

BAKİ UNİVERSİTETİNİN  
**XƏBƏRLƏRİ**

---

---

**ВЕСТНИК**

БАКИНСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

---

---

**NEWS**

**OF BAKU UNIVERSITY**

ISSN 1609-0586

**FİZİKA-RİYAZİYYAT**

*elmləri seriyası*

---

*серия*

**ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК**

---

*series of*

**PHYSICO-MATHEMATICAL SCIENCES**

***№1.2021***

## RİYAZİYYAT

УДК 517.95

**ОБРАТНАЯ КРАЕВАЯ ЗАДАЧА  
ДЛЯ УРАВНЕНИЯ БУССИНЕСКА–ЛЯВА  
С НЕКЛАССИЧЕСКИМИ КРАЕВЫМИ УСЛОВИЯМИ****Н.Ш.ИСКЕНДЕРОВ, С.И.АЛЛАХВЕРДИЕВА\****Бакинский Государственный Университет**\* Мингечевирский Государственный Университет**nizameddin\_isgenderov@mail.ru,**seriye\_allahverdiyeva@mail.ru*

*В работе исследовано существование и единственность решения обратной краевой задачи для уравнения Буссинеска–Лява с неклассическими краевыми условиями. Сначала исходная задача сводится к эквивалентной в определенном смысле задаче. С помощью метода Фурье эквивалентная задача сводится к решению системы интегральных уравнений. С помощью метода сжатых отображений доказываются существование и единственность решения системы интегральных уравнений, которая также является единственным решением эквивалентной задачи. Пользуясь эквивалентностью, доказываются существование и единственность классического решения исходной задачи.*

**Ключевые слова:** обратная краевая задача, уравнения Буссинеска–Лява, неклассическое условия, классического решение.

**Введение.** Обратными задачами для дифференциальных уравнений принято называть задачи, в которых наряду с нахождением решения требуется найти входные данные, например, коэффициенты уравнения или функции, определяющие начальные или граничные условия. Теория обратных задач для дифференциальных уравнений является динамично развивающимся разделом современной науки. Предпосылкой для исследований разрешимости обратных задач для рассматриваемого класса являются неклассические задачи математической физики, возникающие при моделировании различных физических, механических, биологических и т.п. процессов. Для псевдо гиперболических уравнений такие задачи возникают в теории нестационарного течения вязкого газа, при конвектив-

ной диффузии солей в пористой среде, распространении начальных уплотнений в вязком газе и во многих других ситуациях.

Основы теории и практики исследования обратных задач математической физики были заложены и развиты в фундаментальных работах выдающихся ученых А.Н. Тихонова [1], М.М. Лаврентьева [2,3], В. К. Иванова [4], В.Г. Романова [2, 3, 5]. В дальнейшем, развитая ими методика исследования обратных задач была применена в исследованиях широкого круга обратных задач их учениками последователями.

В данной работе доказаны существование и единственность решения обратной краевой задачи для уравнения Буссинеска — Лява, моделирующего продольные волны в упругой балке с учетом поперечной инерции.

### 1. Постановка задачи и её сведение к эквивалентной задаче.

Рассмотрим уравнение Буссинеска — Лява [6]

$$u_{tt}(x,t) - u_{txx}(x,t) - \alpha u_{txx}(x,t) - \beta u_{xx}(x,t) = a(t)u(t,x) + f(x,t) \quad (1)$$

в области  $D_T = \{(x,t) : 0 \leq x \leq 1, 0 \leq t \leq T\}$  обратную задачу с начальными условиями

$$u(x,0) = \varphi(x), u_t(x,0) = \psi(x) \quad (0 \leq x \leq 1), \quad (2)$$

с граничными условиями

$$u(0,t) = 0, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (3)$$

$$u_x(1,t) + du_{xx}(1,t) = 0, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (4)$$

и с дополнительным условием

$$u(x_0,t) = h(t), \quad (5)$$

где  $x_0 \in (0,1)$ ,  $d > 0$ ,  $\alpha > 0$ ,  $\beta > 0$  – заданные числа,  $f(x,t)$ ,  $\varphi(x)$ ,  $\psi(x)$ ,  $h(t)$  – заданные функции, а  $u(x,t)$  и  $a(t)$  – искомые функции.

**Определение.** Пару  $\{u(x,t), a(t)\}$  функций  $u(x,t)$ ,  $a(t)$  назовем классическим решением краевой задачи (1)-(5), если она удовлетворяют следующим условиям:

- 1) Функция  $u(x,t)$  и ее производные  $u_t(x,t)$ ,  $u_{tt}(x,t)$ ,  $u_{xx}(x,t)$ ,  $u_{txx}(x,t)$ ,  $u_{ttx}(x,t)$  непрерывны в  $D_T$ ;
- 2) функция  $a(t)$  непрерывна на  $[0, T]$ ;
- 3) уравнение (1) и условия (2)-(5) удовлетворяются в обычном классическом смысле.

Сначала задача (1)-(5) будет сведена эквивалентной задаче. Для этого рассмотрим следующую спектральную задачу [7]:

$$y''(x) + \lambda y(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad y(0) = 0, \quad y'(1) = d\lambda y(1), \quad d > 0. \quad (6)$$

Эта задача имеет только собственные функции  $y_k(x) = \sqrt{2} \sin(\sqrt{\lambda_k} x)$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$ , с положительными собственными числами

$\lambda_k$  из уравнения  $ctg \sqrt{\lambda} = d\sqrt{\lambda}$ . Нулевой индекс присваиваем любой собственной функции, а все остальные нумеруем в порядке возрастания собственных чисел.

Справедлива следующая

**Теорема 1.**

Пусть

$f(x, t) \in C(D_T)$ ,  $\varphi(x), \psi(x) \in C^2[0, 1]$ ,  $h(t) \in C^2[0, T]$ ,  $h(t) \neq 0$  при  $t \in [0, T]$ ,

$$\varphi(1) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 \varphi(x) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx = 0, \quad (7)$$

$$\psi(1) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 \psi(x) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx = 0, \quad (8)$$

$$f(1, t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 f(x, t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx = 0, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (9)$$

и выполняются условия согласования

$$\varphi'(1) + d\varphi''(1) = 0, \psi'(1) + d\psi''(1) = 0, \quad \varphi(x_0) = h(0), \quad \psi(x_0) = h'(0). \quad (10)$$

Тогда задача нахождения классического решения задачи (1)-(5) эквивалентна задаче определения функций  $u(x, t)$  и  $a(t)$ , обладающих свойствами 1) и 2) определения классического решения задачи (1)-(5), удовлетворяющие уравнению (1), условиям (2), (3) и условиям

$$u(1, t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 u(x, t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx = 0, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (11)$$

$$h''(t) - u_{ttxx}(x_0, t) - \alpha u_{txx}(x_0, t) - \beta u_{xx}(x_0, t) = a(t)h(t) + f(x_0, t), \quad 0 \leq t \leq T. \quad (12)$$

**Доказательство.** Пусть  $\{u(x, t), a(t)\}$  является решением задачи (1)-(5). Тогда из уравнения (1), с учётом (9), имеем:

$$\begin{aligned} & u_{tt}(1, t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 u_{tt}(x, t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx - \\ & - \left( u_{ttxx}(1, t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 u_{ttxx}(x, t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx \right) - \\ & - \alpha \left( u_{txx}(1, t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 u_{txx}(x, t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx \right) - \\ & - \beta \left( u_{xx}(1, t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 u_{xx}(x, t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx \right) = \end{aligned}$$

$$= a(t) \left[ u(1,t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 u(x,t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx \right] \quad (0 \leq t \leq T).$$

(13)

Интегрируя по частям дважды, с учётом (3), находим:

$$\begin{aligned} \int_0^1 u_{xx}(x,t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx &= u_x(1,t) \sin \sqrt{\lambda_0} - \sqrt{\lambda_0} u(1,t) \cos \sqrt{\lambda_0} - \\ &- \lambda_0 \int_0^1 u(x,t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx \quad (0 \leq t \leq T). \end{aligned}$$

Отсюда имеем:

$$\begin{aligned} u_{xx}(1,t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 u_{xx}(x,t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx &= \\ = \frac{1}{d} (u_x(1,t) + du_{xx}(1,t)) - \lambda_0 \left[ u(1,t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 u(x,t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx \right]. \end{aligned} \quad (14)$$

Подставляя (14) в (13) получим:

$$\begin{aligned} u_{tt}(1,t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 u_{tt}(x,t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx + \\ - \frac{d^2}{dt^2} \left\{ \frac{1}{d} (u_x(1,t) + du_{xx}(1,t)) - \lambda_0 \left[ u(1,t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 u(x,t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx \right] \right\} - \\ - \alpha \frac{d}{dt} \left\{ \frac{1}{d} (u_x(1,t) + du_{xx}(1,t)) - \lambda_0 \left[ u(1,t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 u(x,t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx \right] \right\} - \\ - \beta \left\{ \frac{1}{d} (u_x(1,t) + du_{xx}(1,t)) - \lambda_0 \left[ u(1,t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 u(x,t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx \right] \right\} = \\ = a(t) \left[ u(1,t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 u(x,t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx \right] \quad (0 \leq t \leq T). \end{aligned} \quad (15)$$

Из (15) в силу (4) находим:

$$\omega''(t) + \frac{\alpha \lambda_0}{1 + \lambda_0} \omega'(t) + \frac{(\beta \lambda_0 - a(t))}{1 + \lambda_0} \omega(t) = 0 \quad (0 \leq t \leq T), \quad (16)$$

где

$$\omega(t) = u(1,t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 u(x,t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx \quad (0 \leq t \leq T). \quad (17)$$

Далее, в силу (2) и условий (7) и (8) находим:

$$\begin{aligned}\omega(0) &= \varphi(1) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 \varphi(x) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx = 0, \\ \omega'(0) &= \psi(1) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 \psi(x) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx = 0.\end{aligned}\quad (18)$$

Из (16) и (18) ясно, что  $\omega(t) = 0$  ( $0 \leq t \leq T$ ). Отсюда, с учетом (17), заключаем, что выполняется условие (11).

Из (5) видно, что

$$u_t(x_0, t) = h'(t), \quad u_{tt}(x_0, t) = h''(t) \quad (0 \leq t \leq T). \quad (19)$$

Из уравнения (1), имеем:

$$u_{tt}(x_0, t) - u_{ttxx}(x_0, t) - \alpha u_{ttxx}(x_0, t) - \beta u_{xx}(x_0, t) = a(t)u(x_0, t) + f(x_0, t) \quad (0 \leq t \leq T). \quad (20)$$

Отсюда с учётом (5) и (19), приходим к выполнению (12).

Теперь, предположим, что  $\{u(x, t), a(t)\}$  является решением задачи (1)-(3), (11), (12). Тогда из (15), с учётом (11) получаем:

$$\frac{d^2}{dt^2}(u_x(1, t) + du_{xx}(1, t)) + \alpha \frac{d^2}{dt^2}(u_x(1, t) + du_{xx}(1, t)) + \beta(u_x(1, t) + du_{xx}(1, t)) = 0. \quad (21)$$

В силу (2) и  $\varphi'(1) + d\varphi''(1) = 0, \psi'(1) + d\psi''(1) = 0$ , имеем:

$$\begin{aligned}u_x(1, 0) + du_{xx}(1, 0) &= \varphi'(1) + d\varphi''(1) = 0, \\ u_{tx}(1, 0) + du_{txx}(1, 0) &= \psi'(1) + d\psi''(1) = 0\end{aligned}\quad (22)$$

Из (21) и (22) легко приходим к выполнению (4).

Далее, из (12) и (20), получаем:

$$\frac{d^2}{dt^2}(u(x_0, t) - h(t)) = a(t)(u(x_0, t) - h(t)) \quad (0 \leq t \leq T). \quad (23)$$

В силу (2) и  $\varphi(x_0) = h(0), \psi(x_0) = h'(0)$ , имеем:

$$\begin{cases} u(x_0, t) - h(0) = \varphi(x_0) - h(0) = 0, \\ u_t(x_0, t) - h'(0) = \psi(x_0) - h'(0) = 0. \end{cases}\quad (24)$$

Из (23) и (24) заключаем, что выполняется условие (5). Теорема 1 доказана.

## 2. Сведения из теории спектральных задач и введение некоторых пространств

Решая однородную задачу, соответствующей задаче (1)-(3), (11), методом разделения переменных, приходим к спектральной задаче

$$y''(x) + \lambda y(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq 1,$$

$$y(0) = 0, \quad y(1) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 y(x) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx = 0. \quad (25)$$

Известно [7, 8] что спектральная задача (25) эквивалентна спектральной задаче (6) без собственной функции, соответствующей

собственному значению  $\lambda_0$ . Следовательно, спектральная задача (25) имеет только собственные функции  $y_k(x) = \sqrt{2} \sin(\sqrt{\lambda_k} x)$ ,  $k = 1, 2, \dots$ , с положительными собственными числами  $\lambda_k$ , определяемые из уравнения  $ctg \sqrt{\lambda} = d \sqrt{\lambda}$ , занумерованные в порядке возрастания.

В работе [7,8] сформулированы и обоснованы следующие утверждения.

**Лемма 1.** *Начиная с некоторого номера  $N$  имеет место оценка*

$$0 < \sqrt{\lambda_k} - \pi k < (d\pi k)^{-1}. \quad (26)$$

**Следствие 2.1.** *Пусть  $v_k(x) = \sqrt{2} \sin(\sqrt{\mu_k} x)$ , где  $\sqrt{\mu_k} = \pi k$ ,  $k = 1, 2, 3, \dots$ . Тогда справедливы неравенства*

$$\begin{aligned} \|y_k(x) - v_k(x)\|_{C[0,1]} &\leq \sqrt{2}(d\pi k)^{-1}, \quad k \geq N, \\ \sum_{k=N}^{\infty} \|y_k(x) - v_k(x)\|_{L_2(0,1)}^2 &\leq 1/(9d^2). \end{aligned} \quad (27)$$

**Лемма 2.** *Биортогонально сопряжённая система  $\{z_k(x)\}$  к системе  $\{y_k(x)\}$ ,  $k = 1, 2, 3, \dots$ , определяется по формуле*

$$z_k(x) = \sqrt{2}(\sin(\sqrt{\lambda_k} x) - \sin \sqrt{\lambda_k} (\sin \sqrt{\lambda_0} x) / (\sin \sqrt{\lambda_0})) / (1 + d \sin^2 \sqrt{\lambda_k}). \quad (28)$$

**Теорема 2.** *Системы  $\{y_k(x)\}$ ,  $k = 1, 2, \dots$ , образует базис Рисса в пространстве  $L_2(0,1)$ .*

Теперь,

пусть

$\eta_k(x) = \sqrt{2} \cos(\sqrt{\lambda_k} x)$ ,  $\xi_k(x) = \sqrt{2} \cos(\sqrt{\mu_k} x)$ ,  $k = 1, 2, 3, \dots$ . Тогда, аналогично (27), справедливы неравенства

$$\begin{aligned} \|\eta_k(x) - \xi_k(x)\|_{C[0,1]} &\leq \sqrt{2}(d\pi k)^{-1}, \quad k \geq N, \\ \sum_{k=N}^{\infty} \|\eta_k(x) - \xi_k(x)\|_{L_2(0,1)}^2 &\leq 1/(9d^2). \end{aligned} \quad (29)$$

Предположим, что  $g(x) \in L_2(0,1)$ . Тогда, с учётом (27), получаем

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} \left( \int_0^1 g(x) y_k(x) dx \right)^2 &\leq \sum_{k=1}^N \int_0^1 g^2(x) dx \cdot \int_0^1 y_k^2(x) dx + \\ + 2 \sum_{k=N}^{\infty} \left( \int_0^1 g(x) v_k(x) dx \right)^2 &+ 2 \sum_{k=N}^{\infty} \int_0^1 g^2(x) dx \cdot \int_0^1 (y_k(x) - v_k(x))^2 dx \end{aligned}$$

ИЛИ

$$\left( \sum_{k=1}^{\infty} \left( \int_0^1 g(x) y_k(x) dx \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq M \|g(x)\|_{L_2(0,1)}, \quad (30)$$

где

$$M = \left[ \sum_{k=1}^N \int_0^1 y_k^2(x) dx + 2/(9d^2) + 2 \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (31)$$

Аналогично (30), с учетом (29), находим:

$$\left( \sum_{k=1}^{\infty} \left( \int_0^1 g(x) \eta_k(x) dx \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq M \|g(x)\|_{L_2(0,1)}. \quad (32)$$

Так как функции  $\{y_k(x)\}$ ,  $k=1,2,3,\dots$ , образуют базис Рисса в пространстве  $L_2(0,1)$ , тогда известно что для любой функции  $g(x) \in L_2(0,1)$  справедливо равенство

$$g(x) = \sum_{k=1}^{\infty} g_k \cdot y_k(x), \quad (33)$$

где

$$g_k = \int_0^1 g(x) z_k(x) dx. \quad (k=1,2,\dots)$$

Далее, нетрудно видеть, что

$$g_k = \frac{\sqrt{2}}{\alpha_k} \left[ \int_0^1 g(x) \sin(\sqrt{\lambda_k} x) dx - \frac{\cos \sqrt{\lambda_k}}{d \sqrt{\lambda_k} \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 g(x) \sin \sqrt{\lambda_0} x dx \right], \quad (34)$$

где

$$\alpha_k = 1 + d \sin^2 \sqrt{\lambda_k} > 1.$$

Отсюда, с учётом (30) имеем:

$$\left( \sum_{k=1}^{\infty} g_k^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq M_0 \|g(x)\|_{L_2(0,1)}, \quad (35)$$

где

$$M_0 = \left[ M + \frac{1}{d |\sin \sqrt{\lambda_0}|} \left( \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_k} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \sqrt{2}. \quad (36)$$

Предположим, что  $g(x) \in C[0,1]$ ,  $g'(x) \in L_2(0,1)$ ,  $g(0) = 0$  и



$$J(g) \equiv g(1) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 g(x) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx = 0.$$

Тогда из (34) имеем:

$$g_k = \frac{\sqrt{2}}{\alpha_k} \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} \int_0^1 g'(x) \cos(\sqrt{\lambda_k} x) dx. \quad (37)$$

Отсюда, с учётом (29), находим:

$$\left( \sum_{k=1}^{\infty} (\sqrt{\lambda_k} |g_k|)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq M \|g'(x)\|_{L_2(0,1)}. \quad (38)$$

Пусть  $g(x) \in C^1[0,1]$ ,  $g''(x) \in L_2(0,1)$ ,  $g(0) = 0$  и  $J(g) = 0$ . Тогда из (37) получаем:

$$g_k = -\frac{\sqrt{2}}{\alpha_k} \left[ \frac{1}{\lambda_k} \int_0^1 g''(x) \sin(\sqrt{\lambda_k} x) dx - \frac{\cos \sqrt{\lambda_k}}{d \lambda_k \sqrt{\lambda_k}} g'(1) \right]. \quad (39)$$

Отсюда находим:

$$\left( \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k |g_k|)^2 \right)^{1/2} \leq m |g'(0)| + \sqrt{2} M \|g''(x)\|_{L_2(0,1)}, \quad (40)$$

где

$$m = \frac{\sqrt{2}}{d} \left( \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_k} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Теперь предположим, что  $g(x) \in C^2[0,1]$ ,  $g'''(x) \in L_2(0,1)$ ,  $g(0) = 0$ ,  $J(g) = 0$ ,  $g''(0) = 0$  и  $d g''(1) + g'(1) = 0$ . Тогда из (39) имеем:

$$g_k = -\frac{\sqrt{2}}{\alpha_k} \frac{1}{\lambda_k \sqrt{\lambda_k}} \int_0^1 g'''(x) \cos(\sqrt{\lambda_k} x) dx.$$

Отсюда, с учётом (29), получаем:

$$\left( \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} |g_k|)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq M \|g'''(x)\|_{L_2(0,1)}. \quad (41)$$

1. Обозначим через  $B_{2,T}^{\frac{3}{2}}$  [9], совокупность всех функций  $u(x,t)$  вида

$$u(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} u_k(t) y_k(x),$$

рассматриваемых в  $D_T$ , где каждая из функций  $u_k(t)$  непрерывна на  $[0,T]$  и

$$\left\{ \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} \|u_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right\}^{\frac{1}{2}} < +\infty.$$

Норму на этом множестве определим так:

$$\|u(x,t)\|_{B_{2,T}^{\frac{3}{2}}} = \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} \|u_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right\}^{\frac{1}{2}}.$$

2. Через  $E_T^{\frac{3}{2}}$  обозначим пространство, состоящее из топологического произведения

$$B_{2,T}^{\frac{3}{2}} \times C[0,T].$$

Норма элемента  $z = \{u, a\}$  определяется формулой

$$\|z\|_{E_T^{\frac{3}{2}}} = \|u(x,t)\|_{B_{2,T}^{\frac{3}{2}}} + \|a(t)\|_{C[0,T]}.$$

Известно, что  $B_{2,T}^{\frac{3}{2}}$  и  $E_T^{\frac{3}{2}}$  являются банаховыми пространствами.

### 3. Исследование существования и единственности классического решения обратной краевой задачи.

Принимая во внимание лемму 1 и теорему 2 первую компоненту  $u(x,t)$  решения  $\{u(x,t), a(t)\}$  задачи (1)-(3), (11), (12) будем искать в виде

$$u(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} u_k(t) y_k(x), \quad (42)$$

где

$$u_k(t) = \int_0^1 u(x,t) z_k(x) dx, \quad k = 1, 2, \dots$$

Для определения искоемых функций  $u_k(t)$ ,  $k = 1, 2, \dots$ , применяя метод разделения переменных к уравнению (1), в силу (2), получим соотношения

$$(1 + \lambda_k) u_k''(t) + \alpha \lambda_k u_k'(t) + \beta \lambda_k u_k(t) = F_k(t; u, a), \quad (k = 1, 2, \dots, 0 \leq t \leq T), \quad (43)$$

$$u_k(0) = \varphi_k, \quad u_k'(0) = \psi_k, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (44)$$

где

$$F_k(t; u, a) = f_k(t) + a(t) u_k(t), \quad f_k(t) = \int_0^1 f(x,t) z_k(x) dx,$$

$$\varphi_k = \int_0^1 \varphi(x) z_k(x) dx, \quad \psi_k = \int_0^1 \psi(x) z_k(x) dx, \quad k = 1, 2, \dots$$

Очевидно, что

$$\lambda_k < 1 + \lambda_k < 2\lambda_k$$

тогда

$$\frac{\alpha^2}{8} - \beta < \frac{\alpha^2 \lambda_k}{4(1 + \lambda_k)} - \beta < \frac{\alpha^2}{4} - \beta$$

Теперь предположим, что

$$\frac{\alpha^2}{8} - \beta > 0.$$

Решая задачу (43), (44) находим, что

$$\begin{aligned} u_k(t) = & \frac{1}{\gamma_k} \left[ \left( \mu_{2k} e^{\mu_{1k} t} - \mu_{1k} e^{\mu_{2k} t} \right) \varphi_k + \left( e^{\mu_{2k} t} - e^{\mu_{1k} t} \right) \psi_k + \right. \\ & \left. + \frac{1}{1 + \lambda_k} \int_0^t F_k(\tau; u, a) \left( e^{\mu_{2k}(t-\tau)} - e^{\mu_{1k}(t-\tau)} \right) d\tau \right] \\ & (0 \leq t \leq T; k = 1, 2, \dots), \end{aligned} \quad (45)$$

где

$$\begin{aligned} \mu_{ik} = & -\frac{\alpha \lambda_k}{2(1 + \lambda_k)} + (-1)^i \sqrt{\frac{\alpha^2 \lambda_k^2}{4(1 + \lambda_k)^2} - \frac{\beta \lambda_k}{1 + \lambda_k}} \quad (i = 1, 2), \\ \gamma_k = & \mu_{2k} - \mu_{1k} = 2 \sqrt{\frac{\alpha^2 \lambda_k^2}{4(1 + \lambda_k)^2} - \frac{\beta \lambda_k}{1 + \lambda_k}}. \end{aligned}$$

Для определения первой компоненты  $u(x, t)$  классического решения  $\{u(x, t), a(t)\}$  задачи (1)-(3), (11), (12), учитывая соотношения (45), из (42) получим

$$\begin{aligned} u(x, t) = & \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{1}{\gamma_k} \left[ \left( \mu_{2k} e^{\mu_{1k} t} - \mu_{1k} e^{\mu_{2k} t} \right) \varphi_k + \left( e^{\mu_{2k} t} - e^{\mu_{1k} t} \right) \psi_k + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{1 + \lambda_k} \int_0^t F_k(\tau; u, a) \left( e^{\mu_{2k}(t-\tau)} - e^{\mu_{1k}(t-\tau)} \right) d\tau \right] \right\} y_k(x). \end{aligned} \quad (46)$$

Теперь, с учетом (42), из (12) находим, что

$$a(t) = h^{-1}(t) \{h''(t) - f(x_0, t) + \sqrt{2} \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k (u_k''(t) + \alpha u_k'(t) + \beta u_k(t)) \sin \sqrt{\lambda_k} x_0\}. \quad (47)$$

Дифференцируя (42) два раза, получим:

$$u_k'(t) = \frac{1}{\gamma_k} \left[ \mu_{1k} \mu_{2k} \left( e^{\mu_{1k} t} - e^{\mu_{2k} t} \right) \varphi_k + \left( \mu_{2k} e^{\mu_{2k} t} - \mu_{1k} e^{\mu_{1k} t} \right) \psi_k + \right.$$

$$+ \frac{1}{1 + \lambda_k} \int_0^t F_k(\tau; u, a) \left( \mu_{2k} e^{\mu_{2k}(t-\tau)} - \mu_{1k} e^{\mu_{1k}(t-\tau)} \right) d\tau \quad (0 \leq t \leq T; k = 1, 2, \dots), \quad (48)$$

$$u_k''(t) = \frac{1}{\gamma_k} \left[ \mu_{1k} \mu_{2k} \left( \mu_{1k} e^{\mu_{1k}t} - \mu_{2k} e^{\mu_{2k}t} \right) \varphi_k + \left( \mu_{2k}^2 e^{\mu_{2k}t} - \mu_{1k}^2 e^{\mu_{1k}t} \right) \psi_k + \frac{1}{1 + \lambda_k} \int_0^t F_k(\tau; u, a) \left( \mu_{2k}^2 e^{\mu_{2k}(t-\tau)} - \mu_{1k}^2 e^{\mu_{1k}(t-\tau)} \right) d\tau \right] + \frac{1}{1 + \lambda_k} F_k(t; u, a) \quad (k = 1, 2, \dots). \quad (49)$$

В силу (42) и (49) имеем:

$$\begin{aligned} \lambda_k (u_k''(t) + \alpha u_k'(t) + \beta u_k(t)) &= F_k(\tau; u, a, b) - u_k''(t) = \\ &= -\frac{1}{\gamma_k} \left[ \mu_{1k} \mu_{2k} \left( \mu_{1k} e^{\mu_{1k}t} - \mu_{2k} e^{\mu_{2k}t} \right) \varphi_k + \left( \mu_{2k}^2 e^{\mu_{2k}t} - \mu_{1k}^2 e^{\mu_{1k}t} \right) \psi_k + \right. \\ &+ \left. \frac{1}{1 + \lambda_k} \int_0^t F_k(\tau; u, a, b) \left( \mu_{2k}^2 e^{\mu_{2k}(t-\tau)} - \mu_{1k}^2 e^{\mu_{1k}(t-\tau)} \right) d\tau \right] + \\ &+ \frac{\lambda_k}{1 + \lambda_k} F_k(t; u, a) \quad (0 \leq t \leq T; k = 1, 2, \dots). \end{aligned} \quad (50)$$

Далее, принимая во внимание (50), из (47) для второй компоненты  $a(t)$  решения  $\{u(x, t), a(t)\}$  задачи (1)-(3), (11), (12) получаем следующее соотношение

$$\begin{aligned} a(t) &= h^{-1}(t) \left\{ h''(t) - f(x_0, t) + \sqrt{2} \sum_{k=1}^{\infty} \left[ \frac{\lambda_k}{1 + \lambda_k} F_k(t; u, a) + \right. \right. \\ &- \sum_{k=1}^{\infty} \left[ \frac{1}{\gamma_k} \left[ \mu_{1k} \mu_{2k} \left( \mu_{1k} e^{\mu_{1k}t} - \mu_{2k} e^{\mu_{2k}t} \right) \varphi_k + \left( \mu_{2k}^2 e^{\mu_{2k}t} - \mu_{1k}^2 e^{\mu_{1k}t} \right) \psi_k + \right. \right. \\ &+ \left. \left. \frac{1}{1 + \lambda_k} \int_0^t F_k(\tau; u, a) \left( \mu_{2k}^2 e^{\mu_{2k}(t-\tau)} - \mu_{1k}^2 e^{\mu_{1k}(t-\tau)} \right) d\tau \right] \sin(\sqrt{\lambda_k} x_0) \right\}. \end{aligned} \quad (51)$$

Таким образом, решение задачи (1)-(3), (11), (12) сведено к решению системы (46), (51) относительно неизвестных функций  $u(x, t)$  и  $a(t)$ .

**Лемма 3.** Пусть  $\{u(x,t), a(t)\}$  – решение задачи (1)-(3), (11), (12).

Тогда функции  $u_k(t) = \int_0^1 u(x,t) z_k(x) dx$ ,  $t \in [0, T]$ ,  $k = 1, 2, \dots$ , удовлетворяют соотношению (42).

**Следствие 1.** Пусть система (33), (36) имеет единственное решение. Если задача (1)-(3), (11), (12) имеет решение, то оно единственно.

Нетрудно видеть, что

$$\mu_{ik} < 0, \quad e^{\mu_{ik}t} < 1, \quad e^{\mu_{ik}(t-\tau)} < 1, \quad (i=1,2; 0 \leq t \leq T; 0 \leq \tau \leq t)$$

$$|\mu_{ik}| \leq \alpha \quad (i=1,2), \quad |\mu_{1k}\mu_{2k}| \leq \beta, \quad \frac{1}{\gamma_k} \leq \frac{1}{2\sqrt{\frac{1}{2}\left(\frac{\alpha^2}{8} - \beta\right)}} \equiv \gamma_0.$$

Учитывая эти соотношения, находим:

$$\begin{aligned} & \left( \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} \|\tilde{u}_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq \\ & \leq 2\alpha\gamma_0 \left( \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} |\varphi_k|)^2 \right)^{\frac{1}{2}} + 2\alpha\gamma_0 \left( \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} |\psi_k|)^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \\ & + 2\gamma_0 \sqrt{T} \left( \int_0^T \sum_{k=1}^{\infty} (\sqrt{\lambda_k} |f_k(\tau)|)^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}} + 2T\gamma_0 \|a(t)\|_{C[0,T]} \left( \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} \|u_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (52) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \|\tilde{a}(t)\|_{C[0,T]} \leq \|h^{-1}(t)\|_{C[0,T]} \left\{ \|h''(t) - f(x_0, t)\|_{C[0,T]} + \sqrt{2} \left( \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-1} \right)^{\frac{1}{2}} \times \right. \\ & \times \left[ \left( \sum_{k=1}^{\infty} (\sqrt{\lambda_k} \|f_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \|a(t)\|_{C[0,T]} \left( \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} \|u_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{\frac{1}{2}} + \right. \\ & + 2\alpha\beta\gamma_0 \left( \sum_{k=1}^{\infty} (\sqrt{\lambda_k} |\varphi_k|)^2 \right)^{\frac{1}{2}} + 2\alpha^2\gamma_0 \left( \sum_{k=1}^{\infty} (\sqrt{\lambda_k} |\psi_k|)^2 \right)^{\frac{1}{2}} + 2\alpha^2\gamma_0 \sqrt{T} \left( \int_0^T \sum_{k=1}^{\infty} (\sqrt{\lambda_k} |f_k(\tau)|)^2 d\tau \right)^{\frac{1}{2}} + \\ & \left. \left. + 2\alpha^2\gamma_0 T \|a(t)\|_{C[0,T]} \left( \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} \|u_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \right] \right\}. \quad (53) \end{aligned}$$

Предположим, что данные задачи (1)-(3), (11), (12) удовлетворяют следующим условиям:

$$1^\circ. \varphi(x) \in C^2[0,1], \varphi'''(x) \in L_2(0,1) \text{ и } \varphi(0) = \varphi''(0) = 0,$$

$$\varphi(1) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 \varphi(x) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx = 0, \quad d\varphi''(1) + \varphi'(1) = 0,$$

$$2^\circ. \psi(x) \in C^2[0,1], \psi'''(x) \in L_2(0,1) \text{ и } \psi(0) = \psi''(0) = 0,$$

$$\psi(1) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 \psi(x) \sin \sqrt{\lambda_0} x dx = 0, \quad d\psi''(1) + \psi'(1) = 0,$$

$$3^\circ. f(x,t) \in C(D_T), f_x(x,t) \in L_2(D_T), f(0,t) = 0,$$

$$f(1,t) + \frac{1}{d \sin \sqrt{\lambda_0}} \int_0^1 f(x,t) \sin(\sqrt{\lambda_0} x) dx = 0, \quad 0 \leq t \leq T,$$

$$4^\circ. \alpha > 0, \beta > 0, \frac{\alpha^2}{8} - \beta > 0. h(t) \in C^2[0,T], h(t) \neq 0 \text{ при } t \in [0,T].$$

Тогда, с учетом (35), (40), из (52) и (53) получим, соответственно,

$$\|\tilde{u}(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}} \leq A_1(T) + B_1(T) \|a(t)\|_{C[0,T]} \|u(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}}, \quad (54)$$

$$\|\tilde{a}(t)\|_{C[0,T]} \leq A_2(T) + B_2(T) \|a(t)\|_{C[0,T]} \|u(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}}, \quad (55)$$

где

$$A_1(T) = 2\alpha\gamma_0 M \|\varphi'''(x)\|_{L_2(0,1)} + 2\alpha\gamma_0 M \|\psi'''(x)\|_{L_2(0,1)} + 2\gamma_0 M \sqrt{T} \|f_x(x,t)\|_{L_2(D_T)},$$

$$B_1(T) = 2T\gamma_0,$$

$$A_2(T) = \|h^{-1}(t)\|_{C[0,T]} \left\{ \|h''(t) - f(x_0,t)\|_{C[0,T]} + \sqrt{2} \left( \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-1} \right)^{1/2} \left[ M \|f_x(x,t)\|_{C[0,T]} \|_{L_2(0,1)} + \right. \right.$$

$$\left. \left. + 2\alpha\beta\gamma_0 M \|\varphi'(x)\|_{L_2(0,1)} + 2\alpha^2\gamma_0 M \|\psi'(x)\|_{L_2(0,1)} + 2\alpha^2\gamma_0 M \sqrt{T} \|f_x(x,t)\|_{L_2(D_T)} \right] \right\},$$

$$B_2(T) = \sqrt{2} \|h^{-1}(t)\|_{C[0,T]} \left( \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-1} \right)^{1/2} \left( 1 + 2\alpha^2\gamma_0 T \right).$$

Из неравенств (54), (55) следует справедливость неравенства

$$\|\tilde{u}(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}} + \|\tilde{a}(t)\|_{C[0,T]} \leq A(T) + B(T) \|a(t)\|_{C[0,T]} \|u(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}}, \quad (56)$$

где

$$A(T) = A_1(T) + A_2(T), \quad B(T) = B_1(T) + B_2(T).$$

Обозначим через  $K_R$  замкнутый шар в пространстве  $E_T^{3/2}$ , с центром в нуле, радиуса  $R$ .

**Теорема 3.** Пусть выполняется условия  $1^\circ - 4^\circ$  и условие

$$(A(T) + 2)^2 B(T) < 1. \quad (57)$$

Тогда задача (1)-(3), (11), (12) имеет в шаре  $K_R \subset E_T^{3/2}$  единственное решение, где  $R = A(T) + 2$

**Доказательство.** В пространстве  $E_T^{3/2}$  рассмотрим уравнение

$$z = \Phi z, \quad (58)$$

где  $z = \{u, a\}$ , а компоненты  $\Phi_i (i=1,2)$  оператора  $\Phi(u, a)$  определены правыми частями 46), (51) соответственно.

Аналогично, (56) получаем, что для любых  $z, z_1, z_2 \in K_R$  справедливы оценки

$$\|\Phi z\|_{E_T^{3/2}} \leq A(T) + B(T) \|a(t)\|_{C[0,T]} \|u(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}}, \quad (59)$$

$$\|\Phi z_1 - \Phi z_2\|_{E_T^{3/2}} \leq B(T) R \left( \|a_1(t) - a_2(t)\|_{C[0,T]} + \|u_1(x,t) - u_2(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}} \right). \quad (60)$$

В силу (57), из (59) и (60) следует, что оператор  $\Phi$  действует в шаре  $K_R$  и является сжимающим. Поэтому этот оператор в шаре  $K_R$  имеет единственную неподвижную точку  $z = \{u, a\}$ . Следовательно,  $z = \{u, a\}$  является в шаре  $K_R$  единственным решением системы (46), (51).

Функция  $u(x,t)$ , как элемент пространства  $B_{2,T}^{3/2}$ , непрерывна и имеет непрерывные производные  $u_x(x,t), u_{xx}(x,t)$  в  $D_T$ .

Нетрудно видеть, что  $u_t(x,t), u_{tx}(x,t), u_{ttx}(x,t), u_{tt}(x,t), u_{ttt}(x,t)$  непрерывны в  $D_T$ . Заметим, что уравнение (1) и условия (2), (3), (11) и (12) удовлетворяются в обычном смысле. Следовательно,  $\{u(x,t), a(t)\}$  является решением задачи (1)-(3), (11), (12), а в силу следствия 1, оно единственное. Теорема доказана.

Из теоремы 3, в силу теоремы 1, непосредственно следует справедливость следующего утверждения.

**Теорема 2.** Пусть выполняются все условия теоремы 1 и выполняются условия согласования  $(\varphi(x_0) = h(0), \psi(x_0) = h'(0))$ . Тогда задача (1)-(5) имеет в шаре  $K_R$  единственное классическое решение.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Тихонов А.Н. Об устойчивости обратных задач // ДАН СССР, 1943, т. 39, №5, с.195-198.
2. Лаврентьев М.М., Васильев В.Г., Романов В.Г. Многомерные обратные задачи для дифференциальных уравнений. Новосибирск, 1969.
3. Лаврентьев М.М., Романов В.Г., Шишатский С.Т. Некорректные задачи математической физики и анализа. М., 1980.
4. Иванов В.К., Васин В.В., Танана В.П. Теория линейных некорректных задач и ее при-

ложения. М., 1978.

5. Романов В.Г. Обратные задачи математической физики. М., 1984, 264 с.
6. Уизем Дж. Линейные и нелинейные волны. М.: Мир, 1977.
7. Капустин Н.Ю., Моисеев Е.И. // Дифференц. уравнения, 1997, т. 33, № 1, с. 115-119.
8. Моисеев Е.И., Капустин Н.Ю. // Дифференц. уравнения, 2000, т. 36, № 8, с. 1069-1074.
9. Худавердиев К.И., Велиев А.А. Исследование одномерной смешанной задачи для одного класса псевдогиперболических уравнений третьего порядка с нелинейной операторной правой частью, Баку: Чашыюглы, 2010, 168 с.

## **BUSSINESK-LYAVA TƏNLİYİ ÜÇÜN BİR QEYRİ-KLASSİK SƏRHƏD ŞƏRTLİ TƏRS SƏRHƏD MƏSƏLƏSİ**

**N.Ş.İSGƏNDƏROV, S.İ.ALLAHVERDİYEVA**

### **XÜLASƏ**

Məqalədə Bussinesk-Lyava tənliyi üçün qeyri-klassik sərhəd şərtli tərs məsələ tətbiq olunur. Əvvəlcə, qoyulmuş məsələ ekvivalent məsələyə gətirilir. Furiye üsulunun köməyi ilə ekvivalent məsələ inteqral tənliklər sisteminə gətirilir. Sıxılmış inikas prinsipindən istifadə edərək inteqral tənliklər sisteminin həllinin varlığı və yeganəliyi isbat edilir. Bu həll ekvivalent məsələnin həlli olur. Sonra isə ekvivalentlikdən istifadə edərək qoyulmuş məsələnin həllinin varlığı və yeganəliyi isbat edilir.

**Açar sözlər:** tərs məsələ, Bussinesk-Lyava tənliyi, qeyri-klassik şərtlər, klassik həll.

## **INVERSE BOUNDARY VALUE PROBLEM FOR THE BOUSSINESQ-LOVE EQUATION WITH NONCLASSICAL BOUNDARY CONDITIONS**

**N.Sh.İSGANDAROV, S.I.ALLAHVERDIYEVA**

### **SUMMARY**

This paper the existence and uniqueness of a solution of the inverse boundary value problem for the Boussinesq-Love Equation with nonclassical boundary conditions. The problem is firstly reduced to the problem that is in a sense equivalent to the original. Then, the Fourier method is applied, reducing the problem to solution of a system of integral equations. The existence and uniqueness of the latter equation is proved by the contraction mapping principle, which also yields the unique solution of the equivalent problem. Using equivalence, we finally prove the unique existence of a classical solution of the problem under consideration.

**Key words:** inverse problem, Boussinesq-Love Equation, nonclassical conditions, classical solution.



УДК 517.95

**ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ КОЭФФИЦИЕНТА  
ГИПЕРБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ  
ВТОРОГО ПОРЯДКА С НЕЛОКАЛЬНЫМ УСЛОВИЕМ**

**Г.Ф.КУЛИЕВ, Х.Т.ТАГИЕВ**

*Бакинский Государственный Университет*  
*hamletquliyev51@gmail.com, tagiyevht@gmail.com*

*В последнее время задачи оптимального управления для различных уравнений с частными производными с нелокальными граничными условиями интенсивно изучаются [4, 10]. Наряду с этим задачи оптимального управления с коэффициентами уравнений с частными производными среди всех задач оптимального управления занимают особое место [1, 2, 5, 6]. В рассматриваемой работе изучается задача оптимального управления для гиперболического уравнения с нелокальным граничным условием, когда искомая управляющая функция присутствует в младшем коэффициенте уравнения.*

**Ключевые слова:** гиперболические уравнения, оптимальное управление, нелокальные условия, дифференциальные уравнения с частными производными

**1. Постановка задачи.** Рассмотрим задачу определения пары функций  $(u(x,t), \vartheta(x)) \in W_2^1(Q) \times V$  из следующих соотношений

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} - \Delta u + \vartheta(x)u(x,t) = f(x,t), \quad (x,t) \in Q = \Omega \times (0,T), \quad (1)$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad \frac{\partial u(x,0)}{\partial t} = u_1(x), \quad x \in \Omega, \quad (2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \nu} \Big|_S = \int_{\Omega} K(x,y)u(y,t)dy, \quad (x,t) \in S, \quad (3)$$

$$\int_0^T R(x,t)u(x,t)dt = \varphi(x), \quad x \in \Omega, \quad (4)$$

здесь  $T$  заданное положительное число,  $\Omega \subset R^n$  ( $n = 2,3$ )-ограниченная область с гладкой границей  $\partial\Omega$ ,  $S = \partial\Omega \times (0,T)$  -боковая поверхность цилиндра  $Q$ ,  $\nu$  -внешняя нормаль к границе  $\partial\Omega$ .

Если функции  $f(x,t), \vartheta(x), u_0(x), u_1(x), K(x,y)$  заданы, то получаем прямую задачу (1)-(3) определения функции  $u(x,t)$ .

Если  $\vartheta(x)$  - неизвестная функция, мы дополнительно зададим условие (4). Тогда получается обратная задача (1)-(4) определения пары функций  $(u(x,t), \vartheta(x))$ .

Предположим, что  $f \in L_2(Q), u_0 \in W_2^1(\Omega), u_1 \in L_2(\Omega), R \in L_\infty(Q), \varphi \in L_2(\Omega), K(x,y) \in L_\infty(\partial\Omega \times \Omega)$  - заданные функции

Задачу (1)-(4) приводим к следующей задаче оптимального управления: найти такую функцию  $\vartheta(x)$  из множества

$$V = \{ \vartheta(x) \in L_2(\Omega) : a \leq \vartheta(x) \leq b \text{ почти всюду на } \Omega \}, \quad (5)$$

которая доставляет минимум функционалу

$$I(\vartheta) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left[ \int_0^T R(x,t) u(x,t; \vartheta) dt - \varphi(x) \right]^2 dx \quad (6)$$

при ограничениях (1)-(3), где  $u(x,t; \vartheta)$  - решение задачи (1)-(3) при  $\vartheta = \vartheta(x)$ ,  $a, b$  заданные числа. Эту задачу назовем задачей (1)-(3),(5),(6).

Функцию  $\vartheta(x)$  назовем управлением, а  $V$  -классом допустимых управлений. Между задачами (1)-(3),(5),(6) и (1)-(4) существует тесная связь. Отметим, что если  $\min_{\vartheta \in V} I(\vartheta) = 0$ , то дополнительное условие (4) выполняется.

Под решением краевой задачи (1)-(3) при каждом фиксированном управлении  $\vartheta \in V$  будем понимать функцию из  $W_2^1(Q)$  равную  $u_0(x)$  при  $t = 0$  и удовлетворяющую интегральному тождеству

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_{\Omega} \left( -\frac{\partial u}{\partial t} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \nabla u \nabla \eta + \vartheta u \eta \right) dx dt - \int_0^T \int_{\partial\Omega} \eta(x,t) \int_{\Omega} K(x,y) u(y,t) dy ds dt - \\ & - \int_{\Omega} u_1(x) \eta(x,0) dx = \int_0^T \int_{\Omega} f(x,t) \eta(x,t) dx dt \end{aligned} \quad (7)$$

при всех  $\eta = \eta(x,t)$  из  $W_2^1(Q)$ , равных нулю при  $t = T$ .

