

АВТОКОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ФУНКЦИИ ПОСТУПАТЕЛЬНЫХ И ВРАЩАТЕЛЬНЫХ СКОРОСТЕЙ МОЛЕКУЛ ВОДЫ И ИХ СПЕКТРЫ

Волошин В.П.

Институт химической кинетики и горения СО РАН, г. Новосибирск

Каждая молекула жидкости участвует одновременно во многих движениях: в поступательных и вращательных, в индивидуальных относительно её ближайшего окружения и в коллективных вместе с окружениями разного масштаба. И все эти движения отображаются на автокорреляционной функции скоростей молекул жидкости, которую достаточно просто рассчитать в ходе молекулярно-динамического моделирования. Впрочем, разглядеть каждое из движений непосредственно из автокоррелятора очень трудно. Для более точного анализа мы использовали косинус-преобразование Фурье автокорреляционных функций. В спектре поступательного движения центров масс молекул мы обнаружили два чётко различимых максимума, Нам удалось показать, что максимум с более высокой частотой (210 см^{-1}) формируется индивидуальными колебаниями молекул воды относительно их локального окружения, тогда как низкочастотный максимум (40 см^{-1}) отражает её участие в коллективных колебаниях окружений разного масштаба.

В спектре вращательного движения мы обнаружили широкий максимум с более высокими частотами (от 400 до 900 см^{-1}). Как оказалось, он формируется вращательными колебаниями молекул с разным количеством и силой водородных связей – большое количество сильных связей формирует высокочастотный край максимума, а отсутствие связей или их слабость низкочастотный край. В добавок к этому вращательный спектр включает в себя также крайне ослабленные максимумы поступательного спектра. Это свидетельствует о существовании корреляции поступательного и вращательного движений молекул воды.