



УДК 519.714+517.977.1

© 2016 г. **И.Е. Еремин**, д-р техн. наук,

В.В. Еремина, канд. физ.-мат. наук,

Е.Ю. Онищенко

(Амурский государственный университет, Благовещенск)

НЕПРЕРЫВНО-ДЕТЕРМИНИРОВАННАЯ МОДЕЛЬ ШИРОКОДИАПАЗОННЫХ СПЕКТРОВ ВОДЫ. I*

Рассматривается возможность эффективного имитационного моделирования оптических спектров, характерных для жидкого полярного диэлектрика. В первой части работы представлены результаты структурного синтеза динамических моделей общей совокупности поляризационных процессов.

Ключевые слова: линейная динамическая модель, упругая ионная поляризация; упругая дипольная поляризация, релаксационная поляризация.

DOI: 10.22250/isu.2016.50.44-57

Введение

Особенности взаимодействия любого диэлектрического образца со слабым переменным электрическим полем, т.е. световым потоком, могут быть информативно охарактеризованы спектральными зависимостями оптических показателей его преломления и поглощения исследуемым веществом. При этом макроскопическая диэлектрическая проницаемость, лежащая в основе данных характеристик и обуславливаемая вынужденной электрической поляризацией микрочастиц конкретного материала, существенно зависит от частоты электрического поля, прилагаемого к образцу. Например, – в видимом диапазоне частот диэлектрическая проницаемость воды имеет значение всего лишь 1,77, а в случае рассмотрения технических частот ее значения достигают уже 80 относительных единиц.

При этом, исключая электронные квантовые эффекты, проявляющиеся в ультрафиолетовой области оптического спектра, можно выделить три основные группы электромагнитных колебаний молекул воды, индуцированных действием переменного электрического поля малой амплитуды – внутримолекулярные, межмолекулярные и релаксационные. Необходимо отметить, что каждая из перечисленных разновидностей рассматриваемых физических явлений может быть

* Работа выполнена по государственному заданию Министерства образования и науки РФ высшим учебным заведениям в рамках проекта 145.2014 «Кибернетическое моделирование внутренней микроструктуры вещества».

связана с определенным видом поляризации макроскопического массива воды, происходящей в ней на микроскопическом уровне [1 – 3].

В свою очередь, является достаточно очевидным, что комплексные поляризуемости частиц исследуемого вещества, которые в конечном итоге и определяют его диэлектрические свойства, могут быть выражены на базе ньютоновских балансов сил [4], иными словами, они вполне адекватно описываются линейными дифференциальными уравнениями общего (унифицированного) вида.

Линейная динамическая модель валентных колебаний

Упругая ионная поляризация воды обуславливается валентными и деформационными колебаниями ее молекул, механизмы которых связаны тем, что под действием приложенного поля заряженные частицы смещаются из положений своего электростатического равновесия.

Первая разновидность заключается в растяжении или сжатии молекулярных валентных связей, а вторая – в изменении исходных валентных углов. При этом в результате вынужденной деформации возникают квазиупругие силы, которые после прекращения действия поля возвращают систему в исходное положение, общее время установления таких процессов составляет от 10^{-14} до 10^{-15} секунд, что соответствует частотам собственных колебаний упруго связанных ионов, а вытекающая дисперсия диэлектрической проницаемости наблюдается в ближнем инфракрасном диапазоне.

Рассмотрим структурный синтез линейного дифференциального уравнения, описывающего первую разновидность ионных колебаний молекулы воды.

Во-первых, на основании общей теоретической картины изучаемого явления (рис. 1) составим базовые уравнения ньютоновского баланса сил:

$$m_H a_1 = F_{ЭДС1} \cos\theta - F_{сomp1} - F_{упр1}; \quad m_H a_2 = F_{ЭДС2} \cos(\alpha - \theta) - F_{сomp2} - F_{упр2}. \quad (1)$$

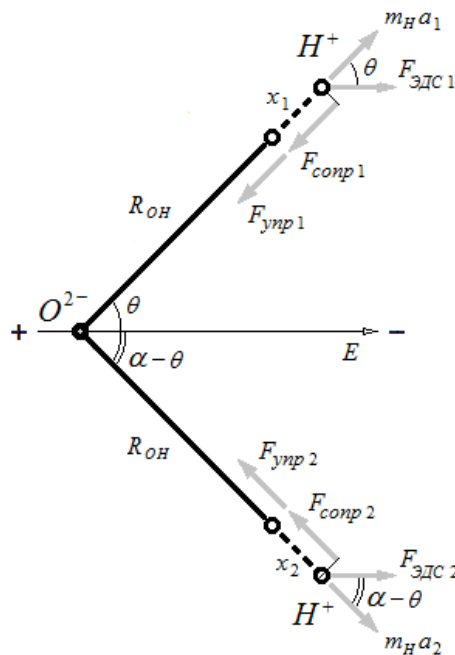


Рис. 1. Статичный баланс ньютоновских сил, теоретически действующих в рамках классического описания валентных колебаний молекулы H_2O .

Во-вторых, учитывая физическую аутентичность валентных связей молекулы воды, выразим каждую из составляющих базовых уравнений как

$$a_1 = \frac{d^2 x_1}{dt^2}, \quad F_{ЭДС1} = eE(t), \quad F_{comp1} = \frac{m_H}{\tau} \frac{dx_1}{dt}, \quad F_{yup1} = k_{yup} x_1(t);$$

$$a_2 = \frac{d^2 x_2}{dt^2}, \quad F_{ЭДС2} = eE(t), \quad F_{comp2} = \frac{m_H}{\tau} \frac{dx_2}{dt}, \quad F_{yup} = k_{yup} x_2(t).$$

Теперь на базе введенных в рассмотрение соотношений сгенерируем выражения

$$m_H \frac{d^2 x_1}{dt^2} + \frac{m_H}{\tau} \frac{dx_1}{dt} + k_{yup} x_1(t) = eE(t) \cos \theta;$$

$$m_H \frac{d^2 x_2}{dt^2} + \frac{m_H}{\tau} \frac{dx_2}{dt} + k_{yup} x_2(t) = eE(t) \cos(\alpha - \theta).$$