Из результатов работы [3] следует, что при принятых условиях краевая задача (1)-(3) при каждом фиксированном  $\vartheta \in V$  имеет единственное обобщенное решение из  $W_2^1(Q)$  и справедлива оценка

$$\|u\|_{W_2^1(Q)} \leq c \left[ \|u_0\|_{W_2^1(\Omega)} + \|u_1\|_{L_2(\Omega)} + \|f\|_{L_2(Q)} \right]. \quad (8)$$

Кроме того, это решение обладает свойствами

$$u \in C\left([0, T], W_2^1(\Omega)\right), \frac{\partial u}{\partial t} \in C\left([0, T], L_2(\Omega)\right).$$

Здесь и в дальнейшем через  $c$  будем обозначать различные постоянные, не зависящие от оцениваемых величин и от допустимых управлений.

## 2. О разрешимости задачи (1)-(3), (5), (6).

**Теорема 1.** Пусть выполнены условия, принятые при постановке задачи (1)-(3), (5), (6). Тогда  $V_* = \left\{ \vartheta_* \in V : I(\vartheta_*) = \min_{\vartheta \in V} I(\vartheta) \right\}$  непусто, слабо компактно в  $L_2(\Omega)$  и любая минимизирующая последовательность  $\{\vartheta_k\}$  слабо в  $L_2(\Omega)$  сходится к множеству  $V_*$ .

**Доказательство:** Ясно, что множество  $V$ , определяемое соотношением (5), слабо компактно в пространстве  $L_2(\Omega)$ . Покажем, что функционал (6) слабо в  $L_2(\Omega)$  непрерывен на множестве  $V$ . Пусть  $\vartheta \in V$  - некоторый элемент,  $\{\vartheta_k\} \in V$  - произвольная последовательность, такая, что при  $k \rightarrow \infty$

$$\vartheta_k \rightarrow \vartheta \text{ слабо в } L_2(\Omega). \quad (9)$$

В силу однозначной разрешимости краевой задачи (1)-(3), каждому управлению  $\vartheta_k \in V$  соответствует единственное решение  $u_k = u(x, t; \vartheta_k)$  задачи (1)-(3) и справедлива оценка  $\|u_k\|_{W_2^1(Q)} \leq c, \forall k = 1, 2, \dots$ , т.е. последовательность  $\{u_k\}$  равномерно ограничена по норме пространства  $W_2^1(Q)$ . Тогда из теорем вложения [7, с.84] следует, что из последовательности можно выделить подпоследовательность  $\{u_{k_l}\}$ , такую, что при  $l \rightarrow \infty$

$$u_{k_l} \rightarrow u \text{ сильно в } L_2(Q), \quad (10)$$

$$\frac{\partial u_{k_l}}{\partial t} \rightarrow \frac{\partial u}{\partial t}, \frac{\partial u_{k_l}}{\partial x} \rightarrow \frac{\partial u}{\partial x} \text{ слабо в } L_2(Q), \quad (11)$$

где  $u = u(x, t) \in W_2^1(Q)$  некоторый элемент. Покажем, что  $u(x, t) = u(x, t; \vartheta)$ , т.е. функция  $u(x, t)$  является обобщенным решением задачи (1)-(3), соответствующим управлению  $\vartheta \in V$ . Ясно, что справедливы тождества

$$\int_0^T \int_{\Omega} \left( -\frac{\partial u_{k_l}}{\partial t} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \nabla u_{k_l} \nabla \eta + \vartheta_{k_l} u_{k_l} \eta \right) dx dt - \int_0^T \int_{\partial \Omega} \eta(x,t) \int_{\Omega} K(x,y) u_{k_l}(y,t) dy ds dt - \int_{\Omega} u_1(x) \eta(x,0) dx = \int_0^T \int_{\Omega} f(x,t) \eta(x,t) dx dt \quad (12)$$

при всех  $\eta = \eta(x,t)$  из  $W_2^1(Q)$ , равных нулю при  $t = T$ .

Переходя к пределу в (12) при  $l \rightarrow \infty$  и используя (9) (10), (11) и теорему вложения  $W_2^1(Q) \subset L_4(Q)$  получим, что функция  $u(x,t)$  равна  $u_0(x)$  при  $t = 0$  и удовлетворяет тождеству (7). Отсюда и из единственности решения задачи (1)-(3), соответствующего управлению  $\vartheta \in V$ , следует, что  $u(x,t) = u(x,t; \vartheta)$ .

Используя единственность решения задачи (1)-(3), соответствующего управлению  $\vartheta \in V$ , легко проверить, что соотношения (10), (11) справедливы не только для подпоследовательности  $\{u_{k_l}\}$ , но и для всей последовательности  $\{u_k\}$ . Учитывая это, из (6) получаем, что  $I(\vartheta_k) \rightarrow I(\vartheta)$  при  $k \rightarrow \infty$ , т.е.  $I(\vartheta)$  слабо в  $L_2(\Omega)$  непрерывен на множестве  $V$ . Тогда в силу теорем 2 из [8, с.49] получаем, что справедливы все утверждения теоремы 1. Теорема доказана.

Для обеспечения единственности решения задачи оптимального управления вместо функционала (6) можно рассматривать функционал вида

$$I_{\alpha}(\vartheta) = I(\vartheta) + \alpha \|\vartheta - \omega\|_{L_2(\Omega)}^2, \quad (13)$$

где  $I(\vartheta)$  определен равенством (6),  $\alpha > 0$  - заданное число,  $\omega \in L_2(\Omega)$  - заданная функция.

**Теорема 2.** Пусть выполнены условия теоремы 1 и  $\alpha > 0$ . Тогда существует плотное подмножество  $G$  пространства  $L_2(\Omega)$ , такое, что для любой  $\omega \in G$  задача минимизации функционала (13) на множестве при условиях (1)-(3) имеет единственное решение.

**Доказательство.** Функционал  $I(\vartheta)$  ограничен снизу и в силу теоремы 1 непрерывен на  $V$ . Кроме того, множество  $V$  замкнуто и ограничено в равномерно выпуклом банаховом пространстве  $L_2(\Omega)$ , Тогда из результатов работы [9, с.372] следует утверждение теоремы 2. Теорема 2 доказана.

**3. Дифференцируемость функционала (6).** Теперь исследуем дифференцируемость функционала (6). Пусть  $\psi(x, t) = \psi(x, t; \vartheta)$  обобщенное решение из  $W_2^1(Q)$  сопряженной задачи

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \Delta \psi + \vartheta(x)\psi(x, t) = \int_{\partial \Omega} \psi(\xi, t) K(\xi, x) ds + R(x, t) \left( \int_0^T R(x, t) u(x, t) dt - \varphi(x) \right),$$

$$(x, t) \in Q, \quad (14)$$

$$\psi(x, T) = 0, \frac{\partial \psi(x, T)}{\partial t} = 0, x \in \Omega, \quad (15)$$

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial \nu} \right|_S = 0, (x, t) \in S. \quad (16)$$

Под обобщенным решением краевой задачи (13)-(15) при каждом фиксированном управлении  $\vartheta \in V$  будем понимать функцию  $\psi(x, t) = \psi(x, t; \vartheta)$  из  $W_2^1(Q)$ , равную нулю при  $t = T$  и удовлетворяющую интегральному тождеству

$$\int_0^T \int_{\Omega} \left( -\frac{\partial \psi}{\partial t} \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \nabla \psi \nabla \Phi + \vartheta \psi \Phi \right) dx dt - \int_0^T \int_{\partial \Omega} \psi(x, t) \int_{\Omega} K(x, y) \Phi(y, t) dy ds dt -$$

$$- \int_0^T \int_{\Omega} \Phi(x, t) R(x, t) \left( \int_0^T R(x, t) u(x, t) dt - \varphi(x) \right) dx dt = 0 \quad (17)$$

при всех  $\Phi = \Phi(x, t)$  из  $W_2^1(Q)$ , равных нулю при  $t = 0$ .

Поскольку смешанная задача (14)-(16) является линейной относительно  $\psi(x, t)$ , то эта задача в пространстве  $W_2^1(Q)$  имеет единственное обобщенное решение [3] и справедлива оценка

$$\|\psi\|_{W_2^1(Q)} \leq c \left[ \|u_0\|_{W_2^1(\Omega)} + \|u_1\|_{L_2(\Omega)} + \|f\|_{L_2(Q)} + \|\varphi\|_{L_2(\Omega)} \right]. \quad (18)$$

**Теорема 3.** Пусть выполнены предполагаемые выше условия на данные задачи (1)-(3), (5), (6). Тогда функционал (6) непрерывно дифференцируем по Фреше на  $V$  и дифференциал в точке  $\vartheta \in V$  при приращении  $\delta \vartheta \in L_2(\Omega)$  имеет вид

$$\langle I'(\vartheta), \delta \vartheta \rangle = \int_0^T \int_{\Omega} u \psi \delta \vartheta dx dt. \quad (19)$$

**Доказательство:** Рассмотрим приращение функционала (6):

$$\begin{aligned} \delta I(\vartheta) &= I(\vartheta + \delta\vartheta) - I(\vartheta) = \\ &= \int_{\Omega} \int_0^T R(x,t) \delta u dt \left( \int_0^T R(x,t) u(x,t) dt - \varphi(x) \right) dx + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left( \int_0^T R(x,t) \delta u dt \right)^2 dx, \end{aligned} \quad (20)$$

где  $\delta u(x,t) = u(x,t; \vartheta + \delta\vartheta) - u(x,t; \vartheta)$ , а  $u(x,t; \vartheta + \delta\vartheta)$  и  $u(x,t; \vartheta)$  - решения задачи (1)-(3), соответствующие управлениям  $\vartheta + \delta\vartheta, \vartheta \in V$ . Ясно, что функция  $\delta u(x,t)$  является обобщенным решением из  $W_2^1(Q)$  краевой задачи

$$\frac{\partial^2 \delta u}{\partial t^2} - \Delta \delta u + (\vartheta + \delta\vartheta) \delta u = -u \delta\vartheta, \quad (x,t) \in Q, \quad (21)$$

$$\delta u(x,0) = 0, \quad \frac{\partial \delta u(x,0)}{\partial t} = 0, \quad x \in \Omega, \quad (22)$$

$$\left. \frac{\partial \delta u}{\partial \nu} \right|_S = \int_{\Omega} K(x,y) \delta u(y,t) dy, \quad (x,t) \in S. \quad (23)$$

Обобщенное решение из  $W_2^1(Q)$  задачи (21)-(23) равно нулю при  $t = 0$  и удовлетворяет интегральному тождеству

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega} \left( \frac{\partial \delta u}{\partial t} \frac{\partial \eta}{\partial t} - \nabla \delta u \nabla \eta - (\vartheta + \delta\vartheta) \delta u \eta \right) dx dt + \int_0^T \int_{\partial\Omega} \eta(x,t) \int_{\Omega} K(x,y) \delta u(y,t) dy ds dt = \\ = \int_0^T \int_{\Omega} u \eta \delta\vartheta dx dt \end{aligned} \quad (24)$$

при всех  $\eta = \eta(x,t)$  из  $W_2^1(Q)$ , равных нулю при  $t = T$ . Как для решения задачи (1)-(3) и для решения задачи (21)-(23) справедлива оценка

$$\|\delta u\|_{W_2^1(Q)} \leq c \|u\|_{L_4(Q)} \|\delta\vartheta\|_{L_2(\Omega)}. \quad (25)$$

Если в (17) положим  $\Phi = \delta u(x,t)$ , а в (24)  $\eta = \psi(x,t; \vartheta)$  и сложим полученные соотношения, то имеем

$$\begin{aligned} \int_0^T \int_{\Omega} R(x,t) \delta u \left( \int_0^T R(x,t) u(x,t) dt - \varphi(x) \right) dx dt = \int_0^T \int_{\Omega} \psi \delta u \delta\vartheta dx dt + \\ + \int_0^T \int_{\Omega} \psi u \delta\vartheta dx dt. \end{aligned}$$

Учитывая это равенство в (20) имеем

$$\delta I(\vartheta) = \int_0^T \int_{\Omega} u \psi \delta\vartheta dx dt + R, \quad (26)$$

где  $R = \int_0^T \int_{\Omega} \delta u \psi \delta v \delta x dt + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \left( \int_0^T R \delta u dt \right)^2 dx$  остаточный член.

Ясно, что выражение в правой части (19) при заданном  $v \in V$  определяет линейный функционал от  $\delta v$ . Кроме того, по теореме вложения  $W_2^1(Q) \subset L_4(Q)$  имеем

$$\left| \int_0^T \int_{\Omega} u \psi \delta v \delta x dt \right| \leq c \|u\|_{L_4(Q)} \|\psi\|_{L_4(Q)} \|\delta v\|_{L_2(\Omega)}.$$

Учитывая здесь оценки (8), (18), получим ограниченность по  $\delta v$  функционала в правой части (19).

Теперь проведем оценку остаточного члена  $R$ , входящего в (26). Используя неравенство Коши-Буняковского получим

$$|R| \leq c \left( \|\delta u\|_{L_4(Q)} \|\psi\|_{L_4(Q)} \|\delta v\|_{L_2(\Omega)} + \|\delta u\|_{L_2(Q)}^2 \right).$$

Учитывая здесь оценку (25), получим, что  $R = o\left(\|\delta v\|_{L_2(\Omega)}\right)$ .

Тогда из (26) следует, что функционал (6) дифференцируем по Фреше на  $V$  и справедлива формула (19). Покажем, что отображение  $v \rightarrow I'(v)$ , определяемое равенством (19), непрерывно действует из  $V$  в  $L_2(\Omega)$ .

Пусть  $\delta \psi(x, t) = \psi(x, t; v + \delta v) - \psi(x, t; v)$ . Из (14)-(16) следует, что  $\delta \psi(x, t)$  является обобщенным решением из  $W_2^1(Q)$  краевой задачи

$$\frac{\partial^2 \delta \psi}{\partial t^2} - \Delta \delta \psi + (v + \delta v) \delta \psi(x, t) = -\psi \delta v + \int_{\partial \Omega} \delta \psi(\xi, t) K(\xi, x) ds +$$

$$+ R(x, t) \int_0^T R(x, t) \delta u(x, t) dt \quad (x, t) \in Q,$$

$$\delta \psi(x, T) = 0, \frac{\partial \delta \psi(x, T)}{\partial t} = 0, x \in \Omega,$$

$$\frac{\partial \delta \psi}{\partial \nu} \Big|_S = 0, (x, t) \in S.$$

Аналогично (18), для решения этой задачи справедлива оценка

$$\|\delta \psi\|_{W_2^1(Q)} \leq c \left( \|\delta u\|_{W_2^1(Q)} + \|\delta v\|_{L_2(\Omega)} \right). \quad (27)$$

Тогда из (25) и (27) следует оценка

$$\|\delta \psi\|_{W_2^1(Q)} \leq c \|\delta v\|_{L_2(\Omega)}. \quad (28)$$

Используя (19) и неравенство Коши-Буняковского, имеем

$$\|I'(\vartheta + \delta\vartheta) - I'(\vartheta)\|_{L_2(\Omega)} \leq c \left( \|\delta u\|_{W_2^1(Q)} \|\psi\|_{L_2(Q)} + \|u\|_{L_2(Q)} \|\delta\psi\|_{L_2(Q)} + \|\delta u\|_{L_2(Q)} \|\delta\psi\|_{L_2(Q)} \right).$$

В силу (25) и (28) отсюда получаем оценку

$$\|I'(\vartheta + \delta\vartheta) - I'(\vartheta)\|_{L_2(\Omega)} \leq c \|\delta\vartheta\|_{L_2(\Omega)}. \quad (29)$$

Здесь правая часть стремится к нулю при  $\|\delta\vartheta\|_{L_2(\Omega)} \rightarrow 0$ . Отсюда следует, что  $\vartheta \rightarrow I'(\vartheta)$  есть непрерывное отображение из  $V$  в  $L_2(\Omega)$ . Теорема 3 доказана.

#### 4. Необходимые условия оптимальности и формула для градиента функционала (6).

**Теорема 4.** Пусть выполнены условия теоремы 3. Тогда для оптимальности управления  $\vartheta_*(x) \in V$  в задаче (1)-(3), (5), (6) необходимо, чтобы выполнялось неравенство

$$\int_0^T \int_{\Omega} u_*(x, t) \psi_*(x, t) (\vartheta(x) - \vartheta_*(x)) dx dt \geq 0, \quad (30)$$

для любого  $\vartheta = \vartheta(x) \in V$ , где  $u_*(x, t) = u(x, t; \vartheta_*)$ ,  $\psi_*(x, t) = \psi(x, t; \vartheta_*)$  - решения задач (1)-(3), и (14)-(16) соответственно при  $\vartheta = \vartheta_*(x)$ .

**Доказательство.** Множество  $V$ , определяемое соотношением (5), выпукло  $L_2(\Omega)$ . Кроме того, согласно теореме 3, функционал  $I(\vartheta)$  непрерывно дифференцируем по Фреше на  $V$  и его дифференциал в точке  $\vartheta \in V$  определяется равенством (19). Тогда в силу теоремы 5 из [8, с28] на элементе  $\vartheta_*(x) \in V$  необходимо выполнение неравенства

$$\langle I'(\vartheta), \vartheta - \vartheta_* \rangle \geq 0,$$

при всех  $\vartheta \in V$ . Отсюда и из (19) следует справедливость неравенства (30) при всех  $\vartheta \in V$ . Теорема 4 доказана.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Кабанихин С.И., Исакаев К.Т. Оптимизационные методы решения коэффициентных обратных задач. Новосибирск: НГУ, 2001, 315 с.
2. Кабанихин С.И. Обратные и некорректные задачи. Новосибирск: Сиб. науч. изд-во, 2009, 457 с.
3. Кожанов А.И., Пулькина Л.С. О разрешимости краевых задач с нелокальным граничным условием интегрального вида для многомерных гиперболических уравнений // Дифференц. Уравнения, 2006, т.42, №9, с. 1166-1179.
4. Кулиев Г.Ф., Шарифов Я.А., Тагиев Х.Т. Решение задачи оптимального управления для одномерного волнового уравнения с нелокальными граничными условиями // Доклады



НАНА, 2006, № 3-4, с. 16-24.

5. Кулиев Г.Ф., Насибзаде В.Н. Приведение обратной задачи акустики к задаче оптимального управления и её исследование. Вестник Томского Государственного Университета, 2018, №54, с. 5-16.
6. Тагиев Р.К. Задачи оптимального управления коэффициентами уравнений с частными производными. Автореф. докт. дис. Баку, 2010.
7. Ладыженская О.А. Краевые задачи математической физики. М.: Наука, 1973, 408 с.
8. Васильев Ф.П., Методы решения экстремальных задач. М.: Наука, 1981, 400 с.
9. Экланд И., Темам Р. Выпуклый анализ и вариационные проблемы. М.: Мир, 1979, 399 с.
10. Guliyev H.F., Tagiev H.T. An optimal control problem with non-local conditions for the weakly nonlinear hyperbolic equation //Optimal control applications and methods, 2013, vol. 34, issue 2, p.216-235.

## **QEYRİ-LOKAL ŞƏRTLİ İKİTƏRTİBLİ HİBERBOLİK TƏNLİYİN ƏMSALININ TƏYİNİ HAQQINDA**

**H.F.GULİYEV, H.T.TAĞIYEV**

### **XÜLASƏ**

Son dövrlər qeyri-lokal şərtli xüsusi törəməli diferensial tənliklər üçün müxtəlif optimal idarəetmə məsələləri intensiv öyrənilir. Bununla yanaşı əmsalında idarəedici olan xüsusi törəməli diferensial tənliklər üçün optimal idarəetmə məsələləri mühüm yer tutur. Baxılan işdə kiçik hədd əmsalında idarəedici olan qeyri-lokal sərhəd şərtli hiperbolik tənlik üçün optimal idarəetmə məsələsi öyrənilmişdir.

**Açar sözlər:** hiperbolik tənliklər, optimal idarəetmə, qeyri-lokal şərt, xüsusi törəməli diferensial tənliklər

## **ON THE DEFINITION OF THE COEFFICIENT OF A SECOND-ORDER HYPERBOLIC EQUATION WITH NONLOCAL CONDITIONS**

**H.F.GULIYEV, H.T.TAGIYEV**

### **SUMMARY**

Recently, optimal control problems for various partial differential equations with nonlocal boundary conditions have been intensively studied. Along with this, optimal control problems with coefficients of partial differential equations occupy a special place among all optimal control problems. In this paper, we study the optimal control problem for a hyperbolic equation with a nonlocal boundary condition when the desired control function is present in the lowest control coefficient.

**Keywords:** hyperbolic equations, optimal control, nonlocal conditions, partial differential equations

УДК 517.927

## О ГЛОБАЛЬНОЙ БИФУРКАЦИЙ ОДНОЙ ПОЛУЛИНЕАРИЗИРУЕМОЙ ЗАДАЧИ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

З.С.АЛИЕВ, М.М.МАМЕДОВА

*Бакинский Государственный Университет*  
z\_aliyev@mail.ru, memmedova.mesume@inbox.ru

*В работе рассматривается полулинеаризируемая задача на собственные значения для обыкновенных дифференциальных уравнений четвертого порядка. Показано существование двух последовательностей неограниченно возрастающих простых полусобственных значений соответствующей полулинейной задачи на собственные значения с полусобственными функциями, обладающими обычными узловыми свойствами Штурма. Изучена структура точек бифуркации из нуля полулинеаризируемой задачи и доказано существование глобальных континуумов нетривиальных решений, отвечающих из точек бифуркации линии тривиальных решений и обладающих осциллиционными свойствами полусобственных функций полулинейной задачи на собственные значения.*

**Ключевые слова:** полулинейная задача на собственные, полусобственное значение, полусобственная функция, точка бифуркации, глобальный континуум.

**Введение.** Рассмотрим следующую нелинейную задачу на собственные значения

$$\ell(y) \equiv y^{(4)} - (q(x)y)'' = \lambda y + \alpha(x)y^+ + \beta(x)y^- + g(x, y, y', y'', y''', \lambda), \quad x \in (0, 1), \quad (1)$$

$$y(0) = y'(0) = y(1) = y'(1) = 0, \quad (2)$$

где  $\lambda \in R$  – спектральный параметр,  $y^+(x) = \max\{y(x), 0\}$ ,  $y^-(x) = (-y)^+(x)$ ,  $q(x)$  – положительная абсолютная непрерывная функция на  $[0, 1]$ ,  $\alpha(x)$ ,  $\beta(x)$  – непрерывные действительные функции на  $[0, 1]$ . Кроме того, функция  $g \in C([0, 1] \times R^5)$  удовлетворяет условию:

$$g(x, y, s, v, w, \lambda) = o(|u| + |s| + |v| + |w|) \text{ при } |y| + |s| + |v| + |w| \rightarrow 0, \quad (3)$$

равномерно по  $x \in [0, 1]$  и  $\lambda \in \Lambda$ , для каждого ограниченного промежутка  $\Lambda \subset R$ .

Бифуркация решений нелинейных задач на собственные значения возникает при изучении различных задач механики, физики, биологии, экономики и других отраслях естествознания (см. напр., [1-5]). Отметим,

что задача (1)-(2) описывает изгибные колебания однородной балки при критических нагрузках, в сечениях которой действует продольная сила, оба конца которой закреплены [1].

Исследованию бифуркации решений нелинейных на собственные значения для обыкновенных дифференциальных уравнений и уравнений в частных производных посвящены работы многих авторов (см. напр., [6-13] и их библиографию). В этих работах с помощью осцилляционных свойств соответствующих линейных задач доказываются существование глобальных континуумов решений исходящих из точек и отрезков прямой тривиальных решений и обладающих осцилляционными свойствами собственных функций этих линейных задач.

А. Берестиким в [7] исследована также полулинеаризируемая задача Штурма-Лиувилля, где с использованием теорем сравнения Штурма доказано, что полусобственные значения полулинейной задачи Штурма-Лиувилля являются простыми, а соответствующие им полусобственные функции обладают обычными узловыми свойствами. Кроме того, было показано существование неограниченных континуумов решений ответвляющихся из точек прямой тривиальных решений и обладающих узловыми свойствами полусобственных функций соответствующей полулинейной задачи.

Отметим, что полулинейные и полулинеаризируемые задачи для обыкновенных дифференциальных уравнений четвертого порядка до сих пор не исследованы. Это связано с тем, что узловые свойства собственных функций спектральных задач для обыкновенных дифференциальных уравнений четвертого порядка были полностью изучены лишь недавно в работе [11].

Настоящая работа посвящена изучению глобальной бифуркации решений нелинейной задачи (1)-(2). Пользуясь результатами работ [10, 11] мы утверждаем существование двух семейств глобальных континуумов решений исходящих из точек прямой тривиальных решений и обладающих узловыми свойствами полулинейной задачи полученной из (1)-(2) при  $g \equiv 0$ .

**Классы  $S_k^v, k \in \mathbb{N}, v \in \{+, -\}$ , и некоторые вспомогательные утверждения.** Рассмотрим следующую нелинейную задачу на собственные значения

$$\begin{aligned} \ell(y) \equiv y^{(4)} - (q(x)y')' &= \lambda y + \alpha(x)y^+ + \beta(x)y^-, \quad x \in (0, 1), \\ y(0) = y'(0) = y(1) = y'(1) &= 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Задача (4) называется полулинейной задачей на собственные значения, поскольку уравнение в (4) положительно однородно и линейно в конусах  $y > 0$  и  $y < 0$ . Говорят, что  $\lambda$  является полусобственным значением задачи (4), если существует нетривиальное решение  $(\lambda, y_\lambda)$  этой задачи. При этом  $\{(\lambda, \alpha y_\lambda) : \alpha > 0\}$  называется полупрямой нетривиальных

решений задачи (4). Полусобственное значение  $\lambda$  называется простым, если все решения  $(\lambda, \vartheta)$  задачи (4), где  $\vartheta$  и  $y_\lambda$  имеют один и тот же знак в проколотой окрестности точки  $x=0$ , находятся на этой полупрямой. Может существовать другая полупрямая решений  $\{(\lambda, \alpha\vartheta_\lambda) : \alpha > 0\}$ , но тогда говорят, что  $\lambda$  является простым, если  $y_\lambda$  и  $\vartheta_\lambda$  имеют разные знаки в проколотой окрестности точки  $x=0$ , и все решения  $(\lambda, \vartheta)$  задачи (4) лежат на этих двух полупрямых [7].

Через  $E$  обозначим банахово пространство  $E = C^3[0,1] \cap B.C.$  с обычной нормой  $\|y\|_3 = \sum_{i=0}^3 \|y^{(i)}\|_\infty$ , где  $\|y\|_\infty = \max_{x \in [0,1]} |u(x)|$ .

Пусть

$$S = S_1 \cup S_2,$$

где

$$S_1 = \{y \in E : y^{(i)}(x) \neq 0, Ty(x) \neq 0, x \in [0, 1]\} \text{ и}$$

$S_2 = \{u \in E : \exists i_0 \in \{0, 1, 2\} \text{ и } x_0 \in (0, 1) \text{ такие, что } y^{(i)}(x_0) = 0 \text{ или } Ty(x_0) = 0, \text{ и если}$

$y(x_0)y''(x_0) = 0$ , то  $y'(x)Ty(x) < 0$  в окрестности точки  $x_0$ , если  $y'(x_0)Ty(x_0) = 0$ , то

$y(x)y''(x) < 0$  в окрестности точки  $x_0\}$  (см. [11]).

Если  $y \in S$ , то легко проверить, что якобиан преобразования типа Прюфера

$$\begin{cases} y(x) = \rho(x) \sin \psi(x) \cos \theta(x), & y'(x) = \rho(x) \cos \psi(x) \sin \varphi(x), \\ y''(x) = \rho(x) \cos \psi(x) \cos \varphi(x), & Ty(x) = \rho(x) \sin \psi(x) \sin \theta(x), \end{cases}$$

не равен нулю при  $x \in (0, 1)$ .

Для каждой функции  $y \in S$  определим непрерывные на  $[0, 1]$  угловые функции  $\theta(u, x)$ ,  $\varphi(u, x)$  следующим образом (см. [11]):

$$\theta(y, x) = \operatorname{arctg} \frac{Ty(x)}{y(x)}, \quad \theta(y, 0) = -\frac{\pi}{2}, \quad \varphi(u, x) = \operatorname{arctg} \frac{y'(x)}{y''(x)}, \quad \varphi(u, 0) = 0.$$

Для каждого  $k \in \mathbb{N}$  и каждого  $\nu$  через  $S_k^\nu$  обозначим множество функций  $y \in S$  удовлетворяющих следующим условиям:

(i)  $\theta(y, 1) = (2k - 1)\pi/2$ ;

(ii)  $\varphi(u, 1) = (k + 1)\pi$  либо  $\varphi(u, 1) = k\pi$ ;

(iii) если функция  $y$  фиксирована, то функция  $\theta(u, x)$  (соответственно,  $\varphi(u, x)$ ), при возрастании  $x$  от 0 до 1, строго возрастающая, принимает значения  $m\pi/2$ ,  $m \in \mathbb{Z}$  (соответственно  $s\pi$ ,  $s \in \mathbb{Z}$ ), а при убывании  $x$

от 1 до 0, строго убывая, принимает значения  $m\pi/2$ ,  $m \in \mathbb{Z}$  (соответственно  $s\pi$ ,  $s \in \mathbb{Z}$ );

(iv) функция  $\nu u(x)$  положительна в проколотой окрестности точки  $x = 0$ .

Заметим что, при каждом  $k \in \mathbb{N}$  множества  $S_k^+$ ,  $S_k^-$  и  $S_k = S_k^+ \cup S_k^-$ , являются открытыми подмножествами в  $E$ . Кроме того,  $S_k^+ \cap S_{k'}^+ = \emptyset$  для любых  $(k, \nu) \neq (k', \nu')$ , а в силу [11, лемма 3.1], если  $y \in \partial S_k^+$ , то функция  $y(x)$  имеет по крайней мере один четырехкратный нуль на отрезке  $[0, 1]$ .

На основании [11, теорема 1.2 и замечание 4.1] имеет место следующий результат.

**Теорема 1.** Пусть  $r(x) \in L_1(0, 1)$ . Тогда собственные значения линейной спектральной задачи

$$\begin{cases} \ell(y) = \lambda y + r(x)y, & x \in (0, 1), \\ y(0) = y'(0) = y(1) = y'(1) = 0, \end{cases}$$

являются вещественными, простыми и образуют неограниченно возрастающую последовательность

$$\lambda_{1r} < \lambda_{2r} < \dots < \lambda_{kr} < \dots$$

Кроме того, для каждого  $k \in \mathbb{N}$  имеет место соотношение  $y_{kr}(x) \in S_k$ , где  $y_{kr}(x)$  – собственная функция, соответствующая собственному значению  $\lambda_{kr}$ .

Следуя рассуждениям, проведенным при доказательстве теоремы 3.3 из [10] с учетом [11, теорема 1.3], теоремы 1 убеждаемся в справедливости следующего утверждения для задачи (4).

**Теорема 2.** *Существуют две последовательности неограниченно возрастающих простых полусобственных значений задачи (4):*

$$\lambda_1^+ < \lambda_2^+ < \dots < \lambda_k^+ < \dots \quad \text{и} \quad \lambda_1^- < \lambda_2^- < \dots < \lambda_k^- < \dots;$$

*Для каждого  $k \in \mathbb{N}$  полусобственные функции  $y_k^+(x)$  и  $y_k^-(x)$ , соответствующие полусобственным значениям  $\lambda_k^+$  и  $\lambda_k^-$ , лежат в  $S_k^+$  и  $S_k^-$ , соответственно. Кроме того, отличных от этих и тривиальных решений, других решений задачи (4) не существуют.*

**Глобальная бифуркация решений задачи (1)-(2).** В этом параграфе изучается глобальная бифуркация решений нелинейной задачи (1)-(2).

В дальнейшем нам понадобится следующая лемма.

**Лемма 1.** Пусть  $(\lambda, y) \in R \times E$  – решение задачи (1)-(2) такая, что  $(\lambda, y) \in \partial S_k^+$ ,  $k \in \mathbb{N}$ . Тогда  $y \equiv 0$ .

Доказательство этой леммы аналогично доказательству [11, лемма 1.1].

Обозначим через  $D$  замыканию в  $R \times E$  множества нетривиальных решений задачи (1.1), (1.2).

Если существует последовательность  $\{(\lambda_{kn}^v, y_{kn}^v)\}_{n=1}^\infty \in D$  такая, что  $y_{kn}^v \in S_k^v$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , и  $(\lambda_{kn}^v, y_{kn}^v) \rightarrow (\lambda, 0)$  при  $n \rightarrow \infty$ , то  $(\lambda, 0)$  называется точкой бифуркации задачи (1), (2) по множеству  $R \times S_k^v$ .

**Лемма 2.** Для каждого  $k \in \mathbb{N}$  и каждого  $v$  множество точек бифуркации задачи (1), (2) по множеству  $R \times S_k^v$  не пусто. Если  $(\lambda, 0)$  является точкой бифуркации задачи (1), (2) по множеству  $R \times S_k^v$ , то  $\lambda \in I_k$ , где

$$I_k = [\lambda_k - M, \lambda_k + M], \quad M = \max_{x \in [0,1]} |\alpha(x)| + \max_{x \in [0,1]} |\beta(x)|.$$

**Доказательство.** Заметим, что

$$|\alpha(x)| + |\beta(x)| \leq M, \quad x \in [0, 1]. \quad (5)$$

Пусть

$$f(x, y, s, \vartheta, w, \lambda) = \alpha(x)y^+ + \alpha(x)y^-, \quad x \in [0, 1], y \in R, s \in R, \lambda \in R,$$

где

$$y^+ = \max\{y, 0\}, \quad y^- = -\min\{y, 0\}.$$

Тогда нелинейную задачу (1), (2) можно переписать в следующей эквивалентной форме

$$\begin{cases} \ell(y) = \lambda y + f(x, y, y', y'', y''', \lambda) + g(x, y, y', y'', y''', \lambda), & x \in (0, 1), \\ y(0) = y'(0) = y(1) = y'(1) = 0. \end{cases} \quad (6)$$

Из соотношения (5) следует, что

$$|f(x, y, s, \vartheta, w, \lambda)| \leq M |y|, \quad x \in [0, 1], y \in R, s \in R, \lambda \in R.$$

Тогда, в силу [11, лемма 5.3 и следствие 5.2], точки бифуркации задачи (6) по множеству не пусто. Кроме того, на основании [11, следствие 5.3], если  $(\lambda, 0)$  является точкой бифуркации задачи (6) по множеству  $R \times S_k^v$ , то  $\lambda \in I_k$ . Лемма доказана.

Возникает естественный вопрос: сколько точек бифуркации задачи (1), (2) по множеству  $R \times S_k^v$  содержится на отрезке  $I_k \times \{0\}$ ?

Следующая лемма дает ответ на этот вопрос.

**Лемма 3.** Пусть  $(\tilde{\lambda}, 0)$  является точкой бифуркации задачи (1), (2) по множеству  $R \times S_k^v$ ,  $k \in \mathbb{N}$ . Тогда  $\tilde{\lambda} = \lambda_k^v$ .

**Доказательство.** Пусть  $(\tilde{\lambda}, 0)$  – точка бифуркации задачи (1), (2) по множеству  $R \times S_k^v$ ,  $k \in \mathbb{N}$ . Тогда существует последовательность  $\{(\lambda_{kn}^v, y_{kn}^v)\}_{n=1}^\infty$  нетривиальных решений задачи (1), (2) такая, что  $(\lambda_{kn}^v, y_{kn}^v) \in R \times S_k^v$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , и  $(\lambda_{kn}^v, y_{kn}^v) \rightarrow (\tilde{\lambda}, 0)$  в  $R \times E$  при  $n \rightarrow \infty$ .

Введем обозначение:

$$\vartheta_{nk}^v = \frac{y_{nk}^v}{\|y_{nk}^v\|_3}, n \in \mathbb{N}.$$

Заметим, что

$$\vartheta_{nk}^v \in S_k^v, \|\vartheta_{nk}^v\|_3 = 1, n \in \mathbb{N}. \quad (7)$$

Так как  $(\lambda_{kn}^v, y_{kn}^v)$  является решением задачи (1), (2), то имеем

$$\begin{cases} \ell(y_{kn}^v) = \lambda_{kn}^v y_{kn}^v + \alpha (y_{kn}^v)^+ + \beta (y_{kn}^v)^- + g(x, y_{kn}^v, (y_{kn}^v)', (y_{kn}^v)'', (y_{kn}^v)''', \lambda_{kn}^v), x \in (0, 1), \\ y(0) = y'(0) = y(1) = y'(1) = 0. \end{cases} \quad (8)$$

Разделив обе части (8) на  $\|y_{kn}^v\|_3, n \in \mathbb{N}$ , получим

$$\begin{cases} \ell(\vartheta_{kn}^v) = \lambda_{kn}^v \vartheta_{kn}^v + \alpha (\vartheta_{kn}^v)^+ + \beta (\vartheta_{kn}^v)^- + \frac{g(x, y_{kn}^v, (y_{kn}^v)', (y_{kn}^v)'', (y_{kn}^v)''', \lambda_{kn}^v)}{\|y_{kn}^v\|_3}, x \in (0, 1), \\ \vartheta_{kn}^v(0) = (\vartheta_{kn}^v)'(0) = \vartheta_{kn}^v(1) = (\vartheta_{kn}^v)'(1) = 0. \end{cases} \quad (9)$$

В силу (3) для любого  $\varepsilon > 0$  существует  $\delta_\varepsilon > 0$  такое, что для любых

$$x \in [0, 1], (y, \vartheta) \in R^2, |y| + |s| + |\vartheta| + |w| < \delta_\varepsilon, \lambda \in \Lambda \subset R,$$

имеет место соотношение

$$\frac{|g(x, y, s, \vartheta, w, \lambda)|}{|y| + |s| + |\vartheta| + |w|} < \varepsilon. \quad (10)$$

Так как  $\lambda_{kn}^v \rightarrow \lambda, \|y_{kn}^v\|_3 \rightarrow 0$  при  $n \rightarrow \infty$ , то существует  $n_\varepsilon \in \mathbb{N}$  такое, что для всех  $n \geq n_\varepsilon$  выполняются соотношения

$$|\lambda_{kn}^v - \tilde{\lambda}| < \delta_\varepsilon \text{ и } \|y_{kn}^v\|_3 < \delta_\varepsilon. \quad (11)$$

Из (11) следует, что при всех  $n \geq n_\varepsilon$  и  $x \in [0, 1]$  справедливы соотношения

$$\lambda_{kn}^v \in \tilde{\Lambda}_\varepsilon = [\tilde{\lambda} - \delta_\varepsilon, \tilde{\lambda} + \delta_\varepsilon] \subset \tilde{\Lambda} = [\tilde{\lambda} - 1, \tilde{\lambda} + 1]$$

и

$$|y_{kn}^v(x)| + |(y_{kn}^v)'(x)| + |(y_{kn}^v)''(x)| + |(y_{kn}^v)'''(x)| < \delta_\varepsilon.$$

Тогда, в силу (10), при всех  $n \geq n_\varepsilon$  и  $x \in [0, 1]$  имеем

$$\begin{aligned} & \frac{|g(x, y_{kn}^v(x), (y_{kn}^v)'(x), (y_{kn}^v)''(x), (y_{kn}^v)'''(x), \lambda_{kn}^v)|}{\|y_{kn}^v(x)\|_3} \leq \\ & \frac{|g(x, y_{kn}^v(x), (y_{kn}^v)'(x), (y_{kn}^v)''(x), (y_{kn}^v)'''(x), \lambda_{kn}^v)|}{|y_{kn}^v(x)| + |y_{kn}^v(x)| + |y_{kn}^v(x)| + |y_{kn}^v(x)|} < \varepsilon, \end{aligned}$$

т.е.

$$\frac{|g(x, y_{kn}^v(x), (y_{kn}^v)'(x), (y_{kn}^v)''(x), (y_{kn}^v)'''(x), \lambda_{kn}^v)|}{\|y_{kn}^v(x)\|_3} \rightarrow 0 \text{ при } n \rightarrow \infty, \quad (12)$$

равномерно по  $x \in [0, 1]$ .

В силу (5), (7), (11) и (12) имеем

$$\left\| \lambda_{kn}^v \vartheta_{kn}^v + \alpha (\vartheta_{kn}^v)^+ + \beta (\vartheta_{kn}^v)^- + \frac{g(x, y_{kn}^v, (y_{kn}^v)', (y_{kn}^v)'', (y_{kn}^v)''', \lambda_{kn}^v)}{\|y_{kn}^v\|_3} \right\|_{\infty} \leq |\tilde{\lambda}| + M + 2,$$

Тогда из (9) получаем, что

$$|(\vartheta_{kn}^v)^{(4)}(x)| \leq \|q\|_{\infty} + \|q'\|_{\infty} + |\tilde{\lambda}| + M + 2, \quad x \in [0, 1].$$

Следовательно, в силу теоремы Арцела-Асколи, из последовательности  $\{(\lambda_{kn}^v, \vartheta_{kn}^v)\}_{n=1}^{\infty}$  можно извлечь подпоследовательность  $\{(\lambda_{kn_m}^v, \vartheta_{kn_m}^v)\}_{m=1}^{\infty}$ , которая сходится к  $(\tilde{\lambda}, \tilde{\vartheta})$  в  $R \times E$  при  $n \rightarrow \infty$ . В силу (12), из (9) следует, что  $\{(\lambda_{kn_m}^v, \vartheta_{kn_m}^v)\}_{m=1}^{\infty}$  сходится к  $(\tilde{\lambda}, \tilde{\vartheta})$  также и в  $R \times C^4[0, 1]$  при  $n \rightarrow \infty$ . Тогда переходя к пределу при  $m \rightarrow \infty$  в соотношениях

$$\begin{cases} \ell(\vartheta_{kn_m}^v) = \lambda_{kn_m}^v \vartheta_{kn_m}^v + \alpha (\vartheta_{kn_m}^v)^+ + \beta (\vartheta_{kn_m}^v)^- + \frac{g(x, y_{kn_m}^v, (y_{kn_m}^v)', (y_{kn_m}^v)'', (y_{kn_m}^v)''', \lambda_{kn_m}^v)}{\|y_{kn_m}^v\|_3}, \quad x \in (0, 1), \\ \vartheta_{kn_m}^v(0) = (\vartheta_{kn_m}^v)'(0) = \vartheta_{kn_m}^v(1) = (\vartheta_{kn_m}^v)'(1) = 0, \end{cases}$$

получаем, что

$$\begin{cases} \ell(\tilde{\vartheta}) = \tilde{\lambda} \tilde{\vartheta} + \alpha (\tilde{\vartheta})^+ + \beta (\tilde{\vartheta})^-, \quad x \in (0, 1), \\ \tilde{\vartheta}(0) = (\tilde{\vartheta})'(0) = \tilde{\vartheta}(1) = (\tilde{\vartheta})'(1) = 0. \end{cases}$$

Так как  $\vartheta_{kn_m}^v \in S_k^v$  и  $\|\vartheta_{kn_m}^v\|_3 = 1$  при всех  $m \in \mathbb{N}$ , то  $\tilde{\vartheta} \in \overline{S_k^v} = S_k^v \cup \partial S_k^v$  и  $\|\tilde{\vartheta}\|_3 = 1$ . Следовательно, на основании леммы 1, имеет место соотношение  $\tilde{\vartheta} \in S_k^v$ . Тогда, в силу теоремы 2, получаем, что  $\tilde{\lambda} = \lambda_k^v$ . Лемма доказана.

**Замечание 1.** Лемма 3 показывает, что для каждого  $k \in \mathbb{N}$  отрезок  $I_k \times \{0\}$  содержит только две точки бифуркации  $(\lambda_k^+, 0)$  и  $(\lambda_k^-, 0)$  задачи (1), (2) по множествам  $R \times S_k^+$  и  $R \times S_k^-$  соответственно.

Для каждого  $k \in \mathbb{N}$  и каждого  $v$  обозначим через  $D_k^v$  компоненту связности множества  $D$  ответвляющуюся из точки бифуркации  $(\lambda_k^v, 0)$  по множеству  $R \times S_k^v$ .

В силу леммы 3 и замечания 1 из [11, теорема 3.1] следует следующий глобальный результат для задачи (1), (2).

**Теорема 3.1.** Для каждого  $k \in \mathbb{N}$  и каждого  $v$  множество  $D_k^v$  содержится в  $R \times S_k^v$  и неограничено в  $R \times E$ .

