

Объем вытекшей жидкости в безразмерной форме

$$\bar{V} = -\bar{t} + \int_0^{\bar{L}} \bar{s} d\bar{x}, \quad \bar{V} = \frac{V}{sl}.$$

При $u > 0$ вытеснение жидкости ограничено по величине и времени. Как показывают расчеты $\bar{V}_m \approx 0.3$, $\bar{t}_m \approx 3$. В реальном масштабе:

$$V_m = sl\bar{V}_m \approx 0.3 \frac{(\rho_2 - \rho_1)gDs^2}{\mu_1 u}.$$

Таким образом, предложена модель принудительного истечения вязкой жидкости из трубы в затопленное пространство. Получена аппроксимация силы трения. Определен объем вытекшей жидкости при втягивающем потоке.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kranenburg, C. Exchange flow of oil and sea-water in a ruptured submarine pipeline // Applied Ocean Research. 1984. Vol. 6, No. 1. P. 23-30.
2. Kranenburg, C., Vegt, E. Leakage from ruptured submarine oil pipeline // Journal of Transportation Engineering. 1985. Vol. 111, No. 5. P. 570-579.
3. Кутушев А. В., Татосов А. В. Свободное истечение вязкой жидкости из трубы в затопленное пространство // Вестник ТюмГУ. 2004. № 4. С. 84-89.

*Елена Ивановна ЛОБОДЕНКО —
доцент кафедры строительной механики
Тюменского государственного
архитектурно-строительного университета*

УДК 539.194

ОПЕРАТОР ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА ЛИНЕЙНЫХ МОЛЕКУЛ ТИПА XY_2 СИММЕТРИИ $D_{\infty h}$ С УЧЕТОМ ИЗОТОПИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА

АННОТАЦИЯ. Рассмотрено влияние эффекта изотопического замещения атомов с учетом отклонения от приближения Борна-Оппенгеймера на дипольный момент линейных молекул типа XY_2 симметрии $D_{\infty h}$.

The effect of isotope substitution with Born-Oppenheimer-breakdown corrections on the dipole moment operator of XY_2 -type molecule $D_{\infty h}$ is considered.

Введение

Обычно изотопический эффект в молекулах рассматривается на основе приближения Борна-Оппенгеймера (Б-О) [1]. Ряд молекулярных величин, например, таких, как равновесная конфигурация, дипольный момент молекулы, внутримолекулярная потенциальная функция и т. д., в этом приближении зависит только от свойств электронной оболочки и не зависит от масс атомов. Данный подход подробно освещен в работах [2-10] для колебательных и вращательных спектров молекул.

Использование лазерной техники и регистрирующих спектрометров нового типа привело к увеличению точности экспериментальных данных о центрах и интенсивностях спектральных линий различных молекул, что в свою очередь требует улучшения теоретических моделей, описывающих эти величины. Поэтому стали появляться работы, в которых рассматриваются модели, учитывающие отклонения от приближения Б-О [11, 12]. Настоящая работа является продолжением [12], и посвящена изучению оператора дипольного момента молекул XU_2 -типа симметрии $D_{\infty h}$ при различном замещении атомов.

1. Общие соотношения

Чем легче молекула, тем более сильный эффект, связанный с замещением ядер, наблюдается в молекулярных спектрах. Например, замещение водорода на дейтерий или тритий может приводить к смещению колебательных частот в спектрах молекулы до сотни обратных сантиметров. Замещение более тяжелых атомов, таких как бор, углерод, азот и т.п., вызывает «умеренный» изотопический эффект. Смещения линий и полос при этом в основном ограничиваются десятками обратных сантиметров. Изотопическое замещение очень тяжелых атомов (например, Os, Ge, U) мало изменяет спектр, что приводит к определенным трудностям при изучении спектров смесей различных изотопных модификаций подобных молекул [3].

