ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

УДК 539.194: 544.273 DOI: 10.15587/2313-8416.2018.121426

АНАЛИЗ ФАЗОВЫХ ДИАГРАММ ДВУХЧАСТОТНОГО МАЯТНИКА КАК МОДЕЛИ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ МОЛЕКУЛЫ ВОДЫ

© Н. Т. Малафаев

Проведен анализ вращательных колебаний молекул воды с помощью модели двухчастотного маятника в области изменения типа его колебаний. Обнаружены особенности фазовых диаграмм, траекторий и скоростей маятника при переходе от независимых двухчастотных колебаний к эллипсоподобным колебаниям, аналогичным вращениям молекул воды вокруг осей связей в неоднородном поле сил межмолекулярного взаимодействия

Ключевые слова: молекула воды, двухчастотный маятник, тип колебания, фазовые диаграммы, неоднородное поле сил

1. Введение

Свойства воды вызывают большой интерес и широко обсуждаются в литературе. Вопросы влияния колебательных спектров атомов и молекул на свойства веществ подробно рассматриваются в рамках теории эффекта Яна-Теллера [1]. В работе [2] данная теория применена автором к колебательным спектрам молекул жидкой воды, и показано, что ее главные особенности обусловлены появлением в ней новых коллективизированных вращательных (либрационных) колебаний, приводящих к изгибам водородных связей (H – связей) в воде и значительному изменению всех ее свойств.

Моделирование вращательных колебаний молекул воды проводилось с помощью модели двухчастотного сферического маятника [3], однако еще многие вопросы физики колебаний молекул воды требуют своего анализа.

2. Литературный обзор

Главное внимание в литературе уделяется экспериментальным данным о свойствах жидкой воды [4, 5], классическим моделям ее структуры [4–6], модели динамических связей в рамках теории эффекта Яна – Теллера [2], моделированию динамики движения ее отдельных молекул [5, 6], методам моделирования и диффузии молекул [5, 6], потенциалам взаимодействия молекул [4, 5], взаимодействиям с внешними поверхностями [4] и с другими молекулами [5, 6], рассматриваются коллективные перемещения молекул [7, 8], димеризация молекул воды [9], механизмы разрывов H – связей и их статистика [5, 6].

Проблеме вращательных колебаний и их моделирования для молекул воды, которые в большой степени ответственны за все ее термодинамические свойства, уделяется мало внимания. Обычно информация об вращательных колебаниях рассматривалась через наличие в жидкой воде спектров поглощения электромагнитных волн [4] и средних углов изгиба *H*связей [6] без анализа их причины, их характеристик и особенностей, что говорит о недооценке влияния этих колебаний на все свойства воды.

При компьютерном моделировании колебаний ансамблей молекул воды методом молекулярной динамики [5, 6] задается большой шаг во времени сравнительно с периодом колебаний, что требует постоянной коррекции температуры системы, а также это не позволяет рассмотреть особенности вращательного движения молекул. Учет теплового движения всех молекул сопровождается его сильной хаотизацией, включая разрывы связей. Не решен вопрос о едином описании потенциалов межмолекулярного взаимодействия.

В работе [3] для моделирования вращательных колебаний молекулы воды была применена модель двухчастотного сферического маятника, поскольку было показано [2], что малые вращательные колебания молекул воды являются двухчастотными. Наличие двух вращательных частот маятника задавалось параметром $k=I_x$ / I_y , характеризирующим отношение моментов инерции маятника (и молекулы) по осям модели, где k>1 и ось x – низкочастотная. Вследствие различия моментов инерции молекулы по осям возвращающие силы, действующие на маятник, становятся нецентральными, что может способствовать вращению маятника (и молекулы) вокруг его оси.