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Артобелевский И.И., Боголюбов А.Н., Болотин В.В. и др., Вибрации в технике: Справочник в 6 томах. Колебания механических систем. I, М., Машиностроение, 1978



2. Dickey R.W. Bifurcation problems in nonlinear elasticity, London, Pitman 1976.
3. Cantrell R.S., Cosner C. Spatial ecology via reaction-diffusion equations, Chichester, Wiley, 2003.
4. Келлер Дж.Б., Антман С. Теория ветвления и нелинейные задачи на собственные значения, М., Мир, 1974.
5. Красносельский М.А. Топологические методы в теории нелинейных интегральных уравнений, М., Гостехизд, 1956.
6. Rabinowitz, Some global results for nonlinear eigenvalue problems, J. Funct. Anal., 1971, v 7, no. 3, p. 487-513.
7. Berestycki H. On some nonlinear Sturm-Liouville problems, J. Differential Equations, 1977, v. 26, no. 3, p. 375-390.
8. Rynne B.P. Bifurcation from zero or infinity in Sturm-Liouville problems which are not linearizable, J. Math. Anal. Appl., 1998, no. 1, p. 141-156.
9. Rynne B.P., Youngson M.A. Bifurcation of positive solutions from zero or infinity in elliptic problems which are not linearizable, Nonlinear Anal. 2001, v. 44, no. 1, p. 21-31.
10. Rynne B.P. Half-eigenvalues of self-adjoint, 2mth order differential operators and semi-linear problems with jumping nonlinearities, Differential Integral Equations, 2001, v. 14, no. 9, p1129-1152.
11. Алиев З.С. О глобальной бифуркации решений некоторых нелинейных задач на собственные значения для обыкновенных дифференциальных уравнений четвертого порядка, Матем. сб., 2016, т. 207, № 12, с. 3–29.
12. Aliyev Z.S., Hasanova Sh.M. Global bifurcation of positive solutions of semi-linear elliptic partial differential equations with indefinite weight, Z. Anal. Anwend., 2019, v. 38, no. 1, p. 1-15.
13. Aliyev Z.S., Hasanova Sh.M. Global bifurcation of positive solutions from zero in nonlinearizable elliptic problems with indefinite weight, J. Math. Anal. Appl., 2020, v. 491, no. 1, p. 1-14.

## **BİR YARIXƏTTİLƏŞƏN MƏXSUSİ QIYMƏT MƏSƏLƏSİNİN GLOBAL BİFURKASIYASI**

**Z.S.ƏLİYEV, M.M.MƏMMƏDOVA**

### **XÜLASƏ**

Məqalədə dördüncü tərtib adi diferensial tənliklər üçün yarıxəttiləşən məxsusi qiymət məsələsinə baxılır. Uyğun yarıxətti məxsusi qiymət məsələsinin iki sonsuz artan sadə yarıməxsusi ədədlər ardıcılığının varlığı və onlara uyğun yarıməxsusi funksiyaların Şturmun adi osillasiya xassələrinə malik olması göstərilmişdir. Yarıxəttiləşən məsələnin bifurkasiya nöqtələrinin strukturu öyrənilmiş, həllərinin uyğun yarıxətti məxsusi qiymət məsələsinin yarıməxsusi funksiyalarının osillasiya xassələrinə malik və trivial həllər əyrisinin bifurkasiya nöqtələrindən budaqlanan qeyri-məhdud kontinuumlarının varlığı isbat edilmişdir.

**Açar sözlər:** yarıxətti məxsusi qiymət məsələsi, yarıməxsusi ədəd, yarıməxsusi funksiya, bifurkasiya nöqtəsi, qlobal kontinuum.

# ON THE GLOBAL BIFURCATION OF ONE HALF-LINEARIZABLE EIGENVALUE PROBLEM

Z.S.ALIYEV, M.M.MAMEDOVA

## SUMMARY

The paper considers a half-linearizable eigenvalue problem for ordinary differential equations of the fourth order. The existence of two sequences of unboundedly increasing simple half-eigenvalues of the corresponding half-linear eigenvalue problem with the half-eigenfunctions possessing the usual nodal Sturm properties is shown. The structure of bifurcation points from zero of the half-linearizable eigenvalue problem is studied, and the existence of global continua of nontrivial solutions emanating from bifurcation points of the line of trivial solutions and possessing oscillatory properties of half-eigenfunctions of the half-linear eigenvalue problem is proved.

**Key words:** half-linear eigenvalue problem, half-eigenvalue, half-eigenfunction, bifurcation point, global continuum.

**İNFORMATİKA****UDK 622.276.1/4.001.57****QAZ-KONDENSAT QUYULARININ QUYUDİBİ ZONASININ MAYE  
KARBOHİDROGEN VƏ QAZLA BİRGƏ İŞLƏNİLMƏSİNİN  
SƏMƏRƏLİLİYİNİN QİYMƏTLƏNDİRİLMƏSİ****M.S.XƏLİLOV***Bakı Dövlət Universiteti**khalilov\_mubariz@mail.ru*

*Quyüətrafi zonada retroqrad kondensatın toplanması quyuların məhsuldarlığının aşağı düşməsinin əsas səbəbidir. Ona görə quyuların məhsuldarlığını artırmaq üçün onların quyudibi zonasından çökmüş retroqrad kondensatın uzaqlaşdırılması və buxarlandırılması üsullarının tədqiqi mühüm əhəmiyyət kəsb edir.*

**Açar sözlər:** neft, lay,qaz-kondensat, quyudibi zona, təzyiq

Quyüətrafi zonada retroqrad kondensatın toplanması qaza görə faza keçiriciliyini azaldır və nəticədə qaz-kondensat quyularının həm qaza, həm də kondensata görə məhsuldarlığı azalır. Ona görə də təbiidir ki, quyuların məhsuldarlığını artırmaq üçün quyudibi zonadan retroqrad kondensatın uzaqlaşdırılması və buxarlandırılması üsullarından istifadə edilir. Retroqrad kondensata müxtəlif qazlarla təsir fiziki lay modellərində araşdırılmışdır [1,2 və s.].

Bu təcrübələr fazalararası kütlə mübadiləsinin əsas xüsusiyyətlərinin və qaz fazasında maye komponentlərin buxarlanması səmərəliliyinin tədqiqi üzrə aparılmışdır. Həmin işlərin nəticələri qaz-kondensat quyularının quyudibi zonasının işlənməsi və quyudibi zonadan retroqrad kondensatın buxarlandırılaraq qaz fazasına keçməsi hesabına uzaqlaşdırılması imkanlarının təsdiq olunması nöqteyi-nəzərindən maraqlıdır. Lakin aparılan təcrübələr retroqrad qaz-kondensatın və vurulan qazın quyudibi zonası şəraitində qarşılıqlı təsirlərini tam şəkildə aydınlaşdırmağa imkan vermir. Bunun əsas səbəbi quyudibi zonada qaz-kondensat qarışığının parametrlərinin, o cümlədən komponent tərkibinin və retroqrad mayenin, vurulan qazın və həmçinin termobarik şəraitin həcm üzrə kəskin dəyişməsidir.

Retroqrad kondensatın quyuaətrafi zonadan uzaqlaşdırılması üçün tərkibində 90-95% metan və ya tərkibində müxtəlif nisbətlərdə azot və karbon qazı olan quru qazdan istifadə edilməsi [1,2,7] işlərində tədqiq edilmişdir. Qeyd olunmuşdur ki, qaz-kondensat quyuların quyudibi zonasının karbohidrogen qazlarla işlənməsinin səmərəliliyinin qiymətləndirilməsinə təsir göstərən əsas amillərdən biri-lay təzyiqidir.

Əksər qaz-kondensat yataqlarının lay qarışığı üçün, lay təzyiqinin aşağı düşməsi halında (diferensial kondensasiya), onun qiyməti maksimal kondensasiya təzyiqindən yuxarı olduqda qazdan əlavə ayrılan karbohidrogenlərin miqdarının mayeyə çevrilməsi, kondensatla doymanın qiymətinin artması və kondensat qaz amilinin azalması özünü göstərir. Təzyiqin qiyməti maksimal kondensasiya qiymətindən aşağı olduqda isə mayedən karbohidrogenlərin buxarlanma yolu ilə qaz fazasına keçməsi prosesi baş verir. Bu isə kondensatla doymanın qiymətinin azalmasında və kondensat qaz amilinin artmasında özünü göstərir. Təbii ki, qaz-kondensat qarışığının diferensial kondensasiya prosesinin qeyd olunan nəticələri quyuların quyudibi zonasında gedən prosesləri tam xarakterizə edə bilmir.

Quyudibi zonada qaz-kondensat sisteminin tərkibi lay qarışığının cari tərkibi ilə müqayisədə çox kəskin dəyişir. Ona görə də quyuların quyuaətrafi zonasında qaz və maye fazaları arasındakı kütlə mübadiləsi prosesi ümumən layda baş verən proseslərdən kəskin şəkildə fərqlənir. Odur ki, lay təzyiqi maksimal kondensasiya təzyiqindən yuxarı olduqda layın quyudan uzaq hissələrindən (bir qədər yüksək təzyiq) quyudibi zonaya (bir qədər aşağı təzyiq) zənginləşmiş qaz fazası daxil olur. Lay təzyiqi maksimal kondensasiya təzyiqindən aşağı olduqda quyulara kifayət qədər qaz-kondensat qarışığı süzülür. Lay təzyiqinin maksimal kondensasiya təzyiqindən aşağı qiymətlərində maksimal kondensasiya təzyiqinin yuxarı qiymətləri ilə müqayisədə quyuların karbohidrogen qazlarla işlənməsinin səmərəli proses olması [4] işində əsaslandırılmışdır. Qaz-kondensat quyuların quyudibi zonasının lay təzyiqinin maksimal kondensasiya təzyiqindən aşağı qiymətlərində müxtəlif tərkibli qazlarla o, cümlədən quru qaz, quru qazın tərkibində müəyyən miqdar karbon qazı, həmçinin azot qazı, propan-butan fraksiyalı tərkibə quru qazla təsir edilməklə işlənmənin səmərəliliyinin müqayisəli olaraq qiymətləndirilməsi çox vacib və mühüm əhəmiyyət kəsb edən məsələlərdəndir.

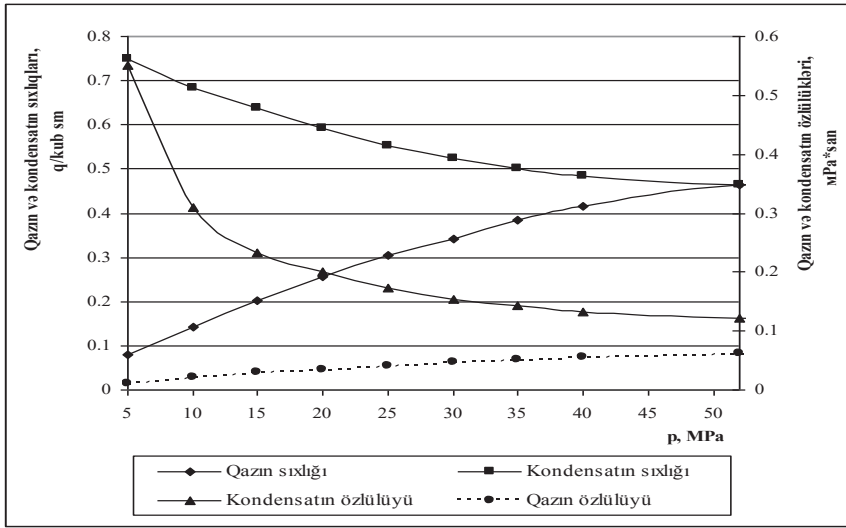
Tükənməkdə olan qaz-kondensat laylarının quyularının quyudibi zonasının müxtəlif tərkibli qazlarla - quru qaz, quru qazın tərkibinə müəyyən miqdar karbon qazı, həmçinin azot qazı, propan-butan fraksiyalı tərkibə quru qazla təsir edilməklə işlənmənin səmərəliliyinin müqayisəli olaraq qiymətləndirilməsi süzülmənin ikifazalı çoxkomponentli hidroqazdinamik modeli nəzəri baza seçilməklə tədqiq edilmişdir.

Hesablamalar Bulla-dəniz qaz-kondensat yatağının V blok VII horizontunun quyuları timsalında aparılmışdır [5]. İstismar müddəti ərzində horizontun işləyən quyularının debiti başlanğıcla müqayisədə qaza görə təxminən 80% və

kondensata görə isə 95%-dan çox aşağı düşmüşdür. Məsələn, 46 sayılı quyunun kondensata görə debiti 12 t, qaza görə isə 210 min  $m^3$  -ə qədər azalmışdır. Təxminən eyni göstəricilər digər quyularda da müşahidə olunmuşdur. Quyuların istismarı müddəti ərzində quyudibi təzyiqi 12.9  $MPa$  -a qədər düşmüşdür.

Horizontun lay qarışığı üçün diferensial kondensasiya prosesi modelləşdirilmiş və bunun əsasında karbohidrogen sistemin təzyiqdən asılı olaraq kondensat xarakteristikaları təyin edilmişdir. Qaz-kondensat qarışığının maksimal kondensasiya təzyiqinin 22-23  $MPa$  və maye karbohidrogen fazanın 0.31 qiymətindən sonra onun hərəkətdə olması müəyyənləşdirilmişdir.

Fazaların fiziki xassələri və hər bir fazada komponentlərin miqdarı cari təzyiq və temperaturda qarışığın komponent tərkibinə görə hal tənliyi [1] vasitəsilə təyin edilmişdir (şəkil 1).

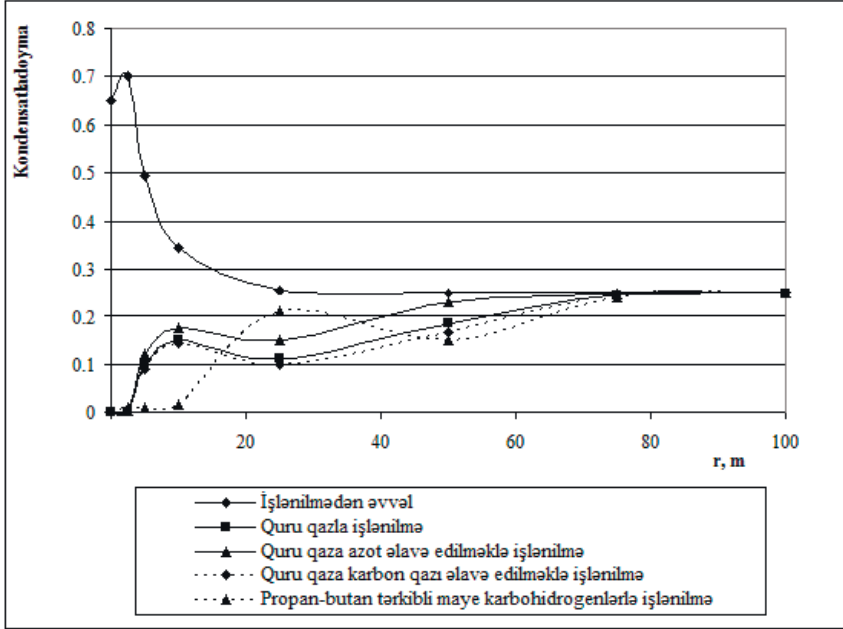


Şəkil 1. Qazın, kondensatın sıxlıq və özlülüklərinin təzyiqdən asılılıqları

Qaza və kondensata görə nəzəri faza keçiricilikləri yatağın işlənməsinin tarixi verilənlərinə görə ikifazlı çoxkomponentli hidroqazdinamik modelinin yatağa sazlanması (adaptasiyası) nəticəsində tapılmışdır.

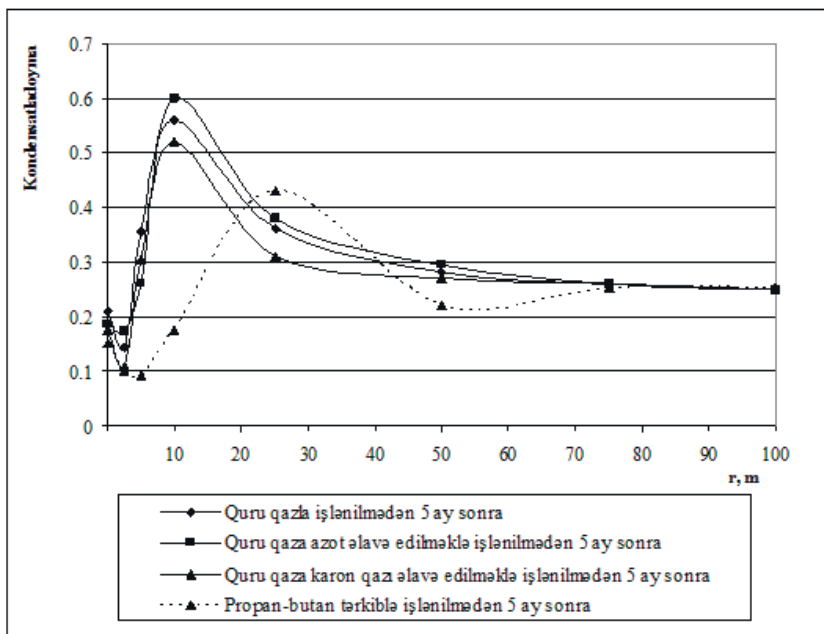
Horizontun işlənməsi prosesində onun işləyən quyularının quyuyətrafi zonasında maye kondensatın paylanma dinamikası göstərir ki, həmin zonada maye ilə yüksək doymulu zona formalaşır və onun radiusu təqribən 15-20 m təşkil edir (şəkil 2). Retroqrad kondensatın quyuyətrafi zonadan uzaqlaşdırılması və buxarlandırılması üçün quru qaz, onun tərkibində müəyyən miqdar azot, karbon qazı, propan-butan fraksiyalı tərkiblərlə işlənməsi prosesi yerinə yetirilmişdir. Bu zaman 46 sayılı quyuyətrafi üçün 450 min  $m^3$  uyğun olaraq quru qaz, həcm saxlanılmaqla quru qazın tərkibində 22% azot və 30% karbon qazı və həmçinin 200min  $m^3$  propan-butan fraksiyalı ( $C_3H_8$ -40%,  $C_4H_{10}$  -60%) tərkibə

250 min  $m^3$  quru qaz əlavə olunmaqla işlənilmə aparılmışdır. Quyudibi zonaya işçi aqentlərin vurulması 13-14 MPa təzyiqli intervalında aparılmışdır.



Şəkil 2. Quyudibi zonanın müxtəlif qazlarla və propan-butan fraksiyalı maye karbohidrogenlərlə işlənilməsindən sonra kollektorun kondensatladoymasının dəyişməsi

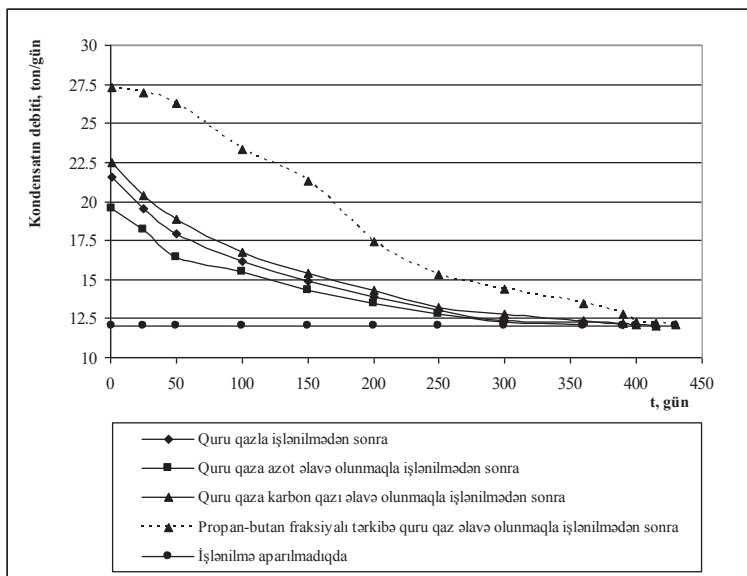
Quyunun işçi aqentlərlə işlənilməsindən əvvəl və sonra kollektorun maye ilə doyması şəkil 2-də göstərilmişdir. Quru qazın tərkibinə 22% azot əlavə edilməklə işlənilmə quru qazla işlənilmə ilə müqayisədə maye kondensatın buxarlanması və onun quyuyətrafi zonadan uzaqlaşdırılması baxımından az səmərəlidir. Quru qazın tərkibinə 30% karbon qazı əlavə edilməklə işlənilmə digər iki halla müqayisədə daha səmərəlidir. Belə ki, quru qaz və quru qaza azot əlavə edilməklə işlənilmədə kondensatladoymanın qiymətinin təxminən 30-40 m, quru qaza karbon qazı əlavə edilməklə işlənilmədə isə 40-45 m-ə qədər intervalda azalması müşahidə edilir. Quyunun propan və butan fraksiyalı tərkiblə işlənilməsindən sonra 10 m radiuslu quyuyətrafi zonada kondensatladoymanın qiyməti sıfıra yaxınlaşır. 10-40 m-ə qədər zonada kondensatladoymanın qiyməti lay üzrə orta qiymətinə qədər artır. Quyunun işlənilməsi şəraitində quyudibi zonada əmələ gələn maye karbohidrogenlər araqatı qaz-kondensatda həll olmaqla onu sıxışdırır. Propan və butan fraksiyalı maye karbohidrogenlər ardınca vurulan quru qaz öz növbəsində mayenin çoxkontaktlı qarşılıqlı həllolma halında karbohidrogen komponentlərin mayedən qaza intensiv buxarlanması şəraitində sıxışdırır. Quyuyətrafi zonanın müəyyən sərhədində kondensatladoymanın orta qiymətindən aşağı maye karbohidrogenlərin yığılma zonası formalaşır. Bu zonada lay sistemi ilə tarazlıqda olmayan maye olur.



Şəkil 3. Quyunun istismara buraxılmasından 5 ay sonra kollektorun kondensatlaşdırmasının dəyişməsi

Quru qaz, quru qazın tərkibində azot və karbon qazı ilə işlənmədən sonra quyuyu istismara buraxdıqda quyuyətrafı zonada maye fazanın təkrar tədricən yığılması baş verir və maye faza quyuya tərəf yerini dəyişməyə başlayır. Bir müddətdən sonra maye fazanın hərəkəti quyuya çatmadan dayanır və zaman etibarlı ilə quyudibi zonada karbohidrogenlərin retroqrad kondensasiyası hesabına maye fazanın miqdarı artır. Propan-butan fraksiyalı tərkibə işlənmədən sonra qaz hasilatı zamanı quyudibi zonada retroqrad kondensatın toplanması prosesi digər işçi agentlərə işlənmə variantları ilə müqayisədə zəif sürətlə baş verir (şəkil 3).

Quyunun məhsuldarlığının artımı vurulan həcm agentin tərkibindən çox asılıdır.  $450 \text{ min } m^3$  quru qaz, həcm saxlanılmaqla quru qazın tərkibində müəyyən miqdar azot və karbon qazı və həmçinin propan-butan fraksiyalı tərkibə quru qaz əlavə olunmaqla işlənmədən sonra quyunun kondensata görə məhsuldarlığının dəyişmə dinamikası şəkil 4-də verilmişdir. Ən az məhsuldarlıq quyunun quru qaza müəyyən nisbət azot əlavə olunmaqla işlənməsi zamanı alınır. Quyunun kondensata görə məhsuldarlığı istismarın ilk anlarında 1.66 dəfə artır. Kondensata görə ən yüksək məhsuldarlıq propan-butan fraksiyalı tərkibə quru qaz əlavə etməklə quyunun işlənməsində alınır və quyunun kondensata görə məhsuldarlığı istismarın ilk anlarında 2.7 dəfə artır. Quyunun quru qaza müəyyən miqdar karbon qazı əlavə etməklə işlənməsinin nəticəsi maye karbohidrogenlərlə işlənmə variantı müstəsna olmaqla digər baxılan variantlarla işlənmə ilə müqayisədə daha sərfəlidir.



**Şəkl.4.** Quyunun işçi agentlərlə işlənməsindən sonra onun kondensata görə debitinə dəyişmə dinamikasının nəticələrinin müqayisəsi

### Nəticə:

Hesablama modelinin nəticələrinə görə həcm saxlanılmaqla quru qaz, quru qazın tərkibində müəyyən miqdar azot və karbon qazı və həmçinin propan-butan fraksiyalı tərkiblə quru qazla təsir edilməklə qaz-kondensat quyusunun işlənmə səmərəliliyinin artım sırası -quru qaz+ azot, quru qaz, quru qaz + karbon qazı, propan-butan fraksiyalı maye qarışığı + quru qaz - ardıcılığı müəyyən edilmişdir. Qaz-kondensat quyularının məhsuldarlığının artırılması üçün propan-butan fraksiyalı maye qarışığına quru qazla təsir edilməklə işlənmənin aparılması daha səmərəlidir və praktiki tətbiq üçün istifadə edilə bilər.

### ƏDƏBİYYAT

1. Гриценко А.И., Гриценко И. А., Юшкин В.В., Островская Т.Д. Научные основы прогноза фазового поведения пластовых газоконденсатных систем. М.: Недра, 1995, 432 с.
2. Гриценко А.И., Тер-Саркисов Р.М., Шандрыгин А.Н., Подюк В.Г. Методы повышения продуктивности газоконденсатных скважин. М.: Недра, 1997, 364 с.
3. Фейзуллаев Х.А. Численное моделирование обработки призабойной зоны газоконденсатной скважины “сухим” газом с учетом многокомпонентной фильтрации системы // Изв. НАН Азерб., серия Наук о Земле, 2006, №2, с.48-54
4. Фейзуллаев Х.А. Численное моделирование обработки призабойных зон газоконденсатных скважин газами различного состава // Изв. НАН Азерб., серия Наук о Земле, 2007, №4, с.44-47
5. Фильтрации газированной жидкости и других многокомпонентных смесей в нефтяных пластах / М.Д.Розенберг, С.А.Кундин, А.К.Курбанов и др.. М.: Недра, 1960, 436 с.
6. Xəlilov M.S. Neft araqlatılı qaz-kondensat layının işlənməsi üsullarının effektivliyinin qiymətləndirilməsi. Bakı Dövlət Universitetinin Xəbərləri. Fizika-riyaziyyat elmləri seriyası. 2019, №2, s. 104.



6. Фейзуллаев Х.А., Халилов М.С. Идентификация параметров деформируемого пласта и параметров, характеризующих течение газа в стволе, по устевым данным скважин. Автоматизация, телемеханизация и связь в нефтяной промышленности. Москва, ОАО, ВНИИОЭНГ, Москва, 2018, №2, с.37-41
7. Халилов М.С. Определение функции относительной фазовой проницаемости, входящих в гидродинамическую модель фильтрации трехфазной фильтрации флюидов. VIII Международной научно-практической конференции «Математическое моделирование процессов и систем», Конференция проводится при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект №18-31-10029 4-7 октября 2018г., Башкирский Государственный Университет- Институт Стратегических Исследований. г. Уфа (Россия), с.134-149.

## **ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ РАЗРАБОТКИ ГАЗОКОНДЕНСАТНЫХ СКВАЖИН ПРИЗАБОЙНОЙ ЗОНЕ СОЧЕТАНИЕМ С ЖИДКИМ УГЛЕВОДОРОМ И ГАЗОМ**

**М.С.ХАЛИЛОВ**

### **РЕЗЮМЕ**

Накопление ретроградного конденсата в районе скважины является основной причиной снижения продуктивности скважины. Поэтому для увеличения продуктивности скважин важно изучить способы удаления и испарения ретроградного конденсата из призабойной зоны.

**Ключевые слова:** нефть, пласт, газовый конденсат, призабойная зона скважины, давление.

## **ESTIMATION OF THE EFFICIENCY OF DEVELOPMENT OF GAS-CONDENSATE WELLS IN THE BOTTOM AREA COMBINED WITH LIQUID HYDROCARBON AND GAS**

**M.S.KHALILOV**

### **SUMMARY**

The accumulation of retrograde condensate in the area of the well is the main reason for the decline in well productivity. Therefore, in order to increase the productivity of wells, it is important to study methods for removing and evaporating retrograde condensate from the bottomhole zone.

**Key words:** oil, reservoir, gas-condensate, bottomhole zone of the well, pressure.

**FİZİKA****MÜXTƏLİF FRAKSIYALI POLİETİLENQLİKOLLARIN SUDA MƏHLULLARININ VİSKOZİMETRİYA, DENSİTOMETRİYA VƏ İQ-SPEKTROSKOPIYA METODLARI İLƏ TƏDQIQI****E.Ə.MƏSİMOV, B.G.PAŞAYEV***Bakı Dövlət Universiteti**p.g.bakhtiyar@gmail.com*

*İşdə müxtəlif fraksiyalı (1000, 1500, 3000, 4000 və 6000 q/mol) PEQ-lərin suda məhlullarının 293.15 - 323.15 K temperatur və 0 - 0,001 molyar hissə konsentrasiya intervalında dinamik özlülüyü və sıxlığı ölçülmüşdür, İQ oblastda udma spekrləri çəkilmişdir və su molekullarının OH valent rəqslərinin tezliyi müəyyən edilmişdir. Təcrübi nəticələrdən istifadə edərək tədqiq olunan məhlulların baxılan temperaturalarda və konsentrasiyalarda özlü axınının aktivləşmə parametrləri, məhlulda PEQ-nin parsial molyar həcmələri, PEQ makromolekulunun hidratlaşma ədədi, su molekulları arasındakı hidrogen rabitəsinin enerjisi və uzunluğu hesablanmışdır. Müəyyən olunmuşdur ki, PEQ, həm molekul kütləsinin, həm də konsentrasiyasının artması ilə suya strukturlaşdırıcı təsir göstərir.*

PACS: 61.20.Ne, 66.20.+d, 82.60.Lf, 61.25.Hq.

**Açar sözlər:** sulu məhlul, PEQ, özlü axının aktivləşmə parametrləri, parsial molyar həcm, hidratlaşma ədədi, hidrogen rabitəsinin enerjisi.

Polietilenqlikol (PEQ) bir çox sənaye sahələrində (yeyinti sənayesində, farmakologiyada, kosmetologiyada, biotexnologiyada və s.) geniş istifadə olunan sintetik, xətti polimerdir [1, 2]. PEQ-nin orta molekul kütləsinin 200 (atom kütlə vahidlərində) ilə on minlər arasında dəyişən müxtəlif fraksiyaları mövcuddur. Otaq temperaturunda, molekul kütləsi 600-dən kiçik olan PEQ-lər rəngsiz özlü maye halında olur, molekul kütləsi 800-dən böyük olan PEQ-lər isə ağ rəngli mum halında olur. PEQ-nin bütün molekul kütləli fraksiyaları suda yaxşı həll olur [1]. Maye halında olan PEQ-lər suda bütün nisbətdə həll olur, bərk halda olan, məsələn, molekul kütləsi 2000 olan PEQ 20<sup>0</sup>C temperaturda suda təxminən 60% həll olur. Kiçik molekul kütləli PEQ-lər uçucu deyil və həm özləri, həm də sulu məhlulları yaxşı həlledici kimi istifadə edilə bilər. PEQ-nin müxtəlif fraksiyaları zülalların çökdürülməsində, nuklein turşularının və polinukleotidlərin konformasiya dəyişmələrində, ikifazlı su-polimer sistemlərinin yaranmasında və s. istifadə olunurlar [3, 4, 5]. PEQ bağlayıcı,

qatılaşıdırıcı, stabilləşdirici kimi xüsusiyyətlərə malikdir. Odur ki, məmulatın matrisi kimi, hidrofob molekullarla kovalent əlaqə yaratmaqla qeyri - ion səthi aktiv maddələrin alınmasında, bəzi yeyinti məhsullarının hazırlanmasında, asılqan hissəciklərinin koagulyasiyası üçün, inyeksiya zamanı hidrodinamik müqavimətin azaldılması məqsədilə, aqroximikatlarda suda həll oluna bilən örtüklə örtülməsi üçün, boya və latekslərdə bağlayıcı və qatılaşıdırıcı kimi də sənayenin bir çox sahələrində istifadə olunurlar [1, 6].

PEQ-nin sulu məhlullarının struktur və termodinamik xarakteristikaları uzun illərdə intensiv tədqiq olunur [6-15]. Bu PEQ-nin geniş praktiki tətbiq sahələrinin olması ilə əlaqədardır. Həmçinin PEQ-nin sulu məhlullarının fiziki-kimyəvi xassələrinin öyrənilməsi suda həllolan polimerlərin fundamental nəzəriyyələrinin verilməsi üçün çox böyük əhəmiyyətə malikdir. PEQ-yə olan maraq eyni zamanda onun biologiya, molekulyar biologiya və biokimyada geniş istifadə olunması ilə bağlıdır. Bir sıra hallarda PEQ canlı orqanizmlərdə gedən proseslərə təsir göstərir və bu təsirin molekulyar mexanizminin öyrənilməsi PEQ-nin fiziki-kimyəvi xassələrinin daha da geniş öyrənilməsinə təkan verir. Son illərdə aparılmış elmi-tədqiqat işlərində müxtəlif molekul kütləli PEQ-lərin kimya, biotexnologiya, tibb sənayesində və s. tətbiqləri haqqında geniş məlumatlar verilmişdir [1, 14, 15]. Qeyd edək ki, PEQ-nin əksər funksional fəaliyyəti su mühiti ilə bağlıdır. Odur ki, PEQ-nin sulu məhlullarında yaranan struktur xüsusiyyətlərinin müxtəlif metodlarla müqayisəli öyrənilməsi olduqca zəruridir. PEQ-nin geniş tətbiq sahəsinin olmasına baxmayaraq onun müxtəlif molekul kütləli fraksiyalarının sulu məhlullarının özlü axını, həcmi və spektroskopik xassələri az araşdırılmışdır.

PEQ-nin suyun strukturuna təsirini araşdırmaq üçün müxtəlif fraksiyalı PEQ-lərin sulu məhlulları viskozimetriya, densitometriya və İQ-spektroskopiya metodları ilə tədqiq olunmuşdur. İşdə PEQ-nin orta molekul kütlələri 1000, 1500, 3000, 4000 və 6000 olan fraksiyaları götürülmüşdür. Tədqiq olunan sulu məhlulların 293.15-323.15 K temperatur və 0-0.001 molyar hissə konsentrasiyası intervalında dinamik özlülüyü və sıxlığı ölçülmüşdür, həmçinin molekul kütlələri 1000, 4000 və 6000 olan PEQ-lərin sulu məhlullarının müxtəlif konsentrasiyalarda İQ-spektrləri çəkilməmişdir. Təcrübi nəticələrdən istifadə edərək tədqiq olunan sistemlərin özlü axınının aktivləşmə Gibbs enerjisinin ( $\Delta G_n^\ddagger$ ), özlü axınının aktivləşmə entalpiyasının ( $\Delta H_n^\ddagger$ ), özlü axınının aktivləşmə entropiyasının ( $\Delta S_n^\ddagger$ ), məhlulda PEQ-nin parsial molyar həcmi ( $\tilde{V}$ ), məhlulda su molekulları arasındakı hidrogen rabitəsinin enerjisinin ( $E_H$ ) və uzunluğunun ( $R_H$ ) PEQ-nin konsentrasiyasından asılılıqları təhlil olunmuşdur. Həmçinin baxılan PEQ-lərin müxtəlif temperaturlarda məhlulda hidratlaşma ədədləri ( $N_h$ ) təyin edilmişdir.

## NƏZƏRİ HISSƏ

Müxtəlif alimlər tərəfindən verilmiş və yanaşma tərzinə görə bir-birindən fərqlənən, mayələrin bir neçə özlü axın nəzəriyyələri mövcuddur. Bu nəzəriyyələrdən özlü axını daha aydın və əsaslandırılmış şəkildə təsvir edən və elmi ədəbiyyatda daha çox istinad olunanı Frenkel və Eyriinq nəzəriyyələridir. Frenkelə görə, aktivləşmə enerjisi hissəciklərin yerdəyişməsi üçün lazım olan enerji olmayıb, bu hissəciklərin düşükləri dəşikləri - mikroblastları yaratmaq üçün sərf olunan xarici enerjidir. Molekulların yerdəyişməsi üçün kənardan enerji sərf olunmur, bu yerdəyişmələr daxili enerji hesabına (molekulların toqquşması və s.) baş verir. Mayenin sərbəst həcmi kiçik olduqda dəyişin yaranması üçün daha çox enerji tələb olunur [16, 17]. Eyriinqə görə, özlü mayələrdə axının baş verməsi üçün molekulların bir-birinə nəzərən nisbi hərəkəti zamanı onlar qonşu vəziyyətlər arasında mövcud olan enerji baryerini keçməlidirlər. Deməli, Eyriinqə görə, molekulların öz tarazlıq vəziyyətindən qonşu vəziyyətə sıçrayışla keçməsinə onun potensial enerji baryerini aşması prosesi kimi baxmaq olar [16].

Bu proseslərə əlaqədar Eyriinq yanaşmasına daha yaxın olan *bizim yanaşmamız* aşağıdakı kimidir: Hər hansı bir halda olan molekul əhatə olunduğu molekullarla qarşılıqlı təsirdə olur və tutaq ki, onun bu bağlı halda enerjisi (qarşılıqlı təsir enerjisi ilə kiçik rəqslərinin enerjilərinin cəmi)  $U_1$ -dir. Molekulun keçdiyi yeni halda isə enerjisi  $U_2$ -dir. Onda molekulun bir haldan digər hala keçməsi üçün  $U_2 - U_1 = \Delta U$  qədər enerji tələb olunur. Qeyd edək ki, mayeyə xarici qüvvə təsir etmədikdə molekul bu izafi (əlavə) enerjini digər molekullarla toqquşması zamanı əldə edir. Molekul bir haldan digər hala keçməsi üçün o iki mərhələni keçməlidir. Birinci mərhələdə molekulun əldə etdiyi əlavə enerjinin bir hissəsi molekulun ətrafdakı bağlı olduğu molekullardan ayrılaraq (qoparaq) azad olmasına sərf olunur ( $\Delta H_1$ ). Əgər molekulun aldığı enerji bu enerjидən böyük olarsa ( $\Delta H$ ), onun yerdə qalan hissəsi (sərbəst hissəsi) molekulun hərəkətinə (kinetik enerjiyə çevrilərək) sərf olunur  $\Delta H = \Delta H_1 + \Delta G$ . Sərbəst enerji ( $\Delta G$ ) molekulun hərəkəti zamanı görülən işə sərf olunur (hərəkət edən molekulun rastlaşdığı manelərə qarşı) və  $\Delta G=0$  olana qədər molekulun hərəkəti davam edir. Molekulun hərəkətinin dayanması onun rast gəldiyi dəyişə düşməsi deməkdir, yəni başqa əhatəyə düşməsi deməkdir. Qeyd edək ki, molekul digər hala keçdikdə əvvəl udduğu qədər ( $\Delta H$ ) enerji ayrılır və bu enerji mayenin orta kinetik enerjisinin – temperaturun artmasına sərf olunur. Bu zaman xariclə heç bir qarşılıqlı təsirdə olmadığı üçün enerjinin (temperaturun) saxlanması təmin olunur. Bu proses mayeyə heç bir xarici qüvvə təsir etmədikdə bütün istiqamətlərdə eyni hüquqla baş verir və nəticədə mayədə "məcburi diffuziya" və ya "istiqamətlənmiş diffuziya" baş vermir. Lakin mayeyə sürüşmə gərginliyi şəklində qüvvə təsir edərsə, bu qüvvə istiqamətində molekulların sıçrayışlarının sayı artır və axma prosesi yaranır. Xarici qüvvənin təsiri ilə digər molekulların əhatəsində bağlanmış molekul

əhatədən aralanmağa çalışır və verilmiş makrohala uyğun mikrohaların sayı, yəni mayenin entropiyası artır. Entropiyanın bu artımı sabit temperaturda mayenin daxili enerjisini  $TdS$  qədər artırır ( $dH = TdS + Vdp$ ,  $p = const$  olduqda  $dH = TdS$  olur). Bu artımın müəyyən qiymətində molekul əhatəsindən azad olur və artıq qalan sərbəst enerji ( $\Delta G$ ) molekulun hərəkət etməsi üçün görülən işə sərf olunur. Yuxarıdakı mülahizələrdən hesab etmək olar ki, molekulların xarici təsirlər nəticəsində aldığı əlavə  $\Delta H$  enerjisi məlum  $\Delta H = \Delta G + T\Delta S$  ifadəsinə [16, 38] uyğun olaraq mayelərin axma prosesini təmin edir. Digər tərəfdən maye ona təsir edən xarici qüvvənin - ağırlıq qüvvəsinin təsiri ilə axdıqda ona göstərilən müqavimət qüvvəsi özlüklə xarakterizə olunduğundan özlü-lüyün temperaturdan asılılığını ifadə edən Frenkel - Eyriinq düsturuna məhz sərbəst enerji daxil olur. Beləliklə, 1 mol molekul aktiv hala keçdikdə - əlavə enerji özlü axının aktivləşmə entalpiyası ( $\Delta H_{\eta}^{\#}$ ), ətrafdan qopmasına sərf olunan enerji özlü axının aktivləşmə entropiyasının mütləq temperatura hasili ( $T\Delta S_{\eta}^{\#}$ ), hərəkətə sərf olunan enerji isə özlü axının aktivləşmə Gibbs enerjisidir ( $\Delta G_{\eta}^{\#}$ ).

Məhlullarda struktur dəyişmələrini və mövcud qarşılıqlı təsirləri öyrənmək üçün əlverişli üsullardan biri də məhlulların özlü axınının aktivləşmə parametrlərinin ( $\Delta G_{\eta}^{\#}$ ,  $\Delta H_{\eta}^{\#}$ ,  $\Delta S_{\eta}^{\#}$ ) tədqiqidir [16, 18]. Mayelərin özlü axınının Frenkel və Eyriinq nəzəriyyələrinə [16] görə özlü axınının aktivləşmə Gibbs enerjisi ( $\Delta G_{\eta}^{\#}$ )

$$\Delta G_{\eta}^{\#} = RT \ln \frac{\eta}{\eta_0} \quad (1)$$

ifadəsilə təyin olunur. Eyriinq nəzəriyyəsinə görə  $\eta_0 = N_A h \rho / M$  olur [16]. Burada  $R$ -universal qaz sabiti,  $N_A$ -Avoqadro ədədi,  $h$ -Plank sabitidir.  $M$ -məhlulun molyar kütləsi olub,  $M = \sum_{i=1}^N x_i M_i$  ifadəsilə təyin olunur [16].  $x_i$  və  $M_i$  uyğun olaraq  $i$ -ci komponentin molyar hissəsi və molyar kütləsidir.  $T$  mütləq temperaturunda mayenin dinamik özlülüyü ( $\eta$ ) və sıxlığı ( $\rho$ ) təcrübədə təyin olunur.

Özlü axının aktivləşmə entalpiyasını ( $\Delta H_{\eta}^{\#}$ )

$$\Delta H_{\eta}^{\#} = R \frac{\partial \ln(\eta / \eta_0)}{\partial (1/T)} \quad (2)$$

ifadəsilə təyin edə bilərik [16]. (1) ifadəsindən  $\Delta G_{\eta}^{\#}$  və (2) ifadəsindən  $\Delta H_{\eta}^{\#}$  təyin edildikdən sonra

$$\Delta G_{\eta}^{\#} = \Delta H_{\eta}^{\#} - T\Delta S_{\eta}^{\#} \quad (3)$$

ifadəsinə [16] əsasən özlü axının aktivləşmə entropiyasını ( $\Delta S_{\eta}^{\#}$ ) təyin edə bilərik.

Çoxkomponentli sistemlərdə həcmi xassələrin (sıxlıq, parsial molyar həcm, istidən genişlənmə əmsalı və s.) tədqiqi müxtəlif proseslərin təsviri üçün olduqca əhəmiyyətlidir [19, 22, 23]. Bu xassələr məhlulların molekulyar quruluşunu və makroskopik xüsusiyyətlərini müəyyənləşdirmək üçün müxtəlif modellərin verilməsində də mühim rol oynayır. Məhlulun əmələ gəlməsi zamanı molekullararası qarşılıqlı təsirlər dəyişir və hər komponentin molekullarının yerləşməsində özünə məxsus fərqlər yaranır. Təmiz suda molekullar arasında hidrogen rabitələri vasitəsilə yaranmış fəza toru olduğundan, sulu məhlulların fiziki-kimyəvi xassələri xüsusi dəyişir. Məhlulların həcmi xassələrinin, xüsusən də komponentlərin parsial molyar həcmələrinin öyrənilməsi məhlulda molekullar arasındakı molekulyar qarşılıqlı təsirlərin mahiyyətini aydınlaşdırmağa imkan verir. Məhlulların bu xassəsinin tədqiqi, həmçinin məhlullarda yaranan struktur xarakteristikalarının təsvirində də çox vacibdir [24, 25]. Məhlulda həllolan maddənin parsial molyar həcmi ( $\tilde{V}$ )

$$\tilde{V} = V_m + (1-x) \left( \frac{\partial V_m}{\partial x} \right)_{p,T} \quad (4)$$

düsturu ilə təyin olunur [16]. Burada  $V_m$  - məhlulun molyar həcmi olub,

$$V_m = \frac{M}{\rho} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=1}^N x_i M_i$$

düsturu ilə hesablanır.

Məhlullarda həlledici və həllolan maddə molekulları arasında yaranan qarşılıqlı təsirlər nəticəsində müxtəlif proseslər baş verir. Belə proseslərdən biri də solvatlaşma və ya hidratlaşma (həlledici su olduqda) prosesidir [20, 26, 27]. Hidratlaşma prosesində həllolan maddənin hissəcikləri (ionları, atomları, molekulları) ilə su molekulları dayanıqlı və ya dayanıqsız birləşmələr (hidratlar) əmələ gətirirlər. Bu prosesdə su molekulları dissosiasiyaya uğramır, yəni hidrogen ionu ( $H^+$ ) və hidroksil ionu ( $OH^-$ ) əmələ gəlmir. Hidratlaşma prosesi maddələrin suda həllolmasında, çoxkomponentli, çoxfazlı sistemlərdə maddələrin paylanması, kristal hidratların əmələ gəlməsində və s. vacib rol oynayır. Bəzi maddələrin hissəcikləri su molekullarını möhkəm, bəziləri isə zəif saxlayır. Hidratlaşma prosesi ümumi halda məhlulda baş verən bütün energetik və struktur dəyişmələrini xarakterizə edir [28, 29]. Odur ki, hidrat təbəqəsinin ölçüsünün, hidratlaşma ədədinin təyini olduqca mühümdür.