Затем, разделив каждый их член на m_H , приведем к более компактному виду

$$\frac{d^2 x_1}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{dx_1}{dt} + \frac{k_{yup}}{m_H} x_1(t) = \frac{e}{m_H} E(t) \cos \theta;$$

$$\frac{d^2 x_2}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{dx_2}{dt} + \frac{k_{yup}}{m_H} x_2(t) = \frac{e}{m_H} E(t) \cos(\alpha - \theta).$$

Используя параметры затухающих линейных колебаний

$$2\beta = \frac{1}{\tau}, \quad \omega_0^2 = \frac{k_{yup}}{m_H},$$

сформируем линейные уравнения гармонических осцилляторов с трением:

$$\frac{d^2 x_1}{dt^2} + 2\beta \frac{dx_1}{dt} + \omega_0^2 x_1(t) = \frac{e}{m_H} E(t) \cos \theta; \tag{2}$$

$$\frac{d^2 x_2}{dt^2} + 2\beta \frac{dx_2}{dt} + \omega_0^2 x_2(t) = \frac{e}{m_H} E(t) \cos(\alpha - \theta).$$

В-третьих, перейдем от линейных смещений к значениям соответствующих наведенных дипольных моментов валентных связей OH , учитывая, что они равны произведению поляризуемого заряда на его смещение, т.е. $\mu_i = ex_i$:

$$\frac{d^2 \mu_1}{dt^2} + 2\beta \frac{d\mu_1}{dt} + \omega_0^2 \mu_1(t) = \frac{e^2}{m_H} E(t) \cos(\theta); \tag{3}$$

$$\frac{d^2 \mu_2}{dt^2} + 2\beta \frac{d\mu_2}{dt} + \omega_0^2 \mu_2(t) = \frac{e^2}{m_H} E(t) \cos(\alpha - \theta).$$

В-четвертых, учитывая броуновскую хаотичность пространственной ориентации молекул любой жидкости, усредненные величины $\cos \theta$ и $\cos(\alpha - \theta)$ можно найти за счет интегрирования значения угла θ в диапазоне от 0 до π

$$\overline{\cos(\theta)} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(\theta) d\theta = 0; \quad \overline{\cos(\alpha - \theta)} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \cos(\alpha - \theta) d\theta = \frac{2 \sin \alpha}{\pi}.$$

Таким образом, общая совокупность исследуемых процессов выражается

как

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mu_1}{dt^2} + 2\beta \frac{d\mu_1}{dt} + \omega_0^2 \mu_1(t) &= 0; \\ \frac{d^2 \mu_2}{dt^2} + 2\beta \frac{d\mu_2}{dt} + \omega_0^2 \mu_2(t) &= \frac{e^2}{m_H} \cdot \frac{2 \sin \alpha}{\pi} E(t). \end{aligned} \quad (4)$$

В-пятых, выражения (4) могут быть заменены их суммой $2M_1(t) = \mu_1(t) + \mu_2(t)$, дающей исходное описание валентных колебаний молекулы воды, обладающих наименьшей инерционностью по отношению к еще не рассмотренным разновидностям ее поляризационных механизмов следующего вида:

$$\frac{d^2 M_1}{dt^2} + 2\beta_1 \frac{dM_1}{dt} + \omega_{01}^2 M_1(t) = \frac{e^2 \sin \alpha}{m_H \pi} E(t), \quad (5)$$

где ω_{01} и β_1 – собственная частота валентных ионных колебаний молекулы H_2O и коэффициент их затухания; e и m_H – заряд и атомная масса ионизированных частиц водорода; α – молекулярный валентный угол HOH .

Линейная динамическая модель деформационных колебаний

Рассмотрим структурный синтез линейного дифференциального уравнения, описывающего вторую разновидность ионных колебаний молекулы воды.

Во-первых, на основании общей теоретической картины изучаемого явления (рис. 2) составим базовые уравнения ньютоновского баланса сил:

$$\begin{aligned} m_H a_1 &= F_{ЭДС1} \cos(\pi/2 - (\theta - \varphi_1)) - F_{сomp1} - F_{унр1}; \\ m_H a_2 &= F_{ЭДС2} \cos(\pi/2 - (\alpha - \theta - \varphi_2)) - F_{сomp2} - F_{унр2}. \end{aligned} \quad (6)$$

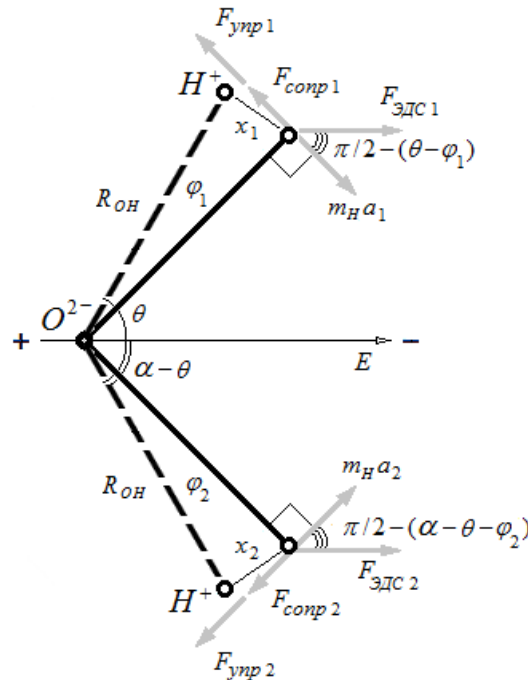


Рис. 2. Статичный баланс ньютоновских сил, действующих в рамках классического описания деформационных колебаний молекулы H_2O .

