

ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ ПОВОЛЖСКИЙ РЕГИОН

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

№ 2 (74)

2025

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

Смирнов Ю. Г. О фредгольмовости гиперсингулярных интегральных операторов в специальных классах функций	3
Зайцев Б. А., Медведев М. Ю. Определение структуры объектов и их визуализация в задаче восстановления диэлектрической проницаемости по результатам измерений ближнего электромагнитного поля	15
Титаренко В. И., Фомин А. И. Вариант формальной теоремы о нулях линейных дифференциальных операторов	27
Бештоков М. Х. Конечно-разностный метод решения первой краевой задачи для нагруженного нестационарного уравнения влагопереноса	44
Смирнов Ю. Г., Кондырев О. В. Задача дифракции электромагнитной волны на однородном диэлектрическом шаре, покрытом графеном	63
Тихов С. В. Задача дифракции ТЕ-волны на тонком слое кремния, покрытом графеном	77
Рязанцев В. А. Об одном численном алгоритме восстановления порядка дробной производной в обобщенном волновом уравнении	92

ФИЗИКА

Шостак Н. А. Особенности определения параметров кубической кристаллической решетки клатратных гидратов	104
Макеева Г. С., Никитин М. С. Магнитоплазмонные эффекты при дифракции терагерцевых волн на магнитно-смещенных графеновых метаповерхностях	116
Кревчик В. Д., Разумов А. В., Семенов М. Б. Фотодиэлектрический эффект, связанный с возбуждением примесных комплексов $A^+ + e$ в квазиульмерных структурах в условиях 1D-диссипативного туннелирования во внешнем магнитном поле	134

**UNIVERSITY PROCEEDINGS
VOLGA REGION
PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES**

№ 2 (74)

2025

CONTENT

MATHEMATICS

<i>Smirnov Yu.G.</i> On Fredholm property of hypersingular integral operators in special classes of functions	3
<i>Zaytsev B.A., Medvedik M.Yu.</i> Determination of the structure of objects and their visualization in the problem of restoring the permittivity by the results of measurements of the near electromagnetic field	15
<i>Titarenko V.I., Fomin A.I.</i> A variant of the formal theorem on the zeros of linear differential operators	27
<i>Beshtokov M.Kh.</i> Finite-difference method for solving the first boundary value problem for a non-stationary loaded moisture transfer equation	44
<i>Smirnov Yu.G., Kondyrev O.V.</i> Problem of electromagnetic wave diffraction on homogeneous dielectric ball coated with graphene	63
<i>Tikhov S.V.</i> Scattering problem of TE-wave on a thin silicon layer covered with graphene	77
<i>Ryazantsev V.A.</i> On a numerical method for recovery of fractional derivative order in the generalized wave equation	92

PHYSICS

<i>Shostak N.A.</i> Features of determining the parameters of the cubic crystal lattice of clathrate hydrates	104
<i>Makeeva G.S., Nikitin M.S.</i> Magnetoplasmonic effects at the diffraction of terahertz waves on magnetically biased graphene metasurfaces	116
<i>Krevchik V.D., Razumov A.V., Semenov M.B.</i> Photodielectric effect associated with excitation of impurity complexes $A^+ + e$ in quasi-zero-dimensional structures under conditions of 1D-dissipative tunneling in an external magnetic field	134

МАТЕМАТИКА

MATHEMATICS

УДК 517.96

doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-1

О фредгольмовости гиперсингулярных интегральных операторов в специальных классах функций

Ю. Г. Смирнов

Пензенский государственный университет, Пенза, Россия

mmm@pnzgu.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Рассматриваются гиперсингулярные интегральные уравнения на отрезке, возникающие во многих задачах математической физики. *Материалы и методы.* Гиперсингулярные уравнения изучаются в специальных классах функций, которые представляются рядами Фурье по многочленам Чебышева 2-го рода. *Результаты и выводы.* Доказываются критерии компактности операторов в специальных классах функций. Основным результатом является доказательство фредгольмовости гиперсингулярного оператора в специальных классах функций, которое важно при формулировке и реализации численного метода решения гиперсингулярных уравнений.