Polimerlərin suda məhlullarının struktur xarakteristikaları əsasən polimer makromolekulunun konformasiyası, ölçüləri, hidratlaşması və s. ilə təsvir olunur. Bütün bioloji proseslər suda getdiyindən, bioloji əhəmiyyətli polimerlərin makromolekullarının hidratlaşmasının öyrənilməsi maraqlı və vacib məsələlərdəndir [20, 30]. Müasir təsəvvürlərə görə duru polimer məhlullarında xətti ölçülü mütəhərrik makromolekul yumaq formasına keçir. Fərz edək ki, həcmi  $V_{su}$  olan suda  $m_2$  kütləli polimer həll olduqda alınan məhlulun həcmi  $V_m$  olmuşdur. Suda hər bir yumağın həcmi  $V_y$ , onun daxilində qalan suyun həcmi (hidrat su)  $V_h$  ilə işarə edək. Suda olan yumaqların sayının  $N$  olduğunu qəbul etsək yazıla bilər:

$$V_{su} + NV_y - V_m = NV_h \quad \Rightarrow \quad V_m - V_{su} = N(V_y - V_h) \quad (5)$$

(5) ifadəsinə daxil olan  $V_{su}$ ,  $V_m$ ,  $N$ ,  $V_y$ ,  $V_h$  kəmiyyətlərini

$$V_{su} = \frac{m_1}{\rho_1} = \frac{v_1 M_1}{\rho_1}, \quad V_m = \frac{m}{\rho} = \frac{vM}{\rho}, \quad N = \frac{m_2}{M_2} N_A = v_2 N_A,$$

$$V_y = \frac{m_y}{\rho_1} = \frac{M_2}{N_A \rho_1}, \quad V_h = \frac{m_h}{\rho_1} = \frac{N_h m_{0su}}{\rho_1} = \frac{N_h M_1}{N_A \rho_1} \quad (6)$$

ifadələrilə əvəz edə bilərik. Burada  $m_1$  - suyun,  $m_2$  - polimerin,  $m$  - məhlulun kütləsidir;  $M_1$  - suyun,  $M_2$  - polimerin,  $M$  - məhlulun molyar kütləsidir;  $v_1$  - suyun,  $v_2$  - polimerin,  $v$  - məhlulun maddə miqdarıdır;  $\rho_1$  - suyun,  $\rho$  - məhlulun sıxlığıdır;  $m_h$  - hidrat suyun kütləsi,  $m_{0su}$  - su molekulunun kütləsi,  $N_h$  - yumağın daxilində qalan su molekullarının sayıdır (hidratlaşma ədədi);  $N_A$  - Avogadro ədədidir. Qeyd edək ki, yumaqlar həlledicidə üzdüyündən onların orta sıxlığını həlledicinin sıxlığına bərabər götürə bilərik. İndi hidratlaşma ədədini qiymətləndirmək üçün ifadəni müəyyənləşdirək. (6) ifadələrini (5)-də nəzərə

alsaq və alınan tənlikdə  $x_1 = \frac{v_1}{v}$ ,  $x_2 = \frac{v_2}{v}$ ,  $M = x_1 M_1 + x_2 M_2$  olmaqla sadələşmə aparsaq alarıq:

$$N_h = \left( \frac{x_1}{x_2} + \frac{M_2}{M_1} \right) \left( 1 - \frac{\rho_1}{\rho} \right) \quad (7)$$

Burada  $x_1$  - suyun,  $x_2$  - polimerin molyar hissəsidir. (7) ifadəsində  $x_1 = 1 - x$ ,  $x_2 = x$  olduğunu nəzərə alsaq alarıq:

$$N_h = \left( \frac{1-x}{x} + \frac{M_2}{M_1} \right) \left( 1 - \frac{\rho_1}{\rho} \right) \quad (8)$$

Üçkomponentli sistemlərdə, yəni su-polimer-A sistemində  $x$  - polimerin molyar hissəsi,  $M_1$  - həlledicinin (su-A) molyar kütləsi,  $M_2$  - polimerin molyar kütləsi,  $\rho_1$  - həlledicinin (su-A) sıxlığı,  $\rho$  - məhlulun sıxlığı olacaq. Burada A üçüncü komponent olub duz, qələvi, spirt və s. ola bilər. Hesablamalar göstərir ki, hidratlaşma ədədi polimerin konsentrasiyasından, demək olar ki, asılı olmur. Güman edirik ki, alınmış bu nəticə duru məhlullar halında qəbul ediləndir. Oudur ki, duru məhlullarda  $N_h$  - in konsentrasiyadan asılı olmadığını qəbul edə bilərik. Dissertasiya işindəki tədqiqatlarda hidratlaşma ədədi (8) ifadəsinə əsasən təyin olunmuşdur və verilmiş temperatura uyğun müxtəlif konsentrasiyalarda qiymətləri hesablanaraq orta qiymətləri götürülmüşdür.

Sulu məhlullarda struktur xüsusiyyətlərini öyrənən metodlardan biri də İQ-spektroskopiya metodudur [31-35]. Məhlulların İQ oblastda udma spektrlərinin tədqiqi hidrogen rabitələrini kəmiyyətcə xarakterizə etmək üçün olduqca böyük əhəmiyyətə malikdir. Qeyd edək ki, sulu məhlullarda OH qruplarının valent rəqslərinin tezliyinin əsas tezliklər oblastında tədqiqi, maye suda İQ-süaların güclü udulması üzündən çətinləşir. Buna görə də sulu məhlulların İQ-



spektrləri əsasən oberton oblastında ( $7300-5000 \text{ sm}^{-1}$ ) tədqiq edilir [33-35]. Maddənin İQ oblastda udma spektrində  $OH$  valent rabitəsinin rəqs tezliyinin sürüşməsi ilə hidrogen rabitəsinin enerjisi ( $E_H$ ) və uzunluğu ( $R_H$ ) arasındakı əlaqə İoqansen [31] tərəfindən aşağıdakı kimi təklif olunmuşdur:

$$-E_H = \frac{18\Delta\nu}{720 + \Delta\nu} \quad (9)$$

$$R_H = 2.44 \cdot (-E_H)^{-0.2} \quad (10)$$

Burada  $\Delta\nu = \nu_0 - \nu$  olub,  $\nu$  - bağlı  $OH$  valent rabitəsinin rəqs tezliyi,  $\nu_0$  - isə sərbəst  $OH$  valent rabitəsinin rəqs tezliyidir. Ədəbiyyat mənbələrinə [19, 22] istinad edərək göstərmək olar ki, su üçün  $\nu_0 = 7062 \text{ sm}^{-1}$ . Qeyd edək ki, (9) və (10) ifadələri ilə təyin olunan hidrogen rabitəsinin enerjisi və uzunluğunun vahidi müvafiq olaraq  $\text{kkal/mol}$  və  $\text{Å}$ -ə uyğundur.

## TƏCRÜBİ HİSSƏ

*Tədqiqat obyektləri və metodları.* Tədqiqat obyektləri olaraq müxtəlif fraksiyalı PEQ-lərin sulu məhlulları götürülmüşdür. PEQ-nin 1000, 1500, 3000, 4000 və 6000  $q/mol$  orta molekulyar kütləli fraksiyalarına baxılmışdır. Tədqiqat zamanı istifadə edilmiş PEQ-lər kimyəvi safdır və İspaniyanın "Pan-reac" firmasının istehsalıdır. Ölçülər normal atmosfer təzyiqində aparılmışdır. Məhlullar qravimetrik üsulla hazırlanmışdır. Məhlulların hazırlanmasında bidistillə edilmiş sudan istifadə olunmuşdur. Nümunələrin hazırlanması zamanı "KERN 770" firmasının istehsal etdiyi analitik tərəzidən istifadə olunmuşdur və ölçmələr 0,0001  $q$  dəqiqliklə çəkilmişdir. İşdə özlülük 0,56  $mm$  diametrli ŞMV-2 kapilyar viskozimetrlə ölçülmüşdür. Viskozimetrdə mayenin axma müddəti  $\pm 0.01 \text{ san}$  dəqiqliklə təyin edilmişdir. Bütün ölçmələr üç dəfə aparılmışdır və eksperimentin nəticəsi olaraq onların orta qiymətləri götürülmüşdür. Mayələrin sıxlığı həcmi 15  $\text{sm}^3$  olan nazik uzun boğazlı (boğazı dərəcələnməmiş) şüşə piknometrlə həcmi dəyişməsinə əsasən təyin edilmişdir. Həm özlülüyn, həm də sıxlığın qiymətləri etalon mayeyə nisbətən müəyyən olunmuşdur. Etalon maye olaraq bidistillə olunmuş sudan istifadə olunmuşdur, suyun özlülüynünün və sıxlığının qiymətləri [16] işindən götürülmüşdür. Məhlulların özlülüynünü və sıxlığını müxtəlif temperaturalarda (293.15, 298.15, 303.15, 308.15, 313.15, 318.15 və 323.15  $K$ ) təyin etmək üçün viskozimetr və piknometr termostatda yerləşdirilmişdir. Temperatur  $\pm 0.05 \text{ K}$  dəqiqliklə ölçülmüşdür. Təcrübənin maksimal nisbi xətası sıxlığın təyini zamanı 0,30 %, özlülüyn təyini zamanı isə 1,0 % olmuşdur.

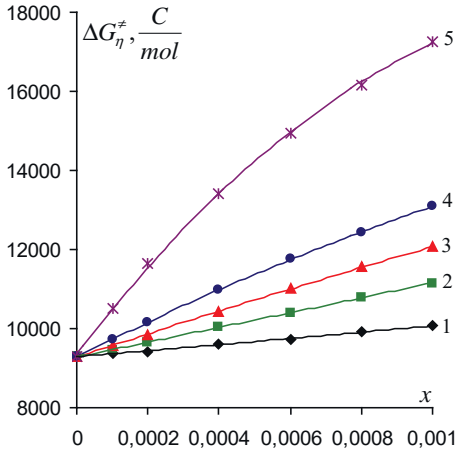
Müxtəlif konsentrasiyalı sulu məhlulların İQ-spektrləri "Perkin Elmer 2000" (ABS) firmasının istehsal etdiyi "Spectrum One" spektrometrində çəkilmişdir. "Spectrum One" cihazı CDRH, BS EN 60825-1/IEC 60825-1 birinci dərəcəyə uyğun gəlir. "Spectrum One" spektrometrlə 7800-dən 370  $\text{sm}^{-1}$  udma zolaqlarında 0.5  $\text{sm}^{-1}$  dəqiqliklə ölçü aparmaq olur. Cihazı müvafiq proqramla



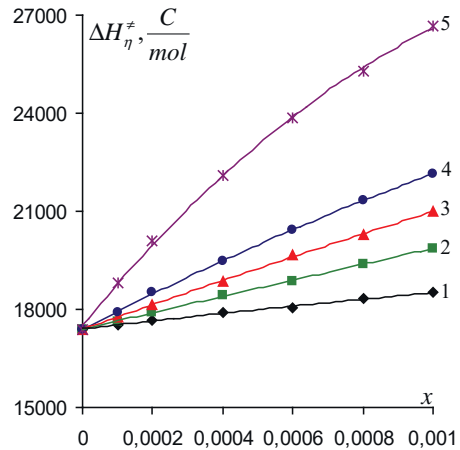
təchiz olunmuş kompüterlə birləşdirməklə idarə etmək olur. Bu proqram əsasında kompüterə "əmr" verməklə spektri müəyyən sayda çəkmək olur və kompüterin yaddaşında ən optimal variant saxlanılır. Qeyd edək ki, bu proqram üçün nəzərdə tutulmuş ən optimal say 16-dır. Buna görə də işdə kompüterə hər bir spektri 16 dəfə çəkmək əmri verilmişdir. Həmçinin bu proqram ilə çəkilmiş spektrin sahəsini, hündürlüyünü, o cümlədən maksimal udulmaya uyğun gələn tezliyin qiymətini təyin etmək olur. Spektrlər suda həll olmayan KRS küvetində çəkilmişdir və alınan nəticələri müqayisə etmək üçün qalınlığın eyni saxlanması təmin edilmişdir.

## ALINMIŞ NƏTİCƏLƏRİN TƏHLİLİ

Hesablamalar göstərir ki,  $\Delta G_{\eta}^{\ddagger}$ ,  $\Delta H_{\eta}^{\ddagger}$ ,  $\Delta S_{\eta}^{\ddagger}$  və  $\tilde{V}$  parametrlərinin verilmiş temperaturda konsentrasiyadan asılılıqları eyni qanunauyğunluqla dəyişir. Odur ki, yalnız 293,15<sup>0</sup>K temperatura uyğun nəticələrlə kifayətlənəcəyik. Müxtəlif molekul kütləli PEQ-lərin sulu məhlullarının 293,15<sup>0</sup>K temperaturda özlü axınının aktivləşmə parametrlərinin ( $\Delta G_{\eta}^{\ddagger}$ ,  $\Delta H_{\eta}^{\ddagger}$ ,  $\Delta S_{\eta}^{\ddagger}$ ) PEQ-nin konsentrasiyasından ( $x$ ) asılılıqları 1-3 sayılı şəkillərdə göstərilmişdir.

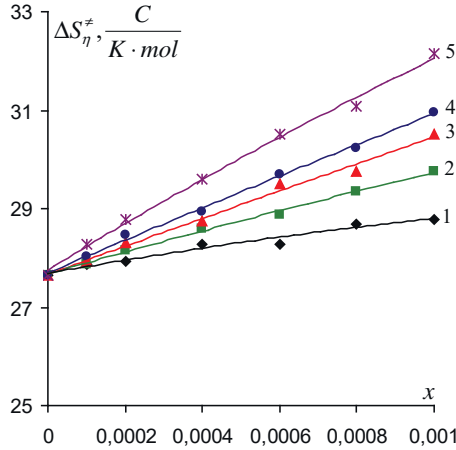


**Şəkil 1.** Su-PEQ sistemində özlü axının aktivləşmə Gibbs enerjisinin konsentrasiyadan asılılığı (T=293.15 K).



**Şəkil 2.** Su-PEQ sistemində özlü axının aktivləşmə entalpiyasının konsentrasiyadan asılılığı (T=293.15 K).

1-PEQ (1000), 2-PEQ (1500), 3-PEQ (3000), 4-PEQ (4000), 5-PEQ (6000)

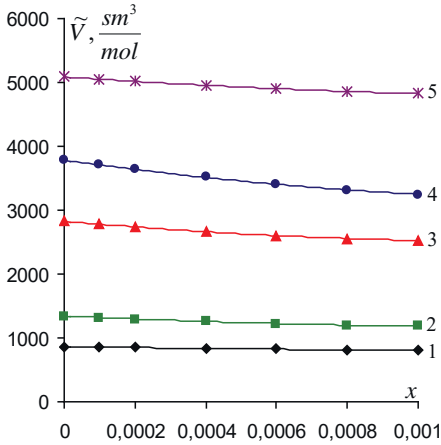


**Şək. 3.** Su-PEQ sistemində özlü axının aktivləşmə entropiyasının konsentrasiyadan asılılığı ( $T=293.15$  K).  
1-PEQ (1000), 2-PEQ (1500), 3-PEQ (3000), 4-PEQ (4000), 5-PEQ (6000)

Şəkil 1-3-dən görünür ki,  $\Delta G_{\eta}^{\ddagger}$ ,  $\Delta H_{\eta}^{\ddagger}$  və  $\Delta S_{\eta}^{\ddagger}$  parametrləri verilmiş temperaturda PEQ-nin konsentrasiyasının artması ilə, verilmiş temperatur və konsentrasiyada isə PEQ-nin molekul kütləsinin artması ilə artır. Özlü axın prosesini xarakterizə edən aktivləşmə parametrlərindən  $\Delta G_{\eta}^{\ddagger}$  - 1 mol maye molekullarının aktiv hala keçdikdən sonra hərəkəti zamanı gördükləri işdir,  $\Delta H_{\eta}^{\ddagger}$  - məhlulda yaranan dəyişmələri enerji baxımından,  $\Delta S_{\eta}^{\ddagger}$  - isə struktur baxımından xarakterizə edir [16]. Belə ki, konsentrasiyanın artması ilə  $\Delta G_{\eta}^{\ddagger}$ -nin artması aktiv hala keçmiş molekulların daha çox iş görməsini,  $\Delta H_{\eta}^{\ddagger}$ -in artması sistemin daha möhkəm struktura malik olmasını,  $\Delta S_{\eta}^{\ddagger}$ -in artması isə sistemin daha strukturlaşmış hala keçməsinə göstərir [16]. Özlü axının aktivləşmə parametrlərinin konsentrasiyadan asılılıqlarına əsasən deyə bilərik ki, məhlulda PEQ-nin həm molekul kütləsi, həm də konsentrasiyası artdıqca məhlul daha möhkəm struktura malik olur və daha da strukturlaşmış hala keçir. Qeyd edək ki, alçaqtezlikli dielektrik spektroskopiya metodu ilə də anoloji nəticəyə gəlinmişdir [36].

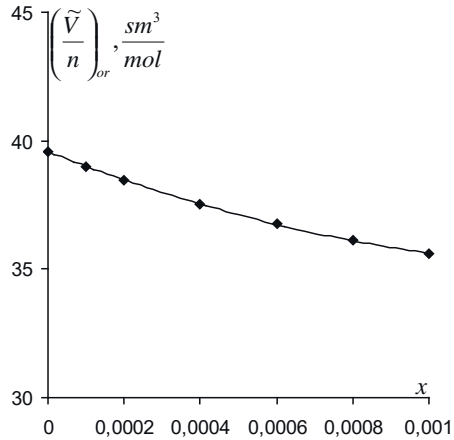
Su-PEQ sistemi molekullararası qarşılıqlı təsiri öyrənmək üçün ən sadə modellərdən hesab edilir. Ümumiyyətlə, binar məhlulların yaranması bir sıra proseslərlə müşayiət olunur. Bu proseslər həm su molekullarının öz aralarında, həm PEQ makromolekullarının öz aralarında, həm də PEQ makromolekulları ilə su molekulları arasında baş verən qarşılıqlı təsirlərlə əlaqədardır. Belə molekulyar qarşılıqlı təsirlər hidrogen və digər növ rabitələrin yaranması hesabına ilk növbədə məhlulun həcmi xassələrinə təsir edir. Məhlulun həcmi xassələri komponentlərin parsial molyar həcmliyi ilə də xarakterizə olunur.

Elmi ədəbiyyatda polimerlərin sulu məhlullarında polimerin parsial molyar həcmələrinin temperaturdan, polimerin molekulyar kütləsindən və konsentrasiyasından asılı olaraq dəyişməsinin tədqiqi ilə bağlı işlərə rast gəlinir [24, 37]. Parsial molyar həcm, həlledici ilə həll olan maddə molekulları arasındakı qarşılıqlı təsirləri, sistemdə baş verən struktur dəyişmələrini müəyyənləşdirmək üçün mühim termodinamik parametrlərdən biridir. Əlavə olaraq qeyd edək ki, məhlulda komponentlərin parsial molar həcmələrinin təhlili, digər tədqiqat metodlarının (İQ spektroskopiyası, ultrasentrifüqasiya, işığın səpilməsi, rentgenoqrafiya, neytronoqrafiya və s.) tətbiqi üçün də çox faydalıdır [37].



Şəkil 4. Su-PEQ sistemində PEQ-nin parsial molyar həcmi konsentrasiyadan asılılığı (T=293.15 K).

1-PEQ (1000), 2-PEQ (1500), 3-PEQ (3000), 4-PEQ (4000), 5-PEQ (6000)



Şəkil 5. Su-PEQ sistemində PEQ-nin bir monomerə düşən parsial molyar həcmi konsentrasiyadan asılılığı (T=293.15 K).

Müxtəlif molekulyar kütləli PEQ-lərin sulu məhlullarında 293.15 K temperaturda PEQ-nin parsial molyar həcmi konsentrasiyadan ( $x$ ) asılılığı Şəkil 4-də göstərilmişdir. Şəkil 4-dən görünür ki, məhlulda PEQ-nin parsial molyar həcmi verilmiş temperaturda konsentrasiyanın artması ilə azalır, verilmiş temperatur və konsentrasiyada isə molyar kütlənin artması ilə artır. Hesablamalar göstərir ki, verilmiş temperatur və konsentrasiyada PEQ-nin bir monomerə düşən parsial molyar həcmi ( $(\tilde{V}/n)_{or}$ ) PEQ-nin molyar kütləsindən, demək olar ki, asılı deyil. Şəkil 5-də tədqiq olunan müxtəlif molyar kütləli PEQ-lərin 293.15 K temperaturda bir monomerə düşən parsial molyar həcmi orta qiymətinin konsentrasiyadan asılılığı göstərilmişdir. Bu asılılığı

$$\left(\frac{\tilde{V}}{n}\right)_{or} = 1906007,0x^2 - 5854,9x + 39,6$$

ifadəsilə təsvir edə bilərik. Məlumdur ki,  $i$ -ci komponentin parsial molyar həcmi verilmiş tərkibli sistemə həmin komponentdən 1 mol əlavə etdikdə

həcmi dəyişməsinə bərabərdir [38]. Deyə bilərik ki, böyük ölçülü assosiatların fəzadakı həcm payı, bölündükdə onun ayrı-ayrı hissələrinin fəzadakı həcm payları cəmindən kiçik olur və əksinə. Suyun struktur modellərinə (iki strukturlu modellər, boşluqları doldurulmuş modellər, klaster modellər) görə su, hidrogen rabitəsilə birləşmiş müxtəlif ölçülü klasterlərdən və klasterlər arası sərbəst su molekullarından ibarətdir [39]. Parsial molyar həcmi konsentrasiyadan asılılığına əsasən ehtimal etmək olar ki, PEQ molekulları ilk növbədə sərbəst su molekulları ilə hidrogen rabitəsi vasitəsilə birləşirlər. Bu isə konsentrasiyanın artması ilə məhlulda PEQ-nin parsial molyar həcmi azalmasına səbəb olur. Bu isə PEQ-nin konsentrasiyasının artması ilə məhlulun daha da strukturlaşmasını göstərir.

Həllolan maddə ilə həlledici arasındakı qarşılıqlı təsirləri xarakterizə etmək üçün hidratlaşma anlayışlarından istifadə olunur. Bəzi müəlliflərin fikrinə görə hidratlaşma prosesi müxtəlif maddələrin suyun strukturuna təsirinin ümumi fiziki mənzərəsini aydınlaşdırmağa imkan verir [39, 40]. Hidratlaşma prosesində bəzi polimer makromolekulları öz ətrafında su molekullarını nisbətən möhkəm, bəziləri isə nisbətən zəif saxlayırlar. Polimer məhlullarında hidratlaşma prosesi ümumi olaraq baş verən energetik və struktur dəyişmələrini xarakterizə edir [41]. Baxılan molekul kütləli PEQ-lərin tədqiq olunan temperatur və konsentrasiya intervalında hidratlaşma ədədləri ( $N_h$ ) təyin edilmişdir. Hesablamalar göstərir ki, hidratlaşma ədədi PEQ-nin konsentrasiyasından demək olar ki, asılı olmur. Güman edirik ki, alınmış bu nəticə duru məhlullar halında qəbul ediləndir. Odur ki, duru məhlullarda  $N_h$ -in konsentrasiyadan asılı olmadığını qəbul edə bilərik. İşdə verilmiş temperaturalarda hidratlaşma ədədləri baxılan konsentrasiyalara uyğun orta qiymətləri götürülmüşdür. Su-PEQ sistemi üçün  $N_h$ -in qiymətləri cədvəl 1-də verilmişdir:

Cədvəl 1

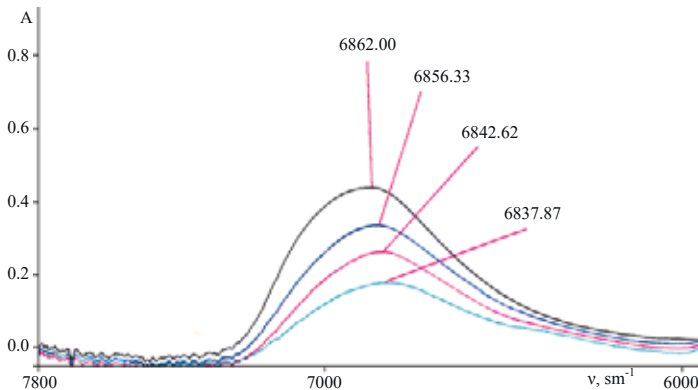
**Su-PEQ sistemlərində PEQ-nin hidratlaşma ədədinin temperaturdan asılılığı**

$T, K$	PEQ (1000)	PEQ (1500)	PEQ (3000)	PEQ (4000)	PEQ (6000)
293.15	8.6	11.6	14.9	20.7	56.7
298.15	8.3	11.2	14.4	20.1	56.3
303.15	7.9	10.8	14.1	19.6	56.0
308.15	7.4	10.3	13.6	19.2	55.8
313.15	7.0	9.8	13.2	18.7	55.4
318.15	6.7	9.5	12.6	18.2	54.9
323.15	6.2	9.2	12.4	18.0	54.8

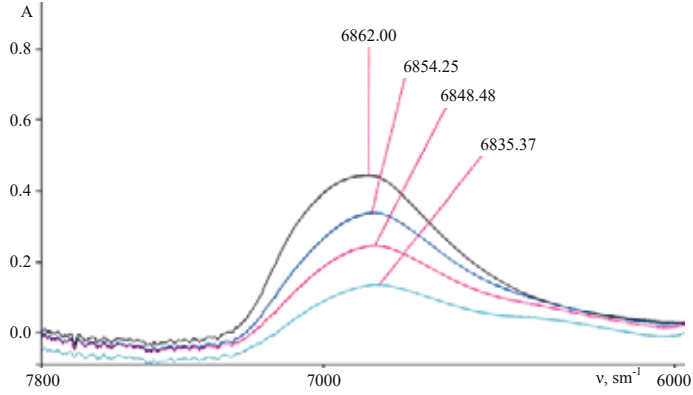
Cədvəl 1-dən göründüyü kimi, makromolekulun hidratlaşma ədədi PEQ-nin molekul kütləsinin ( $M$ ) artması ilə artır, temperaturun ( $T$ ) artması ilə isə azalır.  $N_h$  -in  $M$ -dən və  $T$ -dən asılı olaraq dəyişməsini aşağıdakı kimi izah etmək olar. Molekul kütləsinin artması ilə PEQ makromolekulunun həcmi böyüyür və molekulyar yumağın daxilindəki boşluqlar artır, həmçinin PEQ monomerində olan və su molekulları ilə hidrogen rabitəsi əmələ gətirən oksigen

atomlarının sayı da artır və nəticədə  $N_h$  artır. Temperaturun artması ilə molekulların istilik hərəkətinin orta kinetik enerjisi artdığı üçün hidrogen rabitəsi su molekullarını hidratlaşmış makromolekulyar yumaqda saxlaya bilmir və nəticədə  $N_h$  azalır, sərbəst su molekullarının sayı isə artır. Qeyd edək ki, hidratlaşma prosesi zamanı su molekulları sadəcə polimer makromolekulları ilə birləşməzlər, həmçinin su molekullarının öz aralarında polimer makromolekulları ilə hidrogen rabitələri yaratması uğrunda rəqabət yaranır [42]. Bu proses polimer makromolekullarının hidratlaşma enerjisinin maksimum olması ilə xarakterizə olunur ki, bu da yaranan konformasiyanı yarana biləcək digər konformasiyalarla müqayisədə daha ehtimallı edir [43].

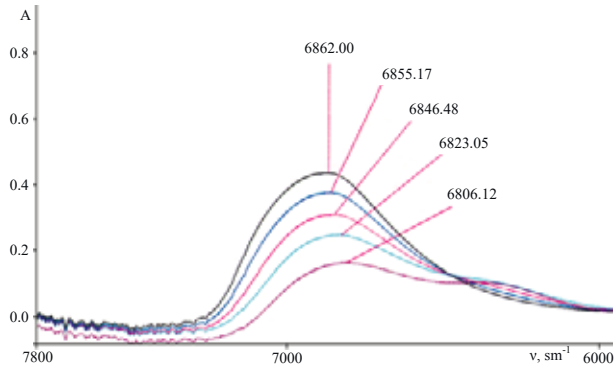
Məhlulların fiziki-kimyəvi xassələri onun strukturu və termodinamik halı ilə əlaqədardır. Bunlar isə öz növbəsində məhlulu təşkil edən hissəciklərin ölçüləri, formaları və aralarındakı çoxsaylı qarşılıqlı təsirlərlə müəyyən olunur. Polimerlərin sulu məhlullarının İQ oblastda tədqiqi polimer makromolekulları ilə su molekulları arasında, həmçinin su molekullarının öz aralarında yaranan qarşılıqlı təsirlərin öyrənilməsində olduqca əhəmiyyətlidir [44]. Sulu məhlulların İQ oblastda udma spektrlərini tədqiq etməklə su molekulları arasındakı hidrogen rabitələrini kəmiyyətə xarakterizə etmək olur [31]. Molekul kütlələri 1000, 4000 və 6000 olan PEQ-lərin sulu məhlullarının İQ oblastda udma spektrləri şəkil 6-8-də göstərilmişdir. Şəkillərdən görüldüyü kimi, PEQ-nin həm molekul kütləsinin, həm də konsentrasiyasının artması ilə məhlulların İQ oblastda udma spektrlərinin forması, intensivliyi və tezliyi dəyişir. Bu su-PEQ sistemlərində yaranan molekullarası qarşılıqlı təsirlər nəticəsində məhlulda struktur dəyişmələrinin olduğunu göstərir. Məhlulların İQ-spektrində su molekullarının OH qruplarının valent rəqslərinin tezliyinə əsasən müxtəlif konsentrasiyalarda su molekulları arasındakı hidrogen rabitəsinin enerjisi və uzunluğu hesablanmışdır (cədvəl 2).



**Şək. 6.** Müxtəlif konsentrasiyalarda PEQ-nin suda məhlulunun İQ oblastda udma spektri ( $M_{PEQ}=1000$ ).  
**6862.00**-su, **6856.33**-10%, **6842.62**-20%, **6837.87**-30%



**Şək. 7.** Müxtəlif konsentrasiyalarda PEQ-nin suda məhlulunun İQ oblastda udma spektri ( $M_{PEQ}=4000$ ).  
**6862.00**-su, **6854.25**-10%, **6848.48**-20%, **6835.37**-30%

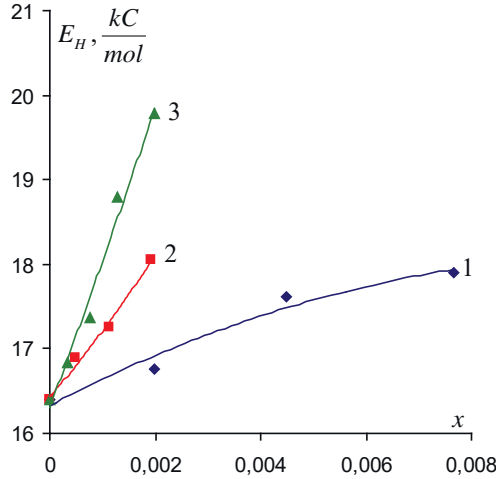


**Şək. 8.** Müxtəlif konsentrasiyalarda PEQ-nin suda məhlulunun İQ oblastda udma spektri ( $M_{PEQ}=6000$ ).  
**6862.00**-su, **6855.17**-10%, **6846.48**-20%, **6823.05**-30%, **6806.12**-40%

Cədvəl 2

**Su-PEQ sistemlərində müxtəlif konsentrasiyalarda su molekulları arasındakı hidrogen rabitəsinin enerjisi ( $E_H$ ) və uzunluğu ( $R_H$ )**

p, %	x	$\nu, \text{cm}^{-1}$	$E_H, \text{kC/mol}$	$R_H, \text{Å}$
<b>Su-PEQ (1000)</b>				
0	0	6862.00	16.4	1.86
10	0.00200	6856.33	16.8	1.85
20	0.00448	6842.62	17.6	1.83
30	0.00766	6837.87	17.9	1.82
<b>Su-PEQ (4000)</b>				
10	0.00050	6854.25	16.9	1.85
20	0.00112	6848.48	17.3	1.84
30	0.00192	6835.37	18.1	1.82
<b>Su-PEQ (6000)</b>				
10	0.00033	6855.17	16.8	1.85
20	0.00075	6846.48	17.4	1.84
30	0.00128	6823.05	18.8	1.81
40	0.00200	6806.12	19.8	1.79



**Şək. 9.** Su-PEQ sistemlərində su molekulları arasındakı hidrogen rabitəsinin enerjisinin konsentrasiyadan asılılığı.  
1-PEQ (1000), 2-PEQ (4000), 3-PEQ (6000)

Cədvəl 2-dən görüldüyü kimi, PEQ-nin həm molekul kütləsinin, həm də konsentrasiyasının artması ilə məhluldakı su molekulları arasındakı hidrogen rabitəsinin enerjisi artır, uzunluğu isə azalır. Güman edirik ki, PEQ-nin həm molekul kütləsinin, həm də konsentrasiyasının artması ilə məhlulun İQ oblastda udma spektrlərinin nisbətən kiçik tezliklərə tərəf sürüşməsi, su molekulları arasındakı hidrogen rabitəsinin enerjisinin artması və uzunluğunun azalması PEQ-nin suya strukturlaşdırıcı təsirlə əlaqədardır. Şəkil 9-da molekul kütlələri 1000, 4000 və 6000 olan PEQ-lərin sulu məhlullarında su molekulları arasındakı hidrogen rabitəsinin enerjisinin PEQ-nin konsentrasiyasından asılılıqları verilmişdir. Görüldüyü kimi, verilmiş konsentrasiyada  $E_H(\text{PEQ (1000)}) < E_H(\text{PEQ (4000)}) < E_H(\text{PEQ (6000)})$  olur. Hesab edirik ki, konsentrasiyanın artması ilə  $E_H$ -in artması  $\Delta H_{\eta}^{\ddagger}$ -nin artmasına,  $R_H$ -in azalması isə  $\tilde{V}$ -nin azalmasına müəyyən qədər öz payını verir.

PEQ makromolekulunda  $(\text{HO}-(\text{CH}_2-\text{CH}_2-\text{O})_n-\text{H})$  həm hidrofob  $(\text{CH}_2)$ , həm də hidrofilyl  $(\text{OH})$  qrupları var [16]. PEQ-nin OH qrupu,  $-\text{O}-$  və  $-\text{H}$  atomları su molekulu ilə hidrogen rabitəsi yarada bilirlər,  $\text{CH}_2$  qrupları isə hidrofob effekti yaradırlar. Gözləmək olar ki, PEQ-də hidrofob effektinin varlığı PEQ-nin hidrofilyl qrupları ilə su molekulları arasında hidrogen rabitəsinin yaranmasını gücləndirir. Beləliklə, su-PEQ sistemlərinin tədqiq olunan temperatur və konsentrasiya intervalında özlü axın və həcmi xassələrinin, həmçinin İQ oblastda udma spektrlərinin təhlili onu deməyə imkan verir ki, tədqiq olunan bütün molekulyar kütləli PEQ-lər suya strukturlaşdırıcı təsir göstərir. Həmçinin məhlulda PEQ-nin konsentrasiyası artdıqca, suya strukturlaşdırıcı təsiri də artır və nisbətən daha böyük molekulyar kütləli PEQ suya daha çox strukturlaşdırıcı təsir edir. Ehtimal etmək olar ki, tədqiq olunan sistemlərdə

PEQ molekullarının ətrafında hidrogen rabitəsi vasitəsilə su molekullarının (ilk növbədə sərbəst su molekulları) toplanması nəticəsində müəyyən ölçülü aqreqatlar əmələ gəlir. Bu əyani olaraq cədvəl 2-dən də aydın görünür. PEQ-nin konsentrasiyasının artması ilə belə aqreqatların sayı artır, molekul kütləsinin artması ilə ölçüləri böyüyür, nəticədə məhlul daha strukturlaşmış hala keçir. Həmçinin qeyd edək ki, PEQ makromolekulu böyük hidrofobluğa və kiçik polyarlığa malikdir [3, 45] və molekul kütləsinin artması ilə PEQ makromolekulunun polyarlığı artır [30]. Su molekulu da polyar olduğundan hesab edirik ki, bu halın özü də həm molekul kütləsindən, həm də konsentrasiyadan asılı olaraq PEQ-nin suya strukturlaşdırıcı təsirini müəyyən qədər artırır.

#### ƏDƏBİYYAT

1. Chen J., Spear S.K., Huddleston J.G., Rogers R.D. Polyethylene glycol and solutions of polyethylene glycol as green reaction media. *J. Green Chem.*, 2005, v. 7, p. 64-82.
2. Costa B.S., Rojas, E.E.G., Coimbra J.S.R., Teixeira J.A., Telis-Romero J. Density, Refractive Index, Apparent Specific Volume, and Electrical Conductivity of Aqueous Solutions of Poly(ethylene glycol) 1500 at Different Temperatures. *J. Chem. Eng.*, 2014, v. 59, p. 339-345.
3. Məsimov E.Ə. Bioloji sistemlərdə suyun rolu. Hidrofobluq. Bakı: Bakı Universiteti Nəşriyyatı, 2008, 328 s.
4. Шуляк И.В., Грушова Е.И. Использование реологических и квантово-химических методов для определения конформаций полиэтиленгликоля в воде. XI международная конференция «проблемы сольватации и комплексообразования в растворах», Иваново, 10-14 октября 2011, с. 200-201.
5. Zaslavsky B.Yu., Mestechkina N.M., Mischeva L.M., Rogozhin S.V. Physico-chemical factors governing partition behaviour of solutes and particles in aqueous polymeric biphasic systems. III Features of solutes and biological particles detected by the partition technique. *J. Chromatogr.*, 1983, v. 256, №1, p. 49-59.
6. Масимов Э.А., Пашаев Б.Г., Гасанов Г.Ш., Гаджиева Ш.Н. Определение конформации и размеров макромолекул полиэтиленгликоля в водных растворах методом вискозиметрии. *Журнал физической химии*, 2019, том 93, № 6, с. 845-849.
7. Ozdemir C., Guner A. Solution Thermodynamics of Poly(ethylene glycol)/Water Systems. *Appl J. Polym. Sci.*, 2006, v. 101, p. 203-216.
8. Regupathi I., Govindarajan R., Amaresh S., Murugesan T. Densities and viscosities of polyethylene glycol 6000 + triammonium citrate + water systems. *J. Chem. Eng.*, 2009, v. 54, № 12, p. 3291-3295.
9. Масимов Э.А., Пашаев Б.Г., Раджабов М.Р. Определение конформации и размеров макромолекул полиэтиленгликоля в системах вода-полиэтиленгликоль-LiOH методом вискозиметрии. *Журнал структурной химии*, 2020, том 61, № 6, с. 932-939.
10. Polik W.F., Burchard W. Static light scattering from aqueous poly (ethylene oxide) solutions in the temperature range 20-90°C. *J. Macromolecules*, 1983, v. 16, p. 978-982.
11. Iguchi M., Hiraga Y., Kasuya K., Aida T., Watanabe M., Sato Y., Smith R. Viscosity and density of poly(ethylene glycol) and its solution with carbon dioxide at 353.2 K and 373.2 K at pressures up to 15 MPa. *J. Supercrit. Fluids*, 2015, v. 97, p.63-73.
12. Pashayev B.G. Studying of structural characteristics in Water-Polyethylene Glycol-LiOH, NaOH, KOH systems by viscosimetry and pycnometry methods. *Conference Proceedings, Modern Trends In Physics Baku*, 01-03 May, 2019, p.170-174.
13. Масимов Э.А., Пашаев Б.Г., Гасанов Г.Ш. Вискозиметрическое исследование разбавленных водных растворов полиэтиленгликолей с различной молекулярной



- массой. Журнал физической химии, 2019, том 93, № 5, с. 779-781.
14. Tang Z., Fang K., Song Y., Sun F. Jetting performance of polyethylene glycol and reactive dye solutions. *J. Polymers*, 2019, v. 11, p. 739-748.
  15. Parmoona G., Mohammadi Nafchib A., Pirdashtic M. Density, viscosity, refractive index and excess properties of binary and ternary solutions of poly (ethylene glycol), sulfate salts and water at 298.15 K. *Phys. J. Chem. Res.*, 2019, v. 7, № 4, 859-884.
  16. Мәсимов Е.Ә., Нәсәнов Н.Ғ., Паҗаев В.Г. Mayelərin özlülüyü. "Ləman Poliqrafiya MMC", Bakı 2016, 285 s.
  17. Френкель Я. И. Кинетическая теория жидкостей. Л.: Наука, 1975, 592 с.
  18. Масимов Э.А., Пашаев Б.Г., Гасанов Г.Ш., Гасанов Н.Г. Параметры активации вязкого течения воды, тяжелой воды и сверхтяжелой воды. *Успехи современного естествознания*. 2015, №10, с. 32-35.
  19. Масимов Э.А., Гасанов Г.Ш., Пашаев Б.Г. Изменение структуры воды в водных растворах уксусной кислоты в зависимости от концентрации и температуры по данным денситометрии, вискозиметрии и ИК-спектроскопии. *Журнал физической химии*, 2013, том 87, № 6, с. 969-972.
  20. Масимов Э.А., Пашаев Б.Г., Раджабов М.Р. Вискозиметрическое и денситометрическое исследование систем вода-ПЭГ-КВг. *Журнал физической химии*, 2020, том 94, № 12, с. 1909-1915.
  21. Lotfi S., Herreraez J.V., Akhtar S., Shaik B., Ahlam A., Noureddine O. Thermodynamic parameters modeling of viscous flow activation in ethylene glycol-water fluid systems. *J. Chem. Chem. Eng.*, 2020, v. 39, № 3, p. 287-301.
  22. Медведев Н.Н., Волошин В.П., Ким А.В., Аникеенко А.В., Гайгер А. Расчет парциального мольного объема и его составляющих на молекулярно-динамических моделях разбавленных растворов. *Журнал структурной химии*. 2013, т. 54, № S2, с.276-293.
  23. Adam O.E.-A.A., Al-Dujaili A.H., Awwad A.M. Volumetric properties of aqueous solutions of ethylene glycols in the temperature range of 293.15-318.15 K, *ISRN Phys. Chem.*, 2014, Article ID, p. 639813-639823.
  24. Tyczynska M., Jozwiak M. Partial Molar Volumes of 15-Crown-5 Ether in Mixtures of N,N-Dimethylformamide with Water. *J. Solution Chem.* 2014, v. 43, p. 388-403.
  25. Ouerfelli N., Barhoumi Z., Iulian O. Viscosity Arrhenius activation energy and derived partial molar properties in 1,4-dioxane + water binary mixtures from 293.15 K to 323.15 K. *Journal of Solution Chemistry*, 2012, v. 41, № 3, p. 458-474.
  26. Nishimura T., de Campo L., Iwase H., Akiyoshi K. Determining the hydration in the hydrophobic layer of permeable polymer vesicles by neutron scattering. *J. Macromolecules*, 2020, v. 53, № 17, p. 7546-7551.
  27. Pissis P., Kyritsis A. Hydration Studies in Polymer Hydrogels. *Journal of polymer science, part B: Polymer physics*, 2013, v. 51, p. 159-175.
  28. Paez M.M., Figueredo S., Perez D.S., Vergara M., Lans E. Volumetric, viscometric and molecular simulation studies of glycine in aqueous sodium sulphate solutions at different temperatures. *Journal of Molecular Liquids*, 2018, v. 266, p. 718-726.
  29. Волков В.И., Черняк А.В., Голубенко Д.В., Шевлякова Н.В., Тверской В.А., Ярославцев А.Б. Подвижность катионов и молекул воды в сульфокатионообменных мембранах на основе полиэтилена и сульфированного привитого полистирола. *Жур. Мембраны и мембранные технологии*, 2020, т. 10, № 1, с. 63-72.
  30. Аббасов Х.Ф. Конформационные характеристики макромолекул полиэтиленгликолей в водных растворах по данным рефрактометрии. *Журнал физ. химии*, 2014, т. 88, № 6, с. 979-982.
  31. Водородная связь. Сборник статей. М.: Наука, 1981. с.112-155.
  32. Worley J.D., Klotz I.M. Near-infrared spectra of H<sub>2</sub>O-D<sub>2</sub>O solutions. *J. Chem. Phys.*,

- 1966, v.45, p.2868-2871.
33. Вода в полимерах: Пер. с англ. (Под ред. с Роуланда). М.: Мир, 1984, с. 50-78.
  34. Карякин А.В., Кривенцова Г.А. Состояние воды в органических и неорганических соединениях. М.: Наука, 1973, 176с.
  35. Юхневич Г.В. Инфракрасная спектроскопия воды. М.: Наука, 1973, 208 с.
  36. Məsimov E.Ə., Abbasov H.F., Həsənov H.H. Polietilenqlikolun duru sulu məhlullarının struktur xüsusiyyətləri. J. of. Qafqaz University, № 21, 2008, s. 73-76.
  37. Мухторовна А.Д., Юсупжановна М.М., Абдуганиевич Ш.Ш., Сабирханович Т.А. Реологические свойства концентрированных водных растворов гидролизованых производных галактоманнана. Журнал Химия растительного сырья, 2014, № 4, с. 67-75.
  38. Məsimov E.Ə., Həsənov H.Ş. Bioloji sistemlərin termodinamikası. Bakı: Ləman, 2007, 418 s.
  39. Масимов Э.А. Вода. Баку: Ляман, 2018, 368 с.
  40. Liese S., Gensler M., Krysiaik S., Schwarzl R., Achazi A., Paulus B., Hugel T. Rabe P.J., Netz R.R. Hydration effects turn a highly stretched polymer from an entropic into an energetic Spring. J. American Chemical Society, 2017, v. 11, № 1, p. 702-712.
  41. Pradhan M.R., Nguyen M.N., Kannan S., Fox S.J., Kwoh C.K., Lane D.P., Verma C.S. Characterization of hydration properties in structural ensembles of biomolecules. Journal of Chemical Information and Modeling, 2019, v. 59, p. 3316-3329.
  42. Bang C.H., Choi H.K., Lee B.S. Hydrogen bonding in polymer solution. J. Chem. Eng., 2016, v. 61, № 10, p. 3438-3447.
  43. Cao Z., Bowie J.U. An energetic scale for equilibrium H/D fractionation factors illuminates hydrogen bond free energies in proteins. J. Protein Science, 2014, v. 23, p. 566-575.
  44. Масимов Э.А., Пашаев Б.Г., Гасанов Г.Ш. Структура водных растворов сахарозы по данным вискозиметрии и ИК-спектроскопии. Журнал физической химии, 2017, том 91, № 4, с. 644-647.
  45. Шуляк И.В., Грушова Е.И. Расчет размеров молекул полиэтиленгликоля в растворах по данным вискозиметрии. Жур. физ. химии. 2013, т. 87, №12, с. 2079-2084.