Моделирование колебаний для маятника проводилось в неоднородном поле сил (НПС), моделирующем направленные межмолекулярные силы. В работе [10] рассмотрены силы и потенциалы взаимодействия в НПС и их влияние на колебания маятника. Наличие НПС приводит к сильной зависимости периода колебаний маятника от амплитуды колебаний [3, 10], что согласуется с зависимостями либрационных частот воды от температуры [4]. Это также создает условия для перехода двухчастотных колебаний маятника к колебаниям на одной общей частоте.

Результаты моделирования [3, 11] показали, что колебания маятника можно разделить на два типа: двухчастотные независимые колебания (НК) при малых амплитудах колебаний и одночастотные, описывающие сложные траектории эллипсоподобных колебаний (ЭПК) при больших амплитудах колебаний. ЭПК соответствуют вращениям молекул воды и, в частности, их ядер атомов водорода вокруг осей H – связей с соседними молекулами. Эти вращения ведут к появлению на осях связей постоянного магнитного поля. В работе [12] рассмотрен случай простейших ЭПК – эллиптических колебаний, при которых протоны молекул воды осуществляют в пространстве движение по постоянным эллиптическим орбитам.

При наличии чисто эллиптической орбиты область ЭПК можно разделить на две:

 – ЭПК-1 – с траекториями колебаний внутри этой орбиты;

 – ЭПК-2 – при больших скоростях и с траекториями колебаний вне этой орбиты [11].

В работе [11] начат анализ траекторий для типов колебаний маятника в широком интервале его начальных скоростей. Однако не были рассмотрены особенности этих колебаний для скоростей, сил и фазовых диаграмм колебаний, особенно, вблизи критической точки изменения типа колебаний.

3. Цель и задачи исследования

Цель работы – поиск и физико-математический анализ особенностей колебаний молекулы воды с помощью модели двухчастотного маятника в области изменения типа ее колебаний и создание методики экспресс – разделения областей существования разных типов колебаний по зависимостям выбранных параметров колебаний от величины его начальной скорости.

Для достижения поставленной цели были решены следующие задачи:

1. Анализ траекторий, скоростей и фазовых диаграмм двухчастотного маятника и определение параметров траекторий и диаграмм, указывающих на изменение типа колебаний маятника.

2. Построение диаграмм, в серии измерений с изменением начальной скорости, для параметров траекторий и скоростей двухчастотного маятника для экспресс-анализа областей существования разных типов колебаний.

4. Модель колебаний двухчастотного маятника в НПС

Модель свободных колебаний двухчастотного сферического маятника в НПС подробно рассмотрена в [3]. Она представляет две массы, закрепленные на двух невесомых стержнях длиной l под углом Θ_o , что дает разные моменты инерции маятника по его осям. Ось X маятника (перпендикуляр к плоскости маятника) соответствует оси x молекулы воды [5], а ось Y маятника – оси y молекулы воды для отношения моментов инерции k=3 либо оси z молекулы (биссектриса угла Θ_o молекулы) – для отношения моментов инерции k=1,5.

Смещения маятника от равновесия (вертикальной оси Z) рассматриваются через угол отклонения маятника θ , либо через относительные смещения от начала XY – координат по оси X_i :

$$\delta_i = x_i / l \ (l = 1 \text{ M}, i = X, Y),$$

где смещения по осям x_i и δ_i численно равны. При моделировании колебаний задавались начальное относительное смещение маятника δ_{xo} по оси X и его начальная скорость v_{yo} по оси Y. Угол максимального отклонения маятника θ ограничивался при моделировании нижней полусферой – углом 90°, тогда как для реальной молекулы воды при углах более 30° вероятен разрыв ее H – связи [6].

Локальное моделирование вращательных колебаний молекулы воды было проведено в пакете *MatLab* с помощью модели двухчастотного сферического маятника в НПС вида

$$G=g \cdot cos^n \theta$$
 (g=10 M/c², n=8).