Изотопическое замещение тяжелых атомов в молекуле характеризуется относительно небольшим изменением их массы и может учитываться как некоторый малый параметр. Пользуясь теорией возмущения, найдем связь между операторами дипольного момента изотопа и основной молекулы, учитывая предложенную в [10] методику. Использована схема координатных преобразований и соответствующих ей преобразований гамильтониана и дипольного момента молекулы, сущность которых заключается в следующем. Гамильтониан h изотопной модификации молекулы представим в виде

$$h = H^{осн} + \Delta h, \quad (1)$$

здесь $H^{осн}$ — гамильтониан основной изотопической модификации молекулы, а Δh — добавка, вызванная изотопическим замещением атомов.

Порядок отдельных слагаемых в разложении оператора Δh будем описывать двумя параметрами: массовым $\epsilon = \max |\epsilon_N|$ и Б-О $\kappa = \sqrt{\frac{m_e}{M}}$, где

$$\epsilon_N = \frac{m'_N - m_N}{m'_N}, \quad m'_N \text{ и } m_N \text{ — массы } N\text{-го атома изотопа и основной молекулы, } m_e \text{ — масса электрона, } M \text{ — величина порядка средней массы ядер.}$$

Очевидно, что величины $H^{осн}$ и Δh являются функциями параметров основной молекулы.

В самом общем виде поправку Δh можно записать как некоторую сумму из произведений безразмерных операторов координат q_λ , импульсов p_λ и компонент полного углового момента J_α :

$$\Delta h = \sum_{\alpha\beta\lambda\mu\nu\tau} h_{\lambda\mu}^{\alpha\beta\dots\nu\tau\dots} q_\lambda q_\mu \dots p_\nu p_\tau \dots J_\alpha J_\beta \dots \quad (2)$$

Явный операторный вид этих слагаемых определяется либо исходя из требований симметрии, либо разложениями Δh в ряды по степеням нормальных координат.

Как уже отмечалось, отклонение от приближения Б-О будем учитывать с помощью теории возмущения [10], записывая гамильтонианы изотопа и основной молекулы в виде

$$H(X, Y) = H_0^{B-O}(X) + \Delta H^{B-O}(X, Y), \quad (3)$$

где X и Y — два набора переменных, и второе слагаемое рассматривается как малое возмущение первого. Здесь $H_0^{B-O}(X)$ — гамильтониан молекулы, который обычно находится по теории возмущения с параметром малости Б-О. Гамильтониан (3) отличается от обычно используемого гамильтониана, но описывает ту же самую физическую систему, что позволяет решать задачу на собственные значения, определять уровни энергии, частоты переходов и интенсивностей изотопной молекулы, выражая их только через параметры основной молекулы.

Оператор дипольного момента изотопа μ' также представим в виде дипольного момента основной молекулы $\mu^{осн}$ и небольшой добавки $\Delta\mu$, вызванной замещением атомов

$$\mu' = \mu^{осн} + \Delta\mu. \quad (4)$$

Компоненты оператора дипольного момента молекулы обычно записывают в виде ряда по нормальным колебаниям

$$\mu_\alpha = \sum_\beta K_{\alpha\beta} \left\{ \mu_\beta^0 + \sum_\lambda \mu_\beta^\lambda Q_\lambda + \sum_{\lambda\nu} \mu_\beta^{\lambda\nu} Q_\lambda Q_\nu + \dots \right\}.$$

Явный вид $\Delta\mu$ находится также исходя из требований симметрии либо разложением в ряды. В [10] показано, что отличие постоянного дипольного момента изотопа и основной молекулы вызывается только изменением ориентации координатной системы, фиксированной в молекуле:

$$\mu'_\alpha{}^0 = \sum_\beta N_{\beta\alpha}^0 \mu_{\beta}^{осн}{}^0,$$

здесь $N_{\beta\alpha}^0$ — матрица, соответствующая повороту координатной системы основной молекулы к координатной системе изотопа — матрица направляющих косинусов. Нами показано, что та же причина дает основной вклад в отличие первых, вторых и более высокого порядка производных дипольного момента

$$\mu'_\alpha{}^\lambda = \sum_\beta N_{\beta\alpha}^0 \sum_\nu \mu_{\beta}^{осн}{}^\nu \alpha_{\lambda\nu},$$

$$\mu'_\alpha{}^{\lambda\nu} = \sum_\beta N_{\beta\alpha}^0 \sum_{\gamma \leq \kappa} \mu_{\beta}^{осн}{}^{\gamma\kappa} (\alpha_{\gamma\lambda} \alpha_{\kappa\nu} + \alpha_{\gamma\nu} \alpha_{\kappa\lambda}),$$