## **ИССЛЕДОВАНИЕ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ РАЗЛИЧНЫХ ФРАКЦИИ ПОЛИЭТИЛЕНГЛИКОЛЕЙ МЕТОДАМИ ВИСКОЗИМЕТРИИ, ДЕНСИТОМЕТРИИ, ИК-СПЕКТРОСКОПИИ**

**Э.А.МАСИМОВ, Б.Г. ПАШАЕВ**

### **РЕЗЮМЕ**

В работе измерены динамическая вязкость, плотность водных растворов ПЭГ различных фракций (1000, 1500, 3000, 4000 и 6000 г/мол) в интервале концентрации (0 - 0.001 мольные доли) и температур (293.15 - 323.15 К), в ИК области определена частота ОН валентных колебаний молекул воды. На основании полученных опытных данных были вычислены параметры активации вязкого течения, парциальные мольные объемы, числа гидратации макромолекул ПЭГ в растворе, энергия и длина водородной связи в исследованных растворах. Было показано что ПЭГ оказывает структурирующее действие на воду, причем с увеличением молекулярной массы и концентрации ПЭГ этот эффект увеличивается.

**Ключевые слова:** водный раствор, ПЭГ, параметры активации вязкого течения, парциальный молярный объем, число гидратации, энергия водородной связи.

# STUDY OF AQUEOUS SOLUTIONS OF VARIOUS POLYETHYLENE GLYCOL FRACTIONS BY VISCOSIMETRY, DENSITOMETRY, IR SPECTROSCOPY

E.A.MASIMOV, B.G.PASHAYEV

## SUMMARY

In this work, the dynamic viscosity, the density of aqueous solutions of PEG of various fractions (1000, 1500, 3000, 4000 and 6000 g/mol) were measured in the concentration range (0 - 0.001 molar fractions) and temperatures (293.15 - 323.15 K), the frequency was determined in the IR region OH stretching vibrations of water molecules. Based on the experimental data obtained, the parameters of activation of a viscous flow, partial molar volumes, hydration numbers of PEG macromolecules in solution, energy and length of hydrogen bonds in the investigated solutions were calculated. It was shown that PEG has a structuring effect on water, and this effect increases with an increase in the molecular weight and concentration of PEG.

**Key words:** aqueous solutions, PEG, activation parameters of viscous flow, partial molar volumes, hydration number, energy hydrogen bonding.

PACS 25.40-Ep  
УДК 531.1

## РЕДЖЕ-ЭЙКОНАЛЬНЫЙ МЕТОД ДЛЯ УПРУГОГО $pN$ -РАССЕЯНИЯ

С.Г.АБДУЛВАГАБОВА, Т.О.БАЙРАМОВА  
Бакинский Государственный Университет  
sajida.gafar@gmail.com

*Настоящая статья посвящена рассмотрению упругого рассеяния протонов на ядрах при высоких энергиях и при больших переданных импульсах с помощью квазипотенциала, зависящей от энергии. Данное рассеяние описывается с помощью единого объекта – вакуумного Редже полюса. В работе используется аналитическое свойство амплитуды упругих процессов как функции угловых переменных и возможности расширения соответствующих областей аналитичности при учете условия унитарности. Показано, что при высоких энергиях сечение сохраняет экспоненциальную зависимость от переданного импульса. Из-за отсутствия кулоновской интерференции, следует  $\text{Re } F(0) \ll \text{Im } F(0)$ . Кроме того, сечение рассеяния лишь незначительно превышает величину квадрата мнимой части. Эта разница не может быть приписана действительной части  $F(0)$ . Обсуждено возможное дальнейшее развитие теоретических исследований.*

**Ключевые слова:** Эйкональ, Редже полюс, упругое рассеяние, сечение, унитарность, аналитичность, дифракция.

### 1. Введение

По квантомеханическому смыслу величины орбитального момента  $l$  могут принимать лишь целые положительные значения. Однако для случая рассеяния частицы на каком-либо сферически симметричном потенциале парциальные амплитуды можно формально продолжить в область комплексных значений  $l$ . Значение комплексного углового момента, при котором матрица рассеяния обладает полюсом, называется полюсом Редже. Положение полюса Редже зависит от энергии рассеяния, так что при изменении энергии полюс «движется» по плоскости комплексного орбитального момента.

Среди различных процессов упругого рассеяния протон - ядерное рассеяние занимает особое положение, поскольку наличие первичных

протонных пучков в ускорителях позволяет изучать взаимодействие протонов при наибольших доступных значениях энергии.

В рамках дифракционной теории получили удовлетворительное объяснение многочисленные эксперименты, в которых изучалось взаимодействие при высоких энергиях не только нуклонов, но и  $\pi$ -мезонов.

В данной работе в рамках редже-эйконального подхода исследуется упругое протон - ядерное рассеяние. Преимущество эйконального подхода перед простым реджевским подходом заключается в том, что он в явном виде приводит к соблюдению унитарности в  $s$ - канале. Кроме того, использование в качестве основного уравнения условия двухчастичной унитарности, аналитически продолженного в область высоких энергий, дает возможность эффективного учета структуры сингулярностей амплитуды рассеяния в плоскости углового момента и приводит к представлениям для амплитуды, содержащим в малой степени модельные предположения [1].

## 2. Редже-эйкональный подход

Высокоэнергетическое или эйкональное приближение широко и успешно применяется для описания рассеяния частиц в сложных ядрах как рассеяние в некоторой оптической сплошной среде. В этом приближении вместо закона сохранения энергии имеет место закон сохранения проекции импульса на направление  $k$ :  $p_k = \text{const}$ . Это означает, что полностью пренебрегается движением в поперечных направлениях. Кроме того, в этом приближении не накладывается никаких ограничений на массы и координаты частиц, при этом и конечный радиус, и отдача считаются точно. Поэтому высокоэнергетическое приближение можно использовать для вычисления угловых распределений рассеянных частиц [2].

В модели Редже дифракционное рассеяние описывается обменом вакуумным движущимся полюсом с траекторией  $a(E)$  в комплексной плоскости углового момента, которое получило название померон. Для объяснения эйкональное рассеяние адронов более адекватна  $s$ - канальный обмен померонами.

Рассеяние частиц высоких энергий имеет свои особенности, связанные, прежде всего с неупругими процессами, внутренней структурой и большими множественностями, характерными для сильного взаимодействия. Теория многократного рассеяния и явление экранировки тесно связанная с  $s$ - канальным условием унитарности, является одним из важнейших инструментов при изучении дифракции – как в рассеянии ядер, адронов, так и в глубоконеупругом адронном рассеянии.

Исследование двухчастичного условия унитарности в  $t$ -канале показывает, что амплитуды  $F_l(t)$  должны иметь полюсы, положение которых

зависит от переменной  $t$ . Вблизи полюса парциальная амплитуда имеет вид

$$F_l(s, t) \sim t^{\alpha(s)}, \quad (1)$$

где  $\alpha$  - первая сингулярность в  $l$  плоскости.

Важным следствием теории Редже является связь между энергетической зависимостью амплитуды рассеяния и существованием полюсов Редже:

$$s = 4(k^2 + m^2) = 4E^2, \quad t = -(\mathbf{p} - \mathbf{k})^2, \quad (2)$$

где  $s$  и  $t$  — мандельштамовские инварианты:  $s$  - квадрат энергии столкновения в системе центра масс,  $t$  - квадрат переданного 4-импульса. Частица с высокой энергией, проходя через ядро, рассеивается не более одного раза, т.е. сталкивается только с одним из нуклонов ядра.

Поскольку невозможно указать, с каким из нуклонов ядра произошло столкновение, то амплитуда упругого рассеяния на ядре в этом случае будет когерентной суммой амплитуд рассеяния на каждом из нуклонов. Если игнорировать спин ядра, разложение амплитуды по парциальным волнам имеет вид

$$F(s, t) = \sum (2l + 1)(\eta_l(s) \exp[2i\delta_l(s)] - 1) / 2ik^2 P_l(\cos \theta). \quad (3)$$

Здесь  $\cos(\theta) = 1 + 2t/s$  - косинус угла рассеяния,  $\delta_l(s)$  - фазовый сдвиг,  $\eta_l(s)$  - поглощение в  $l$  канале ядра.

Эйконал с высокой степенью точности пропорционален эффективному квазипотенциалу взаимодействию адронов. На практике для нахождения  $V(r)$  обычно применяют следующую процедуру. Используя данные по рассеянию при малых энергиях, определяют сдвиги фаз  $\delta_l$  для малых значений  $l$ .  $\delta_l$  характеризует рассеяние частицы с различными значениями орбитального момента и зависит от энергии частицы и вида потенциала. Сдвиги фаз  $\delta_l$  для больших значений  $l$  вводят так, чтобы аппроксимировать сечение при высоких энергиях. Следующая задача состоит в выяснении возможности определения потенциала по данным о  $\delta_l$ . Но надо отметить, что однозначное определение потенциала по данным  $\delta_l$  невозможно. Осуществляя в (3) высокоэнергетические замены:  $P_l(\cos \theta) \approx J_0(b\sqrt{-t})$  и переходя от суммирования к интегрированию, получим амплитуду рассеяния в представлении прицельного параметра [3]:

$$F(s, t) = i \int b db (1 - \exp[i\chi(s, b)]) J_0(b\sqrt{-t}), \quad (4)$$

где  $\chi(s, b)$  - эйконал. Этот эйконал содержит потенциал взаимодействия протона с ядром.

Обратное преобразование определяет эйконал через параметры померона:

$$\chi(s, b) = \frac{1}{2} \int dt F(s, t) J_0(b\sqrt{-t}) \quad (5)$$

Траектория полюса Редже определяет асимптотическое поведение амплитуды, когда  $\cos(\theta) \rightarrow \infty$ . Отсюда следует, что при  $s \rightarrow \infty, t < 0$  амплитуда рассеяния ведет себя как

$$F(s, t) \propto \sum_i \left( \frac{s}{s_0} \right)^{a_i(t)} \gamma_i(t), \quad (6)$$

где  $a_i(t)$  определяет положение полюсов Редже, соответствующих связанным состояниям и резонансам, а  $s_0$  – некоторый параметр, имеющий размерность квадрата массы.

Практическая польза редже-эйконального подхода заключена в возможности уменьшения функционального произведения путем сведения неизвестной функции двух переменных  $F(s, t)$  к нескольким функциям одной переменной, каковыми являются траектории Редже и реджевские вычеты.

В теории потенциального рассеяния наклон траектории Редже  $a(t)$  связан с квадратом эффективного радиуса взаимодействия, порождающего эту траекторию, приближенным соотношением  $R^2 \propto \alpha(t)(2\alpha(t) + 1)$ . Следствием этого выражения является фундаментальная нелинейность траекторий Редже, хотя само по себе это соотношение не накладывает никаких ограничений на функциональную форму траекторий Редже при достаточно малых  $t$ .

Запишем при малых  $t$ ,  $a(t) \approx 1 + \varepsilon$ , тогда

$$\sigma^{tot} = \sum F(0) s^{\alpha(0)-1}. \quad (7)$$

При достаточно малых значениях  $t$  никакие ограничения не накладываются на функциональную форму траекторий Редже. Единственными твердо установленными ограничениями на функциональную форму траекторий Редже в области отрицательных значений аргумента являются их вещественность и реноминированность.

Дифференциальные сечения бинарных процессов согласно формуле (7), сосредоточены в узкой области переданных импульсов  $|t|$ , ширина которой логарифмически убывает с ростом энергии [4]. Это явление в упругих процессах обычно называют сокращением дифракционного конуса. Сокращение конуса углового распределения наблюдалось экспериментально во всех бинарных реакциях.

Для большого числа упругих процессов как и для упругого  $pN$  рассеяния с малой, но неисчезающей передачей импульса, зависимость дифференциального сечения от  $t$  описывается формулой



$$\frac{d\sigma}{dt} = \left( \frac{d\sigma}{dt} \right)_{t=0} \exp(at + \gamma^2). \quad (8)$$

При малых  $t$  формула (7) совпадает с формулой (8). Различие состоит в том, что теория Редже предсказывает логарифмический рост константы  $a$  при увеличении энергии.

В теории потенциального рассеяния наклон траектории  $a_i(t)$  связан с квадратом эффективного радиуса взаимодействия, порождающего эту траекторию приближенным соотношением  $R^2 \sim a(t)(2a(t)+1)$  [5]. Поэтому при  $t \rightarrow -\infty$  траектория  $a(t) = \text{const}$  действительно соответствует малым расстоянием и пределу свободных полей при асимптотически больших значениях переданного импульса.

### 3. Заключение

Таким образом, метод расширенной унитарности дает простую возможность учета аналитических свойств амплитуды рассеяния в плоскости углового момента прямого канала. Главное преимущество теории Редже — резкое уменьшение числа степеней свободы, необходимых для рассмотрения процесса квантовомеханического рассеяния. Модель полюсов Редже допускает определенный произвол в выборе вакуумной сингулярности и тем более в выборе формы траектории и вычета. Экспериментальные данные указывают на умеренный рост сечений с энергией. Произвол может быть устранен с учетом  $t$  – канальной унитарности и с учетом спиновых эффектов.

Локальный потенциал играет существенную роль при малой передаче импульса. Член амплитуды рассеяния имеет полюса при углах рассеяния  $\cos \theta = \pm [1 + (\mu/2k)^2]$ , где  $\mu$  – масса протона, а  $k$  – импульс ядра в системе центра масс. Тогда рассеяние в окрестности полюсов определяется рассеянием в полюсах. Размер области взаимодействия оценивается как  $\hbar/\mu c$ . Следовательно, наибольший радиус действия сил получается при углах рассеяния  $\cos \theta = \pm [1 + (\mu/2k)^2]$ . Тогда рассеяние в окрестности полюсов определяется рассеянием в полюсах. Все фазы становятся комплексными и ядерная амплитуда  $pN$ - рассеяния вперед почти полностью мнима. Это можно видеть по полному отсутствию кулоновской интерференции, откуда следует, что  $\text{Re } F(0) \ll \text{Im } F(0)$ . Кроме того, сечение рассеяния лишь незначительно превышает величину квадрата мнимой части. Эта разница не может быть приписана действительной части  $F(0)$ .

Достоинством развиваемого здесь подхода является то, что он позволяет единым образом исследовать процессы рассеяния (частица на частице, частица на ядре) на малые и большие углы, имеющие дифракционный характер.



## ЛИТЕРАТУРА

1. Енковский Л.Л. ФЭЧАЯ, 2003, Т.34, Вып.5, с. 1196.
2. Алхазов Г.Д., Анисович В.В. Волковский П.Э. Дифракционное взаимодействие адронов с ядрами при высоких энергиях. Л.: Наука, 1991.
3. Зотов Н.П., Русаков С.В., Царев В.А. ЭЧАЯ, 1980, Том 11, Вып. 5, с. 1160.
4. Абдулвагабова С.К. Journal of Qafqaz University, Number 30, 2010, p. 19-24.
5. Годизев А.А., Петров В.А. ФЭЧАЯ, 2008, Т.39, Вып. 1, с. 243 -265.

## YÜKSƏK ENERJİLƏRDƏ $pN$ -ELASTİKİ SƏPİLMƏSİNDƏ RECCE-EYKONAL METODU

S.Q.ƏBDÜLVAHABOVA, T.O.BAYRAMOVA

### XÜLASƏ

İşdə yüksək enerjilərdə və ötürülən impulsun böyük qiymətlərində protonun nüvələrdən səpilməsini enerjidən asılı olan kvazipotensialda tədqiq edilmişdir. Səpilmə Recce-nin vakuum qütbləri metodu ilə aparılmışdır. Tədqiqatda bucaqdan asılı olan elastiki səpilmə amplitudunun analitik xassəsi və unitarlıq şərti nəzərə alınaraq analitiklik oblastının genişlənməsindən istifadə edilmişdir. Yüksək enerjilərdə effektiv kəsik enerjidən eksponensial asılı olur. Kulon interferensiyasının nəzərə alınmamasından  $\operatorname{Re} F(0) \ll \operatorname{Im} F(0)$  alınır. Bundan başqa, effektiv kəsiyin qiyməti amplitudun xəyali hissəsinin kvadratından çox az böyükdür. Bu fərq  $F(0)$  amplitudunun həqiqi hissəsinin hesabına ola bilməz. Gələcəkdə bu istiqamətdə aparılan tədqiqatlar da müzakirə edilir.

**Açar sözlər:** eykonal, Recce qütbü, elastiki toqquşma, kəsik, unitarlıq, analitiklik, difraksiya

## REGGE- EIKONAL METHOD FOR HIGH – ENERGY $pp$ - ELASTIC SCATTERING

S.Q.ABDULVAHABOVA, T.O.BAYRAMOVA

### SUMMARY

This article is devoted to the consideration of elastic scattering of protons on nuclei at high energies at large transmitted pulses using a quasi-potential that depends on the energy. This scattering is described using a single object-the vacuum Regge pole. The paper uses the analytical property of the amplitude of elastic processes as a function of angular variables and the possibility of expanding the corresponding areas of analyticity when taking into account the condition of unitarity. It is shown that at high energies, the cross-section retains an exponential dependence on the transmitted pulse. Due to the absence of Coulomb interference, it follows that  $\operatorname{Re} F(0) \ll \operatorname{Im} F(0)$ . In addition, the scattering cross-section is only slightly larger than the square of the imaginary part  $F(0)$ . This difference cannot be attributed to the actual part. Possible further development of theoretical research is discussed.

**Key words:** Eikonal, Regge pole, elastic scattering, section, unitarity, analyticity, diffraction.

PACS 68.65

## SFERİK KVANT NÖQTƏSİNDƏ OPTİK KEÇİDLƏR VƏ LAZER EFFEKTİ

T.H.İSMAYILOV, A.F.ASLANLI  
Bakı Dövlət Universiteti  
ms.fq@bk.ru, tariyel.i@gmail.com

*Bu işdə parabolik dispersiya qanunlu yarımkeçirici əsaslı kvant nöqtəsində effektiv kütlə yaxınlaşmasında elektronların (deşiklərin) enerji spektri tapılmış, zonadaxili və zonalararası keçid ehtimalları hesablanmış, lazer effekti araşdırılmışdır.*

**Açar sözlər:** kvant nöqtə, kvant ölçü, enerji diskretliyi, lazer

Hazırda kristal nanostrukturuların elektron xassələrinin tədqiqi geniş vüsət almışdır. Bu, çoxsaylı tətbiq imkanlarına bağlı olmaqla yanaşı, eyni zamanda fundamental tədqiqatlar nöqtəyi-nəzərindən böyük əhəmiyyət kəsb edir. Belə strukturulara misal kvant nöqtələridir. Son on il ərzində kvant nöqtə əsaslı lazerlərə diqqət xeyli artmışdır. Bunun səbəbi onlardakı yükdaşıyıcıların hərəkətinin üç istiqamətdə məhdudlaşmasının nəticəsində enerji spektrinin tam diskretliyi ilə bağlıdır. Enerjinin diskretliyi hal sıxlığının da diskretliyinə gətirir. Kvant nöqtə əsaslı lazerlərin əsas üstünlükləri onların astana enerjisinin kiçik olması [1, 2], temperatur həssaslığının cüzi olması [3, 4], geniş spektral moduləyisiya zolağına malik olması və həcmələrinin kiçik olmasıdır. Son zamanlar belə lazerlər spektroskopiyada, telerabitədə, optik koherent tomoqrafiyada, tıbdə lazer bıçaqları kimi istifadə olunur.

Fərz edək ki, elektron  $r_0$  radiuslu kvant quyusunun daxilində sərbəst hərəkət edir, xaricində isə potensial enerji Kulon qanununa tabedir:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < r_0, \\ -\frac{e^2}{\varepsilon r}, & r \geq r_0. \end{cases} \quad (1)$$

Burada  $\varepsilon$  -kvant nöqtəsinin yerləşdiyi mühitin dielektrik nüfuzluğu,  $e$ -elektronun yükü,  $V_0$  –quyunun dərinliyidir.

Quyu daxilində elektronun (deşiyin) dalğa funksiyasının radial hissəsi kəsr indeksli  $J_{n+\frac{1}{2}}(\rho)$  Bessel funksiyası ilə ifadə olunur. Quyunun xaricində isə

radial hissə ümumiləşmiş Lager polinomları vasitəsilə ( $L$ ) ifadə oluna bilər. İzolə olunmuş kvant nöqtəsi halında Kulon sahəsinin uzaq təsirli olması üzündən elektronların enerji spektri dalğa funksiyasının quyu xaricindəki davranışı ilə təyin olunur və hidrogen atomunun müvafiq effektiv kütləli və dielektrik nüfuzlu spektrinə bənzərdir:

$$E_n = -\frac{me^4}{2h^2n^2\varepsilon^2}, \quad n=1,2,3\dots \quad (2)$$

Elektronların enerji səviyyələri məlum olduğu üçün quyunun sərhədində dalğa funksiyasının özünün və törəməsinin

$$R_{xar,l}(r=r_0) = R_{dax,l}(r=r_0), \quad \frac{\partial R_{xar,l}(r)}{\partial r} \Big|_{r=r_0} = \frac{\partial R_{dax,l}(r)}{\partial r} \Big|_{r=r_0} \quad (3)$$

kəsilməzliyi şərtlərindən quyunun ölçülərinə məhdudiyət yaranır.

$V_0 = 0.1eV$ ,  $m = 0.067 \cdot 9.1 \cdot 10^{-28}q$ ,  $\varepsilon = 12$  olsa,  $n=1$ ,  $l=0$  halı üçün kvant quyusunun aşağıdakı mümkün ölçülər toplusunu almış olarıq:

$$r_0=0.205 a_0, r_0=1.269 a_0, r_0=2.168 a_0, r_0=2.972 a_0, r_0=3.515 a_0; \quad (4)$$

$$l=0 \text{ və } n_l=2 \text{ olsa,}$$

$$r_0=0.205 a_0, r_0=1.299 a_0, r_0=2.780 a_0, r_0=3.645 a_0, r_0=4.478 a_0, \quad (5)$$

burada  $a_0=9.067 \cdot 10^{-7} \text{ sm}$

Eyni ilə  $n>2$  - lər üçün də uyğun ifadələri almaq olar.

Ferminin qızıl qaydasının köməyi ilə müxtəlif hallar arasındakı optik keçidlər hesablanmışdır:

$$W(\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{2\pi\hbar e^2}{m_0^2 \omega V} \sum_{i,f} |\langle f|\mathbf{e}\mathbf{p}|i\rangle|^2 \delta(\varepsilon_f - \varepsilon_i - \hbar\omega) \quad (6)$$

Burada  $\langle f|\mathbf{e}_r\mathbf{p}|i\rangle$  matris elementidir,  $i, f$ , uyğun olaraq, başlanğıc və son halları işarə edir,  $\varepsilon_i, \varepsilon_f$  başlanğıc və son halların enerjisi,  $\omega$ ,  $\mathbf{e}_r$  düşən işığın tezliyi və polarizasiyası,  $\mathbf{p}$  elektronun impuls operatorudur və

$$\langle f|\mathbf{e}\mathbf{p}|i\rangle = \int \Psi^* \mathbf{e}\mathbf{p} \Psi dV, \quad (7)$$

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar} \quad E_n \text{ n-ci halın enerjisidir.} \quad (8)$$

Hesablamalar göstərir ki, baxılan mühitə yerləşdirilmiş atom üçün bu keçidlərin ehtimalı  $P \approx 2 \cdot 10^{-19}$  - a bərabərdir. Yarımkəçirici kvant nöqtələrində belə keçidlərin ehtimalı çox-çox böyük alınır. Məsələn,  $n=2$ ,  $l=1$  ( $r_0=0.205 a_0$ ) halından  $n=1$ ,  $l=0$  ( $r_0=0.167 a_0$ ) halına keçidin ehtimalı  $P=1.9 \cdot 10^{-14}$  - ə bərabərdir.

$n=2$ ,  $l=1$  ( $r_0=1.269 a_0$ ) halından  $n=1$ ,  $l=0$  ( $r_0=1.531 a_0$ ) halına keçid ehtimalı  $P=7.6 \cdot 10^{-19}$  - dur.

$n=2$ ,  $l=1$  ( $r_0=3.514 a_0$ ) halından  $n=1$ ,  $l=0$  ( $r_0=4.062 a_0$ ) halına keçid ehtimalı  $P=2.3 \cdot 10^{-20}$  -yə bərabərdir.

Əks keçidlərin ehtimalı xeyli kiçik alınır. Bu, kvant nöqtələrində inversiya halının yaradılmasını mümkün edir. Bu da, öz növbəsində, müxtəlif yarımkeçirici əsaslı kvant nöqtələrində müxtəlif tezlik intervallarında işləyən lazerlərin yaradılmasını təmin edir.

#### ƏDƏBİYYAT

- 1.J.H.Davies.The Physics of Low-dimensional semiconductors.Cambridge University Press, 1998
- 2.E.L.Ivchenko. Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures.(Alpha Science Intern.Ltd. Harrow, UK, 326 (2005)
- 3.Kryzhanovskaya, N.V., Zhukov, A.E., Maximov, M.V., et al., IEEE J. Selected TopicsQuantum Electron. 21, 1900905 (2015).
- 4.Moiseev, E., Kryzhanovskaya, N., Maximov, M., Opt. Lett. 43, 4554 (2018).
- 5.V.V. Mitin, V.A. Kochelap, Mitra Dutta, M. A. Stroschio . Introduction to Optical and Optoelectronic Properties of Nanostructures Cambridge University Press, 2019; 403 pages
6. P.Harrison, A.Valavanis. Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures. 2016, Edition 4, Wiley, 624p.
7. G. Iadonisi, G. Cantele, M. L. Chiofalo Introduction to Solid State Physics and Crystalline Nanostructures, Springer-Verlag Mailand. 2014, 707p.
- 8.Yu-Guo Guo. Nanostructures and Nanomaterials for Batteries: Principles and Applications, Springer Singapore, 2019, 393p.

#### ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ В СФЕРИЧЕСКОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ. ЛАЗЕРНЫЙ ЭФФЕКТ

Т.Г.ИСМАЙЛОВ, А.Ф.АСЛАНЛЫ

#### РЕЗЮМЕ

Рассмотрена задача об оптических переходах в квантовой точке основе полупроводников в сравнении с переходами в атомных спектрах. Показано, что в квантовой точке на основе полупроводника вероятность таких переходов на несколько порядков больше, чем это в атомах. Рассмотрен лазерный эффект.

**Ключевые слова:** квантовая точка, размерное-квантование, дискретность энергии, лазер.

#### OPTICAL TRANSITIONS IN A SPHERICAL QUANTUM POINT. LASER EFFECT

T.H.İSMAYILOV, A.F.ASLANLI

#### SUMMARY

The problem of optical transitions in a quantum dot based on semiconductors is considered in comparison with transitions in atomic spectra. It is shown that in a semiconductor-based quantum dot the probability of such transitions is several orders of magnitude higher than in atoms. The laser effect is considered.

**Keywords:** quantum dot, size quantization, energy discreteness, laser.

## LASER PULSE MANIPULATION IN OPTICAL FIBER

R.J.KASUMOVA<sup>1,\*</sup>, Z.H.TAGIEV<sup>2</sup>, Sh.Sh.AMIROV<sup>3</sup><sup>1</sup>*Baku State University*<sup>2,3</sup>*Azerbaijan Medical University**renajkasumova@gmail.com*

*An analysis is made of the influence of the inhomogeneity of the refractive index in an optical fiber on the generation of the second harmonic in the constant intensity approximation. The influence of the regular inhomogeneity of the medium on the character of the nonlinear process is revealed at different values of the pump intensity and losses in the medium. It is considered how the inhomogeneity of the medium affects the duration of the harmonic pulse in the case of a Gaussian pulse of pump wave. The possibility of controlling the duration of the output pulse of the harmonic in a regular inhomogeneous medium is shown. The results obtained are compared with the results in the constant field approximation and numerical calculation, as well as with the case of a homogeneous nonlinear medium.*

**Keywords:** regular refractive index inhomogeneity, optical fiber, pulse duration, constant intensity approximation.

Pacs: 42.62-b, 42.65-Ky, 42.70 Hj, 42.81-i

## 1. Introduction

In laser physics, the analysis of the interaction of optical waves in spatially inhomogeneous nonlinear media does not lose its relevance. This is due to the fact that the main element in frequency converters is nonlinear crystals, which are subject to high requirements for the homogeneity of the nonlinear material. This technological problem seriously limits the efficiency of the frequency converter. When growing and processing nonlinear materials, optical inhomogeneity occurs due to inhomogeneous composition, the presence of impurities, defects, etc. This results in an inconsistent refractive index along the entire length of the material. In the case of optical fiber, the sample is fabricated with a refractive index gradient where the core size and refractive index profile must be kept strictly constant. Note that dispersion in an optical fiber plays the main role in the propagation of short laser pulses.

A distinction is made between static inhomogeneity, when either the direction of the optical axis changes randomly, and regular inhomogeneity, when the change in the refractive index can be described analytically [1-2]. Both

types of inhomogeneity can be inherent in the nonlinear medium itself or arise as a result of parametric interaction under the action of laser radiation on a parameter of the medium. The degree of inhomogeneity directly affects the efficiency of the transducers as well as the parametric gain threshold.

Scientific research of the world's leading laboratories over the past decades has confirmed the promising nature of using optical fiber for information transmission. In particular, optical solitons are used for this purpose, i.e. laser pulses propagating practically without changing the pulse shape due to compensation arising from two opposite effects: dispersive broadening and narrowing of the spectrum of laser radiation during propagation in a nonlinear medium. In addition, using solitons, it is possible to control the parameters of ultrashort optical pulses [3-4].

In an optical fiber, in contrast to a bulk medium, the transverse dimension of the laser radiation is retained along the entire propagation length along the optical fiber. Therefore, due to minimal losses and high field concentration, a significant increase in conversion efficiency is observed. These two facts also lead to large values of the interaction length. Therefore, fiber-optic sensors, devoid of the disadvantages of traditional electrical sensors, are quite successfully used to monitor oil wells [5-6].

In optical fibers, the squeezed states of light, the harmonic generation, and the propagation of optical solitons were studied in the approximation of undepleted pumping, i.e. in the constant field approximation (CFA) or numerically [3-4]. However, an analytical approach to solving coupled wave equations is preferable, since it is possible to understand the qualitative picture of the nonlinear interaction of waves. Analysis of nonlinear processes shows that phase relations between interacting waves play an essential role [7-10], which is not taken into account in the CFA. In this work, we used the constant intensity approximation (CIA) [11], which takes into account the depletion of the pump wave and changes in the phases of all interacting waves. In this approximation, we have already analyzed nonlinear processes at SHG and CARS in an optical fiber, the effects of the self – phase and cross – phase modulations [12-13].

In the present work, a non-stationary SHG in a spatially inhomogeneous optical fiber is investigated in CIA. The influence of the regular inhomogeneity of the medium on the character of the nonlinear process is revealed at different values of the pump intensity. It is considered how the inhomogeneity of the medium affects the duration of the second harmonic pulse. A comparison is made with the case of a homogeneous nonlinear medium.

## **2. Theory**

Let us consider a non-stationary SHG process in an optical fiber with an optical inhomogeneity. The study will be carried out in the first approximation

of the theory of dispersion, i.e. disregarding the effect of dispersive spreading of pulses as the waves propagate. In this case, the truncated equations describing the generation of the second harmonic with account for losses have the form [3, 12]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial A_1}{\partial z} + \frac{1}{u_1} \frac{\partial A_1}{\partial t} + \delta_1 A_1 &= -i\gamma(|A_1|^2 + 2|A_2|^2)A_1 - i\beta_1 A_1^* A_2 \exp[i\Delta_0 z + i\psi(z)], \\ \frac{\partial A_2}{\partial z} + \frac{1}{u_2} \frac{\partial A_2}{\partial t} + \delta_2 A_2 &= -i\gamma(|A_2|^2 + 2|A_1|^2)A_2 - i\beta_2 A_1^2 \exp[-i\Delta_0 z - i\psi(z)]. \end{aligned} \quad (1)$$

Here  $A_{1,2}$  are the complex amplitudes of the pump wave ( $\omega_1$ ) and second harmonic ( $\omega_2 = 2\omega_1$ ),  $u_{1,2}$  are the group velocities of the corresponding waves,  $\delta_{1,2}$  are the linear losses of the interacting waves,  $\gamma$  is an average value of nonlinear coupling coefficient of the interacting waves where the contribution is imported by the self – phase and cross – phase modulation processes,  $\beta_1 = \gamma_{SH}^* / 2$ ,  $\beta_2 = \gamma_{SH}$ ,  $\gamma_{SH} = 3\omega_1 \epsilon_0^2 \alpha_{SH} f_{112} \mathcal{X}^{(3)} |E_p|^2 |E_{SH}|$ ,  $\epsilon_0$  is a dielectric constant of vacuum,  $\alpha_{SH}$  is a constant, depending on the microscopic process,  $f_{112}$  is an integral of the overlapping, defining through mode distribution for optical fields and average on transverse coordinates  $x$  and  $y$  [14],  $E_p$  is a field of pumping at frequency  $\omega_p$ ,  $E_{SH}$  is a field of a weak seed second harmonic at frequency  $2\omega_p$ .  $\Delta_0 = k_2 - 2k_1 - \Delta(z)$ , where  $\Delta_0$  and  $\Delta(z)$  denote the constant and variable parts of the wave parts of the phase detuning between the interacting waves, respectively, and  $\psi(z) = \int_0^z \Delta(z') dz'$ . For further simplification the above overlap integrals  $f_{ijk} \cong f_{112} \cong 1/A_{eff}$  ( $i, j, k = 1, 2, 3$ ) ( $A_{eff}$  is the effective area of a fiber core) are taken identical, that is valid for single-mode waveguides [3].

In the case when only a pump wave is present at the input to the left of the fiber, the boundary conditions are written in the form

$$A_1(z=0) = A_{10}(t), \quad A_2(z=0) = 0 \quad (2)$$

The analysis is carried out in a quasistatic approximation  $u_1 = u_2 = u$ . In this case, in (1), it is expedient to pass from variables  $z$  and  $t$  to new variables  $z$  and  $\eta = t - z/u$ . Then, rewriting (1) for new variables, we obtain

$$\begin{aligned}\frac{\partial A_1}{\partial z} + \delta'_1 A_1 &= -i\beta_1 A_1^* A_2 \exp[i\Delta_0 z + i\psi(z)], \\ \frac{\partial A_2}{\partial z} + \delta'_2 A_2 &= -i\beta_2 A_1^2 \exp[-i\Delta_0 z - i\psi(z)],\end{aligned}\quad (3)$$

where

$$\delta'_1 = \delta_1 + i\gamma(|A_1|^2 + 2|A_2|^2), \quad \delta'_2 = \delta_2 + i\gamma(|A_2|^2 + 2|A_1|^2)$$

From (3) for  $A_2(z)$ , one can obtain the following second-order differential equation

$$\frac{d^2 A_2}{dz^2} + [\delta'_2 + 2\delta'_1 + i\Delta_0 + i\Delta(z)] \frac{dA_2}{dz} + [2\Gamma^2 + 2\delta'_1 \delta'_2 + i\delta'_2 \Delta_0 + i\delta'_2 \Delta(z)] A_2 = 0, \quad (4)$$

where  $\Gamma^2 = |\beta_1| |\beta_2| I_1(z, \eta) = \frac{|\gamma_{SH}|^2}{2} I_1(z, \eta)$ ,  $I_1 = A_1 \cdot A_1^*$ . Here  $I_1(z, \eta)$  is a function of two variables. This makes it difficult to obtain a rigorous analytical solution for  $A_2(z)$ . Assuming that  $I_1(z, \eta)$  is only a function of one variable  $\eta$ , i.e.  $I_1(z, \eta) = I_1(\eta)$ , equation (4) can be solved. This approach is consistent with CIA, since no restrictions are imposed on the change in the pump wave phase.

After replacing  $A_2 = V \exp[-i\psi(z)]$  from (4) we obtain a differential equation for  $V(z)$ :

$$\frac{d^2 V}{dz^2} + [\delta'_2 + 2\delta'_1 + i\Delta_0 - i\Delta(z)] \frac{dV}{dz} + [2\Gamma^2 + 2\delta'_1 \delta'_2 + \Delta_0 \Delta(z) + i\delta'_2 \Delta_0 - i2\delta'_1 \Delta(z) - i \frac{d\Delta(z)}{dz}] V = 0 \quad (5)$$

In this case, the boundary conditions (2) for  $V(z)$  are written in the form  $V(z=0) = 0$ ,  $\frac{dV}{dz}(z=0) = -i\beta_2 A_{10}^2(\eta)$ . Further consideration will be carried out for a regular linearly inhomogeneous medium, i.e.  $\Delta(z) \sim \cdot z$ . Let's define  $\Delta(z) = \alpha \cdot z$ , where  $\alpha$  is a constant value. As a result, from (5) we obtain ( $\Delta_0 = 0$ )

$$\frac{d^2 V}{dz^2} + [\delta'_2 + 2\delta'_1 - i\alpha z] \frac{dV}{dz} + [2\Gamma^2 + 2\delta'_1 \delta'_2 - i\alpha - i2\alpha \delta'_1 z] V = 0 \quad (6)$$

To solve the resulting second-order differential equation, we make the change  $V(z) = f(\xi) \cdot \exp(-2\delta'_1 z)$ , where  $\xi = \sqrt{\alpha}(z + i \frac{\delta'_2 - 2\delta'_1}{\alpha})$ . For the function  $f(\xi)$ , we obtain the Weber equation [15]:

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} - \xi \frac{df}{d\xi} - lf = 0, \quad (7)$$



where  $l = (1 + i2 \frac{\Gamma^2}{\alpha})$ . The solution to this equation is:

$$f(\xi) = c_1 \left[ 1 + \frac{l}{2!} \xi^2 + \frac{l(l+2)}{4!} \xi^4 \right] + c_2 \left[ \xi + \frac{l+1}{3!} \xi^3 + \frac{(l+1)(l+3)}{5!} \xi^5 \right]. \quad (8)$$

Hence, the complex amplitude of the harmonic has the form  $A_2(z) = V \cdot \exp(-i\psi(z)) = f(\xi) \cdot \exp[-2\delta_1'z - i\psi(z)]$ . After substituting the values of the variables taking into account the boundary conditions in the final version for the complex amplitude of the second harmonic, as a function  $z$ , we obtain:

$$A_2(z) = -i\beta_2 I_{10}(\eta) \cdot z \cdot \left[ 1 - \frac{(|\alpha| - i\Gamma^2)}{3} z^2 + \frac{(|\alpha| - i\Gamma^2)(2|\alpha| - i\Gamma^2)}{30} z^4 \right] \cdot \exp[-2\delta_1'z - i\psi(z)].$$

As a result, the relative intensity of conversion to the second harmonic in a regular inhomogeneous medium is

$$I_2(z)/I_{10} = (|\beta_2|z)^2 \cdot I_{10}(\eta) \left\{ \left[ 1 - \frac{1}{3}|\alpha|z^2 + \frac{1}{30}(2|\alpha|z^2 - \Gamma^4 z^4)^2 + \left[ \frac{1}{3} - \frac{1}{10}|\alpha|z^2 \right]^2 \Gamma^4 z^4 \right] \right\} \cdot \exp(-4\delta_1 z). \quad (9)$$

In the absence of non-linear medium inhomogeneity, i.e.  $\Delta(z) = 0$  ( $\alpha = 0$ ), for a homogeneous medium we obtain  $I_2^{CIA}(z) = |\beta_2|^2 I_{10}^2(\eta) z^2 \cdot \exp(-4\delta_1 z) \left\{ 1 + \frac{(\Gamma z)^4}{45} \left[ 2 + \frac{(\Gamma z)^4}{20} \right] \right\}$ . In the CFA, when  $\beta_1 = 0$

( $\Gamma = 0$ ) and  $\delta_1 = 0$ , from (9) we obtain  $I_2^{CFA}(z) = |\beta_2|^2 I_{10}^2(\eta) z^2$ , and in the stationary case  $I_2^{CFA}(z) = |\beta_2|^2 I_{10}^2 z^2$  [16].

Let us analyze expression (9), obtained in the CIA, for the cases of a weak and strong inhomogeneous medium with a pulsed character of the pump wave. Let us assume that the pump wave at the left entrance to the optical fiber has the form of a Gaussian beam  $A_{10}(\eta) = A_{10} \exp(-\eta^2 / 2\tau_1^2)$ . In this case, the relation for  $\Gamma z$  in CIA has the form  $\Gamma z = \sqrt{|\beta_{||}||\beta_2| I_{10}(\eta) z} = \sqrt{|\beta_{||}||\beta_2| I_{10}} \cdot z \exp(-\eta^2 / 2\tau_1^2) = \Gamma(0)z$ , where  $\Gamma(0) = \sqrt{|\beta_{||}||\beta_2| I_{10}}$ ,  $I_{10} = A_{10} \cdot A_{10}^*$ .

In the case of a weak inhomogeneous medium  $|\alpha|z^2 < 1$  and small interaction lengths  $\Gamma z < 1$ , from (9) we obtain

$$I_2(z) \approx \left[ |\beta_2| I_{10}(\eta) z \right]^2 \cdot \left( 1 - \frac{2}{45} \Gamma^4 z^4 \right) \cdot \exp(-2\delta_2 z), \quad (10)$$

hence for CFA  $I_2(z)/I_{10} \approx \left[ |\beta_2| I_{10}(\eta) z \right]^2$ . Taking into account the pulsed nature of pumping, we rewrite (10) in the form

$I_2(z)/I_{10} \approx \exp\left[(-\eta^2/\tau_1^2) \cdot \left(1 - \frac{4}{45}\Gamma^4(0)z^4\right)\right]$ . It can be seen that an increase in the input pulse duration is determined by the following relation  $\tau_{2in\text{hom}} = \tau_1 / \sqrt{1 - \frac{4}{45}\Gamma(0)^4 z^4}$ . In the CFA, this effect of changing the pulse duration is not detected  $\tau_{2in\text{hom}} = \tau_1$ , since  $\Gamma = 0$ .

In a strong inhomogeneous medium  $|\alpha|z^2 > 1$  and small interaction lengths  $\Gamma z < 1$ , from (9) we obtain

$$I_2(z) \approx \left[ \beta_2 |I_{10}(\eta)z| \right]^2 \cdot \left( 1 - \frac{2}{3}|\alpha|z^2 + \frac{11}{45}|\alpha|^2 z^4 - \frac{2}{45}|\alpha|^3 z^6 - \frac{1}{45}|\alpha|z^2 \Gamma^4 z^4 \right) \cdot \exp(-2\delta_2 z) \quad (11)$$

Hence, in the CFA, we obtain

$$I_2(z) \approx \left[ \beta_2 |I_{10}(\eta)z| \right]^2 \cdot \left( 1 - \frac{2}{3}|\alpha|z^2 + \frac{11}{45}\alpha^2 z^4 - \frac{2}{45}|\alpha|^3 z^6 \right) \quad \text{In a homogeneous medium } I_2(z) \approx \left[ \beta_2 |I_{10}(\eta)z| \right]^2 \cdot \exp(-2\delta_2 z).$$

From (11), to analyze the duration of the second harmonic pulse, we obtain  $I_2(z)/I_{10} \approx \exp\left[(-\eta^2/\tau_1^2) \cdot \left(1 - \frac{2}{15}|\alpha|z^2 \Gamma(0)^4 z^4\right)\right]$ . Whence the duration of the output pulse of harmonic radiation in a strong inhomogeneous medium is equal to  $\tau_{2in\text{hom}} = \tau_1 / \sqrt{1 - \frac{2}{15}|\alpha|\Gamma(0)^4 z^4}$ , and in a homogeneous medium  $\tau_{2\text{hom}} = \tau_1$ . This effect is absent in the CFA ( $\Gamma = 0$ ).

Let us estimate the change in the pulse duration for different inhomogeneous media. Suppose  $\Gamma(0)z = 0.9$  then in a weak inhomogeneous medium, assuming  $|\alpha|z^2 = 0.3$ ,  $\tau_{2in\text{hom}} = 1.0305 \cdot \tau_1$ . In a strong inhomogeneous medium,  $|\alpha|z^2 = 3$ , let us get  $\tau_{2in\text{hom}} = 1.1644 \cdot \tau_1$ . As expected, with an increase in the degree of inhomogeneity of the optical system, the Q-factor of the system, by analogy with the Q-factor of an optical resonator, decreases, which leads to broadening of the second harmonic pulse excited in the given system.