Во-вторых, принимая во внимание очевидное соотношение

$$\frac{\varphi_i}{x_i} = \frac{2\pi}{2\pi R_{OH}} \Rightarrow x_i = R_{OH} \varphi_i,$$

а также физическую аутентичность молекулярных связей OH , выразим каждую из составляющих базовых уравнений как

$$a_1 = \frac{d^2 x_1}{dt^2} = \frac{d^2 (R_{OH} \varphi_1)}{dt^2} = R_{OH} \frac{d^2 \varphi_1}{dt^2},$$

$$F_{ЭДС1} = eE(t),$$

$$F_{comp1} = \frac{m_H}{\tau} \frac{dx_1}{dt} = \frac{m_H}{\tau} \frac{d(R_{OH} \varphi_1)}{dt} = \frac{m_H R_{OH}}{\tau} \frac{d\varphi_1}{dt},$$

$$F_{yup1} = k_{yup} x_1(t) = k_{yup} R_{OH} \varphi_1(t);$$

$$a_2 = \frac{d^2 x_2}{dt^2} = \frac{d^2 (R_{OH} \varphi_2)}{dt^2} = R_{OH} \frac{d^2 \varphi_2}{dt^2}, \quad F_{ЭДС2} = eE(t),$$

$$F_{comp2} = \frac{m_H}{\tau} \frac{dx_2}{dt} = \frac{m_H}{\tau} \frac{d(R_{OH} \varphi_2)}{dt} = \frac{m_H R_{OH}}{\tau} \frac{d\varphi_2}{dt},$$

$$F_{yup2} = k_{yup} x_2(t) = k_{yup} R_{OH} \varphi_2(t).$$

Кроме того, учитывая физическую ничтожность углов φ_i , используем упрощение $\cos(\pi/2 - (\theta - \varphi_1)) = \sin(\theta - \varphi_1) \approx \sin \theta$;

$$\cos(\pi/2 - (\alpha - \theta - \varphi_2)) = \sin(\alpha - \theta - \varphi_2) \approx \sin(\alpha - \theta).$$

Теперь на базе введенных в рассмотрение соотношений сгенерируем выражения

$$m_H R_{OH} \frac{d^2 \varphi_1}{dt^2} + \frac{m_H R_{OH}}{\tau} \frac{d\varphi_1}{dt} + k_{yup} R_{OH} \varphi_1(t) = eE(t) \sin \theta;$$

$$m_H R_{OH} \frac{d^2 \varphi_2}{dt^2} + \frac{m_H R_{OH}}{\tau} \frac{d\varphi_2}{dt} + k_{yup} R_{OH} \varphi_2(t) = eE(t) \sin(\alpha - \theta),$$

которые, разделив каждый их член на $m_H R_{OH}$, приведем к более компактному виду

$$\frac{d^2 \varphi_1}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d\varphi_1}{dt} + \frac{k_{yup}}{m_H} \varphi_1(t) = \frac{e}{m_H R_{OH}} E(t) \sin \theta;$$

$$\frac{d^2 \varphi_2}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d\varphi_2}{dt} + \frac{k_{yup}}{m_H} \varphi_2(t) = \frac{e}{m_H R_{OH}} E(t) \sin(\alpha - \theta).$$

В свою очередь, принимая во внимание, что

$$\mu_{OH} = eR_{OH}, J_{OH} = m_H R_{OH}^2 \Rightarrow \frac{e}{m_H R_{OH}} = \frac{\mu_{OH}}{R_{OH} m_H R_{OH}} = \frac{\mu_{OH}}{J_{OH}},$$

а также используя параметры затухающих линейных колебаний

$$2\beta = \frac{1}{\tau}, \quad \omega_0^2 = \frac{k_{yup}}{m_H},$$

сформируем линейные уравнения гармонических осцилляторов с трением:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\varphi_1}{dt^2} + 2\beta\frac{d\varphi_1}{dt} + \omega_0^2\varphi_1(t) &= \frac{\mu_{OH}}{J_{OH}} E(t)\sin\theta; \\ \frac{d^2\varphi_2}{dt^2} + 2\beta\frac{d\varphi_2}{dt} + \omega_0^2\varphi_2(t) &= \frac{\mu_{OH}}{J_{OH}} E(t)\sin(\alpha - \theta),\end{aligned}\quad (7)$$

где μ_{OH} и J_{OH} – собственный дипольный момент и момент инерции связи OH .

В-третьих, основываясь на общей картине физического явления (рис. 2), отметим, что деформационные повороты каждой из отдельно взятых валентных связей молекулы воды, происходящие в направлении приложенного электрического поля, оказываются эквивалентными индукции статичных дипольных моментов μ_i , которые, соответственно, равны

$$\begin{aligned}\mu_1 &= \mu_{OH} \cos(\theta - \varphi_1) - \mu_{OH} \cos\theta = \\ &= \mu_{OH} \sin\theta \sin\varphi_1 - 2\mu_{OH} \cos\theta \sin^2(\varphi_1/2); \\ \mu_2 &= \mu_{OH} \cos((\alpha - \theta) - \varphi_2) - \mu_{OH} \cos(\alpha - \theta) = \\ &= \mu_{OH} \sin(\alpha - \theta) \sin\varphi_2 - 2\mu_{OH} \cos(\alpha - \theta) \sin^2(\varphi_2/2).\end{aligned}$$

Кроме того, учитывая незначительность углов φ_i , будем считать, что

$$\varphi_i \approx 0, \quad \Rightarrow \quad \sin^2(\varphi_i/2) \cong 0, \quad \sin\varphi_i \cong \varphi_i.$$

Теперь, принимая во внимание потенциальное обращение в ноль вторых слагаемых представленных выше выражений μ_i , можно получить соотношения

$$\begin{aligned}\mu_1(t) = \mu_{OH}\varphi_1(t)\sin\theta &\quad \Rightarrow \quad \varphi_1(t) = \frac{\mu_1(t)}{\mu_{OH}\sin\theta}; \\ \mu_2(t) = \mu_{OH}\varphi_2(t)\sin(\alpha - \theta) &\quad \Rightarrow \quad \varphi_2(t) = \frac{\mu_2(t)}{\mu_{OH}\sin(\alpha - \theta)}.\end{aligned}$$

