H – связей в воде с нагревом [2–4, 12].

В работах [9, 10] проведено моделирование вращательных колебаний молекул воды с помощью модели двухчастотного сферического маятника в НПС. При малых начальных скоростях протоны совершают двухчастотные независимые колебания по двум взаимно перпендикулярным осям. С ростом скоростей и углов отклонения маятника по оси Y частоты колебаний в НПС сближаются и начинаются вращения маятника вокруг его оси (и, аналогично, протонов молекул воды вокруг осей H – связей), что приводит к сильной эллиптичности (вытянутости) орбит. При полном совпадении периодов колебаний по осям T_x и T_y будут наблюдаться чисто эллиптические траектории. При небольшом различии периодов колебаний по осям появляется прецессия больших осей эллипсов. Причем, в отличие от одночастотного сферического маятника ($k=1$), вращения происходят не в пределах круга [11], а в некоторой эллиптической области с длинной осью вдоль оси Y модели, с наименьшим моментом инерции маятника и начальным периодом колебаний T_{y0} [9]. Эти общие прецессирующие эллипсоподобные колебания продолжают с ростом начальной скорости маятника вплоть до выхода маятника из его потенциальной ямы – из нижней полусферы.

В работах [9, 10] есть неточности, в частности, частоты вращательных двухчастотных колебаний соотносятся между собой как $k^{0,25}$, а не как $k^{0,5}$. Это сближает эти частоты и уменьшает средние величины углов отклонения маятника θ [9], которые были завышенными сравнительно с экспериментом для величин углов изгибов H – связей в воде [12]. Поэтому уточнение расчетов может дать более реальную картину о колебаниях молекул воды в жидкой фазе и о возможности вращений протонов молекул вокруг осей их H – связей.

3. Цель и задачи исследования

Цель работы – рассмотрение особенностей вращательных колебаний молекул воды путем моделирования их эллиптических колебаний с помощью модели двухчастотного сферического маятника.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. Определение и уточнение параметров эллиптических орбит маятника в зависимости от неоднородности поля сил и различия частот маятника.

2. Определение возможности эллиптических колебаний молекул воды и вращений протонов ее молекул вокруг собственных осей H – связей.

4. Моделирование колебаний двухчастотного маятника

Модель колебаний двухчастотного сферического маятника в НПС подробно рассмотрена в [9]. Она представляет две массы, закрепленные на двух стержнях длиной l под углом θ_0 . Ось X маятника соответствует оси x молекулы воды [2], а ось Y маятника – оси y молекулы для отношения моментов инерции $k=3$ либо оси z молекулы для $k=1,5$. Отклонения маятника рассматриваются через угол θ отклонения маятника от вертикальной оси Z либо относительные начальные смещения по оси x : $\delta_{x0}=x_0/l$ и оси y : $\delta_{y0}=y_0/l$ (где $l=1$ м, $2 \cdot m=1$ кг). При некоторых заданных начальных скоростях v_{y0} при начальных смещениях δ_{x0} маятник совершает чисто эллиптические колебания. При этом траектория движения маятника относительно его оси Z согласуется с траекторией вращательных колебаний протонов молекулы воды относительно оси H – связи.

Локальное моделирование вращательных колебаний молекулы воды было проведено в пакете *MatLab* с помощью модели двухчастотного сферического маятника в неоднородном поле сил вида $G=g \cdot \cos^n \theta$ ($g=10$ м/с²). Это поле сил остается неизменным для всего процесса моделирования колебаний.

Определение параметров траекторий маятника проводилось для отношений моментов инерции, характерных для молекулы воды $k=1,5$ и 3 , а также промежуточных $k=1$; $1,2$ и 2 , и для показателей НПС $n=0$ (однородное поле сил) и $n=8$. При анализе результатов использовались и другие значения показателей НПС в интервале $n=0 \dots 8$. Эллипсоподобные колебания маятника [9, 10] достаточно сложны для рассмотрения, а потому для анализа были выбраны эллиптические траектории, как повторяющиеся, наиболее наглядные и простые траектории движения двухчастотного сферического маятника и пересекающие всю область существования его эллипсоподобных колебаний [9].

На рис. 1 показаны эллиптические орбиты двухчастотного маятника в НПС с $n=8$ и $k=3$ для начальных смещений по оси X с шагом $0,05$. На рис. 1,а показаны XU – проекции эллиптических орбит, а на рис. 1,б – их объемный вид. Проекция орбит симметричны, для компактности показана их половина ($Y>0$).