---

In the case of neglecting the effects of self – phase and cross – phase modulations and losses ( $\delta_2' = 2\delta_1' = 0$ ), Eq. (6) is investigated in [17].

### 3. Results and Discussion

Let us carry out a numerical analysis of Eq. (9) obtained in the CIA. In Fig. 1 shows the time dependences of the relative intensity of the second har-

monic  $I_2/I_{10}$  for different values of the problem parameters. With an increase in the degree of inhomogeneity of the nonlinear medium (curves 3, 2, and 1), the efficiency of conversion of the pump wave energy into a harmonic wave decreases. At large values of  $\alpha z^2$ , a flattening of the curve is observed, i.e. saturation takes place (curve 1). Along with this process, the ratio also decreases due to a change in the pump wave phase, which is taken into account in the CIA. The calculation of the dependence in the CFA (curve 5) is also given here. Comparison of curves 4 and 5, calculated with the same parameters of the problem, shows a lower efficiency of the process in the CIA than in the CFA. This is explained by the nonzero parameter  $\beta_1$  in the CIA, which takes into account the reverse action of the excited wave on the pump wave. Indeed, in contrast to the CFA, where the pump wave amplitude is unchanged, the CIA takes into account the change in the pump wave, which leads to a decrease  $I_2/I_{10}$ . In Fig. 2 shows how an increase in the pump intensity (curves 1 and 2) and a decrease in losses (curves 2 and 3) lead to an increase in the conversion efficiency.

As the degree of inhomogeneity of the medium increases, as expected, the pulse duration increases. Figure 3 shows how the pulse duration changes depending on the parameters of the problem, according to the analysis of equations (10) and (11). Indeed, according to the results obtained in CIA in the case of a strong inhomogeneity, the degree of regular inhomogeneity through an exponential dependence affects the pulse duration, increasing it (compare the solid and marked curves). Through the parameter  $\Gamma$ , the change in the pump intensity directly affects the duration of the second harmonic output pulse. This result cannot be obtained in the CFA, since in this approximation there is no exponential dependence, due to the condition  $\Gamma = 0$  (dashed curve).

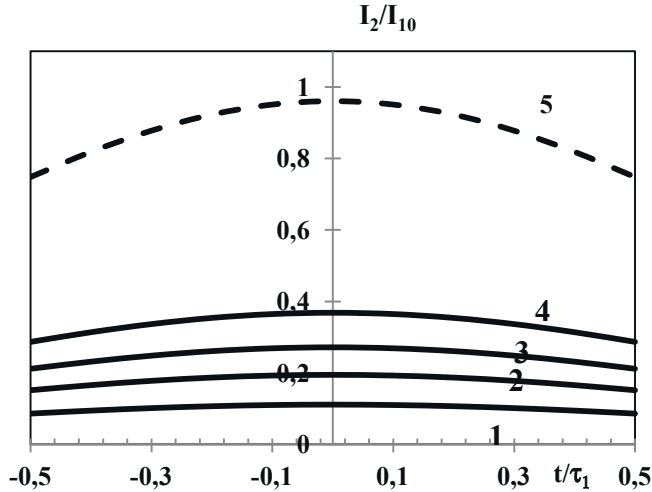
As a result of the nonlinear interaction of optical waves, simultaneously with the saturation process, the broadening of the second harmonic pulse occurs in a regular inhomogeneous medium as compared with the case of a homogeneous medium. This makes it possible to manipulate the duration of the output harmonic pulse in a regular inhomogeneous medium by changing the pump intensity at the input.

Thus, the possibility of controlling the parameter of the output pulse of the harmonic by a nonlinear optical method is shown. In a regular inhomogeneous medium, by controlling the input pump intensity, one can manipulate the parameter of the output harmonic radiation.

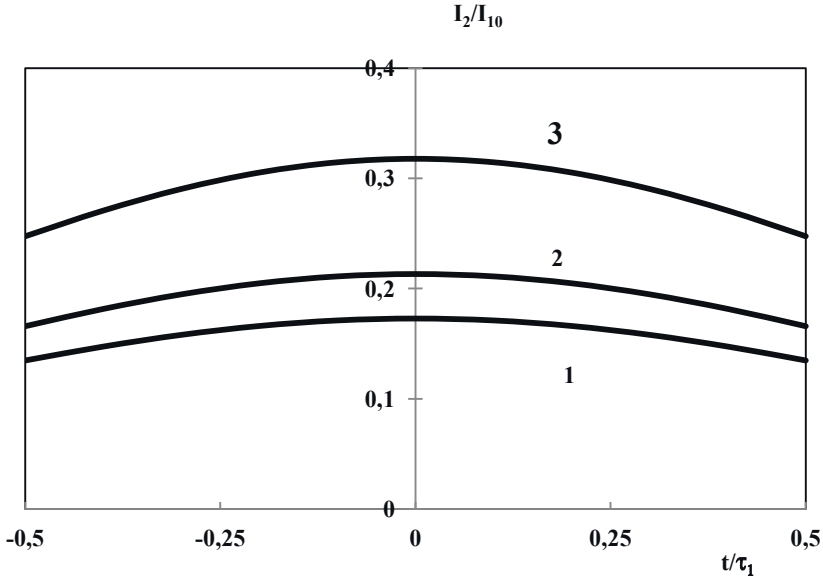
## Conclusion

Thus, in the constant intensity approximation, we have studied SHG in an optical fiber with a linear regular inhomogeneity of the refractive index. An analytical expression is obtained for the intensity of the second harmonic wave taking into account the effects of self-phase and cross-phase modulations of pump and harmonic waves. The analytical and numerical results are compared with the results in the CFA. Two effects are found that cannot be obtained and studied in the CFA: the broadening of the second harmonic pulse in a regular inhomogeneous medium as compared to the case of a homogeneous medium and the effect of saturation of the second harmonic intensity in the process of frequency conversion. The possibility of manipulating the duration of the output harmonic pulse in a regular inhomogeneous medium by changing the pump intensity at the input is shown.

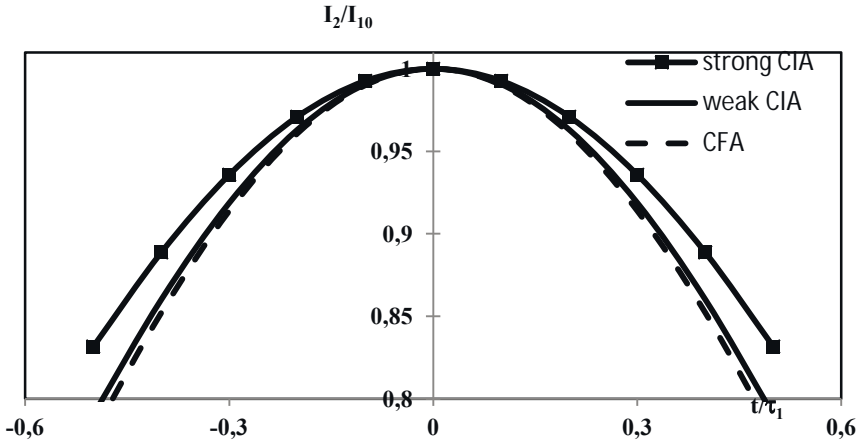
The case of a nonlinear regular inhomogeneity of the refractive index will be the subject of the next article.



**Fig. 1.** Time dependence of the relative intensity of the second harmonic  $I_2 / I_{10}$  at  $\Gamma z = 0.98$  for  $\delta_1 z = \delta_2 z = 0.3$  (curves 1-3) and 0 (curves 4-5),  $|\alpha| z^2 = 0$  (curve 3), 0.5 (curve 2) and 3.5 (curves 4-5). Calculations were carried out in the CIA (curves 1-4) and in the CFA (dashed curve 5).



**Fig. 2.** Dependence of the relative intensity of the second harmonic  $I_2 / I_{10}$  on time  $t / \tau_1$  at  $|\alpha|z^2 = 4$  for  $\Gamma z = 0.7$  (curve 1), 0.98 (curves 2-3),  $\delta_1 z = \delta_2 z = 0.1$  (curves 1 and 3) and 0.2 (curve 2). Calculations were carried out in the CIA.



**Fig. 3.** Dependence of the relative intensity of the second harmonic  $I_2 / I_{10}$  on time  $t / \tau_1$  at  $|\alpha|z^2 = 6$  for the case of a strong inhomogeneity of the medium,  $\Gamma z = 0$  (for the CFA), 0.9 (for the CIA with a weak and strong inhomogeneous medium).

## REFERENCES

1. F.S. Ghen. Optically induced change of refractive indices in  $\text{LiNbO}_3$  and  $\text{LiNaO}_3$ . Appl. Phys. 1960, **40**(8), 3389-3396.
2. S.A.Akhmanov, D.P.Krindach, A.P.Sukhorukov, R.V.Khohlov. JETP Letters, 1967. 6(2), 509-513.
3. G. Agrawal, Nonlinear Fiber Optics. Academic, San-Diego, Calif. (1995).
- 4 L. F. Mollenauer, J. P. Gordon. Solitons in Optical Fibers. Fundamentals and Applications. Elsevier, 2006. 296p.
5. R. Cannon, F. Aminzadeh, University of Southern California. Distributed Acoustic Sensing: State of the Art. Paper SPE 163688 Presented at the 2013 SPE Digital Energy Conference and Exhibitions held in The Woodlands, Texas, USA, 5-7 March 2013 p. 1-10
6. A. Bukhamsin, R. Horne (2014) Paper SPE 170679-MS Presented at the 2014 SPE Annual Technical Conference and Exhibition held in Amsterdam, the Netherlands, 27-29 October 2014 p. 1-19.
7. N. Blombergen. Nonlinear Optics. W.A. Benjamin, Inc. New York-Amsterdam, (1965)
8. Y.R. Shen. Principles of Nonlinear Optics, Wiley, New York, 1984
9. M.D. Reid, P.D. Drummond, Phys. Rev. Lett., **60**, 2731 (1988).
10. R.W. Boyd, Nonlinear optics. San Diego, Academic Press, 2008, -613p.
11. Z.H. Tagiev, and A.S. Chirkin, Fixed intensity approximation in the theory of nonlinear waves, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **73** (1977) 1271-1282; Z.H.Tagiev, R.J.Kasumova, R.A.Salmanova, N.V.Kerimova J. Opt. B: Quantum Semiclas. Opt. **3**, 84 (2001).
12. Z.H.Tagiev, R.J.Kasumova. Theoretical studies on frequency doubling in glass optical fibers in constant-intensity approximation. Optics & Communications, 2006, v.261, p.258-265.
13. R.J. Kasumova, N.V. Kerimli, G.A. Safarova. Phase effects on coherent anti-Stokes Raman scattering. J. of Applied Spectroscopy.
14. J.G.Gabriagues, L.Fersing, in Digest of Conference on Lasers and ElectroOptics, OSA, Washington, D.C., 1984, p.176. J.G.Gabriagues, H. Fevrier, Opt. Lett., **12**, 720 (1987).
15. E. Kamke. Differential Gleichungen. Leipzig, 1959, 576p.
16. V.G.Dmitriev, L.V.Tarasov. Applied Nonlinear Optics. Fizmatlit, Moscow, 2004, 360.
17. Z.H.Tagiev, A.S.Chirkin. Kvantovaya Elektronika (Moscow), **4**(7) (1977), 1503-1508.
18. H.Bateman, A. Erdelyi. Higher transcendental functions. New-York, Mc Graw –Hill Book Company, Inc. 1953, v.1, 296p.

## OPTİK LİFLƏRDƏ LAZER İMPULSLARI İLƏ İDARƏ OLUNMA

R.C.QASIMOVA, Z.H.TAĞIYEV, Ş.Ş.ƏMİROV

### XÜLASƏ

Optik liflərdə sındırma əmsalının qeyri-bircinsliliyinin ikinci harmonikanın qenerasiyasına təsiri sabit intensivlik yaxınlaşmasında təhlil edilmişdir. Mühitin müntəzəm qeyri-bircinsliliyinin qeyri-xətti prosesin xarakterinə təsiri güclü dalğa intensivliyinin və mühitdəki itgilərin müxtəlif qiymətlərində aşkar olunmuşdur. Güclü dalğanın Qauss formalı impulsu üçün mühitin qeyri-bircinsliliyinin harmonik impulsun davametmə müddətinin təsirinə baxılmışdır. Müntəzəm qeyri-bircinsliliyə malik mühitin çıxışında harmonik impulsun davametmə müddətinin idarə olunmasının mümkünlüyü göstərilmişdir. Alınmış nəticələr sabit amplitud yaxınlaşması və dəqiq həll ilə, həmçinin bircins qeyri-xətti mühit üçün alınmış nəticələrlə müqayisə edilmişdir.

**Açar sözlər:** sındırma əmsalının müntəzəm qeyri-bircinsliliyi, optik lif, impulsun davametmə müddəti, sabit intensivlik yaxınlaşması.

## МАНИПУЛЯЦИЯ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ В ОПТИЧЕСКОМ ВОЛОКНЕ

Р.Дж.КАСУМОВА, З.А.ТАГИЕВ, Ш.Ш.АМИРОВ

### РЕЗЮМЕ

Проведен анализ влияния неоднородности показателя преломления в оптоволокне на генерацию ВГ в приближении заданной интенсивности. Выявлено влияние регулярной неоднородности среды на характер нелинейного процесса при различных величинах интенсивности накачки и потерь в среде. Рассмотрено как неоднородность среды действует на длительность импульса ВГ при гауссовой форме импульса волны накачки. Показана возможность управления длительностью выходного импульса гармоники в регулярной неоднородной среде. Проведено сравнение полученных результатов с результатами в приближении заданного поля и численным счетом, а также со случаем однородной нелинейной среды.

**Ключевые слова:** регулярная неоднородность показателя преломления, оптоволокно, длительность импульса, приближение заданной интенсивности.

**UOT 533.95****HELIUM PLAZMASININ SƏRBƏSTÇATMA REJİMİNDƏN  
AMBİPOLYAR DİFFUZIYA REJİMİNƏ KEÇİDİN İMPEDANSI****T.X.HÜSEYNOV, Q.İ.QƏRİBOV,  
V.H.SƏFƏROV, E.A.RƏSULOV***Bakı Dövlət Universiteti**htarlan@mail.ru, garibovgio@yahoo.com, eldarasul@gmail.com*

*İşdə spektroskopiya üsulu ilə helium plazmasının sərbəstçatma rejimindən ambipolyar diffuziya rejiminə keçidinin impedansı tədqiq edilmişdir. Məlum olmuşdur ki, boşalma cərəyanının modullaşma tezliyinin 10 kHs-dən böyük qiymətində impedansın ölçülmüş və hesablanmış spektrlərinin gedişi praktiki olaraq eyni xarakterlidir. Cərəyanın modullaşmasının dərinlik əmsalı kifayət qədər kiçik olduqda həm təcrübi, həm də nəzəri əyriyə maksimum müşahidə olunur, yəni impedansın modulu artır. Boşalma cərəyanının modullaşma dərinliyi artdıqda rezonans hadisəsi güclənir. Rezonansın bu qaydada dəyişməsinin səbəblərindən biri kimi cərəyanın modullaşma dərinliyinin artması ilə impedansın spektrində qeyri-xətti effektlərin təsirinin artmasını göstərmək olar.*

**Açar sözlər:** qaz boşalması plazması, sərbəstçatma rejimi, ambipolyar rejim, impedans spektroskopiyası, qodoqraf, elektronun yaşama müddəti.

Müasir dövrdə plazmadan müxtəlif sahələrdə geniş istifadə edilir. Bu sahələrdən biri də təsirsiz qazların əlavə edilməsi ilə plazma dəstələrinin yaradılmasıdır. Belə dəstələrin köməyi ilə müxtəlif metal səthlərinin işlənməsi prosesi həyata keçirilir. Plazma dəstəsinə təsirsiz qaz əlavə etdikdə onun metal səthlərinə təsirinin effektivliyi yüksəlir. Bu məqsəd üçün helium təsirsiz qazından istifadə etdikdə plazma dəstəsinin gücü və intensivliyi bir qədər də yüksəlir. Helium təsirsiz qaz boşalması plazmasının spektroskopik və dinamik tədqiqatları bu sahədə öz töhvəsini verə bilər [1]. Odur ki, plazma dəstəsində heliumun spektral xətlərinin intensivliyini artırmaq üçün plazmanın praktikada mümkün olan müxtəlif mövcudluq hallarından daha effektiv rejimin seçilməsi vacib şərtlərdən biridir. Təqdim etdiyimiz bu iş də həmin problemə həsr edilmişdir. Helium plazmasının sərbəstçatma rejimindən ambipolyar diffuziya rejiminə keçid şəraitində impedans spektroskopiyaya üsulu ilə helium plazması öyrənilmiş və məlum olmuşdur ki, boşalma cərəyanının modullaşma dərinlik əmsalı kifayət qədər kiçik olduqda, aşağı tezliklər oblastında eksperimental



əyrilərdə maksimum müşahidə olunur və nəticədə, impedansın modulu artır.

Boşalma cərəyanının kiçik qiymətlərində, aşağı təzyiqli təsirsiz qaz boşalması plazmasında yüklü zərrəciklərin yaranmasının başlıca mexanizmini əsas səviyyədə elektron zərbəsi ilə atomların ionlaşması prosesi oynayır. Yüklü zərrəciklərin yox olmasında isə onların plazmanı hüdudlandıran qabın divarlarına sərbəst düşməsi və burada rekombinasiyası əsas rol oynayır. Yüklü zərrəciklərin bir qədər yüksək sıxlıqlarında boşalmada ambipolyar diffuziya rejimi formalaşır. Sərbəst zərrəciklərin radial istiqamətdəki hərəkəti yavaşdır, boşalmada elektronların orta yaşama müddəti böyüyür yüksəlir. Bu isə sərbəstçatma rejimindən ambipolyar diffuziya rejiminə keçidə uyğun gəlir və boşalmanın voltamper xarakteristikası (VAX) düşən xarakterli olur. Bizim fikrimizcə, boşalmada VAX-ın mənfi (enmə) faktorunun yaranmasına səbəb, plazma daxilində müsbət fəza yüklərinin miqdarının artması və borunun divarlarında mənfi yüklərin yığılmasıdır. Əks işarəli yüklərin ayrılması radial elektrik sahəsi yaradaraq, elektronların divar istiqamətindəki hərəkətini ləngidir və plazmanın keçiriciliyini artırır. Ona görə də sərbəstçatma rejimindən ambipolyar diffuziya rejiminə keçidin öyrənilməsi və bu şəraitdə plazmanın dinamik xassələrinin tədqiqi böyük maraq kəsb edir [2-5].

Biz problemi həll etmək üçün yüklü zərrəciklərin sərbəstçatma rejimindən ambipolyar diffuziya rejiminə keçidi halında boşalmanın müsbət sütununun vahid uzunluğuna düşən kompleks dinamik müqaviməti hesablayıb və alınan qiymətləri kompleks dinamik müqavimətin təcrübi nəticələrinin qiymətləri ilə müqayisə etmişik. Bu müqayisə zamanı hər iki nəticələrin uyğun gəlməsinə görə deyə bilərik ki, sərbəstçatma rejimindən ambipolyar diffuziya rejiminə keçid üçün təklif etdiyimiz izahat doğrudur.

Sərbəstçatma rejimindən ambipolyar diffuziya rejiminə keçidə uyğun olan qaz boşalması plazmasının parametrlərini elektronların balans tənliklər sistemindən tapmaq olar:

$$\frac{dn_e}{dt} = N_0 \alpha n_e - \frac{n_e}{\tau_a}, \quad (1)$$

$$j = g n_e e b_e E. \quad (2)$$

Burada  $n_e$ ,  $b_e$  – elektronların konsentrasiyası və yürüklüyü,  $N_0$  – neytral atomların konsentrasiyası,  $\alpha$  – birbaşa ionlaşma reaksiyasının sürətini xarakterizə edən əmsal,  $\tau_a$  – elektronların ambipolyar diffuziya yaşama müddəti,  $j$  – boşalma cərəyanının sıxlığı,  $E$  – aksial elektrik sahəsinin intensivliyi,  $g$  – yüklü zərrəciklərin radial paylanması nəzərə alan faktordur.

Adətən boşalmada elektronun ambipolyar diffuziya rejimində yaşama müddətinin  $\tau_a$  – sabit olduğu hesab edilir və o, aşağıdakı ifadə ilə təyin olunur:

$$\tau_a = \frac{1}{\mu^2 D_a}. \quad (3)$$

Burada  $\mu = \frac{2,405}{r_0}$ ,  $D_a$  – ambipolyar diffuziya əmsalı olub,  $D_a = b_i \left( \frac{kT_e}{e} + \frac{kT_i}{e} \right) \approx b_i \frac{kT_e}{e}$  ifadəsi ilə təyin edilir. Boşalma cərəyanının qiyməti artdıqca, ke-

çid oblastında radial elektrik sahəsi, elektronların yaşama müddəti və konsentrisiyası artır, elektronların temperaturu yüksəlir, diffuziya əmsalı isə kiçilir. Ona görə də elektronun orta yaşama müddətini:

$$\tau = \frac{\tau_a}{1 + \gamma \frac{kT_e}{ne}} \quad (4)$$

ifadəsi ilə təyin etmək olar. Burada  $\gamma = \frac{\varepsilon_0}{e\Lambda^2}$ ,  $\varepsilon_0$  – elektrik sabitidir.

(1 – 2) tənliklər sistemində (3) ifadəsini nəzərə alsaq, dinamik volt-ampere xarakteristikanın aşağıdakı şəkildəki ifadəsini alırıq:

$$\frac{1}{j} \frac{dj}{dt} - \frac{1}{u} \frac{du}{dt} = N_0 \alpha n - \frac{1 + \beta \frac{u^2}{j}}{\tau_a}. \quad (5)$$

Burada  $\beta = \frac{bg}{L}$ ,  $g = \frac{\lambda}{\sqrt{\alpha PL}}$ ,  $\lambda$  – elektronların sərbəst qaçış yolunun uzunluğu,  $\alpha$  – orta istilikötürülmə əmsalındır.

(5) diferensial tənliyini xətiləşdirsək, alırıq:

$$\frac{1}{j_0} \frac{dj_1}{dt} - \frac{j_1}{A} = \frac{1}{u_0} \frac{du}{dt} + \frac{u}{B}. \quad (6)$$

(6) ifadəsində:

$$\frac{1}{A} = \frac{\mu_0 \beta u_0^3}{j_0^2}, \quad \frac{1}{B} = \frac{\mu_0 u_i}{g u_0} - \frac{\mu_0 \beta u_0^2}{j_0} \left( 4 + \frac{u_i}{g u_0} \right), \quad \mu_0 = \frac{b e g}{\Lambda^2}.$$

İşarələmələrini nəzərə alsaq, onda boşalmanın harmonik həyəcanlanması halında, müsbət sütunun vahid uzunluğuna düşən impedansı üçün alırıq:

$$Z = \frac{u_1}{j_1} = R + jX. \quad (7)$$

Burada

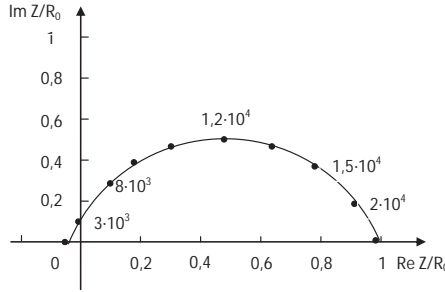
$$R = \frac{\frac{\omega^2}{j_0 u_0} - \frac{1}{j_1 u_1}}{\frac{1}{u_1^2} + \frac{\omega^2}{u_0^2}}, \quad X = \frac{\omega \left( \frac{1}{j_0 u_0} + \frac{1}{j_1 u_0} \right)}{\frac{1}{u_1^2} + \frac{\omega^2}{u_0^2}}. \quad (8)$$

Helium qazı boşalması üçün impedans spektrinin hesablanmış nəticələri şəkil 1-də göstərilmişdir. Burada impedansın ayrılarında kiloherslərlə harmonik həyəcanlanma tezliyinin qiymətləri verilmişdir. Şəkildən görünür ki, aşağı tezliklər oblastında impedansın həqiqi hissəsi mənfi qiymətə malikdir, yəni boşalma neqatron xassəlidir.

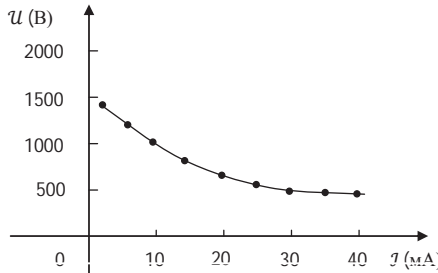
Helium qazının  $p = 1$  Tor təzyiqində boşalmanın ölçülmüş statik VAX-ı şəkil 2-də göstərilmişdir. Şəkildən görüldüyü kimi, cərəyan artdıqca, boşalmanın gərginlik düşgüsü azalır. Boşalma cərəyanının 30 mA-dan böyük qiymətlərində xarakteristikanın düşmə sürəti yavaşdır. Bu nəticə ambipolyar sahənin formalaşmasını və normal səyriyəni boşalmaya keçidin baş verdiyini göstərir.

İmpedans xarakteristikalarını ölçmək məqsədi ilə statik VAX-da boşalma cərəyanının  $J_b = 20$  mA qiymətinə uyğun işçi nöqtə seçmişik. İmpedans spektri [2]-də təsvir edilən qurğuda ölçülmüşdür. Bu qurğuda harmonik rəqslər generatorundan elektrik dövrəsinə daxil olan modullaşmış siqnal bölüşdürücü kondensatorlardan keçməklə, boşalma dövrəsində yerləşdirilmiş və qiyməti 50 Om

olan müqavimətə verilir. Boşalma cərəyanının modullaşma dərinliyi 5-10% tərtibində götürülmüş, modullaşma tezliyinin yuxarı həddi 100 kHs olmuş, boşalma cərəyanının effektiv modullaşması isə praktiki olaraq, tezliyin  $2 \cdot 10^4 \div 3 \cdot 10^4$  Hs qiymətlərində müşahidə edilmişdir. Helium qaz boşalması plazması impedansının təcrübi yolla ölçülmüş qiymətləri gərginliyin və cərəyanın dəyişən toplananlarının nisbətindən, onlar arasındakı fazalar fərqi nəzərə almaqla, təyin etmişik.



**Şək. 1.** Helium qazı boşalması üçün hesablanmış impedans əyrisi. Əyrinin üstündəki tezliklər kHs-lə verilmişdir.

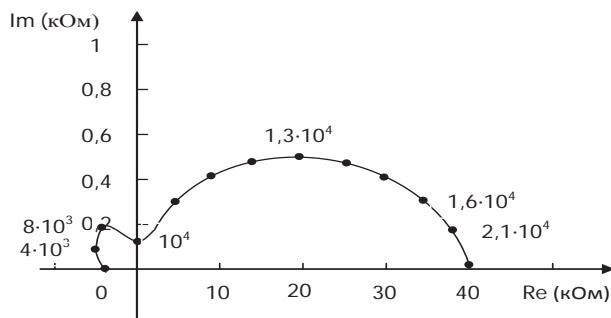


**Şək. 2.** Boşalmanın statik volt-ampere xarakteristikası. He, P = 1 Tor.

Boşalmanın impedansının təcrübi ölçülmələrindən alınmış nəticələri şəkil 3-də təsvir olunmuşdur. Müəyyən edilmişdir ki, modullaşma tezliyinin 10 kHs qiymətindən nisbətən böyük tezliklərdə ölçülmüş və hesablanmış impedans spektrləri praktiki olaraq eyni xarakterlidir (şəkil 1 və 3). Boşalma cərəyanının modullaşma dərinliyi kifayət qədər kiçik olduqda, aşağı tezliklər oblastında eksperimental əyriyə maksimum müşahidə olunur və nəticədə, impedansın modulu artır. Helium qaz boşalmasında boşalma cərəyanının modullaşma dərinlik əmsalı artdıqda isə rezonans hadisəsi daha da yüksəlir. Qaz boşalmasında rezonans hadisəsinin bu cür dəyişməsinin səbəblərindən biri impedans spektrində qeyri-xətti effektlərin təsirinə artmasıdır.

İmpedans spektrlərinin hesablanmış nəticələrini ölçülmüş impedans əyri-ləri ilə (qodoqraflarla) müqayisə etdikdə, onların keyfiyyətə bir-biri ilə uyğun gəldiyini görürük.

Dinamik müqavimətin təcrübi ölçmələri cədvəl 1-də verilmiş boşalma şəraitində aparılmışdır. Təcrübə spektral təmiz helium qazı boşalmasında aparılmışdır. Boşalma borusunun daxili diametri  $d = 3$  sm və uzunluğu  $L = 60$  sm götürülmüşdür. Slindrik boruda süni yolla közərdilən volfram katod, nikel anod və plazma parametrlərini ölçmək üçün zondlar yerləşdirilmişdir. Strat rəqslərini kənarlaşdırmaq məqsədilə boşalma cərəyanı və qazın təzyiqi strat rəqslərinin mövcudluq sərhədindən kənar oblastlarda seçilmişdir.



Şək. 3. Helium qazı boşalmasında ölçülmüş impedans əyrisi.  $P = 1$  Tor,  $J_b = 20$ . mA. Əyrinin üstündəki tezliklər kHs-lə verilmişdir.

Cədvəl 1

### Birbaşa ionlaşma rejimində helium qazı boşalmasının şərtləri

$p$ , Tor	$J_b$ , mA	$R_0$ , Om-sm	$E_0$ , B/sm	$j_0$ , A/sm <sup>2</sup>	$n_e$ , sm <sup>-3</sup>
1	20	$3,6 \cdot 10^2$	2,5	$7,04 \cdot 10^{-3}$	$2,1 \cdot 10^9$
$N_{m_3}$ , sm <sup>-3</sup>	$n_e \alpha_{oi} N_0$ , sm <sup>-3</sup> san <sup>-1</sup>	$n_e \alpha_{mi} N_m$ , sm <sup>-3</sup> san <sup>-1</sup>	$\tau_a^{-1}$ , san <sup>-1</sup>	$N_{0,3}$ , sm <sup>-3</sup>	-
$1,45 \cdot 10^9$	$3,73 \cdot 10^{14}$	$6,46 \cdot 10^{12}$	$1,95 \cdot 10^5$	$1,85 \cdot 10^{15}$	-

Cədvəl 1-dən görüldüyü kimi, birbaşa ionlaşmalar ( $3,73 \cdot 10^{14}$ ) pilləli ionlaşmalardan ( $6,46 \cdot 10^{12}$ ) təqribən iki tərtib böyükdür. Pilləli ionlaşmaların sayı digər iki triplet metastabil kvant səviyyələrdən ionlaşmaların sayının 20%-ni təşkil edir. Bu rejimdə ölçülmüş impedans əyrisi şəkil 3-də göstərilmişdir. Diaqramda modullaşma tezliyinin qiymətləri Hs-lərlə verilib. Şəkildən görüldüyü kimi əyri mənfi qiymətdən başlanır. Tezlik artdıqca, impedansın aktiv və reaktiv toplananları artır, həmçinin reaktiv toplanan bütün tezlik qiymətlərində induktiv xarakter daşıyır. İmpedansın reaktiv toplananı tezliyin  $10^4$  kHs qiymətində ordinat oxunu kəsir, yenidən artaraq maksimuma çatır və sonra azalır. Nisbətən böyük tezliklərdə impedansın reaktiv toplananı tezlik artdıqca, azalır və impedans əyrisi sabit boşalma cərəyananlı müsbət sütunun müqavimətinə bərabər olan həqiqi qiymətini alır.

## ӘДӘБИҮАТ

1. J. Michael Johnson et.al. Extending the volume of atmospheric pressure plasma jets through the use of additional helium gas streams//Plasma Sources Sci.Technol. 2020, 29015006.
2. Т.Х.Гусейнов Импеданс спектроскопия в плазме дугового разряда при средних давлениях // Ученые записки, Баку, 2017, № 1, с. 73–79.
3. А.Х.Мурадов, Т.Х.Гусейнов Об импедансе разряда в неоне в конической трубке // Радиотехника и электроника, Россия, 2011, т.56, № 5, с. 641–645.
4. E.V.Easton, P.G.Pickner An electrochemical impedance spectroscopy study of fuel cell electrodes // Electro-chim. Acta., in Russian, 2005, v. 50, p. 2469–2474.
5. С.В.Дудин, А.В.Зыков, В.И.Вареник Диагностика плазменных технологических систем / Украина: Миллениум, 2009, 32 с.

### ИМПЕДАНС ПЕРЕХОДА ПЛАЗМЫ ГЕЛИЯ ИЗ РЕЖИМА СВОБОДНОГО ПАДЕНИЯ В РЕЖИМ АМБИПОЛЯРНОЙ ДИФФУЗИИ

Т.Х.ГУСЕЙНОВ, Г.И.ГАРИБОВ, В.Г.САФАРОВ, Э.А.РАСУЛОВ

#### РЕЗЮМЕ

В работе спектроскопическим методом исследован импеданс перехода плазмы гелия из режима свободного падения в режим амбиполярной диффузии. Выявлено, что при частоте модуляции разрядного тока выше 10 кГц ход измеренного и вычисленного спектров импеданса имеет практически одинаковый характер. При достаточно малых значениях коэффициента глубины модуляции тока, как на экспериментальной, так и на теоретической кривой наблюдается максимум, т.е. модуль импеданса растет. При увеличении глубины модуляции разрядного тока резонанс усиливается. В качестве одной из причин такого изменения резонанса можно указать усиление влияния нелинейных эффектов в спектре импеданса с ростом глубины модуляции тока.

**Ключевые слова:** плазма газового разряда, режим свободного падения, амбиполярный режим, импеданс спектроскопия, годограф, время жизни электрона.

### TRANSITION IMPEDANCE OF HELIUM PLASMA FROM THE FREE FALL REGIME TO THE AMBIPOLAR DIFFUSION REGIME

T.Kh.GUSEINOV, G.I.GARIBOV, V.G.SAFAROV, E.A.RASULOV

#### SUMMARY

In this work, the transition impedance of helium plasma from the free fall regime to the ambipolar diffusion regime was investigated by the spectroscopic method. It was found that at a discharge current modulation frequency above 10 kHz, the behavior of the measured and calculated impedance spectra is practically the same. At sufficiently small values of the current modulation depth coefficient, a maximum is observed both on the experimental and theoretical curves, that is, the impedance modulus increases. As the depth of modulation of the discharge current increases, the resonance increases. As one of the reasons for such a change in the resonance, one can indicate the enhancement of the influence of nonlinear effects in the impedance spectrum with an increase in the depth of current modulation.

**Keywords:** gas discharge plasma, free fall regime, ambipolar regime, impedance spectroscopy, hodograph, electron lifetime.

**UDK 547.962:541.63****ANTIHIPERTENZİV DİPEPTİDİN  
KONFORMASIYA VƏ ELEKTRON PARAMETRLƏRİ****S.Q.RƏHİMZADƏ, G.Ə.HAQVERDİYEVA***Bakı Dövlət Universiteti**sararahimzada@bsu.edu.az, gulnaraakverdieva@bsu.edu.az*

*Təqdim olunmuş işdə antihipertenziv Val-Trp dipeptidin kompüter modelləşdirilməsi yerinə yetirilmişdir. Molekulun fəza quruluşu nəzəri konformasiya analizi üsulu ilə tədqiq olunmuş, elektron quruluşu kvant-kimyəvi hesablamalar əsasında araşdırılmışdır. Dipeptidin optimal konformasiyalarının həndəsi, enerji və elektron parametrləri hesablanmışdır. Müəyyən olunmuşdur ki, bu ardıcılığın fəza quruluşu əsas zəncirin açıq və bükülü formasında olan konformasiyalar ilə təsvir oluna bilər. Bu molekulun iki xarakterik optimal konformasiyalarının fəza və elektron quruluşlarında oxşar və fərqli xüsusiyyətlər müəyyənləşdirilmişdir.*

**Açar sözlər:** antihipertenziv dipeptid; fəza quruluşu; konformasiya; elektron parametrləri

**Giriş**

Son illərdə, bir sıra xəstəliklərin qarşısının alınması və müalicəsində qida maddələrinin tərkibinə daxil olan bioloji aktiv peptidlərdən geniş istifadə olunur. Belə ki, tərkibində triptofan olan dipeptidlər hipertoniya, xroniki böyrək xəstəliyi və ürək çatışmazlığı kimi müxtəlif xəstəliklərin müalicəsi üçün istifadə olunur. Bu sıradan bioloji aktiv əlavə olan Val-Trp (L-valyl-L-tryptophan) dipeptidi əsasən angiotenzin çevirici fermentin (AÇF) inhibitoru kimi tanınır [1-2]. Orqanizmdə bioloji aktiv molekulların fizioloji təsirləri bilavasitə onların konformasiya və elektron xassələri ilə bağlıdır. Təqdim olunmuş işdə qeyd olunan dipeptidin konformasiya profilləri və elektron quruluşu tədqiq olunmuşdur.

**Hesablama üsulları**

Val-Trp dipeptidin fəza quruluşu mexaniki model çərçivəsində tədqiq olunmuşdur. Molekulyar mexanika metodu Born-Oppenheymer yaxınlaşmasına əsaslanır. Bu yaxınlaşmaya əsasən molekulun enerjisi nüvələrin koordinatlarından asılı potensial funksiya kimi götürülür. Molekulun potensial enerjisini təsvir edən bu funksiya vasitəsilə onun fəza quruluşunu müəyyən etmək olur.

Molekulyar mexanika metodunda molekul daxili qarşılıqlı təsir enerjisi bir-birilə birbaşa kimyəvi rabitədə iştirak etməyən atomların qeyri-valent qarşılıqlı təsir enerjisinin ( $E_{q.v.}$ ), hidrogen rabitəsi enerjisinin ( $E_{h.r.}$ ), birqat kimyəvi rabitələr ətrafında baş verən daxili fırlanma enerjisinin ( $E_{tors.}$ ) və atomların partial yükləri arasındakı elektrostatik qarşılıqlı təsir enerjisinin ( $E_{elst.}$ ) additiv cəmi kimi götürülür. Tədqiqatda istifadə edilmiş potensial funksiyaların parametrləri [3] işlərdə ətraflı təsvir olunub. Nəticələrin təqdimi və təhlili zamanı peptid quruluşlarının konformasiyalara, əsas zəncirin formalarına və peptid skeletinin şeyplərinə əsaslanan klassifikasiyadan istifadə olunmuşdur. Bu klassifikasiya “ağac” prinsipinə görə qurulmuşdur: konformasiya variantları əvvəl peptid skeletinin şeyplərinə bölünür və hər bir şeypə əsas zəncirin müəyyən formaları daxildir, hər forma isə bir sıra konformasiyalarla təmsil olunur. Belə olduqda,  $n$  sayda amin turşusundan ibarət ardıcılığa aid olan şeyplərin sayı ümumi halda  $2^{n-1}$  olur. Hər şeypdə peptid zəncirinin formalarının sayı qalıqların R, B, L və P formalarının kombinasiyası ilə, hər bir qalığın formalarının sayı isə qalıqların sərbəstlik dərəcələrinin sayı ilə müəyyənələnir. Amin turşularının əsas zəncirinin forması  $R(\varphi, \psi = -180^0 - 0^0)$ ,  $B(\varphi = -180^0 - 0^0, \psi = 0^0 - 180^0)$ ,  $L(\varphi, \psi = 0^0 - 180^0)$ ,  $P(\varphi = 0^0 - 180^0, \psi = -180^0 - 0^0)$  simvolları ilə işarə olunur. Bu işarələmələri əsas götürməklə müəyyən identifikatorlar sistemindən istifadə olunmaqla hər bir qalığın konformasiya vəziyyəti  $X_{ij}$  ilə təsvir olunur. Burada X əsas zəncirin R, B, L və ya P formalarını,  $ij = 11, \dots, 12, \dots, 13, \dots, 21, \dots, 22, \dots, 23, \dots$  yan zəncirin birqat kimyəvi rabitələri ətrafındakı fırlanmalara uyğun gələn  $\chi_1, \chi_2, \dots$  ikiqat bucaqların qiymətlərini ifadə edir: «1» indeksi  $\chi$  bucağının  $0^0$  ilə  $120^0$ , «2» indeksi  $120^0$  ilə  $-120^0$  və «3» indeksi  $-120^0$  ilə  $0^0$  aralarında olan qiymətlərini göstərir. Müəyyən ardıcılıqdakı amin turşu qalıqları formalarının kombinasiyası fraqmentin əsas zəncirin formasını müəyyənləyir. Belə ki, iki amin turşusundan ibarət olan fraqment üçün əsas zəncirin iki növ forması mümkündür: bükük və açıq. Onlar, müvafiq olaraq,  $f$  və  $e$ -şeypləri vasitəsilə təsvir olunur.  $f$ -şeypinə əsas zəncirin RR, RB, LL, LP, PR, PB, BL və BP,  $e$ -şeypinə isə BB, BR, RL, RP, PL, PP, LB və LR formaları daxildir. İkiqat fırlanma bucaqlarının qiymətləri IUPAC-IUB nomenklaturasına [4] uyğundur. Hesablamalar konformasiya enerjisinin lokal minimumlarının tapılması üçün FORTRAN alqoritmik dildə yazılmış universal proqramdan [5-6] istifadə edərək personal kompüterlərdə aparılmışdır.

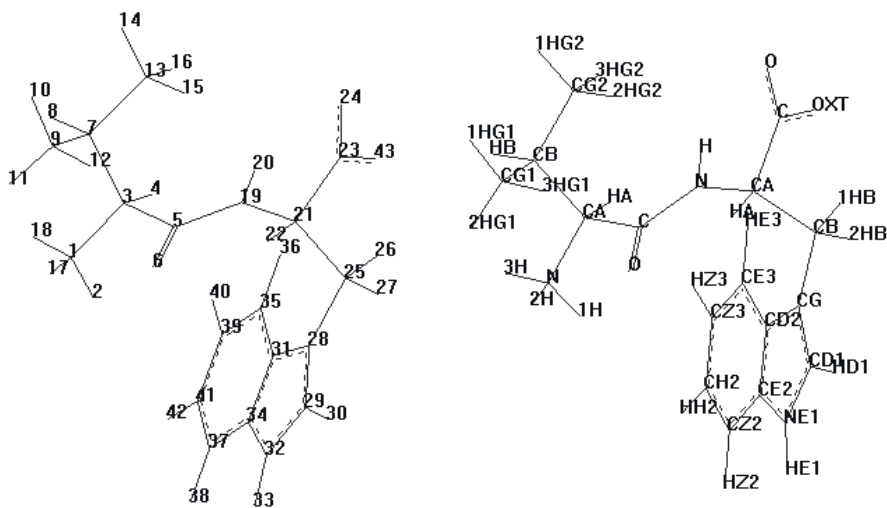
Biopolimerlərin elektron quruluşlarının hesablamaları üçün hazırlanmış CNDO kvant-kimyəvi metodun köməyi ilə HyperChem 8.03 proqramlar paketindən [7] (<http://www.hyper.com>) istifadə olunmuşdur.

### Nəticələrin təhlili

Birinci mərhələdə Val-Trp dipeptidinin konformasiya profilləri molekulyar mexanika üsulu ilə araşdırılmışdır. Molekulun atomlarının nömrələnməsi (a) və kimyəvi işarələnməsi (b) ilə təsvir olunmuş hesablama modeli şəkil 1-də



təqdim olunub. Molekulu təşkil edən amin turşu qalıqlarının əsas zəncirləri Ramaçandran xəritələrinə uyğun olaraq R, B və L formalarda ola bilər. Triptofanın  $\psi$  bucağı molekulun C-ucundakı yalnız iki oksigen atomunun fəzada yerləşməsinə təyin etdiyindən bu qalığın B və R formaları eyni olduğu qəbul edilə bilər. Bu səbəbdən dipeptidin əsas zənciri açıq olan konformasiyalar BB, LB və RL, əsas zənciri bükülü olanlar konformasiyalar isə RR, BL və LL formalarda baxılmışdır. Aminturşu qalıqlarının  $\chi$  bucaqlarına yan zəncirlərinin dayanıqlı vəziyyətlərinə uyğun gələn qiymətlər verilmişdir. Belə ki, hər iki qalığın yan zəncirlərinin  $\chi_1$  bucaqları üçün  $60^\circ, 180^\circ, -60^\circ$  torsion minimumları nəzərə alınmışdır. Valinin  $\chi_2$  və  $\chi_3$  bucaqlarına  $180^\circ$ , Trp  $\chi_2$  bucağına isə  $90^\circ$  və  $-90^\circ$  qiymətlər verilmişdir ki, molekulun  $\varphi, \psi, \omega, \chi_1, \chi_2, \dots$  torsion bucaqlarına fırlanma sərbəstliyi verərək 108 sayda konformasiyalar üçün molekul daxili potensial enerjisi minimizasiya edilmişdir.