Следовательно, линейные осцилляционные уравнения (7) сводятся к виду

$$\begin{aligned}\frac{1}{\mu_{OH}\sin\theta} \frac{d^2\mu_1}{dt^2} + 2\beta \frac{1}{\mu_{OH}\sin\theta} \frac{d\mu_1}{dt} + \omega_0^2 \frac{1}{\mu_{OH}\sin\theta} \mu_1(t) &= \\ &= \frac{\mu_{OH}}{J_{OH}} E(t)\sin\theta; \\ \frac{1}{\mu_{OH}\sin(\alpha - \theta)} \frac{d^2\mu_2}{dt^2} + 2\beta \frac{1}{\mu_{OH}\sin(\alpha - \theta)} \frac{d\mu_2}{dt} + \omega_0^2 \frac{1}{\mu_{OH}\sin(\alpha - \theta)} \mu_2(t) &= \\ &= \frac{\mu_{OH}}{J_{OH}} E(t)\sin(\alpha - \theta),\end{aligned}$$

приводимому к традиционной форме записи поляризационных процессов за счет почленного умножения соответственно на $\mu_{OH}\sin\theta$ или же $\mu_{OH}\sin(\alpha - \theta)$:

$$\begin{aligned}\frac{d^2\mu_1}{dt^2} + 2\beta\frac{d\mu_1}{dt} + \omega_0^2\mu_1(t) &= \frac{\mu_{OH}^2}{J_{OH}} E(t)\sin^2\theta; \\ \frac{d^2\mu_2}{dt^2} + 2\beta\frac{d\mu_2}{dt} + \omega_0^2\mu_2(t) &= \frac{\mu_{OH}^2}{J_{OH}} E(t)\sin^2(\alpha - \theta).\end{aligned}\quad (8)$$

В-четвертых, учитывая броуновскую хаотичность пространственной ориентации молекул любой жидкости, усредненные величины $\sin^2\theta$ и $\sin^2(\alpha-\theta)$ могут быть найдены путем интегрирования значения угла θ в диапазоне от 0 до π

$$\overline{\sin^2(\theta)} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \sin^2(\theta) d\theta = \frac{1}{2}; \quad \overline{\sin^2(\alpha-\theta)} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \sin^2(\alpha-\theta) d\theta = \frac{1}{2}.$$

Таким образом, общая совокупность разбираемых процессов выражается как

$$\begin{aligned} \frac{d^2 \mu_1}{dt^2} + 2\beta \frac{d\mu_1}{dt} + \omega_0^2 \mu_1(t) &= \frac{\mu_{OH}^2}{2J_{OH}} E(t); \\ \frac{d^2 \mu_2}{dt^2} + 2\beta \frac{d\mu_2}{dt} + \omega_0^2 \mu_2(t) &= \frac{\mu_{OH}^2}{2J_{OH}} E(t). \end{aligned} \quad (9)$$

В-пятых, выражения (9) могут быть заменены их суммой $2M_2(t) = \mu_1(t) + \mu_2(t)$, дающей исходное описание деформационных колебаний молекулы воды, обладающих большей инерционностью по отношению к уже рассмотренным разновидностям поляризационных механизмов:

$$\frac{d^2 M_2}{dt^2} + 2\beta_2 \frac{dM_2}{dt} + \omega_{02}^2 M_2(t) = \frac{\mu_{OH}^2}{2J_{OH}} E(t),$$

которое, принимая во внимание, что $2\mu_{OH} \cos(\alpha/2) = \mu_0$, а также учитывая типовую формулу расчета инерциального момента J_{OH} , может быть представлено в виде:

$$\frac{d^2 M_2}{dt^2} + 2\beta_2 \frac{dM_2}{dt} + \omega_{02}^2 M_2(t) = \frac{\mu_0^2}{8m_H \cos^2(\alpha/2) R_{OH}^2} E(t), \quad (10)$$

где ω_{02} и β_2 – динамические параметры деформационных колебаний H_2O ; μ_0 – собственный дипольный момент H_2O ; R_{OH} – длина валентной связи OH .

Линейная динамическая модель дипольных колебаний

Упругая дипольная поляризация воды обычно связывается с либрационными (ориентационными) и трансляционными колебаниями ее отдельных молекул. Изначально все направления исходной ориентации молекул полярной жидкости равновероятны, т.е. статическая дипольная поляризация воды равна нулю. В свою очередь действие внешнего электрического поля инициирует преимущественную ориентацию молекулярных диполей в направлении возникающих силовых линий. При этом общее время установления рассматриваемых процессов составляет порядка 10^{-13} секунд, следовательно, вытекающая дисперсия диэлектрической проницаемости проявляется в среднем инфракрасном диапазоне.

Отметим, что в работе [5] была показана принципиальная возможность игнорирования традиционной трактовки трансляционных колебаний, которые оказываются эквивалентом деформаций валентных связей, уже учитываемых в рамках описания механизмов упругой ионной поляризации.

Рассмотрим структурный синтез линейного дифференциального уравнения дипольных колебаний молекулы воды.