На рис. 2 показаны XU – проекции эллиптических орбит для отношения моментов инерции $k=1,5$ и показателей $n=0$ и 8 для различных начальных смещений δ_{x0} . Видим пересечение орбит при малых начальных смещениях δ_{x0} по оси Y для $n=0$ и уменьшение величины больших полуосей эллипсов и эллиптичности траекторий с ростом величины показателя НПС n . Для больших величин смещений δ_{x0} эллиптические колебания становятся невозможными.

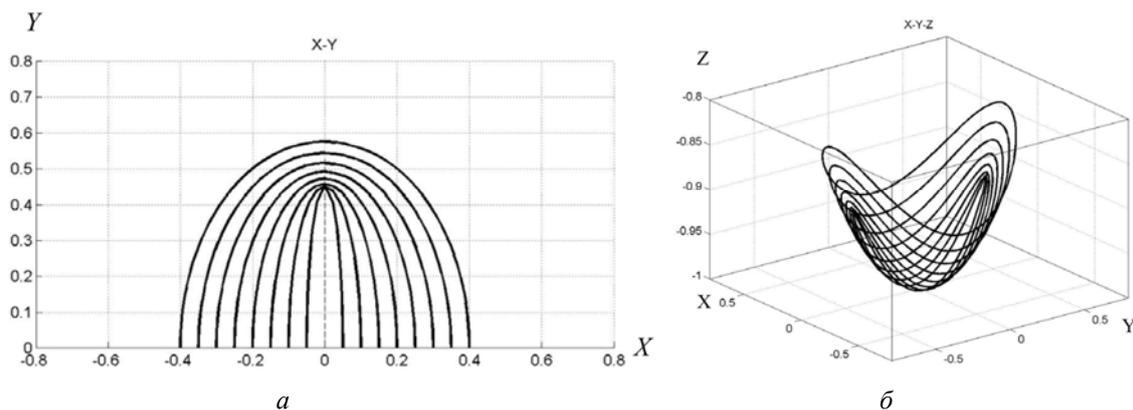


Рис. 1. Вид эллиптических орбит двухчастотного сферического маятника для $k=3$ и $n=8$: a – в проекциях координат XY ; b – объемный вид – XYZ

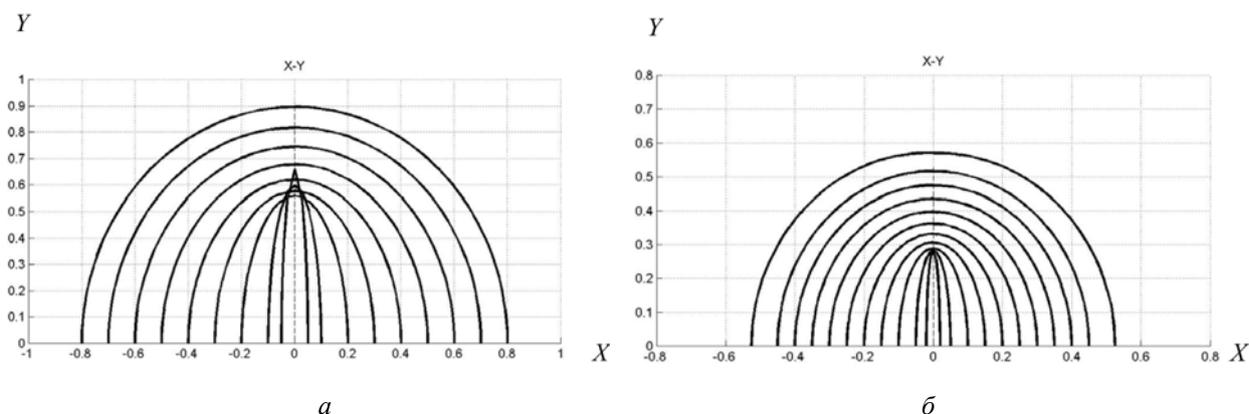


Рис. 2. XY – проекции эллиптических орбит двухчастотного маятника для отношений $k=1,5$ и начальных смещений δ_{x0} : a – для $n=0$; b – $n=8$

Эллиптические колебания можно также рассматривать как переход конических колебаний одночастотного маятника с $k=1$ при его превращении в двухчастотный маятник при росте отношения моментов инерции k . На рис. 3 показаны рассчитанные зависимости относительных величин больших полуосей эллипса δ_y для отношений моментов $k=1,2; 1,5; 2$ и 3 и показателей НПС $n=0$ и 8 от величины начальных смещений δ_{x0} по оси X (минимум δ_{x0} при моделировании: $\delta_{x0}=0,001$). Видим наличие минимумов для величин больших полуосей эллипсов вблизи малых начальных смещений δ_{x0} . Снизу все эти, упорядоченные по параметру k , кривые ограничены прямой для конического маятника ($k=1$) и стремятся к ней с ростом величины смещений δ_{x0} .