(a) (b)

Şək. 1. Val-Trp dipeptid atomlarının nömrələnməsi (a) və kimyəvi işarələnməsi (b) ilə təsvir olunmuş hesablama modeli

Molekulu təşkil edən qalıqların böyük həcmli olması səbəbindən onların yan zəncirlərinin qarşılıqlı təsirləri əsas stabilləşdirici faktordur. Molekulun N- və C-ucularında yerləşən əks yük daşıyan atom qruplarının arasında elektrostatik qarşılıqlı təsirlər də müəyyən dərəcədə stabilləşdirici effekt göstərir. Müəyyən olunmuşdur ki, şeyplər arasında enerjiyə görə diferensiasiya çox cüzdür (cədvəl 1). Hesablanmış konformasiyaların yalnız 11 %-i 0-3 kkal/mol nisbi enerji intervalında reallaşır. Diferensiasianın belə zəif olması mümkün olan iki şeypin reallaşmaq şansının praktik olaraq eyni olmasından xəbər verir. Bununla bərabər əsas zəncirin formaları və konformasiyaları arasında kəskin enerji diferensiasiyasının baş verdiyi müəyyənləşdirilmişdir. Bu onu göstərir ki, dipeptidin enerjisi amin turşularının həm əsas zəncirləri, həm də yan zəncirlərinin vəziyyətlərinə çox həssasdırlar. Aşağıenerjili konformasiya-



lardakı qalıqlararası təsir enerjiləri, həmçinin qeyri-valent, elektrostatik, torsion qarşılıqlı təsir enerjilərinin verdikləri paylar və nisbi enerjiləri Cədvəl 2-də əks olunmuşdur.

Cədvəl 1

**Val-Trp dipeptidi üçün hesablanmış konformasiyaların enerjiyə görə paylanması**

Şeyp	Enerji intervalı (kkal/mol)					
	0-1	1-2	2-3	3-4	4-5	>5
e	-	1	3	7	14	29
f	1	4	3	7	8	31

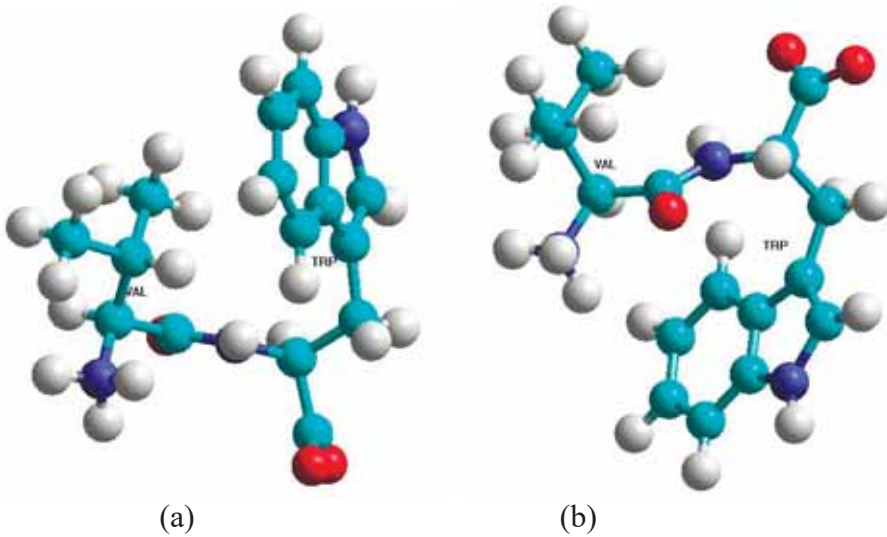
Cədvəl 2

**Val-Trp dipeptidinin 0-3 kkal/mol enerji intervalındakı konformasiyalarının enerji parametrləri (kkal/mol)**

Şeyp	Konformasiya	$E_{nis.}$	Val -Trp qarşılıqlı təsir enerjisi	Enerji payları		
				$E_{q/v}$	$E_{el}$	$E_{tors}$
f	R <sub>222</sub> R <sub>33</sub>	0.0	-13.59	-7.93	-1.29	-0.90
	B <sub>122</sub> L <sub>33</sub>	1.13	-11.97	-7.70	-1.01	1.53
	R <sub>222</sub> R <sub>31</sub>	1.35	-12.28	-6.73	-1.12	0.89
	R <sub>222</sub> R <sub>11</sub>	1.41	-12.24	-6.29	-1.56	0.95
	B <sub>122</sub> L <sub>31</sub>	1.66	-11.38	-7.39	-0.89	1.62
	B <sub>122</sub> L <sub>33</sub>	2.90	-10.86	-5.87	-1.01	1.46
	B <sub>322</sub> L <sub>33</sub>	2.98	-10.89	-6.39	-0.96	2.00
	R <sub>222</sub> R <sub>13</sub>	2.99	-11.84	-5.04	-1.82	1.53
e	B <sub>122</sub> B <sub>33</sub>	1.79	-9.74	-7.98	0.37	1.07
	B <sub>222</sub> B <sub>33</sub>	2.28	-9.82	-7.51	0.48	1.00
	B <sub>122</sub> B <sub>11</sub>	2.67	-8.41	-7.12	0.39	1.08
	B <sub>322</sub> B <sub>33</sub>	2.97	-9.47	-6.96	0.35	1.27

Yalnız əsas zəncirin *f* şeypinin LL formasında və *e* şeypinin LB və RL formalarında olan konformasiyaların yüksək enerjisi olduğu sübut edilmişdir; bu formaların ən yaxşı nümayəndələrinin nisbi enerjiləri müvafiq olaraq 4.38, 3.29 və 4.57 kkal/mol qiymətlərinə sahibdirlər. Molekulun *f* şeypinin R<sub>222</sub>R<sub>33</sub> konformasiyası bu dipeptidin ən dayanıqlı quruluşudur, bu konformasiyada dispersiya, elektrostatik və torsion qarşılıqlı təsirləri ən yaxşı balanslaşdırılmışdır. *e* şeypinin enerji cəhətdən ən stabil B<sub>122</sub>B<sub>33</sub> konformasiyasının nisbi enerjisi 1.79 kkal/mol-dur, bu konformasiyada elektrostatik (1.66 kkal/mol) və torsion qarşılıqlı təsirləri (1.97 kkal/mol) qlobal quruluşa nisbətən sabitləşdirici təsir göstərir. Bu dipeptidin *e* şeypinə aid olan konformasiyalar monopeptid enerjilər baxımından daha əlverişli olsalar da, *f* şeypinin konformasiyalarında yan zəncirlər fəzada bir-birinə daha çox yaxındır və effektiv əlaqələr yaradır. Qeyd edək ki, dipeptidin *f* şeypinin optimal konformasiyasında valin və

triptofan amin turşusu qalıqlarının yan zəncirləri bir-birinə nəzərən koplanar vəziyyətdə yerləşirlər və bu səbəbdən *e* şeypinin optimal quruluşu ilə müqayisədə 3.85 kkal/mol enerji qədər daha effektiv qarşılıqlı təsirlərdə iştirak edirlər. Yan zəncirlərin fəzada belə yerləşməsi molekulu daha kompaktlaşdırır və eyni zamanda yan zəncirlərin atomları ilə molekulun uclarındakı atom qruplarının yaxınlığını təmin edir. Optimal bükülü quruluşun son uclu amin kationu və valinin əsas zəncirindəki karbonil qrupunun oksigen atomu arasında, optimal açıq quruluşun isə triptofanın əsas zəncirinin amid qrupunun nitrogen atomu və molekulun C-uclu karboksil qrupunun oksigen atomları arasında hidrogen rabitələri ilə stabiləşməsi aşkar olunmuşdur. Əsas zəncirin bükülü və açıq formada olan optimal konformasiyaları şəkil 2-də göstərilmişdir. Cədvəl 3-də isə bu quruluşların ikiqat bucaqları göstərilmişdir.



Şəkl. 2. Val-Trp dipeptidinin əsas zənciri bükülü (a) və açıq (b) formada olan optimal quruluşları

Cədvəl 3

**Val-Trp dipeptidinin əsas zənciri bükülü və açıq formada olan optimal quruluşlarının həndəsi parametrləri (dərəcələrlə)**

Amin turşuları	Torsion bucaqlar	Konformasiyalar	
		Bükülü	Açıq
Val	$\varphi$	-42	-71
	$\psi$	-65	149
	$\chi_1$	178	65
	$\chi_2$	-178	176
	$\chi_3$	180	179
	$\omega$	179	180
Trp	$\varphi$	-100	-138
	$\psi$	-47	162
	$\chi_1$	-56	-56
	$\chi_2$	-90	-102

Məlum olduğu kimi, hər bir konformasiya özünəməxsus elektron sıxlığının paylanması və elektron parametrləri ilə xarakterizə olunur. Məhz bu səbəbdən Val-Trp dipeptidinin elektron quruluşunun tədqiqi maraqlıdır. Bu məqsədlə kvant-kimyəvi üsulun köməyi ilə molekulun iki xarakterik optimal konformasiyaları üçün bir sıra elektron parametrlər, HOMO və LUMO enerjiləri, enerji boşluğu, elektrik dipol momenti, atomların parsial yükləri hesablanmışdır (cədvəllər 4 və 5).

Cədvəl 4

**Val-Trp dipeptidinin əsas zənciri bükülü və açıq formada olan optimal quruluşlarının elektron parametrləri**

Parametrlər	Bükülü quruluş	Açıq quruluş
Tam enerji (kkal/mol)	-137991.536	-137998.838
Rabitə enerjisi (kkal/mol)	-12783.648	-12790.950
İzolə olunmuş atom enerjisi (kkal/mol)	-125207.888	-125207.888
Elektron enerjisi (kkal/mol)	-775052.542	-776645.650
Nüvələrarası qarşılıqlı təsir enerjisi (kkal/mol)	637061.006	638646.812
Əmələ gəlmə istiliyi (kkal/mol)	-8437.589	-8444.891
Dipol momenti (D)	21.517	25.598
$E_{HOMO}$ (eV)	-7.174	-7.109
$E_{LUMO}$ (eV)	0.853	0.959
Enerji boşluğu, $\Delta E$ (eV)	8.027	8.067

\* **Qeyd:**  $E_{HOMO}$  - yüksək dolmuş molekulyar orbital enerjisi,  $E_{LUMO}$  - aşağı dolmamış molekulyar orbital enerjisi

Cədvəl 4-dən görüldüyü kimi, bükülü və açıq optimal quruluşlar üçün tam enerji, rabitə enerjisi və əmələ gəlmə istiliyi yalnız 7.302 kkal/mol qiyməti ilə cüzi fərqlənir, elektron enerjisi 1593.108 kkal/mol qiyməti ilə, nüvələrarası qarşılıqlı təsir enerjisi isə 1585.806 kkal/mol-qiyməti ilə xeyli fərqlənir. Müəyyən edilmişdir ki, peptid zəncirinin bükülməsi nəticəsində molekulun əks yük daşıyan atom qrupları fəzada yaxınlaşır, Val qalığının alifatik yan zəncirindəki və Trp qalığının indol halqasındakı atomlarda yük paylanmasının dəyişməsi baş verir, bu da ki müsbət yükün sürüşməsinə səbəb olaraq elektrik dipol momentin 4.081 D azalması ilə nəticələnir. Cədvəl 5-dən görüldüyü kimi, molekulun iki xarakterik optimal quruluşlarında valin qalığının yan zəncirinin HB, CG1, 3HG2 atomlarının yüklərində gözəçarpan fərq var, CB, 2HG1, 3HG1, 1HG2, 2HG2 atomlarının yüklərində isə cüzi fərq var; triptofan qalığının əsas zəncirinin amid qrupunun H atomunun və indol halqasının CE3, HE3, CZ3, CH2 atomlarının yüklərində fərq var. Hər iki quruluşda  $\alpha$ -amin qrupunun üç H atomları, valinin karbonil qrupunun C atomu, triptofanın amid qrupunun H atomu, molekulun karboksil qrupunun C atomu, triptofanın indol halqasının HE1 və CE2 atomları böyük qiymətə malik müsbət yük daşıyırlar, lakin valin qalığının əsas zəncirinin karbonil qrupunun O atomu, triptofan qalığının əsas

zəncirinin amid qrupunun N atomu, indol halqasının NE1 atomu, son uclu karboksil qrupunun iki O atomları isə böyük qiymətə malik mənfi yük daşıyırlar. Beləliklə, hesablamalar Val-Trp dipeptidinin iki xarakterik optimal konformasiyalarının fəza və elektron quruluşlarının oxşar və fərqli xüsusiyyətlərini müəyyənləşdirdi.

Cədvəl 5

**Val-Trp dipeptidinin əsas zənciri bükülü və açıq formada olan optimal quruluşlarının atom yükləri**

Atomun №-si	Atom	Bükülü quruluş	Açıq quruluş
1	N (NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> )	-0.002821	-0.002582
2	1H (NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> )	0.218648	0.206253
3	CA Val	0.021472	0.021750
4	HA Val	0.037390	0.031410
5	C Val	0.335570	0.347736
6	O Val	-0.330510	-0.382741
7	CB Val	0.035731	0.046912
8	HB Val	0.013510	-0.013253
9	CG1 Val	-0.012649	-0.024723
10	1HG1 Val	0.026878	0.029530
11	2HG1 Val	0.027975	-0.017878
12	3HG1 Val	0.019686	0.043922
13	CG2 Val	-0.019561	-0.019764
14	1HG2 Val	0.031158	0.026404
15	2HG2 Val	0.016204	0.051616
16	3HG2 Val	-0.018549	0.016298
17	2H (NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> )	0.216438	0.220751
18	3H (NH <sub>3</sub> <sup>+</sup> )	0.198107	0.193472
19	N Trp	-0.183781	-0.178205
20	H Trp	0.091040	0.123718
21	CA Trp	0.035786	0.034858
22	HA Trp	-0.012063	-0.009444
23	C (COO <sup>-</sup> )	0.375965	0.379122
24	O (COO <sup>-</sup> )	-0.528636	-0.554104
25	CB Trp	0.012010	0.012122
26	1HB Trp	0.002119	0.000375
27	2HB Trp	0.008330	0.011967
28	CG Trp	-0.016843	-0.012206
29	CD1 Trp	0.027650	0.031002
30	HD1 Trp	0.008168	0.010427
31	CD2 Trp	-0.014477	-0.013023
32	NE1 Trp	-0.136279	-0.135412
33	HE1 Trp	0.093516	0.093960
34	CE2 Trp	0.129403	0.128373
35	CE3 Trp	-0.008487	-0.014273
36	HE3 Trp	-0.012912	-0.005634
37	CZ2 Trp	-0.069185	-0.072861
38	HZ2 Trp	-0.003248	-0.002272
39	CZ3 Trp	-0.032111	-0.043269

40	HZ3 Trp	-0.024850	-0.024906
41	CH2 Trp	0.023997	0.016583
42	HH2 Trp	-0.019424	-0.020653
43	OXT (COO <sup>-</sup> )	-0.560363	-0.531359

\**Qeyd:* atomların nömrələri və kimyəvi işarələri şəkil 1-ə uyğun olaraq verilib

Belə nəticəyə gəlmək olar ki, tədqiq olunmuş dipeptid molekulun konkret xarakterik quruluşunun fəzada reallaşması elektron effektlərinə həssas olan ferment-substrat qarşılıqlı təsirlərin spesifikasiyası ilə müəyyənləşə bilər. Alınmış nəticələr antihipertenziv peptidlərin təsir mexanizminin tədqiqində və bunun əsasında yeni bioloji aktiv əlavələrin məqsədyönlü sintezində istifadə oluna bilər.

### ƏDƏBİYYAT

1. Rudolph S., Lunow D., Kaiser S., Henle T. Identification and quantification of ACE-inhibiting peptides in enzymatic hydrolysates of plant proteins. *Food Chem*, 224(2017)19-25. doi: 10.1016/j.foodchem.2016.12.039.
2. Lunow D, Kaiser S, Rückriemen J, Pohl C, Henle T. Tryptophan-containing dipeptides are C-domain selective inhibitors of angiotensin converting enzyme. *Food Chem*. 166 (2015)596-602. doi: 10.1016/j.foodchem.2014.06.059.
3. Godjajev N.M., Akyuz S., Akverdieva G.A., A molecular mechanics conformational study of peptide T, *J. Mol. Structure*. 403 (1997) 95-110. [https://doi.org/10.1016/S0022-2860\(96\)09410-0](https://doi.org/10.1016/S0022-2860(96)09410-0)
4. IUPAC-IUB. Quantities, Units and Symbols in Physical Chemistry, Blackwell Scientific, Oxford, (1993). [https://old.iupac.org/publications/books/gbook/green\\_book\\_2ed.pdf](https://old.iupac.org/publications/books/gbook/green_book_2ed.pdf)
5. Godjajev N.M., Maksumov I.S., Ismailova L.I., Program of semiempirical calculations of conformations of molecular complexes, *Zh.strukt.khim*, 4(1983) 147-148 (in Russian)
6. Akverdieva G.A., Godjajev N.M., Improvement of program of calculation of molecular conformation, *J. Modern Technology & Engineering*.2(2017)140-145. <http://jomardpublishing.com/UploadFiles/Files/journals/JTME/V2N2/HakverdiyevaG.pdf>
7. Allinger N.L., Yuh Y., QCPE 395, Quantum chemistry program exchange, Indiana Univ., Indiana, (1982)

### CONFORMATIONAL AND ELECTRONIC PARAMETERS OF ANTIHYPERTENSIVE DIPEPTIDE

S.G.RAHİMZADE, G.A.AKVERDIEVA

### SUMMARY

In the presented study, a computer modeling of the antihypertensive dipeptide Val-Trp was carried out. The spatial structure of the molecule was studied by the method of theoretical conformational analysis, the electronic structure was investigated on the basis of quantum chemical calculations. The geometric, energy and electronic parameters of the optimal conformations of the dipeptide were calculated. It was found that the spatial structure of this sequence can be described by conformations with folded and extended forms of the main chain. The similarities and differences in the spatial and electronic structure of two characteristic optimal conformations of this molecule were revealed.

**Key words:** antihypertensive dipeptide; spatial structure; conformation; electronic parameters

## **КОНФОРМАЦИОННЫЕ И ЭЛЕКТРОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ АНТИГИПЕРТЕНЗИВНОГО ДИПЕПТИДА**

**С.Г.РАГИМЗАДЕ, Г.А.АХВЕРДИЕВА**

### **РЕЗЮМЕ**

В представленном исследовании было проведено компьютерное моделирование антигипертензивного дипептида Val-Trp. Пространственная структура молекулы была изучена методом теоретического конформационного анализа, электронная структура исследована на основе квантово-химических расчетов. Рассчитаны геометрические, энергетические и электронные параметры оптимальных конформаций дипептида. Установлено, что пространственная структура этой последовательности может быть описана конформациями со свернутой и развернутой формой основной цепи. Выявлены сходства и различия в пространственной и электронной структуре двух характерных оптимальных конформаций данной молекулы.

**Ключевые слова:** антигипертензивный дипептид; пространственная структура; конформация; электронные параметры

PACS: 11.25.Tq, 11.25.Wx, 13.75.Lb.

SONLU TEMPERATURDA  $a_1$  MEZON-NUKLON QARŞILIQLI  
TƏSİR SABİTİNƏ ÜÇLÜ QARŞILIQLI TƏSİR  
LAQRANJIANININ ƏLAVƏSİ

Ş.A.MƏMMƏDOV<sup>1,2</sup>, Ş.İ.TAĞIYEVA<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Fizika Problemləri İnstitutu və Nəzəri Fizika kafedrası,*

<sup>2</sup>*Bakı Dövlət Universiteti,*

*sh.mamedov62@gmail.com, shahnaz.ilqarzadeh.92@mail.ru*

*Sonlu temperaturda AdS/KXD-nin yumşaq divar modeli əsasında üçlü qarşılıqlı təsir həddinin  $a_1$  aksial vektor mezon-nuklon qarşılıqlı təsir sabitinə əlavəsini öyrənmişik. Holoqrafik uyğunluq prinsipindən və sonlu temperaturda yumşaq divar modelində nuklonun,  $a_1$  aksial-vektor mezonun profil funksiyalarından istifadə edərək  $a_1$  aksial vektor mezon-nuklon qarşılıqlı təsir sabiti üçün integral ifadəsi alınmışdır və bu sabitin temperaturdan asılılıq qrafiki qurulub.*

**Açar sözlər:** AdS/ KSN uyğunluğu, yumşaq-divar modeli, nuklon.

Müxtəlif modellər əsasında nəzəri və təcrübi olaraq elementar zərrəciklər arasındakı qarşılıqlı təsir sabitlərinin və form faktorların hesablanması hadronlar fizikasının bir sıra problemlərini həll edir. Bu cür metodlardan biri AdS/KXD-nin sərt divar modeli və yumşaq divar modelləridir. [3,4,11-14] işlərdə AdS/KXD-nin sərt divar modeli və yumşaq divar modellərindən istifadə olunaraq elementar zərrəciklər arasındakı qarşılıqlı təsir sabitləri hesablanmışdır. [9,15] işlərində isə müəlliflər sonlu temperaturda yumşaq divar modelində AdS/Şvarşild yanaşmasında mezon və baryonların kütlə spektrinin öyrənilməsinə və hadronların form faktorlarının hesablanması məsələsinə toxunulub. Bu məqalələrdə qeyd olunduğu kimi, AdS/Şvarşild metrikası aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$ds^2 = e^{2A(z)} \left[ f_T(z) dt^2 - (d\vec{x})^2 - \frac{dz^2}{f_T(z)} \right] \quad (1)$$

Burada  $x = (t, \vec{x})$  Minkovski koordinatlarıdır,  $z$  holoqrafik koordinatdır,  $A(z) = \log(R/z)$ ,  $f_T(z) = 1 - z^4/z_H^4$  kimi təyin olunurlar [9],  $R$  AdS fəzasının radiusudur.

Sonlu temperaturda yumşaq divar modelində AdS/Şvarşild yanaşması

əsasında  $a_1$  aksial mezon-nuklon qarşılıqlı təsir sabitini hesablammaq üçün ilk öncə, sonlu temperaturda yumşaq divar modelində nuklonun və  $a_1$  aksial-vektor mezonun profil funksiyası müəyyən edilmişdir. Növbəti mərhələdə,  $a_1$  aksial vektor mezon-nuklon qarşılıqlı təsir sabitinin təyin olunma qaydasını qeyd edərək, nəticə etibarilə, aldığımız qarşılıqlı təsir sabitinin temperaturdan asılılıq qrafikini qurmuşuq.

## Sonlu temperaturda yumşaq divar modelində profil funksiyaları

### a) Nuklonların sonlu temperaturda yumşaq divar modelində profil funksiyaları.

Yumşaq divar modelində AdS/Şvartsşild yanaşması əsasında nuklonlar üçün profil funksiyasını təyin etmək üçün ilk öncə  $B_{N_1 \dots N_J}(x, r, T)$  iç fermion sahəsi üçün təsiri yazaq:

$$S = \int d^4 x dr \sqrt{g} \bar{B}_{N_1 \dots N_J}(x, r, T) \hat{D}_\pm(r) B^{N_1 \dots N_J}(x, r, T) \quad (2)$$

$$\hat{D}_\pm(r) = \frac{i}{2} \Gamma^M \overleftrightarrow{\partial}_M - \frac{1}{4} \omega_M^{ab} \Gamma_a \Gamma_b \mp \mu(r, T) + U_F(r, T) \quad (3)$$

Burada,  $\mu(r, T) = \frac{\mu}{f_T^{3/10}(r)}$  AdS fermionun beş ölçülü kütləsidir,  $\omega_M^{ab} = (\delta_M^a \delta_r^b - \delta_M^b \delta_r^a) / r f_T^{3/10}(r)$  spin əlaqədir,  $\Gamma^M$  beş ölçülü matrislərdir və  $\Gamma^M = \epsilon_a^M \Gamma^a$ ,  $\Gamma^a = (\gamma^\mu, -i\gamma^5)$  kimi təyin olunur  $\Gamma^M \overleftrightarrow{\partial}_M$ -qismən törəmə aşağıdakı şəkildə təyin olunur:

$$\Gamma^M \overleftrightarrow{\partial}_M = \Gamma^M (\overleftarrow{\partial}_M - \overrightarrow{\partial}_M) = g^{MN} \epsilon_N^a \Gamma_a (\overleftarrow{\partial}_M - \overrightarrow{\partial}_M), \quad (4)$$

$$\epsilon_N^a = \frac{R}{z} \delta_N^a. \quad (5)$$

$U_F(r, T) = \varphi_T(r) / f_T^{3/10}(r)$  temperaturdan asılı olan dilaton potensialıdır,  $\varphi_T(r)$  dilaton sahəsi aşağıdakı kimi təyin olunur:

$$\varphi_T(r) = K_T^2 r^2 = (1 + \rho_T) k^2 r^2, \quad (6)$$

$$\rho_T = \left( \frac{9\alpha\pi^2}{16} + \delta_{T_1} \right) \frac{T^2}{12F^2} + \delta_{T_2} \left( \frac{T^2}{12F^2} \right)^2, \quad (7)$$

$$\delta_{T_1} = -\frac{N_f^2 - 1}{N_f}, \quad (8)$$

$$\delta_{T_2} = -\frac{N_f^2 - 1}{2N_f^2}. \quad (9)$$

$N_f$  kvarkın rəyihə nömrəsidir. AdS/KXD-nin yumşaq divar modelində  $k$  dilaton parametri ilə (7) ifadəsinə daxil olan  $F$  parçalanma sabiti arasında aşağıdakı əlaqə mövcuddur [1,2]:

$$F = k \frac{\sqrt{3}}{8}. \quad (10)$$

$B_z(x, r, T) = 0$  aksial kalibrəmə şərtindən istifadə edərək AdS fəzasında fermion sahəsinin 4-ölçülü eninə komponentləri üçün Kaluza-Kleyn ayrılışını yazaq:

$$B_{\mu_1 \dots \mu_J}^{L \setminus R}(x, r, T) = \sum_n B_{\mu_1 \dots \mu_J}^{L \setminus R}(x, r, T) \Phi_{nJ}^{L \setminus R}(r, T), \quad (11)$$

$$B^{L \setminus R} = \frac{1 \mp \gamma^5}{2} B, \quad \gamma^5 B^{L \setminus R} = \mp B^{L \setminus R},$$



(11) ifadəsindəki  $\phi_{nJ}^{L/R}(r, T)$  həddi nuklonun temperaturdan və holoqrafik koordinatdan asılı olaraq dəyişən profil funksiyasıdır.  $\phi_{nJ}^{L/R}(r, T)$  profil funksiyası

$$\Phi_{nJ}^{L/R}(r, T) = e^{A(r)(J-2)} \phi_{nJ}^{L/R}(r, T) \quad (12)$$

əvəzləməsini ödədiyindən Şredinger tip hərəkət tənliyindən təyin olunur:

$$-\partial_z^2 + U_{L/R}(r, T) \phi_{nJ}^{L/R}(r, T) = M_n^2(T) \phi_{nJ}^{L/R}(r, T). \quad (13)$$

(13) hərəkət tənliyi ultrabənövşəyi və infraqırmızı oblastda, uyğun olaraq, aşağıdakı sərhəd şərtləri əsasında həll olunur:

$$\phi_{nJ}^{L/R}(r, T) \sim r^{N+L\pm 1/2}, \quad (14)$$

$$\phi_{nJ}^{L/R}(r, T) \rightarrow 0. \quad (15)$$

Sonlu temperaturda (13) hərəkət tənliyinin həlli, başqa sözlə desək, nuklonlar üçün sonlu temperatur halda yumşaq divar modelində profil funksiyası aşağıdakı kimi ifadə olunacaqdır [9,15]:

$$\phi_{nJ}^{L/R}(r, T) = \sqrt{\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+m_{L/R}+1)}} K_T^{m_{L/R}+1} r^{m_{L/R}+1/2} e^{-K_T^2 r^2/2} L_n^{m_{L/R}}(K_T^2 r^2). \quad (16)$$

(16) profil funksiyasına uyğun kütlə spektri aşağıdakı şəkildədir:

$$M_{nJ}^2(T) = 4K_T^2 \left( n + m + \frac{1}{2} \right) = 4k^2 (1 + \rho_T) \left( n + m + \frac{1}{2} \right). \quad (17)$$

#### b) Sonlu temperaturda $a_1$ aksial vektor mezonun profil funksiyası.

Aksial vektor mezonun yumşaq divar modelində profil funksiyası (buna bəzən iç-sərhəd-propaqatoru da deyilir) aşağıdakı kimi təyin edilmişdir [4,5]:

$$A_n^{yum.div.}(z) = e^{-k^2 z^2/2} (kz)^{m+1/2} \sqrt{\frac{2n!}{(m+n)!}} L_n^m(k^2 z^2) \quad (18)$$

Biz  $a_1$  aksial vektor mezon üçün  $m = 1$  qəbul etmişik. Bu əsas halda  $a_1$  vektor mezon üçün profil funksiyası aşağıdakı kimi ifadə olunacaqdır:

$$A_n^{yum.div.}(z) = k^2 z^2 \sqrt{\frac{2}{n+1}} L_n^1(k^2 z^2). \quad (19)$$

Analoji olaraq sonlu temperatur halda  $a_1$  aksial vektor mezon üçün profil funksiyası (20) şəklində ifadə olunacaq:

$$A_0^{yum.div.}(z, T) = K_T^2 z^2 \sqrt{\frac{2}{n+1}} L_n^1(K_T^2 z^2). \quad (20)$$

#### Sonlu temperatur halda $g_{a_1 NN}$ qarşılıqlı təsir sabitinin hesablanması.

Məlum olduğu kimi, yumşaq divar modelində AdS fəzasında təsir (21) şəklində ifadə olunur:

$$S_{q/t} = \int_0^\infty d^5 x \sqrt{G} e^{-K_T^2 z^2} \mathcal{L}_{q/t} \quad (21)$$

$\mathcal{L}_{q/t}$   $a_1$  mezon-nuklonlar arasındakı qarşılıqlı təsir laqranjianıdır. AdS/KSN uyğunluğuna görə AdS fəzasının törədici funksiyası sərhəd KXD-nin törədici funksiyası ilə eynilik təşkil edir:

$$Z_{AdS} = Z_{KXD}. \quad (22)$$

İç aksial-vektor cərəyanı  $Z_{AdS}$  törədici funksiyasının ifadəsindən təyin olunur:

$$Z_{AdS} = e^{iS_{int}}. \quad (23)$$

Digər tərəfdən, AdS fəzasının sərhədində nuklonlar üçün 4-ölçülü aksial-vektor cərəyan törədici funksionalın ultrabənövşəyi sərhəddəki 4-ölçülü sahənin vakuüm qiymətinə görə funksional törəməsinə bərabərdir:

$$\langle J_\mu \rangle = -i \frac{\delta Z_{KXD}}{\delta \tilde{A}_\mu^0} \Big|_{\tilde{A}_\mu^0=0} \quad (24)$$

Burada,  $\tilde{A}_\mu^0 = \tilde{A}_\mu(q, z=0) = A_\mu(q)$  aksial-vektor sahənin ultrabənövşəyi sərhəddəki qiymətidir ( $A(q, z=0) = 1$ ). Aksial vektor cərəyanın (24) ifadəsini

$$J_\mu(p', p) = g_{a_1 NN} \bar{u}(p') \gamma_\mu \frac{\tau^a}{2} u(p) \quad (25)$$

ifadə ilə müqayisə edərək sonlu temperatur halda yumşaq divar modelində  $a_1$  aksial vektor mezon-nuklon arasındakı qarşılıqlı təsir sabiti təyin edilir. Bunun üçün ilk öncə (21) təsirində daxil olan  $L_{q/t}$  qarşılıqlı təsir laqranjianını aşağıdakı kimi təyin edirik:

$$L_{q/t} = \frac{i}{2} k_2 (\bar{\Psi}_1 X \Gamma^{MN} (F_R)_{MN} \Psi_2 - \bar{\Psi}_2 X^+ \Gamma^{MN} (F_L)_{MN} \Psi_1). \quad (26)$$

(26) laqranjianını (21) təsirində nəzərə alıb  $Z_{AdS}$  törədici funksiyasını müəyyən edib (24) düsturuna əsasən AdS fəzasının sərhədində nuklonlar üçün 4-ölçülü aksial-vektor cərəyanı təyin edirik. Alınan aksial vektor cərəyanı ilə (25) ifadəsini müqayisəsindən sonlu temperaturda yumşaq divar modelində  $a_1$  aksial vektor mezon-nuklon arasındakı qarşılıqlı təsir sabitini aşağıdakı kimi təyin etmiş oluruq:

$$g_{a_1 NN}(z, T) = 2g_Y \int_0^\infty \frac{dz}{z^4} A_0(z, T) v(z) \phi_R(z, T) \phi_L(z, T). \quad (27)$$

### Ədədi hesablamalar

Beləliklə,  $a_1$  aksial –vektor mezon və nuklonlar arasındakı qarşılıqlı təsir sabiti üçün (27) inteqralı təyin edildi. Bu inteqralın hesablanması üçün MATHEMATİCA proqramından istifadə edilir.

$g_{a_1 NN}(z, T)$  qarşılıqlı təsir sabitinə daxil olan parametrlərin ədədi qiymətləri üçün  $m_q = 8.3 \text{ MeV}$ ,  $\Sigma = (0.213 \text{ MeV})^3$ ,  $g_Y = 9.182$  qiymətləri təyin edilmişdir [6,7,8].  $v(z, T)$  funksiyası aşağıdakı şəkildədir:

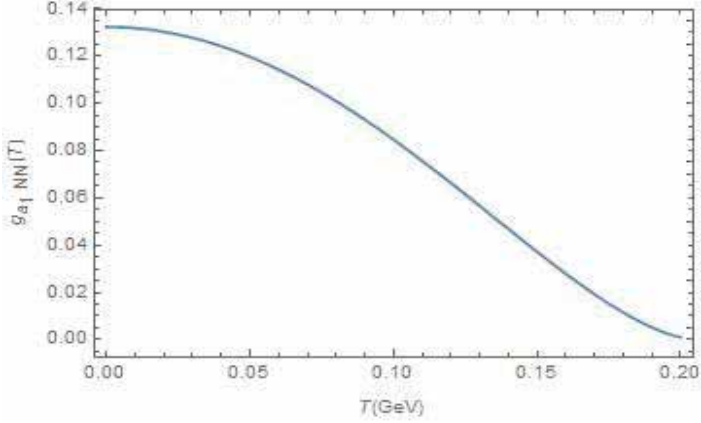
$$v(z, T) = \frac{1}{2} m_q b z + \frac{\Sigma(T) z^3}{2b}.$$

Burada  $b = \sqrt{3}/2\pi$  AdS/KSN uyğunluğuna əsasən normallaşma sabitidir,  $m_q$  kvark kütləsidir,  $\Sigma(T)$  sonlu temperatur halda kiral kondensatıdır və aşağıdakı kimi təyin olunur:

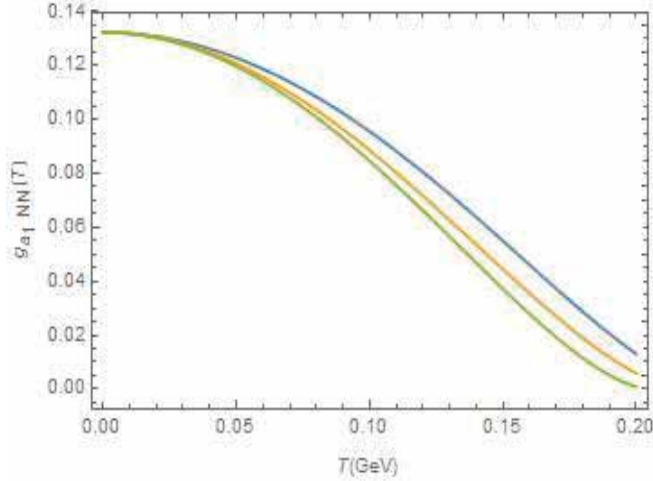
$$\Sigma(T) = \Sigma(1 + \Delta_T + O(T^6)).$$

Qrafik 1 –də  $N_f = 3$ ,  $F = 100 \text{ MeV}$  halda  $g_{a_1 NN}(z, T)$  qarşılıqlı təsir sabitinin qrafikini qurmuşuq. Qrafik 2-də  $N_f$  kvarkın rəyihə nömrəsiylə  $F$  parçalanma sabitinin müxtəlif hallarına uyğun qrafiklər qurulmuşdur. Kvark

rayihə nömrəsinə uyğun olan parçalanma sabitinin ədədi qiymətləri [9,10] ədəbiyyatlarından götürülmüşdür.



**Qrafik 1.**  $N_f = 3, F = 100 \text{ MeV}$  halı üçün  $g_{a_1 NN}(z, T)$  qarşılıqlı təsir sabiti.



**Qrafik 2.**  $G_{a_1 NN}(z, T)$  qarşılıqlı təsir sabitinin  $N_f = 2, F = 87 \text{ MeV}, N_f = 3, F = 100 \text{ MeV}, N_f = 5, F = 140 \text{ MeV}$  hallarının müqayisəli şəkildə tədqiqi.

## ƏDƏBİYYAT

1. S.J.Brodsky and G.F.de Teramond, Phys. Rev.Lett. 96, 201601(2006); Phys.Rev. D 77, 056007 (2008).
2. T.Branz, T.Gutsche, V.E. Lyubovitskij, İ.Schmidt and A.Vega, Phys. Rev. D 82, 074022 (2010).
3. N. Huseynova, Sh. Mamedov arxiv:1907.13477v1 [hep-ph] 30 Jul 2019.
4. Zh.Fang, D.Li, Y.L.Wu, IR-improved Soft wall AdS/ QCD Model for Baryons, [arxiv:1602.00379[hep-ph]].
5. H.J. Kwee, R. Lebed, JHEP 0801, 027, (2008), [arxiv: 0708.4054 [hep-ph]].
6. H.C.Ahn, D.K.Hong, C.Park and S.Siwach Phys. Rev.D, 80, 054001 [arxiv: 0904.3731].
7. A.Cherman, T.D.Cohen and E.S.Werbos, Phys. Rev. C 79, 045203, [arxiv: 0804.1096[hep-ph]].
8. D.K. Hong, H.C. Kim, S. Siwach, and H.U.Yee J.High Energy Phys. 0711, 036, [arxiv: 0709.0314 [hep-ph]].
9. Th.Gutsche, V.E.Lyubovitskij, İ.Schmidt and A.Y.Trifonov, Phys.Rev. D 99, 114023 (2019).

10. J.Gasser and H.Leutwyler, Phys. Lett. B 184, 83 (1987).
11. Sh.A. Mamedov, Sh. İ. Taghiyeva, Journal of Radiation Researches, vol.№2, 2019, Baku.
12. Sh. A.Mamedov, Sh.İ.Taghiyeva, GESJ Physics 2018 No.2(20).
13. Sh.A. Mamedov, Sh. İ. Taghiyeva, Journal of Baku Engineering University-Physics, 2019, Volume 3, Number 2.
14. D.K.Hong, T.Inami and H.U.Yee, Phys. Lett. B 646(2007).
15. Th. Gutsche, V.E.Lyubovitskij, İ.Schmidt and A.Y.Trifonov, Phys.Rev. D 99, 054030 (2019).

**CONTRIBUTION OF THE THREESOME INTERACTION LAGRANJIAN  
TO THE CONSTANT OF  $a_1$  MESON-NUCLEON INTERACTION  
AT FINITE TEMPERATURE**

**Sh.A.MAMEDOV, Sh.I.TAGHIYEVA**

**SUMMARY**

We defined the contribution of the threesome interaction to the  $a_1$  axial vector meson-nucleon coupling constant in the framework of the soft wall model of AdS/QCD at finite temperature. Using the AdS/CFT correspondence and profile functions of the nucleon,  $a_1$  axial vector meson in the framework of the soft wall model at finite temperature the integral expression was obtained for the  $a_1$  meson-nucleon coupling constant and we plot the graphic of dependence from the temperature of the coupling constant.

**Key words:** AdS/CFT correspondence, soft-wall model, nucleon.

**ВКЛАД ЛАГРАНЖИАНА ТРОЙНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ К КОНСТАНТЕ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ  $a_1$  МЕЗОН-НУКЛОНА ПРИ КОНЕЧНОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ**

**Ш.А.МАМЕДОВ, Ш.И.ТАГИЕВА**

**РЕЗЮМЕ**

Установили вклад тройного взаимодействия в постоянную взаимодействия аксиально- векторного  $a_1$  мезон-нуклона на основании мягкой стенной модели АдС/КХД при конечной температуре. С применением принципа голографического соответствия в модели мягкой стены при конечной температуре получено интегральное выражение для постоянного взаимодействия аксиально- векторного  $a_1$  мезон- нуклона с применением профильных функций аксиального вектора  $a_1$  мезона и нуклона., а также построили график зависимости от температуры этого постоянного.

**Ключевые слова:** АдС/КПТ соответствие, модель мягкой стены, нуклон.

PACS 25.40-Ep  
УДК 531.1

## STUDY OF HADRON POLARIZATION IN LOCAL POTENTIAL

I.G.AFANDIYEVA, R.A.AKHMEDOV  
*Azerbaijan State University of Oil and Industry*  
*irada.e@mail.ru*

*A study of the calculations of polarization effects associated with the scattering of hadrons on the nucleus in the pulse approximation in the cluster model is presented. The local interaction potential includes the spin-orbit interaction. The study did not take into account the interaction between the particles of the clusters. In this case, the transition occurs directly from the initial to the final state of the cluster transfer without changing the internal states of the nucleons. The scattering amplitude contains a term that depends on the spin orientation and a term that does not depend on the spin orientation, and the polarization occurs due to interference between these two parts of the scattering. The degree of polarization is proportional to the probability that the cluster "aimed" at the initial nucleus with the corresponding values of momentum and angular momentum are captured to form a composite nucleus.*

**Key words:** cluster, matrix element, impulse approximation, polarization.

### 1. Introduction

The value of the transition matrix of the polarization dependent on the orbital angular momentum of cluster, which directly determines the parity of the final state (if known to the parity of the original nucleus) and provides essential information for determining the spin of this state. The analysis shows that, if interaction hadrons with nuclei depend on the spin, and the polarization of hadrons and target will be different from each other. This means that when unpolarized hadrons pass through a polarized nucleus, in directions where the interaction cross section is smaller, polarization of hadrons will be observed in this direction. As a result of the spin dependence, the scattering interaction cross section can depend on the polarization of the interacting systems.

The theoretical and experimental studies have been carried out, for both neutron and proton scattering, which show that almost full polarization can occur. The polarization effect is a consequence of the fact that the nucleon-nucleus interaction may be represented as a complex spin-dependent potential.

The existence of such a potential is suggested by the spin dependence of the nucleon-nucleon interaction.

The polarization effects usually are used for investigation spin-dependent interactions in the scattering processes and for checking the used model. Polarization of particles scattered from unpolarized nuclei can occur due to the spin-orbit interaction between the incident particle and the nuclei [1]. The theoretical analysis of the polarization effects in the scattering of hadrons showed that, in addition to the central interactions, must be considered also a spin-orbit interaction.

Early, it was shown [2] that the calculated in the quark cluster model real and imaginary parts of the leading asymptotic term of the spin-flip amplitude of the charge exchange reactions agree sufficiently well with the amplitude reconstructed by the model independent approach from the experimental data.

The polarization of scattered particles in the eikonal approximation has been reported in [2,3]. In this paper polarization effects in scattering processes with hadron are analyzed by means of the impulse approximation.

## 2. The polarization function

It is known, that particle with a nonzero rest mass and spin  $J$  has  $2J+1$  quantum states corresponding to different spin orientations of the particle. The state of a particle is superposition of these states. If the particle completely polarized to mean superposition coefficients of these states are completely determined. If the superposition coefficients are specified only by certain statistical characteristics, then particle has partial polarization. The particle can be completely unpolarized when these coefficients are not determined.

In approaching zero radius a hadron is emitted at the same point, which is captured cluster. Mathematically, it comes down to the choice of potential as follows local potential:

$$Vf^s(\vec{r}, \vec{\rho}) = W(\vec{r})\delta(\vec{\rho}). \quad (1)$$

Let us consider the production of transversely polarized hadrons in the scattering processes. Under the assumption that at high energies of incident hadrons, the kinetic energy of the hadrons is large in comparison with the binding energies of the nucleons, the interaction of the hadron with the nucleons of the nucleus can be treated independently. With each nucleon, the hadron interacts only once. For the high-energy scattering we will consider only nuclear potential, and don't consider magnetic interaction. To determine the polarization, it is necessary to determine the scattering amplitudes using the unitarity condition. For construction the scattering amplitude that satisfies at least the two-particle unitarity condition is the use of realistic potentials [4].

The Schrodinger equation for this system is:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_h} \Delta - \frac{\hbar^2}{2m_N} \Delta_N + V \right] \Psi(r_h r_N) = E \Psi(r_h, r_N), \quad (2)$$

where

$$W(r) = V = V_{12}(r_{h,N}) + V_{ls}, \quad (3)$$

$V_{12}(r_{h,N})$ -interaction between hadrons and nucleus nucleons and is Gauss potential:

$$V_Q = is \left( \frac{\pi}{a} \right)^{3/2} \exp(-r^2 / 4a) \quad (4)$$

and  $V_{ls}$  is spin-orbital interaction:

$$V_{ls} = - \left( \frac{\hbar}{\mu c} \right)^2 \frac{(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{l})}{2\hbar r} \frac{dV_{12}(r_{h,N})}{dr}. \quad (5)$$

We seek the solution  $\Psi(r_h r_N)$ , which containing the incident plane wave of the hadrons and the scattered waves. In the impulse approximation the wave function  $\Psi(r_h r_N)$  is replaced by

$$\Psi(r_h r_N) \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \iint dK dr e^{-ik_i r_h} \varphi_i(r) \psi_{k_i K}(r_h r_N), \quad (6)$$

where  $k_i$  initial impulse of the hadron,  $K$  transferred impulse.

In scattering described by the Schrödinger equation, the amplitude  $f$  is a scalar. In the spherically symmetric central field, the scattering matrix elements has following view

$$f = \frac{1}{(2\pi)^6} \int e^{i(k_i - k_f + K)r} \psi_f^*(r) \psi_i(r) (k_f K' | V | k_i K) dr dK dK', \quad (7)$$

where

$$(k_f K' | V | k_i K) = (2\pi)^3 \delta(k_f + K' - k_i - K) \int e^{i(k_i - k_f + K)r/2} V(r) \varphi_{k_i - K}(r) dr, \quad (8)$$

and  $k_f$  is final impulse of the hadron.