Ключевые слова: гиперсингулярное уравнение, фредгольмов оператор, многочлены Чебышева

Финансирование: работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по гранту Государственного задания (Рег. № 124020200015-7).

Для цитирования: Смирнов Ю. Г. О фредгольмовости гиперсингулярных интегральных операторов в специальных классах функций // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2025. № 2. С. 3–14. doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-1

On Fredholm property of hypersingular integral operators in special classes of functions

Yu.G. Smirnov

Penza State University, Penza, Russia

mmm@pnzgu.ru

Abstract. *Background.* Hypersingular integral equations on a segment that arise in many issues of mathematical physics are considered. *Materials and methods.* Hypersingular equations are studied in special classes of functions, which are represented by Fourier series of Chebyshev polynomials of the 2nd kind. *Results and conclusions.* The criteria of compactness of operators in special classes of functions are proved. The main result is the proof of the Fredholm property of hypersingular operator in special classes of functions, which is important in the formulation and implementation of a numerical method for solving hypersingular equations.

© Смирнов Ю. Г., 2025. Контент доступен по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 License / This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 License.

Keywords: hypersingular equation, Fredholm operator, Chebyshev polynomials

Financing: the research was financed by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation under the grant of the State Assignment (Reg. No. 124020200015-7).

For citation: Smirnov Yu.G. On Fredholm property of hypersingular integral operators in special classes of functions. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2025;(2):3–14. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-1

Введение

К гиперсингулярным уравнениям сводятся многие краевые задачи математической физики (см., например, [1–4]). Гиперсингулярные операторы изучены достаточно полно [1–4]. Обычно гиперсингулярные операторы понимаются в смысле Адамара [3, 4], но их можно рассматривать как интегродифференциальные или псевдодифференциальные [1].

Другой подход к рассмотрению гиперсингулярных операторов используется в [2]. Оператор определяется своим действием на функции, разложенные в ряд Фурье по многочленам Чебышева. При этом используется известная формула действия гиперсингулярного оператора на многочлены Чебышева 2-го рода. Именно так рассматриваются операторы в данной статье. Такой подход особенно полезен при формулировке и реализации численных методов решения гиперсингулярных уравнений, поскольку позволяет явно (аналитически) учесть гиперсингулярную особенность ядра интегрального уравнения и произвести тем самым его регуляризацию.

Центральным при анализе свойств гиперсингулярного уравнения является вопрос о его разрешимости в некоторых функциональных классах. Чаще всего, эта задача решается на основе доказательства фредгольмовости оператора и доказательства единственности решения уравнения, откуда следует непрерывная обратимость оператора и однозначная разрешимость уравнения. Доказательство единственности решения уравнения, как правило, основано на единственности решения исходной краевой задачи и в настоящей статье не рассматривается.

Основным результатом настоящей статьи является доказательство фредгольмовости гиперсингулярного оператора в специальных классах функций, которые «подбираются» таким образом, чтобы легко изучить действие в них гиперсингулярного оператора. Такой подход был реализован при изучении логарифмических интегральных операторов в [2, 5].

1. Классы Ψ_p . Гиперсингулярные интегральные операторы в классах Ψ_p

Далее будут изучены свойства гиперсингулярных интегральных операторов в некоторых специальных классах Ψ_p (на шкале пространств), естественно связанных с многочленами Чебышева 2-го рода.

Пусть h_p – пространство последовательностей комплексных чисел ξ_k таких, что

$$\sum_{k=0}^{\infty} |\xi_k|^2 (k+1)^p < \infty; \quad p \geq 0. \quad (1)$$

Пространства h_p , наделенные скалярным произведением

$$(\xi, \eta)_p = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k \bar{\eta}_k (k+1)^p \quad (2)$$

и нормой

$$\|\xi\|_p^2 = \sum_{k=0}^{\infty} |\xi_k|^2 (k+1)^p, \quad (3)$$

являются сепарабельными гильбертовыми пространствами.

