

# ХƏВƏРЛƏРİ

---

---

ВЕСТНИК  
БАКИНСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

---

---

NEWS  
OF BAKU UNIVERSITY

FİZİKA-RİYAZİYYAT  
*elmləri seriyası*

---

*серия*  
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК

---

*series of*  
PHYSICO-MATHEMATICAL SCIENCES

№ 3, 2020

Baki–2020

## RİYAZİYYAT

УДК 517.928

ON THE SOLUTION OF ONE MIXED PROBLEM,  
CONTAINING DIRICHLET BOUNDARY CONDITIONS

Yu.A.MAMMADOV, S.Z.AHMADOV, A.Kh.ABBASOVA

*Baku State University*  
salehakhmedov1973@gmail.com  
aygun\_abbasova@bk.ru

*Present paper is dedicated on finding of the solution of the mixed problem for the fourth order partial differential equation under the Dirichlet boundary conditions. A spectral problem, corresponding to the considering mixed problem is constructed. After construction asymptotics of eigenvalues, the important properties of the Green function were studied and the decomposition theorem is proved. As a main result, under the certain algebraic conditions of coefficients of the boundary conditions the solution of the mixed problem is found in wider class, which includes the class of parabolic equation in the sense of Shilov.*

**Keywords:** eigenvalues, Green function, fundamental solution, characteristic determinant, spectral problem, the theorem of decomposition, mixed problem.

The present article is dedicated to the solution of a mixed problem with Dirichlet boundary conditions:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = i \frac{\partial^4 u(x,t)}{\partial x^4} + q(x) \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0 \quad (1)$$

$$u(x,0) = \varphi(x), \quad (2)$$

$$L_1(u) \equiv u(0,t) = 0,$$

$$L_2(u) \equiv u(1,t) = 0,$$

$$L_3(u) \equiv \frac{\partial u(0,t)}{\partial x} + \alpha \frac{\partial u(1,t)}{\partial x} = 0, \quad (3)$$

$$L_4(u) \equiv \frac{\partial^2 u(0,t)}{\partial x^2} + \beta \frac{\partial^2 u(1,t)}{\partial x^2} = 0,$$

where  $q(x)$  and  $\varphi(x)$  are complex valued functions,  $\alpha$  and  $\beta$  are real numbers.

A spectral problem corresponding to the mixed problem (1)-(3) is constructed as follows:

$$iy^{IV} + q(x)y'' - \lambda^4 y = -\varphi(x), \quad 0 < x < 1 \quad (4)$$

$$L_k(y) = 0, \quad k = \overline{1,4} \quad (5)$$

The roots of the characteristic equation in the sense of Birkhof corresponding to equation (4) have the form:

$$\theta_1 = \theta = e^{\frac{\pi i}{8}}, \quad \theta_2 = i\theta, \quad \theta_3 = -\theta, \quad \theta_4 = -i\theta.$$

To find the asymptotic of fundamental solutions the  $\lambda$ -complex plane is divided into the eight sectors as follows [2, 4, 9]:

$$S_k = \left\{ \lambda : \lambda_1 \operatorname{tg} \frac{3\pi}{8} < (-1)^k \lambda_2 < \lambda_1 \operatorname{tg} \frac{5\pi}{8} \right\}, \quad k = 1, 2,$$

$$S_k = \left\{ \lambda : \lambda_1 \operatorname{tg} \frac{\pi}{8} < (-1)^k \lambda_2 < \lambda_1 \operatorname{tg} \frac{3\pi}{8} \right\}, \quad k = 3, 4,$$

$$S_k = \left\{ \lambda : \lambda_1 \operatorname{tg} \left( -\frac{\pi}{8} \right) < (-1)^k \lambda_2 < \lambda_1 \operatorname{tg} \frac{\pi}{8} \right\}, \quad k = 5, 6,$$

$$S_k = \left\{ \lambda : \lambda_1 \operatorname{tg} \left( -\frac{3\pi}{8} \right) < (-1)^k \lambda_2 < \lambda_1 \operatorname{tg} \left( -\frac{\pi}{8} \right) \right\}, \quad k = 7, 8.$$

If  $q(x) \in C^1[0,1]$ , then on each of sectors  $S_k$  ( $k = \overline{1,8}$ ) at large values of  $|\lambda|$  the asymptotics of the fundamental solution of equation (4) has the following representation [6]:

$$\frac{d^m y_n(x, \lambda)}{dx^m} = (\lambda \omega_n)^m \left[ 1 + \frac{1}{4\lambda \omega_n} \int_0^x q(\tau) d\tau + O\left(\frac{1}{\lambda^2}\right) \right] e^{\lambda \omega_n x};$$

$$|\lambda| \rightarrow +\infty, \quad \lambda \in S_n \ (n = \overline{1,8}), \quad n = \overline{1,4}; \quad m = \overline{0,3}. \quad (6)$$

Green function [2,3] of spectral problem (4), (5) has the form

$$G(x, \xi, \lambda) = \frac{\Delta(x, \xi, \lambda)}{\Delta(\lambda)}; \quad \lambda \in S_k, \quad k = \overline{1,8}. \quad (7)$$

$\Delta(\lambda)$  is called a characteristic determinant and can be found as follows

$$\Delta(\lambda) = \begin{vmatrix} L_1(y_1) & L_1(y_2) & L_1(y_3) & L_1(y_4) \\ L_2(y_1) & L_2(y_2) & L_2(y_3) & L_2(y_4) \\ L_3(y_1) & L_3(y_2) & L_3(y_3) & L_3(y_4) \\ L_4(y_1) & L_4(y_2) & L_4(y_3) & L_4(y_4) \end{vmatrix}$$

and auxiliary determinant  $\Delta(x, \xi, \lambda)$  is found as follows

$$\Delta(x, \xi, \lambda) = \begin{vmatrix} g(x, \xi, \lambda) & y_1(x, \lambda) & y_2(x, \lambda) & y_3(x, \lambda) & y_4(x, \lambda) \\ L_1(g)_x & L_1(y_1) & L_1(y_2) & L_1(y_3) & L_1(y_4) \\ L_2(g)_x & L_2(y_1) & L_2(y_2) & L_2(y_3) & L_2(y_4) \\ L_3(g)_x & L_3(y_1) & L_3(y_2) & L_3(y_3) & L_3(y_4) \\ L_4(g)_x & L_4(y_1) & L_4(y_2) & L_4(y_3) & L_4(y_4) \end{vmatrix},$$

where Cauchy function  $g(x, \xi, \lambda)$  takes the form [2]

$$g(x, \xi, \lambda) = \pm \frac{1}{2} \sum_{k=1}^4 z_k(\xi, \lambda) y_k(x, \lambda)$$

“+” if  $0 \leq \xi \leq x \leq 1$ , “-” if  $0 \leq x \leq \xi \leq 1$ ,

$$z_k(\xi, \lambda) = \frac{V_{4k}(\xi, \lambda)}{V(\xi, \lambda)}, \quad k = \overline{1, 4}$$

$V_{4k}(\xi, \lambda)$  is an algebraic complement of the fourth row element of Vronskian  $V(\xi, \lambda)$

To find the asymptotic of eigenvalues of spectral problem (4), (5) the following estimation was used, [1, 7]:

**Theorem 1.** Suppose, that  $q(x) \in C^1[0, 1]$ , then the zeros of the characteristic determinant  $\Delta(\lambda)$  are countable set, single limit points of which is  $\lambda = \infty$  and the following formulas for the asymptotic zeros are true:

$$\mu_n = \frac{2n+1}{2} \cdot \frac{\pi}{\theta}, \quad n \rightarrow \infty,$$

$$\lambda_n^4 = i[16\pi^4 n^4 - 32i\pi^3 n^3 \ln_0 E - 24\pi^2 n^2 \ln_0^2 E] - 4\pi^2 n^2 \int_0^1 q(\tau) d\tau + O(n) \quad n \rightarrow \pm\infty,$$

$$E = \frac{1}{\alpha\beta} \left( -\alpha - \beta \pm \sqrt{(\alpha + \beta)^2 - \alpha^2 \beta^2} \right) \quad (8)$$

Based on this fact the following theorem of decomposition is proved:

**Theorem 2.** Suppose, that functions  $q(x)$  and  $\varphi(x)$  satisfies to the following conditions  $q(x) \in C^1[0, 1]$ ,  $\varphi(x) \in C^2[0, 1]$ ,  $\varphi(0) = \varphi(1) = \varphi'(0) = \varphi'(1) = 0$ . Then for the function  $\varphi(x)$  can be represented by Green function and eigenvalues as follows:

$$\varphi(x) = -\frac{1}{2\pi} \sum_k \int_{C_k} \lambda^3 \int_0^1 G(x, \xi, \lambda) \varphi(\xi) d\xi d\lambda, .$$

here  $C_k$  are simple contour and contain only one pole of the Green function in the  $\lambda$ -complex plane

**Proof:**

First let's choose the numbers  $\theta_k$  ( $k = \overline{1,4}$ ) in each sectors  $S_p$  ( $p = \overline{1,8}$ ) of which the inequalities

$\operatorname{Re}\theta_1\lambda \leq \operatorname{Re}\theta_2\lambda \leq 0 \leq \operatorname{Re}\theta_3\lambda \leq \operatorname{Re}\theta_4\lambda$ ,  $\lambda \in S_p$  ( $p = \overline{1,8}$ ) are satisfies [5]. For that it is enough to make the choice as follows.

$$\theta_1 = \omega_3; \theta_2 = \omega_4; \theta_3 = \omega_2; \theta_4 = \omega_1; \lambda \in S_1;$$

$$\theta_1 = \omega_3; \theta_2 = \omega_2; \theta_3 = \omega_4; \theta_4 = \omega_1; \lambda \in S_2;$$

$$\theta_1 = \omega_2; \theta_2 = \omega_3; \theta_3 = \omega_1; \theta_4 = \omega_4; \lambda \in S_3;$$

$$\theta_1 = \omega_2; \theta_2 = \omega_1; \theta_3 = \omega_3; \theta_4 = \omega_4; \lambda \in S_4;$$

$$\theta_1 = \omega_1; \theta_2 = \omega_2; \theta_3 = \omega_4; \theta_4 = \omega_3; \lambda \in S_5;$$

$$\theta_1 = \omega_1; \theta_2 = \omega_4; \theta_3 = \omega_2; \theta_4 = \omega_3; \lambda \in S_6;$$

$$\theta_1 = \omega_4; \theta_2 = \omega_1; \theta_3 = \omega_3; \theta_4 = \omega_2; \lambda \in S_7;$$

$$\theta_1 = \omega_4; \theta_2 = \omega_3; \theta_3 = \omega_1; \theta_4 = \omega_2; \lambda \in S_8;$$

Let's multiply the second, third, fourth, fifth column of the determinant

$\Delta(x, \xi, \lambda)$  by  $\frac{1}{2}z_1(\xi, \lambda)$ ,  $\frac{1}{2}z_2(\xi, \lambda)$ ,  $-\frac{1}{2}z_3(\xi, \lambda)$ ,  $-\frac{1}{2}z_4(\xi, \lambda)$  correspondingly

and add to first column. After these transformations, let's denote the elements of the first column by  $g_0(x, \xi, \lambda)$  and  $g_p(\xi, \lambda)$  ( $p = \overline{1,4}$ ) and get :

$$g_0(x, \xi, \lambda) = \begin{cases} z_1(\xi, \lambda)y_1(x, \lambda) + z_2(\xi, \lambda)y_2(x, \lambda), & 0 \leq \xi \leq x \leq 1 \\ -z_3(\xi, \lambda)y_3(x, \lambda) - z_4(\xi, \lambda)y_4(x, \lambda), & 0 \leq x \leq \xi \leq 1 \end{cases}$$

$$g_{p+1}(\xi, \lambda) = -\sum_{k=1}^2 z_k(\xi, \lambda) \frac{d^p y_k(x, \lambda)}{dx^p} \Big|_{x=1} - \sum_{k=3}^4 z_k(\xi, \lambda) \frac{d^p y_k(x, \lambda)}{dx^p} \Big|_{x=0}, \quad p = \overline{0,3},$$

here

$$z_k(\xi, \lambda) = \frac{1}{\lambda^3} \frac{V_{4k}}{V} \left[ 1 - \frac{1}{4\lambda\theta_k} \int_0^\xi q(\tau) d\tau + O\left(\frac{1}{\lambda^2}\right) \right] e^{-\lambda\theta_k\xi}, \quad |\lambda| \rightarrow \infty,$$

$$\lambda \in S_p \quad (p = \overline{1,8})$$

$V$  - the Vandermonde determinant of the numbers  $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4$ ,  $V_{4k}$  - is algebraic co-factor of the  $(4, k)$  element of determinant  $V$ .

First, expanding the determinant  $\Delta(x, \xi, \lambda)$  in the first row, and then each of the obtained determinants in the first column, we'll get :

$$\frac{\Delta(x, \xi, \lambda)}{\Delta(\lambda)} = g_0(x, \xi, \lambda) + \sum_{m=1}^4 \sum_{k=1}^4 y_m(x, \lambda) g_k(\xi, \lambda) \frac{\Delta_{km}(\lambda)}{\Delta(\lambda)}$$

Let's denote  $O_k$  ( $k=1,2,3,\dots$ ) series of circle with center of the origin in  $\lambda$ -kompleks plane, radiuses of which are increases and satisfies to condition  $\lim_{k \rightarrow \infty} r_k = +\infty$ . Let's choose radiuses of series of circle  $O_k$  ( $k=1,2,3,\dots$ ) under condition, that there are don't intersect  $\delta$ -neighborhood of zeroes of the determinant  $\Delta(\lambda)$ .

$$\int_0^1 \frac{\Delta(x, \xi, \lambda)}{\Delta(\lambda)} \varphi(\xi) d\xi = \sum_{k=1}^2 y_k(x, \lambda) \int_0^1 z_k(\xi, \lambda) \varphi(\xi) d\xi - \sum_{k=3}^4 y_k(x, \lambda) \int_0^1 z_k(\xi, \lambda) \varphi(\xi) d\xi + \sum_{m=1}^4 \sum_{k=1}^4 y_m(x, \lambda) \int_0^1 g_k(\xi, \lambda) \varphi(\xi) d\xi$$

Integrating by part all integrals of the right side of the previous equality we'll

$$\text{get. } \int_0^1 \frac{\Delta(x, \xi, \lambda)}{\Delta(\lambda)} \varphi(\xi) d\xi = \frac{-i}{\lambda^4} \varphi(x) + \frac{M(x, \xi, \lambda)}{\lambda^5},$$

here function  $M(x, \xi, \lambda)$  is bounded on interval  $[0,1]$  with respect to  $x$  and  $\xi$ , and analytical with respect to  $\lambda$  in sectors  $\lambda \in S_p$  ( $p = \overline{1,8}$ ),

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{O_k} \lambda^3 \int_0^1 G(x, \xi, \lambda) \varphi(\xi) d\xi d\lambda = \sum_k \int_{O_k} \lambda^3 \int_0^1 G(x, \xi, \lambda) \varphi(\xi) d\xi$$

Thus, for  $\varphi(x)$  we'll get the formula to put in the theorem.

The theorem is proved.

As it is known, that at  $\text{Re } q(x) > 0, 0 \leq x \leq 1$  equation (1) is parabolic in the sense of Shilov [8]. A following theorem allows us to find solution of the mixed problem (1)-(3) not only in case of parabolic in the sense of Shilov, but also wider classes:

**Theorem 3. (decomposition)** Suppose, that functions  $q(x)$  and  $\varphi(x)$  satisfies to the conditions:  $q(x) \in C^1[0,1]$ ,  $\varphi(x) \in C^2[0,1]$ ,  $\varphi(0) = \varphi(1) = \varphi'(0) = \varphi'(1) = 0$ , and coefficients of the boundary conditions (3)  $\alpha$  and  $\beta$  satisfies to condition  $|\alpha\beta| > |\alpha + \beta| > 0$ , also coefficients of the equation (1) satisfies to the algebraic

conditions  $\text{Re} \int_0^1 q(\tau) d\tau > 0$ . Then solution of the mixed problem (1)-(3) is

found by the following formula:

$$u(x, t) = -i \sum_{k=1}^4 \sum_{n=1}^{\infty} \text{res}_{\lambda=\lambda_{kn}} \lambda^3 e^{\lambda^4 t} \int_0^1 G(x, \xi, \lambda) \varphi(\xi) d\xi, \quad (9)$$

here as  $\lambda_{kn}$  ( $k = \overline{1,4}; n = 1,2,3,\dots$ ) are denoted all zeroes of the Green function of the corresponding spectral problem and asymptotics of the eigenvalues has been found by formula (8).

Solution of the mixed problem is searched as follows

$$u(x,t) = \sum_{k=1}^4 \sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{res}_{\lambda=\lambda_{kn}} \lambda^3 \int_0^1 G(x,\xi,\lambda) z(\xi,t,\lambda) d\xi. \quad (10)$$

Here  $z(\xi,t,\lambda)$  is unknown function. Taking into account (10) in (1) and (2) to find function  $z(\xi,t,\lambda)$  we'll get the following Cauchy problem

$$\frac{dz(\xi,t,\lambda)}{dt} = \lambda^4 z(\xi,t,\lambda) \quad (11)$$

$$z(\xi,0,\lambda) = -i\varphi(\xi) \quad (12)$$

Solution of the Cauchy problem (11) - (12) is found by formula

$$z(\xi,t,\lambda) = -i\varphi(\xi)e^{\lambda^4 t}. \quad (13)$$

Taking into account solution (13) in series (10) we get the formula (9). It is easy to check that series (9) is the formal solution of the mixed problem (1)-(3).

Using formula (8) the following estimation is true :

$$\left| e^{\lambda_{kn}^4 t} \right| = e^{t \operatorname{Re} \lambda_{kn}^4} = e^{-t\pi^2 n^2 \int_0^1 q(\tau) d\tau + O(n)}, \quad \operatorname{Re} \int_0^1 q(\tau) d\tau > 0$$

It shows, that at  $t > 0$  and  $x \in [0,1]$  the function  $u(x,t)$ , defined by series (9) and its forth order with respect to  $x$ , and first order with respect to  $t$  derivatives uniformly and absolutely converges. The theorem is proved.

## REFERENCES

1. Садовничий В.А., Любишкин В.А. Регуляризованные суммы корней одного класса целых функций экспоненциального типа// Докл. АН, СССР, 1981, т. 256, №4, с. 794-798
2. Расулов М.Л. Метод контурного интеграла// М.: Наука, 1964, 462 с.
3. Расулов М.Л. Применение вычетного метода к решению задач дифференциальных уравнений // Баку, Изд. Элм, 1989, 328 стр.
4. Мамедов Ю.А., Ахмедов С.З. Исследование характеристического определителя, связанного с решением спектральной задачи// Вестник Бакинского Университета, серия физико-математических наук, 2005, №2, с.5-12
5. Наймарк М.А. Линейные дифференциальные операторы// М.: Наука, 1969
6. Əhmədov S.Z., Ələsgərova S.T.  $\lambda$  — kompleks parametrindən asılı dördüncü tərtib tənliyin fundamental həllərinin asimptotikasının qurulması // Bakı Universitetinin Xəbərləri, fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, 2012, №1, s.70-77.
7. Əhmədov S.Z. Dördüncü tərtib kompleks parametrdən asılı tənlik üçün bir sərhəd məsələsinin xarakteristik determinantının sıfırlarının asimptotikası haqqında//Bakı Universitetinin Xəbərləri, fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, 2018, №2, s.97-100.
8. Эйдельман С.Д. Параболические системы// М.: Наука, 1964, 443 с.

9. Ahmadov S.Z., Abbasova A.Kh. Solution of one mixed problem for the fourth order partial differential equation by sense of Shilov.// Odessa, International Periodical Scientific Journal-Scientific look into the future, Issue №19, Part 1., November, 2020, pp.103-107.

## **DİRİXLƏ SƏRHƏD ŞƏRTLƏRİNİ DAXİLİNDƏ SAXLAYAN BİR QARIŞIQ MƏSƏLƏNİN HƏLLİ HAQQINDA**

**Y.Ə.MƏMMƏDOV, S.Z.ƏHMƏDOV, A.X.ABBASOVA**

### **XÜLASƏ**

Təqdim olunan iş, Dirichlet şərtlərini daxilində saxlayan dördüncü tərtib xüsusi törəmli diferensial tənlik üçün qarışıq məsələnin həllinin tapılmasına həsr edilmişdir. Baxılan qarışıq məsələyə uyğun spektral məsələ qurulmuşdur. Məxsusi ədədlərin asimptotikasını qurduqdan sonra Qrin funksiyasının mühüm xassələri öyrənilmişdir və ayrılış teoremi isbat edilmişdir. Mühüm nəticə olaraq, sərhəd şərtlərinin əmsallarına qoyulmuş müəyyən cəbri şərtlər daxilində qarışıq məsələnin həlli Şilov mənadı parabolik tənliklər sinfindən daha geniş bir sinifdə tapılmışdır.

**Açar sözlər:** Məxsusi ədədlər, Qrin funksiyası, fundamental həll, xarakteristik determinant, Spektral məsələ, ayrılış teoremi, qarışıq məsələ

## **О РЕШЕНИИ ОДНОЙ СМЕШАННОЙ ЗАДАЧИ, СОДЕРЖАЩЕЙ ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДИРИХЛЕ**

**Ю.А.МАМЕДОВ, С.З.АХМЕДОВ, А.Х.АББАСОВА**

### **РЕЗЮМЕ**

Представленная работа посвящена нахождению решения смешанной задачи для дифференциального уравнения с частными производными четвертого порядка с граничными условиями, содержащими условия Дирихле. Построена спектральная задача, соответствующая рассматриваемой смешанной задаче. После построения асимптотики собственных значений были изучены важные свойства функции Грина и доказана теорема разложения. Как основной результат, при определенных алгебраических условиях, поставленных на коэффициенты граничных условий решение смешанной задачи находится в более широком классе, включающим класс параболических уравнений по Шилову.

**Ключевые слова:** собственные значения, функция Грина, фундаментальное решение, характеристический определитель, спектральная задача, теорема разложения, смешанная задача



УДК 517.956.223

**ОДИН МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ РЕШЕНИЯ ТРЕХМЕРНОГО  
УРАВНЕНИЯ ГЕЛЬМГОЛЬЦА С НЕЛОКАЛЬНЫМИ  
ГРАНИЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ, ЗАВИСЯЩИМИ ОТ ПАРАМЕТРА****Е.Ю.МУСТАФАЕВА, Н.А.АЛИЕВ**  
*Бакинский Государственный Университет*  
*helemust@rambler.ru*

*Излагаемая работа посвящена исследованию решений граничных задач с нелокальными граничными условиями, зависящими от параметра, для трехмерного уравнения Гельмгольца. Исходя из известного фундаментального решения уравнения Гельмгольца, получены основные соотношения, дающие нам полную систему необходимых условий для разрешимости граничной задачи. Некоторые из этих условий содержат сингулярности, регуляризация которых представляет трудность и проводится по своеобразной схеме.*

**Ключевые слова:** трехмерное уравнение Гельмгольца, нелокальные граничные условия, необходимые условия, фундаментальное решение, сингулярность, регуляризация, фредгольмовость.

**Mathematical Subject Classification:** 35J40.

Рассматривая нелокальные граничные условия для уравнения с частными производными, мы получаем возможность исследовать решение граничных задач для дифференциальных уравнений как четного, так и нечетного порядка.

Как известно, для обыкновенного дифференциального уравнения число дополнительных условий (условий Коши или граничных условий) всегда совпадает порядком рассматриваемого уравнения [1].

В курсе уравнений математической физики и уравнений в частных производных каноническим видом уравнения эллиптического типа является уравнение Лапласа (уравнение второго порядка), для которого задается одно локальное граничное условие (Дирихле, Неймана или же Пуанкаре) [2], [3].

Приведенные нелокальные граничные условия освобождают нас от вышеуказанного недоразумения между обыкновенными д.у. и уравнениями в частных производных [4], [5]. Также именно для нелокальных граничных задач появляется возможность доказательства фредгольмово-

сти при помощи вывода так называемых необходимых условий и их регуляризации.

Идея необходимых условий впервые была использована А.В.Бицадзе для уравнения Лапласа в работе [6, с. 185]. Необходимые условия мы собираемся получить из основных соотношений, которые выводятся только из рассматриваемого уравнения и являются аналогами формулы Лагранжа для о.д.у, а для уравнений в частных производных они получаются из второй формулы Грина. Необходимые условия показывают, что нельзя произвольным образом задавать искомую функцию и ее частные производные на границе области даже в классе допустимых функций (непрерывных или непрерывно дифференцируемых).

### Постановка задачи

Рассмотрим уравнение Гельмгольца ([7], с.203):

$$\Delta u + k^2 u(x) = -f(x), \quad x = (x_1, x_2, x_3) \in D \subset R^3 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \Big|_{x_3=\gamma_k(x')} + \sum_{j=1}^2 \left[ \alpha_{j1}^{(k)}(x') \frac{\partial u(x)}{\partial x_1} + \alpha_{j2}^{(k)}(x') \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \right] \Big|_{x_3=\gamma_j(x')} = \lambda u(x', \gamma_k(x')), \quad (2)$$

$$k = 1, 2; \quad x' \in S,$$

$$u(x) = f_0(x), \quad x \in \bar{\Gamma}_1 \cap \bar{\Gamma}_2. \quad (3)$$

Здесь  $S$  - проекция области  $D$  на плоскость  $Ox_1x_2 = Ox'$  ( $x_3 = 0$ ).

Фундаментальное решение  $U(x)$  уравнения Гельмгольца  $((\Delta + k^2 I)U(x) = \delta(x))$

имеет вид  $U(x) = -\frac{e^{ik|x|}}{4\pi|x|}$  или

$$U(x - \xi) = -\frac{e^{ik|x-\xi|}}{4\pi|x-\xi|}. \quad (4)$$

### Необходимые условия

Чтобы получить необходимые условия разрешимости краевой задачи (1)-(3) для уравнения Гельмгольца в 3-мерном случае, умножим уравнение (1) на фундаментальное решение (4)

$$\int_D (\Delta u + k^2 u(x)) U(x - \xi) dx = - \int_D f(x) U(x - \xi) dx$$

или

$$- \int_D (\Delta u + k^2 u(x)) \frac{e^{ik|x-\xi|}}{4\pi|x-\xi|} dx = \int_D f(x) \frac{e^{ik|x-\xi|}}{4\pi|x-\xi|} dx. \quad (5)$$

Интегрируя (5), мы получим следующее:

$$\begin{aligned}
& \int_D (\Delta u + k^2 u(x)) U(x - \xi) dx = \\
& = \sum_{j=1}^3 \int_D \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_j^2} U(x - \xi) dx + \int_D k^2 u(x) U(x - \xi) dx = \\
& = \sum_{j=1}^3 \left[ \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_j} U(x - \xi) \cos(v_x, x_j) dx - \int_D \frac{\partial u(x)}{\partial x_j} \frac{\partial U(x - \xi)}{\partial x_j} dx \right] + \int_D k^2 u(x) U(x - \xi) dx = \\
& = \sum_{j=1}^3 \int_{\Gamma} \left( \frac{\partial u(x)}{\partial x_j} U(x - \xi) - u(x) \frac{\partial U(x - \xi)}{\partial x_j} \right) \cos(v_x, x_j) dx + \\
& + \int_D u(x) \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 U(x - \xi)}{\partial x_j^2} dx + \int_D k^2 u(x) U(x - \xi) dx = \\
& = \sum_{j=1}^3 \int_{\Gamma} \left( \frac{\partial u(x)}{\partial x_j} U(x - \xi) - u(x) \frac{\partial U(x - \xi)}{\partial x_j} \right) \cos(v_x, x_j) dx + \int_D u(x) \delta(x - \xi) dx. \quad (6)
\end{aligned}$$

Так как  $U(x - \xi)$  - фундаментальное решение уравнения Лапласа, то

$$\sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 U(x - \xi)}{\partial x_j^2} + k^2 U(x - \xi) = (\Delta_x + k^2 I) U(x - \xi) = \delta(x - \xi)$$

является функцией Дирака. Учитывая это и подставляя (6) в (5), мы имеем соотношение

$$\begin{aligned}
& - \int_D f(x) U(x - \xi) dx = \int_D \left\{ \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_j^2} + k^2 u(x) \right\} U(x - \xi) dx = \\
& = \sum_{j=1}^3 \int_{\Gamma} \left( \frac{\partial u(x)}{\partial x_j} U(x - \xi) - u(x) \frac{\partial U(x - \xi)}{\partial x_j} \right) \cos(v_x, x_j) dx - \int_D u(x) \delta(x - \xi) dx
\end{aligned}$$

откуда получаем первое основное соотношение

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^3 \int_{\Gamma} \left( \frac{\partial u(x)}{\partial x_j} U(x - \xi) - u(x) \frac{\partial U(x - \xi)}{\partial x_j} \right) \cos(v_x, x_j) dx + \\
& + \int_D f(x) U(x - \xi) dx = \\
& = \int_D u(x) \delta(x - \xi) dx = \begin{cases} u(\xi), & \xi \in D, \\ \frac{1}{2} u(\xi), & \xi \in \Gamma. \end{cases} \quad (7)
\end{aligned}$$

Второе из соотношений (7) называется **1-ым необходимым условием разрешимости задачи (1)-(2)**:

$$\frac{1}{2} u(\xi) =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{j=1}^3 \int_{\Gamma} \left( \frac{\partial u(x)}{\partial x_j} U(x-\xi) - u(x) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_j} \right) \cos(v_x, x_j) dx + \\
&+ \int_D f(x) U(x-\xi) dx, \quad \xi \in \Gamma.
\end{aligned} \tag{8}$$

Необходимое условие (8) можно переписать следующим образом:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} u(\xi) &= \int_{\Gamma} \left( \frac{\partial u(x)}{\partial v_x} U(x-\xi) - u(x) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial v_x} \right) dx + \\
&+ \int_D f(x) U(x-\xi) dx, \quad \xi \in \Gamma.
\end{aligned} \tag{9}$$

**Теорема 1.** Пусть  $D \subset R^3$  ограничена и выпукла в направлении  $x_3$  с границей  $\Gamma$ , являющейся поверхностью Ляпунова. Первое необходимое условие (9) является регулярным, если правая часть  $f(x)$  уравнения (1) удовлетворяет условию Гельдера.

Умножая (1) на  $\frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_i}$ ,  $i = \overline{1,3}$ , и интегрируя по области  $D$ , мы получаем следующее:

$$\int_D (\Delta u + k^2 u(x)) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_i} dx = - \int_D f(x) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_i} dx.$$

Интегрируя по частям, мы получим остальные три основных соотношения:

$$\begin{aligned}
&\int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_i} \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial v_x} dx + \\
&+ \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_m} \left[ \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_i} \cos(v_x, x_m) - \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_m} \cos(v_x, x_i) \right] dx + \\
&+ \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_l} \left[ \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_i} \cos(v_x, x_l) - \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_l} \cos(v_x, x_i) \right] dx + \\
&\quad + \int_D f(x) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_i} dx = \\
&= \begin{cases} -\frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_i}, & \xi \in D, \\ -\frac{1}{2} \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_i}, & \xi \in \Gamma, \end{cases} \quad i = \overline{1,3},
\end{aligned} \tag{10}$$

где числа  $i, m, l$  образуют перестановку чисел  $1, 2, 3$ .

Вторые выражения в (10) - это остальные три необходимых усло-

вия ( $\xi \in \Gamma, i = \overline{1,3}$ ):

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2} \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_i} = \\
& = \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_i} \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial v_x} dx + \\
& + \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_m} \left[ \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_i} \cos(v_x, x_m) - \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_m} \cos(v_x, x_i) \right] dx + \\
& + \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_l} \left[ \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_i} \cos(v_x, x_l) - \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_l} \cos(v_x, x_i) \right] dx + \\
& + \int_D f(x) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_i} dx
\end{aligned} \tag{11}$$

где числа  $i, m, l$  образуют перестановку чисел 1,2,3.

Так как

$$\begin{aligned}
\frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_j} &= -\frac{\partial}{\partial x_j} \frac{e^{ik|x-\xi|}}{4\pi|x-\xi|} = -\frac{1}{4\pi} \left( \frac{\frac{x_j - \xi_j}{|x-\xi|} e^{ik|x-\xi|} - ik(x_j - \xi_j) e^{ik|x-\xi|}}{|x-\xi|^2} \right) = \\
&= -\frac{1}{4\pi} \left( \frac{\left( \frac{x_j - \xi_j}{|x-\xi|} - ik(x_j - \xi_j) \right) e^{ik|x-\xi|}}{|x-\xi|^2} \right) = -\frac{e^{ik|x-\xi|}}{4\pi} \left( \frac{\cos(x-\xi, x_j)}{|x-\xi|^2} - ik \frac{\cos(x-\xi, x_j)}{|x-\xi|} \right)
\end{aligned}$$

то

$$\frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_j} = -\frac{\cos(x-\xi, x_j)}{4\pi|x-\xi|^2} e^{ik|x-\xi|} (1 - ik|x-\xi|). \tag{12}$$

Подставляя (12) в (8), получим

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} u(\xi) &= \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} u(x) \frac{\cos(x-\xi, v_x)}{|x-\xi|^2} e^{ik|x-\xi|} (1 - ik|x-\xi|) dx - \\
&- \frac{1}{4\pi} \int_{\Gamma} \frac{e^{ik|x-\xi|}}{|x-\xi|} \frac{\partial u(x)}{\partial v_x} dx - \int_D f(x) U(x-\xi) dx, \quad \xi \in \Gamma.
\end{aligned} \tag{13}$$

Вводя обозначения:

$$K_{ij}(x, \xi) = \cos(x-\xi, x_i) \cos(v_x, x_j) - \cos(x-\xi, x_j) \cos(v_x, x_i), \tag{14}$$

мы можем переписать 2-ое, 3-е и 4-ое необходимые условия (10) в виде

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_i} = \\
& = - \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_i} \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial v_x} dx - \\
& - \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_m} \frac{K_{im}(x, \xi)}{4\pi|x-\xi|^2} e^{ik|x-\xi|} (1-ik|x-\xi|) dx - \\
& \int_{\Gamma} \frac{\partial u(x)}{\partial x_l} \frac{K_{il}(x, \xi)}{4\pi|x-\xi|^2} e^{ik|x-\xi|} (1-ik|x-\xi|) dx - \\
& - \int_D f(x) \frac{\partial U(x-\xi)}{\partial x_i} dx, \tag{15}
\end{aligned}$$

где числа  $i, m, l$  образуют перестановку чисел 1, 2, 3.