Considering the (7) the expression (6) can be seen as a generalization of the impulse approximation for the scattering amplitude and is valid in the entire range of scattering angles.

This polarization will on the average be parallel to the atomic planes and perpendicular to the quantum momentum. The mechanism that produces the polarization can be explained in the following manner.

The scattering amplitude is 2 x 2 elements of the matrix  $f$ , which may be expressed by the Pauli matrix and unit vector  $\mathbf{n}$

$$f = g\mathbf{n} + (\mathbf{h}\boldsymbol{\sigma}). \quad (9)$$

The multiples  $g$  in the (8) corresponding to the interaction, which don't depends on the spin, vector  $\mathbf{h}$  – to the interaction under which reoriented the spin.

If the y-axis is chosen along the direction of the unit vector  $\mathbf{n}$  ( $\varphi=0$ ), then the wave function of the scattered particle initially located in the spin state  $\chi_s$

$$\chi_s = (n\sigma) \chi_s, \quad (10)$$

where

$$\chi_s = c\chi_{1/2} + d\chi_{-1/2}, \quad (11)$$

and

$$c = \sqrt{\frac{1+n_z}{2}}, \quad d = \frac{n_x + in_y}{\sqrt{2(1+n_z)}}, \quad (12)$$

can be written in the form:

$$\left( \frac{\sqrt{\frac{1+n_z}{2}}}{\frac{n_x + in_y}{\sqrt{2(1+n_z)}}} \right) e^{ikr} + \begin{pmatrix} f^+(\theta) \\ f^-(\theta) \end{pmatrix} \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (13)$$

where  $f^+$  and  $f^-$  are the complex functions and depends on the scattering angle  $\theta$

$$f^+(\theta) = cg - idh, \quad f^-(\theta) = dg + ich. \quad (14)$$

However, if we select the spin-quantizing axis along the direction of the initial hadrons waves, the amplitudes  $f^+(\theta)$  and  $f^-(\theta)$  turn out to be connected because of the invariance with respect to reflection.

When considering the filtration of a beam through a polarized nuclear target, the beam to consist of two components with intensities  $J_+$  and  $J_-$ , completely polarized, respectively, parallel and antiparallel to the direction of polarization in the nuclear target. The intensities of these components are related to the total beam intensity  $J$  and its polarization  $P$  by obvious relations:

$$J = J_+ + J_-; \quad P = (J_+ - J_-)/J. \quad (15)$$

If the neutron spins do not change their orientation during the passage of the beam through the polarized target, which is true for practically used targets, then the attenuation of each of the components occurs independently

Since the interaction is spinning dependent, the effective cross section will also depend on polarization of the hadron. Using the definition of the differential scattering cross section, we obtain that

$$\sigma(\theta, \varphi) = \{1 + P(\theta) \cos \phi\} \left( |g(\theta)|^2 + |h(\theta)|^2 \right), \quad (16)$$

$$P(\theta) = 2 \frac{\text{Re}(g^* h)}{|g(\theta)|^2 + |h(\theta)|^2}. \quad (17)$$



The function  $P(\theta)$  is polarization function.

Function  $P(\theta)$  can be presented in the following way. The scattering amplitude considering (3), has following view

$$f_{ls} = \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \left( \frac{\hbar}{\mu c} \right)^2 \int \exp[-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{r}] \frac{1}{2ir} \frac{dV}{dr} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla) dr. \quad (18)$$

Using the expression  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{C} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{C} \times \mathbf{A}$  and taking partly integration, we obtain

$$f_{ls} = -\frac{i}{2} \frac{\mu}{2\pi\hbar^2} \eta^2 \sin \theta \int \exp[-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{r}] \frac{dV}{dr} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{l}); \quad \eta = \frac{\hbar k}{\mu c}. \quad (19)$$

In the framework of impulse approximation

$$h(\theta) = \frac{i}{2} \eta^2 \sin \theta \int \exp[-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{r}] (V_{hm} + \frac{1}{2ir} (\sigma l) \frac{dV}{dr}), \quad (20)$$

and

$$P(\theta) = -\frac{\mu}{k^2 \sin^2 \theta} (k' - k)(V_{hm} + V_{sl}) \frac{d\sigma(\theta)}{d\theta} / \sigma(\theta). \quad (21)$$

The scattering amplitude contains a spin orientation dependent term and a spin orientation independent term, and the polarization is due to interference between these two scattering parts. With increasing energy, in the region of small momentum transfers, the scattered particles have a parallel configuration, and in this case the polarization should be equal to zero.

After scattering on the target  $A$  the average spin of the particles is equal  $\langle \sigma \rangle_1 = P_1 \mathbf{n}_1$ , then the target of the incident polarized beam of particles with  $\langle \sigma \rangle_1$  spin. Therefore, the double scattering cross section can be expressed as:

$$\sigma(\theta_1, \theta_2, \varphi_{12}) = (1 + P_2 \mathbf{n}_2 \langle \sigma \rangle_1) I_2(\theta_2) I_1(\theta_1) = (1 + P_2(\theta_2) P_1(\theta_1) \cos \varphi_{12}) I_1(\theta_1) I_2(\theta_2). \quad (22)$$

Opposite polarization signs are associated with positive and negative scattering angles and polarization can be zero if there is a balance of scattering on both sides. Large values of the degree of polarization are observed in the case when the magnitude of the interference is comparable to the magnitude of the scattering cross section.

It has been shown in the work [5] that a polarization effect arises from the quantum spin-entanglement of the projectile-target system in addition to the separable total spin depending on the collision energy and scattering angle.

### 3. Conclusion

Spin effects are important from the point of view of studying the structure of particles, in particular, the problem of the relationship between the spin of a particle and the spin of its components and the interaction mechanism of the components.

Although the polarization effect is by no means confined to elastic scattering large diffraction cross sections observed experimentally insure relatively high yields of polarized particles.

The polarization sign depends on the value of the incident particle energy. Depending on the energy, there is interference from positive and negative scattering angles and this affects the sign of polarization. It is of interest to study polarization for individual energy regions. This can monitor the change in the polarization sign.

Polarization effects are important of studying the structure of particles. The studying shows that studies of nucleon polarization can illuminate some aspects of nuclear structure, since the polarization depends on the particular nucleus used as a target as well as upon the form of the interaction.

A qualitative description of the polarization of hadrons is explained by the spin-orbit interaction in a scalar field that connects quarks within the hadrons. Therefore, not only a qualitative explanation, but also for a quantitative understanding of polarization, it is necessary to take into account the quark structure of hadrons.

### REFERENCES

1. Haque A.K.F.et al., Relativistic calculations for spin-polarization of elastic electron-mercury scattering. J. Phys. Commun. 1 035014, (2017).doi:10.1088/2399-6528/aa8bf8.
2. Ahmedov R.A.: Polarization effects in hadron-nuclei scattering at high energy. Cumhuriyet University Faculty of Science Science Journal (CSJ), Vol. 37 (2016), P. S56-S58 ISSN: 1300-1949.
3. Abdulvahabova S.G. and Afandiyeva I.G.: Polarization effects in scattering with nucleon associations. Journal of Qafqaz University, V1 (1), (2015),p.61.
4. Abdulvahabova S.G. et.al.: Amplitude of elastic scattering for the region of large impact parameters. Cumhuriyet Sci. Journal, V.40 (1), (2019),p. 79.
5. Blum Kand B. and Lohmann B.: Entanglement and Bell Correlation in Electron-Exchange Collisions. Phys. Rev. Lett. 116 033201 (2016). doi:10.1103/PhysRevLett.116.033201

### LOKAL POTENSİALDA HADRONLARIN POLYARİZASİYASININ TƏDQIQI

İ.Q.ƏFƏNDİYEVƏ, R.A.ƏHMƏDOV

### XÜLASƏ

İmpuls yaxınlaşmasında klaster modelində hadronların nüvələrdən səpilməsi zamanı polyarizasiya effektləri tədqiq edilir. Qarşılıqlı təsir potensialı lokal təsir kimi qəbul edilmiş və spin-orbital qarşılıqlı təsir də nəzərə alınmışdır. Tədqiqat zamanı klasterin nuklonları arasında qarşılıqlı təsir nəzərə alınmamışdır. Belə halda nuklonların hallarında dəyişiklik baş vermədən

klaster ilkin haldan son hala keçir. Səpilmə amplituduna spinin yönəlməsindən asılı olan və asılı olmayan hədlər daxildir. Bu hədlərin interferensiyası nəticəsində hadronun polyarizasiyası baş verir. Polyarizasiyanın dərəcəsi klasterin müəyyən impuls və bucaq momenti ilə ilkin nüvənin üzərinə düşərək aralıq nüvəsinin yaranmasının ehtimalı ilə mütənasibdir.

**Açar sözlər:** klaster, matrisa elementi, impuls yaxınlaşması, polyarizasiya.

## **ИЗУЧЕНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ АДРОНОВ В ЛОКАЛЬНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ**

**И.Г.ЭФЕНДИЕВА, Р.А.АХМЕДОВ**

### **РЕЗЮМЕ**

Представлено исследование расчетов поляризационных эффектов, связанных с рассеянием адронов на ядрах в импульсном приближении в модели кластеров. В локальном потенциале взаимодействия входит спин-орбитальное взаимодействие. В исследовании не учитывалось взаимодействие между частицами кластеров. В этом случае переход происходит прямо от начального к конечному состоянию переноса кластера без изменения внутренних состояний нуклонов. Амплитуда рассеяния содержит члены, зависящий от ориентации спина, и не зависящий от ориентации спина, а поляризация возникает из-за интерференции между этими двумя частями рассеяния. Степень поляризации пропорциональна вероятности того, что кластер, "нацеленный" на начальное ядро с соответствующими значениями импульса и углового момента, захватываются с образованием составного ядра.

**Ключевые слова:** кластер, матричный элемент, импульсное приближение, поляризация.

**ДВУГРАННЫЕ УГЛЫ В НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ  
КОНФОРМАЦИЯХ ПЕНТАПЕПТИДНОЙ МОЛЕКУЛЫ****Г.Д.АББАСОВА, Э.З.АЛИЕВ***Бакинский государственный университет*

*Методом молекулярной динамики исследовано пространственное и электронное строение молекулы CREKA, нового лекарственного препарата, обладающего противоопухолевым эффектом. Рассчитаны геометрические параметры и энергетические вклады различных видов межзатомных взаимодействий в стабилизацию устойчивых конформационных состояний молекулы, проведена количественная оценка пределов изменения двугранных углов в основной и боковых цепях аминокислотных остатков в процессе молекулярной динамики.*

**Ключевые слова:** CREKA, пептид, конформационный анализ, конформационное состояние, молекулярная динамика

**Введение**

В 2006 году американскими учеными был синтезирован новый лекарственный препарат, обладающий ярко выраженным противоопухолевым эффектом в отношении рака простаты [1-6]. Этот препарат, в химической структуре которого имеется пять последовательно соединенных аминокислотных остатков цистеин (C), аргинин (R), глутаминовая кислота (E), лизин (K) и аланин (A) получил название CREKA. Ранее нами были исследованы конформационные свойства и изучена динамика боковых цепей молекулы в условиях неявно заданного водного окружения. В данной работе методами квантовой химии и молекулярной динамики исследованы электронно-конформационные и молекулярно-динамические свойства молекулы CREKA.

**Методы расчета**

Электронная структура молекулы CREKA, парциальные заряды на атомах, распределение электронной плотности, электрический дипольный момент и другие параметры были исследованы полуэмпирическим методом квантовой химии CNDO, а динамические свойства - изучены методом молекулярной динамики. При оптимизации электронной энергии молекулы в качестве нулевых приближений были рассмотрены равновесные конфигурации ядер, соответствующие геометрии шести предпочтительных конформаций, рассчитанных ранее методом теоретического конфор-

мационного анализа.

### **Метод CNDO**

Метод CNDO (Complete Neglect of Differential Overlap или полное пренебрежение дифференциальным перекрыванием) является простейшим методом самосогласованного поля. Он используется для расчетов основного состояния электронных характеристик систем с открытой и закрытой оболочками, оптимизации геометрии и полной энергии. Основные приближения, используемые в полуэмпирических методах, следующие:

1) Рассматриваются только валентные электроны, электроны атомных остовов лишь экранируют ядра, поэтому эти электроны учитывают в функциях, описывающих энергию остов–остовного отталкивания (в которое включается ядер–ядерное отталкивание). Поляризацией остовов пренебрегают.

2) В МО учитывают только АО с главным квантовым числом, соответствующим высшим заселенным электронами орбиталям изолированных атомов (минимальный базис), причем считают, что базисные функции образуют набор ортонормированных АО.

В методе CNDO параметризуемым свойством является электронная плотность. Метод хорошо воспроизводит дипольные моменты, длины связей, валентные углы, силовые константы и т.д.

Максимальное число циклов, при котором удается получить решение уравнений самосогласованного поля с параметром сходимости  $10^{-8}$  не более, чем 500. Основным параметром критерия сходимости являются разности полной энергии на предыдущем и текущем шаге итерации.

### **Метод молекулярной динамики**

Для описания динамического поведения пептидных молекул при различных условиях широко используется метод молекулярной динамики, прогресс в развитии которого базируется на достижениях компьютерных технологий [7-9]. Расчеты проводились при условии, что исследуемая молекула находится в вакууме. Во всех случаях рассчитанная равновесная геометрия использовалась в качестве начальной для молекулярно-динамического расчета, проводимого в потенциалах полуэмпирического метода ММ+ без учета симметрии. Оптимизация геометрии молекулы проводилась с параметром сходимости 0.01.

### **Результаты расчетов и их обсуждение**

Энергетические параметры низкоэнергетических структур молекулы CREKA после оптимизации полной энергии даны в таблице 1. Как видно из таблицы 1 состояние с глобальным минимумом энергии (конформация 1, табл.1) сохраняет свое преимущество и при сравнении значений полной электронной энергии. Самое низкое значение полной электронной энергии обеспечивается благоприятным балансом энергии стабилизации электронных облаков и отталкивания атомных остатков. Не-

смотря на то, что электронная энергия этой структуры уступает по значению некоторым другим конформациям, благоприятное расположение атомных ядер компенсирует этот проигрыш. В итоге, конформация 1 обладает самой большой величиной энергии связывания, которая является основным критерием стабильности. Следующее состояние с относительной энергией 0,27 ккал/моль, полученное с помощью метода молекулярной механики, по значениям энергии связывания уступает трем следующим структурам (конформации 3, 4 и 5, табл.1). Этому способствует низкое значение электронной энергии. При благоприятном расположении атомных остатков отсутствует эффективное стабилизирующее распределение электронов. В итоге, можно подчеркнуть, что наблюдается определенная энергетическая дифференциация по результатам квантово-химических расчетов. Между конформациями, попадающими в интервал относительной энергии 0-1 ккал/моль по расчетам молекулярной механики и квантовой химии не наблюдается существенного расхождения по характеру дифференциации низкоэнергетических состояний.

Сравнительный анализ электронной структуры низкоэнергетических конформаций проведен на основе значений эффективных зарядов, орбитальной энергии, дипольных моментов. Изменение этих параметров при переходе от одной конформации к другой позволяет определить конформационно-электронную обусловленность низкоэнергетических структур. Анализируя динамику изменения эффективных зарядов конкретных атомов можно выявить относительно консервативные и чувствительные к конформационным перестройкам участки молекулы. Заряды на атомах наиболее важных функциональных групп молекулы в различных конформационных состояниях приведены в табл.4.

Таблица 1

**Энергетические параметры (ккал/моль) низкоэнергетических конформационных состояний молекулы CREKA по данным метода CNDO**

Конформация	Относительная энергия	Полная энергия	Энергия связывания	Электронная энергия	Энергия ядерных взаимодействий	Энергия теплообразования
1	0,0	-288622	-21920	-2004372	1715750	-14137
2	0,3	-288603	-21901	-2005934	1717332	-14118
3	0,3	-288607	-21905	-2033603	1744996	-14123
4	0,5	-288609	-21907	-2080778	1792169	-14125
5	0,9	-288608	-21907	-2042134	1753526	-14124
6	1,0	-288565	-21864	-2080225	1791659	-14081

Таблица 2

**Величины дипольных моментов низкоэнергетических  
конформационных состояний молекулы  
CREKA по данным метода CNDO**

Конфор- мация	Дипольный момент, Дб			
	X	Y	Z	Полный
<b>1</b>	0.5	-2.3	1.8	3.0
<b>2</b>	2.8	5.1	-2.4	6.3
<b>3</b>	2.1	-1.5	-5.9	6.4
<b>4</b>	-2.9	-0.9	-1.3	3.3
<b>5</b>	-1.0	3.9	-5.9	7.2
<b>6</b>	9.9	5.7	-2.2	11.7

Таблица 3

**Энергия (эВ) верхней заполненной и нижней свободной  
молекулярных орбиталей в различных конформациях молекулы  
CREKA**

Конформация	ВЗМО	НСМО
<b>1</b>	-0.040	0.737
<b>2</b>	-0.089	0.870
<b>3</b>	-0.241	0.878
<b>4</b>	0.091	0.961
<b>5</b>	-0.155	0.890
<b>6</b>	-0.244	0.834

Как видно из таблицы 2 значения дипольных моментов молекулы в разных конформациях заметно отличаются и наблюдается тенденция к увеличению дипольного момента с увеличением относительной энергии. Исключение составляет конформация 4, которая имеет относительно компактное пространственное строение со сближенными противоположно заряженными участками. Поэтому молекула в этом состоянии характеризуется меньшей величиной дипольного момента. Эта тенденция наблюдается и при анализе энергий верхней заполненной и нижней свободной молекулярных орбиталей молекулы в этой конформации. Как видно из таблицы 3 наблюдается уменьшение величины энергии верхней заполненной молекулярных орбитали с увеличением относительной конформационной энергии для конформаций 1-3, 5 и 6. Исключение составляет конформация 4, для которой характерно изменение пространственной структуры, связанной с конформационными перестройками концевых участков. Аналогичные выводы можно сделать и при анализе величин эффективных зарядов, рассчитанных для всех конформаций молекулы. Существенные различия касаются, в основном, атомов молекулы в конформации 4.

Таблица 4

**Парциальные заряды на атомах молекулы CREKA в различных конформационных состояниях**

Амино-кислоты	Атомы	Конформация						
		1	2	3	4	5	6	$\Delta$
<b>CYS 1</b>	S <sup>G</sup>	-0.149	-0.145	-0.138	-0.104	-0.148	-0.150	0.045
<b>ARG 2</b>	H (NH <sub>2</sub> )	0.100	0.101	0.101	0.100	0.100	0.146	0.046
<b>GLU 3</b>	O (CO)	-0.358	-0.365	-0.354	-0.346	-0.355	-0.349	0.012
	C <sup>D</sup>	0.450	0.418	0.445	0.415	0.413	0.420	0.037
	O <sup>D</sup>	-0.307	-0.288	-0.336	-0.264	-0.261	-0.284	0.046
	O <sup>D</sup>	-0.308	-0.268	-0.275	-0.280	-0.274	-0.283	0.040
	H <sup><math>\beta</math></sup>	0.027	0.016	0.012	0.024	0.023	0.040	0.015
	H <sup>G</sup>	0.036	0.043	0.043	0.029	0.029	0.064	0.028
	H <sup><math>\alpha</math></sup>	0.012	0.032	0.032	0.008	0.013	0.002	0.020
<b>LYS 4</b>	C <sup><math>\alpha</math></sup>	0.063	0.072	0.072	0.075	0.076	0.070	0.013
	C <sup>D</sup>	0.010	0.012	0.012	0.012	0.012	-0.029	0.019
	H (NH)	0.106	0.125	0.113	0.106	0.110	0.116	0.019
	H <sup><math>\alpha</math></sup>	0.029	0.005	0.011	0.006	0.000	0.014	0.029
	H <sup>G</sup>	0.000	0.010	0.003	0.023	0.021	0.006	0.023
	H <sup>D</sup>	0.002	0.002	0.002	0.003	0.002	0.043	0.041
<b>ALA 5</b>	N	-0.202	-0.178	-0.173	-0.186	-0.177	-0.178	0.029
	C <sup><math>\alpha</math></sup>	0.075	0.120	0.128	0.112	0.124	0.120	0.043
	C'	0.345	0.421	0.441	0.409	0.438	0.421	0.096
	O(C'O)	-0.171	-0.291	-0.332	-0.269	-0.346	-0.294	0.175
	O(C'O)	-0.188	-0.313	-0.325	-0.267	-0.306	-0.311	0.137
	H	0.109	0.134	0.134	0.120	0.133	0.132	0.025
	H <sup><math>\beta</math></sup>	0.018	0.031	0.035	0.026	0.034	0.031	0.017

Методом молекулярной динамики исследованы динамические свойства молекулы CREKA. Результаты обобщены в таблице 5, где приведены пределы изменения двугранных углов в основной цепи молекулы. Полученные результаты согласуются с данными квантово-химических расчетов и будут использованы для изучения конформационно-динамических свойств аналогов молекулы CREKA.

Таблица 5

**Двугранные углы (град) в низкоэнергетических конформациях молекулы CREKA до (верхняя строка) и после (нижняя строка) молекулярной динамики в силовом поле MM+**

Конформация	Cys1	Arg2	Glu3	Lys4	Ala5
<b>1</b>	*-73, -55, 180	-104, -59, 178	-99, 137, 185	-117, -61, 184	-88, -52, 178
	-145, -67, 182	-96, 56, -172	-82, 35, 164	-99, 60, -171	-58, 180, 179
<b>2</b>	-76, -52, 180	-92, -56, 178	-147, 173, 180	-90, 95, 180	-84, -55, 179
	161, -164, 189	-102, -28, -175	-101, 107, -168	-67, 30, -175	-119, 172, 164
<b>3</b>	-83, 72, 181	-116, -63, 177	-96, -52, 183	-114, 123, 175	-83, -54, 180
	-53, 93, 176	-96, 63, 169	72, -40, -172	-83, 57, -161	-42, 146, 174



<b>4</b>	-83, 76, 181 -50, 93, 177	-119, -63, 179 -88, 31, 171	-94, 140, 187 80, -44, -165	54, 65, 184 -74, -52, 159	50, 56, 188 -88, 118, 169
<b>5</b>	-77,-57,179 -90, -73, 185	-108,-61,178 -86, 45, -176	-98,143,186 -73, 55, 178	55, 68, 181 87, -72, -166	-113, 141, 183 -162, -168, -173
<b>6</b>	-87, -62, 180 174, -176, 181	-136, -63, 180 -98, 70, -164	53, 62, 183 70, 12, 173	-117, 96, 182 -95, 68, 171	-89, -56, 180 -63, -38, 169

\**Примечание:* Величины двугранных углов основной цепи даны в последовательности:  $\varphi, \psi, \omega$

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Farokhzad O.C., Cheng J.J., Teply B. A., Sherifi, I, Jon S, Kantoff P.W., Ritchie J.P., Langer R. // Proceeding of the National Academy of Sciences, 2006, v.103 (116), p. 6315-6320.
2. Montet X., Weissleder R., Josephson L. // Bioconjugate Chemistry, 2006, v.17, p.905-911.
3. Couvreur P., Vauthier C. // Pharmaceutical Research, 2006, v. 23 (7), p.1417-1450.
4. Sunderland C.J., Steiert M., Talmadge J.E., Derfus A.M., Barry S.E. // Drug Development Research, 2006, v.7, p.70-93.
5. Yih T.C., Al-Fandi M. // Journal of Cellular Biochemistry, 2006, v.97, p.1184-1190.
6. Simberg D., Duza T., Park J.H., Essler M., Pilch J., Zhang L., Derfus A.M., Yang M., Hoffman R.M., Bhatia S., Sailor M.J., Ruoslahti E. // PNAS, 2007, v.104, No.3, p.932-936.
7. Попов Е.М. // Int.J.Quantum Chem., 1979, v.16, p.707-737.
8. Попов Е.М. Структурная организация белков // М. Наука, 1989, 352 с.
9. Momany F.A., McGuire R.F, Burgess A.W., Scheraga H.A. // J.Phys.Chem., 1975, v.79, p. 2361-2381.
10. Липкин Г.М., Архипова С.Ф., Попов Е.М. // Журнал структурной химии. 1970, т. 11, с. 121-126.
11. IUPAC-IUB, Quantity, Units and Symbols in Physical Chemistry, Blackwell Scientific Publications, Oxford, v.39, 1988.

#### PENTAPEPTİD MOLEKULUN KİÇİK ENERJİLİ KONFORMASİYALARININ İKİÜZLÜ BUCAQLARI

G.C.ABBASOVA, E.Z.ƏLİYEV

#### XÜLASƏ

Şişlərə qarşı yeni dərman preparatı CREKA molekulunun molekulyar dinamika üsulu ilə fəza quruluşu və elektron quruluşu tədqiq edilmişdir. Molekulun dayanıqlı konformasiyalarının stabilləşməsində əsas olan atomlar arası müxtəlif qarşılıqlı təsirlərin enerji payları və həndəsi parametrləri hesablanmışdır. Molekulyar dinamika prosesində aminturşu qalıqlarının əsas və yan zəncirlərinin ikiüzlü bucaqlarının qiymətləri verilmişdir.

**Açar sözlər:** CREKA, peptid, konformasiya analizi, konformasiya vəziyyəti, molekulyar dinamika.

#### DIHEDRAL ANGLES IN LOW-ENERGY CONFORMATIONS OF PENTAPEPTIDE MOLECULE

G.D.ABBASOVA, E.Z.ALIYEV

#### SUMMARY

The method of molecular dynamics investigated the spatial and electronic structure of the CREKA molecule, a new drug with an antitumor effect. Geometric parameters and energy contributions of various types of interatomic interactions to stabilize stable conformational states of the molecule were calculated, limits of change of dihedral angles in the main and side chains of amino acid residues in the process of molecular dynamics were quantified.

**Keywords:** CREKA, peptide, conformational analysis, conformational state, molecular dynamics

**УДК 539.125.5.33****РЕЛАКСАЦИЯ НЕЙТРОНОВ В МАТЕРИАЛАХ ЗАМЕДЛИТЕЛЯ**

**Х.Ш.АБДУЛЛАЕВ, Б.А.НАДЖАФОВ**  
*Бакинский Государственный Университет*  
*xanvaliabdullayev@bsu.edu.az*

*Исследован приближенный метод расчета спектров нейтронов. Показан расчет различной длины релаксации нейтрона в веществе. Приведена методика расчета длины релаксации температуры нейтронного газа от основной диффузионной длины и длины релаксации для потока нейтронов, полученных из эксперимента.*

**Ключевые слова:** нейтрон, спектр, релаксация, диффузия.

Процесс установления равновесного потока нейтронов в веществе называется термолизацией. В безграничной однородной непоглощающей среде спектр нейтронов от импульсного источника стремится к максвелловскому. Поглощение, источники нейтронов и их утечка в конечной среде приводят к отличным от максвелловского спектрам нейтронов. Характер отклонений и законы затухания различных возмущений нейтронного потока во времени и пространстве представляют большой интерес с одной стороны для реакторной техники, а с другой—для уточнения различных моделей замедлителей. Поскольку в модели замедлителей, в частности твердых тел, исходят из определенных частотных спектров, на основе которых рассчитывается спектр нейтронов, то в этом смысле изучение спектров, а также релаксации потоков нейтронов представляет значение для физики конденсированных состояний вещества.

Изучение релаксации потока и температуры нейтронного газа обычно сводится к определению различных длин релаксаций. Дело в том, что длины релаксации определяются только свойствами среды и не зависят от вида источников. Тем самым они содержат информацию о законе рассеяния среды и, будучи извлеченными из эксперимента, могут оказаться полезными для проверки теоретических моделей ядра рассеяния

Длинами релаксации по определению называют обратные величины дискретных собственных значений задач, возникающих при разделении

переменных в кинетическом уравнении. В простейшем случае плоской геометрии, если искать решение кинетического уравнения

$$\mu \frac{\partial \varphi(z, \mu, E)}{\partial z} + \sum_t(E) \varphi(z, \mu, E) = \int_{-1}^1 \partial'_\mu \int_0^\infty \sum_s(E' \rightarrow E, \mu' \rightarrow \mu) \times \varphi(z, \mu' E') dE' \quad (1)$$

в виде

$$\varphi(z, \mu, E) = e^{-xz} f(\mu, E) \quad (2)$$

задача на собственные значения имеет вид

$$(\sum_i(E) - \mu x) f(E, \mu) = \int_{-1}^1 d\mu' \int_0^\infty \sum_s(E' \rightarrow E, \mu' \rightarrow \mu) f(E', \mu') dE' \quad (3)$$

Аналогичными в Рг приближении и при изотропном рассеянии являются следующие уравнения:

$$-L(E) \frac{d^2 \psi(z, E)}{dz^2} + \sum_t(E) \psi(z, E) = \int_0^\infty \sum_s(E' \rightarrow E) \psi(z, E') dE' \quad (4)$$

$$\psi(z, E) = \gamma(E) e^{-xz}$$

$$(\sum_t(E) - D(E)x^2) \gamma(E) = \int_0^\infty \sum_s(E' \rightarrow E) \gamma(E') dE' \quad (5), (6)$$

Как видим, задачи на собственные значения (3) и (6) представляют собой задачи на собственные значения для различных интегральных уравнений, ядрами которых являются дважды дифференцированные сечения рассеяния. Спектр собственных значений [1, 2] любой реальной системы содержит непрерывную часть, но отнюдь не всегда—дискретные собственные значения. Граница между этими частями спектра лежит при

$$x^* = \min(\sum_t(E)) \quad (7)$$

для уравнения (3) и при

$$x^* = \min(\sqrt{3} \sum_t(E)) \quad (8)$$

для уравнения (6). Таким образом, границы непрерывного спектра, а следовательно и весь спектр собственных значений существенно зависят от используемого приближения.

Величину  $L_0 = x_0^{-1}$  (в том случае, если существует дискретное собственное значение  $x_0$ ) часто называют длиной диффузии или фундаментальной длиной, соответствующей используемому приближению;  $L_1 = x_1^{-1}$  (в том случае, если существует дискретное собственное значение  $x_1$ ) называют первой длиной релаксации или длиной растермализации. В том случае, когда известны несколько первых длин релаксации и соответствующих им собственных функций (3), решение уравнения (1) на расстояниях  $z > x^{-1}$  с хорошей точностью может быть представлено в виде суперпозиции:

$$\varphi(z, \mu, E) = \sum_{n=0}^N C_n f_n(\mu, E) e^{-x_n z}, \quad (9)$$

где  $x_n$ — дискретные собственные значения,  $f_n(\mu, E)$ — соответствующие им собственные функции,  $N+1$ — их число, а  $C_n$ — коэффициенты разложения.

Аналогом (9) в  $P_1$ -приближении будет

$$\psi(z, E) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \gamma_n(E) e^{-x_n^2} \quad (10)$$

Отметим, что разложение (8) и (10) справедливо для полубесконечной среды, расположенной справа от источника. Обобщение на случай конечной среды производится непосредственным образом. Очевидно, что разложения (9) и (10) наиболее подходящи для задач, которые характеризуются большими размерами замедляющих зон со слабым поглощением. Многогрупповые численные методы расчета таких систем могут оказаться гораздо менее эффективными, чем указанный полуаналитический метод [3].

Теперь рассмотрим длины релаксации приближенных методов расчета. На практике пространственно-энергетическое распределение тепловых нейтронов в задачах такого класса по всей области  $z$  довольно часто ищется в виде разложения

$$\psi(z, E) = \sum_{i=1}^N \psi_i(z) \chi_i(E), \quad (11)$$

где  $\psi(z, E)$ —скалярный поток,  $\psi_i(z)$ —весовые функции,  $\chi_i(E)$  пробные функции, выбираемые из интуитивных соображений.

В качестве  $\chi_i(E)$  можно использовать, например, максвелловские распределения с различными температурами или спектры в бесконечных средах.

Представление пространственно-энергетического распределения тепловых нейтронов в виде (11) лежит в основе различных малогрупповых методов решения задач термализации, являющихся по сути дела вариациями метода перекрывающихся групп (МППГ). Очевидным обобщением (11) для кинетического случая является

$$\varphi(z, \mu, E) \simeq \sum_{i=1}^N \Phi_i(z, \mu) \chi_i(E) \quad (12)$$

Выражения (11) и (12) по форме аналогичны (10) и (9). Основное отличие (11) от (10) и (12) от (9) в том, что вместо собственных функций и собственных длин для данной среды в (11) и (12) используются какие-то другие функции и длины.

Очевидно, что когда пробные функции  $\chi_i(E)$  плохо воспроизводят собственные функции задачи, (11) и (12) будут давать неверную асимптотику. Однако от (11) и (12) и не требуется правильной асимптотики. С их помощью делается попытка описать с равномерной точностью спектр нейтронов во всей области изменения  $z$ . Это означает, что длины релаксации этих методов не универсальны. Если в качестве пробных функций использовать максвелловские распределения с температурами зон, то в  $P_1A$ -приближении (12) преобразуется к виду

$$\psi(z, E) \simeq \psi_1(z)M(E, T_1) + \psi_2(z)M(E, T_2) \quad (13)$$

а из (4) получается хорошо известная система уравнений [4, 5]:

$$\begin{aligned} D_1 \Delta \psi_1 - (\Sigma_{a1} + \Sigma_R^{1 \rightarrow 2}) \psi_1 + \Sigma_R^{2 \rightarrow 1} \psi_2 &= -S_1 \\ L^2 \Delta \psi_2 - (\Sigma_{a2} + \Sigma_R^{1 \rightarrow 2}) \psi_2 + \Sigma_R^{2 \rightarrow 1} \psi_1 &= -S_2 \end{aligned} \quad (14)$$

где обозначения констант соответствуют принятым в работах [4, 5]. Весь спектр собственных значений однородного уравнения (14) состоит только из двух дискретных собственных значений.

Качественная структура спектра собственных значений рассмотренного приближенного метода отлична от структуры спектра собственных значений уравнений (3) и (6). Действительно, трансформируется не только граница между непрерывной и дискретной частями собственных значений, но и накладываются существенные ограничения на число дискретных собственных значений (их не может быть больше двух). Кроме того, в случае P-приближения непрерывная часть спектра собственных значений вообще отсутствует. Следует также отметить, что дискретные собственные значения приближенного метода зависят от вида пробных функций. Отсюда видно, что длины релаксации приближенного метода, равные обратным величинам соответствующих собственных значений, не обязаны совпадать с длинами релаксации уравнений (3) и (6).

Был предложен следующий метод вычисления ЛЛ. При условии существования дискретной (или хотя бы квазидискретной) первой длины релаксации ЛЛ векторный поток нейтронов на асимптотике может быть представлен в виде

$$\varphi(z, \mu, E) \simeq C_0 f_0(\mu, E) e^{-z/P} + C_1 f_1(\mu, E) e^{-z/L_1}$$

Тогда температура нейтронного газа будет

$$T(z, \mu) = \frac{\int E \varphi(z, \mu, E) dE}{\int \varphi(z, \mu, E) dE} \simeq \frac{\bar{E}_0(\mu) + C(\mu) \bar{E}(\mu) e^{-z/L_1}}{1 + C(\mu) e^{-z/L_1}} \quad (15)$$

$$C(\mu) = \frac{C_1 \int f_1(p, E) dE}{C_0 \int f_0(\mu, E) dE}, E_n = \frac{\int E f_n(\mu, E) dE}{\int f_n(u, E) dE} \quad (n = 0, 1)$$

$$\frac{1}{L_2} = \frac{1}{L_1} = \frac{1}{L_0} \quad (15 \text{ a})$$

Но это выражение может быть преобразовано к виду

$$T(z, \mu) = T_2 + (T_1 - T_2) \frac{b}{b + e^{z/L_2}}$$

если ввести обозначения:

$$T_2(z) = \bar{E}_0(\mu), T_1(z) = \bar{E}_1(\mu), b = C(\mu)$$

Рассмотрим формулу (15) в частном случае больших  $z$ .

Учитывая малость экспоненциального члена, представим  $T(z, \mu)$  в виде

$$T(z, \mu) \simeq \bar{E}_0(\mu) + C(\mu) [\bar{E}_1(\mu) - \bar{E}_0(\mu)] e^{-z/L_2}$$

Обозначая

$$T_\infty = \bar{E}_0(\mu) \text{ и } T_0 \approx C(\mu) \bar{E}_1(\mu) + \bar{E}_0(\mu) [1 - C(\mu)]$$

получим соотношение, совпадающее с выражением (6) работы [6]:

$$T(z, \mu) \approx T_{\infty} + (T_0 - T_{\infty})e^{-z/L_2} \quad (17)$$

если под  $L_2$  понимать так называемую длину релаксации температуры нейтронного газа.

Таким образом, извлекаемая путем подгонки асимптотической части хода экспериментальной температуры формулами (17) или (16), связана с первой длиной релаксации  $L_1$  соотношением (15 а). Тем самым получаем

$$L_1 = \frac{L_0 L_r}{L_0 + L_r}$$

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Nucl. Sci. Engng. № 2, vol 159, (2008) (169-181)
2. Ядерные константы № 1-2, 2010, ст. 81-88
3. Ядерные константы № 1-2, 2008, ст. 60-86
4. Ядерная физика Том: 79, №4, (2015) ст. 916

#### NEYTRONLARIN YAVAŞIDICI MADDƏLƏRDƏ RELAKSASIYASI

X.Ş.ABDULLAYEV, B.A.NƏCƏFOV

#### XÜLASƏ

Tədqiqatda neytron spektrlərinin hesablanması üçün təqribi üsul araşdırılmışdır. Bu məqsədlə neytronların yavaşıcı maddələrdə relaksasiyası və müxtəlif relaksasiya uzunluqları hesablanmışdır. Maddədə neytron qazının temperaturunun, relaksasiya uzunluğunun, təcrübə tapılmış neytron selinin relaksasiya uzunluğu və diffuziya uzunluğuna əsasən hesablanması üçün üsul irəli sürülmüşdür.

**Açar sözlər:** neytron, spektr, relaksasiya, diffuziya

#### RELAXATION OF NEUTRONS IN SLOWING DOWN MATTERS

Ch.Sh.ABDULLAYEV, B.A.NAJAFOV

#### SUMMARY

It is investigated approximate method for the calculation of the neutron spectra. It is shown the calculation of different relaxation length of the neutron in the matter. The method is given for the calculation of the relaxation length of the neutron gas temperature on the the basic diffusion length and the relaxation length for neutron flow obtained from the experiment.

**Keywords:** neutron, spectrum, relaxation, diffusion

## MÜNDƏRİCAT

## RİYAZİYYAT

**İsgəndərov N.Ş., Allahverdiyeva S.İ.**

Bussinesk-Lyava tənliyi üçün bir qeyri-klassik sərhəd şərtli  
tərs sərhəd məsələsi..... 5

**Quliyev H.F., Tağıyev H.T.**

Qeyri-lokal şərtli ikitərtibli hiperbolik tənliyin əmsalının təyini haqqında..... 20

**Əliyev Z.S., Məmmədova M.M.**

Bir yarıxəttilləşən məxsusi qiymət məsələsinin qlobal bifurkasiyası ..... 29

## İNFORMATİKA

**Xəlilov M.S.**

Qaz-kondensat quyularının quyudibi zonasının maye karbohidrogen  
və qazla birgə işlənilməsinin səmərəliliyinin qiymətləndirilməsi..... 38

## FİZİKA

**Məsimov E.Ə., Paşayev B.G.**

Müxtəlif fraksiyalı polietilenqlikolların suda məhlullarının viskozimetriya,  
densitometriya və İQ-spektroskopiya metodları ilə tədqiqi ..... 45

**Əbdülvahabova S.Q., Bayramova T.O.**

Yüksək enerjilərdə P-N elastiki səpilməsində Recce-Eykonal metodu ..... 63

**İsmayılov T.H., Aslanlı A.F.**

Sferik kvant nöqtəsində optik keçidlər və lazer effekti ..... 69

**Qasımova R.C., Tağıyev Z.H., Əmirov Ş.Ş.**

Optik liflərdə lazer impulsları ilə idarə olunma ..... 72

**Hüseynov T.X., Qəribov Q.İ., Səfərov V.H., Rəsulov E.A.**

Helium plazmasının səbəstçatma rejimindən ambipolyar diffuziya  
rejiminə keçidin impedansı ..... 83

**Rəhimzadə S.Q., Haqverdiyeva G.Ə.**

Antihipertenziv dipeptidin konformasiya və elektron parametrləri ..... 89

**Məmmədov Ş.A., Tağıyeva Ş.İ.**

Sonlu temperaturda  $a_1$  mezon-nuklon qarşılıqlı təsir sabitinə üçlü  
qarşılıqlı təsir Laqranjınının əlavəsi ..... 98

**Əfəndiyeva İ.Q., Əhmədov R.A.**

Lokal potensialda hadronların polyarizasiyasının tədqiqi..... 104

**Abbasova G.C., Əliyev E.Z.**

Pentapeptid molekulun kiçik enerjili konformasiyalarının ikiüzlü bucaqları ..... 111

**Abdullayev X.Ş., Nəcəfov B.A.**

Neytronların yavaşıcı maddələrdə relaksasiyası ..... 117

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

**Искендеров Н.Ш., Аллахвердиева С.И.**  
 Обратная краевая задача для уравнения Буссинеска–Лява с неклассическими краевыми условиями ..... 5

**Кулиев Г.Ф., Тагиев Х.Т.**  
 Об определении коэффициента гиперболического уравнения второго порядка с нелокальным условием ..... 20

**Алиев З.С., Мамедова М.М.**  
 О глобальной бифуркации одной полулинеаризируемой задачи на собственные значения..... 29

ИНФОРМАТИКА

**Халилов М.С.**  
 Оценка эффективности разработки газоконденсатных скважин призабойной зоне сочетанием с жидким углеводородом и газом..... 38

ФИЗИКА

**Масимов Э.А., Пашаев Б.Г.**  
 Исследование водных растворов различных фракции полиэтиленгликолей методами вискозиметрии, денситометрии, ИК-спектроскопии ..... 45

**Абдулвагабова С.Г., Байрамова Т.О.**  
 Редже-Эйкональный метод для упругого  $pn$ -рассеяния ..... 63

**Исмаилов Т.Г., Асланлы А.Ф.**  
 Оптические переходы в сферической квантовой точке. .... 69

Лазерный эффект

**Касумова Р.Дж., Тагиев З.А., Амиров Ш.Ш.**  
 Манипуляция лазерным импульсом в оптическом волокне ..... 72

**Гусейнов Т.Х., Гарибов Г.И., Сафаров В.Г., Расулов Э.А.**  
 Импеданс перехода плазмы гелия из режима свободного падения в режим амбиполярной диффузии..... 83

**Рагимзаде С.Г., Ахвердиева Г.А.**  
 Конформационные и электронные параметры антигипертензивного дипептида..... 89

**Мамедов Ш.А., Тагиева Ш.И.**  
 Вклад Лагранжиана тройного взаимодействия к константе взаимодействия  $a_1$  мезон-нуклона при конечной температуре..... 98

**Эфендиева И.Г., Ахмедов Р.А.**  
 Изучение поляризации адронов в локальном потенциале ..... 104

**Аббасова Г.Д., Алиев Э.З.**  
 Двугранные углы в низкоэнергетических конформациях пентапептидной молекулы ..... 111

**Абдуллаев Х.Ш., Наджафов Б.А.**  
 Релаксация нейтронов в материалах замедлителя..... 117



## CONTENTS

## MATHEMATICS

**Isgandarov N.Sh., Allahverdiyeva S.I.**

Inverse boundary value problem for the Boussinesq- Love Equation  
with nonclassical boundary conditions .....5

**Guliyev H.F., Tagiyev H.T.**

On the definition of the coefficient of a second-order hyperbolic equation  
with nonlocal conditions .....20

**Aliyev Z.S., Mamedova M.M.**

On the global bifurcation of one half-linearizable eigenvalue problem .....29

## INFORMATION

**Khalilov M.S.**

Estimation of the efficiency of development of gas-condensate wells  
in the bottom area combined with liquid hydrocarbon and gas .....38

## PHYSICS

**Masimov E.A., Pashayev B.G.**

Study of aqueous solutions of various polyethylene glycol fractions  
by viscosimetry, densitometry, IR spectroscopy .....45

**Abdulvahabova S.Q., Bayramova T.O.**

Regge- Eikonal method for high – energy  $pp$ - elastic scattering .....63

**İsmayilov T.H., Aslanli A.F.**

Optical transitions in a spherical quantum point. Laser effect .....69

**Kasumova R.J., Tagiev Z.H., Amirov Sh.Sh.**

Laser pulse manipulation in optical fiber .....72

**Guseinov T.Kh., Garibov G.I., Safarov V.G., E.A. Rasulov**

Transition impedance of helium plasma from the free fall regime  
to the ambipolar diffusion regime .....83

**Rahimzade S.G., Akverdieva G.A.**

Conformational and electronic parameters of antihypertensive dipeptide .....89

**Mamedov Sh.A., Taghiyeva Sh.I.**

Contribution of the threesome interaction Lagrangian to the constant  
of  $a_1$  meson-nucleon interaction at finite temperature .....98

**Afandiyeva I.G., Akhmedov R.A.**

Study of hadron polarization in local potential .....104

**Abbasova G.D., Aliyev E.Z.**

Dihedral angles in low-energy conformations of pentapeptide molecule .....111

**Abdullayev Ch.Sh., Najafov B.A.**

Relaxation of neutrons in slowing down matters .....117