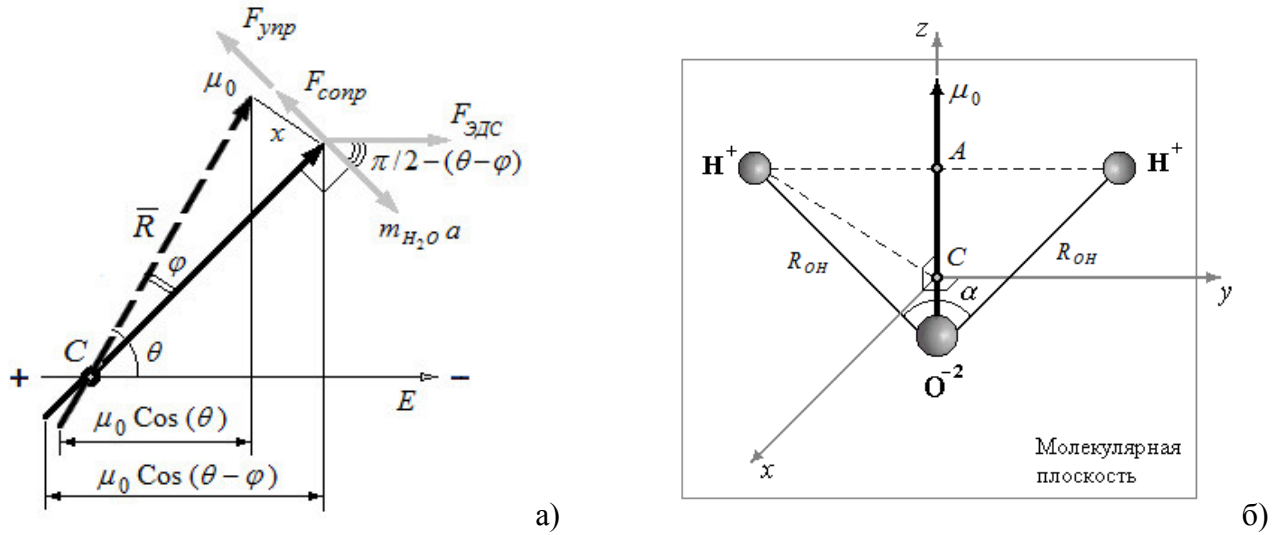


Рис. 3. Физические схемы, используемые для синтеза текущей модели:
а) – статичный баланс теоретически действующих ньютоновских сил;
б) – общая схема молекулы воды и направления ее молекулярных осей.

Во-первых, на основании общей теоретической картины изучаемого явления (рис. 3, а), составим базовое уравнение ньютоновского баланса сил:

$$m_{H_2O}a = F_{ЭДС} \cos(\pi/2 - (\theta - \varphi)) - F_{собр} - F_{унр}. \quad (11)$$

Во-вторых, принимая во внимание соотношение

$$\frac{\varphi}{x} = \frac{2\pi}{2\pi R} \Rightarrow x = \varphi \bar{R},$$

выразим каждую из составляющих данного уравнения как

$$a = \frac{d^2x}{dt^2} = \frac{d^2(\varphi \bar{R})}{dt^2} = 2\bar{R} \frac{d^2\varphi}{dt^2};$$

$$F_{ЭДС} = 2eE(t);$$

$$F_{собр} = \frac{m_{H_2O}}{\tau} \frac{dx}{dt} = \frac{m_{H_2O}}{\tau} \frac{d(\varphi \bar{R})}{dt} = \frac{m_{H_2O} \bar{R}}{\tau} \frac{d\varphi}{dt}; \quad F_{унр} = k_{унр}x(t) = k_{унр} \bar{R}\varphi(t).$$

Кроме того, учитывая физическую ничтожность угла φ , используем упрощение $\cos(\pi/2 - (\theta - \varphi)) = \sin(\theta - \varphi) \approx \sin \theta$.

Теперь на базе введенных в рассмотрение соотношений сгенерируем выражение

$$m_{H_2O} \bar{R} \frac{d^2\varphi}{dt^2} + \frac{m_{H_2O} \bar{R}}{\tau} \frac{d\varphi}{dt} + k_{унр} \bar{R}\varphi(t) = 2eE(t) \sin \theta,$$

которое (разделив каждый их член на $m_{H_2O} \bar{R}$) приведем к компактному виду

$$\frac{d^2\varphi}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d\varphi}{dt} + \frac{k_{унр}}{m_{H_2O}} \varphi(t) = \frac{2e}{m_{H_2O} \bar{R}} E(t) \sin \theta.$$

В свою очередь, принимая во внимание, что

$$\mu_0 = 2e\bar{R}, \quad \bar{J} = m_{H_2O} \bar{R}^2 \Rightarrow \frac{2e}{m_{H_2O} \bar{R}} = \frac{\mu_0}{\bar{R}m_{H_2O} \bar{R}} = \frac{\mu_0}{\bar{J}},$$

а также используя общепринятые параметры затухающих линейных колебаний

$$2\beta = \frac{1}{\tau}, \quad \omega_0^2 = \frac{k_{\text{упр}}}{m_{H_2O}},$$

сформируем угловое уравнение гармонического осциллятора с трением:

$$\frac{d^2\varphi}{dt^2} + 2\beta \frac{d\varphi}{dt} + \omega_0^2 \varphi(t) = \frac{\mu_0}{J} E(t) \sin \theta. \quad (12)$$

В-третьих, основываясь на общей картине физического явления (рис. 3, а), отметим, что поворот молекулы воды в направлении приложенного поля оказывается эквивалентным индукции статического дипольного момента μ , равного

$$\begin{aligned} \mu &= \mu_0 \cos(\theta - \varphi) - \mu_0 \cos \theta = \\ &= \mu_0 (\cos \theta \cos \varphi + \sin \theta \sin \varphi) - \mu_0 \cos \theta = \\ &= \mu_0 \cos \theta (\cos \varphi - 1) + \mu_0 \sin \theta \sin \varphi = \\ &= \mu_0 \sin \theta \sin \varphi - 2\mu_0 \cos \theta \sin^2(\varphi/2). \end{aligned}$$

Учитывая чрезвычайно малую величину деформационного угла φ , будем считать

$$\varphi \approx 0,$$

$$\sin^2(\varphi/2) \cong 0,$$

$$\sin \varphi \cong \varphi.$$

Теперь, принимая во внимание потенциальное обращение в ноль второго слагаемого представленного выше выражения μ , можно получить соотношение

$$\mu(t) = \mu_0 \varphi(t) \sin \theta \Rightarrow \varphi(t) = \frac{\mu(t)}{\mu_0 \sin \theta}.$$

Следовательно, угловые осцилляционные уравнения (12) сводятся к виду

$$\frac{1}{\mu_0 \sin \theta} \frac{d^2\mu}{dt^2} + 2\beta \frac{1}{\mu_0 \sin \theta} \frac{d\mu}{dt} + \omega_0^2 \frac{1}{\mu_0 \sin \theta} \mu(t) = \frac{\mu_0}{J} E(t) \sin \theta,$$

приводимому к традиционной форме записи поляризационных процессов за счет почленного умножения на величину $\mu_0 \sin \theta$:

$$\frac{d^2\mu}{dt^2} + 2\beta \frac{d\mu}{dt} + \omega_0^2 \mu(t) = \frac{\mu_0^2}{J} E(t) \sin^2 \theta, \quad (13)$$

где \bar{J} – момент инерции молекулы H_2O , определяемый разновидностью молекулярной оси, относительно которой происходит вращение.