.....

$$\mu_{\alpha}^{\lambda\nu\dots\chi\delta} = \sum_{\beta} H_{\beta\alpha}^0 \sum_{\gamma \leq \kappa \leq \varphi \leq \phi} \mu_{\beta}^{осн\gamma\kappa\dots\varphi\phi} \times \\ \times (\alpha_{\gamma\lambda} \alpha_{\kappa\nu} \dots \alpha_{\varphi\chi} \alpha_{\phi\delta} + \alpha_{\gamma\delta} \alpha_{\kappa\chi} \dots \alpha_{\varphi\nu} \alpha_{\phi\lambda}). \quad (5)$$

Здесь $\alpha_{\lambda\nu}$ — параметры преобразования нормальных координат, зависящие от масс атомов:

$$Q_{\lambda} = \sum_{\nu} \alpha_{\lambda\nu} Q'_{\nu} + \sum_{\nu\kappa} \alpha_{\nu\kappa}^{\lambda} Q'_{\nu} Q'_{\kappa} + \dots$$

Следуя схеме, предложенной в работах [10, 12], изотопические сдвиги молекулярных и спектроскопических постоянных будем определять, используя двухступенчатую схему преобразования гамильтониана (1). Сначала проводится серия малых унитарных преобразований, приводящих оператор $H^{осн}$ к блочно-диагональному виду, т.е. эффективному вращательному гамильтониану. Затем с помощью разложения в ряды по параметру ε в преобразованном гамильтониане учитывается наличие добавки, связанной с изотопическим замещением атомов.

Данная схема весьма сложна и трудоемка, т.к. требует проведения двух контактных преобразований. Она упрощается, если использовать «глобальный» подход в методе эффективных гамильтонианов, где вид эффективного гамильтониана и спектроскопические постоянные определяются исходя из соображений симметрии, т.е. без проведения контактных преобразований в явном виде [13-15]. Параметры гамильтониана — высокие центробежные поправки, резонансные члены и т.п., при этом определяются подгонкой к измеренным значениям центров линий.

Для получения аналогичных формул, представляющих изотопические сдвиги колебательно-вращательных (КВ) линий, более удобно использовать общую схему теории возмущения Рэля-Шредингера, представляя волновые функции изотопной молекулы и ее энергетические уровни в виде

$$\Psi'_n = \Psi_n + \sum_m \frac{\langle \Psi_n | \Delta h | \Psi_m \rangle}{E_n - E_m} \Psi_m + \dots; \quad (6)$$

$$E'_n = E_n + \varepsilon \langle \Psi_n | \Delta h | \Psi_n \rangle + \varepsilon^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \Psi_n | \Delta h | \Psi_m \rangle|^2}{E_n - E_m} + \dots \quad (7)$$

Здесь Ψ_n — волновые функции, E_n — уровни энергии КВ-состояний основной молекулы, n и m нумеруют ее состояния, а Δh определяется соотношением (2). Предполагаем также, что изотопическое замещение не вызывает сильного перемешивания уровней и позволяет установить однозначное соответствие между стационарными состояниями изотопных модификаций.