На рис.4 показаны зависимости средних углов отклонения маятника при эллиптических колебаниях для этих же отношений моментов k и показателей НПС n от величины начальных смещений δ_{x0} . Видим, что на их величину оказывает основное влияние величины больших полуосей эллипса δ_y (рис. 3), поскольку время пребывания маятника при наибольших отклонениях максимально [8, 9]. При этом данные углы для однородного поля сил ($n=0$) примерно вдвое большие, чем для поля сил с показателем НПС $n=8$.

На рис. 5 показаны зависимости скоростей в точках пересечения эллипса осями для отношений $k=1; 1,2; 1,5; 2$ и 3 и показателей НПС $n=0$ и 8 от величины начальных смещений по оси X . Кривая $k=1$ соответствует одночастотному коническому маятнику, для которого скорости на осях равны: $v_c=v_x=v_y$. Видим, что для двухчастотного маятника скорости $v_y > v_c$ и быстро растут с ростом отношения k , а скорости v_x близки к v_c , но для однородного поля сил $v_x \geq v_c$ ($n=0$) (рис. 5, a) и $v_x < v_c$ для НПС с $n=8$ (рис. 5, b). Рост отношения k для НПС с $n=8$ ведет к смещению минимумов скорости для углов отклонения в сторону роста смещений δ_x , а максимумов – наоборот.

Для анализа влияния параметров k и n на величину средних углов отклонения эллипса рассмотрим их зависимости вблизи минимумов этих углов (рис. 4). Такие величины смещений δ_{x0} можно считать характерными для вращательных колебаний молекул воды (для смещений $\delta_{x0} > 0,2$ углы отклонений $\theta > 15^\circ$, что больше, чем у воды [12], для $n=8$ и $k=1,5$ – рис. 4, b).

На рис. 6 показаны зависимости величин средних углов отклонения эллипса от величины отношений моментов инерции маятника k для начальных смещений $\delta_{x0}=0,15$. Аналогичный вид от данных параметров имеют также зависимости для скоростей v_{y0} и больших полуосей маятника. Это говорит об их связанности и приблизительной пропорциональности.

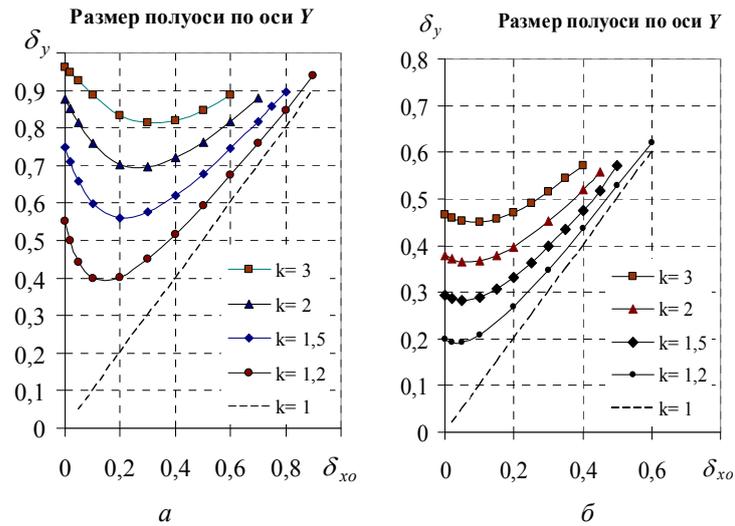


Рис. 3. Зависимости величин больших полуосей эллипсов δ_y от начальных смещений δ_{x0} для отношений моментов $k=1; 1,2; 1,5; 2$ и 3 и для показателей НПС: a – для $n=0$; b – для $n=8$