Это осредненное поле сил остается неизменным для всего процесса моделирования колебаний, в котором маятник совершает свободные колебания. То есть, для случая молекулы воды – мы пренебрегаем тепловым движением ее соседних молекул. Наличие НПС приводит к сильной зависимости периода колебаний маятника от амплитуды колебаний, что является главной причиною синхронизации частот колебаний в "критической" точке (максимальные отклонения по оси У всегда большие, чем по оси Х). Это приводит к изменению типа колебаний с ростом начальной скорости маятника [11]. При "эллиптической" начальной скорости траектория представляет эллипс, при "максимальной" скорости - угол отклонения маятника в достигает 90°. Определение параметров траекторий маятника проводилось для отношения моментов инерции, характерного для молекулы воды *k*=1,5 [12].

Колебания (НК и ЭПК) двухчастотного маятника происходят в широкой области пространства [3, 11] и сложны для рассмотрения. Потому при анализе колебаний были выбраны и рассмотрены особые экстремальные точки на огибающих линиях областей колебаний и их значения (параметры). Для траекторий колебаний определены параметры координат, для фазовых диаграммам – параметры координат, при большом числе периодов колебаний и времени моделирования (≈200 с) можно выделить область, внутри которой происходят данные колебания, а также достаточно надежно усреднить полученные результаты. Шаг моделирования составлял 0,0001 с, поскольку нелинейностями моделирования за данное время можно пренебречь.

5. Результаты исследования и их обсуждение

На рис. 1 показаны траектории в *XY*-координатах и фазовые диаграммы маятника вдоль оси *X* в об-

ласти независимых колебаний маятника для заданных начального смещения δ_{xo} и начальной скорости v_{yo} .



Рис. 1. Колебания маятника в области НК (δ_{xo} =0,2; v_{yo} =0,7 м/с): a - X - Y - траектории колебаний; $\delta - V_x - X - \phi$ азовая диаграмма; $e - V_y - X - \phi$ азовая диаграмма маятника

Для малых отклонений ($\delta < 0,1$) колебания происходят в прямоугольной области *XY* - координат, а фазовые диаграммы: зависимости $V_x - X$ или $V_y - Y$ представляют собой эллипсы. С ростом отклонений маятника боковые стороны прямоугольника изгибаются (рис. 1, *a*) [11], а фазовые диаграммы уширяются и деформируются. Видим, что расстояние между вершинами «измененного прямоугольника» (ВИП) по оси *X*: $2x_r$ соответствует внутреннему размеру на этой оси для фазовых диаграмм (рис. 1, *б*, *в*). Это объясняется тем, что в ВИП происходят максимальные отклонения маятника от начала координат и скорости $v_x = v_y = 0$, что соответствует точкам на оси *X* диаграмм. Вторые точки обнуления компонент скоростей происходят на своих осях, что и ведет к наличию данных диаграмм вне или внутри интервала $2x_r$ на оси *X*.

При достижении критической скорости, слияния ВИП и появления ЭПК вращения маятника становятся однонаправленными [11]. И тогда траектории на фазовой диаграмме V_x -X (рис. 1, δ) заполняют все пространство до начала координат (x_r =0). Фазовые диаграммы V_x -X или V_y -Y представляют собой эллипсы, переходящие в спирали, для обоих типов колебаний и потому не представляют интереса при анализе типа колебаний.

Смешанная фазовая диаграмма маятника V_y —X при малых скоростях имеет вид аналогичный рис. 1, *a*, но повернута на 90°. С ростом скорости она изменяется (рис. 1, *s*), и особенно, вблизи критической точки. Это обусловлено наличием максимумов траекторий по оси Y правее ВИП (1-й октант) вблизи критической точки. Данная фазовая диаграмма маятника значительно меняется при изменении типа колебаний, и поэтому далее она будет анализироваться.

На рис. 2, *а* видим, что в области ЭПК все траектории маятника находятся между двумя огибающими эллипсами. Также видим качественное изменение вида для смешанных фазовых диаграмм в областях ЭПК (рис. 2, δ) и НК (рис. 1, ϵ). Видим, что радиус внутреннего эллипса по оси *X* для траекторий соответствует координате максимума скорости v_y на смешанной фазовой диаграмме, поскольку в ней доля в общей кинетической энергии от скорости по оси *X* минимальна и далее с ростом отклонения по оси *X* эта доля растет.