При вычислении матричных элементов в (6) и (7) можно использовать функции нулевого приближения $\tilde{\Psi}_n$, вводя одновременно поправочные множители, зависящие от колебательных и вращательных квантовых чисел:

$$E'_n = E_n + \varepsilon \sum_{\alpha\beta\lambda\mu\nu\tau} \alpha^{\beta\dots} h_{\lambda\mu}^{\nu\tau\dots} \langle \tilde{\Psi}_n | q_{\lambda} q_{\mu} \dots p_{\nu} p_{\tau} \dots J_{\alpha} J_{\beta} \dots | \tilde{\Psi}_n \rangle \times$$

$$\begin{aligned} & \times \left\{ 1 + \alpha\beta \dots \eta_{\lambda\mu}^{\nu\tau} \dots (n) + \dots \right\} + \varepsilon^2 \sum_{\alpha\beta\lambda\mu\nu\tau} \sum_{\alpha'\beta'\lambda'\mu'\nu'\tau'} \alpha\beta \dots h_{\lambda\mu}^{\nu\tau} \dots \alpha'\beta' \dots h_{\lambda'\mu'}^{\nu'\tau'} \dots \times \\ & \times \langle \tilde{\Psi}_m | q_{\lambda'} q_{\mu'} \dots p_{\nu'} p_{\tau'} \dots J_{\alpha'} J_{\beta'} \dots | \tilde{\Psi}_n \rangle \times \\ & \times \frac{1}{E_n - E_m} \left\{ 1 + \alpha\beta\alpha'\beta' \dots \mu_{\lambda\mu\lambda'\mu'}^{\nu\tau\nu'\tau'} \dots (n, m) + \dots \right\} + \dots \end{aligned} \quad (8)$$

Выражения в фигурных скобках в правой части (8) представляют собой поправки, которые должны определяться подгонкой к измеренным значениям изотопических сдвигов. Очевидно, что остальные величины в (8) дают главную часть вклада в изотопические сдвиги уровней:

$$\Delta\nu_{n \leftarrow 0} = (E'_n - E'_0) - (E_n - E_0) = \varepsilon \left\{ \langle \tilde{\Psi}_n | \Delta h | \tilde{\Psi}_n \rangle - \langle \tilde{\Psi}_0 | \Delta h | \tilde{\Psi}_0 \rangle \right\} + \dots \quad (9)$$

Определение матричных элементов по функциям нулевого приближения — гармонического осциллятора и жесткого волчка — не представляет труда, здесь могут быть использованы те же формулы, что и для основной молекулы.

Проведенный анализ показал, что спектроскопические параметры и производные дипольного момента изотопа могут быть определены как некоторые функции характеристик основной молекулы и параметра ε :

$$\alpha\beta \dots h_{\lambda\mu}^{\nu\tau} \dots_{изот} = f(\varepsilon) \alpha\beta \dots h_{\lambda\mu}^{\nu\tau} \dots ; \quad (10)$$

$$\mu_{\alpha}^{\lambda\kappa} \dots = \sum_{\beta} N_{\beta\alpha}^0 \sum_{\nu\gamma} f(\varepsilon) \mu_{\beta}^{осн\ \nu\gamma} \dots \quad (11)$$

2. «Умеренный» изотопический эффект в линейных молекулах XY_2 симметрии $D_{\infty h}$

Параметры преобразования нормальных координат $\alpha_{\lambda\nu}$ зависят от масс атомов, т.к. связаны с элементами симметричной квадратной матрицы $A_{\lambda\mu}$, получаемой при решении характеристического уравнения для нахождения гармонических частот изотопа [10]. В случае симметричного замещения атомов линейных молекул типа XY_2 симметрии $D_{\infty h}$ эта связь довольно простая. Ненулевыми оказываются лишь диагональные элементы $\alpha_{\lambda\lambda} = \sqrt{A_{\lambda\lambda}}$. При несимметричном замещении атомов подобная связь между параметрами остается для двукратно вырожденного колебания: $\alpha_{2,2_1} = \alpha_{2,2_2} = \sqrt{A_{2,2_1}}$, а для невырожденных колебаний становится более сложной: $\alpha_{11} = \sqrt{A_{11}} \cdot \cos \theta$, $\alpha_{33} = \sqrt{A_{33}} \cdot \cos \theta$. Кроме того, появляются недиагональные элементы $\alpha_{13} = \sqrt{A_{33}} \frac{\omega_3}{\omega_1} \cdot \sin \theta$, $\alpha_{31} = -\sqrt{A_{11}} \frac{\omega_1}{\omega_3} \cdot \sin \theta$, здесь θ — один из углов Эйлера, входящий в матрицу направляющих косинусов.