Поскольку нормальная производная фундаментального решения не имеет особенности в точке  $x = \xi$ , то при условии Гельдера на функцию  $f(x)$  мы имеем сингулярность во втором и третьем интегралах в правой части (15).

**Теорема 2.** При выполнении условий теоремы 1 необходимые условия (15) являются сингулярными.

Выделим только сингулярные слагаемые во 2-ом, 3-ем, 4-ом необходимых условиях (15) ( $i = \overline{1,3}$ ) для  $k=1,2$ :

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial \xi_i} \Big|_{\xi_3 = \gamma_k(\xi')} = \\
& (-1)^k \int_S \frac{\partial u(x)}{\partial x_m} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} \frac{K_{im}(x, \xi)}{4\pi|x-\xi|^2} (1-ik|x-\xi|) \Big|_{\substack{x_3 = \gamma_k(x') \\ \xi_3 = \gamma_k(\xi')}} \frac{dx'}{\cos(v_x, x_3)} + \\
& + (-1)^k \int_S \frac{\partial u(x)}{\partial x_l} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} \frac{K_{il}(x, \xi)}{4\pi|x-\xi|^2} (1-ik|x-\xi|) \Big|_{\substack{x_3 = \gamma_k(x') \\ \xi_3 = \gamma_k(\xi')}} \frac{dx'}{\cos(v_x, x_3)} + \dots, \tag{16}
\end{aligned}$$

где многоточие обозначает сумму несингулярных слагаемых.

Введем обозначения:

$$K_{ij}^{(k)}(x', \xi') = K_{ij}(x, \xi) (1-ik|x-\xi|) \Big|_{\substack{x_3 = \gamma_k(x') \\ \xi_3 = \gamma_k(\xi')}}, k=1,2. \tag{17}$$

Рассмотрим  $|x-\xi|^2 \Big|_{\substack{x_3 = \gamma_k(x') \\ \xi_3 = \gamma_k(\xi')}}^2, k=1,2$ , в знаменателе подынтегральных выражений (16):

$$|x-\xi|^2 \Big|_{\substack{x_3 = \gamma_k(x') \\ \xi_3 = \gamma_k(\xi')}}^2 = |x'-\xi'|^2 + (\gamma_k(x') - \gamma_k(\xi'))^2 =$$

$$\begin{aligned}
&= |x' - \xi'|^2 \left[ 1 + \sum_{m=1}^2 \left( \frac{\partial \gamma_k(x')}{\partial x_m} \right)^2 \cos^2(x' - \xi', x_m) + \right. \\
&\quad \left. + 2 \frac{\partial \gamma_k(x')}{\partial x_1} \frac{\partial \gamma_k(x')}{\partial x_2} \cos(x' - \xi', x_1) \cos(x' - \xi', x_2) + O(|x' - \xi'|) \right].
\end{aligned} \tag{18}$$

Введем обозначения:

$$\begin{aligned}
P_k(x', \xi') &= 1 + \sum_{m=1}^2 \left( \frac{\partial \gamma_k(x')}{\partial x_m} \right)^2 \cos^2(x' - \xi', x_m) + \\
&\quad + 2 \frac{\partial \gamma_k(x')}{\partial x_1} \frac{\partial \gamma_k(x')}{\partial x_2} \cos(x' - \xi', x_1) \cos(x' - \xi', x_2) + O(|x' - \xi'|)
\end{aligned}$$

откуда мы можем переписать (18) следующим образом:

$$|x - \xi|^2 \Big|_{\substack{x_3 = \gamma_k(x') \\ \xi_3 = \gamma_k(\xi')}} = |x' - \xi'|^2 P_k(x', \xi'). \tag{19}$$

**З а м е ч а н и е.** Заметим, что для  $\xi' = x'$  мы имеем:

$$P_k(x', x') = 1 + \left( \frac{\partial \gamma_k}{\partial x_1} \right)^2 + \left( \frac{\partial \gamma_k}{\partial x_2} \right)^2 + 2 \frac{\partial \gamma_k}{\partial x_1} \frac{\partial \gamma_k}{\partial x_2} \neq 0, \quad k = 1, 2.$$

При помощи обозначений (17), (19) мы можем переписать необходимые условия (16) для  $k=1, 2$  следующим образом:

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial \xi_i} \Big|_{\xi_3 = \gamma_k(\xi')} = \\
&= (-1)^k \int_S \frac{\partial u(x)}{\partial x_m} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} \frac{1}{4\pi |x' - \xi'|^2} \frac{K_{im}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')} \frac{dx'}{\cos(v_x, x_3)} + \\
&\quad + (-1)^k \int_S \frac{\partial u(x)}{\partial x_l} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} \frac{1}{4\pi |x' - \xi'|^2} \frac{K_{il}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')} \frac{dx'}{\cos(v_x, x_3)} + \dots, \quad i = 1, 2, 3, \tag{20}
\end{aligned}$$

где числа  $i, m, l$  образуют перестановку чисел 1, 2, 3.

**Теорема 3.2.** При условиях теоремы 3.1 необходимые условия (20) являются сингулярными.

Чтобы выделить сингулярные слагаемые в подынтегральных выражениях в необходимых условиях (20), мы сначала разложим все коэффициенты впри производных по формуле Тейлора в точке  $\xi' = x'$ :

$$\frac{K_{ij}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')} = \frac{K_{ij}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} + \sum_{p=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_p} \left( \frac{K_{ij}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} \right) (x_p - \xi_p) + \dots$$

Подставляя полученное разложение для  $\frac{K_{ij}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')}$  в необходимые условия (20) и учитывая, что слагаемые  $\frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{K_{im}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} \right) \frac{(x_j - \xi_j)}{4\pi|x' - \xi'|^2}$ ,  $j = 1, 2$ , имеют слабую сингулярность, мы выделим только сингулярные слагаемые. Тогда необходимые условия (20) примут окончательный вид для регуляризации:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial \xi_i} \Big|_{\xi_3 = \gamma_k(\xi')} = \\ & = (-1)^k \int_S \frac{1}{4\pi|x' - \xi'|^2} \left[ \frac{\partial u(x)}{\partial x_m} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} \frac{K_{im}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} + \frac{\partial u(x)}{\partial x_l} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} \frac{K_{il}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} \right] \times \\ & \quad \times \frac{dx'}{\cos(v_x, x_3)} + \dots, \quad i = 1, 2, 3; \quad k = 1, 2, \end{aligned} \quad (21)$$

где многоточие обозначает несингулярные слагаемые или слагаемые со слабой сингулярностью, а числа  $i, m, l$  образуют перестановку чисел 1, 2, 3.

### Регуляризация

Вернемся теперь к 1-ому необходимому условию (8) и раскроем каждый поверхностный интеграл по верхней и нижней полуповерхностям  $\Gamma_k = \{\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3) : \xi_3 = \gamma_k(\xi'), \xi' = (\xi_1, \xi_2) \in S\}$   $k = 1, 2$ , границы  $\Gamma$  области  $D$ :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} u(\xi) \Big|_{\xi_3 = \gamma_k(\xi')} = \\ & = - \sum_{m=1}^2 (-1)^m \frac{1}{4\pi} \int_S u(x) \Big|_{x_3 = \gamma_m(x')} \left( \frac{\cos(x - \xi, v_x)}{|x - \xi|^2} e^{ik|x - \xi|} (1 - ik|x - \xi|) \right) \Big|_{\substack{\xi_3 = \gamma_k(\xi') \\ x_3 = \gamma_m(x')}} \frac{dx'}{\cos(v_x, x_3)} + \\ & + \sum_{m=1}^2 (-1)^i \frac{1}{4\pi} \int_S \left( \frac{e^{ik|x - \xi|}}{|x - \xi|} \frac{\partial u(x)}{\partial v_x} \right) \Big|_{\substack{\xi_3 = \gamma_k(\xi') \\ x_3 = \gamma_m(x')}} \frac{dx'}{\cos(v_x, x_3)} - \int_D f(x) \frac{e^{ik|x - \xi|}}{|x - \xi|} dx, \quad \xi \in \Gamma_k. \end{aligned} \quad (22)$$

Очевидно, когда  $k \neq m$  в (22), соответствующий интеграл несингулярен. Когда  $k = m$  в первой сумме в (22), тогда соответствующий интеграл имеет устранимую особенность при  $x \rightarrow \xi$ ; во второй сумме в (22) соответствующий интеграл имеет слабую особенность, так как порядок особенности меньше кратности интеграла, а в третьем интеграле налагая условие Гельдера на функцию  $f(x)$ , получаем также устранимую особенность. Поэтому, обозначая несингулярные слагаемые многоточием в (22) и учитывая (17), мы получаем первое необходимое условие в виде (для  $k=1, 2$ ):



$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} u(\xi) \Big|_{\xi_3 = \gamma_k(\xi')} = \\
& = (-1)^{k-1} \frac{1}{4\pi} \int_S u(x) \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} \frac{\left( \cos(x - \xi, \nu_x) e^{ik|x-\xi|} (1 - ik|x-\xi|) \right) \Big|_{\substack{\xi_3 = \gamma_k(\xi') \\ x_3 = \gamma_k(x')}}}{P_k(x', \xi') |x' - \xi'|^2} \frac{dx'}{\cos(\nu_x, x_3)} + \\
& + (-1)^k \frac{1}{4\pi} \int_S \frac{1}{P_k(x', \xi') |x' - \xi'|} \left( \frac{\partial u(x)}{\partial \nu_x} e^{ik|x-\xi|} (1 - ik|x-\xi|) \right) \Big|_{\substack{\xi_3 = \gamma_k(\xi') \\ x_3 = \gamma_k(x')}} \frac{dx'}{\cos(\nu_x, x_3)} + \dots \quad (23)
\end{aligned}$$

Построим теперь линейную комбинацию необходимых условий (21) ( $i=1,2,3$ ;  $k=1,2$ ):

$$\begin{aligned}
& \beta_{ij}^{(1)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3 = \gamma_1(\xi')} + \beta_{ij}^{(2)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3 = \gamma_2(\xi')} = \\
& = \int_S \sum_{k=1}^2 \beta_{ij}^{(k)}(\xi') (-1)^k \left( \frac{\partial u(x)}{\partial x_m} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} \frac{K_{jm}^{(k)}(x, \xi)}{P_k(x', \xi')} + \frac{\partial u(x)}{\partial x_l} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} \frac{K_{jl}^{(k)}(x, \xi)}{P_k(x', \xi')} \right) \times \\
& \quad \times \frac{1}{2\pi |x' - \xi'|^2} \frac{dx'}{\cos(\nu_x, x_3)} + \dots, \quad (24)
\end{aligned}$$

где числа  $i, m, l$  образуют перестановку чисел 1, 2, 3.

Сформируем сумму из (24) для  $j=1,2,3$ , и вынесем общий множитель  $\frac{1}{2\pi |x' - \xi'|^2}$  под интегралом ( $i=1,2$ ):

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^3 \left( \beta_{ij}^{(1)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3 = \gamma_1(\xi')} + \beta_{ij}^{(2)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3 = \gamma_2(\xi')} \right) = \\
& = \int_S \frac{1}{2\pi |x' - \xi'|^2} \frac{dx'}{\cos(\nu_x, x_3)} \sum_{k=1}^2 (-1)^k \times \\
& \quad \times \sum_{j=1}^3 \beta_{ij}^{(k)}(\xi') \left( \frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} \frac{K_{jm}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')} + \frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} \frac{K_{jl}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')} \right) + \dots \quad (25)
\end{aligned}$$

Прибавляя и вычитая  $\beta_{ij}^{(k)}(x')$  из  $\beta_{ij}^{(k)}(\xi')$ ,  $k=1,2$ , в (25), мы получаем:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^3 \left( \beta_{ij}^{(1)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3 = \gamma_1(\xi')} + \beta_{ij}^{(2)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3 = \gamma_2(\xi')} \right) = \\
& = \int_S \frac{1}{2\pi |x' - \xi'|^2} \frac{dx'}{\cos(\nu_x, x_3)} \sum_{k=1}^2 (-1)^k \times
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \sum_{j=1}^3 \beta_{ij}^{(k)}(x') \left( \frac{\partial u(x)}{\partial x_m} \Big|_{x_3=\gamma_k(x')} \frac{K_{jm}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')} + \frac{\partial u(x)}{\partial x_l} \Big|_{x_3=\gamma_k(x')} \frac{K_{jl}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')} \right) + \\
& \quad + \int_S \frac{dx'}{\cos(\nu_x, x_3)} \sum_{k=1}^2 (-1)^k \times \\
& \times \sum_{j=1}^3 \left[ \frac{\beta_{ij}^{(k)}(\xi') - \beta_{ij}^{(k)}(x')}{2\pi|x' - \xi'|^2} \right] \left( \frac{\partial u(x)}{\partial x_m} \Big|_{x_3=\gamma_k(x')} \frac{K_{jm}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')} + \frac{\partial u(x)}{\partial x_l} \Big|_{x_3=\gamma_k(x')} \frac{K_{jl}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')} \right) + \dots \quad (26)
\end{aligned}$$

Предполагая, что функции  $\beta_{ji}^{(k)}(\xi')$  удовлетворяют условию Гельдера, мы получаем слабые особенности в интегралах с  $\frac{\beta_{ji}^{(k)}(\xi') - \beta_{ji}^{(k)}(x')}{2\pi|x' - \xi'|^2}$ . Отбросив слагаемые со слабыми особенностями и группируя подобные слагаемые, получаем из (26)

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^3 \left( \beta_{ij}^{(1)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3=\gamma_1(\xi')} + \beta_{ij}^{(2)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3=\gamma_2(\xi')} \right) = \\
& = \int_S \frac{1}{2\pi|x' - \xi'|^2} \frac{dx'}{\cos(\nu_x, x_3)} \sum_{k=1}^2 (-1)^k \times \\
& \times \sum_{j=1}^3 \beta_{ij}^{(k)}(x') \left( \frac{\partial u(x)}{\partial x_m} \Big|_{x_3=\gamma_k(x')} \frac{K_{jm}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')} + \frac{\partial u(x)}{\partial x_l} \Big|_{x_3=\gamma_k(x')} \frac{K_{jl}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')} \right) + \dots
\end{aligned}$$

Разложим все коэффициенты при производных под интегралом по формуле Тейлора в точке  $\xi' = x'$ :

$$\begin{aligned}
\frac{K_{ij}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')} &= \frac{K_{ij}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} + \frac{\partial}{\partial x_1} \left( \frac{K_{ij}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} \right) (x_1 - \xi_1) + \\
& + \frac{\partial}{\partial x_2} \left( \frac{K_{ij}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} \right) (x_2 - \xi_2) + \dots
\end{aligned}$$

Все слагаемые, кроме первого, понижают порядок сингулярности и делают ее слабее для двукратного интеграла по поверхности S. Вот почему мы будем рассматривать только первый член из каждого такого разложения:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^3 \left( \beta_{ij}^{(1)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3=\gamma_1(\xi')} + \beta_{ij}^{(2)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3=\gamma_2(\xi')} \right) = \\
& = \int_S \frac{1}{2\pi|x' - \xi'|^2} \frac{dx'}{\cos(\nu_x, x_3)} \sum_{k=1}^2 (-1)^k \times
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \sum_{j=1}^3 \beta_{ij}^{(k)}(x') \left( \frac{\partial u(x)}{\partial x_m} \Big|_{x_3=\gamma_k(x')} \frac{K_{jm}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')} + \frac{\partial u(x)}{\partial x_l} \Big|_{x_3=\gamma_k(x')} \frac{K_{jl}^{(k)}(x', \xi')}{P_k(x', \xi')} \right) + \dots = \\
& = \int_S \frac{1}{2\pi |x' - \xi'|^2} \frac{dx'}{\cos(\nu_x, x_3)} \sum_{k=1}^2 (-1)^k \times \\
& \times \sum_{j=1}^3 \frac{\partial u(x)}{\partial x_j} \Big|_{x_3=\gamma_k(x')} \left( \beta_{il}^{(k)}(x') \frac{K_{lj}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} + \beta_{im}^{(k)}(x') \frac{K_{mj}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} \right) + \dots \quad (27)
\end{aligned}$$

где числа  $i, m, l$  образуют перестановку чисел 1, 2, 3.

Для регуляризации интеграла в правой части (27) поставим условия на коэффициенты  $\beta_{ij}^{(k)}(x')$ : приравняем коэффициенты при производных под знаком интеграла (27) к коэффициентам  $\alpha_{ij}^{(k)}(x')$  из граничных условий (2). Тогда мы получим систему 6 уравнений для 6 неизвестных  $\beta_{ij}^{(k)}(x')$ ,  $i = 1, 2$ ;  $j = 1, 2, 3$ , каждого  $k = 1, 2$ :

$$\begin{aligned}
(-1)^{k+1} \beta_{i2}^{(k)}(x') \frac{K_{21}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} + (-1)^{k+1} \beta_{i3}^{(k)}(x') \frac{K_{31}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} &= \alpha_{i1}^{(k)}(x'), \\
(-1)^{k+1} \beta_{i1}^{(k)}(x') \frac{K_{12}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} - \beta_{i3}^{(1)}(x') \frac{K_{32}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} &= \alpha_{i2}^{(k)}(x'), \\
(-1)^{k+1} \beta_{i1}^{(k)}(x') \frac{K_{13}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} + (-1)^{k+1} \beta_{i2}^{(k)}(x') \frac{K_{23}^{(k)}(x', x')}{P_k(x', x')} &= \alpha_{i3}^{(k)}(x'), \quad (28) \\
& i=1, 2
\end{aligned}$$

Предположим, что неоднородная система (28) имеет единственное решение  $\beta_{11}^{(k)}(x')$ ,  $\beta_{12}^{(k)}(x')$ ,  $\beta_{13}^{(k)}(x')$ ,  $\beta_{21}^{(k)}(x')$ ,  $\beta_{22}^{(k)}(x')$ ,  $\beta_{23}^{(k)}(x')$  для каждого  $k=1, 2$ . Тогда подставляя граничные условия (2) в (27), получаем:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^3 \left( \beta_{ij}^{(1)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3=\gamma_1(\xi')} + \beta_{ij}^{(2)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3=\gamma_2(\xi')} \right) = \\
& = - \int_S \frac{1}{2\pi |x' - \xi'|^2} \left[ \sum_{m=1}^2 \alpha_i^{(m)}(x') u(x', \gamma_m(x')) \right] \frac{dx'}{\cos(\nu_x, x_3)} + \dots \quad (29)
\end{aligned}$$

Подставляя 1-ое необходимое условие (21) для  $u(\xi)$  на  $\Gamma_k$ ,  $k = 1, 2$ , в (29), мы имеем:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^3 \left( \beta_{ij}^{(1)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3=\gamma_1(\xi')} + \beta_{ij}^{(2)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3=\gamma_2(\xi')} \right) = \\
& = - \int_S \frac{dx'}{2\pi \cos(\nu_x, x_3) |x' - \xi'|^2} \sum_{m=1}^2 \alpha_i^{(m)}(x') \times
\end{aligned}$$

$$\times \int_S u(\zeta) \Big|_{\zeta_3 = \gamma_m(\zeta')} \frac{\left( \cos(\zeta - x, \nu_{\zeta'}) e^{ik|\zeta - x|} (1 - ik|\zeta - x|) \right) \Big|_{\substack{\zeta_3 = \gamma_m(\zeta') \\ x_3 = \gamma_m(x')}}}{2\pi |x' - \zeta'|^2 P_m(x', \zeta')} \frac{d\zeta'}{\cos(\nu_{\zeta'}, \zeta_3)} + \dots$$

Меняя порядок интегрирования, получаем два регулярных соотношения ( $k=1,2$ ):

$$\sum_{j=1}^3 \left( \beta_{ij}^{(1)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3 = \gamma_1(\xi')} + \beta_{ij}^{(2)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3 = \gamma_2(\xi')} \right) =$$

$$= \int_S \frac{u(\zeta) \Big|_{\zeta_3 = \gamma_1(\zeta')}}{2\pi \cos(\nu_{\zeta'}, \zeta_3)} \int_S \sum_{m=1}^2 \left( \alpha_i^{(m)}(x') \frac{\left( \cos(\zeta - x, \nu_{\zeta'}) e^{ik|\zeta - x|} (1 - ik|\zeta - x|) \right) \Big|_{\substack{\zeta_3 = \gamma_m(\zeta') \\ x_3 = \gamma_m(x')}}}{2\pi |x' - \zeta'|^2 |x' - \zeta'|^2 P_m(x', \zeta')} \right) \frac{dx'}{\cos(\nu_{x, x_3})} + \dots \quad (30)$$

Внутренние интегралы в правой части (30) являются сингулярными, но они не содержат неизвестную функцию  $u(\xi) = u(\xi_1, \xi_2, \xi_3)$  и сходятся в смысле Коши. Таким образом, мы регуляризировали соотношения (27) и, следовательно, нами установлена следующая

**Теорема 3.** Если система (28) имеет единственное решение  $\beta_{11}^{(k)}(x'), \beta_{12}^{(k)}(x'), \beta_{13}^{(k)}(x'), \beta_{21}^{(k)}(x'), \beta_{22}^{(k)}(x'), \beta_{23}^{(k)}(x')$ , для каждого  $k=1,2$ , и функции  $\beta_{ji}^{(k)}(x'), \varphi_k(x'), i, k = 1,2; j = \overline{1,3}$ , удовлетворяют условию Гельдера, то соотношения (27) являются регулярными.

Из курса математического анализа известно, что

$$\frac{\partial}{\partial x_p} u(x_1, x_2, \gamma_k(x_1, x_2)) = \frac{\partial u(x)}{\partial x_p} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} + \frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} \frac{\partial \gamma_k(x')}{\partial x_p},$$

$$k=1,2; p=1,2,$$

откуда мы имеем

$$\frac{\partial u(x)}{\partial x_p} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} = \frac{\partial u(x', \gamma_k(x'))}{\partial x_p} - \frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')} \frac{\partial \gamma_k(x')}{\partial x_p}, \quad (31)$$

$$p=1,2; k=1,2.$$

Так что производные  $\frac{\partial u(x)}{\partial x_1} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')}$  и  $\frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')}$  определяются через

производную  $\frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')}$ . Тогда мы имеем только две неизвестные: граничные значения искомой функции  $u(x', \gamma_1(x'))$  и  $u(x', \gamma_2(x'))$ .

Подставим теперь выражения для  $\frac{\partial u(x)}{\partial x_1} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')}$  и  $\frac{\partial u(x)}{\partial x_2} \Big|_{x_3 = \gamma_k(x')}$  из (31) в левые части граничных условий (2):

$$\begin{aligned}
l_i u &= \sum_{j=1}^2 \left[ \sum_{m=1}^2 \alpha_{ij}^{(m)}(x') \left( \frac{\partial u(x', \gamma_m(x'))}{\partial x_j} - \frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \Big|_{x_3=\gamma_m(x')} \frac{\partial \gamma_m(x')}{\partial x_j} \right) + \right. \\
&\quad \left. + \alpha_{i3}^{(m)}(x') \frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \Big|_{x_3=\gamma_m(x')} + \alpha_i^{(m)}(x') u(x', \gamma_m(x')) \right] = - \\
&= - \sum_{k=1}^2 \frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \Big|_{x_3=\gamma_k(x')} \left[ \sum_{m=1}^2 \alpha_{im}^{(k)}(x') \frac{\partial \gamma_k(x')}{\partial x_m} - \alpha_{i3}^{(k)}(x') \right] + \\
&\quad + \sum_{j=1}^2 \left[ \alpha_{ij}^{(1)}(x') \frac{\partial u(x', \gamma_1(x'))}{\partial x_j} + \alpha_{ij}^{(2)}(x') \frac{\partial u(x', \gamma_2(x'))}{\partial x_j} \right] + \\
&\quad + \alpha_i^{(1)}(x') u(x', \gamma_1(x')) + \alpha_i^{(2)}(x') u(x', \gamma_2(x')) = 0. \tag{32}
\end{aligned}$$

$x' \in S, i = 1, 2.$

Введем обозначения:

$$A_{ij}(x') = - \left[ \sum_{m=1}^2 \alpha_{im}^{(1)}(x') \frac{\partial \gamma_1(x')}{\partial x_m} - \alpha_{i3}^{(1)}(x') \right], \quad i, j = 1, 2.$$

Тогда система (32) будет переписана в виде:

$$A_{i1}(x') \frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \Big|_{x_3=\gamma_1(x')} + A_{i2}(x') \frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \Big|_{x_3=\gamma_2(x')} = F_i(x'), \quad i = 1, 2, \tag{33}$$

где правые части системы (30) имеют вид:

$$\begin{aligned}
F_i(x') &= - \sum_{j=1}^2 \sum_{m=1}^2 \alpha_{ij}^{(m)}(x') \frac{\partial u(x', \gamma_m(x'))}{\partial x_j} + \\
&\quad + \alpha_i^{(1)}(x') u(x', \gamma_1(x')) + \alpha_i^{(2)}(x') u(x', \gamma_2(x')), \tag{34}
\end{aligned}$$

$x' \in S, i = 1, 2.$

Мы приведем систему (33) к нормальному виду. Для этого мы требуем, чтобы определитель системы был не равен нулю:

$$\Delta(x') = \begin{vmatrix} A_{11}(x') & A_{12}(x') \\ A_{21}(x') & A_{22}(x') \end{vmatrix} \neq 0. \tag{35}$$

Если коэффициенты  $\alpha_{ij}^{(k)}(x')$ ,  $i, j, k = 1, 2$ , и уравнения границ  $\gamma_1(x')$  и  $\gamma_2(x')$  удовлетворяют условию (35), тогда по формулам Крамера имеем:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \Big|_{x_3=\gamma_1(x')} &= \frac{1}{\Delta(x')} \begin{vmatrix} F_1(x') & A_{12}(x') \\ F_2(x') & A_{22}(x') \end{vmatrix}, \\
\frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \Big|_{x_3=\gamma_2(x')} &= \frac{1}{\Delta(x')} \begin{vmatrix} A_{11}(x') & F_1(x') \\ A_{21}(x') & F_2(x') \end{vmatrix}. \tag{36}
\end{aligned}$$

Так как определитель  $\Delta(x')$  не зависит от неизвестной функции и ее производных, а лишь от граничных значений неизвестной функции

$u(x', \gamma_k(x')) = u|_{\Gamma_k}$ ,  $k = 1, 2$ , и их производных  $\frac{\partial u|_{\Gamma_k}}{\partial x_j}$  ( $k, j=1, 2$ ), то решение (36) линейной системы (35) имеет форму линейного функционала:

$$\frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \Big|_{x_3=\gamma_k(x')} = \Phi_k \left( u|_{\Gamma_1}, u|_{\Gamma_2}, \frac{\partial u|_{\Gamma_1}}{\partial x_1}, \frac{\partial u|_{\Gamma_1}}{\partial x_2}, \frac{\partial u|_{\Gamma_2}}{\partial x_1}, \frac{\partial u|_{\Gamma_2}}{\partial x_2} \right), \quad (37)$$

$$k = 1, 2.$$

Вернемся к регулярным граничным условиям (27) и подставим в них выражения (31) для производных  $\frac{\partial u(x)}{\partial x_j} \Big|_{x_3=\gamma_k(x')}$ ,  $j, k = 1, 2$ :

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^3 \left( \beta_{ij}^{(1)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3=\gamma_1(\xi')} + \beta_{ij}^{(2)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_j} \Big|_{\xi_3=\gamma_2(\xi')} \right) = \\ & = \sum_{j=1}^2 \sum_{m=1}^2 \beta_{ij}^{(m)}(\xi') \left( \frac{\partial u(\xi', \gamma_m(\xi'))}{\partial \xi_j} - \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_3} \Big|_{\xi_3=\gamma_m(\xi')} \frac{\partial \gamma_m(\xi')}{\partial \xi_j} \right) + \\ & \quad + \beta_{i3}^{(1)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_3} \Big|_{\xi_3=\gamma_1(\xi')} + \beta_{i3}^{(2)}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_3} \Big|_{\xi_3=\gamma_2(\xi')} = \\ & = - \int_S \frac{1}{2\pi|x'-\xi|^2} \left[ \sum_{m=1}^2 \alpha_i^{(m)}(x') u(x', \gamma_m(x')) \right] \frac{dx'}{\cos(\nu_x, x_3)} + \dots, \\ & \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (38)$$

Сгруппируем слагаемые и приведем соотношения (38) к виду:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_3} \Big|_{\xi_3=\gamma_1(\xi')} \left[ \sum_{m=1}^2 \beta_{im}^{(1)}(\xi') \frac{\partial \gamma_1(\xi')}{\partial \xi_m} - \beta_{i3}^{(1)}(\xi') \right] + \\ & + \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_3} \Big|_{\xi_3=\gamma_2(\xi')} \left[ \sum_{m=1}^2 \beta_{im}^{(2)}(\xi') \frac{\partial \gamma_2(\xi')}{\partial \xi_m} - \beta_{i3}^{(2)}(\xi') \right] = \\ & = \sum_{j=1}^2 \left[ \beta_{ij}^{(1)}(\xi') \frac{\partial u(\xi', \gamma_1(\xi'))}{\partial \xi_j} + \beta_{ij}^{(2)}(\xi') \frac{\partial u(\xi', \gamma_2(\xi'))}{\partial \xi_j} \right] + \\ & + \int_S \frac{dx'}{2\pi|x'-\xi|^2 \cos(\nu_x, x_3)} \sum_{m=1}^2 \alpha_i^{(m)}(x') u(x', \gamma_m(x')) + \dots, \\ & \quad \xi \in \Gamma, \xi' \in S, i = 1, 2. \end{aligned} \quad (39)$$

Слагаемые в (39) - либо со слабо сингулярным либо с регулярным ядром.

Введем обозначения:

$$C_{ij}(\xi') = \left[ \sum_{m=1}^2 \beta_{im}^{(j)}(\xi') \frac{\partial \gamma_j(\xi')}{\partial \xi_m} - \beta_{i3}^{(j)}(\xi') \right], \quad i, j = 1, 2,$$

$$B_i(\xi') = \sum_{j=1}^2 \sum_{m=1}^2 \beta_{ij}^{(m)}(\xi') \frac{\partial u(\xi', \gamma_m(\xi'))}{\partial \xi_j} + \\ + \int_S \frac{dx'}{2\pi|x'-\xi'|^2 \cos(\nu_{x', x_3})} \sum_{m=1}^2 \alpha_i^{(m)}(x') u(x', \gamma_m(x')) + \dots, \\ \xi' \in S, i = 1, 2.$$

Тогда система (39) может быть записана в виде:

$$C_{i1}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_3} \Big|_{\xi_3=\gamma_1(\xi')} + C_{i2}(\xi') \frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_3} \Big|_{\xi_3=\gamma_2(\xi')} = B_i(\xi'), i = 1, 2. \quad (40)$$

Так как в многоточие входят слагаемые интегралы, содержащие производные  $\frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_3} \Big|_{\xi_3=\gamma_k(\xi')}$ ,  $k = 1, 2$ , под интегралом, а также граничные значения  $u \Big|_{\Gamma_k} = u(\xi', \gamma_k(\xi'))$  искомого решения  $u(x)$  на поверхностях  $\Gamma_k, k = 1, 2$ ,

и производные граничных значений  $\frac{\partial u \Big|_{\Gamma_k}}{\partial \xi_j} = \frac{\partial u(\xi', \gamma_k(\xi'))}{\partial \xi_j}$ ,  $j = 1, 2, k = 1, 2$ ,

то

$$B_k = B_k \left( u \Big|_{\Gamma_1}, u \Big|_{\Gamma_2}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_1}}{\partial x_1}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_1}}{\partial x_2}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_2}}{\partial x_1}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_2}}{\partial x_2}, \frac{\partial u}{\partial x_3} \Big|_{\Gamma_1}, \frac{\partial u}{\partial x_3} \Big|_{\Gamma_2} \right)$$

(тогда система (40) представляет собой систему интегро-дифференциальных уравнений Фредгольма второго рода относительно  $\frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_3} \Big|_{\xi_3=\gamma_k(\xi')}$ ,  $k = 1, 2$ , которая имеет единственное решение в виде:

$$\frac{\partial u(\xi)}{\partial \xi_3} \Big|_{\xi_3=\gamma_k(\xi')} = \Psi_k \left( u \Big|_{\Gamma_1}, u \Big|_{\Gamma_2}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_1}}{\partial \xi_1}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_2}}{\partial \xi_1}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_1}}{\partial \xi_2}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_2}}{\partial \xi_2} \right),$$

Теперь давайте подставим выражения (37) для  $\frac{\partial u(x)}{\partial x_3} \Big|_{x_3=\gamma_k(x')}$ ,  $k = 1, 2$ , в систему (40):

$$\sum_{i=1}^2 C_{kj} \Phi_j \left( u \Big|_{\Gamma_1}, u \Big|_{\Gamma_2}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_1}}{\partial x_1}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_1}}{\partial x_2}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_2}}{\partial x_1}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_2}}{\partial x_2} \right) = \\ B_k \left( u \Big|_{\Gamma_1}, u \Big|_{\Gamma_2}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_1}}{\partial x_1}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_1}}{\partial x_2}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_2}}{\partial x_1}, \frac{\partial u \Big|_{\Gamma_2}}{\partial x_2}, \Phi_1, \Phi_2 \right), \\ k = 1, 2. \quad (41)$$

Итак, мы получаем, что правые части (41) есть некоторые линейные функционалы только граничных значений  $(u(x', \gamma_k(x')))$ ,  $k = 1, 2$ ) неиз-

вестной  $u(x)$  и их производных  $\frac{\partial u(x', \gamma_k(x'))}{\partial x_i}$  ( $k, i = 1, 2$ ):

$$B_k(u|_{\Gamma_1}, u|_{\Gamma_2}, \frac{\partial u|_{\Gamma_1}}{\partial x_1}, \frac{\partial u|_{\Gamma_1}}{\partial x_2}, \frac{\partial u|_{\Gamma_2}}{\partial x_1}, \frac{\partial u|_{\Gamma_2}}{\partial x_2}, \Phi_1, \Phi_2) = \Omega_k(u|_{\Gamma_1}, u|_{\Gamma_2}, \frac{\partial u|_{\Gamma_1}}{\partial x_1}, \frac{\partial u|_{\Gamma_1}}{\partial x_2}, \frac{\partial u|_{\Gamma_2}}{\partial x_1}, \frac{\partial u|_{\Gamma_2}}{\partial x_2})$$

и мы получаем систему из двух интегро-дифференциальных уравнений Фредгольма 2-го рода относительно неизвестных  $u|_{\Gamma_1}, u|_{\Gamma_2}$ :

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^2 C_{kj} \Phi_j(u|_{\Gamma_1}, u|_{\Gamma_2}, \frac{\partial u|_{\Gamma_1}}{\partial x_1}, \frac{\partial u|_{\Gamma_1}}{\partial x_2}, \frac{\partial u|_{\Gamma_2}}{\partial x_1}, \frac{\partial u|_{\Gamma_2}}{\partial x_2}) = \\ & = \Omega_k(u|_{\Gamma_1}, u|_{\Gamma_2}, \frac{\partial u|_{\Gamma_1}}{\partial x_1}, \frac{\partial u|_{\Gamma_1}}{\partial x_2}, \frac{\partial u|_{\Gamma_2}}{\partial x_1}, \frac{\partial u|_{\Gamma_2}}{\partial x_2}), \quad k = 1, 2. \end{aligned} \quad (42)$$

Таким образом, мы пришли к 2-мерной системе линейных интегро-дифференциальных уравнений Фредгольма 2-го рода 1-го порядка с граничными условиями Дирихле (3) на границе 2-мерной области  $S$ . Так как эта граница одномерная, то это условие Дирихле не ограничивает общности, так как его коразмерность на две единицы меньше размерности области  $D$ .