В-четвертых, учитывая броуновскую хаотичность пространственной ориентации молекул любой жидкости, усредненные величины $\sin^2 \theta$ могут быть найдены за счет интегрирования значения угла θ в диапазоне от 0 до π

$$\overline{\sin^2 \theta} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \sin^2 \theta d\theta = \frac{1}{2}.$$

Таким образом, общую совокупность исследуемых процессов будем выражать следующим образом:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 \mu_x}{dt^2} + 2\beta_x \frac{d\mu_x}{dt} + \omega_{0x}^2 \mu_x(t) &= \frac{\mu_0^2}{2J_x} E(t); \\
\frac{d^2 \mu_y}{dt^2} + 2\beta_y \frac{d\mu_y}{dt} + \omega_{0y}^2 \mu_y(t) &= \frac{\mu_0^2}{2J_y} E(t); \\
\frac{d^2 \mu_z}{dt^2} + 2\beta_z \frac{d\mu_z}{dt} + \omega_{0z}^2 \mu_z(t) &= \frac{\mu_0^2}{2J_z} E(t),
\end{aligned} \tag{14}$$

где μ_x , μ_y и μ_z – наведенные дипольные моменты, определяемые соответствующими осями вращения молекулы H_2O .

В свою очередь, для описания месторасположений центров каждого из трех видов осевых вращений, совпадающих с центром масс C исследуемой системы (рис. 3, б), можно составить уравнение равновесия, на основании которого расстояния между центром масс H_2O и ее атомными ядрами находятся как

$$\begin{aligned}
m_O |CO| = 2m_H (|AO| - |CO|) \quad \Rightarrow \quad |CO| &= \frac{2m_H |AO|}{2m_H + m_O} \\
|CH| &= \sqrt{(|AO| - |CO|)^2 + |AH|^2}
\end{aligned}$$

Следовательно, расчет осевых моментов инерции H_2O может быть выполнен с помощью формул, учитывая, что $|AO| = R_{OH} \cos(\alpha/2)$ и $|AH| = R_{OH} \sin(\alpha/2)$:

$$\begin{aligned}
J_x &= 2m_H |CH|^2 + m_O |CO|^2 = 2,93839 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2; \\
J_y &= 2m_H (|AO| - |CO|)^2 + m_O |CO|^2 = 1,02037 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}^2; \\
J_z &= 2m_H |AH|^2 = 2m_H R_{OH}^2 \sin^2(\alpha/2) = 1,91803 \cdot 10^{-47} \text{ кг} \cdot \text{м}
\end{aligned}$$

где m_H и m_O – атомные массы водорода и кислорода.

В-пятых, будем принимать во внимание то, что вращение молекул относительно оси z не вызывает индукции каких-либо электрических моментов (рис. 3, б), а также учитывать разницу инерционных моментов J_x и J_y .

Таким образом, исходное описание рассматриваемых процессов межмолекулярной поляризации, обладающих большей инерционностью по отношению к рассмотренным разновидностям поляризационных механизмов, может быть представлено как:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 M_3}{dt^2} + 2\beta_3 \frac{dM_3}{dt} + \omega_{03}^2 M_3(t) &= \frac{\mu_0^2}{2J_y} E(t); \\
\frac{d^2 M_4}{dt^2} + 2\beta_4 \frac{dM_4}{dt} + \omega_{04}^2 M_4(t) &= \frac{\mu_0^2}{2J_x} E(t),
\end{aligned} \tag{15}$$

где ω_{03} и β_3 – собственная частота дипольных колебаний молекулы H_2O относительно ее молекулярной оси y и коэффициент их затухания; ω_{04} и β_4 – собственная частота дипольных колебаний молекулы H_2O относительно молекулярной оси x и коэффициент их затухания.

Линейная динамическая модель релаксационных колебаний

Релаксационная поляризация воды характеризуется вынужденными электромагнитными колебаниями многомолекулярных образований типа $(H_2O)_n$, которые могут иметь как замкнутую кластерную, так и разомкнутую конгломератную структуру [6], при этом их общие механизмы обусловлены переориентацией суммарных дипольных моментов конкретных молекулярных ассоциатов.

В свою очередь результаты работ [7, 8] указывают, что вытекающая дисперсия диэлектрической проницаемости обыкновенной воды, имеющая место в микроволновом диапазоне частот, может быть целиком и полностью связана с релаксационной поляризацией ее пятимолекулярных конгломератов.

Рассмотрим структурный синтез линейного дифференциального уравнения релаксационных колебаний воды.

Во-первых, на основании общей теоретической картины изучаемого явления (рис. 4а), составим базовое уравнение ньютоновского баланса сил:

$$m_{\Sigma} a = F_{\text{ЭДС}} \cos(\pi/2 - (\theta - \varphi)) - F_{\text{conp}} - F_{\text{ynp}}. \quad (16)$$