Чтобы можно было одновременно рассматривать замещение атомов различного типа, введем обозначения: $\varepsilon_x = \frac{m'_x - m_x}{m'_x}$, $\varepsilon_a = \frac{m'_{Y_a} - m_{Y_a}}{m'_{Y_a}}$ и $\varepsilon_b = \frac{m'_{Y_b} - m_{Y_b}}{m'_{Y_b}}$ —

относительные изменения массы атомов X , Y_a и Y_b , соответственно, a и b — нумерация атомов Y (рис. 1), а $\lambda_X = \frac{m_X}{m_{XY_2}}$, $\lambda_Y = \frac{m_Y}{m_{XY_2}}$ — относительные массы соответствующего атома в молекуле.

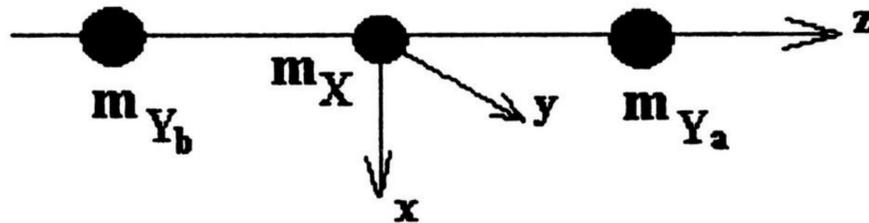


Рис. 1. Используемая система координат и нумерация атомов в молекуле XY_2

Связь между ненулевыми элементами симметричной квадратной матрицы $A_{\lambda\mu}$ и введенными параметрами представлена в табл. 1.

Таблица 1

Зависимость ненулевых элементов симметричной квадратной матрицы

$A_{\lambda\mu}$ от масс атомов молекулы типа XY_2 указанной симметрии

$A_{\lambda\mu}$	симметричное замещение атомов	несимметричное замещение атомов		
	все атомы	атом b	атом a	атомы a и b
A_{11}	$1 - \epsilon_Y$	$1 - \frac{1}{2}\epsilon_b$	$1 - \frac{1}{2}\epsilon_a$	$1 - \frac{1}{2}(\epsilon_a + \epsilon_b)$
A_{13}	0	$\frac{1}{2}\epsilon_b \cdot \sqrt{\lambda_X}$	$-\frac{1}{2}\epsilon_a \cdot \sqrt{\lambda_X}$	$-\frac{1}{2}(\epsilon_a - \epsilon_b) \cdot \sqrt{\lambda_X}$
A_{33}	$1 - 2 \cdot \epsilon_X \lambda_Y - \epsilon_Y \lambda_X$	$1 + \frac{1}{2}\epsilon_b \cdot \lambda_X$	$1 - \frac{1}{2}\epsilon_a \cdot \lambda_X$	$1 - \frac{1}{2}(\epsilon_a - \epsilon_b) \cdot \lambda_X$
$A_{2,2_1} =$ $A_{2,2_2}$	$1 - 2 \cdot \epsilon_X \lambda_Y - \epsilon_Y \lambda_X$	$1 + \frac{1}{2}\epsilon_b \cdot \lambda_X$	$1 - \frac{1}{2}\epsilon_a \cdot \lambda_X$	$1 - \frac{1}{2}(\epsilon_a - \epsilon_b) \cdot \lambda_X$

На основе проведенного анализа можно утверждать, что основной вклад в производные оператора дипольного момента для случая симметричного замещения атомов таких молекул можно записать в виде:

$$\mu_z^{3изот} \sim \mu_z^{3осн} \cdot (1 - \chi)^{1/2},$$

$$\mu_x^{2_аизот} \sim \mu_x^{2_аосн} \cdot (1 - \chi)^{1/2},$$

$$\mu_z^{13изот} \sim \mu_z^{13осн} \cdot (1 - \epsilon_Y)^{1/2} \cdot (1 - \chi)^{1/2},$$