В области НК в точках ВИП все скорости обнуляются и маятник начинает двигаться в обратном направлении и с изменением направления вращения в плоскости XY по углу ϕ ($\phi_i = \operatorname{arctg}(y_i / x_i)$) на противоположное. С ростом начальной скорости увеличивается отклонение, а частоты и точки ВИП сближаются. В критической точке кинетической энергии маятника достаточно для продолжения движения маятника далее через ось У и его вращения в том же направлении. Вследствие нецентральности сил, а также наличия кинетической энергии маятник не может проходить вблизи начала координат и там образуется пустое эллиптическое пространство (рис. 2, а). Видим, (рис. 2, б) что при достижении критической скорости вид смешанной фазовой диаграммы изменяется, так как исчезает половина траекторий – во 2-м и 4-м октантах, отвечающих вращениям маятника по углу ϕ в обратном направлении.

На рис. 3 показаны траектории колебаний и вид смешанной фазовой диаграммы маятника в области НК вблизи критической точки. Большая плотность линий диаграммы в 1-м и 3-м октантах получена подбором времени и видим их сходство с диаграммой для ЭПК. Таким образом, смешанная фазовая диаграмма (рис. 3, δ) показывает ход трансформации этой диаграммы маятника при изменении типа колебаний от вида (рис. 1, e) к виду (рис. 2, δ).



а



Рис. 2. Вид колебаний маятника в области ЭПК ($\delta_{xo}=0,2; v_{yo}=0,9$ м/с): a - X - Y - траектории колебаний; δ – смешанная фазовая диаграмма $V_y - X$

Видим сильное сгущение кривых (рис. 3, *a*) вблизи оси *Y*. Это можно связать со сближением периодов колебаний по обеим осям T_x и T_y . В результате этого угол прецессии большой оси "эллипса" за время $\Delta T = =T_x - T_y$ будет малым, причем, он будет уменьшаться с приближением к критической точке и общей частоте. Для траекторий колебаний вдоль оси *X* (с меньшей амплитудой по оси *Y* и большей по оси *X*) период колебаний по оси *Y* уменьшится, а по оси *X* возрастет, и время ΔT увеличится. Соответственно углы прецессии большой оси эллипса вблизи оси *X* возрастают (рис. 2, *a* и 3, *a*). Таким образом, для двухчастотного маятника прецессия по осям анизотропна.

В области ЭПК прецессия осей маятника остается, хотя периоды его колебаний равны: $T_x = T_y$. Причиною прецессии является неравномерность вращения маятника в НПС вследствие появления дополнительных частот, фазовых сдвигов, особенно при его больших отклонениях.



Рис. 3. Колебания маятника вблизи критической скорости в области НК (δ_{xo} =0,2; v_{yo} =0,81 м/с): a - X - Y – траектории колебаний; δ – смешанная фазовая диаграмма V_y -X

В работе [10] рассмотрены силовые фазовые диаграммы в области ЭПК для эллиптических орбит. Была установлена аномальная силовая зависимость для оси *X* – с ростом отклонения силы растут. Поэтому представляет интерес рассмотреть эти диаграммы в области изменения типа колебаний.

На рис. 4 представлено изменение вида для силовых фазовых диаграмм в областях НК и ЭПК. Общее уменьшение ускорений (угла наклона) вдоль оси X обусловлено большей инерционностью маятника по данной оси. Видим, что изгибы кривых (областей колебаний) в области НК по обеим осям одинаковы – уменьшение ускорений (сил) с ростом отклонения, с изломом области при x_r . Отметим, что в критической точке область колебаний диаграммы a_x —X (кривая 1) становится симметричной (как "пропеллер", x_r =0 – слияние ВИП) и далее с ростом скорости v_{yo} в области ЭПК изгиб диаграммы изменяется на противоположный – нелинейное уменьшение ускорения a_x по оси X для малых отклонений (рис. 4, δ). Видим, что вблизи эллиптической точки области колебаний для диаграммы сузились.