Рассмотрим классы функций, заданных на отрезке $[-1, 1]$:

$$\Psi_p = \left\{ \varphi: \varphi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k U_k(x), \xi \in h_p \right\}, \quad (4)$$

где

$$U_n(x) = \frac{\sin((n+1)\arccos x)}{\sqrt{1-x^2}} -$$

многочлены Чебышева 2-го рода [6]. Эти пространства также становятся гильбертовыми, если определить скалярные произведения по формуле

$$(\varphi, \psi)_p = (\xi, \eta)_p = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k \bar{\eta}_k (k+1)^p, \quad (5)$$

$$\varphi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k U_k(x), \quad \psi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \eta_k U_k(x). \quad (6)$$

Из (1)–(6) ясно, что Ψ_p унитарно изометрично h_p .

Введем пространства квадратично-суммируемых функций на отрезке $[-1, 1]$ с весами $1/\sqrt{1-x^2}$ и $\sqrt{1-x^2}$:

$$L_2^{(1)} = L_2\left([-1, 1]; 1/\sqrt{1-x^2}\right), \quad L_2^{(2)} = L_2\left([-1, 1]; \sqrt{1-x^2}\right).$$

Хорошо известно, что [6] $\Psi_0 = L_2^{(2)}$.

Утверждение 1. Пусть $\varphi \in \Psi_2$. Тогда функция $\varphi(x)$ непрерывна на интервале $(-1, 1)$, для функции $\varphi^*(x) := \varphi(x)\sqrt{1-x^2}$ имеем $\varphi^*(-1) = \varphi^*(1) = 0$.

Доказательство. Из $\varphi \in \Psi_2$ следует, что $\varphi \in \Psi_0$, тогда

$$|\varphi(x)| = \left| \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k U_k(x) \right| = \left| \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k \frac{\sin((k+1)\arccos x)}{\sqrt{1-x^2}} \right| \leq$$

$$\begin{aligned} &\leq \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \sum_{k=0}^{\infty} |\xi_k| |\sin((k+1)\arccos x)| \leq \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \sum_{k=0}^{\infty} |\xi_k| (k+1) \frac{1}{k+1} \leq \\ &\leq \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \left(\sum_{k=0}^{\infty} |\xi_k|^2 (k+1)^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k+1)^2} \right)^{1/2} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \frac{\pi}{\sqrt{6}} \left(\sum_{k=0}^{\infty} |\xi_k|^2 (k+1)^2 \right)^{1/2} \leq \frac{C}{\sqrt{1-x^2}}, \end{aligned}$$

где константа C не зависит от x .

Отсюда следует, что функция $\varphi(x)$ непрерывна на интервале $(-1,1)$, так как ряд из непрерывных функций равномерно сходится на любом отрезке $[a,b] \subset (-1,1)$. Кроме того, функция $\varphi^*(x) = \varphi(x)\sqrt{1-x^2}$ ограничена на $[-1,1]$ и верны оценки $|\varphi(x)| \leq \frac{C}{\sqrt{1-x^2}}$ и $|\varphi^*(x)| \leq C$.

В формуле

$$\varphi(x)\sqrt{1-x^2} = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k \sin((k+1)\arccos x)$$

можно перейти к пределу при $x \rightarrow \pm 1$, поскольку этот ряд сходится равномерно на $[-1,1]$. Имеем $\varphi^*(-1) = \varphi^*(1) = 0$, так как все слагаемые ряда в пределе равны 0.

Утверждение 2. Функции $\varphi^*(x) = \varphi(x)\sqrt{1-x^2}$, где $\varphi \in \Psi_2$, удовлетворяют условию Гельдера с показателем μ , $\mu \leq \frac{1}{4}$.

Доказательство. Докажем, что для некоторой константы $C = C(\varphi^*)$

$$|\varphi^*(x) - \varphi^*(y)| \leq C|x-y|^{\frac{1}{4}}, \quad -1 \leq x, y \leq 1, \quad \forall \varphi \in \Psi_2.$$

Отсюда следует справедливость условия Гельдера при всех $0 < \mu \leq \frac{1}{4}$.