Таким образом, нами установлена

**Теорема 4.** При условиях теоремы 3, если справедливы условия (36) и система (42) однозначно разрешима, то краевая задача (1)-(2) сводится к двумерной системе линейных интегро-дифференциальных уравнений Фредгольма 2-го рода (42), к которой примыкает условие Дирихле (3) на границе  $\partial S = \bar{S} \setminus S$ .

Таким образом, установлена следующая

**Теорема 5.** При условиях теоремы 4 с учетом ограничения (3) краевая задача (1), (2) является Фредгольмовой.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Трикоми Ф.Д. Дифференциальные уравнения, М.: Изд. Иностран. Лит., 1962, 352 с.
2. Петровский И.Г. Лекции об уравнениях в частных производных, М.-Л.: ГИТТЛ, 1961, 400 с.
3. Соболев С.Л. Уравнения математической физики, М.: Наука, 1992, 432 с.
4. Mustafayeva Y.Y., Aliyev N.A. New Method of Solvability of a Three-dimensional Laplace Equation with Nonlocal Boundary Conditions. Journal of Mathematical Physics, Analysis, Geometry, Kharkov, 2016, vol. 12, No. 3, pp. 185-204.
5. Мустафаева Е.Ю., Алиев Н.А. Об одном методе исследования задачи Стеклова для 3-мерного уравнения Лапласа с нелокальными граничными условиями, Вестник Томского Гос. Университета, 2016, №6(44), сс.19-33.
6. Бицадзе А.В. Краевые задачи для уравнений 2-го порядка эллиптического типа
7. Владимиров В.С. Уравнения математической физики М.: Мир, 1981, 512 с.



# PARAMETRDƏN ASILI OLAN QEYRİ-LOKAL SƏRHƏD ŞƏRTLİ ÜÇÖLÇÜLÜ HELMHOLTZ TƏNLIYİNİN BİR HƏLL ÜSULU

Y.Y.MUSTAFAYEVA, N.A.ƏLİYEV

## XÜLASƏ

İş parameter asılı olan qeyri-lokal sərhəd şərtli üçölçülü Helmholtz tənliyinin bir həll üsulunun öyrənilməsinə həsr olunmuşdur. Helmholtz tənliyinin fundamental həllinin əsasında əsas münasibətlər alınır. Bundan əlavə, zəruri şərtlərdə olan sinqulyar inteqrallar çoxölçülüdür. Ona görə də bu sinqulyarlıqların requlyarizasiyası birölçülü sinqulyar inteqrallar requlyarizasiyasından daha çətindir və özünəməxsus sxemaya görə aparılır.

**Açar sözlər:** qeyri-lokal sərhəd şərtləri, üçölçülü Helmholtz tənliyi, çoxölçülü sinqulyar inteqral, fundamental həlli, zəruri şərtlər, requlyarizasiya, Fredholm luq.

## ONE METHOD OF INVESTIGATION OF THE SOLUTION OF THREE-DIMENSIONAL HELMGOLZ EQUATION WITH NON-LOCAL BOUNDARY CONDITIONS DEPENDING ON THE PARAMETER

Y.Y.MUSTAFAYEVA, N.A.ALIEV

## SUMMARY

The present work is devoted to the study of solutions of boundary value problems with nonlocal boundary conditions depending on a parameter for the three-dimensional Helmholtz equation. Based on the well-known fundamental solution of the Helmholtz equation, the basic relations are obtained that give us a complete system of necessary conditions for the solvability of the boundary value problem. Some of these conditions contain singularities the regularization of which is difficult and is carried out according to a peculiar scheme.

**Keywords:** three-dimensional Helmholtz equation, nonlocal boundary conditions, necessary conditions, fundamental solution, singularity, regularization, Fredholm property.

**АНАЛИТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ РЕШЕНИЯ ОДНОЙ  
СМЕШАННОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ  
С ПОСТОЯННЫМИ КОЭФФИЦИЕНТАМИ  
СО СМЕЩЕНИЕМ ВРЕМЕНИ В ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЯХ**

**Х.И.АХМЕДОВ**

*Бакинский Государственный Университет*  
*hikmatahmadov@yahoo.com*

*При минимальных условиях на начальные данные, доказывается однозначная разрешимость смешанной задачи для параболического уравнения с постоянными коэффициентами со смещением времени, с нелокальными и несамосопряженными граничными условиями и получено явное аналитическое представление для решения задачи.*

**Ключевые слова:** смещение по времени, смешанная задача, вычетный метод.

**1. Постановка задачи.** Пусть

$$L\left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial t}\right)u(x, t) \equiv au_{xx}(x, t) + bu_x(x, t) + cu(x, t) - u_t(x, t),$$

$$l_j u(x, t) \equiv u(x, t + (1 - j)\omega) + \alpha_j u(1 - x, t + j\omega), \quad j = 0, 1,$$

и

$$l_j u(x, t) \equiv a_{j-2} u_x^{(j-2)}(x, t) + b_{j-2} u_x^{(j-2)}(1 - x, t), \quad j = 2, 3,$$

где  $a, b, c, \omega, \alpha_j, a_j, b_j$  ( $j = 0, 1$ ) – вещественные постоянные,  $a > 0$ ,  $\omega > 0$ ,  $\alpha_0, \alpha_1 \neq 0$ .

В полуполосе  $\Pi = \{(x, t) : 0 < x < 1, t > 0\}$  рассматривается смешанная задача

$$Lu(x, t) = 0, \quad (x, t) \in \Pi, \quad (1)$$

$$u(x, 0) = \varphi(x), \quad 0 < x < 1, \quad (2)$$

$$l_j u(x, t) \Big|_{x=0} = 0, \quad t > 0, \quad j = 0, 1, \quad (3)$$

$$l_j u(x, t) \Big|_{x=0} = 0, \quad 0 < t \leq \omega, \quad j = 2, 3, \quad (4)$$

где  $\varphi(x)$  – заданная, а  $u(x, t)$  – искомая функция.

Под решением задачи (1)-(4) будем подразумевать функцию  $u(x, t)$ , которая удовлетворяет следующим условиям:

$$1) u(x,t) \in C^{2,1}(\Pi) \cap C(0 < x < 1, t \geq 0); \int_0^t u(x,\tau) d\tau \in C(0 \leq x \leq 1, t \geq 0);$$

$$2) l_j u(x,t) \in C(0 \leq x < 1, t > 0), \quad j = 0, 1;$$

$$3) l_j u(x,t) \in C(0 \leq x < 1, 0 < t \leq \omega), \quad j = 2, 3;$$

4)  $u(x,t)$  удовлетворяет равенствам (1)-(4) в обычном смысле.

В работах [3]-[7] рассмотрены задачи для уравнений с отклоняющимися аргументами, а также задачи для уравнения теплопроводности, в которых вместо краевых условий ставятся функциональные условия. Смешанная задача для уравнения теплопроводности с отклонением аргумента в граничных условиях рассмотрена в работе [8], [9].

**2. Единственность решения.** Задачу

$$L\left(\frac{d}{dx}, \mu^2\right)y(x,\mu) = 0, \quad l_j y(x,\mu)|_{x=0} = 0, \quad j = 2, 3 \quad (5)$$

с комплексным параметром  $\mu$  назовем первой спектральной задачей и отметим некоторые известные [1], [2] и легко доказываемые факты относительно этой задачи.

Пусть коэффициенты уравнения спектральной задачи (5) удовлетворяют условию  $b^2 - ac = 0$ .

Если  $a_0 b_1 + b_0 a_1 \neq 0$ , то при всех комплексных значениях  $\mu$ , не принадлежащих множеству

$$S = \left\{ 0: \sqrt{av}\pi i + \frac{\sqrt{a}}{2} \left[ \ln \left| \frac{n}{m} \right| + i \left( \pi + \arg \frac{n}{m} \right) \right] + O\left(\frac{1}{v}\right), |v| \rightarrow \infty \right\},$$

где  $n = \frac{a_0 b_1 + b_0 a_1 e^{-\frac{b}{2a}}}{\sqrt{a}}$ ,  $m = \frac{a_1 b_0 + a_0 b_1 e^{-\frac{b}{2a}}}{\sqrt{a}}$ , существует функция Грина

$G_1(x, \xi, \mu)$  задачи (5), аналитическая по  $\mu$  всюду, кроме точек множества  $S$ , которые являются ее полюсами.

Перенумеровывая точки из  $S$  в порядке возрастания их модулей, с учетом их кратности, обозначим:  $S = \{\mu_\nu; \nu = 1, 2, \dots\}$ ,  $|\mu_1| \leq |\mu_2| \leq \dots$ ,  $\mu_\nu$  имеет кратности  $\chi_\nu$ , где  $\chi_\nu = 1$  или  $\chi_\nu = 2$ . Ясно, что  $|\mu_\nu| \rightarrow \infty$  ( $\nu \rightarrow \infty$ ), существуют  $h, \delta > 0$ , такие, что

$$-h < \operatorname{Re} \mu_\nu < h, \quad |\mu_{\nu+1} - \mu_\nu| > 2\delta \quad (\nu = 1, 2, \dots). \quad (6)$$

Вне  $\delta$ -окрестностей ( $\delta > 0$ ) точек  $\mu_\nu$ , справедливы оценки

$$\left| \frac{\partial^k G_1(x, \xi, \mu)}{\partial x^k} \right| \leq C |\mu|^{k-1}, \quad C > 0, \quad k = 0, 1, 2 \quad (7)$$

при  $f(x) \in C[0, 1]$

$$L\left(\frac{d}{dx}, \mu^2\right) \int_0^1 G_1(x, \xi, \mu) f(\xi) d\xi = -f(x) \quad (8)$$

$$l_j G_1(x, \xi, \mu) \Big|_{x=0} = 0, \quad j = 2, 3.$$

Для любой функции  $f(x) \in C^2[0, 1]$ ,  $l_j f \Big|_{x=0} = 0$ ,  $j = 2, 3$ , имеет место равенство

$$\int_0^1 G_1(x, \xi, \mu) f(\xi) d\xi = \frac{f(x)}{\mu^2} + \frac{1}{\mu^2} \int_0^1 G_1(x, \xi, \mu) (af'' + bf' + cf) d\xi. \quad (9)$$

Примем следующие обозначения:

Пусть  $d > 0$ ,  $r > 0$  - некоторые числа,  $z$  - комплексное переменное,  $L_d = \{z : \operatorname{Re} z^2 = d\}$  - гипербола с ветвями  $L_d^+ = \{z : \operatorname{Re} z^2 = d, \pm \operatorname{Re} z > 0\}$ ,  $\Omega_r = \{z : |z| = r\}$ .

Введем еще контуры (ломанные)

$$\begin{aligned} \hat{L}_d = & \left\{ z : \pm z = r e^{-\frac{3\pi i}{8}}, \sigma \in \left[ 2d\sqrt{1+\sqrt{2}}, \infty \right) \right\} \cup \\ & \cup \left\{ z : \pm z = d(1+i\eta), \eta \in [-1-\sqrt{2}, 1+\sqrt{2}] \right\} \cup \\ & \cup \left\{ z : \pm z = \sigma e^{\frac{3\pi i}{8}}, \sigma \in \left[ 2d\sqrt{1+\sqrt{2}}, \infty \right) \right\}. \end{aligned}$$

Пусть  $\{r_n\}$  - последовательности положительных чисел таких, что  $0 < r_1 < r_2 < \dots < r_n < \dots$ ,  $\lim_{n \rightarrow \infty} r_n = \infty$ , и окружности  $\Omega_{r_n} = \{\mu : |\mu - \mu_n| = r_n\}$  не пересекает  $\delta > 0$  окрестности точек  $\mu_n \in S$ . Пользуясь схемой вычетного метода [1] для обычной задачи (задачи без отклонения времени) (1), (2), (4) доказывается, следующая теорема.

**Теорема 1.** Пусть  $m \neq 0$ ,  $n \neq 0$ ,  $\varphi(x) \in C^2[0, 1]$ ,

$l_j \varphi(x) \Big|_{x=0} = 0$ , ( $j = 2, 3$ ). Тогда задача (1), (2), (4) имеет единственное решение, и оно представляется формулой

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \varphi(x) + \frac{1}{\pi i} \int_{\hat{L}_d^+} \frac{e^{\mu^2 t}}{\mu} d\mu \times \\ & \times \int_0^1 G_1(x, \xi, \mu) [a\varphi''(\xi_-) + b\varphi'(\xi) + c\varphi(\xi)] d\xi \end{aligned} \quad (10)$$

при  $0 \leq x \leq 1$ ,  $0 < t \leq \omega$ , где  $h$  число из (6). Из этой теоремы следует справедливость следующего утверждения.

**Теорема 2.** При условиях теоремы 1, задача (1)-(4) не может иметь более одного решения.

**3. Существование и представление решения.** Рассмотрим еще одну спектральную задачу:

$$\begin{aligned} L\left(\frac{d}{dx}, \lambda^2\right)z(x, \lambda) &= 0 \\ z(0, \lambda) &= z(1, \lambda) = 0 \end{aligned} \quad (11)$$

с комплексным параметром  $\lambda$ . Известно [2], что оно имеет функцию Грина  $G_2(x, \xi, \lambda)$ , аналитическую по  $\lambda$  всюду, кроме точек  $\lambda_k = \sqrt{a}\pi k i$  ( $k = \pm 1, \pm 2, \dots$ ), которые являются ее простыми полюсами.

Введем функцию

$$\begin{aligned} Q(x, \lambda, p(\lambda), q(\lambda)) &= \left[ e^{\frac{b}{2a} \frac{\lambda}{\sqrt{a}} x} - e^{-\frac{b}{2a} \frac{\lambda}{\sqrt{a}} x} \right]^{-1} \times \\ &\times \left\{ \left[ p(\lambda) e^{\frac{b}{2a} \frac{\lambda}{\sqrt{a}} x} - q(\lambda) \right] e^{\left( -\frac{b}{2a} + \frac{\lambda}{\sqrt{a}} \right) x} + \right. \\ &\left. + \left[ q(\lambda) - p(\lambda) e^{-\frac{b}{2a} \frac{\lambda}{\sqrt{a}} x} \right] e^{\left( -\frac{b}{2a} - \frac{\lambda}{\sqrt{a}} \right) x} \right\} \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$p(\lambda) = \left[ \alpha_1 e^{2\lambda^2 \omega} - \alpha_0 \right]^{-1} \left[ A(\lambda) \alpha_1 e^{\lambda^2 \omega} - \alpha_0 B(\lambda) \right], \quad (13)$$

$$q(\lambda) = \left[ \alpha_1 e^{2\lambda^2 \omega} - \alpha_0 \right]^{-1} \left[ B(\lambda) e^{\lambda^2 \omega} - A(\lambda) \right], \quad (14)$$

$$A(\lambda) = e^{\lambda^2 \omega} \int_0^{\omega} e^{-\lambda^2 t} u(0, \tau) d\tau, \quad (15)$$

$$B(\lambda) = \alpha_1 e^{\lambda^2 \omega} \int_0^{\omega} e^{-\lambda^2 t} u(1, \tau) d\tau \quad (16)$$

$u(s, t)$  – граничные значения решения на частях  $\{(s, t) : 0 < s < 1, t > 0\}$ ,

которые определяются из (10). Зафиксируем  $C_1 > \max\left(0, \ln \left| \frac{\alpha_0}{\alpha_1} \right| \right)$ . Доказыва-

ется

**Теорема 3.** Пусть  $m \neq 0$ ,  $n \neq 0$ ,  $\varphi(x) \in C^2[0, 1]$ ,  $l_j \varphi(x)|_{x=0} = 0$ , ( $j=0, 1$ ).

Тогда задача (1)-(4) имеет классическое решение и оно представляется формулой

$$u(x, t) = \varphi(x) + \frac{1}{\pi \sqrt{-1}} \int_{L_{C_1}^+} \lambda^{-1} e^{\lambda^2 t} \times$$

$$\left[ \int_0^1 G_2(x, \xi, \lambda) (a \varphi'' + b \varphi' + c \varphi) d\xi - Q(x, \lambda, \varphi(0), \varphi(1)) \right] d\lambda + \quad (17)$$

$$+ \frac{1}{\pi \sqrt{-1}} \int_{L_{C_1}^+} \lambda e^{\lambda^2 t} Q(x, \lambda, p(\lambda), q(\lambda)) d\lambda.$$

**Замечание 1.** Объединяя теоремы 2 и 3, мы получаем окончательное утверждение: при условиях теоремы 2 и 3 основная задача (1)-(4) имеет единственное классическое решение и оно представляется формулой (17).

**Замечание 2.** В данной работе мы рассматривали тот случай, когда коэффициенты уравнения (1) удовлетворяет условию  $b^2 - ac = 0$ . Аналогично рассматриваются и условия, когда  $b^2 - ac < 0$  и  $b^2 - ac > 0$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Расулов М.Л. Метод контурного интеграла. М.: Наука, 1964, 462 с.
2. Наймарк М.А. Линейные дифференциальные операторы. М.: Наука, 1969, 526 с.
3. Зарубин А.Н. Уравнения смешанного типа с запаздывающим аргументом. Учебное пособие (ОГУ, Орел, 1997).
4. Подгорнов В.В. Первая краевая задача для квазилинейных параболических уравнений с запаздывающим аргументом. Дифференц. уравнения 3, № 8, 1967, с. 1334-1341.
5. Камынин Л.И. Об одной краевой задаче теории теплопроводности с неклассическими граничными условиями. Журнал вычислительной математики и математической физики, 4, № 6, 1964, с. 1006-1024.
6. Ионкин Н.И. Решение одной краевой задачи теории теплопроводности с неклассическим краевым условием. Дифференц. уравнения 13, № 2, 1997, с. 294-304.
7. Wu I. Theory and applications of partial functional differential equations. New York, Springer, 1996, 119 p.
8. Мамедов Ю.А., Ахмедов Х.И. Об одной смешанной задаче для уравнения теплопроводности с опережением времени в граничных условиях. Известия Вузов. Математика, 2020, № 3, с. 29-47
9. Мамедов Ю.А. Математическая постановка и решение одной задачи теплопроводности, при частично детерминированном граничном режиме. Вестник БГУ, 3, 2005, с. 5-11.

# SƏRHƏD ŞƏRTLƏRİNDƏ ZAMANA GÖRƏ GECİKMƏ OLAN HALDA SABİT ƏMSALLI PARABOLİK TİP TƏNLİK ÜÇÜN QARIŞIQ MƏSƏLƏNİN HƏLLİNİN ANALİTİK AYRILIŞI

H.İ.ƏHMƏDOV

## XÜLASƏ

Sərhəd şərtlərində zamana görə gecikmə olan halda dinamik proseslərin tədqiqi və öyrənilməsi xeyli maraqlıdır və həm də mühüm tətbiqi əhəmiyyətə malikdir. Məqalədə sərhədin bir hissəsində temperaturu digər hissəsinin daha əvvəlki vaxtda temperaturundan asılı olduğu bir dinamik prosesi modelləşdirən qarışıq məsələ akademik M.L.Rəsulovun çıxıqlar və kontur inteqralı üsullarının kombinasiyasından istifadə etməklə həll olunur. Qarışıq məsələnin həllinin varlığı və yeganəliyi isbat olunur və həll üçün aşkar analitik ifadə tapılır.

**Açar sözlər:** qarışıq məsələ, zamana görə sürüşmə, çıxıqlar üsulu.

# ANALYTICAL REPRESENTATION OF THE SOLUTION TO A MIXED PROBLEM FOR A PARABOLIC EQUATION WITH CONSTANT COEFFICIENTS AND TIME SHIFT IN BOUNDARY CONDITIONS

H.I.AKHMEDOV

## SUMMARY

Under minimal conditions on the initial data, we prove the unique solvability of the mixed problem for a parabolic equation with constant coefficients and time shift in nonlocal and non-self-adjoint boundary conditions and obtain an explicit analytical representation for the solution to the problem.

**Key words:** time shift, mixed problem, residue method.

## İNFORMATİKA

UDK 622.276.1/4.001.57

TÜKƏNMƏ REJİMLİ QEYRİ-BİRCİNS QAZKONDENSAT  
LAYININ SÜZÜLMƏ-TUTUM PARAMETRLƏRİNİN  
İDENTİFİKASİYALI TƏYİNİ

M.S.XƏLİLOV

*Bakı Dövlət Universiteti**khalilov\_mubariz@mail.ru*

*Təqdim olunan işdə tükənmə rejimli qeyri-bircins qazkondensat layının süzülmə-tutum parametrlərinin identifikasiyalı təyini tədqiq olunmuşdur.*

**Açar sözlər:** qeyri-bircins, qaz-kondensat, lay, identifikasiya, parameter.

Karbohidrogen yataqlarının məhsuldar horizontları, bir qayda olaraq, mürəkkəb bir quruluşa malikdir və onun kollektor xassələri layın həm kəsilişi üzrə həm də onun uzunluq sahəsi üzrə dəyişir. Layın işlənilməsinin texnoloji göstəricilərinin proqnozlaşdırılması onun qeyri-bircinsliliyindən kəskin asılıdır. Buna görə də onların mümkün təyini məsələsi karbohidrogen yataqların işlənməsi nəzəriyyəsi və praktikasının vacib problemlərindəndir.

Fərz edək ki, keçirməz səthlərlə məhdudlanan  $R_k$  radiuslu  $H$  hündürlüklü qeyri-bircins lay onu tam açan  $r_c$  radiuslu hasilat quyusu  $p_c(z, t)$  quyudibi təzyiqi ilə işləyir. İşlənilməyə qədər layın başlanğıc təzyiqi və kondensatla-doyumluluğu uyğun olaraq  $p_0, S_{k0}$  qəbul edilir. Lay üzrə  $p(r, z, t)$  təzyiqinin və digər fiziki parametrlərin tapılması tələb olunur.

Məsələ aşağıdakı tənliklər sisteminin həllinə gətirilir [9-13]:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ rk(r, z) \left( \frac{F_z(s_z) p \beta [1 - c(p) \bar{\gamma}(p)]}{\mu_z(p) z(p) p_{at}} + \frac{F_k(s_k) S_k(p)}{\mu_k(p) a_k(p)} \right) \frac{\partial p}{\partial r} \right\} +$$

$$+ \frac{\partial}{\partial z} \left\{ k(r, z) \left( \frac{k F_z(s_z) p \beta [1 - c(p) \bar{\gamma}(p)]}{\mu_z(p) z(p) p_{at}} + \frac{k F_k(s_k) S_k(p)}{\mu_k(p) a_k(p)} \right) \frac{\partial p}{\partial z} \right\} =$$



$$= \frac{\partial}{\partial t} \left\{ m \left( \frac{(1-s_k)p\beta}{z(p)p_{at}} [1-c(p)\bar{\gamma}(p)] + s_k \frac{S_k(p)}{a_k(p)} \right) \right\}, \quad (r, z) \in D, \quad t \in (0, T), \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ rk(r, z) \left( \frac{F_k(s_k)}{\mu_k(p)a_k(p)} + \frac{F_z(s_z)c(p)\beta}{\mu_z(p)z(p)p_{at}} \right) \frac{\partial p}{\partial r} \right\} + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left\{ k(r, z) \left( \frac{kF_k(\rho_k)}{\mu_k(p)a_k(p)} + \frac{kF_z(\rho_k)pc(p)\beta}{\mu_z(p)z(p)p_{at}} \right) \frac{\partial p}{\partial z} \right\} = \\ & = \frac{\partial}{\partial t} \left\{ m \left( \frac{s_k}{a_k(p)} + (1-s_k) \frac{p\beta c(p)}{z(p)p_{at}} \right) \right\}, \quad (r, z) \in D, \quad t \in (0, T), \quad (2) \end{aligned}$$

$$p(r, z, t) \Big|_{t=0} = p_0, \quad s_k(r, z, t) \Big|_{t=0} = 0, \quad (r, z) \in D, \quad (3)$$

$$p(r, z, t) \Big|_{r=r_c} = p_c(z, t), \quad t \in (0, T), \quad (4)$$

$$\frac{\partial p(r, z, t)}{\partial r} \Big|_{r=R_k} = 0, \quad \frac{\partial p(r, z, t)}{\partial z} \Big|_{z=0:H} = 0, \quad t \in (0, T), \quad (5)$$

burada  $k(r, z)$  - layın keçiriciliyinin həm en kəsiyi, həm də sahəsi üzrə qeyri-bircinsliliyini təsvir edir. Digər parametrlər isə əvvəlki paragraflardan məlumdur.

$k(r, z)$  -məlum olduqda  $p(x, z, t)$ ,  $s_k(x, z, t)$  həllərinin (1)-(5) şərtləri daxilində tapılması üçün aşağıdakı sonlu fərqlər sxemindən istifadə edilir:

$$\begin{aligned} & e^{-2x_i} \left\{ \frac{1}{\Delta x_i} \left[ k_{i+1/2, j}^n \cdot \Psi_{i+1/2, j}^{n+1} \frac{P_{i+1, j}^{n+1} - P_{i, j}^{n+1}}{\Delta x_{i+1/2}} - k_{i-1/2, j}^n \cdot \Psi_{i-1/2, j}^{n+1} \cdot \frac{P_{i, j}^{n+1} - P_{i-1, j}^{n+1}}{\Delta x_{i-1/2}} \right] \right\} + \\ & + \frac{1}{\Delta z_j} \left[ k_{i, j+1/2}^n \cdot \Psi_{i, j+1/2}^{n+1} \frac{P_{i, j+1}^{n+1} - P_{i, j}^{n+1}}{\Delta z_{j+1/2}} - k_{i, j-1/2}^n \cdot \Psi_{i, j-1/2}^{n+1} \cdot \frac{P_{i, j}^{n+1} - P_{i, j-1}^{n+1}}{\Delta z_{j-1/2}} \right] - \\ & - A_{i, j}^n \left\{ e^{-2x_i} \left[ \frac{1}{\Delta x_i} \left( k_{i+1/2, j}^n \cdot \Phi_{i+1/2, j}^{n+1} \frac{P_{i+1, j}^{n+1} - P_{i, j}^{n+1}}{\Delta x_{i+1/2}} - k_{i-1/2, j}^n \cdot \Phi_{i-1/2, j}^{n+1} \cdot \frac{P_{i, j}^{n+1} - P_{i-1, j}^{n+1}}{\Delta x_{i-1/2}} \right) \right] \right\} + \\ & + \frac{1}{\Delta z_j} \left[ k_{i, j+1/2}^n \cdot \Phi_{i, j+1/2}^{n+1} \frac{P_{i, j+1}^{n+1} - P_{i, j}^{n+1}}{\Delta z_{j+1/2}} - k_{i, j-1/2}^n \cdot \Phi_{i, j-1/2}^{n+1} \cdot \frac{P_{i, j}^{n+1} - P_{i, j-1}^{n+1}}{\Delta z_{j-1/2}} \right] \left\} = \\ & = \left[ (Q'_{i, j}{}^n - A_{i, j}^n M'_{i, j}{}^n) + s_{ki, j} (N'_{i, j}{}^n - A_{i, j}^n B'_{i, j}{}^n) \right] \frac{P_{i, j}^{n+1} - P_{i, j}^n}{\Delta \tau}, \quad (6) \end{aligned}$$

$$e^{-2x_i} \left\{ \frac{1}{\Delta x_i} \left[ k_{i+1/2,j}^n \cdot \Phi_{i+1/2,j}^{n+1} \frac{p_{i+1,j}^{n+1} - p_{i,j}^{n+1}}{\Delta x_{i+1/2}} - k_{i-1/2,j}^n \cdot \Phi_{i-1/2,j}^{n+1} \frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x_{i-1/2}} \right] \right\} +$$

$$+ \frac{1}{\Delta z_j} \left[ k_{i,j+1/2}^n \cdot \Phi_{i,j+1/2}^{n+1} \frac{p_{i,j+1}^{n+1} - p_{i,j}^{n+1}}{\Delta z_{j+1/2}} - k_{i,j-1/2}^n \cdot \Phi_{i,j-1/2}^{n+1} \frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta z_{j-1/2}} \right] -$$

$$- \left[ M_{i,j}^n + s_{ki,j}^n B'_{i,j} \right] \frac{p_{i,j}^{n+1} - p_{i,j}^n}{\Delta \tau} = B_{i,j}^n \frac{s_{ki,j}^{n+1} - s_{ki,j}^n}{\Delta \tau}, \quad (7)$$

$$p_{i,j}^0 = p_{0i,j}, \quad s_{ki,j}^0 = s_{k0} = 0, \quad i = \overline{0, N_x}, \quad j = \overline{0, N_z}, \quad (8)$$

$$p_{0,j}^n = p_{cj}^n, \quad j = \overline{0, N_z}, \quad (9)$$

$$p_{N_x,j}^n = p_{N_x j}^n; \quad p_{i,0}^n = p_{i,1}^n; \quad p_{i,N_z}^n = p_{i,N_z+1}^n; \quad i = \overline{1, N_x}, \quad (10)$$

burada

$$\Psi(p, s_k) = \left[ \frac{F_z(s_z) p \beta [1 - C(p) \gamma(p)]}{\mu_z(p) z(p) p_{at}} + \frac{F_k(s_k) S_k(p)}{\mu_k(p) a_k(p)} \right],$$

$$\Phi(p, s_k) = \left[ \frac{F_z(s_z) p C(p) \beta}{\mu_z(p) z(p) p_{at}} + \frac{F_k(s_k)}{\mu_k(p) a_k(p)} \right],$$

$$B(p) = m \left[ \frac{1}{a_k(p)} - \frac{p \beta c(p)}{z(p) p_{at}} \right], \quad M(p) = m \frac{p \beta c(p)}{z(p) p_{at}},$$

$$N(p) = m \left[ \frac{S_k(p)}{a_k(p)} - \frac{p \beta [1 - c(p) \bar{\gamma}(p)]}{z(p) p_{at}} \right], \quad Q(p) = m \frac{p \beta [1 - c(p) \gamma(p)]}{z(p) p_{at}},$$

$$A(p) = \frac{N(p)}{B(p)}, \quad x = \ln r, \quad x_c = \ln r_c, \quad x_k = \ln R_k,$$

$$(x_i, z_j, t_n) = (x_i, \quad 0 = x_0 < x_1 < \dots < x_{N_x} = L_x,$$

$$z_j, \quad 0 = z_0 < z_1 < \dots < z_{N_z} = L_z, \quad t_n, \quad 0 = t_0 < t_1 < \dots < t_{N_\tau} = T),$$

$$L_x, \quad L_z - \text{layın mütləq ölçüləri}, \quad \Delta \tau = \frac{t_n}{n}, \quad n = 1, 2, 3, \dots, N_\tau,$$

$$x_{i+1/2} = x_i + \frac{1}{2} \Delta x_{i+1/2}, \quad \Delta x_{i+1/2} = x_{i+1} - x_i, \quad i = \overline{1, N_x}, \quad z_{j+1/2} = z_j + \frac{1}{2} \Delta z_{j+1/2},$$

$$\Delta z_{j+1/2} = z_{j+1} - z_j, \quad j = \overline{1, N_z}, \quad \Delta x_i = \frac{1}{2} (\Delta x_{i+1/2} + \Delta x_{i-1/2}), \quad i = \overline{0, N_x};$$

$$x_1 = 0, \quad x_{N_x+1} = x_k, \quad N_{x1} = N_x + 1, \quad \Delta z_j = \frac{1}{2} (\Delta z_{j+1/2} + \Delta z_{j-1/2}),$$

$$j = \overline{0, N_z}; \quad z_1 = 0, \quad z_{N_z+1} = H, \quad N_{z1} = N_z + 1,$$

$$\begin{aligned}\Phi_{i,j}^{n+1} &= C_{1i,j}^{n+1} F_{2i,j}^n + C_{2i,j}^{n+1} F_{ki,j}^n, \quad \Psi_{i,j}^{n+1} = C_{3i,j}^{n+1} F_{aij}^n + C_{4i,j}^{n+1} F_{ki,j}^n, \\ C_{1i,j}^{n+1} &= \frac{p_{i,j}^{n+1} c(p_{i,j}^{n+1}) \beta}{\mu_z(p_{i,j}^{n+1}) z(p_{i,j}^{n+1})}, \quad C_{2i,j}^{n+1} = \frac{1}{\mu_k(p_{i,j}^{n+1}) a_k(p_{i,j}^{n+1})}, \\ C_{3i,j}^{n+1} &= \frac{p_{i,j}^{n+1} [1 - c(p_{i,j}^{n+1}) \bar{\gamma}(p_{i,j}^{n+1})] \beta}{\mu_z(p_{i,j}^{n+1}) z(p_{i,j}^{n+1})}, \quad C_{4i,j}^{n+1} = \frac{S_k(p_{i,j}^{n+1})}{\mu_k(p_{i,j}^{n+1}) a_k(p_{i,j}^{n+1})}.\end{aligned}$$

Layın keçiriciliyinə görə qeyri-bircinsliliyini təyin etmək üçün (1)-(5) tənliklər sisteminə əlavə olaraq

$$2\pi \int_0^H k(x, z) (\Psi(p, \rho_k) + \Phi(p, \rho_k)) \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_{x=x_c} dz = Q_c(t), \quad r = e^x, \quad t \in (0, T), \quad (11)$$

şərti qoşulmalıdır.