Рис. 4. Изменение вида силовых фазовых диаграмм маятника (кривые $1 - a_x - X$ и $2 - a_y - Y$) при изменении типа колебаний от a - HK к $\delta - \Im\Pi K$ (δ_{xo} =0,2; $v_{yo} = 0,7$ и 1 м/с, соответственно)

Данное изменение сил в НПС вызвано влиянием больших отклонений маятника по оси Y. Это приводит к значительному уменьшению всех сил, в том числе, и для малых отклонений по оси X. Данный аномальный эффект для сил вдоль оси X в области ЭПК растет с ростом величины отклонений маятника от равновесия и отношения моментов инерции маятника k [10].

Для получения общей картины, аналогично [11], были построены зависимости для параметров областей колебаний маятника: траекторий и фазовых диаграмм в зависимости от величины начальной скорости v_{yo} при разных величинах начальных смещений δ_{xo} . В качестве таких параметров выбраны: x_{mb} y_m – максимальные смещения по осям, x_p , y_r – точки внутренних параметров, которые различны в областях НК (координаты ВИП) и ЭПК (радиусы второго эллипса). Скорости v_{xr} , v_{xm} , v_{yo} ($v_{yo}=v_{yr}$) рассмотрены в тех же точках. Для смешанной фазовой диаграммы V_y -X для начальной скорости маятника v_{yo} рассмотрены параметр x_{vy} , равный полуширине диаграммы на оси X и скорость v_{yy} , равная полуширине этой диаграммы на оси Y.

Результаты расчетов при начальном смещении δ_{хо}=0,3 для координат траекторий показаны на рис. 5 и для скоростей – на рис. 6. Смещение $\delta_{xo}=0,3$ выбрано, поскольку при нем области ЭПК-1 и ЭПК-2 примерно равны. Вследствие роста эллиптической скорости с ростом отклонения маятника для смещений δ_{кα}>0,48 область ЭПК-2 исчезает. Вследствие симметричности траекторий и диаграмм приведены положительные значения для всех параметров. Исходно некоторые гладкие кривые состояли из двух отрезков, отвечающих разным начальным условиям. Например, в точках пересечения кривых y_r и y_m (аналогично vy0 и vym) на границе областей ЭПК-1 и ЭПК-2 у этих кривых меняются минимумы величин на максимумы и наоборот. Данные о зависимостях для критических, эллиптических и максимальных ($\theta_{max}=90^{\circ}$) скоростях маятника от величины начальных смещений δ_{xo} приведены в [11].

Зависимости для параметров траекторий для координаты Х на рис. 5 более подробны, чем в [11], поскольку здесь приведены кривые для x_r и x_{vv} вместо среднего отклонения траекторий ДХ. Видим плавные изменения кривых для всех типов колебаний. В точках изменения типа колебаний наблюдаем пересечения кривых, изломы или обнуление параметров (x_p, x_{yy}). В критической точке кривая x_r подходит к оси перпендикулярно и сходная в области НК эллипсу, что можно объяснить следствием пропорциональности координат и скоростей в области НК. Кривая x_{vv} в области ЭПК линейно стремится к нулю в эллиптической точке, что позволяет прогнозировать величину эллиптической скорости и размер области ЭПК-1. Предыдущие описания для траекторий маятника согласуются с данными зависимостями.

Зависимости для скоростей маятника на рис. 6 качественно сходны с кривыми на рис. 5 – обозначения точек в сходных парах такие же. Это можно связать с наличием близкой к линейной зависимостями смещений маятника от скорости (кривые y_m (область НК) и y_r – рис. 5). В областях НК и ЭПК-1 скорость v_{yo} меньше v_{ym} , что обусловлено наличием запаса начальной потенциальной энергии в этих областях и невозможностью ее использования в области ЭПК-2. Уменьшение скоростей (рис. 6) сравнительно с координатами (рис. 5) для больших отклонений маятника связано с ослаблением сил в НПС при росте смещений.