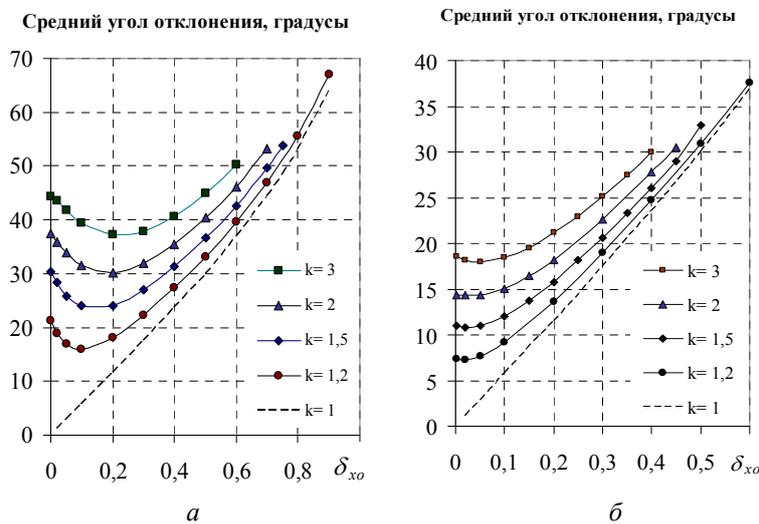


Рис. 4. Зависимости средних углов отклонения маятника от смещений δ_{x0} для отношений $k=1; 1,2; 1,5; 2$ и 3 и показателей НПС: a – для $n=0$; b – для $n=8$

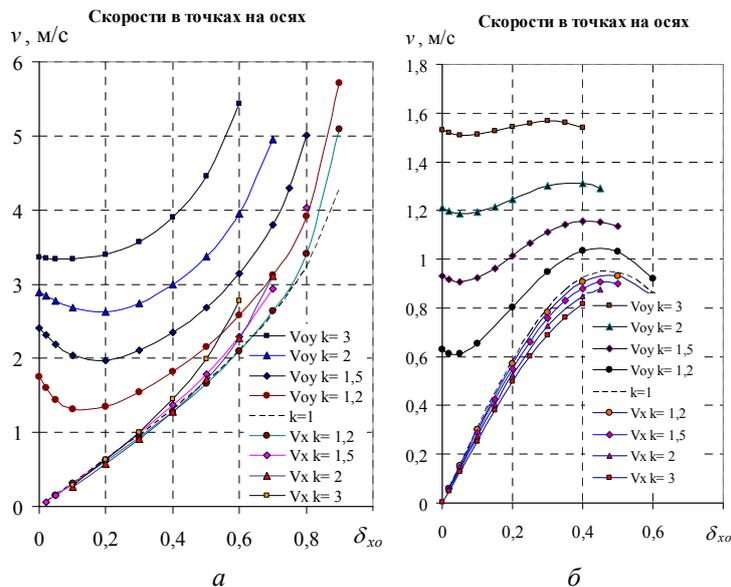


Рис. 5. Зависимости скоростей в точках на осях эллипсов для отношений $k=1 \dots 3$ от начальных смещений δ_{x0} и показателей НПС: a – для $n=0$, b – для $n=8$

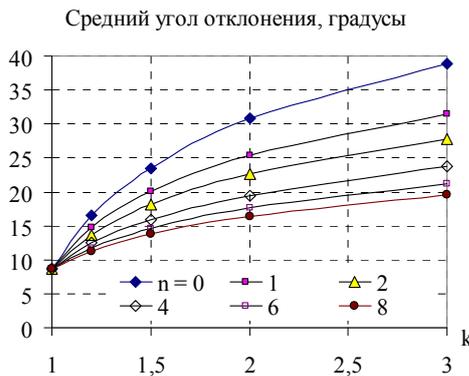


Рис. 6. Залежності середніх кутів відхилення для еліпсів при початкових зміщеннях $\delta_{x0}=0,15$ від відношень k для показателів НПС $n=0; 1 \dots 8$

5. Результати дослідження і їх обговорення

Плоскіе XY – проекції еліптичних орбіт, безумовно, являються упрощенням реальних об'ємних траєкторій маятника (рис. 1, б). Однак це дозволяє зробити більш простими і наглядними траєкторії руху, тим більше що для малих відхилень, зміщення вздовж осі Z пренебрежимо малі. С ростом відношення моментів інерції k ростуть величини великих півосей еліпса δ_y (рис. 2, 3). Проекції траєкторій для відношення моментів інерції $k=3$ мають майже вдвічі більші величини півосей еліпса δ_y , ніж для відношення $k=1,5$. Це призводить і до вдвічі більшим середнім кутам відхилення маятника (рис. 4). В однорідному полі сил ($n=0$) кути відхилення маятника також приблизно вдвічі більші, ніж в НПС з $n=8$. Однак якщо в НПС з $n=8$ кути відхилення маятника близькі до кутів вигибів H – зв'язей в воді [12], то в однорідному полі сил вони великі для молекул води навіть для $k=1,5$.