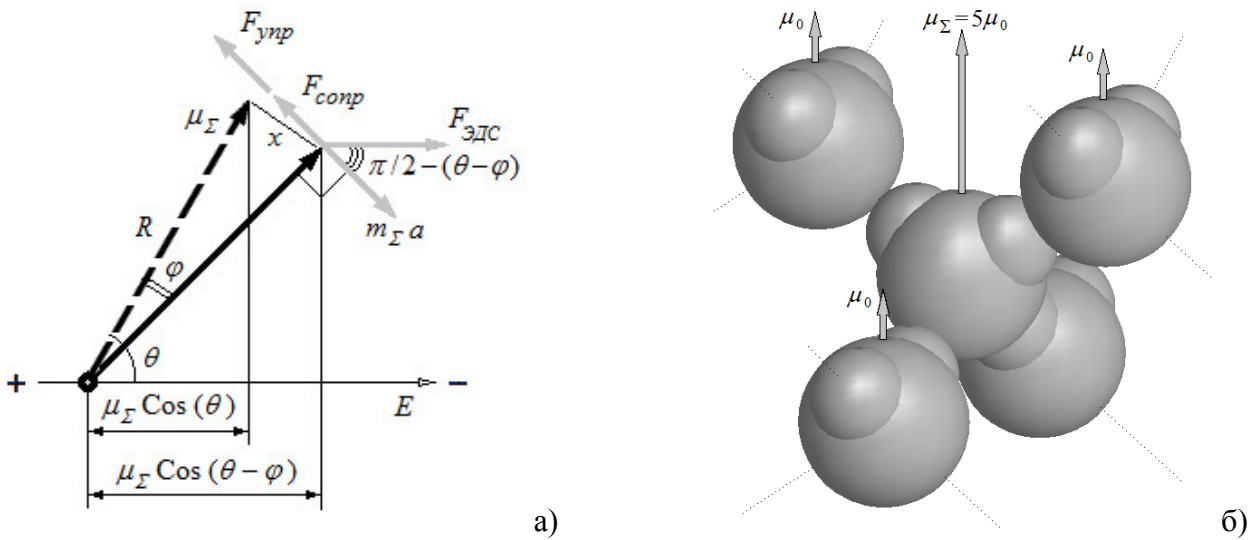


Рис. 4. Физические схемы, используемые для синтеза текущей модели:
а) – статичный баланс теоретически действующих ньютоновских сил;
б) – трехмерная визуализация пятимолекулярного конгломерата воды.

Во-вторых, принимая во внимание соотношение

$$\frac{\varphi}{x} = \frac{2\pi}{2\pi R} \Rightarrow x = R\varphi,$$

выразим каждую из составляющих данного уравнения как

$$a = \frac{d^2 x}{dt^2} = \frac{d^2 (R\varphi)}{dt^2} = R \frac{d^2 \varphi}{dt^2}; \quad F_{\text{ЭДС}} = Q_{\Sigma} E(t);$$

$$F_{\text{conp}} = \frac{m_{\Sigma}}{\tau} \frac{dx}{dt} = \frac{m_{\Sigma}}{\tau} \frac{d(R\varphi)}{dt} = \frac{m_{\Sigma} R}{\tau} \frac{d\varphi}{dt}; \quad F_{\text{ynp}} = k_{\text{ynp}} x(t) = k_{\text{ynp}} R\varphi(t).$$

Кроме того, учитывая физическую ничтожность угла φ , используем упрощение

$$\cos(\pi/2 - (\theta - \varphi)) = \sin(\theta - \varphi) \approx \sin \theta.$$

Теперь, на базе введенных в рассмотрение соотношений сгенерируем выражение

$$m_{\Sigma} R \frac{d^2 \varphi}{dt^2} + \frac{m_{\Sigma} R}{\tau} \frac{d\varphi}{dt} + k_{yup} R \varphi(t) = Q_{\Sigma} E(t) \sin \theta,$$

которое, разделив каждый их член на $m_{\Sigma} R$, приведем к более компактному виду

$$\frac{d^2 \varphi}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d\varphi}{dt} + \frac{k_{yup}}{m_{\Sigma}} \varphi(t) = \frac{Q_{\Sigma}}{m_{\Sigma} R} E(t) \sin \theta.$$

В свою очередь, принимая во внимание, что

$$\mu_{\Sigma} = Q_{\Sigma} R, \quad J_{\Sigma} = m_{\Sigma} R^2 \Rightarrow \frac{Q_{\Sigma}}{m_{\Sigma} R} = \frac{\mu_{\Sigma}}{R m_{\Sigma} R} = \frac{\mu_{\Sigma}}{J_{\Sigma}},$$

а также используя общепринятые параметры затухающих линейных колебаний

$$2\beta = \frac{1}{\tau}, \quad \omega_0^2 = \frac{k_{yup}}{m_{\Sigma}},$$

сформируем угловое уравнение гармонического осциллятора с трением:

$$\frac{d^2 \varphi}{dt^2} + 2\beta \frac{d\varphi}{dt} + \omega_0^2 \varphi(t) = \frac{\mu_{\Sigma}}{J_{\Sigma}} E(t) \sin \theta. \quad (17)$$

В-третьих, основываясь на общей картине физического явления (рис. 4а), отметим, что поворот исследуемого молекулярного ассоциата воды в направлении приложенного поля оказывается эквивалентным индукции статического дипольного момента μ , равного

$$\begin{aligned} \mu &= \mu_{\Sigma} \cos(\theta - \varphi) - \mu_{\Sigma} \cos \theta = \\ &= \mu_{\Sigma} (\cos \theta \cos \varphi + \sin \theta \sin \varphi) - \mu_{\Sigma} \cos \theta = \\ &= \mu_{\Sigma} \cos \theta (\cos \varphi - 1) + \mu_{\Sigma} \sin \theta \sin \varphi = \\ &= \mu_{\Sigma} \sin \theta \sin \varphi - 2\mu_{\Sigma} \cos \theta \sin^2(\varphi/2). \end{aligned}$$

Учитывая чрезвычайно малую величину деформационного угла φ , будем считать

$$\varphi \approx 0,$$

$$\sin^2(\varphi/2) \cong 0,$$

$$\sin \varphi \cong \varphi.$$

Теперь, принимая во внимание потенциальное обращение в ноль второго слагаемого представленного выше выражения μ , можно получить соотношение

$$\mu(t) = \mu_{\Sigma} \varphi(t) \sin \theta \Rightarrow \varphi(t) = \frac{\mu(t)}{\mu_{\Sigma} \sin \theta}.$$

Следовательно, угловое осцилляционное уравнение (17) сводится к виду

$$\frac{1}{\mu_{\Sigma} \sin \theta} \frac{d^2 \mu}{dt^2} + 2\beta \frac{1}{\mu_{\Sigma} \sin \theta} \frac{d\mu}{dt} + \omega_0^2 \frac{1}{\mu_{\Sigma} \sin \theta} \mu(t) = \frac{\mu_{\Sigma}}{J_{\Sigma}} E(t) \sin \theta,$$