Однако есть существенные различия на этих рисунках между кривыми x_{yy} и v_{yy} для смешанной фазовой диаграммы, что связано с различием их определения. В области НК кривые для скоростей v_{yy} и v_{ym} совпадают. Обнаружен скачок скорости v_{yy} в критической точке для смешанной фазовой диаграммы. Этот скачок связан с изменением типа колебаний и появлением внутреннего эллипса (рис. 2, *a*), максимум скорости v_{ym} смещается по оси *X* и скорость v_{yy} на оси *Y* (рис. 2, *б*) у смешанных фазовых диаграмм уменьшается.



Рис. 5. Зависимости для параметров координат от величины начальной скорости *v*_{yo} при начальном смещении δ_{xo}=0,3



Рис. 6. Зависимости для параметров скоростей маятника от величины его начальной скорости *v_{yo}* при начальном смещении δ_{xo}=0,3

Сложный вид фазовых диаграмм и областей колебаний (рис. 1–4) обусловлен вкладами в колебания прецессии маятника на дополнительных частотах и их гармониках. Они обусловлены нелинейностью сил от величины смещения маятника (рис. 4), различием и взаимовлиянием колебаний по координатам [10]. При этом, колебания вблизи малых смещений будут иметь как бы более высокие частоту и рост фазы φ , а при больших смещениях – они понижены относительно результирующей частоты колебаний, хотя в области ЭПК для колебаний вдоль оси *X*, ситуация является обратной. В области НК наиболее пониженной частотой будет разностная частота колебаний по осям. Совокупность всех фазовых смещений будет приво-

дить к уширению областей траекторий колебаний и их диаграмм, что и наблюдается (рис. 1–4). На смешанной фазовой диаграмме в области ЭПК-1 (рис. 2, δ) верхняя кривая области, идущая из точки $x_m = x_o$, пересекает ось *Y* при *Y*>0 и ось *X* при *X*<0, что соответствует величинам $v_{yy}>0$ и $x_v<0$. В области ЭПК-2 кривая $x_m>x_o$ становится нижней и знаки для v_{yy} и x_v изменяются на противоположные. Однако это связано не с изменением общего наклона кривых диаграммы, а с изменением амплитуд и фаз дополнительных частот и гармоник, приводящих к уширению областей колебаний. Особым случаем, для которого скомпенсированы фазовые смещения маятника из-за обнуления амплитуд дополнительных частот, представляет эллиптическая орбита, когда внутренний и внешний огибающие эллипсы области колебаний совпадают.

Для случая больших смещений маятника в нелинейную область сил дополнительные частоты и их фазы будут понижаться. Хотя это интересно для теории двухчастотного свободного маятника, но не реально для колебаний молекул воды. У них при таких больших смещениях и хаотическом воздействии соседей невозможны свободные колебания, зато становятся возможными массовые разрывы связей с соседними молекулами, что приведет к наличию низкочастотных случайных колебаний молекул. Существование всех данных частот и их гармоник ведет к значительному уширению линий в спектрах либрационных (вращательных) частот колебаний молекул воды [4].

Проведенный здесь и в [11] анализ для колебаний двухчастотного маятника показывает, что для молекул воды при температурах 0...100 °С (273..373 К) можно ожидать наличие около половины от максимальной кинетической энергии молекул в критической точке воды (T_{sp} =647 К), когда все связи разрываются. Это примерно соответствует области ЭПК-1 при частичном захвате соседних областей. Поэтому можно ожидать, что для большинства молекул воды характерны колебания в области ЭПК. Учитывая, малость величин *pH* ($\approx 10^{-7}$) и коэффициента диффузии ($\approx 10^{-5}$) в воде, связанных с разрывами связей между молекулами, можно считать, что хаотизация колебаний молекул воды, вследствие влияния тепловых колебаний соседних молекул, сравнительно мала и ее молекулы большую часть времени при температурах 0...100 °C совершают эллипсоподобные колебания, которые будут близки к свободным колебаниям.