Зменшення величин великих півосей еліптичних орбіт, величин середніх кутів відхилень і швидкостей в НПС обумовлені зуженням потенціальної ями маятника по куту і зменшенням її глибини з ростом величини показателя НПС n [11]. Зменшення максимальних швидкостей по осям з ростом показателя НПС з $n=0$ до $n=8$ для початкових швидкостей v_{y0} видно на рис. 5. Максимуми для швидкостей поблизу відхилень $\delta \approx 0,5$ для $n=8$ (рис. 5, б) обумовлені наявністю максимальної швидкості з ростом відхилень δ в НПС для великих значень показателя НПС n [11]. Для великих значень відхилень δ коливання стають неустойчивими до найменшим зміщенням.

Для швидкостей на осях еліпса v_x і v_{y0} бачимо, що вони групуються відносно швидкості конічного маятника v_c по різні сторони. Швидкості v_y завжди більше конічної, а швидкості v_x близькі до неї. Близькість швидкості v_x до конічної можна пояснити тим, що при русі вздовж осі Y існує реальний потенціальний бар'єр по висоті (по осі Z – рис. 1, б), а вздовж осі X він відсутній, якщо швидкість по осі Y буде достаточною для подолання цього бар'єра. Видімо отже швидкість v_x мало відрізняється від конічної v_c . Зменшення швидкостей v_x відносно v_c в НПС $n=8$ пов'язано з зменшенням сил при великих відхиленнях δ_y (із-за зростаючої k). При початкових шкоро-

стях v_{y0} менших, ніж для еліпсів, частоти коливань по осям стануть різними і будуть спостерігатися незалежні коливання по осям на двох частотах [9]. Це підкреслює важливість рівності частот по осям для появи еліптичних і еліпсоподібних коливань.

Збільшення початкової швидкості v_{y0} відносно швидкості конічного маятника v_c (рис. 5) веде до більш швидким коливанням і зменшенню їх періодів з ростом відношень моментів k і зміщення δ_{x0} . Видімо це веде за рахунок великої кінетическої енергії по осі X внаслідок, з ростом величини зміщення δ_{x0} , до зменшенню величини великих півосей еліпсів.

Полученні середні кути відхилення маятника θ менші, ніж було в [9] і збігаються з експериментальними кутами вигиба H – зв'язей в воді [12]. Поскольку в воді середні кути вигиба H – зв'язей при кімнатній температурі становлять близько 15° [12], то згідно рис. 4, можна говорити про збудженні еліптичних коливань в рідинній воді для відношення моментів інерції молекули $k=1,5$ (кути відхилення $11 \dots 13^\circ$ для $\delta_x \leq 0,1$) і такої можливості для відношення $k=3$ (кут відхилення близько 18° для $\delta_x \leq 0,1$). Поскольку еліптичні коливання для малих зміщення з'являються на нижній границі появи еліпсоподібних коливань [9], то можна вважати доведеним, що для відношення моментів інерції молекули $k=1,5$ протони молекули починають виконувати обертання навколо своїх осей H – зв'язей.

Хоча при однаковій ймовірності збудженні обох коливань отримимо середній кут вигиба H – зв'язей $(12+18)/2=15^\circ$, який добре збігається з [12], нам треба врахувати ймовірність цього, виходячи з величини середньої теплової енергії молекули, більшу частину якої складає кінетическа енергія обертання [8]. На рисунку 7 наведені величини кінетическої енергії в точках перетинання еліпса з осями, розраховані для оптимального для води показателя НПС $n=8$ [9] по шкоростям на рис. 5, б.