(1)-(5), (11) tərs məsələdir və onun effektiv və dayanıqlı həll üsulunun işlənilməsi üçün onu ekvivalent varyasiya məsələsinə çevirmək (transfer etmək) lazımdır. Bu cür yanaşma uyğun tərs məsələni şərti ekstremum məsələsinə, xüsusi halda

$$J(u) = \int_0^T \left[ \int_0^H 2\pi k(x, z) (\Psi(p, \rho_k) + \Phi(p, \rho_k)) \frac{\partial p}{\partial x} \Big|_{x=x_c} dz - Q_c(t) \right]^2 dt \quad (12)$$

funksionalının (1)-(5) şərtləri daxilində minimumuna gətirir.

Praktiki nöqtəyi-nəzərdən lay keçiriciliyinin layın hündürlüyü üzrə (şaqlı kəsiyi üzrə) dəyişməsinin təyini əhəmiyyətli məsələlərdəndir.  $k(r, z)$  parametri üçün

$$k(r, z) = k(z) = k_0 e^{bz/H}, \quad (13)$$

nəzəri asılılığı istifadə edilə bilər [1-9]. Burada  $H$  - məhsuldar layın ümumi hündürlüyü,  $b$  - keçiriciliyin maksimal  $k_{\max}$  qiymətinin onun minimal  $k_0$  qiymətinə nisbətinin loqarifmidir.

(12) funksionalının minimumunun tapılması üçün qradiyentlər üsulundan istifadə edilir.

Təklif olunan hesablama sxemi və algoritmi əsasında ədədi eksperimentlər aparılmışdır. Alınan həllin etalon olaraq etibarlılığını yoxlamaq üçün qazkondensat quyusunun sabit təzyiqlə istismara buraxılmasının düz məsələsinin həllinin tapılmasına baxılmış və nəticədə uyğun tərs məsələ həll edilmişdir.

Düz məsələ aşağıdakı ilkin verilənlər əsasında həll edilmişdir:

$$\begin{aligned}r_c &= 0.1m, \quad R_k = 900m, \quad H = 40m, \quad p_0 = 45MPa, \quad p_c(z, t) = p_k(t) - \delta, \quad \delta = 1,5MPa \\ m &= 0.192, \quad b = 4.38, \quad k_0 = 0.037mkm^2\end{aligned}$$

Qazkondensat sisteminin fiziki xassələrini təsvir edən parametrlərin təzyiqdən və fazalara görə nisbi keçiriciliklərin kondensatla doymadan asılılığı altıncı fəslin ikinci paraqrafında daxil edilən formaya uyğun seçilmişdir.

Hesablama nəticələri cədvəl 1-3-də təqdim edilmişdir. Cədvəl 1-də  $p_c(z,t)$  şərti daxilində keçiriciliyə görə qeyri-bircinslik (13) şəklində seçildikdə  $b$  və  $k_0$ -in konkret qəbul olunmuş qiymətlərində quyunun  $Q_c(t)$  hasilatının işlənilmə zamanından asılılığı gətirilmişdir. İdentifikasiya məsələsi isə  $Q_c(t)$  və  $p_c(z,t)$  verilənlərinə görə qeyd olunan  $b$  və  $k_0$  əmsallarının qiymətlərinin bərpa olunmasına gətirilmişdir.

İdentifikasiya məsələsinin  $b = 4.38$ , və  $k_0 = 0.18 \text{ mkm}^2$  başlanğıc qiymətlərinə uyğun hesablama nəticələri cədvəl 2 -də gətirilmişdir.  $b$  və  $k_0$  -in tapılan hesablama qiymətlərində ilkin verilən məlumatlar əsasında yenidən düz məsələ həll edilmiş və nəticələr cədvəl 3 -də təqdim edilmişdir.

Qeyri-bircins layın identifikasiya olunan parametrlərinin alınan qiymətləri quyunun məhsuldarlığının zamana görə proqnoz məlumatlarının böyük dəqiqliklə dəyişməsini təmin edir. Bu da təklif olunan identifikasiya üsulunun yüksək dəqiqliyini göstərir.

Cədvəl 1

**Quyunun debitinin işlənilmə müddətindən asılılığı**

t, gün	10	100	500	1000	2000
$Q_c(t) \cdot 10^3 \text{ m}^3 / \text{gün}$	941,75	867,65	756,95	683,95	621,7

Cədvəl 2

**$b$  və  $k_0$  parametrlərinin identifikasiyası**

Parametrlər	Dəqiq qiyməti	Hesablanmış qiyməti
$b$	4.38	4.35
$k_0$	0.037	0.0373

Cədvəl 3

**$b$  və  $k_0$  parametrlərinin müxtəlif qiymətlərində quyunun debitinin işlənilmə müddətinə görə dəyişməsi**

İşlənilmə müddəti, gün	$Q_c(t) \cdot 10^3 \text{ m}^3 / \text{gün}$	
	$k_0 = 0.037; b = 4.38$	$k_0 = 0.0374; b = 4.35$
10	941,75	941.42
100	867,65	867.57
500	756,95	756.83
1000	683,95	684.03
2000	621,7	621.54

## Nəticə

Qeyri-bircins qazkondensat layının parametrlərinin təklif olunan identifikasiya üsulu quyunun məhsuldarlığının işlənmə müddətinə görə dəyişməsinin proqnozunda yüksək dəqiqliyi təmin edir.

## ƏDƏBİYYAT

1. Абасов М.Т., Стреков А.С., Эфендиев Г.М. Повышение эффективности ограничения водопритоков в нефтяных скважинах. Баку: Nafta-Press, 2009, 256 с.
2. Азиз Х., Сеттари Э. Математическое моделирование пластовых систем: Пер. с английского. М.: Недра, 1982, 407 с.
3. Ентов В.М., Зазовский А.Ф. Гидродинамика процессов повышения нефтеотдачи. М.: Недра, 1989, 232с.
4. Старковский В.А. Обоснование технологии селективной изоляции притока воды в добывающих скважинах на нефтяных месторождениях композициями на основе щелочных силикатных гелей: Автореферат дис. канд.тех.наук. ОАО “ВНИИнефть”, 2013, 25 с.
5. Фейзуллаев Х.А. Особенности влияния неоднородности коллектора на процесс обработки призабойных зон газоконденсатных скважин “сухим” газом // Изв. НАН Азерб., серия Наук о Земле, 2008, №3, с.43-51
6. Фейзуллаев Х.А., Халилов М.С., Кулиев Э.А., Магеррамов С.Д. Моделирование газового воздействия на газоконденсатный пласт на завершающей стадии разработки // Автоматизация, телемеханизация и связь в нефтяной промышленности. Москва ОАО, ВНИОЭНГ, М., 2018, №8, с.48-52
7. Зайдель Я.М. Исследование методом « частиц в ячейке» процесса переноса химвеществ в неоднородных пластах / Тезисы докладов Всесоюзного семинара “Современные проблемы и математические методы теории фильтрации”. М.: Недра, 1984, с.56-57
8. Feyzullayev Kh.A., Khalilov M.S. Identification of heterogeneous stratum parameters in gas-condensate mixture filtration. 18<sup>th</sup> IFAC CONFERENCE on Technology Culture and International Stability/ Baku 2018, 13-15 september, 51-30(2018) pp.27-30 (Springer.Elsevier)(TomsonRouyer)
9. Яковлев В. В., Калугин А. Ю. Увеличение коэффициента конденсатоизвлечения на газоконденсатных месторождениях при различных режимах разработки на основании математического моделирования//Техника и технологии, 2012, с.42-47
10. Яковлев В. В., Калугин А. Ю. Увеличение коэффициента конденсатоизвлечения на газоконденсатных месторождениях при различных режимах разработки на основании математического моделирования//Техника и технологии, 2012, с.42-47
11. Feyzullayev Kh.A., Khalilov M.S. Identification of heterogeneous stratum parameters in gas-condensate mixture filtration. 18<sup>th</sup> IFAC CONFERENCE on Technology Culture and International Stability/ Baku 2018, 13-15 september, 51-30(2018) pp.27-30 (Springer.Elsevier)(TomsonRouyer)
12. Зайдель Я.М. Исследование методом « частиц в ячейке» процесса переноса химвеществ в неоднородных пластах / Тезисы докладов Всесоюзного семинара “Современные проблемы и математические методы теории фильтрации”. М.: Недра, 1984, с.56-57.

# **ИДЕНТИФИКАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ НЕОДНОРОДНЫХ ГАЗОКОНДЕНСАТНЫХ ПЛАСТОВ В РЕЖИМЕ ИСТОЩЕНИЯ**

**М.С.ХАЛИЛОВ**

## **РЕЗЮМЕ**

В представленной работе исследуется идентификационное определение фильтрационно-емкостных параметров неоднородного газоконденсатного пласта с режимом истощения.

**Ключевые слова:** неоднородность, газоконденсат, пласт, идентификация, параметр.

# **IDENTIFICATION OF PARAMETERS OF INHOMOGENEOUS GAS-CONDENSATE FORMATIONS IN DEPLETION MODE**

**M.S.KHALILOV**

## **SUMMARY**

In the presented work, the identification determination of the reservoir parameters of a heterogeneous gas condensate formation with a depletion mode is investigated.

**Key words:** heterogeneity, gas condensate, reservoir, identification, parameter.

## FİZİKA

COMPENSATION OF LOSSES AT THREE-WAVE  
PARAMETRIC INTERACTION IN METAMATERIALS

R.J.KASUMOVA, N.V.KERIMLI, A.R.AHMADOVA, G.A.SAFAROVA

*Baku State University*  
*renajkasumova@gmail.com*

*An analytical expression is obtained for the amplitude of a wave with negative refraction under the condition of phase matching. It is shown that losses in the metamaterial for the backward wave can be compensated, in addition, it is possible to manipulate these losses. The influence of the value of the input intensities of direct waves at which propagation of an inverse signal wave with a constant amplitude is possible, as well as its amplification in a nonlinear medium, is studied. It is shown that the gain increases with increasing input intensities of two direct waves. For each particular experimental case, it is possible to calculate the optimal values of the parameters, determine the required losses and initial values of the pump wave and the wave at the sum frequency in order to obtain the desired parametric amplification in the metamaterial for a wave with negative refraction.*

**Keywords:** metamaterial, loss compensation, backward wave amplification, constant-intensity approximation.

**PACS:** 42.70.-a Optical parametric oscillators and amplifiers; 42.65.Yj Parametric down conversion and production of entangled photons.

**Introduction**

Since the creation of new artificial structures, that is metamaterials, the losses for a wave with negative refraction remain a serious problem [1]. Similar losses in such constructions are inevitable at the resonance frequency, since in the metamaterial the main effects appear near the frequency resonance, where  $\varepsilon$  and  $\mu$  are simultaneously negative. Hence, there is a weakening of the electromagnetic wave in the metamaterial for principal reasons [2-6]. At present, developments are being made in the direction of weakening losses in metamaterials and in the direction of amplification of the attenuated signal due to losses. One of the solutions was the use of nanoplasmonics achievements [7]. The ability of plasmon nanoparticles to accumulate large electric fields around them allowed the authors to report on overcoming large losses in such structures. A different way of overcoming losses was considered by us, where the effect of losses in metamaterials for the case of four-wave interaction was studied for the constant-intensity approximation [8-9]. The purpose of this

work is to study the effect of losses in metamaterials for the case of three-wave interaction, as well as the possibility of manipulating these losses, determining the role of the input intensities of interacting waves, at which propagation of a wave in a "left-handed" medium with a constant amplitude is possible, as well as its amplification in a similar nonlinear medium. In the constant-field approximation, a theoretical study of the nonlinear optical interaction in such artificial structures has been carried out in a number of papers, of which we mention [3-4]. In the constant-intensity approximation, we investigated the second and third harmonic generation, self-action effects and parametric interaction in metamaterials [10-13], four-wave interaction in metamaterials [9, 14].

## Theory

We are considering the case of a parametric three-wave interaction in a metamaterial at a frequency  $\omega_3$ . We assume that the medium is "left-handed" only for a wave at a difference frequency,  $\omega_2$ ,  $\omega_2 = \omega_1 - \omega_3$ . We assume that the energy fluxes  $S_{1,3}$  of the wave at the sum frequency  $\omega_1$  and the pump waves fall normally onto the left side surface of the metamaterial of length  $l$  and propagate along the positive direction of the  $z$  axis. Hence the transfer of wave energy at the difference frequency, for which the medium is "left-handed," occurs in the opposite direction. A similar consideration can be made in the case of a "left-handed" medium for a wave at the sum frequency, if this is of practical interest. We note that we carried out a detailed study in the constant-intensity approximation of parametric interaction in a metamaterial without taking into account the losses, but for various phase mismatches and initial values of the intensities of the interacting waves for high-frequency and low-frequency pumping [12-13].

In the case under consideration, the usual truncated equations for three interacting waves in a metamaterial take the form by analogy with [12]:

$$\begin{aligned} \frac{dA_1}{dz} + \delta_1 A_1 &= -i\gamma_1 A_2 A_3 e^{-i\Delta z}, \\ \frac{dA_2}{dz} - \delta_2 A_2 &= i\gamma_2 A_1 A_3^* e^{i\Delta z}, \\ \frac{dA_3}{dz} + \delta_3 A_3 &= -i\gamma_3 A_1 A_2^* e^{i\Delta z}. \end{aligned} \quad (1)$$

Here  $A_{1,2,3}$  are the corresponding complex amplitudes of the interacting waves,  $\delta_j$  are the absorption coefficients of the medium at frequencies  $\omega_j$  ( $j = 1-3$ ),

$$\gamma_1 = \frac{8\pi \chi_{eff}^{(2)} \omega_1^2 \varepsilon_1}{k_1 c^2}, \quad \gamma_2 = -\frac{8\pi \chi_{eff}^{(2)} \omega_2^2 \varepsilon_2}{k_2 c^2} = \frac{8\pi \chi_{eff}^{(2)} \omega_2^2 |\varepsilon_2|}{k_2 c^2}, \quad \gamma_3 = \frac{8\pi \chi_{eff}^{(2)} \omega_3^2 \varepsilon_3}{k_3 c^2}$$



are coefficients of nonlinear coupling of waves at the appropriate frequencies,  $\chi_{eff}^{(2)}$  is the effective quadratic susceptibility of the medium,  $\Delta = k_1 - k_2 - k_3$  is the phase detuning between the interacting waves.  $z = 0$  corresponds to the input to the left of the metamaterial. In the second equation, it is taken into account that a metamaterial is considered, in which the values of the dielectric permittivity and magnetic permeability at the difference frequency  $\omega_2$  are simultaneously negative,  $\varepsilon_2 < 0$  and  $\mu_2 < 0$ . In addition, in this equation the minus sign before the loss coefficient  $\delta_2$  is due to the fact that the Poynting vector of the backward wave  $S_2$ , which is opposite to the vectors  $k_{1,2,3}$  and  $S_{1,3}$ , is directed along the negative direction of the  $z$  axis.

The boundary conditions corresponding to the considered wave geometry can be represented by analogy with [12] in the form:

$$A_{1,3}(z = 0) = A_{10,30}, \quad A_2(z = \ell) = A_{2\ell}, \quad (2)$$

$A_{10,30}$  are initial amplitudes of the wave at the sum frequency and pump wave at the input from the left into the nonlinear medium,  $A_{2\ell}$  is the initial amplitude of the wave at the difference frequency  $\omega_2$  at the entrance to the metamaterial on the right,  $z = \ell$ .

To solve the system (1), we apply the constant-intensity approximation,  $I_{1,3}(z) = I_{1,3}(z = 0) = const$ . Within the boundary conditions (2) at the output of the metamaterial, we obtain the following expression for the complex amplitude  $A_2(z)$  of the backward wave propagating from right to left in the medium in the case of arbitrary phase detunings ( $\delta_2 = \delta_1 + \delta_3$ )

$$A_2(z = 0) = \frac{A_{2\ell} \exp(i\Delta l / 2) \cdot \left( \lambda' + \frac{i\Delta}{2} \tanh \lambda l \right) - i\gamma_2 A_{10} A_{30}^* \sinh \lambda l}{\lambda' \cosh \lambda l + \left( \delta_2 - \frac{i\Delta}{2} \right) \cdot \sinh \lambda l}, \quad (3)$$

where

$$\lambda' = \sqrt{\Gamma_3^2 - \Gamma_1^2 + \frac{(2\delta_2 - i\Delta)^2}{4}}, \quad \Gamma_3^2 = \gamma_1 \gamma_2 I_{30},$$

$$\Gamma_1^2 = \gamma_2 \gamma_3 I_{10}, \quad I_{j0} = A_{j0} \cdot A_{j0}^*, \quad j = 1 \div 3.$$

Since in the present studies the aim is to study the effect of losses on the parametric interaction, further analysis will be carried out for the case of phase matching, but for arbitrary losses of interacting waves. Hence from (1), taking (2) into account in the general case of arbitrary losses, we obtain

$$A_2(z=0) = \frac{A_{2l} \exp[(\delta_1 + \delta_3 - \delta_2)l/2] - i\gamma_2 A_{10} A_{30}^* \frac{\sinh\lambda l}{\lambda}}{\cosh\lambda l + \frac{(\delta_1 + \delta_2 + \delta_3) \sinh\lambda l}{2\lambda}}, \quad (4)$$

where

$$\lambda = \sqrt{\Gamma_3^2 - \Gamma_1^2 + \frac{(\delta_1 + \delta_2 + \delta_3)^2}{4}}$$

It is seen from (4) that the amplitude of the wave at a frequency  $\omega_2$  exponentially depends on the difference of losses of two direct and one backward waves, i.e. depends on the term in the numerator  $\exp(\delta_1 + \delta_3 - \delta_2)$ . As the loss  $\delta_1$  grows, the weak direct wave at the frequency  $\omega_1$  is weakened. At a certain value  $\delta_1$ , the loss of the backward wave  $\delta_2$  is compensated by the losses of direct waves  $\delta_{1,3}$ . Then exponential growth occurs exponential term. It is possible to amplify the backward wave at a frequency  $\omega_2$ , due to the attenuation of the wave at the frequency  $\omega_1$ , because of the growth of its loss  $\delta_1$ . In this case, a direct pump wave excites practically only the backward wave at a frequency  $\omega_2$ . This is analogous to the case of the generation of two orthogonally polarized modes in a laser when the windows of the active medium in the gas laser or the ends of the active rod in a solid-state laser are located perpendicular to the active laser medium [15]. To increase the gain in one of the generated modes, the windows or the ends are positioned at the Brewster angle to artificially attenuate one of the orthogonally polarized modes. As a result, generation is observed on one amplified linearly polarized mode. Thus, by manipulating the loss of the direct weak wave at the sum frequency  $\delta_1$ , it would be possible to direct all the energy of the pump wave to the excitation and amplification of the backward wave. However, a term with losses in the denominator gives its undesirable contribution and weakens the wave at the difference frequency.

From (4) for the gain of the backward wave on the difference frequency, one can obtain

$$\eta^{ampl} = \frac{I_2(z=0)}{I_{2l}} = \frac{\exp[(\delta_1 + \delta_3 - \delta_2)l] + \frac{\gamma_2^2 I_{10} I_{30}^*}{I_{2l}} \left(\frac{\sinh\lambda l}{\lambda}\right)^2}{\left[\cosh\lambda l + \frac{(\delta_1 + \delta_2 + \delta_3) \sinh\lambda l}{2\lambda}\right]^2}. \quad (4)$$

For comparison, in the case of an ordinary medium with the same wave geometry, namely, when all three waves are incident from the left to the medium, the gain in the constant-intensity approximation can be obtained

$$\eta_{ordinary}^{amp} = \frac{I_2(z=l)}{I_{20}} = \exp[-(\delta_1 + \delta_2 + \delta_3)l] \times \left\{ \left[ \cos\lambda l + \frac{(\delta_2 - \delta_1 - \delta_3)l}{2} \text{sinc}\lambda l \right]^2 + \frac{\gamma_2^2 I_{10} I_{30}^*}{I_{2l}} l^2 \text{sinc}^2 \lambda l \right\} \quad (5)$$

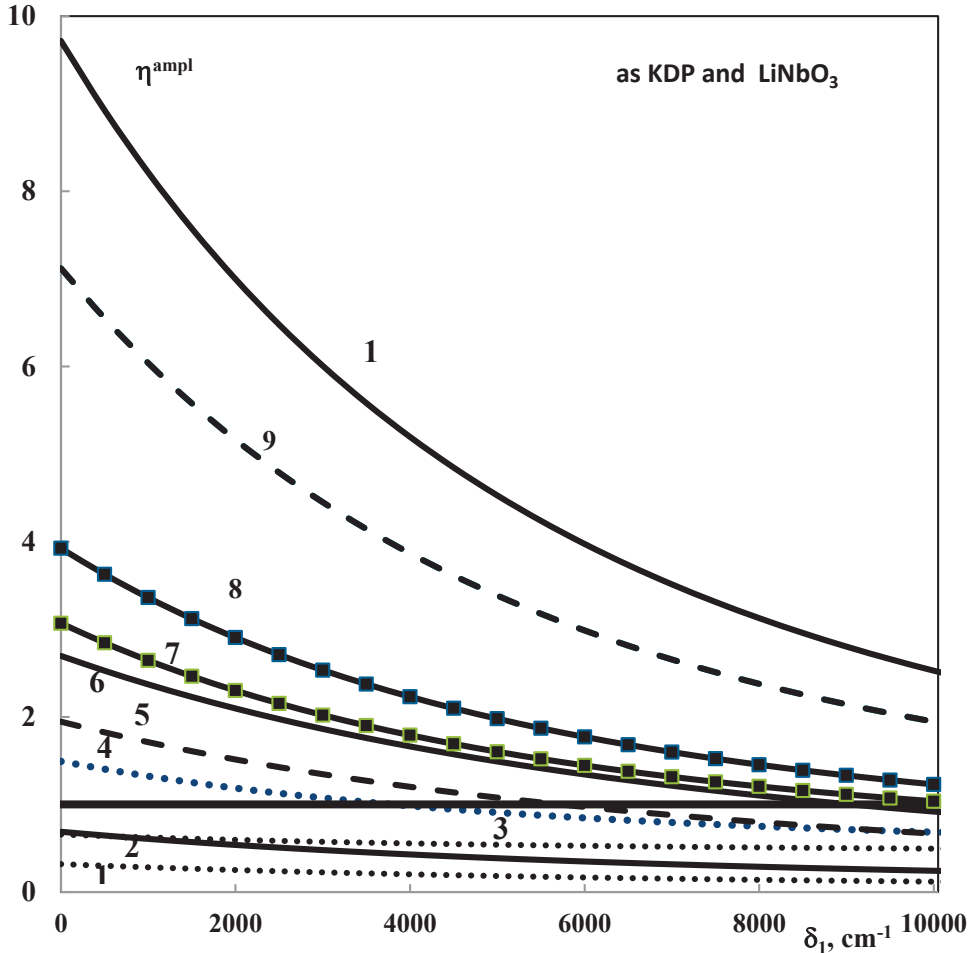
From analysis (5) it follows that in ordinary media, an exponential decrease in the gain is observed with increasing  $\delta_1$ . In contrast to the case in the metamaterial (4), in a usual medium, the contribution of the term with losses is limited by the function  $\text{sinc}\lambda l$ , whose maximum value is equal to 1.

## Results and discussion

Let us numerically analyze the obtained formula (4) and determine the conditions under which propagation of a backward wave with a constant amplitude is possible, as well as its amplification in a nonlinear medium of metamaterial. The calculation is carried out for the case of a medium with negative refraction and with a quadratic nonlinearity both in crystals of KDP ( $\gamma_2 \cong 2.7 \cdot 10^{-4}$  esu) and in LiNbO<sub>3</sub> crystals ( $\gamma_2 \cong 23.44 \cdot 10^{-4}$  esu): the thickness of the metamaterial was taken to be several microns, the pumping intensity  $I_{30}$  was about 1 GW/cm<sup>2</sup>, according to existing experiments [15]. Different variants of input values of intensities of interacting waves were considered.

In Fig. 1 gives the gain of the backward wave  $\eta^{amp}$  as a function of the loss  $\delta_1$  of a weak direct wave of the sum frequency  $\omega_1$  for different initial values of the intensities of the direct pump wave  $I_{30}$  and the wave at the sum frequency  $I_{10}$ . This analysis can also be carried out by controlling the pump wave loss  $\delta_3$ , since  $\delta_1$  and  $\delta_3$  play the same role, that is, they have the same effect on  $\eta^{amp}$  in (4). With an increase in the loss  $\delta_1$  of a weak direct wave and upon attaining a value of  $\delta_1 = 1000 \text{ cm}^{-1}$  ( $\delta_2 = 2000 \text{ cm}^{-1}$ ;  $\delta_3 = 1000 \text{ cm}^{-1}$ ), the loss in the exponent is compensated, the exponential term no longer contributes to a decrease in the intensity of the backward wave (curves 3, 4, 8-10). Further growth of loss  $\delta_1$  leads to a positive contribution of the exponential term, i.e.  $\exp(\delta_1 + \delta_3 - \delta_2) > 1$ . However, losses are present in the denominator, as well as in the parameter  $\lambda$ . These terms make a negative contribution to the value of the gain  $\eta^{amp}$ . The black horizontal solid line corresponds to  $\eta^{amp} = 1$ . As can be seen from Fig. 1, for given parameters of the problem, at 5 times larger values of the loss of the backward wave,  $\delta_2 = 10000 \text{ cm}^{-1}$ , the loss compensation, i.e. the fulfillment of the condition  $(\delta_1 + \delta_3 - \delta_2) = 0$  occurs at large values  $\delta_1$  (or  $\delta_3$ ). In this case, the contribution from the exponential term is absent for small values  $\delta_1$  up to values of  $9000 \text{ cm}^{-1}$  (curves 1, 2, 5, and

6). This explains the more smooth nature of curves 1, 2, 5 and 6 in comparison with curves 3, 4, 8-10. If in the case of curve 10 the maximum attainable gain is  $\eta^{amp} \approx 9.7$ , then for curve 6 this value is 3 times smaller and is equal to  $\sim 3$ . Curves 1-3 lie completely in the region below the straight line  $\eta^{amp} = 1$ , so the parametric amplification condition does not hold in these modes of operation.



**Fig. 1.** The gain of the backward wave with negative refraction  $\eta^{amp}$  as a function of the loss  $\delta_1$  of the weak direct wave of the sum frequency at  $I_{2l} = 0.01 \cdot I_{30}$ ,  $l = 2$  mcm,  $\delta_3 = 1000$   $\text{cm}^{-1}$  for  $\delta_2 = 2000$   $\text{cm}^{-1}$  (curves 3-4, 7-10) and  $10000$   $\text{cm}^{-1}$  (curves 1, 2, 5, 6),  $I_{10} = 0.8 \cdot I_{30}$  (curves 5, 9),  $I_{10} = 0.5 \cdot I_{30}$  (curves 1, 4, 7, 8),  $I_{10} = 0.4 \cdot I_{30}$  (curves 6, 10),  $I_{10} = 0.1 \cdot I_{30}$  (curves 2, 3),  $I_{30} = 1$   $\text{GW}/\text{cm}^2$  (curves 2, 6, 10),  $0.6$   $\text{GW}/\text{cm}^2$  (curves 5, 8, 9),  $0.3$   $\text{GW}/\text{cm}^2$  (curves 1, 3, 4),  $0.06$   $\text{GW}/\text{cm}^2$  (curve 7). All the curves correspond to a metamaterial with a nonlinearity, as in a KDP crystal, with the exception of the 7 curve corresponding to the interaction in a metamaterial with a nonlinearity, like in  $\text{LiNbO}_3$  crystal.

A comparison of curves 8, 9, and 10 shows that with increasing pump intensity, the amplification coefficient increases. The increase in intensity  $I_{30}$  at 40% (in 1.7 times) leads to the nonlinear growth factor of the increase in 1.2 times (curves 9 and 10).

The change in the initial intensity  $I_{10}$  of the sum frequency wave shows that with decreasing  $I_{10}$  the value  $\eta^{amp}$  falls down to the termination of the parametric amplification (compare curves 3, 4 and 8). Curve 3 corresponds to the case of no gain,  $\eta^{amp} < 1$ , it is below the horizontal line  $\eta^{amp} = 1$ . The increase of  $I_{10}$  in more than 3 times from 0.15 GW/cm<sup>2</sup> (curve 4) to 0.5 GW/cm<sup>2</sup> (curve 8) leads to a nonlinear increase in the gain by approximately 2.4 times. Hence, by choosing a larger input value of the forward wave of the sum frequency, it is possible to realize a more intense backward wave signal at the output of the metamaterial.

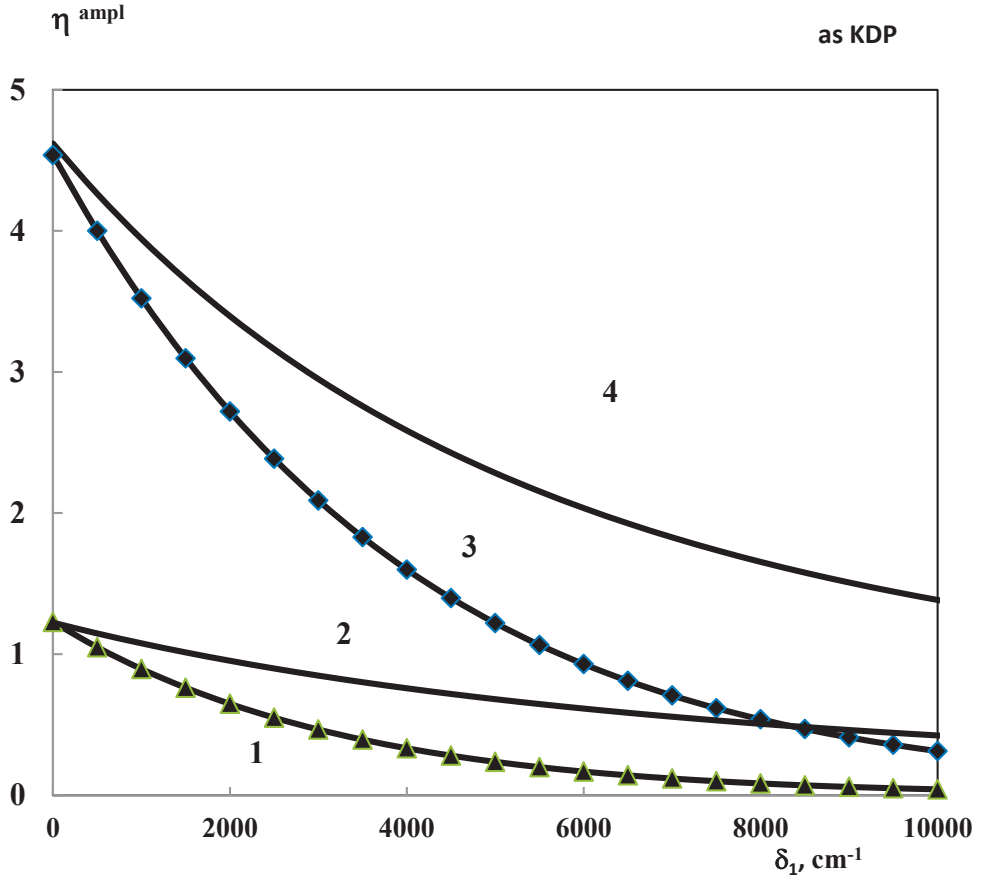
In Fig. 2 shows the dynamics of behavior  $\eta^{amp}$  as a function of the loss  $\delta_1$  of the wave at the sum frequency for two cases: in the metamaterial (curves 2 and 4) and in the ordinary medium (curves 1 and 3). In the first variant, the curves lie on the graph above. This is explained by the compensation of losses in the metamaterial, due to which the exponential decrease occurs much more slowly than in the usual medium. Hence, in medium with negative refraction in comparison with the usual medium, with the same parameters of the problem, the gain values achieved are greater, for example, at  $\delta_1 = 4500 \text{ cm}^{-1}$  the gain  $\eta^{amp}$  is 1.73 times higher.

We perform a numerical estimation and comparison with the gain factors in two types of metamaterials: with a quadratic nonlinearity, as in KDP, and with a high quadratic nonlinearity, as in LiNbO<sub>3</sub>.

As the calculation shows, the almost identical effect of nonlinearity in both cases at the total length of a metamaterial  $l = 2 \text{ }\mu\text{m}$  under phase-matching conditions is found at a fundamental radiation intensity approximately 10 times lower for a medium with a strong nonlinearity, as in LiNbO<sub>3</sub>, as compared to the case of a KDP crystal. In other words, in practice, a similar effect can be obtained by using one order of magnitude smaller values of the pump intensity. The result obtained is graphically visible from a comparison of the corresponding curves for these two crystals (Fig. 1, curves 7 and 8).

Thus, in the presence of a parametric connection between forward and backward waves, it is possible to calculate the conditions for the effective parametric three-wave interaction. For each particular experimental case, knowing the values  $\omega_{1,2,3}$  of the optical frequencies (and hence calculating the exact values  $\gamma_{1,2,3}$  of the nonlinear coupling coefficients), the loss value  $\delta_2$ , the

thickness of the metamaterial for the particular experimental sample, we can calculate, according to (4), the optimum values of the required loss  $\delta_1$  (or  $\delta_3$ ) and the input values of intensities of the pump wave  $I_{30}$  and wave at the sum frequency  $I_{10}$  to obtain the required parametric amplification in the metamaterial for the backward wave.