Пусть $\varphi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k U_k(x)$. Тогда, обозначая $x = \cos \theta$, $y = \cos \tau$, для $\varphi^*(x) = \varphi(x)\sqrt{1-x^2}$ имеем

$$|\varphi^*(x) - \varphi^*(y)| = \left| \sum_{n=0}^{\infty} \xi_n (\sin(n+1)\theta - \sin(n+1)\tau) \right| \leq 2 \sum_{n=0}^{\infty} |\xi_n| \left| \sin \frac{(n+1)(\theta - \tau)}{2} \right| \leq$$

$$\begin{aligned} &\leq 2\|\xi\|_2 \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\sin^2(n+1) \frac{\theta-\tau}{2}}{(n+1)^2} \right)^{1/2} = 2\|\xi\|_2 \left(|\theta-\tau| \left(\frac{\pi}{4} - \frac{1}{8} |\theta-\tau| \right) \right)^{1/2} \leq \\ &\leq \sqrt{\pi} \|\xi\|_2 |\theta-\tau|^{1/2} \leq \frac{\pi}{4\sqrt{2}} \|\xi\|_2 |\cos \theta - \cos \tau|^{1/4} = C|x-y|^{1/4}. \end{aligned}$$

Утверждение доказано.

Следствие 1. Для функций $\varphi^*(x) = \varphi(x)\sqrt{1-x^2}$, где $\varphi \in \Psi_2$, верна оценка

$$|\varphi^*(x)| \leq C(1-x)^{\frac{1}{4}}(1+x)^{\frac{1}{4}}. \quad (7)$$

Введем гильбертово пространство [2]

$$\hat{W}_2^1 := \left\{ \varphi : \varphi \in L_2^{(2)}; \varphi^*(x) := \varphi(x)\sqrt{1-x^2}, (\varphi^*)' \in L_2^{(2)}, \varphi^*(-1) = \varphi^*(1) = 0 \right\} \quad (8)$$

со скалярным произведением и нормой

$$\begin{aligned} (\varphi, \psi)_w &:= \int_{-1}^1 \varphi(x) \overline{\psi(x)} \sqrt{1-x^2} dx + \int_{-1}^1 \left(\varphi(x) \sqrt{1-x^2} \right)' \left(\overline{\psi(x) \sqrt{1-x^2}} \right)' \sqrt{1-x^2} dx, \\ \|\varphi\|_w^2 &:= \int_{-1}^1 |\varphi(x)|^2 \sqrt{1-x^2} dx + \int_{-1}^1 \left| \left(\varphi(x) \sqrt{1-x^2} \right)' \right|^2 \sqrt{1-x^2} dx. \end{aligned} \quad (9)$$

Утверждение 3. $\Psi_2 = \hat{W}_2^1$.

Доказательство. Пусть $\varphi \in \Psi_2$. Тогда $\varphi \in \Psi_0 = L_2^{(2)}$ и

$$\varphi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k U_k(x), \quad \xi_k = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 U_k(x) \varphi(x) \sqrt{1-x^2} dx,$$

а последовательность ξ_k такова, что $\sum_{k=0}^{\infty} |\xi_k|^2 (k+1)^2 < \infty$.

Применяя утверждение 1 (или оценку (7)) при интегрировании по частям, имеем

$$\begin{aligned} (k+1)\xi_k &= (k+1) \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 U_k(x) \varphi(x) \sqrt{1-x^2} dx = \\ &= (k+1) \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \sin((k+1)\arccos x) \varphi(x) dx = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \cos'((k+1)\arccos x) \varphi^*(x) dx = -\frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 T_{k+1}(x) (\varphi^*(x))' dx = \\ &= -\frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 T_{k+1}(x) \sqrt{1-x^2} (\varphi^*(x))' \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx, \end{aligned} \quad (10)$$

поэтому $-(k+1)\xi_k$ являются коэффициентами Фурье функции $\sqrt{1-x^2} (\varphi^*(x))'$ при разложении в ряд Фурье – Чебышева по многочленам

Чебышева 1-го рода $T_k(x)$. Тогда в силу условия $\sum_{k=0}^{\infty} |\xi_k|^2 (k+1)^2 < \infty$ получа-

ем, что $\sqrt{1-x^2} (\varphi^*(x))' \in L_2^{(1)}$. Следовательно, $(\varphi^*(x))' \in L_2^{(2)}$ и $\varphi \in \hat{W}_2^1$.

Пусть теперь $\varphi \in \hat{W}_2^1$, где пространство определяется (8) и (9). Тогда $(\varphi^*(x))' \in L_2^{(2)}$ и $\sqrt{1-x^2} (\varphi^*(x))' \in L_2^{(1)}$.