приводимому к традиционной форме записи поляризационных процессов за счет

почленного умножения на величину $\mu_{\Sigma} \sin \theta$:

$$\frac{d^2 \mu}{dt^2} + 2\beta \frac{d\mu}{dt} + \omega_0^2 \mu(t) = \frac{\mu_{\Sigma}^2}{J_{\Sigma}} E(t) \sin^2 \theta. \quad (18)$$

В-четвертых, учитывая броуновскую хаотичность пространственной ориентации молекулярных ассоциатов $(H_2O)_n$, усредненную величину $\sin^2 \theta$ можно найти за счет интегрирования значений углов θ в диапазоне от 0 до π

$$\overline{\sin^2 \theta} = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \sin^2 \theta d\theta = \frac{1}{2}.$$

Таким образом, принимая во внимание общую структуру пятимолекулярного конгломерата воды (рис. 4б), т.е. учитывая очевидное соотношение $\mu_{\Sigma} = 5\mu_0$, описание анализируемого процесса может быть представлено как:

$$\frac{d^2 \mu_7}{dt^2} + 2\beta \frac{d\mu}{dt} + \omega_0^2 \mu(t) = \frac{25\mu_0^2}{2J_{\Sigma}} E(t), \quad (19)$$

где μ_0 – собственный дипольный момент молекулы H_2O ; J_{Σ} – суммарный моменты инерции ее пятимолекулярного конгломерата.

Поскольку единственная ось вращения исследуемого молекулярного ассоциата совпадает с его геометрическим центром, то с помощью хорошо известной формулы расчета момента инерции тетраэдрического волчка можно определить величину J_{Σ} , равной:

$$J_{\Sigma} = \frac{8}{3} m R^2 = \frac{8}{3} m_{H_2O} R_{OH-O}^2,$$

где m_{H_2O} – молекулярная масса воды; R_{OH-O} – линейная величина кислородно-водородной связи.

В-пятых, принимая во внимание, что общее количество пятимолекулярных конгломератов воды составляет 1/5 часть от значения концентрации ее молекул в некотором объеме, исходное описание последнего из всей совокупности разбираемых поляризационных механизмов, можно представить уравнением

$$\frac{d^2 M_5}{dt^2} + 2\beta_5 \frac{dM_5}{dt} + \omega_{05}^2 M_5(t) = \frac{25\mu_0^2}{2J_{\Sigma}} E(t),$$

которое, учитывая указанную выше формулировку суммарного момента инерции J_{Σ} , может быть представлено в виде:

$$\frac{d^2 M_5}{dt^2} + 2\beta_5 \frac{dM_5}{dt} + \omega_{05}^2 M_5(t) = \frac{15\mu_0^2}{16m_{H_2O} R_{OH-O}^2} E(t), \quad (20)$$

где ω_{05} и β_5 – собственная частота релаксационных колебаний молекулярных ассоциатов $(H_2O)_5$ и коэффициент их затухания.

Заключение

Объединив всю совокупность линейных динамических моделей (5), (10), (15) и (20) в рамках кибернетической трактовки взаимодействия внешнего и эффективного электрических полей, можно сгенерировать исходное описание ре-

зультулирующей поляризации некоторого объема воды следующего вида:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 M_1}{dt^2} + 2\beta_1 \frac{dM_1}{dt} + \omega_{01}^2 M_1(t) &= \frac{e^2 \sin \alpha}{m_H \pi} E(t); \\ \frac{d^2 M_2}{dt^2} + 2\beta_2 \frac{dM_2}{dt} + \omega_{02}^2 M_2(t) &= \frac{\mu_0^2}{8m_H \cos^2(\alpha/2) R_{OH}^2} E(t); \\ \frac{d^2 M_3}{dt^2} + 2\beta_3 \frac{dM_3}{dt} + \omega_{03}^2 M_3(t) &= \frac{\mu_0^2}{2J_y} E(t); \\ \frac{d^2 M_4}{dt^2} + 2\beta_4 \frac{dM_4}{dt} + \omega_{04}^2 M_4(t) &= \frac{\mu_0^2}{2J_x} E(t); \\ \frac{d^2 M_5}{dt^2} + 2\beta_5 \frac{dM_5}{dt} + \omega_{05}^2 M_5(t) &= \frac{15\mu_0^2}{16m_{H_2O} R_{OH-O}^2} E(t); \\ E(t) &= E_0(t) \left(\chi_\infty E(t) - \frac{2}{3\varepsilon_0} N \sum_{i=1}^5 M_i(t) \right), \end{aligned}$$

где $E_0(t)$ и $E(s)$ – функции напряженности внешнего и эффективного полей; χ_∞ – диэлектрическая восприимчивость воды, обусловленная ее электронной поляризацией; ε_0 – электрическая постоянная; N – объемная концентрация молекул H_2O .

ЛИТЕРАТУРА

1. Юхневич Г.В. Инфракрасная спектроскопия воды. – М.: Наука, 1973.
2. Эйзенберг Д., Кауцман В. Структура и свойства воды. – Л.: Гидрометеиздат, 1975.
3. Зацепина Г.Н. Физические свойства и структура воды. – М.: МГУ, 1987.
4. Сканави Г.И. Физика диэлектриков. Область слабых полей. – М.; Л.: Техтеориздат, 1949.
5. Еремина В.В., Костюков Н.С., Тюрина С.Ю. Модификация математической модели ионной поляризации молекулы воды // Информатика и системы управления. – 2006. – № 1(11). – С. 42-52.
6. Габуда С.П. Связанная вода. Факты и гипотезы. – Новосибирск: Наука, 1982.
7. Еремина В.В., Уляхина Д.А. Имитационное моделирование электронного строения трехмерных многомoleкулярных кластеров воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 3(25). – С. 57-60.
8. Еремина В.В., Уляхина Д.А. Имитационное моделирование структуры пятимoleкулярных конгломератов воды // Информатика и системы управления. – 2010. – № 4(26). – С. 43-49.

E-mail:

Еремин И.Е. – marinecops@mail.ru;

Еремина Виктория Владимировна – banysheva@mail.ru;

Онищенко Е.Ю. – ekaterina.rizen@yandex.ru.