**Fig. 2.** The gain of the backward wave with negative refraction  $\eta^{ampl}$  as a function of the loss  $\delta_1$  of the weak direct wave of the sum frequency  $\omega_1$  at  $I_{2l} = 0.01 \cdot I_{30}$ ,  $I_{30} = 0.6$  GW/cm<sup>2</sup>,  $I_{10} = 0.5 \cdot I_{30}$ ,  $l = 2$  mcm,  $\delta_3 = 1000$  cm<sup>-1</sup> for  $\delta_2 = 2000$  cm<sup>-1</sup> (curves 3-4) and 10000 cm<sup>-1</sup> (curves 1-2). Curves 1 and 3 correspond to the ordinary medium, curves 2 and 4 correspond to the metamaterial. In the case of an ordinary medium  $I_{20} = I_{2l} = 0.01 \cdot I_{30}$ . All the curves correspond to a media with a nonlinearity, as in a KDP crystal.

## Conclusion

In work in the constant-intensity approximation for parametric three-wave interaction in metamaterials, the influence of losses of interacting waves is studied, the possibility of overcoming and manipulating these losses is shown. The effect of the input intensities of interacting waves under which propagation of a wave in a “left-handed” medium with a constant amplitude is possible, as well as its amplification in a similar nonlinear medium is investigated. It is shown that the gain of the backward wave increases with increasing input intensities of two direct waves. A similar consideration can be made in the case of a “left-handed” medium at two other frequencies, if this is of practical interest. In this paper, an analysis of the effect of losses on the parametric interaction was carried out for the case of phase matching. However, the method of constant-intensity approximation makes it possible to study the dynamics of the interaction process in metamaterials, the effect of losses, the ways of overcoming them, and in the more general case of an arbitrary phase mismatch between interacting waves. If necessary, analysis of the obtained analytical expression for the gain can be carried out for the conditions of a particular experiment.

## REFERENCES

1. V.G. Veselago, The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of  $\epsilon$  and  $\mu$ . *Sov. Phys. Usp.* **10**, 509 – 514 (1968)
2. S. Zhang, W. Fan, N. C. Panoiu, K. J. Malloy, R. M. Osgood, and S. R. J. Brueck, “Experimental Demonstration of Near-Infrared Negative-Index Metamaterials” *Phys. Rev. Lett.* **95**, 137404-137407 (2005).
3. Shadrivov I. V., Zharov A.A., Kivshar Y.S., Second-harmonic generation in nonlinear left-handed metamaterials, *JOSA* **B23**, №3, 529-534 (2006)].
4. Popov A.K., Shalaev V.M. Negative-index metamaterials: second-harmonic generation, Manley-Rowe relations and parametric amplification // *Appl. Phys. B.* - 2006. –V. 84, - P. 131-137; Popov A.K., Myslivets S.A., Shalaev V.M. Coherent Nonlinear-optical Energy Transfer and Backward-wave Optical Parametric Generation in Negative-index Metamaterials // *Physica B*, **405**, 2999 (2010).
5. Jinggui Zhang, Yuanjiang Xiang, Lifu Zhang, Yongfan Li, and Zhaoming Luo. Induced focusing of optical wave from cross-phase modulation in nonlinear metamaterials. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, **50**(10) 823-830 (2014).
6. Shumin Xiao, Drachev V.P., Kildishev A.V., Ni Xingjie, Chettiar U.K., Yuan Hsiao-Kuan, Shalaev V.M. Loss-free and active optical negative-index metamaterials // *Nature*. –2010. – V. 466. – P. 735 - 742.
7. V.V. Klimov, Nanoplasmonics. *UFN*, **178**, 875-880 (2008).
8. Z. H. Tagiev and A. S. Chirkin, “Fixed intensity approximation in the theory of nonlinear waves,” *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **73**, 1271–1282 (1977).
9. Tagiev Z.H., Kasumova R.J., Salmanova R.A., Kerimova N.V. Constant-intensity approximation in a nonlinear wave theory // *J. Opt. B: Quantum Semiclas. Opt.*–2001. – V. 3 – P. 84 -87.
10. Tagiev Z.H., Kasumova R.J., Gadjieva L.S. Phase effects at second-harmonic generation in metamaterials. *Journal of Russian Laser Research*, 2011, v. 32, No 2, March, p.188-199.
11. Kasumova R.J., Safarova G.A., Shamilova Sh.A., Kerimova N.V. Phase effects in metamaterials at Third-Harmonic Generation. *International Journal of Engineering and Technology IJET-IJENS*, **15**, No.06, 19-30 (2015).

12. R.J. Kasumova, Sh.Sh. Amirov, Sh.A. Shamilova, "Parametric interaction of optical waves in metamaterials under low-frequency pumping," *Quantum Electron.* **47**, 655-660 (2017).
13. Kasumova R.J., Tagiyev Z.H., Amirov Sh.Sh., Shamilova Sh.A., Safarova G.A. Phase effects at parametrical interaction in metamaterials // *Journal of Russian Laser Research.* –2017. –V. 38. – P. 211 – 218.
14. S.A. Gonchukov, V.M. Ermachenko, A.Ch. Izmailov, R.D. Kasumova, V.N. Petrovskii, A.N. Rurulin. A gas laser with phase anisotropy in a magnetostatic field. *Quantum Electronics.* 1981, 8(2) 333-340.
15. T.B. Razumikhina, L.S. Telegin, A.I. Kholodnykh, A.S. Chirkin, "Three-frequency interactions of high-intensity light waves in media with quadratic and cubic nonlinearities," *Quantum Electron.* **11**, 2026-2035 (1984).

## **METAMATERİALLARDA ÜÇDALĞALI PARAMETRİK QARŞILIQLI TƏSİR ZAMANI İTKİLƏRİN KOMPENSASIYASI**

**R.C.QASIMOVA, N.V.KƏRİMLİ, A.R.ƏHMƏDOVA, G.Ə.SƏFƏROVA**

### **XÜLASƏ**

Sabit amplitudlu əks dalğanın yayılması, həmçinin qeyri-xətti mühitdə onun gücləndirilməsi və generasiyası şərtləri təhlil edilmişdir. Faza sinxronizmi şərti üçün əks dalğanın amplitudasının analitik ifadəsi alınmışdır. Göstərilmişdir ki, əks dalğa üçün metamaterialda itkiləri kompensasiya etmək olar, bundan başqa bu itkilərlə manipulyasiya etmək olar. Düz dalğaların giriş intensivliklərinin qiymətinin təsiri öyrənilir, bu zaman sabit amplitudayla əks siqnal dalğasının yayılması, həmçinin qeyri-xətti mühitdə onun gücləndirilməsi və generasiyası mümkündür. Göstərilmişdir ki, gücləndirmə əmsalı iki düz dalğanın giriş intensivliklərinin artmasıyla artır.

**Açar sözləri:** metamaterial, itkilərin kompensasiyası, əks dalğanın gücləndirilməsi, sabit intensivlik yaxınlaşması.

## **КОМПЕНСАЦИЯ ПОТЕРЬ ПРИ ТРЕХВОЛНОВОМ ПАРАМЕТРИЧЕСКОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ В МЕТАМАТЕРИАЛАХ**

**Р.Дж.КАСУМОВА. Н.В.КЕРИМЛИ, А.Р.АХМЕДОВА, Г.А.САФАРОВА**

### **РЕЗЮМЕ**

Проанализированы условия, при которых возможно распространение обратной волны с постоянной амплитудой, а также ее усиление и генерация в нелинейной среде. Получено аналитическое выражение для амплитуды обратной волны при условии фазового синхронизма. Показано, что потери в метаматериале для обратной волны можно компенсировать, кроме того можно манипулировать этими потерями. Изучено влияние значения входных интенсивностей прямых волн, при которых возможно распространение обратной сигнальной волны с постоянной амплитудой, а также ее усиление и генерация в нелинейной среде. Показано, что коэффициент усиления растет с увеличением входных интенсивностей двух прямых волн.

**Ключевые слова:** метаматериал, компенсация потерь, усиление обратной волны, приближение заданной интенсивности.



УДК 539.21

PACS 68.65. Cd, 73.50. Bk

**ГАЛЬВАНОМАГНИТНЫЕ ЭФФЕКТЫ В СВЕРХРЕШЕТКАХ  
В ПРОДОЛЬНОМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ ПРИ РАССЕЯНИИ  
НА СИЛЬНО ЭКРАНИРОВАННЫХ ИОНАХ ПРИМЕСИ****С.Р.ФИГАРОВА<sup>1</sup>, Г.И.ГУСЕЙНОВ<sup>2</sup>, М.М.МАХМУДОВ<sup>1</sup>**<sup>1</sup>*Бакинский Государственный Университет*<sup>2</sup>*Азербайджанский Университет Архитектуры и Строительства*  
*sophiafigarova@gmail.com*

*В работе исследуется эффект Холла и магнитосопротивление в сверхрешетках с косинусоидальным законом дисперсии при рассеянии носителей тока на сильно экранированных ионах примеси. Показано, что коэффициент Холла квазидвумерного и квазитрехмерного электронного газа в продольном магнитном поле меняет знак. Получено, что магнитосопротивление в сильном магнитном поле не зависит от величины магнитного поля и радиуса экранирования, а определяется только степенью заполнения мини-зоны. В слабом же магнитном поле магнитосопротивление положительно, зависит не только от величины магнитного поля и степени заполнения мини-зоны, но и от радиуса экранирования.*

**Ключевые слова:** сверхрешетка, эффект Холла, магнитосопротивление, сильно экранированные ионы примеси

Анизотропия кристаллической структуры, энергетического спектра и времени релаксации электронного газа в сверхрешетках приводит к тому, что характер движения носителей тока параллельно и перпендикулярно слоям сильно отличается. Внешнее магнитное поле связывает эти движения носителей тока и кинетические явления в квазидвумерных и квазитрехмерных системах сильно зависят от ориентации магнитного поля и размерности электронного газа. Динамика электронов в присутствии электрического и магнитного полей в значительной степени определяется топологией поверхности Ферми, которая различна для квазидвумерного (гофрированный цилиндр) и квазитрехмерного (эллипсоид) электронного газа, а также направлением магнитного поля. Анизотропия сверхрешеток открывает возможность исследовать интересные физические явления в их квазидвумерном и квазитрехмерном проявлении, которые не наблюдаются в обычном трехмерном электронном газе [1]. К этим явлениям можно

отнести ориентационный эффект [2-3], геометрический резонанс[4], осцилляции [3-5] и смены знака [6-8] кинетических коэффициентов. Слоистые соединения и сверхрешетки являются перспективными материалами для миниатюризации и улучшения физических характеристик приборов, а также при создании новых нанотехнологических оборудований.

Проведенные экспериментальные и теоретические работы, а также их сравнения показали, что в структурах с наибольшими подвижностями вплоть до температур порядка 77 К доминирует фоннное рассеяния, а при гелиевых температурах рассеяние на ионах примеси. Энергетическая зависимость времени релаксации при рассеянии носителей тока на ионах примеси значительно сложнее, чем электрон-фоннное рассеяние. Поэтому число работ, посвященных вычислению кинетических коэффициентов при рассеянии на ионах примеси сравнительно мало [9,10], чем в случае рассеянии на фононах. Известно, что примесные атомы создают дискретные энергетические уровни, расположенные в запрещенной зоне вблизи краев разрешенных зон. Поэтому они легко ионизируются, и при низких температурах основным механизмом рассеяние является рассеяние на ионах примеси. Если поведение иона характеризовать кулоновским потенциалом, тогда обратное значение времени релаксации ( $\tau^{-1}$ ) логарифмически расходится. Чтобы ликвидировать эту расхождению и получить конечное значение для времени релаксации и подвижности нужно ограничить сферу действия иона [11]. В связи с ограничением радиуса действия кулоновского потенциала вычисление времени релаксации при рассеянии носителей заряда на ионах примеси делится на два предельных случая [10]: слабое экранирование  $k r_0 \gg 1$  (дальнодействующий потенциал примеси), сильное экранирование  $k r_0 \ll 1$  (близкодействующий потенциал примеси), где  $r_0$  - усредненное значение радиуса экранирования,  $k$  - волновой вектор электронов проводимости. При наличии магнитного поля с использованием анизотропного времени релаксации гальваномагнитные эффекты изучены в [11-15], как при рассеянии электронов проводимости на ионах примеси в борновском приближении при слабой экранировке кулоновского потенциала [12-14], так и при сильной экранировке [15]. В [15] изучены эффект Холла и магнитосопротивление в перпендикулярном магнитном поле, направленном по оси сверхрешетки  $oz \parallel \vec{B}$ . Ориентация магнитного поля создает дополнительную анизотропию в явлениях переноса. Поэтому интересно изучать эффекта Холла и магнитосопротивление в продольном магнитном поле, направленном в плоскости слоя  $oz \perp \vec{B}$  при рассеянии на сильно экранированных ионах примеси.

Настоящая работа посвящена изучению гальваномагнитных явлений, а именно, эффекту Холла и магнитосопротивлению и исследована анизотропия, связанная с ориентации магнитного поля, при рассеянии

носителей тока на сильно экранированных ионах примеси в сверхрешетках с косинусоидальным законом дисперсии. Получены общие выражения для компонент гальваномагнитного тензора в продольном магнитном поле. Показано, что коэффициент Холла вырожденного квазидвумерного электронного газа не зависит от полной концентрации носителей тока и определяется параметрами сверхрешетки. Получено, что магнитосопротивление в сильном магнитном поле не зависит от величины магнитного поля и радиуса экранирования, а определяется только степенью заполнения зоны. В слабом же магнитном поле магнитосопротивление положительно, зависит от величины магнитного поля и радиуса экранирования, а также немонотонно зависит от степени заполнения мини-зоны.

**Общий вид компонент гальваномагнитного тензора.** Рассмотрим электронный газ с косинусоидальным законом дисперсии:

$$\varepsilon(k) = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{\perp}} + \varepsilon_0(1 - \cos(ak_z)), \quad (1)$$

здесь,  $k_{\perp}^2 = k_x^2 + k_y^2$ ,  $k_{\perp} = k_z = k_{\parallel}$  - продольная и поперечная компоненты волнового вектора, соответственно,  $\varepsilon_0$  - ширина мини-зоны сверхрешетки,  $a$  - постоянная сверхрешетки,  $\hbar$  - постоянная Планка.

В квазидвумерных электронных системах при рассеянии электронов проводимости на сильно экранированных ионах примеси  $kr_0 \ll 1$  в борновском приближении  $r_0 \ll r_B$ , (где  $r_B = \chi\hbar^2/me^2$  - боровский радиус,  $\chi$  - диэлектрическая проницаемость) время релаксации изотропно и определяется плотностью состояний, т.е. компоненты обратного времени релаксации  $\tau_{\perp}^{-1}$  и  $\tau_{\parallel}^{-1}$  равны и имеют вид:

$$\frac{1}{\tau_{\perp}} = \frac{1}{\tau_{\parallel}} = \frac{1}{\tau_0} 2k_z r_0, \quad (2)$$

здесь выражение для  $\tau_0$  приводится в [10]. Время релаксации зависит только от поперечной компоненты  $k_z$ . Как известно, радиус экранирования вырожденного квазидвумерного электронного газа зависит от степени заполнения минизоны  $Z(\zeta_F) = ak_z$  и концентрации электронного газа  $n$ , здесь  $\zeta_F$  - граничная энергия Ферми и имеет вид [11]:

$$r_0^{-2} = \left( \frac{4\pi e^2}{\chi} \right) \frac{m_{\perp} Z(\zeta_F)}{\pi^2 \hbar^2 a} = \frac{4\pi e^2 n}{\chi \varepsilon_0}. \quad (3)$$

Рассмотрим случай, когда магнитное поле направлено параллельно плоскости слоя -  $B_y = B$ ,  $B_x = B_z = 0$ . В этом случае из выражения для плотности тока получим общие выражения компонент гальваномагнитно-

го тензора, которые имеют вид [16]:

$$\sigma_{xx} = e^2 n_0 \left\langle \frac{\tau_{\perp}}{1 + v_{\perp} v_{II}} \right\rangle, \quad \sigma_{xz} = e^2 n_0 \left\langle \frac{\tau_{\perp} v_{II}}{1 + v_{\perp} v_{II}} \right\rangle, \quad (4)$$

$$\sigma_{zz} = e^2 n_0 \left\langle \left\langle \frac{\tau_z}{1 + v_{\perp} v_{II}} \right\rangle \right\rangle, \quad \sigma_{zx} = e^2 n_0 \left\langle \left\langle \frac{\tau_z v_{\perp}}{1 + v_{\perp} v_{II}} \right\rangle \right\rangle, \quad (5)$$

где  $v_{\perp} = \frac{eB\tau_{\perp}}{m_{\perp}}$ ,  $n_0 = \frac{m_{\perp}(\xi - \varepsilon_0)}{\pi \hbar^2 a}$ , и введены обозначения

$$\langle A \rangle = \frac{m_{\perp}}{\pi^2 \hbar^2 a n_0} \int_0^{Z_0} \int_0^{\infty} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\perp}} \right) A \varepsilon_{\perp} d\varepsilon_{\perp} dZ,$$

$$\langle\langle A \rangle\rangle = \frac{\varepsilon_0}{\pi^2 \hbar^2 a n_0} \frac{m_{\perp}}{m_{II0}} \int_0^{Z_0} \int_0^{\infty} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\perp}} \right) A(\varepsilon_{\perp}, Z) \sin^2 Z d\varepsilon_{\perp} dZ.$$

Для вырожденного электронного газа в некваंटующего продольном магнитном поле при рассеянии носителей тока на сильно ионизированных атомах примеси после интегрирования по  $\varepsilon_{\perp}$  из (4) и (5), для компонент тензора электропроводности получим:

$$\sigma_{xx} = \sigma_0 \left( \frac{m_{\perp} \varepsilon_0}{\pi^2 \hbar^2 a n_0} \right) \left( \frac{a}{2r_0} \right) \int_0^{Z_0} \frac{X(Z) dZ}{Z Y_{II}(Z)}, \quad (6)$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_0 \left( \frac{m_{\perp} \varepsilon_0}{\pi^2 \hbar^2 a n_0} \right) \left( \frac{m_{\perp}}{m_{II0}} \right)^{1/2} \left( \frac{a}{2r_0} \right)^2 (\Omega \tau_0) \int_0^{Z_0} \frac{X(Z) \cos Z dZ}{Z^2 Y_{II}(Z)}, \quad (7)$$

$$\sigma_{zz} = \sigma_0 \left( \frac{m_{\perp} \varepsilon_0}{\pi^2 \hbar^2 a n_0} \right) \left( \frac{m_{\perp}}{m_{II0}} \right) \left( \frac{a}{2r_0} \right) \int_0^{Z_0} \frac{\sin^2 Z dZ}{Z Y_{II}(Z)}, \quad (8)$$

$$\sigma_{zx} = \sigma_0 \left( \frac{m_{\perp} \varepsilon_0}{\pi^2 \hbar^2 a n_0} \right) \left( \frac{m_{\perp}}{m_{II0}} \right) \left( \frac{m_{\perp}}{m_{II0}} \right)^{1/2} \left( \frac{a}{2r_0} \right)^2 (\Omega \tau_0) \int_0^{Z_0} \frac{\sin^2 Z dZ}{Z^2 Y_{II}(Z)}, \quad (9)$$

здесь  $Z_0$  - степень заполнения мини-зоны, которая определяет размерность электронного газа:

$$Z_0 = \begin{cases} \pi, & \text{при } \zeta_F > 2\varepsilon_0, \text{ квазидвумерный, изоэнергетическая поверхность Ферми - гофрированный цилиндр} \\ \arccos \left( 1 - \frac{\zeta_F}{\varepsilon_0} \right), & \text{при } \zeta_F < 2\varepsilon_0, \text{ квазитрехмерный, изоэнергетическая поверхность Ферми - эллипсоид} \end{cases},$$

здесь  $\sigma_0 = \frac{e^2 n_0 \tau_0}{m_{\perp}}$ ,  $\Omega = eB / \sqrt{m_{\perp} m_{II0}}$ ,  $Y_{II} = 1 + (\Omega \tau_0)^2 \left( \frac{a}{2r_0} \right)^2 \frac{1}{Z^2} \cos Z$ ,

$$X(Z) = \cos Z - \cos Z_0, \quad v_{\perp 0} = \Omega \tau_0 \left( \frac{m_{II0}}{m_{\perp}} \right)^{1/2} \left( \frac{a}{2r_0} \right) \frac{1}{Z}, \quad v_{II0} = \Omega \tau_0 \left( \frac{m_{\perp}}{m_{II0}} \right)^{1/2} \left( \frac{a}{2r_0} \right) \frac{1}{Z} \cos Z.$$

Аналитические выражения, полученные для компонент гальваномагнитного тензора (6)-(9), справедливы как для квазидвумерного

( $\zeta > 2\varepsilon_0$ ), так и квазитрехмерного ( $\zeta < 2\varepsilon_0$ ) электронного газа. Однако, при произвольном значении магнитного поля получить аналитическую зависимость коэффициента Холла и магнитосопротивления  $\Delta\rho/\rho$  от параметров энергетического спектра и величины индукции магнитного поля невозможно. Поэтому мы отдельно рассмотрим случаи квазидвумерного ( $\zeta > 2\varepsilon_0$ ) и квазитрехмерного ( $\zeta < 2\varepsilon_0$ ) электронного газа в сильном ( $v_\perp \gg 1$ ) и слабом ( $v_\perp \ll 1$ ) магнитном поле, параллельном плоскости слоя сверхрешетки.

**Коэффициент Холла.** В случае магнитного поля, параллельного плоскости слоя, коэффициент Холла определяется следующим общим выражением [16].

$$R_{II} = \frac{1}{B} \frac{E_z}{j_x} = \frac{\sigma_{zx}}{\sigma_{xx}\sigma_{zz} + \sigma_{xz}\sigma_{zx}}. \quad (10)$$

Подставляя выражения компонент гальваномагнитного тензора (6)-(9) в (10) для  $R_{II}$  получим.

$$R_{II} = \frac{\pi^2 \hbar^2 a}{em_\perp \varepsilon_0} \frac{\int_0^{Z_0} \frac{\sin^2 Z dZ}{Z^2 Y_{II}}}{\int_0^{Z_0} \frac{X(Z) dZ}{Z Y_{II}(Z)} \int_0^{Z_0} \frac{\sin^2 Z}{Z Y_{II}(Z)} + \left(\frac{e}{2r_0}\right)^2 (\Omega\tau_0)^2 \int_0^{Z_0} \frac{\cos ZX(Z) dZ}{Z^2 Y_{II}(Z)} \int_0^{Z_0} \frac{\sin^2(Z) dZ}{Z^2 Y_{II}(Z)}}. \quad (11)$$

Используя формулу (11), отдельно рассмотрим предельные случаи слабого  $\Omega\tau_0 \ll 1$  и сильного  $\Omega\tau_0 \gg 1$  магнитного поля.

В случае слабого магнитного поля из выражения (6)-(9) для компонент гальваномагнитного тензора  $\sigma_{xx}, \sigma_{xz}, \sigma_{zz}, \sigma_{zx}$  имеем:

$$\sigma_{xx} = \sigma_0 \frac{m_\perp \varepsilon_0}{\pi^2 \hbar^2 a n_0} \left(\frac{a}{2r_0}\right) \left[ I_{-1,0,1} - v_{\perp 0}^2 \left(\frac{a}{2r_0}\right)^2 I_{-3,0,1} \right], \quad (12)$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_0 \frac{m_\perp \varepsilon_0}{\pi^2 \hbar^2 a n_0} \left(\frac{m_\perp}{m_{II0}}\right)^{1/2} \left(\frac{a}{2r_0}\right)^2 (\Omega\tau_0) I_{-2,1,1}, \quad (13)$$

$$\sigma_{zz} = \sigma_0 \frac{m_\perp \varepsilon_0}{\pi^2 \hbar^2 a n_0} \frac{m_\perp}{m_{II0}} \frac{a}{2r_0} \left[ (I_{-1,0,0} - I_{-1,2,0}) - (\Omega\tau_0)^2 \left(\frac{a}{2r_0}\right)^2 (I_{-3,1,0} - I_{-3,3,0}) \right], \quad (14)$$

$$\sigma_{zx} = \sigma_0 \frac{m_\perp \varepsilon_0}{\pi^2 \hbar^2 a n_0} \frac{m_\perp}{m_{II0}} \left(\frac{m_{II0}}{m_\perp}\right)^{1/2} \left(\frac{a}{2r_0}\right)^2 (\Omega\tau_0) (I_{-2,0,0} - I_{-2,2,0}), \quad (15)$$

где

$$I_{klm} = \int_0^{Z_0} Z^k \cos^l Z (\cos Z - \cos Z_0)^m dZ. \quad (16)$$

Подставляя выражения (12)-(15) в формулу (11) для коэффициента Холла в случае слабого магнитного поля получим

$$R_{II} = \frac{\pi^2 \hbar^2 a}{em_{\perp} \varepsilon_0} \frac{I_{-2,0,0} - I_{-2,2,0}}{I_{-1,0,1} (I_{-1,0,0} - I_{-1,2,0})}. \quad (17)$$

В этом случае коэффициент Холла имеет положительный знак  $R_{II} > 0$  и выражается через интегралы  $I_{k,l,m}$ , которые не интегрируются, но по этим формулам можно численно построить зависимость коэффициента Холла от степени заполнения мини-зоны.

Используя асимптотику  $I_{k,l,m}$ , для коэффициента Холла квазидвумерного электронного газа  $\zeta_F > 2\varepsilon_0$  получим:

$$R_{II} = \frac{1}{en_{eff}}, \quad (18)$$

где  $n_{eff} = \frac{m_{\perp} \varepsilon_0}{\pi \hbar^2 a}$ , т.е. при сильном вырождении электронного газа коэффициент Холла не зависит от полной концентрации носителей тока и имеет положительный знак. Для квазитрехмерного электронного газа коэффициент Холла сильно зависит от степени заполнения мини-зоны и параметров сверхрешетки  $\varepsilon_0$  и  $a$ .

Сравнивая коэффициент Холла в поперечном магнитном поле  $|R_{\perp}|$  из работы [15] с формулой (18), для коэффициента анизотропии эффекта Холла в слабых магнитных полях при рассеянии на сильно экранированных ионах примеси имеем:

$$\frac{|R_{II}|}{|R_{\perp}|} = \frac{I_{-1,0,1} (I_{-2,0,0} - I_{-2,2,0})}{I_{-2,0,1} (I_{-1,0,0} - I_{-1,2,0})}. \quad (19)$$

Из формулы (19) видно, что анизотропия коэффициента Холла зависит только от степени заполнения мини-зоны.

В сильном магнитном поле для компонент гальваномагнитного тензора получим:

$$\sigma_{xx} = \sigma_0 \frac{m_{\perp} \varepsilon_0}{\pi^2 \hbar^2 a n_0} \left( \frac{2r_0}{a} \right) \frac{1}{(\Omega \tau_0)^2} I_{1,-1,1}, \quad (20)$$

$$\sigma_{xz} = \sigma_0 \frac{m_{\perp} \varepsilon_0}{\pi^2 \hbar^2 a n_0} \left( \frac{m_{\perp}}{m_{H0}} \right)^{1/2} \frac{1}{\Omega \tau_0} I_{0,0,1}, \quad (21)$$

$$\sigma_{zz} = \sigma_0 \frac{m_{\perp} \varepsilon_0}{\pi^2 \hbar^2 a n_0} \left( \frac{m_{\perp}}{m_{H0}} \right) \left( \frac{2r_0}{a} \right) \frac{1}{(\Omega \tau_0)^2} I_{-3,1,1} (I_{1,-1,0} - I_{1,1,0}), \quad (22)$$

$$\sigma_{zx} = \sigma_0 \frac{m_{\perp} \varepsilon_0}{\pi^2 \hbar^2 a n_0} \left( \frac{m_{\perp}}{m_{H0}} \right) \left( \frac{m_{H0}}{m_{\perp}} \right)^{1/2} \frac{1}{\Omega \tau_0} I_{-3,1,1} (I_{1,-1,0} - I_{1,1,0}). \quad (23)$$

В этом случае из формулы (20)-(23) для  $R_{H}$  имеем:

$$|R_{H}| = \frac{1}{en_{eff}} = \frac{\pi^2 \hbar^2 a}{em_{\perp} \varepsilon_0} \frac{1}{\sin Z_0 - Z_0 \cos Z_0} = |R_{\perp}|. \quad (24)$$

Из формулы (24) следует, что в сильном магнитном поле анизотропия коэффициента Холла отсутствует, так как  $R_{H} = R_{\perp}$ . Следует отметить, что для квазидвумерного электронного газа концентрация  $n_{eff}$  имеет вид:

$$n_{eff} = \frac{m_{\perp} (\xi - \varepsilon_0)}{\pi \hbar^2 a},$$

а для квазитрехмерного электронного газа она равна:

$$n_{eff} = \frac{m_{\perp} \varepsilon_0}{\pi^2 \hbar^2 a_{\perp}} (\sin Z_0 - Z_0 \cos Z_0)$$

Из приведенных формул (18) и (24) следует, что в сильном магнитном поле, в отличие от слабого магнитного поля, для квазитрехмерного электронного газа коэффициент Холла зависит от степени заполнения мини-зоны.

**Магнитосопротивление.** Магнитосопротивление определяется формулой:

$$\frac{\Delta \rho}{\rho} = \frac{\rho(B) - \rho(0)}{\rho(0)}, \quad (25)$$

здесь, в продольном магнитном поле [11]

$$\rho(B_{H}) = \frac{\sigma_{zz}}{\sigma_{xx} \sigma_{zz} + \sigma_{xz} \sigma_{zx}}. \quad (26)$$

Подставляя (6)-(9) в (26) в случае произвольного магнитного поля для магнитосопротивления получим:

$$\frac{\Delta \rho(B_{H})}{\rho(0)} = \frac{\int_0^{Z_0} \frac{X(Z) dZ}{Z} \int_0^{Z_0} \frac{\sin^2 Z}{Z Y_{H}(Z)}}{\int_0^{Z_0} \frac{X(Z) dZ}{Z Y_{H}(Z)} \int_0^{Z_0} \frac{\sin^2 Z dZ}{Z Y_{H}(Z)} + \left( \frac{a}{2r_0} \right)^2 (\Omega \tau_0)^2 \int_0^{Z_0} \frac{\cos Z X(Z) dZ}{Z^2 Y_{H}(Z)} \int_0^{Z_0} \frac{\sin^2 Z dZ}{Z^2 Y_{H}(Z)}} - 1. \quad (27)$$

Для слабого магнитного поля  $\Omega \tau_0 \ll 1$  из формулы (27) имеем:

$$\frac{\Delta \rho(B_{H})}{\rho(0)} = (\Omega \tau_0)^2 \left( \frac{a}{2r_0} \right)^2 \frac{I_{-3,1,1} (I_{-1,0,0} - I_{-1,2,0}) - I_{-2,1,1} (I_{-2,0,0} - I_{-2,2,0})}{I_{-1,0,1} (I_{-1,0,0} - I_{-1,2,0})}. \quad (28)$$

Из формулы (28) видно, что в слабом магнитном поле магнитосопротивление, также как и коэффициент Холла, выражается через интегра-

лы  $I_{klm}$  и существенно зависит от степени заполнения мини-зоны, а также от отношения радиуса экранирования к постоянной сверхрешетки ( $r_0/a$ ).

В сильном магнитном поле  $\Omega\tau_0 \gg 1$  для магнитосопротивления получим:

$$\frac{\Delta\rho(B_{||})}{\rho(0)} = \frac{I_{-1,0,1}(I_{1,-1,0} - I_{1,1,0})}{I_{0,0,1}(I_{0,-1,0} - I_{0,1,0})} - 1. \quad (29)$$

Из формулы (29) видно, что магнитосопротивление в сильном магнитном поле не зависит от величины магнитного поля и радиуса экранирования, а определяется только степенью заполнения мини-зоны. Это обстоятельство связано с тем, что циклотронная орбита оказывается вне сильно экранированного поля примеси.

Анизотропия магнитосопротивления будет зависеть от степени заполнения мини-зоны и дается формулой:

$$\frac{\rho(B_{||})}{\rho(B_{\perp})} = \frac{(\sin Z_0 - Z_0 \cos Z_0) \left( \int_0^{Z_0} \frac{Z dZ}{\cos Z} - Z_0 \sin Z_0 + \sin^2(Z_0/2) \right)}{(Z_0 \sin Z_0 - \sin^2 Z_0 - \frac{Z_0^2}{2} \cos Z_0) \left( \ln \left| \operatorname{tg} \left( \frac{Z_0}{2} + \frac{\pi}{4} \right) \right| - \sin Z_0 \right)}. \quad (30)$$

Из (30) следует, что анизотропия магнитосопротивления не зависит от отношения радиуса экранирования к постоянной сверхрешетки, а определяется лишь степенью заполнения мини-зоны.

**Заключение.** В работе изучены эффект Холла и магнитосопротивление для квазидвумерного и квазитрехмерного вырожденного электронного газа при рассеянии электронов проводимости на заряженных ионах примеси в случае сильного экранирования. Рассмотрена анизотропия гальваномагнитных коэффициентов, связанная с ориентацией магнитного поля. Показано, что коэффициент Холла квазидвумерного и квазитрехмерного электронного газа в продольном магнитном поле меняет знак. Получено, что в сильном магнитном поле анизотропия коэффициента Холла отсутствует, в то время как в слабом магнитном поле существенно зависит от степени заполнения мини-зоны. Анизотропия же магнитосопротивления существенна и зависит как от степени заполнения мини-зоны во всей области магнитного поля. Получено, что магнитосопротивление в сильном магнитном поле не зависит от радиуса экранирования, а определяется только степенью заполнения мини-зоны. В слабом же магнитном поле магнитосопротивление зависит и от радиуса экранирования, и от степени заполнения мини-зоны. Причины отсутствия зависимости магнитосопротивления в сильном магнитном поле от радиуса экранирования связано с тем, что циклотронная орбита оказывается вне сильно экранированного поля примеси.