Вздовж осі Y, з меншим моментом інерції, кінетическа енергія маятника зменшується в k раз (швидкості розраховуються для місцеположення маси маятника (протона) без урахування ефективного довжини нашого фізического маятника). Видімо, що хоча швидкості швидко ростуть, відбувається зближення кривих для кінетическої енергії вздовж осі Y з ростом відношень k . Це зближення можна пояснити тим, що величина кінетическої енергії маятника зближається до її максимально можливого значення в потенціальної ями.

Видімо (рис. 7), що для відношення $k=3$ кінетическа енергія приблизно в 1,4 рази більше, ніж для відношення $k=1,5$ при малих відхиленнях δ_x , що відповідає, з урахуванням внеску трансляційних коливань в повну енергію коливань, більшій температурі ($273K \cdot 1,25 \approx 340 K$). Отже збудженні еліптичних коливань для відношення моментів інерції $k=3$ в воді при кімнатній температурі, шкороше всього, можливо лише частково і для малих величин зміщення δ_{x0} ($\delta_{x0} < 0,1$, рис. 4). При більш високим температурах внаслідок хаотического впливання

импульсов от соседних молекул, близости углов изгиба H – связей к максимально возможным, а кинетической энергии – к максимальной в потенциальной яме, для отношения моментов инерции молекулы $k=3$ существование устойчивых эллиптических орбит становится маловероятным.

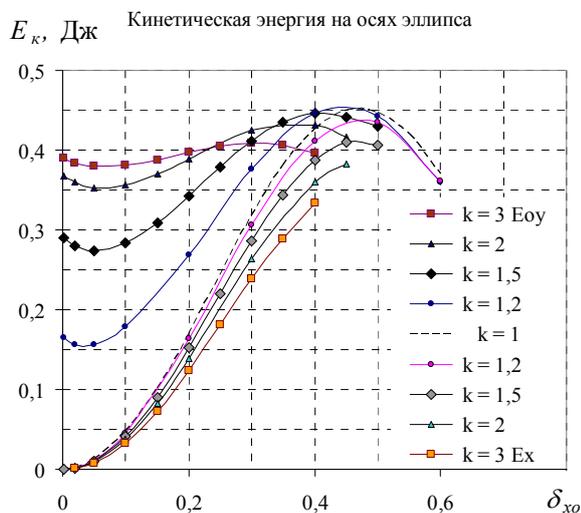


Рис. 7. Величины кинетической энергии в точках на осях эллипсов для показателя НПС $n=8$ и отношений моментов инерции $k=1; 1,2; 1,5; 2$ и 3

Главной причиной наличия вращений протонов является необходимость совпадения частот по обеим осям колебания, что достигается лишь в НПС с большой величиной показателя НПС n . В однородном поле сил это возможно лишь при больших величинах углов изгиба H – связей, что приведет к ослаблению и разрыву H – связей молекул в воде. Таким образом, результаты расчетов говорят о реальной возможности возбуждения в жидкой воде с показателем НПС $n=8$ эллиптических и эллипсоподобных вращений протонов молекул воды вокруг собственных осей H – связей.

Условие для углов изгиба H – связей при комнатной температуре (до 15°) для отклонений $\delta_{x0}=0,15$ ($\theta_{x0}=8,6^\circ$) выполняется для показателей НПС $n=6$ и 8 (рис. 6). Поэтому интересно обсудить вопрос о возможности существования для молекул воды НПС с показателем $n=6$. В работе [9] обсуждалось, что показатель НПС n в воде для изгибов связей близок к степени при радиусе в потенциале взаимодействия ($1/r^n$) для сил притяжения. Степень $n=6$ широко применяется в физических расчетах для потенциалов взаимодействия Ленарда – Джонса и Ван-дер-Ваальса. Возможно, что такая степень реальна и для молекул воды, потому что за счет колебаний соседних молекул суммарные средние углы изгибов H – связей будут возрастать, сравнительно с нашей моделью. Это будет уменьшать силы межмолекулярного взаимодействия и этим как бы соответствовать росту эффективной величины показателя НПС n .

Вращательные колебания молекул воды по углу θ можно считать малыми, что позволяет считать результаты моделирования для углов отклонения θ до 15° достаточно точными. Для относительных отклонений маятника $\delta > 0,2$ точность расчетов для него будет понижаться. Это обусловлено предположениями о постоянстве моментов инерции маятника при больших углах отклонения от равновесия, что по разным причинам не выполняется, а также простой моделью направленных сил, пренебрежением случайными внешними силами (влиянием соседних молекул). А потому можно говорить лишь о качественном согласии расчетов для маятника при больших углах отклонения с колебаниями молекул воды. Также надо помнить, что в воде при отклонениях $\delta > 0,5$ могут наблюдаться разрывы H – связей [3].