Выполним преобразования (10) в обратном порядке, учитывая условие $\varphi^*(-1) = \varphi^*(1) = 0$ при применении формулы интегрирования по частям, получим, что $\sum_{k=0}^{\infty} |\xi_k|^2 (k+1)^2 < \infty$ в силу неравенства Бесселя для коэффициентов

Фурье функции $\sqrt{1-x^2} (\varphi^*(x))'$ при разложении в ряд Фурье по многочленам Чебышева 1-го рода. Эта оценка доказывает, что $\varphi \in \Psi_2$, поскольку

$$\xi_k = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 U_k(x) \varphi(x) \sqrt{1-x^2} dx.$$

Утверждение 4. Вложение $\Psi_p \subset \Psi_q$ компактно при $p > q \geq 0$.

Доказательство. Введем пространства Соболева $W_2^s(0, 2\pi)$, $s \geq 0$, и опишем их с помощью рядов Фурье [7, с. 32]:

$$W_2^s(0, 2\pi) := \left\{ \varphi : \varphi = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \varphi_n e^{inx}, \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\varphi_n|^2 (1+|n|)^{2s}; x \in (0, 2\pi) \right\}.$$

Тогда вложение $W_2^s(0, 2\pi) \subset W_2^t(0, 2\pi)$ компактно при $s > t \geq 0$ [7, с. 32].

Далее нетрудно установить унитарную изометрию пространств $W_2^s(0, 2\pi)$ и h_{2s} . Теперь компактность вложения $\Psi_p \subset \Psi_q$ следует из компактности вложения $h_p \subset h_q$ при $p > q \geq 0$ и унитарной изометрии пространств Ψ_p и h_p .

Следствие 2. Вложение $\hat{W}_2^1 \subset L_2^{(2)}$ компактно.

Будем рассматривать гиперсингулярный интегральный оператор, определяемый формулой

$$H\varphi := \frac{d}{dx} \int_{-1}^1 \frac{1}{x-y} \varphi(y) \sqrt{1-y^2} dy, \quad \varphi \in \Psi_p. \quad (11)$$

Свойства этого оператора в классах Ψ_p определяются следующей леммой.

Лемма 1. Полиномы Чебышева 2-го рода U_n являются собственными функциями оператора H , и справедливы следующие выражения:

$$\frac{d}{dx} \int_{-1}^1 \frac{1}{x-y} U_n(y) \sqrt{1-y^2} dy = \pi(n+1) U_n(x), \quad n \geq 0.$$

Доказательство имеется в [8].

Из леммы 1 сразу следует

Теорема 1. Оператор $H: \Psi_{p+2} \rightarrow \Psi_p$, $p \geq 0$, непрерывно обратим.

Доказательство. Действительно, в силу леммы 1 для

$$\varphi \in \Psi_p, \quad \varphi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k U_k(x), \quad H\varphi = f,$$

имеем

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \eta_k U_k(x), \quad \eta_k = \pi(k+1) \xi_k, \quad \xi_k = \frac{\eta_k}{\pi(k+1)}, \quad (12)$$

откуда непосредственно получаем утверждение теоремы 1.

Утверждение 5. Формула (12) задает обратный оператор:

$$H^{-1}: \Psi_p \rightarrow \Psi_{p+2}, \quad p \geq 0; \quad H^{-1}f = \varphi,$$

где $f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \eta_k U_k(x)$, $\varphi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k U_k(x)$.

2. Компактные и фредгольмовы операторы в пространствах Ψ_p

Рассмотрим сингулярный интегральный оператор, определяемый формулой

$$S\varphi := \int_{-1}^1 \frac{1}{x-y} \varphi(y) \sqrt{1-y^2} dy, \quad \varphi \in \Psi_p. \quad (13)$$

Свойства оператора (13) в классах Ψ_p определяются следующей леммой [8].

Лемма 2. Справедливы следующие выражения:

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{x-y} U_n(y) \sqrt{1-y^2} dy = \pi T_{n+1}(x), \quad n \geq 0.$$

Известно также [8], что $T_n(x) = \frac{1}{2}U_n(x) - \frac{1}{2}U_{n-2}(x)$, $n \geq 2$.