## ЛИТЕРАТУРА

1. Dmitriev I.A., Mirlin A.D., Polyakov D.G., Zudov M.A. *Rev. Mod. Phys.*, 2012, v.84, p.1709-1763.
2. Песчанский В.Г. О гальваномагнитных явлениях в слоистых проводниках. *ЖЭТФ*, 1997, т.112, в.2, с.618-627.
3. Smith M.F., McKenzie R.H. Anisotropic scattering in angular-dependent magnetoresistance oscillations of quasi-two-dimensional and quasi-one-dimensional metals: Beyond the relaxation-time approximation. *Phys. Rev. B*, 2008, v.77, p.235123-1-235123-12.
4. Endo A, Iyu Y. Small amplitude low-field magnetoresistance oscillation in unidirectional lateral superlattices: Geometric resonance of Bragg-reflected cyclotron orbit. *Phys. Rev. B.*, 2005, v.71, p.081303-1-081303-4.
5. Smrčka L., Vašek P., Svoboda P., Goncharuk N.A., Pacheroва O., Krupko Yu., Sheikin Y., Wegscheider W. Magnetoresistance oscillations in GaAs/AlGaAs superlattices subject to in-plane magnetic fields. *Physica E*, 2006, v.34, p.632-635.
6. Sotomoyor N.M., Gusev G.M., Leite J.R., Bykov A.A., Kalagin A.K., Kudryashev V.M., Toropov A.I. Negative linear classical magnetoresistance in a corrugated two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, 2004, v.70, p.235326-1-235326-6.
7. Figarova S.R., Huseynov H.I., Figarov V.R. Magnetothermoelectric properties of layered structure for ion impurity scattering. *Superlattices and Microstructures*. 2018, v.117, p.469-475.
8. Figarova S.R., Huseynov H.I., Figarov V.R. Anisotropy of Nernst-Ettingshausen Effect in Superlattices during Scattering on Phonons. *Russian Physics Journal*, 2018, v.60, No.11, p.1931-1937.
9. Borisenko S.I. Dispersion of the relaxation time of quasi-two-dimensional electrons under conditions of ionized-impurity scattering in a superlattice with doped quantum wells. *Semiconductors*, 2003, v.37, p.569-572.
10. Askerov B.M., Guseinov G.I., Figarov V.R., Figarova S.R. Anisotropy of impurity scattering and electrical conductivity in quasi-two-dimensional electronic systems. *Physics of the Solid State*, 2008, v.50, No.4, p.780-784.
11. Askerov B.M., Figarova S.R. *Thermodynamics, Gibbs Method and Statistical Physics of Electron Gases*. Berlin: Springer Verlag, 2010, 374 p.
12. Askerov B.M., Figarova S.R., Huseynov H.I., Figarov V.R. Magnetoresistance of layered semiconductors upon the scattering of charge carriers at impurity ions in a parallel magnetic field. *Semiconductors*, 2014, v.48, No.6, p.748-753.
13. Askerov B.M., Figarova S.R., Huseynov H.I., Figarov V.R. Magnetoresistance in quasi-two-dimensional electron gas at scattering on impurity ions. *Phys. Status Solidi. B*, 2014, v.251, No.6, p.1197-1201.
14. Аскеров Б.М., Фигарова С.Р., Гусейнов Г.И. Гальваномагнитные эффекты в двумерных электронных системах при рассеянии на ионах примеси. *Вестник Бакинского Университета, серия физ.-мат. наук*, 2009, №3, с.117-123.
15. Аскеров Б.М., Фигарова С.Р., Гусейнов Г.И. Гальваномагнитные эффекты в квазидвумерных электронных системах при рассеянии на сильно экранированных ионах примеси. *Вестник Бакинского Университета, серия физ.-мат. наук*, 2011, №1, с.122-129.
16. Figarova S.R., Figarov V.R. Hall effect in a two-dimensional electron gas. *Philosophical Magazine Letters*. 2007, v.87, No.6, p.373-378.

# UZUNUNA MAQNİT SAHƏSİNDƏ İFRATQƏFƏSLƏRDƏ GÜCLÜ EKTRANLAŞMIŞ AŞQAR İONLARINDAN SƏPİLMƏ HALINDA QALVANOMAQNİT EFFEKTLƏR

S.R.FİQAROVA, H.İ.HUSEYNOV, M.M.MAHMUDOV

## XÜLASƏ

İşdə kosinusoidal dispersiya qanununa tabe olan ifratqəfəslərdə güclü ekranlaşmış aşqar ionlarından səpilmə halında Holl effekti və maqnitmüqaviməti öyrənilmişdir. Göstərilmişdir ki, uzununa maqnit sahəsində kvaziikiölçulu və kvaziüçölçülü elektron qazı üçün Holl əmsalı işarəsini dəyişir. Tapılmışdır ki, güclü maqnit sahəsində maqnitmüqaviməti maqnit sahəsinin qiymətindən və ekranlaşma radiusundan asılı olmayıb yalnız mini-zonanın dolma dərəcəsi ilə təyin olunur. Zəif maqnit sahəsində maqnitmüqaviməti müsbət olub, maqnit sahəsinin qiyməti və mini-zonanın dolma dərəcəsindən başqa həm də ekranlaşma radiusundan asılıdır.

**Açar sözlər:** ifratqəfəs, Holl effekti, maqnitmüqaviməti, güclü ekranlaşmış aşqar ionları.

# GALVANOMAGNETIC EFFECTS IN SUPERLATTICES IN A LONGITUDINAL MAGNETIC FIELD FOR SCATTERING BY STRONGLY SCREENING IMPURITY IONS

S.R.FIGAROVA, H.I.HUSEYNOV, M.M.MAHMUDOV

## SUMMARY

In this paper, the Hall effect and magnetoresistance in superlattices with a cosine dispersion law for the scattering of charge carriers by strongly screened impurity ions are investigated. It is shown that the Hall coefficient of a quasi-two-dimensional and quasi-three-dimensional electron gas in a longitudinal magnetic field changes sign. It was found that the magnetoresistance in a strong magnetic field does not depend on the magnitude of the magnetic field and the screening radius, but is determined only by the degree of the band filling. In a weak magnetic field, the magnetoresistance is positive, depending not only on the magnitude of the magnetic field and the degree of the miniband filling, but also on the screening radius,

**Key words:** superlattices, Hall effect, magnetoresistance, strongly screened impurity ions.

УДК 621.382

**ДВУХБАРЬЕРНЫЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СТРУКТУРЫ  
ДИОДОВ ШОТТКИ****Р.К.МАМЕДОВ, А.Р.АСЛАНОВА**  
*Бакинский Государственный Университет*  
*rasimaz50@yahoo.com*

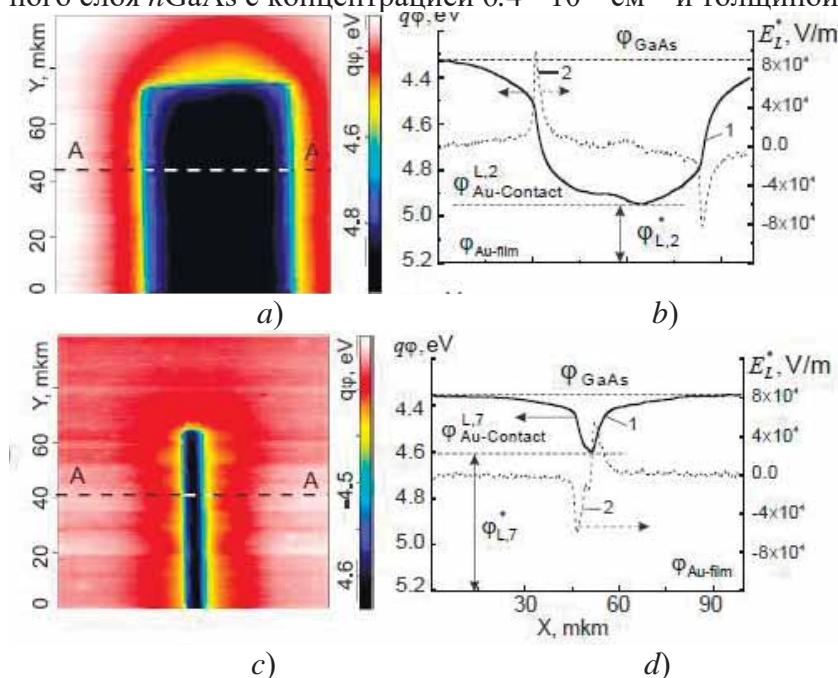
*Реальные ДШ с дополнительным электрическим полем (ДЭП) описываются двухбарьерной энергетической структурой контакта с двумя высотами потенциальных барьеров на периферийной и внутренней частей контактной поверхности. Прямые ветви ВАХ прямоугольных  $Au-nGaAs$  ДШ смешаются в сторону возрастания напряжения, равного на величину напряжения ДЭП и состоят из токов, протекающих через всю площадь общего контакта. Начальный участок прямой ветви ВАХ и обратная ветвь в целом прямоугольных ДШ состоят в основном из обратных токов насыщения, протекающих через периферийную часть контакта. Разность высот потенциальных барьеров периферийной и внутренней частей контакта ДШ составляет около 200 эВ.*

**Ключевые слова:** контакт металл-полупроводник, контакт Шоттки, результирующее электрическое поле, дополнительное электрическое поле, диоды Шоттки.

Характерная особенность реальных контактов Шоттки (КШ) заключается в возникновении дополнительного электрического поля (ДЭП) за счет разности потенциалов между контактной поверхностью и к ней примыкающими свободными поверхностями металла и полупроводника, охватывающего краевую часть контакта и проникающего в периферийную приконтактную область полупроводника [1,2]. Электрические параметры ДЭП и его особенности распределения вокруг КШ с различной геометрической конфигурацией и ограниченной контактной поверхностью были непосредственно измерены методами сканирующей зондовой микроскопии (СЗМ) [3-7]. Получено, что между энергетическими параметрами ДЭП и природой контактирующих материалов, формами и геометрическими размерами металлических контактов существуют определенные корреляции.

Как показано в [6], ДЭП, возникающее вокруг контакта металла золота (Au) на поверхности  $nGaAs$  полупроводника оказывает заметное влияние на поверхностный потенциал (работы выхода) свободных поверхностей металла и полупроводника. Работа выхода сплошной пленки

золота и пластинки nGaAs полупроводника составляют около 4,28 и 5, 22 эВ, соответственно. Под действием ДЭП работа выхода золота на центральной области поверхности Au – nGaAs ДШ с диаметрами 500 и 5 мкм уменьшается на около 0.12 и 0,56 эВ, соответственно. В тоже время, под действием ДЭП работа выхода в центральной области золота на поверхности Au – nGaAs ДШ с прямоугольной формой и шириной 190 мкм уменьшается на величину около 0.18 эВ и это уменьшение для контакта с шириной 2 мкм становится около 0,6 эВ. Получено, что ширина контактной поверхности ДШ является существенно влияющим фактором на характер распределения ДЭП. АСМ измерения ДЭП на контактной поверхности Au-nGaAs ДШ с одинаковой длиной периферии (600 мкм) и прямоугольной формой различной шириной  $b$  (мкм) контактной поверхности представлены на рис.1. Там показаны двухмерные  $\varphi(x, y)$  ( $a$  и  $c$ ) и одномерные  $\varphi(x)$  ( $b$  и  $d$ ) распределения электростатических потенциалов (работ выхода  $q\varphi$ ) поверхности (сплошные кривые 1) и электростатических полей  $E_L(x)$  (пунктирные кривые 2) прямоугольных контактов ( $40 \times 260$ ) мкм<sup>2</sup> и ( $2 \times 298$ ) мкм<sup>2</sup>, соответственно. Пленки золота Au толщиной 0.5 мкм осаждены электрохимическим методом на поверхность эпитаксиального слоя nGaAs с концентрацией  $6.4 \cdot 10^{14}$  см<sup>-3</sup> и толщиной 1 мкм.



**Рис. 1.** Двухмерные  $\varphi(x, y)$  ( $a, c$ ) и одномерные  $\varphi(x)$  ( $b, d$ ) распределения электростатических потенциалов (работ выхода  $q\varphi$ ) поверхности (сплошные кривые 1) и электростатических полей  $E_L(x)$  (пунктирные кривые 2) контактов Шоттки с прямоугольной формой ( $40 \times 260$ ) мкм<sup>2</sup> и ( $2 \times 298$ ) мкм<sup>2</sup>.

Из рисунков видно, что на поверхности полупроводника за периферией контакта наблюдается переходная область (ореол) плавно изменяющегося потенциала протяженностью  $l_i$ , а также переходная область плавно изменяющегося потенциала протяженностью  $l_{ci}$  на поверхности металла. На центрах металлического контакта работа выхода уменьшается на величину  $\varphi_L^*$  и на его краях максимум напряженности электростатического поля становится равны на величину  $E_{Lmax}^*$ .

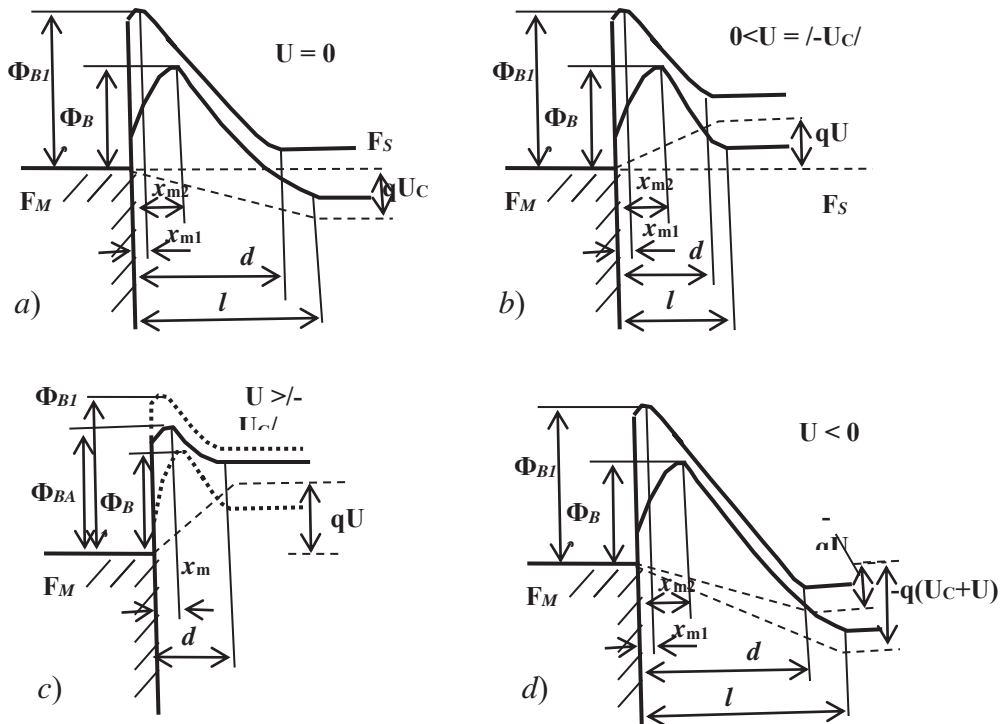
Из АСМ измерений параметров ДЭП ДШ с различной шириной стало видно, что величина ширины переходного слоя для контакта с шириной больше 10 мкм остается постоянным равным около 26 мкм и увеличивается до величины 36 мкм с уменьшением ширины контакта до величины 2 мкм.

Особенности ДЭП на свободной поверхности металла хорошо реализуются и заметно сказываются в электронных процессах, происходящих в приконтактной полупроводниковой области ДШ с любой формой контактной поверхности [8-10]. Реальные КШ с ДЭП описываются энергетической структурой двухбарьерных контактов, состоящих из внутренней части с электрическим полем объемных пространственных зарядов (ОПЗ) и периферийной части с результирующим электрическим полем (РЭП), возникающим суперпозицией электрического поля ОПЗ и ДЭП. Основные параметры энергетической структуры, интегральные электрофизические характеристики и параметры реальных ДШ становятся зависящими от формы и геометрических размеров контактной поверхности за счет электронных процессов, происходящих под действием ДЭП на ограниченной ширине периферийной части контакта.

### Энергетические структуры ДШ с ДЭП

Если ДШ с определенной площадью  $S$  изготовлен на основе контакта широкого прямоугольного металла с работой выхода  $\Phi_M$  и плоского полупроводника  $n$  – типа с работой выхода  $\Phi_S$ , тогда ДЭП с напряженностью  $E_A$ , направленное от контактной поверхности к свободным поверхностям контактирующих материалов, занимает определённую периферийную часть с шириной  $b$  и площадью  $S_2$ , а внутренняя часть с площадью  $S_1$  общего контакта остается без ДЭП. За счет влияния ДЭП, проникающего в полупроводник в глубине  $l$  происходит перераспределение свободных электронов, обуславливающих возникновению потенциала напряжения ( $-U_c$ ), приложенное к переходу в обратном направлении. В результате чего, прямоугольный ДШ с ДЭП характеризуется равновесной внутренней частью контакта с электрическим полем ОПЗ с глубиной  $d$  и неравновесной периферийной частью контакта с РЭП. Энергетическая

диаграмма такого ДШ при отсутствии внешнего напряжения  $U$  изображается так, как это представлено на рис.2а.



**Рис. 2.** Схематические изображения энергетических структур двухбарьерного ДШ с высотами потенциального барьера внутренней ( $\Phi_{B1}$ ) и периферийной ( $\Phi_{B2}$ ) частей контакта, при отсутствии внешнего напряжения (а), наличии прямого (b, c) и обратного (d) напряжения

Из рис.2а видно, что максимум высоты потенциального барьера  $\Phi_{B1}$  внутренней части контактной поверхности ДШ, определенная по модели Шоттки как разность работ выхода металла и полупроводника, находится от контактной поверхности металла на расстоянии  $x_{m1}$ . Внутренняя часть контакта ДШ находится в равновесном состоянии и токи насыщения  $I_{s1}$  в противоположных направлениях над высотой барьера  $\Phi_{B1}$  становится равным друг другу по модулю и соответствующий ток  $I_1$  становится равным нулю [11]. Максимум высоты потенциального барьера  $\Phi_{B2}$  периферийной части с РЭП контактной поверхности ДШ находится от контактной поверхности металла на расстоянии  $x_{m2}$ . Эта часть контакта ДШ под действием напряжения ДЭП ( $-U_C$ ) не находится в равновесном состоянии и через внешнюю цепь контакт протекает ток  $I_2$  в обратном направлении, равный току  $I_o$  общего контакта, который определяется следующей формулой [9]:

$$I_o = I_2 = S_2 A T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_{B2}}{\kappa T}\right) \left[ \exp\left(\frac{-qU_c}{\kappa T}\right) - 1 \right] \quad (1)$$

При приложении прямого напряжения  $U$  в интервале  $0 < U \leq -U_c$  к прямоугольному ДШ его ВАХ, состоящей из суммы токов внутренней  $I_{F1}$  и периферийной  $I_{F2}$  частей контакта определяется формулой [10]:

$$I_F = I_{F1} + I_{F2} = S_1 A T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_{B1}}{\kappa T}\right) \left[ \exp\left(\frac{qU}{n_{11} \kappa T}\right) - \exp\left(-\frac{qU}{n_{12} \kappa T}\right) \right] + \\ + S_2 A T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_{B2}}{\kappa T}\right) \left[ \exp\left(\frac{-n_{21} q U_c + qU}{n_{21} \kappa T}\right) - \exp\left(-\frac{qU}{n_{22} \kappa T}\right) \right] \quad (2)$$

где,

$$n_{11} = \frac{1}{1 - \beta_1} ; \quad n_{12} = \frac{1}{\beta_1} ; \quad n_{21} = \frac{1}{1 - \beta_2} ; \quad n_{22} = \frac{1}{\beta_2} . \quad (3)$$

Все обозначения в формулах являются общепринятыми.

Характер начального участка прямой ветви ВАХ ДШ определяется численными значениями  $S_1$ ,  $S_2(b)$ ,  $\Phi_{B1}$ ,  $\Phi_{B2}$  и особенностями изменений  $\Phi_{B1}$  и  $\Phi_{B2}$  на величин  $q\beta_1 U$  и  $q\beta_2 U$ , соответственно. Из формулы (2) следует, что когда приложенное  $U$  становится равным напряжению ДЭП ( $U = -U_c$ ), через периферийную часть с шириной  $b$  и площадью  $S_2$  контакта ток прекращается и энергетическая диаграмма ДШ имеет вид, как это представлено на рис.2б. При дальнейшем увеличении напряжения ( $U > -U_c$ ) через обе части с  $\Phi_{B1}$  и  $\Phi_{B2}$  контакта будут протекать токи в прямом направлении (рис.2с). ДШ с общей площадью  $S$  контакта будет определяться действующей высотой потенциального барьера  $\Phi_{BA}$ , коэффициентом идеальности  $n$ , безразмерным коэффициентом  $n'$  и его ВАХ будет определяться следующей формулой:

$$I_F = S A T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_{BA}}{\kappa T}\right) \left[ \exp\left(\frac{qU}{n \kappa T}\right) - \exp\left(-\frac{qU}{n' \kappa T}\right) \right] \quad (4)$$

где,

$$n = \frac{1}{1 - \beta} ; \quad n' = \frac{1}{\beta} . \quad (5)$$

Энергетическая диаграмма ДШ при обратном напряжении ( $-U$ ) имеет вид, как это представлено на рис.2д. Характер обратной ветви ВАХ ДШ определяется численными значениями  $S_1$ ,  $S_2(b)$ ,  $\Phi_{B1}$ ,  $\Phi_{B2}$  и особенностями изменений  $\Phi_{B1}$  и  $\Phi_{B2}$  на величин  $q\beta_{r1} U$  и  $q\beta_{r2} U$ , соответственно. Обратный ток  $I_R$  прямоугольного ДШ будет состоят из суммы токов насыщения  $I_{R1}$  и  $I_{R2}$ , протекающих через внутреннюю и периферийную

часть с шириной  $b$  контакта, соответственно. С ростом обратного напряжения  $\Phi_{B1}$  и  $\Phi_{B2}$  уменьшаются приблизительно на величину  $q\beta_{r1}U$  и  $q\beta_{r2}U$ , следовательно, токи  $I_{R1}$  и  $I_{R2}$  медленно увеличиваются. Таким образом, обратная ветвь ВАХ прямоугольного ДШ с общей площадью  $S$ , состоящий из суммы токов внутренней и периферийной частей контакта определяется формулой [10]:

$$I_R = I_{R1} + I_{R2} = S_1 A T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_{B1}}{\kappa T}\right) \left[ \exp\left(-\frac{qU}{n_{r11} \kappa T}\right) - \exp\left(\frac{qU}{n_{r12} \kappa T}\right) \right] + S_2 A T^2 \exp\left(-\frac{\Phi_{B2}}{\kappa T}\right) \left[ \exp\left(\frac{-n_{r21} q U_c - qU}{n_{r21} \kappa T}\right) - \exp\left(\frac{qU}{n_{r22} \kappa T}\right) \right] \quad (6)$$

где,

$$n_{r11} = \frac{1}{1 - \beta_{r1}} ; \quad n_{r12} = \frac{1}{\beta_{r1}} ; \quad n_{r21} = \frac{1}{1 - \beta_{r2}} ; \quad n_{r22} = \frac{1}{\beta_{r2}} , \quad (7)$$

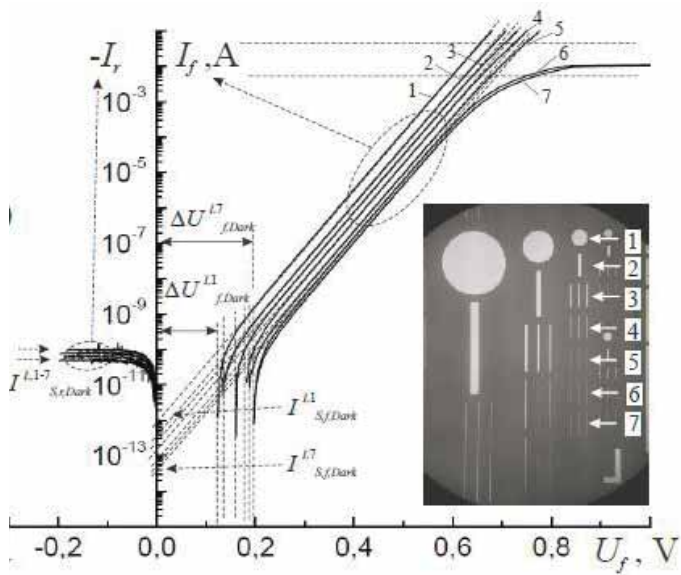
Коэффициенты  $\beta_{r1}$ ,  $\beta_{r2}$  и следовательно  $n_{r11}$ ,  $n_{r12}$ ,  $n_{r21}$ ,  $n_{r22}$  в формулах (6) и (7) являются зависящими от конструктивной структуры ДШ и приложенного напряжения.

Из изложенного выше следует, что прямоугольные ДШ с ДЭП могут описываться энергетической структурой двухбарьерных контактов, состоящих из внутренней части с  $S_1$  и электрическим полем ОПЗ, а также периферийной части с шириной  $b$ , площадью  $S_2$  и РЭП. Двухбарьерные энергетические структуры ДШ находятся в хорошем согласии с экспериментальными результатами многочисленных работ [12-15], а также представленными ниже прямоугольного Au-nGaAs ДШ с различной шириной контактной поверхности.

### **Токопрохождение в прямоугольных ДШ с различной шириной**

Типичные экспериментально измеренные ВАХ в прямом и обратном направлениях Au-nGaAs ДШ с одинаковой длиной (600 мкм) периферии, диаметром ( $D$ ,  $\mu\text{m}$ ) и прямоугольной формой контактов ( $b \times a$ ,  $\mu\text{m}^2$ ): 1 - 191, 2 - 40x260, 3 - 20x280, 4 - 10x290, 5 - 5x295, 6 - 3x297 и 7 - 2x298 и их фотографические изображения [6] представлены на рис.3.

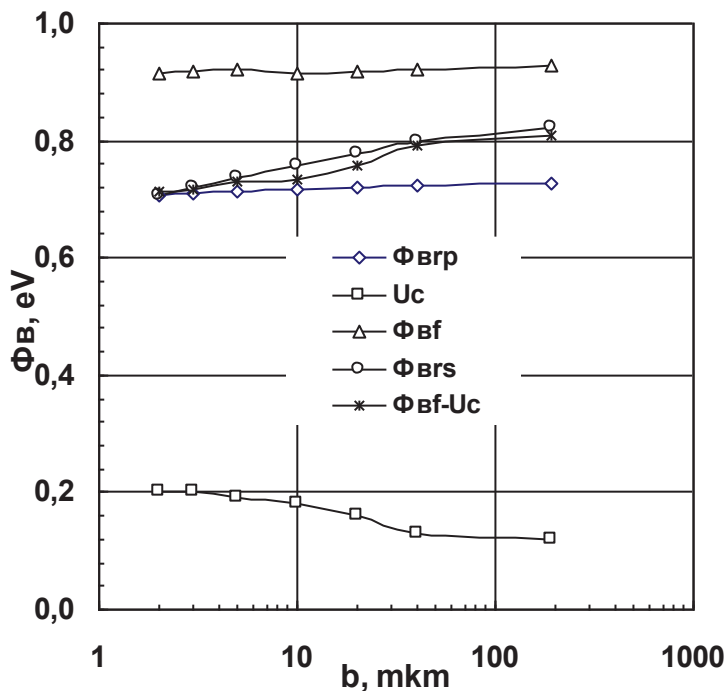




**Рис.3.** Прямые и обратные ВАХ Au-nGaAs ДШ с круглой ( $D$ , мкм) и прямоугольной формой ( $b \times a$ ,  $\mu\text{m}^2$ ) контактов: 1 - 191, 2 - 40x260, 3 - 20x280, 4 - 10x290, 5 - 5x295, 6 - 3x297 и 7 - 2 x298 (на вставке представлено оптическое изображение контактов).

Из рис.3 видно, что прямые ветви ВАХ ДШ с различной шириной контакта смещаются от оси ордината на величину  $\Delta U^i$  в направлении возрастания напряжения и согласно теории термоэлектронной эмиссии [11] изображаются прямыми линиями в полулогарифмическом масштабе в широком интервале тока. Это показывает, что при этом второе слагаемое в формуле (2) преобладает над первым слагаемым, т.е. токи внутренней части контакта все еще остаются незначительными. Величина  $\Delta U^i$  увеличивается от 0,12 до 0,2 В с уменьшением ширины контакта от 190 до 2 мкм и это показывает, что токи в Au-nGaAs ДШ при прямом смещении начинают протекать после компенсации напряжения ( $-U_c$ ) ДЭП с приложенным напряжением, равным на величину  $\Delta U^i$ , как это следует из формулы (2), и при дальнейшем увеличении напряжения ( $U > \Delta U^i$ ) ВАХ ДШ определяется формулой (4). Увеличение  $\Delta U^i$  с уменьшением ширины контакта свидетельствует о том, что напряжение  $U_c$  ДЭП в периферийной приконтактной области ДШ также увеличивается с уменьшением ширины контакта. Были определены токи насыщения  $I_{sf}$  путем экстраполяции прямых линии ВАХ к оси ордината при нулевом напряжении и на их основе были вычислены действующие высоты потенциального барьера  $\Phi_{Bf}$  ДШ с площадью  $S$  и коэффициенты идеальности  $n$ , которые были равны к близко 1.

Обратные ветви ВАХ Au-nGaAs ДШ с различной шириной контакта одинаковой длиной периферии хорошо описывается формулой (6). Обратные токи с ростом напряжения сначала медленно увеличиваются и далее переходят к насыщению. Токи насыщения  $I_{sr}$ , полученных путем экстраполяции прямых линии обратных ВАХ к оси ордината при нулевом напряжении, становятся значительно больше, чем токи насыщения  $I_{sf}$  прямых ветвей ВАХ ДШ. Разница токов насыщений ( $I_{sr} - I_{sf}$ ) увеличивается от одного до четырех порядков с уменьшением ширины контакта от 191 до 2 мкм. Это показывает, что второе слагаемое стало больше, чем первое слагаемое в формуле (6). С уменьшением ширины контакта ДШ с одинаковой длиной периферии площадь контакта уменьшается и в тоже время  $I_{sr}$  и его линейная плотность  $J_{pr}$  по длине периферии контакта увеличиваются, а  $I_{sf}$  уменьшается. Это означает, что  $I_{sr}$  состоит в основном из токов, протекающих через площадь ( $S_p$ ) периферийной части со сниженной высоты потенциального барьера  $\Phi_{Brp}$  под действием ДЭП и из токов  $I_{sf}$ , протекающих через площадь  $S$  общего контакта с усредненной высотой потенциального барьера  $\Phi_{Bf}$ .



**Рис.4.** Зависимости высоты потенциальных барьеров  $\Phi_{Bf}$ ,  $\Phi_{Brp}$ ,  $\Phi_{BrS}$ , напряжения  $U_C$  и разности ( $\Phi_{Bf} - U_C$ ), вычисленные из прямых и обратных ВАХ Au-nGaAs ДШ от  $b$  ширины контакта.

На рис.4 представлены зависимости высоты потенциальных барьеров  $\Phi_{Bf}$ ,  $\Phi_{BrP}$ ,  $\Phi_{BrS}$ ,  $U_c$  и  $(\Phi_{Bf} - U_c)$ , вычисленные из прямых и обратных ВАХ Au-nGaAs ДШ с ДШ от ширины контакта, где видно что  $\Phi_{Bf}$  практически не зависят от ширины контакта, следовательно от площади  $S$ . Это показывает, что при напряжении  $U > |-U_c|$  ДЭП оказывает незначительное влияние на прямые ветви ВАХ ДШ. Численные значения  $I_{Sr}$ ,  $J_{Pr}$  и также высоты потенциального барьера  $\Phi_{BrP}$  и  $\Phi_{BrS}$  вычислены методом обратной ветви ВАХ ДШ с использованием площадь  $S_p$  периферийной части с шириной около 1-2 мкм [10] и площадь  $S$  общего контакта. Нетрудно заметить, что с уменьшением ширины контакта от 190 до 2 мкм высота барьера  $\Phi_{BrP}$  периферийной части ДШ уменьшается всего на 0.021 эВ, а усредненная высота барьера  $\Phi_{BrS}$  по площади  $S$  общего контакта уменьшается на 0.115 эВ. В тоже время, для всех ДШ величина  $\Phi_{BrS}$  становится почти равным на разницу  $(\Phi_{Bf} - U_c)$  и хорошо совпадает с высотой потенциального барьера  $\Phi_{BrS}$  ДШ.

Таким образом, выше представленные результаты исследования токопрохождения в неосвещенных Au-nGaAs ДШ с прямоугольной формой и различной шириной контакта показывают, что ВАХ ДШ в целом хорошо описываются формулами (1)-(7), полученными на основе теории термоэлектронной эмиссии с учетом влияния напряжения  $U_c$  ДЭП. Токи прямой ветви ВАХ ДШ с высотой барьера  $\Phi_{Bf}$ , большей на около 200 мВ от  $\Phi_{BrP}$ , начинают протекать через площадь общего контакта после приложении напряжения  $\Delta U^i$ , равного на величину напряжения  $|-U_c|$  ДЭП. Обратные токи ДШ фактически протекают в основном через узкую краевую площадь контакта с  $\Phi_{BrP}$ .

### Заключение

В реальных ДШ под действием ДЭП происходит перераспределение свободных электронов в периферийной приконтактной области полупроводника, которое обуславливает возникновение падение напряжения  $U_c$ . ДШ описываются двухбарьерной энергетической структурой контакта с двумя высотами потенциальных барьеров в периферийной и внутренней частей, отличающимися почти на величину напряжения  $U_c$  ДЭП и локализованными на разных расстояниях от контактной поверхности металла.