Представление НПС в виде $G=g \cdot \cos^n \theta$ безусловно есть упрощением взаимодействия электронных орбиталей молекул воды. Такая симметрия может соответствовать одной электронной p – орбитали, тогда как у молекулы воды имеется 3 независимые p – орбитали и множество их комбинаций, создающих, в частности, тетраэдрическую симметрию электронной оболочки молекулы воды и ее связей. Создание более сложной модели НПС – задача будущего.

Необходимо отметить, что в данной локальной модели расчета рассматриваются колебания при постоянстве всех параметров модели. Те же эллиптические орбиты получаются для скоростей заданных с точностью до третьего – четвертого знака. В реальном окружении молекулы будут испытывать постоянное, часто хаотическое, влияние соседних молекул. Вследствие этого будут меняться все силовые и геометрические параметры модели, а потому траектории движения молекул, их протонов будут заметно изменяться. Можно ожидать появления независимых двухчастотных и хаотических колебаний, а также возникновения разрывов связей. Однако можно считать, что данная модель будет являться основой, на которую накладываются случайные или коллективизированные внешние возмущения.

6. Выводы

1. Моделированием двухчастотного сферического маятника в неоднородном поле сил получены зависимости для ряда его параметров, в частности, величин больших полуосей эллипсов, обуславливающих эллиптичность траекторий его колебаний.

2. Показано, что средние углы отклонения двухчастотного маятника хорошо согласуются с углами изгиба H – связей в воде для отношения моментов инерции молекулы $k=1,5$. Для отношения $k=3$ углы отклонения велики и данные колебания могут возбуждаться лишь частично.

3. Полученные результаты свидетельствуют о возможности возбуждения эллипсоподобных колебаний у молекул воды в жидкой фазе, а также о возможности вращений их протонов вокруг своих осей H – связей.

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. – Л.: Гидрометеиздат, 1975. – 280 с.

3. Маленков, Г. Г. Структура и динамика жидкой воды [Текст] / Г. Г. Маленков // Журнал структурной химии. – 2006. – Т. 47. – С. 5–35.
4. Kumar, P. Molecular dynamics study of orientational cooperativity in water [Text] / Pradeep Kumar, Giancarlo Franzese, Sergey V. Buldyrev, H. Eugene Stanley // Physical Review E. – 2006. – Vol. 73, Issue 4. 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. Malenkov, G. G. Collective effects in molecular motions in liquids [Text] / G. G. Malenkov, Yu. I. Naberukhin, V. P. Voloshin // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2012. – Vol. 86, Issue 9. – P. 1378–1384. doi: 10.1134/s003602441209004x
7. Берсукер, И. Б. Эффект Яна – Теллера и вибронные взаимодействия в современной химии [Текст] / И. Б. Берсукер. – М.: Наука, 1987. – 344 с.
8. 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.urau.ua/eejet/article/view/1465/1363>
9. Малафаев, Н. Т. Моделирование вращательных колебаний молекул воды [Текст] / Н. Т. Малафаев, Н. И. Погужих // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – 2015. – Т. 2, № 5 (74). – С. 27–35. doi: 10.15587/1729-4061.2015.40569
10. Малафаев, Н. Т. Силовые особенности колебаний двухчастотного сферического маятника в неоднородном поле сил [Текст] / Н. Т. Малафаев // ScienceRise. – 2016. – Т. 10, № 2 (15). – С. 68–75. doi: 10.15587/2313-8416.2015.51842
11. Малафаев, Н. Т. Вращательные колебания молекул воды как колебания сферического маятника в неоднородном поле сил [Текст] / Н. Т. Малафаев // ScienceRise. – 2016. – Т. 2, № 2 (19). – С. 62–69. doi: 10.15587/2313-8416.2016.60587
12. Sceats, M. G. The water–water pair potential near the hydrogen bonded equilibrium configuration [Text] / M. G. Sceats, S. A. Rice // The Journal of Chemical Physics. – 1980. – Vol. 72, Issue 5. – P. 3236–3247. doi: 10.1063/1.439560

Рекомендовано до публікації д-р техн. наук Погужих М. І.

Дата надходження рукопису 28.12.2016

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