$$\mu_x^{12_аизот} \sim \mu_x^{12_аосн} \cdot (1 - \epsilon_Y)^{1/2} \cdot (1 - \chi)^{1/2},$$

$$\mu_z^{113изот} \sim \mu_z^{113осн} \cdot (1 - \epsilon_Y) \cdot (1 - \chi)^{1/2},$$

$$\mu_x^{112_аизот} \sim \mu_x^{112_аосн} \cdot (1 - \epsilon_Y) \cdot (1 - \chi)^{1/2}.$$

$$\mu_z^{223изот} \sim \mu_z^{223осн} \cdot 2 \cdot (1 - \chi)^{3/2},$$

$$\mu_x^{222_аизот} \sim \mu_x^{222_аосн} \cdot 2 \cdot (1 - \chi)^{3/2},$$

$$\mu_z^{333изот} \sim \mu_z^{333осн} \cdot (1 - \chi)^{3/2},$$

$$\mu_x^{332_аизот} \sim \mu_x^{332_аосн} \cdot (1 - \chi)^{3/2},$$

$$\mu_z^{1113изот} \sim \mu_z^{1113осн} \cdot (1 - \epsilon_Y)^{3/2} \cdot (1 - \chi)^{1/2},$$

$$\mu_x^{1112_аизот} \sim \mu_x^{1112_аосн} \cdot (1 - \epsilon_Y)^{3/2} \cdot (1 - \chi)^{1/2},$$

$$\mu_z^{1223изот} \sim \mu_z^{1223осн} \cdot 2 \cdot (1 - \epsilon_Y)^{1/2} \cdot (1 - \chi)^{3/2},$$

$$\mu_x^{1222_аизот} \sim \mu_x^{1222_аосн} \cdot 2 \cdot (1 - \epsilon_Y)^{1/2} \cdot (1 - \chi)^{3/2},$$

$$\mu_z^{1333изот} \sim \mu_z^{1333осн} \cdot (1 - \epsilon_Y)^{1/2} \cdot (1 - \chi)^{3/2},$$

$$\mu_x^{1332_аизот} \sim \mu_x^{1332_аосн} \cdot (1 - \epsilon_Y)^{1/2} \cdot (1 - \chi)^{3/2},$$

где $\chi = 2\varepsilon_x \lambda_y + \varepsilon_y \lambda_x$. Индексы сверху означают, по каким частотам взяты производные дипольного момента, а нижние — на какую молекулярно-фиксированную ось спроектирован оператор.

3. Дипольный момент молекулы CO_2

Молекула углекислого газа является удачным примером для рассмотрения эффекта симметричного изотопического замещения атомов. Во-первых, оба атома — углерод и кислород — по принятой в спектроскопии классификации относятся к разряду тяжелых и можно одновременно рассматривать замещение одного, двух или трех атомов. Во-вторых, для этой молекулы имеется обширная экспериментальная и расчетная информация по колебательно-вращательным спектрам высокого разрешения различных изотопных модификаций. И в-третьих, исследование изотопического эффекта данной молекулы играет очень важную роль в атмосферных приложениях.

В молекуле CO_2 имеется 3 гармонических колебания с невырожденными частотами ω_1 , ω_3 и дважды вырожденной частотой ω_2 , между которыми существуют соотношения $\omega_1 \approx 2\omega_2$ и $\omega_3 \approx 3\omega_2$, приводящие матрицу рассматриваемого гамильтониана к полиадной структуре. Каждая полиада включает колебательные состояния с квантовыми числами V_i , принадлежащими набору, определяемому соотношением $P = 2V_1 + V_2 + 3V_3$. Полиады нумеруются числом P , а серии переходов — ΔP [13]. Эта особенность позволяет описывать КВ-переходы, не производя диагонализацию бесконечных матриц. Поскольку моделирование спектров высокого разрешения при этом является полуэмпирической задачей, то можно не производить в явном виде трудоемких вычислений, связанных с применением теории возмущений, а исходя из симметрии молекулы, выписать допустимые комбинации степеней элементарных операторов и ввести эмпирические параметры при этих комбинациях [14, 15]. В дальнейшем с помощью формул, полученных нами для производных оператора дипольного момента основной и изотопической модификации молекулы и численных значений эмпирических параметров, рассчитанных Переваловым с соавторами, будет проведен анализ с целью определения лучшей аппроксимации. В качестве одной из возможных предложена следующая формула:

$$\mu_z^{\text{isotope}} = \mu_z^v (1 - C_v \varepsilon_v)^{v/2}. \quad (12)$$

Автор выражает благодарность А. Д. Быкову и В. И. Перевалову за обсуждения и оказанную ими помощь при работе над данной проблемой.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Born M., Oppenheimer R. // Ann. Phys. Lpz. 1927. V. 84. № 20. P. 457-484.
2. Мюллер А. Изотопическое замещение // В кн.: Колебательная спектроскопия. Современные воззрения. М.: Мир, 1981. С. 161-187.
3. Зуев В. Е. Распространение видимых и инфракрасных волн в атмосфере. М.: Сов. радио, 1970. 467 с.
4. Хачкурузов Г. А. Колебательные постоянные изотопических разновидностей молекулы воды // Сборник работ по физической химии. Л.: ГИХЛ, 1959. С. 109-131.
5. Герцберг Г. Спектры и строение двухатомных молекул. М.: ИЛ, 1949. 403 с.
6. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. М.: ИЛ, 1949. 403 с.
7. Свердлов Л. М., Ковнер М. А., Крайнов Е. П. Колебательные спектры многоатомных молекул. М.: Наука, 1970. 560 с.

8. Волькенштейн М. В., Грибов Л. А., Ельяшевич М. А., Степанов Б. И. Колебания молекул. М.: Наука, 1972. 700 с.
9. Вильсон Е., Дешиус Дж., Кросс П. Теория колебательных спектров молекул. М.: ИЛ, 1960. с.
10. Быков А. Д., Макушкин Ю. С., Улеников О. Н. Изотопозамещение в многоатомных молекулах. Новосибирск: Наука, 1985. 160 с.
11. Watson, J.K.G. // J. Mol. Spectrosc. 2004. V. 223. № 1. P. 39-50.
12. Лободенко Е. И., Быков А. Д. // Оптика атмосферы и океана. 2004. Т. 17. № 11. С. 944-947.
13. Tashkun, S. A., Perevalov, V. I., Teffo, J.-L., Rothman, L.S., Tyuterev, V.I.G. // JQSRT. 1998. V. 60. P. 785-801.
14. Perevalov, V. I., Lobodenko, E. I., Lyulin, O. M., Teffo, J.-L. // J. Mol. Spectrosc. 1995. V. 171. P. 435-452.
15. Teffo, J.-L., Lyulin O. M., Perevalov V. I., Lobodenko E. I. // J. Mol. Spectrosc. 1998. V. 187. P. 28-41.

Игорь Григорьевич ТЕЛЕГИН —
старший научный сотрудник
лаборатории гидродинамических методов ПНП
Тюменского филиала КогалымНИПИнефть,
кандидат физико-математических наук, доцент

Олег Борисович БОЧАРОВ —
старший научный сотрудник Института
гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН,
кандидат физико-математических наук, доцент

УДК 532.546: 949.8

СРАВНЕНИЕ ДВУХ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ФИЛЬТРАЦИИ ДВУХФАЗНОЙ ЖИДКОСТИ*

АННОТАЦИЯ. В работе численно исследуются одномерные задачи вытеснения нефти водой в неизотермических условиях по моделям Маскета-Леверетта и Баклея-Леверетта. Показывается, что для обеих моделей за счет температурных эффектов имеет место немонотонное поведение решения для водонасыщенности, однако причины, вызывающие такое поведение решения, имеют разную природу.

The numerical one dimensional solutions of Muskat-Leverett and Buckley-Leverett models are compared under the non-isothermal conditions. It is shown that in both cases non-monotony of water saturation take place due to temperature effects, but the reasons of such a behavior of solutions for each model have different nature.

* Работа выполнена при частичной финансовой поддержке СО РАН (интеграционный проект № 117)