Прямые ветви ВАХ прямоугольных Au-nGaAs ДШ смешаются в сторону возрастания напряжения, равного на величину напряжения ДЭП и состоят из токов, протекающих через всю площадь общего контакта. Напряжение ДЭП увеличивается от 130 мВ до 210 мВ с уменьшением

ширины контакта от 190 мкм до 2 мкм. Начальный участок прямой ветви ВАХ и обратная ветвь ВАХ прямоугольных ДШ состоят в основном из обратных токов насыщения, протекающих через периферийную часть контактной поверхности. Высота потенциального барьера периферийной части контакта имеет значение на около 200 эВ меньше, чем высоты барьера внутренней части контакта.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Мамедов Р.К. Контакты металл – полупроводник с электрическим полем пятен. Баку, БГУ, 2003, 231 с.
2. Mamedov R.K., Features of the additional electric field in real metal-semiconductor contact, *News BSU Ser. Phys. Math. Sci.* 4 (2013) 128-163
3. Торхов Н.А., Божков В.Г., Ивонин И.В., Новиков В.А. Исследование распределения потенциала на локально металлизированной поверхности nGaAs методом Атомно – Силовой Микроскопии. Поверхность: рентгеноские, синхротронные и нейтронные исследования. 2009, № 1, с.57-66.
4. Торхов Н.А. Влияние фотоэда на токопрохождение в контактах металл – полупроводник с барьером Шоттки. ФТП, 2011, т.45, в.7, с.965 –973
5. Торхов Н.А. Влияние периферии контактов металл – полупроводник с барьером Шоттки на их электрофизические характеристики. ФТП, 2011, т.45, в.1, с.70-86.
6. Торхов Н.А. Влияние фотоэда на токопрохождение в контактах металл – полупроводник с барьером Шоттки. ФТП, 2011, т.45, в.7, с.965 –973
7. Torkhov N.A., The influence of the peripheral electrostatic field on the valve photoelectric effect in metal-semiconductor contacts with a Schottky barrier, *Physics and Technology of Semiconductors*, 52 (10) (2018) 1150-1171
8. Mamedov R.K., Aslanova A.R., Alternativ current source based Schottky contact with additional electric field, *Superlattices and Microstructures*, 107 (2017) 28–37.
9. Mamedov R.K., Aslanova A.R. Features of current-voltage characteristic of non-equilibrium trench MOS barrier Schottky diode, *Superlattices and Microstructures*, 118 (2018) 298–307.
10. Mamedov R.K., Aslanova A.R. Features of current transport in Schottky diodes with additional electric field, *Superlattices and Microstructures*, 136 (2019) 106297.
11. Зи С.М. Физика полупроводниковых приборов, часть 1. Москва, Мир, 1984, 450 с.
12. Caixia Hou , Robert A. Makin , Krystal R. York et. al., High-temperature (350 °C) oxidized iridium Schottky contacts on  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, *Appl. Phys. Lett.* 114 (2019) 233503.
13. Jiancheng Yang, Chaker Fares, Fan Ren et. al., Switching Behavior and Forward Bias Degradation of 700V, 0.2A,  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Vertical Geometry Rectifiers, *ECS Journal of Solid State Science and Technology*, 8 (7) (2019)Q3028-Q3033.
14. Chandan Joishi, Subrina Rafique, Zhanbo Xia1 et al, Low-pressure CVD-grown  $\beta$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> bevel-field-plated Schottky barrier diodes *Applied Physics Express* 11, (2018) 031101.
15. S. K p, A. Ta er,  . Kanmaz, B. et. al., Effects of Au-Ag and Au-Cu alloy ratios on the temperature dependent current-voltage characteristics of Au-Ag/n-GaAs/In and Au-Cu/n-GaAs/In Schottky diodes, *Materials Today: Proceedings* 18 (2019) 1936–1945.

# İKİÇƏPƏRLİ ENERJETİK STRUKTURLU ŞOTTKİ DİODLARI

R.Q.MƏMMƏDOV, Ə.R.ASLANOVA

## XÜLASƏ

Real Şottki diodları (ŞD) əlavə elektrik sahəsinin (ƏES) təsiri ilə biri periferiya boyunca, digəri mərkəzi hissədə yerləşən iki hündürlüyə malik ikiçəpərli energetik strukturla xarakterizə olunur. Düzbucaqlı Au-nGaAs SD-nin düz istiqamətdə VAX-ı gərginliyin artma istiqamətində ƏES gərginliyi qədər sürüşür və kontaktın ümumi səthindən keçən cərəyandan ibarət olur. SD-nin VAX-nin düz istiqamətdə başlanğıc hissəsi və əks istiqamətdə hamısı əsasən kontaktın periferiya hissəsindən keçən əks doymuş cərəyandan ibarət olur. SD kontaktının periferiya və mərkəzi hissələrində potensial çəpərin hündürlükləri fərqi təqribən 200 eV olur.

**Açar sözlər:** metal-yarımkeçirici kontakt, Şottki kontaktı, yekun elektrik sahəsi, əlavə elektrik sahəsi, Şottki diodu.

# TWO BARRIER ENERGY STRUCTURES OF SCHOTTKY DIODES

R. K.MAMEDOV, A.R.ASLANOVA

## SUMMARY

Real SD under the action of an additional electric field (AEF) are described by a two-barrier energy contact structure with two potential barriers heights in the peripheral and internal parts of the contact surface. The forward  $I - V$  characteristics of rectangular Au-nGaAs SDs are shifted in the direction of increasing voltage, which is equal to the magnitude of the AEF voltage and consist of currents flowing through the entire common contact area. The initial portion of the forward  $I - V$  characteristic and the generally reverse branch of the rectangular SDs consist mainly of reverse saturation currents flowing through the peripheral part of the contact. The height difference between the potential barriers of the peripheral and internal parts of the SD contact is about 200 eV.

**Key words:** metal - semiconductor contact, Schottky contact, resulting electric field, additional electric field, Schottky diode.

UOT 577.3

**β- KAZOMORFİN-5 MOLEKULUNUN  
NƏZƏRİ KONFORMASIYA ANALİZİ**

**L.N.AGAYEVA, R.M.ABBASLI,  
L.İ.İSMAYİLOVA, L.S.HACIYEVA, N.A.ƏHMƏDOV**  
*Bakı Dövlət Universiteti*  
*leylanamig@mail.ru*

*Nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə Tyr1-Pro2-Phe3-Pro4-Gly5-NH<sub>2</sub> β-kazomorfin-5 molekulunun fəza quruluşu tədqiq olunmuşdur. β-kazomorfin-5 molekulunun fəza quruluşunu öyrənmək üçün sistemin potensial enerjisi qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin və hidrogen rabitəsi enerjisinin cəmi şəklində seçilmişdir. β-kazomorfin-5 molekulunun stabil konformasiyaları yığımları, onların ikiüzlü fırlanma bucaqlarının qiymətləri, onları stabilləşdirən aminturşu qalıqları arasındakı və daxili qarşılıqlı təsir enerjiləri müəyyən edilmişdir. Göstərilmişdir ki, bu molekulun fəza quruluşu 0 – 8 kkal/mol enerji intervalına düşən əsas zəncirin on altı forması ilə təmsil edilir.*

**Açar sözlər:** ekzorfin, kazomorfin, opioid, fəza quruluşu, konformasiya

Qida maddələrindən alınmış bir sıra ekzogen peptidləri opioidəbənzər xassələrə malikdir. İlk dəfə elmə məlum olan ekzorfinlər α-kazeindən və buğda qlütenindən alınmışdır və müəyyən təsirləri öyrənilmişdir. Qida maddələrinin peptid komponentlərinin opioid aktivliyinə malik olmasının kəşfi belə fərziyyə ilə irəli sürməyə əsas verdi ki, bəzi yeməklər mərkəzi əsəb sisteminə opiat dərmanlar kimi təsir göstərməyə qadirdir. Bəzi tədqiqatçılar fərz edirlər ki, insanlar tərəfindən süd və buğda məhsullarının çox istifadə edilməsi onların tərkibində ekzorfinlərin olması nəticəsində olmuşdur. Endogen opioid peptidlərinin və ekzorfinlərin aminturşu qalıqları ardıcılıqlarının müqayisəsi göstərir ki, ekzorfin molekulunun N-tərəf aminturşu qalıqları daha rəngarəngdir. Bu onu göstərir ki, ekzorfinlər opiat reseptorlarının ixtisaslaşdırılmış liqandları deyil və onlar bəzi hallarda müxtəlif mediator və hormonlarla müxtəlif vəziyyətlərdə qarşılıqlı təsirlərdə ola bilərlər. Ekzorfinlərin N- tərəfində ən çox rast gəlinən Tyr-Pro ardıcılığıdır. Endogen opioid peptidlərinin N-tərəfində ən çox rast gəlinən Tyr-Gly-Gly-Phe ardıcılığıdır. Prolin aminturşu qalığının olması molekulu parçalanmaya qarşı daha davamlı edir. Heyvan mənşəli ekzorfinlər

arasında ən çox tədqiq olunanı süd zülalının törəmələridir. Ən çox öyrənilənləri inək südünün  $\beta$ -kazeininin hidrolizindən alınan  $\beta$ -kazomorfin-4, -5, -6, -7 –dir. [1-4].

Opioid peptidləri sinfinə aid olan enkefalinlərin, endorfinlərin, endomorfinlərin, dinorfinlərin, neoendorfinlərin quruluş-funksiya əlaqələrini tədqiq etmişik, indi isə ekzorfinlər sinfinə daxil olan molekulların quruluş-funksiya əlaqələri tədqiq olunur. Bu tədqiqat işi də əvvəlki tədqiqat işlərimizin davamıdır [5-10].

### Hesablama metodu

Tyr1-Pro2-Phe3-Pro4-Gly5-NH<sub>2</sub>  $\beta$ -kazomorfin-5 molekulu beş amin-turşu qalığından, 81 atomdan və 18 ikiüzlü fırlanma bucağından ibarətdir.  $\beta$ -kazomorfin-5 molekulunun fəza quruluşunu öyrənmək üçün sistemin potensial enerjisi qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin və hidrogen rabitəsi enerjisinin cəmi şəklində seçilmişdir. Qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisi Lennard-Cons potensialı ilə Momani və Şeraqanın verdiyi parametrlərlə hesablanmışdır. Molekulun konformasiya imkanları su mühitində öyrənilmişdir. Hidrogen rabitəsinin enerjisi Morze potensialı ilə hesablanmışdır. Torsion qarşılıqlı təsir enerjisini hesablamaq üçün potensial funksiyalar, atomlardakı parsial yüklərin qiymətləri, valent bucaqlarının qiymətləri və valent rabitələrinin uzunluqları Momani və Şeraqanın məqaləsindən götürülmüşdür. İkiüzlü fırlanma bucaqlarının işarələri və qiymətləri beynəlxalq nomenklaturaya uyğundur [11].

Nəzəri konformasiya analizi üsulunda hesablamaların nəticələrini təhlil etmək üçün hər bir aminturşu qalığının konformasiya halını xarakterizə etmək üçün  $X^{n_{ij}}$  işarəsindən istifadə edilir, burada X-aminturşu qalığının əsas zəncirinin formalarını (R,B,L,P), n-ardıcılıqda aminturşu qalığının neçənci yerdə durduğunu,  $ij=11,12,13,21$  və s. simvolları aminturşu qalığının yan zəncirinin vəziyyətini ( $\chi_1, \chi_2, \chi_3$ ) xarakterizə edir. 1-indeksi ikiüzlü fırlanma bucağının qiymətinin  $0^\circ-120^\circ$  intervalında, 2-indeksi  $120^\circ- -120^\circ$  intervalında, 3-indeksi  $-120^\circ-0^\circ$  intervalında dəyişdiyini göstərir. Aminturşu qalığının əsas zəncirinin R-oblastında ikiüzlü fırlanma bucaqları  $\varphi$  və  $\psi$ -nin qiymətləri  $-180^\circ-0^\circ$  intervalında; B-oblastında  $\varphi$ -nin qiyməti  $-180^\circ-0^\circ$  intervalında,  $\psi$ -nin qiyməti  $0^\circ-180^\circ$  intervalında; L-oblastında  $\varphi$  və  $\psi$ -nin qiymətləri  $0^\circ-180^\circ$  intervalında; P-oblastında  $\varphi$  -nin qiyməti  $0^\circ-180^\circ$  intervalında,  $\psi$ -nin qiyməti  $-180^\circ-0^\circ$  intervalında dəyişir. Əsas zəncirin forması anlayışı aminturşu qalıqlarının əsas zəncirinin ikiüzlü fırlanma bucaqlarının qiymətlərinin R,B,L,P oblastlarına düşdüyünü müəyyən edir.

Molekulun əsas zənciri e və f şəypə adlanan simvollarla da xarakterizə olunur ki, bunlar da uyğun olaraq  $C^{\alpha}_i-C^{\alpha}_{i+1}-C^{\alpha}_{i+2}-C^{\alpha}_{i+3}$  virtual rabitələrinin açılmış və bükülmüş konfigurasiyasına uyğun gəlir. f-şeypini dipeptid fraqmentin

R-R, R-B, B-L, L-L, B-P, L-P, P-R, R-B formaları, e-şeypini isə B-B, B-R, L-B, L-P, R-L, R-P, P-L, P-P formaları əmələ gətirir.

### Hesablamaların nəticələri və onların müzakirəsi

Tyr1-Pro2-Phe3-Pro4-Gly5-NH<sub>2</sub> β-kazomorfin-5 molekulunun fəza quruluşu onu əmələ gətirən metilamid-N-asetil-L-tirozin və β-kazomorfin-4 molekullarının aşağıenerjili konformasiyaları əsasında tədqiq olunmuşdur. Birinci mərhələdə Pro1-Phe2-Pro3-Gly4-NH<sub>2</sub> β-kazomorfin-4 molekulunun fəza quruluşu onu əmələ gətirən uyğun aminturşu qalıqlarının aşağıenerjili konformasiyaları əsasında hesablanmışdır. Məlumdur ki, molekulun aminturşu qalıqları ardıcılığında qlisindən başqa digər aminturşu qalıqları prolin aminturşu qalığından əvvəl gəldikdə onlar üçün əsas zəncirin R formasının konformasiyaları yüksəkenerjili olur. Ona görə də β-kazomorfin-4 molekulunun fəza quruluşunu hesablamaq üçün başlanğıc variantlar seçildikdə Phe2 üçün əsas zəncirin R formasının konformasiyalarına baxılmamışdır. Bu səbəbdən də molekulun fəza quruluşunu öyrənmək üçün başlanğıc variantlar peptid zəncirin eee, eef, fee və fef şeyplərinin əsas zəncirlərinin 16 formasının konformasiyaları əsasında formalaşmışdır. β-kazomorfin-4 molekulunun fəza quruluşunun öyrənilməsi göstərir ki, əsas zəncirin formalarının və konformasiyaların enerjilərinə görə diferensiasiya gedir. Hesablanmış konformasiyalar arasından əsas zəncirin hər bir formasının ən aşağıenerjili konformasiyası seçilmiş, onlara qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay, ümumi və nisbi enerjiləri cədvəl 1-də göstərilmişdir.

Cədvəl 1

### β-kazomorfin-4 molekulunun aşağıenerjili konformasiyaları, onlara qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay, ümumi və nisbi enerjiləri

Nö	Şeyp	Konformasiya	U <sub>qv</sub>	U <sub>el</sub>	U <sub>tor</sub>	U <sub>üm</sub>	U <sub>nis</sub>
1	fef	R B <sub>3</sub> R R	-10.3	-2.7	1.0	-12.0	0
2		R B <sub>2</sub> B L	-8.9	-3.0	1.5	-10.3	1.7
3		B L <sub>3</sub> R R	-9.2	-2.6	1.7	-10.1	1.9
4		B L <sub>2</sub> B L	-7.6	-2.6	1.9	-8.3	3.7
5	fee	R B <sub>1</sub> R L	-9.4	-2.8	0.8	-11.3	0.7
6		R B <sub>1</sub> B B	-6.7	-3.1	0.9	-8.9	3.1
7		B L <sub>3</sub> R L	-7.6	-2.6	1.5	-8.7	3.3
8		B L <sub>3</sub> B B	-5.4	-3.0	1.4	-7.0	5.0
9	eef	B B <sub>3</sub> R R	-9.0	-2.8	1.2	-10.6	1.4
10		R L <sub>3</sub> R R	-10.1	-2.4	2.1	-10.3	1.7
11		B B <sub>2</sub> B L	-8.5	-2.9	1.5	-9.9	2.1
12		R L <sub>2</sub> B L	-8.2	-2.5	1.7	-9.0	3.0
13	eee	B B <sub>1</sub> R L	-7.5	-2.8	0.9	-9.4	2.6
14		R L <sub>2</sub> R L	-8.1	-2.4	1.5	-9.0	3.0
15		B B <sub>1</sub> B B	-5.4	-3.2	1.2	-7.4	4.6
16		R L <sub>3</sub> B B	-6.4	-2.8	1.8	-7.3	4.7



Cədvəl 1-dən göründüyü kimi, qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisinin ümumi enerjiyə verdiyi pay (-10.3) – (-5.4) kkal/mol, elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisinin verdiyi pay (-3.2) – (2.4) kkal/mol, torsion qarşılıqlı təsir enerjisinin verdiyi pay (0.8) - (2.1) kkal/mol intervalında olmuşdur. Cədvəl 1-də göstərilən konformasiyaların nisbi enerjiləri isə 0 - 5.0 kkal/mol enerji intervalında dəyişir. Bu konformasiyaların hamısı və Tyr1-in aşağıenerjili konformasiyaları β-kazomorfin-5 molekulunun fəza quruluşunu hesablamaq üçün başlanğıc variantlar kimi seçilmişdir. Ona görə də pentapeptid molekulun fəza quruluşunu öyrənmək üçün ilk yaxınlaşmada bir neçə yüz konformasiya hesablanmışdır.

β-kazomorfin-5 molekulunun fəza quruluşunun hesablanması göstərdi ki, şeyplərin, əsas zəncirin formalarının və konformasiyaların enerjilərinə görə diferensiasiya gedir. 0 – 10 kkal/mol enerji intervalına dörd şeypə mənsub, əsas zəncirin on altı formasının konformasiyaları düşür. Əsas zəncirin hər bir formasının ən aşağıenerjili konformasiyası, onlara qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay, ümumi və nisbi enerjiləri cədvəl 2-də göstərilmişdir.

Cədvəl 2

**β-kazomorfin-5 molekulunun aşağıenerjili konformasiyaları, onlara qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri pay, ümumi və nisbi enerjiləri**

№	Şeyp	Konformasiya	$U_{qv}$	$U_{el}$	$U_{tor}$	$U_{üm}$	$U_{nis}$
1	efee	B <sub>1</sub> R B <sub>1</sub> R L	-16.4	-2.2	1.8	-16.8	0
2		B <sub>3</sub> R B <sub>1</sub> B B	-16.5	-2.7	3.4	-15.8	1.0
3		B <sub>2</sub> B L <sub>3</sub> R L	-13.4	-1.7	2.5	-12.6	4.2
4		B <sub>1</sub> B L <sub>3</sub> B B	-10.7	-2.3	2.7	-10.4	6.4
5	eeef	B <sub>2</sub> B B <sub>3</sub> R R	-16.4	-1.9	3.1	-15.2	1.6
6		B <sub>2</sub> B B <sub>2</sub> B L	-15.9	-2.2	3.4	-14.8	2.0
7		B <sub>2</sub> R L <sub>2</sub> B L	-13.7	-1.8	3.0	-12.5	4.3
8		B <sub>3</sub> R L <sub>3</sub> R R	-13.0	-1.6	2.8	-11.9	4.9
9	efef	B <sub>3</sub> R B <sub>1</sub> B L	-15.5	-2.0	2.8	-14.7	2.1
10		B <sub>3</sub> R B <sub>3</sub> R R	-13.9	-2.4	2.2	-14.2	2.6
11		B <sub>1</sub> B L <sub>3</sub> R R	-13.7	-2.1	2.4	-13.4	3.4
12		B <sub>2</sub> B L <sub>2</sub> B L	-13.7	-1.7	2.7	-12.7	4.1
13	eeee	B <sub>2</sub> B B <sub>1</sub> R L	-14.6	-1.9	3.2	-13.3	3.5
14		B <sub>2</sub> B B <sub>1</sub> B B	-14.2	-2.5	3.8	-12.9	3.9
15		B <sub>2</sub> R L <sub>2</sub> R L	-11.7	-1.5	2.6	-10.6	6.2
16		B <sub>3</sub> R L <sub>3</sub> B B	-9.6	-2.1	2.5	-9.2	7.6

Cədvəl 2-dən göründüyü kimi, qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisinin ümumi enerjiyə verdiyi pay (-16.5) – (-9.6) kkal/mol, elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisinin verdiyi pay (-2.7) – (-1.5) kkal/mol, torsion qarşılıqlı təsir enerjisinin verdiyi pay (1.8) - (3.8) kkal/mol intervalında olmuşdur. Cədvəl 2-də göstərilən konformasiyaların nisbi enerjiləri isə 0 - 8.0 kkal/mol enerji intervalında dəyişir.

$\beta$ -kazomorfin-5 molekulunun hər bir şəypinin ən aşağıenerjili konformasiyalarında aminturşu qalıqları daxilində və arasında qarşılıqlı təsir enerjiləri cədvəl 3-də, onların həndəsi parametrləri isə cədvəl 4-də göstərilmişdir.  $\beta$ -kazomorfin-5 molekulunun ən stabil konformasiyası efee şəypinə mənsub  $B_1RB_1RL$ -dir. Cədvəl 1-dən görüldüyü kimi bu konformasiya eyni zamanda qeyri-valent, elektrostatik və torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinə görə əlverişlidir. Bu konformasiyada Tyr1 fəzada elə vəziyyətdə yerləşir ki, özündən sonra gələn Pro2, Phe3 və Pro4 ilə əlverişli qarşılıqlı təsir yaradır. Bu qarşılıqlı təsirlər ümumi enerjiyə (-11.6) kkal/mol qədər pay verir (cədvəl 3). Konformasiyanın stabiləşməsinə Pro2–Phe3 qarşılıqlı təsiri (-2.2) kkal/mol qədər, Phe3-ün Pro4 və Gly5-lə qarşılıqlı təsiri isə (-5.5) kkal/mol qədər pay verir (cədvəl 3).

efee şəypinin və molekulun ikinci aşağıenerjili konformasiyası  $B_3RB_1BB$ -dir. Bu konformasiya qeyri-valent və elektrostatik qarşılıqlı təsirlərə görə qlobal konformasiyadan daha əlverişlidir və elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisinə görə ən əlverişlidir. Yalnız torsion qarşılıqlı təsir enerjisinə görə qlobal konformasiyaya uduzur (cədvəl 2). efee şəypinin  $BBLRL$  və  $BBLBB$  formalarının konformasiyalarının nisbi enerjiləri 4.2 kkal/mol-dan böyükdür.

eeef şəypinin cədvəl 2-də göstərilən konformasiyalarının nisbi enerjiləri 1.6–4.9 kkal/mol enerji intervalında dəyişir. Şeypin ən stabil konformasiyası nisbi enerjisi 1.6 kkal/mol olan  $B_2RB_3RR$ -dir. Bu konformasiyaya qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisi (-16.4) kkal/mol, elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisi (-1.9) kkal/mol, torsion qarşılıqlı təsir enerjisi 3.1 kkal/mol qədər pay verir. Bu konformasiyada da Tyr1 fəzada elə vəziyyətdə yerləşir ki, özündən sonra gələn Pro2, Phe3 və Pro4 ilə əlverişli qarşılıqlı təsir yaradır, onlarla qarşılıqlı təsir enerjisi ümumi enerjiyə (-12.0) kkal/mol qədər pay verir. Phe3-ün Pro4 və Gly5-lə qarşılıqlı təsir enerjisi isə ümumi enerjiyə (-5.4) kkal/mol qədər pay verir (cədvəl 3). eeef şəypinin sonrakı aşağıenerjili konformasiyası  $B_2BB_2BL$ -dir, onun nisbi enerjisi özündən əvvəlki konformasiyanın nisbi enerjisindən 0,4 kkal/mol qədər çoxdur. Qeyri-valent və torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri paya görə bu konformasiya əvvəlki konformasiyadan geri qalır. eeef şəypinin  $B_2RL_2BL$  konformasiyasının və  $B_3RL_3RR$  konformasiyasının nisbi enerjiləri uyğun olaraq 4.3 kkal/mol və 4.9 kkal/mol-dur (cədvəl 2).

efef şəypinin aşağıenerjili konformasiyalarının nisbi enerjiləri 2.1 – 4.1 kkal/mol intervalında dəyişir. Şeypin ən stabil konformasiyası nisbi enerjisi 2.1 kkal/mol olan  $B_3RB_1BL$ -dir. Bu konformasiya qlobal konformasiyaya qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjilərinə görə 0.9 kkal/mol qədər, elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisinə görə 0.2 kkal/mol qədər, torsion qarşılıqlı enerjilərinə görə 1.0 kkal/mol qədər uduzur (cədvəl 2). Bu konformasiyada Tyr1-in özündən sonra gələn dörd aminturşu qalığı ilə qarşılıqlı təsir enerjisi ümumi enerjiyə (-7.7) kkal/mol qədər pay verir, Phe3-ün Pro4 və Gly5-lə qarşılıqlı təsir enerjisi isə ümumi enerjiyə (-8.4) kkal/mol qədər pay verir (cədvəl 3).

Cədvəl 3

**$\beta$ -kazomorfin-5 molekulunun aşağıenerjili  $B_1 R B_1 R L$  ( $U_{nis}=0$  kkal/mol, 1-ci sətr),  $B_2 B B_3 R R$  ( $U_{nis}=1.6$  kkal/mol, 2-ci sətr),  $B_3 R B_1 B L$  ( $U_{nis}=2.1$  kkal/mol, 3-cü sətr),  $B_2 B B_1 R L$  ( $U_{nis}=3.5$  kkal/mol, 4-cü sətr) konformasiyalarında aminturşu qalıqları daxilində və arasında qarşılıqlı təsir enerjiləri**

Tyr1	Pro2	Phe3	Pro4	Gly5	
3.1	-4.4	-2.9	-4.3	-0.2	Tyr1
2.4	-5.6	-5.0	-1.4	0	
2.2	-4.2	-2.8	-0.3	-1.4	
2.2	-5.6	-3.9	-0.8	0	
	0.3	-2.2	-0.4	0	Pro2
	0.3	-1.2	-0.6	0	
	0.3	-1.7	-0.8	-0.1	
	0.3	-0.3	-0.4	0	
		-0.3	-3.5	-2.0	Phe3
		0	-3.1	-2.3	
		0.1	-5.0	-3.4	
		-0.2	-3.7	-2.3	
			0.3	-1.3	Pro4
			0.3	-1.2	
			0.6	-0.3	
			0.3	-1.3	
				-0.8	Gly5
				-0.8	
				-0.7	
				-0.8	

Tam açılmış eeee şeypinin cədvəl 2-də göstərilən konformasiyalarının nisbi enerjiləri 3.5 – 7.6 kkal/mol enerji intervalında dəyişir. Göründüyü kimi, eeee şeypinin konformasiyaları yüksəkenerjilidir. Şeypin ən stabil konformasiyası nisbi enerjisi 3.5 kkal/mol olan  $B_2BB_1RL$ -dir. Konformasiyanın stabilləşməsinə Tyr1-in Pro2-Phe3-lə qarşılıqlı təsir enerjisi (-9.5) kkal/mol qədər, Phe3-ün Pro4-Gly5-lə qarşılıqlı təsir enerjisi isə (-6.0) kkal/mol qədər ümumi enerjiyə pay verir (cədvəl 3).

Cədvəl 4

**$\beta$ -kazomorfin-5 molekulunun aşağıenerjili konformasiyalarının həndəsi parametrləri**

Amin turşusu	$B_1 R B_1 R L$	$B_2 B B_3 R R$	$B_3 R B_1 B L$	$B_2 B B_1 R L$
Tyr1	-87 146 171 55 78 0	-72 117 172 167 74 0	-66 151 172 -70 111 0	-63 -114 168 167 76 0
Pro2	-60 -63 177	-60 127 -172	-60 -51 174	-60 119 -174
Phe3	-124 144 180 61 88	-98 145 176 -59 104	-86 134 178 180 91	-123 147 180 69 96
Pro4	-60 -57 180	-60 -55 177	-60 -100 -177	-60 -60 180
Gly5	69 63 180	-76 -58 179	73 54 179	75 59 180

**Qeyd:** ikiüzlü fırlanma bucaqlarının qiymətləri  $\phi, \psi, \omega, \chi_1, \chi_2, \dots$  ardıcılığı ilə verilmişdir.

$\beta$ -казоморфин-5 молекулуğunun fəza quruluşunun öyrənilməsi göstərir ki, molekul elə fəza quruluşları yığımına malik olur ki, o müxtəlif bioloji funksiyaları yerinə yetirə bilər və müxtəlif reseptor molekulları ilə əlaqəyə girə bilər.  $\beta$ -казоморфин-5 молекулуğunun fəza quruluşunun öyrənilməsindən alınan nəticələr  $\beta$ -казоморфин-6,-7 molekullarının fəza quruluşlarının tədqiqində istifadə oluna bilər.

#### ƏDƏBİYYAT

1. Чеснокова Е.А., Сарычева Н.Ю., Дубынин В.А., Каменский А.А. Опиоидные пептиды, получаемые с пищей и их влияние на нервную систему. Успехи физиологических наук, 2015, т. 46, №1, с. 22-46.
2. Дубынин В.А. Экзорпины: возможное биологическое и клиническое значение. Психиатрия. 2010. Т.45. №3. С. 65-73.
3. Дубынин В.А., Ивлева Ю.А., Каменский А.А. Нейротропная активность опиоидных пептидов пищевого происхождения  $\beta$ -казоморфинов//Успехи физиол. наук. 2004. Т.35. №1, С. 83-101.
4. Дубынин В.А., Каменский А.А. Бета-казоморфины и их роль в регуляции поведения. М.: КМК, 2010. 304 с.
5. Ахмедов Н.А., Годжаев Н.М., Сулейманова Е.В., Попов Е.М. Структурная организация молекул [Met] энкефалина и эндорфинов. Биоорганическая химия, 1990, т. 16, с. 649-667.
6. Akhmedov N.A., Agayeva L.N., Ismailova L.I., Godjaev N.M. The spatial structure of the cardio active peptides. Current Topics in Peptide and Protein Research. 2010, v. 11, pp. 87-93.
7. Гаджиева Ш.Н., Ахмедов Н.А., Масимов Э.А., Годжаев Н.М. Пространственная структура молекулы Thr-Pro-Ala-Glu-Asp-Phe-Met-Arg-Phe-NH<sub>2</sub>, Биофизика, 2013, Том 58, вып. 4, с. 587-590.
8. Akhmedov N.A., Ismailova L.I., Abbasli R.M. et al. Spatial Structure of Octarphin molecule. IOSR.J.Applied Physics (IOSR-JAP). 2016, 8, 66-70.
9. Hasanov E.M., Akhmedov N.A. Spatial Structure of Peptide BAM-20P. International Journal of Innovative Science and Research Technology ISSN No:-2456-2165, 2018, v. 3, pp. 72-76.
10. Akhmedov N.A., Abbasli R.M., Agayeva L.N., Ismailova L.I. Three-dimensional structure of exorpin B5 molecule. Conference proceedings Modern Trends In Physics. 2019, 201-204.
11. IUPAC-IUB. Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry, Blackwell Scientific, Oxford, 1993.

#### ПРОСТРАНСТВЕННАЯ СТРУКТУРА МОЛЕКУЛЫ $\beta$ -КАЗОМОРФИНА-5

Л.Н.АГАЕВА, Р.М.АББАСЛЫ, Л.И.ИСМАИЛОВА,  
Л.С.ГАДЖИЕВА, Н.А.АХМЕДОВ

#### РЕЗЮМЕ

Методом теоретического конформационного анализа исследована пространственная структура молекулы  $\beta$ -казоморфина-5 (Tyr1-Pro2-Phe3-Pro4-Gly5-NH<sub>2</sub>). Потенциальная функция системы выбрана в виде суммы невалентных, электростатических и

торсионных взаимодействий и энергии водородных связей. Найдены низкоэнергетические конформации молекулы, значения двугранных углов основных и боковых цепей аминокислотных остатков, входящих в состав молекулы, оценена энергия внутри- и межостаточных взаимодействий. Было показано, что трехмерная структура этой молекулы может быть представлена 16 низкоэнергетическими формами основной цепи, попадающими в энергетический интервал 0-8,0 ккал/моль.

**Ключевые слова:** экзорфин, казоморфин, опиоид, структура, конформация

## **SPATIAL STRUCTURE OF $\beta$ -CASOMORPHIN-5 MOLECULE**

**L.N.AGAYEVA, R.M.ABBASLI, L.I.ISMAILOVA, L.S.HAJIYEVA, N.A.AKHMEDOV**

### **SUMMARY**

By the method of the theoretical conformational analysis the conformational capabilities of the  $\beta$ -casomorphin-5 (Tyr1-Pro2-Phe3-Pro4-Gly5-NH<sub>2</sub>) molecule were studied. The potential function of the system is chosen as the sum of non-valent, electrostatic and torsion interactions and the energy of hydrogen bonds. Low-energy conformations of the  $\beta$ -casomorphin-5 molecule, the values of the dihedral angles of the main and side chains of amino acid residues that make up the molecules are founded; the energy of intra- and inter-residual interactions is estimated. It is shown that the spatial structure of the casomorphin-5 molecule can be represented by 16 conformations.

**Key words:** exorphin, casomorphin, opioid, structure, conformation

## ВЛИЯНИЕ КОНФОРМАЦИОННЫХ ПЕРЕСТРОЕК НА СТРУКТУРИРОВАНИЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МОЛЕКУЛЫ ARG-GLY-ASP

Г.Д.АББАСОВА, Э.З.АЛИЕВ, Л.С.ГАДЖИЕВА

*Бакинский государственный университет*

*abbasova1962@mail.ru*

*Аргинилглициласпарагиновая кислота состоящий из L-аргинина, глицина и L-аспарагиновой кислоты, входит в состав клеточных белков и является распространённым элементом распознавания и белок-белкового взаимодействия [1,2]. В клеточной биологии и биотехнологии свободный молекулы аргинин, глицин, аспарагиновой кислоты широко используется для ингибирования межклеточных связей, так как обладает способностью специфически связываться с интегринами и блокировать межклеточные связи.*

**Ключевые слова:** Аргинилглициласпарагиновая кислота, пространственная структура, конформация, молекулярная динамика.

В данной работе методами теоретического моделирования с использованием современных вычислительных компьютерных программ, основанных на приближении атом-атомных потенциальных функций проанализировано влияние молекулярно-динамических перестроек на электронные свойства пептидов аргинина, глицина, аспарагиновой кислоты.

Моделирование включало поиск устойчивых конформационных состояний пептида путем минимизации полной конформационной энергии, изучения молекулярной динамики в условиях водного окружения и расчета электронных параметров в низкоэнергетических состояниях трипептида. Для расчетов использовались методы и подходы, использованные в работах [3,4].