6. Выводы

1. Определено, что при изменении типа колебаний двухчастотного сферического маятника от двухчастотных НК к одночастотным ЭПК изменяется вид его смешанных и силовых фазовых диаграмм.

2. Определены параметры траекторий и фазовых диаграмм маятника, изменяющиеся для разных типов колебаний двухчастотного маятника. Определены параметры, которые обнуляются в критической и эллиптической точках маятника. Для смешанной фазовой диаграммы обнаружен скачок скорости в критической точке.

3. Построены диаграммы для параметров координат и скоростей двухчастотного маятника, позволяющие провести экспресс-анализ и разделить области существования разных типов колебаний в зависимости от величин его начальных скоростей и начального смещения.

Полученные особенности колебаний двухчастотного сферического маятника будут характерными и для вращательных колебаний молекул воды.

Литература

1. Берсукер И. Б. Эффект Яна-Теллера и вибронные взаимодействия в современной химии. Москва: Наука, 1987. 344 с.

2. Малафаев Н. Т. О взаимодействиях и динамике молекул в чистой воде // Восточно-европейский журнал передовых технологий. 2011. Т. 4, № 8 (52). С. 48–58. URL: http://journals.uran.ua/eejet/article/view/1465/1363

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

4. Эйзенберг, Д., Кауцман, В. Структура и свойства воды. Ленинград: Гидрометеоиздат, 1975. 280 с.

5. Антонченко В. Я., Давыдов А. С., Ильин В. В. Основы физики воды. Киев: Наукова думка, 1991. 672 с.

6. Маленков Г. Г. Структура и динамика жидкой воды // Журнал структурной химии. 2006. Т. 47. С. 5–35.

7. Malenkov G. G., Naberukhin Y. I., Voloshin V. P. Collective effects in molecular motions in liquids // Russian Journal of Physical Chemistry A. 2012. Vol. 86, Issue 9. P. 1378–1384. doi: 10.1134/s003602441209004x

8. Kumar P., Franzese G., Buldyrev S. V., Stanley H. E. Molecular dynamics study of orientational cooperativity in water // Physical Review E. 2006. Vol. 73, Issue 4. doi: 10.1103/physreve.73.041505

9. Makhlaichuk P. V., Malomuzh M. P., Zhyganiuk I. V. Dimerization of water molecules. modeling of the attractive part of the interparticle potential in the multipole approximation // Ukrainian Journal of Physics. 2013. Vol. 58, Issue 3. P. 278–288. doi: 10.15407/ujpe58.03.0278

10. Малафаев Н. Т. Силовые особенности колебаний двухчастотного сферического маятника в неоднородном поле сил // ScienceRise. 2016. Т. 10, № 2 (15). С. 68–75. doi: 10.15587/2313-8416.2015.51842

11. Малафаев Н. Т. Анализ типов колебаний двухчастотного сферического маятника как модели колебаний молекулы воды // ScienceRise. 2017. № 4 (33). С. 57–62. doi: 10.15587/2313-8416.2017.98312

12. Малафаев Н. Т. Эллиптические колебания протонов молекул воды // ScienceRise. 2017. Т. 1, № 2 (30). С. 46–53. doi: 10.15587/2313-8416.2017.89712

Рекомендовано до публікації д-р техн. наук Погожих М. І. Дата надходження рукопису 28.12.2017

Малафаев Николай Тимофеевич, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра физикоматематических и инженерно-технических дисциплин, Харьковский государственный университет питания и торговли, ул. Клочковская, 333, г. Харьков, Украина, 61051 E-mail: mnt949@gmail.com