### Метод расчета

Пространственная структура и конформационные свойства молекулы аргинилглициласпарагиновой кислоты, были исследованы путем поиска локальных минимумов полной конформационной энергии согласно методике и технике расчетов, описанных в работах [5-6]. При расчете энергии учитывались невалентные ( $E_{нев}$ ) и электростатические ( $E_{эл}$ ) взаимодействия атомов, водородные связи ( $E_{вод}$ ) и торсионные вклады ( $E_{торс}$ ), для описания которых были использованы полуэмпирические потенциальные функции, предложенные в работах [7]. Расчеты проводились в

рамках жесткой валентной схемы, т.е. при фиксированных значениях длин валентных связей и валентных углов аминокислотных остатков, входящих в химическую структуру аргинилглициласпарагиновой кислоты. Примененная система потенциальных функций и вычислительные программы были апробированы на большом числе пептидов и белков авторами данной работы. Критерием отбора устойчивых структур являлись минимальные значения конформационной энергии, вклады межостаточных взаимодействий, а также система водородных связей, стабилизирующих низкоэнергетические конформационные состояния пептида. Поиск низкоэнергетических конформаций молекулярной системы проводился с помощью численных методов поиска экстремумов функций многих переменных. При этом предполагается, что нативная конформация молекулы находится в области глобального минимума потенциальной энергии.

Для моделирования водного окружения использовалась параметризация, предложенная в работе [7]. Энергия водородных связей оценивалась с помощью потенциала Морзе при значении энергии диссоциации водородной связи, равной 1,5 ккал/моль, соответствующей расстоянию связи  $\text{NH}\dots\text{OC}$   $r=1.8\text{\AA}$  для водных растворов. Величина диэлектрической постоянной принята равной 10. При обсуждении результатов расчета была использована общепринятая классификация пептидных структур. Выбор структурных вариантов при расчете конформаций отдельных пептидов осуществлялся на основе известных значений двугранных углов ( $\phi$  и  $\psi$ ) соответствующих низкоэнергетическим областям конформационной карты R,B,L и P для каждого монопептида. Отсчет двугранных углов проводился согласно международной номенклатуре.

## Результаты и обсуждение

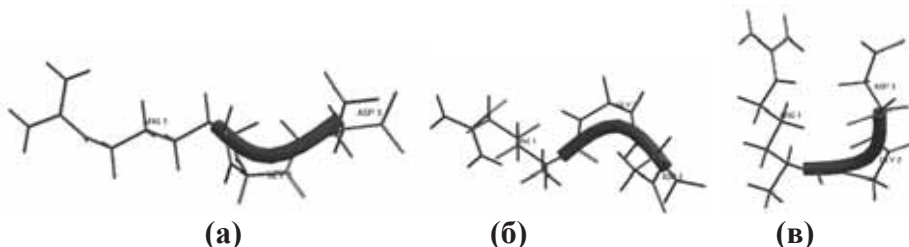
Расчетная модель и низкоэнергетические конформационные состояния молекулы Arg-Gly-Asp, соответствующие минимальным значениям полной конформационной энергии и различным типам пространственной структуры приведены на рис.1 и в табл.1.

Таблица 1

### Энергетические составляющие устойчивых конформаций трипептида

№	Форма пептидной цепи	Полная энергия и ее составляющие*, ккал/моль			
		$E_{\text{нев}}$	$E_{\text{эл}}$	$E_{\text{торс}}$	$E_{\text{полн}}$
1	Развернутая	-6,4	-3,5	1,4	-8,6
2	Полусвернутая	-8,6	-4,2	1,3	-11,5
3	Свернутая	-7,1	-3,8	1,5	-9,4

\*Примечание:  $E_{\text{нев}}$ —вклад энергии невалентных взаимодействий;  $E_{\text{эл}}$ —вклад энергии электростатических взаимодействий;  $E_{\text{торс}}$ —вклад энергии торсионных взаимодействий;  $E_{\text{полн}}$ —полная конформационная энергия.



**Рис.1.** Низкоэнергетические конформационные состояния с развернутой (а), полусвернутой (б) и свернутой формами основной цепи пептида Arg-Gly-Asp.

С целью изучения влияния конформационных перестроек на электронные характеристики трипептида была выполнена молекулярная динамика в условиях, имитирующих водное окружение и проанализированы его электронные характеристики. Обобщенные результаты исследования приведены в табл.2.

Таблица 2

**Величины зарядов на атомах оптимизированных конформаций пептида Arg-Gly-Asp**

Аминокислота	Атом	Форма пептидной цепи		
		Развернутая	Полусвернутая	Свернутая
Arg	N	0.79	0.75	0.74
	C <sup>α</sup>	-0.24	-0.26	-0.27
	C <sup>β</sup>	0.22	0.18	0.20
	C <sup>γ</sup>	-0.36	-0.24	-0.29
	C <sup>σ</sup>	-0.06	-0.12	-0.11
	N <sup>σ</sup>	-0.17	-0.14	-0.13
	C <sup>ε</sup>	-0.02	-0.04	-0.05
	C <sup>ζ</sup>	-0.09	-0.07	-0.02
Gly	N	-0.05	-0.46	-0.45
	C <sup>α</sup>	0.23	0.11	0.10
	C <sup>γ</sup>	0.21	0.28	0.18
Asp	N	-0.39	-0.31	-0.29
	C <sup>α</sup>	-0.08	-0.09	-0.12
	C <sup>β</sup>	-0.07	-0.08	-0.13
	C <sup>γ</sup>	0.34	0.28	0.32
	O	-0.57	-0.51	-0.63
	C <sup>ζ</sup>	-0.07	-0.10	-0.02

Полученные результаты будут использованы для моделирования структуры комплексных соединений, образующихся при связывании пептида Arg-Gly-Asp с интегринами.

**ЛИТЕРАТУРА**

1. Pattillo C., Sari-Sarraf F., Nallamothe R., Moore B.M., Wood G.C., Kiani M.F. // Pharm. Res., 2005, v.22, p.1117
2. Zhang Z., Lai Y., Yu L., Ding J. // Biomaterials, 2010, v.31, p.7873-7882
3. Аббасова Г.Д., Алиева И.Н., Омарова А.И., Годжаев Н.М. // АМЕА-нын Хəбərлəri



(fizika-riy. və texnika elm.seriyası), 2010, cild XXX, N.5, s.112-120

4. Аббасова Г.Д., Алиева И.Н., Омарова А.И. // Journal of Qafqaz University, 2013, vol.1, № 1, с.47-54
5. Попов Е.М. Quantitative approach to conformations of proteins // Int/J/Quant.Chem., 1979, v.16, p.707-737
6. Попов Е.М. Структурная организация белков // М., Наука, 1989, 352 с.
7. Momany F.A., McGuire R.F, Burgess A.W., Scheraga H.A. Energy parameters in polypeptides: geometric parameters, partial atomic charges, nonbonded interaction for naturally occurring amino acid // J.Phys.Chem, 1975, v.79, p.2361-2381

## **KONFORMASIYA QURMALARININ ARG-GLY-ASP MOLEKULUNUN QURULUŞUNA VƏ ELEKTRON XARAKTERİSTİKALARINA TƏSİRİ**

**G.C.ABBASOVA, E.Z.ƏLİYEV, L.S.HACIYEVA**

### **XÜLASƏ**

Arginilqlisilasparagin turşusu L-arginin, qlisin və L-asparagin turşusundan ibarət olub, zülalların tərkibinə daxildir və zülal-zülal qarşılıqlı təsirində geniş yayılmışdır [1,2]. Hüceyrə biologiyasında və biotexnologiyada sərbəst arginin, qlisin, asparagin turşusu molekulları hüceyrələrarası rabitələrin yaranmasında geniş istifadə edilir. Belə ki, onlar hüceyrə reseptorları olan integrinlərlə əlaqəyə girmək və hüceyrələrarası rabitələrin yaranmasına mane olmaq qabiliyyətinə malikdir.

**Açar sözlər:** Arginilqlisilasparagin turşusu, fəza quruluşu, konformasiya, molekulyar dinamika.

## **EFFECT OF CONFORMATIONAL REARRANGEMENTS ON THE STRUCTURING AND ELECTRONIC CHARACTERISTICS OF THE ARG-GLY-ASP MOLECULE**

**G.D.ABBASOVA, E.Z.ALIYEV, L.S.HAJIYEVA**

### **SUMMARY**

Arginyl glycyaspartic acid consisting of L-arginine, glycine and L-aspartic acid, is part of cellular proteins and is a common element of recognition and protein-protein interaction [1,2]. In cell biology and biotechnology, the free molecules arginine, glycine, aspartic acid are widely used to inhibit intercellular bonds because it has the ability to specifically bind to integrins and block intercellular bonds.

**Keywords:** Arginylglycyaspartic acid, spatial structure, conformation, molecular dynamics

УДК 539.2/.6

**РАЗРАБОТКА ВАРИАЦИОННОГО МЕТОДА ИЗМЕРЕНИЯ  
ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ПОЛЯРНЫХ ЖИДКОСТЕЙ  
В ДИАПАЗОНЕ СВЕРХВЫСОКИХ ЧАСТОТ****3. Автоматизированная методика расчета диэлектрических  
параметров с использованием исходных уравнений****С.М.УСЕЙНОВА***Бакинский Государственный Университет**nushana\_kasimova@yahoo.com*

*При разработке нового, вариационного метода измерения диэлектрических параметров полярных жидкостей (диэлектрической проницаемости  $\xi'$  и диэлектрических потерь  $\xi''$ ) в диапазоне сверхвысоких частот (СВЧ) были рассчитаны теоретические принципы вариационного метода измерения и получены исходные уравнения. Из-за трансцендных функций в исходных уравнениях был подготовлен и использован графический метод решения этих уравнений и построены соответствующие номограммы. Для дальнейшего усовершенствования применения нового вариационного метода измерения диэлектрических параметров полярных жидкостей в диапазоне СВЧ с целью автоматизации проведения расчетных операций была также подготовлена программа и разработана блок-схема алгоритма расчета диэлектрических параметров*

**Ключевые слова:** вариационный метод исследования, полярные жидкости и растворы, диэлектрические характеристики, сверхвысокие частоты, исходные уравнения, программа и блок-схема алгоритма расчета.

В настоящее время, по литературным данным широко освещаются объекты, в которых можно пренебречь дипольными и иными межмолекулярными взаимодействиями, и к которым сравнительно легко применима молекулярная модель Дебая. А объекты в которых преобладает тип межмолекулярного взаимодействия в исходных компонентах (полярные жидкости с заметными диэлектрическими потерями, бинарные и другие системы растворов полярных жидкостей) изучены сравнительно мало и истолкование степени влияния на общую релаксационную характеристику отдельных кинетические единиц и сил межмолекулярного взаимодействия по сравнению с чистыми жидкостями, довольно ограничена. Причиной этого можно считать, отчасти, возникающие трудности при применении известных диэлектрических методов исследования при изучении этих систем. Методические трудности, возникающие при применении

общеизвестных диэлектрических методов исследования к вышеуказанным объектам изучения, привели нас к разработке нового вариационного метода исследования диэлектрических характеристик.

При решении теоретических проблем предлагаемого вариационного метода, предназначенного для высокочастотных измерений диэлектрических характеристик полярных жидкостей и их растворов, была определена связь между величинами диэлектрических параметров ( $\varepsilon'$  - диэлектрическая проницаемость,  $\varepsilon''$  - диэлектрические потери) и экспериментально определяемыми величинами ( $\lambda_g$  - длина волны в ячейке заполненной жидкостью,  $l_m$  - толщина слоя жидкости в ячейке при котором имеет место минимум амплитуды отраженной волны  $|\hat{\rho}|$  или коэффициента стоячей волны  $\eta$  и величины  $\eta_m$  при этой толщине жидкости).

В данной статье приводятся результаты, полученные при применении автоматического метода решения этих уравнений и построены соответствующие номограммы.

С целью автоматизации производства расчетных операций по предлагаемому методу измерения  $\xi'$  и  $\xi''$  разработан алгоритм (рис.1), обеспечивающий при наличии телетайпной линии связи между экспериментальной лабораторией (установкой) и компьютером, прием с телетайпа в компьютер измеренных значений  $l_m$  и  $\eta_m$ , решения уравнений (3.1)-(3.13) при заданных  $l_m$  и  $\eta_m$  и выдачу на печать искомым величин  $\xi'$ ,  $\xi''$ ,  $\lambda_g$ ,  $tg_2^A$ .

$$u = (1+y^2) R^{-\frac{1}{2}} \quad (3.1)$$

$$v = x(1+y^2) R^{-\frac{1}{2}} \quad (3.2)$$

$$\eta = \sqrt{\frac{N \pm M}{N \mp M}} \quad (3.3)$$

$$\eta_m = \sqrt{\frac{th(2\pi xy) + y \operatorname{ctg}(2\pi xy)}{cth((2\pi xy) + y \operatorname{ctg}(2\pi x))}} \quad (3.4)$$

$$\eta_m = \sqrt{\frac{th(2\pi xy) - y \operatorname{ctg}(2\pi xy)}{cth((2\pi xy) + y \operatorname{ctg}(2\pi x))}} \quad (3.5)$$

$$sh(\pi xy) = -y \sin(\pi x) \quad (3.6)$$

$$\xi' = \frac{(1-y^2)}{(1+y^2)^2} R \quad (3.7)$$

$$\xi'' = \frac{2y}{(1+y^2)^2} R \quad (3.8)$$

Блок-схема разработанного алгоритма приведена на рис. 1, а программа расчета включает в себя начальные процедуры вызова самой программы расчета и занесения в оперативную память компьютера постоянных параметров  $\lambda$ ,  $\rho$ ,  $\lambda_b$ , некоторые входят в уравнения (3.1)-(3.8) и зависят от типа примененной экспериментальной установки. После ввода найденных экспериментальных величин  $\eta$ , и  $l$  в точке минимума зависи-

мости  $\eta$  от  $l$ , в соответствии с Рис. 1 Блок-схема алгоритма расчета диэлектрических параметров по разработанному вариационному методу. программой осуществляет автоматический поиск таких значений  $\bar{x}$  и  $\bar{y}$ , которым соответствуют условия

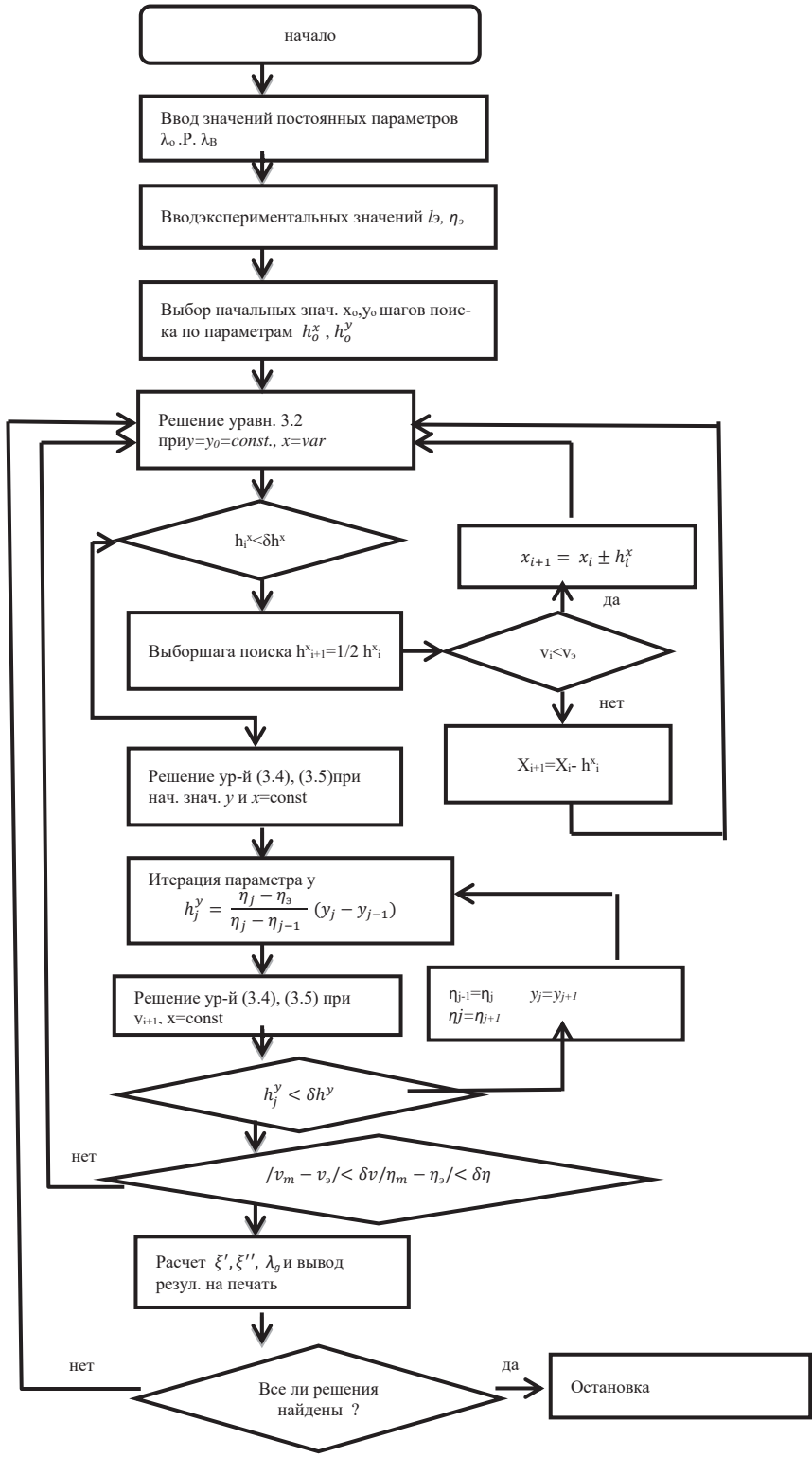
$$|v_m - v_3| < \delta v \quad \text{и} \quad |\eta_m - \eta_3| < \delta \eta \quad (3.9)$$

где  $\delta v, \delta \eta$  - предварительно заданные допустимые пределы погрешности в определении  $v_m$  и  $\eta_m$  по уравнениям (3.2), (3.3), (3.4), (3.5).

В начале поиска  $\bar{x}$  и  $\bar{y}$  программой устанавливаются начальные значения варьируемых параметров  $\bar{x}$  и  $\bar{y}$ , шагов поиска по этим параметрам  $h_0^x$  и  $h_0^y$ , а также значения  $\delta v, \delta \eta$ . С учетом допустимых пределов варьирования параметров  $\bar{x}$  и  $\bar{y}$  их начальные значения приняты равными:  $x = x'_0 = 0,29$ ;  $y = y'_0 = 0,0001$  и  $x = x''_0 = 0,29$ ;  $y = y''_0 = 0,60$  соответственно, для двух возможных вариантов решения уравнений (3.2), (3.4), (3.5) (см. рис. 1). Поиск  $\bar{x}$  и  $\bar{y}$  начинается с задаваемых значений  $x'_0, y'_0$ ; при этом процедура накопления  $\bar{x}$  и  $\bar{y}$  располагается на два последовательно проводимых этапах поиска. На первом их них варьируемой величиной является параметр  $x$ , а значение параметра  $y$  сохраняется неизменным и равным  $y'_0$ . Варьирование  $x$  осуществляется способом последовательного деления исходного шага поиска  $h_0^x$ ; таким образом на  $(i+1)$  шаге поиска  $x_{i+1} = x_i \pm h_{i+1}^x$ , где  $h_{i+1}^x = \frac{1}{2} h_i^x$ .

Знак при  $h_{i+1}^x$  определяется из условия  $v_i < v_3$ ; при его соблюдении на  $i$ -м шаге поиска  $x_{i+1}$  увеличивается по сравнению с  $x_i$ ; при его соблюдении по шаге поиска увеличивается по сравнению с  $x_i$ . При  $h_i^x < \delta h^x$ , где  $\delta h^x$  допустимая величина шага поиска по параметру  $x$ , завершается первый этап поиска  $\bar{x}$ .

На втором этапе поиска варьируемой величиной является параметр  $y$ , а значение параметра  $x$ , сохраняется неизменным и равным по значению  $x$ , найденному на первом этапе поиска. Варьирование  $y$  осуществляется способом секущих линий, обеспечивающим быструю сходимость величин  $\eta_3$  и  $\eta_m$ . По этому способу на  $(j+1)$  шаге поиска параметра  $y$ ,  $y_{j+1} = y_j \pm h_j^y$  где  $h_j^y = \frac{\eta_j - \eta_3}{\eta_j - \eta_{j-1}} (y_j - y_{j-1})$  определяется по данным расчета  $\eta$ ,  $y$  при двух предыдущих шагах поиска. В начале поиска величина шага поиска принимаются равным  $h_0^y$ . При  $h_j^y < \delta h^y$ , где  $\delta h^y$  допустимая величина шага поиска по параметру  $y$ , завершается этап поиска  $\bar{y}$ . Если при найденных значениях  $\bar{x}$  и  $\bar{y}$ , выполняются условия (3.9), то программа обеспечивает расчет  $\xi', \xi'', \lambda_g$  по уравнениям (3.10), (3.11), (3.1) с задачей результатов вычислений на печать телетайпе,



$$\xi_1 = \frac{1-y^2}{u^2} \quad (3.10)$$

$$\xi_2 = \frac{2y}{u^2} \quad (3.11)$$

$$u = (1+y^2) R^{-\frac{1}{2}} \quad (3.1)$$

где

$$R = 1 - y^2 - 2y \frac{1 - \operatorname{ch}(4\pi xy) \cos(4\pi x)}{\operatorname{sh}(4\pi xy) \sin(4\pi x)} \quad (3.12)$$

а затем производит аналогичную процедуру поиска  $\bar{x}$  и  $\bar{y}$  и расчета искомых параметров для второго варианта решения уравнений (3.10), (3.11), (3.12). При не соблюдении хотя бы одного из условий (3.9) программа повторяет процедуру поиска  $\bar{x}$  и  $\bar{y}$  первого варианта решения искомых уравнений.

$$\xi'' = \frac{2y}{u^2} \quad (3.13)$$

$$\xi'' = 2 \left( \frac{\lambda}{\lambda_g} \right)^2 \operatorname{tg} \frac{\Delta}{2} \quad (3.14)$$

$$u = (1+y^2) R^{-\frac{1}{2}} \quad (3.15)$$

В этом случае в качестве начальных величин  $x_0, y_0$  используются полученные на предыдущих этапах поиска значения  $\bar{x}, \bar{y}$ . Количество таких операций определяется необходимой точностью расчета искомых величин и может быть регулируемо соответствующим выбором значений  $\delta v, \delta \eta, \delta h^x, \delta h^y$ .

Разработанный алгоритм был применен для компьютерного вычисления диэлектрических параметров ряда жидкостей и растворов; при этом расчет  $\xi', \xi''$  выполнялся в процессе конкретного эксперимента, в котором производились измерения и исследуемых объектов с вводом этих значений.

Хотя в литературе широко освещаются объекты исследования, к которым сравнительно легко применима молекулярная модель Дебая, то объекты в которых преобладает тип межмолекулярного взаимодействия в исходных компонентах (бинарные и другие системы растворов полярных жидкостей) изучены мало. Причиной этого являются ограниченные возможности применения общеизвестных диэлектрических методов /1/-/12/.

Именно это и привело нас к разработке нового вариационного метода исследования диэлектрических характеристик, которая позволяет лишь измеряя эти экспериментальные данные – коэффициент стоячей волны при первом минимуме зависимости от толщины слоя жидкости в ячейке (), рассчитать значения диэлектрических параметров (диэлектрической проницаемости и диэлектрических потерь) любых жидкостей и растворов без ограничений /13-14/.

Таким образом, автоматизированная методика непосредственного

компьютерного расчета диэлектрических параметров с использованием исходных уравнений намного ускорила и уточнила получение конечных результатов и как результат нами проведен также анализ погрешностей измерений, который будет представлен в следующей статье.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Шахпаронов М.И. Методы исследования теплового движения молекул и строение жидкостей. М., 1972, с.281.
2. Poley I.P. J.Appl, Sci.Res. B4, 337, 1955.
3. Ахадов Я.Ю. Диэлектрические свойства чистых жидкостей, Изд.стандартов, М., 1972, с.412.
4. Брандт А.А. Исследование диэлектриков на сверхвысоких частотах. М.: Физматгиз, 1963, с.493.
5. Касимов Р.М., Нагизаде Н.С. Вестник МГУ, серия химическая, 2, 101, 1967.
6. Fatuzzo E, Mason P.R. J.of Appl. Rh., 36,2, 427, 1965.
7. Харвей А.Ф. Техника сверхвысоких частот, т. I, Изд. "Сов.радио", 1965, с. 783.
8. Касимов Р.М. Измерительная техника. 10, 1970.
9. Касимов Р.М., Усейнова С.М. Изд. АН Азерб. ССР, серия физико-техн. и матем. наук, I, 1973, с.111-117
10. Касимов Р.М., Усейнова С.М. Измерительная техника, 2, 1975, с.76-82
11. Усейнова С.М. О вариационном методе исследования диэлектрических свойств жидкостей и растворов. BDU., "Fizikanın müasir problemləri" V Respublika konfransının materialları. Bakı, 2011, s.200-202.
12. Усейнова С.М. Графические способы применения вариационного метода. BDU., "Fizikanın müasir problemləri" V Respublika konfransının materialları. Bakı: 2011, s.202-205.
13. Усейнова С.М. Разработка вариационного метода измерения диэлектрических параметров полярных жидкостей в диапазоне сверхвысоких частот.1.Теоретические принципы вариационного метода измерения. Баку, Вестник БГУ, серия физ-мат. наук, 2015, №1, с.176-185
14. Усейнова С.М. Разработка вариационного метода измерения диэлектрических параметров полярных жидкостей в диапазоне сверхвысоких частот.2.Графический метод решения исходных уравнений. Баку, Вестник БГУ, серия физ-мат. наук, 2016, №1, с.177-188

### **POLYAR MAYELƏRİN DİELEKTRİK XARAKTERİSTİKALARININ İFRAT YÜKSƏK TEZLİKLƏR DİAPAZONUNDA VARIASİON ÖLÇMƏ METODUNUN NƏZƏRİ PRİNSİPLƏRİ**

#### **3. Variasion metodun əsas tənliklərinin istifadəsi ilə dielektrik parametrlərin hesablanmasının avtomatlaşdırılması metodikası**

**S.M.USEYNOVA**

#### **XÜLASƏ**

Polyar mayelərin ifrat yüksək tezliklər (İYT) diapazonunda dielektrik parametrlərinin (dielektrik nüfuzluğu  $\xi'$  və dielektrik itkiləri  $\xi''$ ) ölçülməsi üçün işlənilib-hazırlanması prosesində, variasion metodun nəzəri prinsipləri hazırlanmış, əsas tənlikləri hesablanmışdır. Əsas tənliklərdə transsendent funksiyalar olduğundan, bu tənliklərin həllinin qrafik metodikası hazırlanmış, uyğun nomogramlar qurulmuş və dielektrik parametrlərin qiymətlərinin təyin edilməsində istifadə olunmuşdur. Yeni variasion metodun tətbiqinin daha da mükəmməlləşdirilməsi üçün di-

elektrik parametrlərin birbaşa hesablanma əməliyyatların avtomatlaşdırılması məqsədi ilə xüsusi proqram vasitəsi ilə hesablamaların alqoritminin blok-sxemi işlənilib hazırlanmışdır və müvəffəqiyyətlə tətbiq edilmişdir.

**Açar sözlər:** variasion tədqiqat metodu, polyar mayelər və məhlullar, dielektrik xarakteristikaları, ifrat yüksək tezliklər, əsas nəzəri tənliklər, alqoritmin blok-sxemi və hesablama proqramı.

**DEVELOPMENT OF VARIATIONAL METHOD FOR MEASURING  
OF DIELECTRIC PARAMETERS OF POLAR LIQUIDS  
AT MICROWAVE FREQUENCIES**

**3. Automated procedure for calculation of dielectric parameters using the initial equations**

**S.M.USEYNOVA**

**SUMMARY**

Theoretical principles of the variational measurement method were calculated and the initial equations were obtained under developing a new variational method for measuring the dielectric parameters of polar liquids (dielectric constant  $\xi'$  and dielectric losses  $\xi''$ ) in the microwave range. Graphical method for solving these equations was prepared and used, also the corresponding nomograms were constructed due to the transcendental functions in the original equations. Program and block-diagram of the algorithm for calculating of dielectric parameters was developed for measuring of the dielectric parameters of polar liquids in the microwave range with the aim of automating calculation operations for further improve the application of the new variational method.

**Keywords:** variational method of research, polar liquids and solutions, dielectric characteristics, ultra-high frequency, original equations, program of calculation and block-diagram of the algorithm.



## MÜNDƏRİCAT

## RİYAZIYYAT

<b>Məmmədov Y.Ə., Əhmədov S.Z., Abbasova A.X.</b> Dirixle sərhəd şərtlərini daxilində saxlayan bir qarışıq məsələnin həlli haqqında .....	5
<b>Mustafayeva Y.Y., Əliyev N.A.</b> Parametrdən asılı olan qeyri-lokal sərhəd şərtli üçölçülü Helmholtz tənliyinin bir həll üsulu .....	12
<b>Əhmədov H.İ.</b> Sərhəd şərtlərində zamana görə gecikmə olan halda sabit əmsallı parabolik tip tənlik üçün qarışıq məsələnin həllinin analitik ayrılışı .....	29

## İNFORMATİKA

<b>Xəlilov M.S.</b> Tükənmə rejimli qeyri-bircins qazkondensat layının süzülmə-tutum parametrlərinin identifikasiyalı təyini .....	35
---	----

## FİZİKA

<b>Qasımova R.C., Kərimli N.V., Əhmədova A.R., Səfərova G.Ə.</b> Metamateriallarda üçdalğalı parametrik qarşılıqlı təsir zamanı itkilərin kompensasiyası.....	42
<b>Figarova S.R, Huseynov H.I., Mahmudov M.M.</b> Uzununa maqnit sahəsində ifratqəfəslərdə güclü ekranlaşmış aşqar ionlarından səpilmə halında qalvanomaqnit effektlər .....	52
<b>Məmmədov R.Q., Aslanova Ə.R.</b> İkiçəpərli energetik strukturlu Şottki diodları .....	62
<b>Ağayeva L.N., Abbaslı R.M., İsmayılova L.İ, Hacıyeva L.S., Əhmədov N.A.</b> $\beta$ -kazomorfin-5 molekulunun nəzəri konformasiya analizi .....	73
<b>Abbasova G.C, Əliyev E.Z., Hacıyeva L.S.</b> Konformasiya qurmalarının ARG-GLY-ASP molekulunun quruluşuna və elektron xarakteristikalarına təsiri .....	81
<b>Useynova S.M.</b> Polyar mayelərin dielektrik xarakteristikalarının ifrat yüksək tezliklər diapazonunda variasion ölçmə metodunun nəzəri prinsipləri (3. Variasion metodun əsas tənliklərinin istifadəsi ilə dielektrik parametrlərin hesablanması avtomatlaşdırılması metodikası). .....	85

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

**Мамедов Ю.А., Ахмедов С.З., Аббасова А.Х.**  
 О решении одной смешанной задачи, содержащей граничные условия Дирихле ..... 5

**Мустафаева Е.Ю., Алиев Н.А.**  
 Один метод исследования решения трехмерного уравнения Гельмгольца с нелокальными граничными условиями, зависящими от параметра ..... 12

**Ахмедов Х.И.**  
 Смешанной задачи для параболического уравнения с постоянными коэффициентами со смешением времени в граничных условиях ..... 29

ИНФОРМАТИКА

**Халилов М.С.**  
 Идентификация параметров неоднородных газоконденсатных пластов в режиме истощения ..... 35

ФИЗИКА

**Касумова Р.Дж., Керимли Н.В., Ахмедова А.Р., Сафарова Г.А.**  
 Компенсация потерь притрехволновом параметрическом взаимодействии в метаматериалах ..... 42

**Фигарова С.Р., Гусейнов Г.И., Махмудов М.М.**  
 Гальваномангнитные эффекты в сверхрешетках в продольном магнитном поле при рассеянии на сильно экранированных ионах примеси ..... 52

**Мамедов Р.К., Асланова А.Р.**  
 Двухбарьерные энергетические структуры диодов Шоттки ..... 62

**Агаева Л.Н., Аббаслы Р.М., Исмаилова Л.И., Гаджиева Л.С., Ахмедов Н.А.**  
 Пространственная структура молекулы  $\beta$ -казоморфина-5 ..... 73

**Аббасова Г.Д., Алиев Э.З., Гаджиева Л.С.**  
 Влияние конформационных перестроек на структурирование и электронные характеристики молекулы Arg-Gly-Asp ..... 81

**Усейнова С.М.**  
 Разработка вариационного метода измерения диэлектрических параметров полярных жидкостей в диапазоне сверхвысоких частот (3. Автоматизированная методика расчета диэлектрических параметров с использованием исходных уравнений) ..... 85

## CONTENTS

## MATHEMATIC

<b>Mammadov Yu.A., Ahmadov S.Z., Abbasova A.Kh.</b> On the solution of one mixed problem, containing dirichlet boundary conditions .....	5
<b>Mustafayeva Y.Y., Aliev N.A.</b> One method of investigation of the solution of three-dimensional Helmgolz equation with non-local boundary conditions depending on the parameter.....	12
<b>Akhmedov H.I.</b> Analytical representation of the solution to a mixed problem for a parabolic equation with constant coefficients and time shift in boundary conditions.....	29

## INFORMATICS

<b>Khalilov M.S.</b> Identification of parameters of inhomogeneous GAS-condensate formations in depletion mode.....	35
--	----

## PHISIC

<b>Kasumova R.J., Kerimli N.V., Ahmadova A.R., Safarova G.A.</b> Compensation of losses at three-wave parametric interaction in metamaterials....	42
<b>Figarova S.R., Huseynov H.I., Mahmudov M.M.</b> Galvanomagnetic effects in superlattices in a longitudinal magnetic field for scattering by strongly screening impurity ions .....	64
<b>Mamedov R.K., Aslanova A.R.</b> Two barrier energy structures of schotk diodes .....	74
<b>Agayeva. L.N., Abbasli R.M., Ismailova L.I., Hajiyeva L.S., Akhmedov N.A.</b> Spatial structure of $\beta$ -casomorphin-5 molecule .....	85
<b>Abbasova G.D., Aliyev E.Z., Hajiyeva L.S.</b> Effect of conformational rearrangements on the structuring and electronic characteristics of the Arg-Gly-Asp molecule.....	93
<b>Useynova S.M.</b> Development of variational method for measuring of dielectric parameters of polar liquids at microwave frequencies (3. Automated procedure for calculation of dielectric parameters using the initial equations) .....	97