Утверждение 6. Оператор $S: \Psi_p \rightarrow \Psi_p$, $p \geq 0$, является ограниченным.

Доказательство. Пусть

$$\varphi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k U_k(x), \quad \xi_k = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 U_k(x) \varphi(x) \sqrt{1-x^2} dx, \quad \sum_{k=0}^{\infty} |\xi_k|^2 (k+1)^p < \infty,$$

тогда

$$\begin{aligned} S\varphi &= \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k S U_k = \pi \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k T_{k+1} = \frac{\pi}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k (U_{k+1} - U_{k-1}) = \\ &= \frac{\pi}{2} \left(-\xi_1 U_0 + \sum_{k=1}^{\infty} (\xi_{k-1} - \xi_{k+1}) U_k \right) (U_{-1} \equiv 0). \end{aligned}$$

Далее получаем

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{\infty} |\xi_{k-1} - \xi_{k+1}|^2 (k+1)^p &\leq 2 \sum_{k=1}^{\infty} |\xi_{k-1}|^2 (k+1)^p + 2 \sum_{k=1}^{\infty} |\xi_{k+1}|^2 (k+1)^p \leq \\ &\leq 2^{p+1} \sum_{k=1}^{\infty} |\xi_{k-1}|^2 k^p + 2 \sum_{k=1}^{\infty} |\xi_{k+1}|^2 (k+2)^p \leq (2^{p+1} + 2) \sum_{k=0}^{\infty} |\xi_k|^2 (k+1)^p < \infty, \end{aligned}$$

поэтому $S\varphi \in \Psi_2$. Утверждение доказано.

Утверждение 7. Оператор $S: \Psi_p \rightarrow \Psi_q$, $p > q \geq 0$, является компактным.

Доказательство. По утверждению 6, $S: \Psi_p \rightarrow \Psi_p$ является ограниченным оператором. Тогда из компактности вложения $\Psi_p \subset \Psi_q$ при $p > q \geq 0$ получаем требуемое утверждение.

Следствие 3. Оператор $S: \hat{W}_2^1 \rightarrow L_2^{(2)}$ является компактным.

Пусть оператор K задан формулой

$$K\varphi \equiv \int_{-1}^1 K(x, y) \varphi(y) \sqrt{1-y^2} dy. \quad (14)$$

Теорема 2. Пусть $K(x, y) = \frac{\partial K_1(x, y)}{\partial y}$, функция $K_1(x, y)$ ограничена на

квадрате $[-1, 1] \times [-1, 1]$ и выполнено условие $K_1(x, y) \in L_2^{(2)} \times L_2^{(1)}$, т.е.

$$\int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} \int_{-1}^1 |K_1(x, y)|^2 \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} dx < \infty. \quad (15)$$

Тогда формула (14) определяет компактный оператор $K : \hat{W}_2^1 \rightarrow L_2^{(2)}$.

Доказательство. Имеем

$$\begin{aligned} |K\varphi| &= \left| \int_{-1}^1 K(x, y) \varphi(y) \sqrt{1-y^2} dy \right| = \left| \int_{-1}^1 \frac{\partial K_1}{\partial y} \varphi(y) \sqrt{1-y^2} dy \right| = \\ &= \left| \int_{-1}^1 K_1(x, y) (\varphi^*(y))' dy \right| = \left| \int_{-1}^1 \frac{K_1(x, y)}{\sqrt{1-y^2}} (\varphi^*(y))' \sqrt{1-y^2} dy \right| \leq \\ &\leq \|\varphi\|_W \int_{-1}^1 \frac{|K_1(x, y)|^2}{\sqrt{1-y^2}} dy, \end{aligned}$$

поэтому

$$\|K\varphi\|_{L_2^{(2)}}^2 \leq \|\varphi\|_W^2 \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} \int_{-1}^1 \frac{|K_1(x, y)|^2}{\sqrt{1-y^2}} dy dx,$$

что доказывает ограниченность оператора $K : \hat{W}_2^1 \rightarrow L_2^{(2)}$.

Обозначим через P_N и Q_N проекторы, действующие по формулам:

$$\begin{aligned} P_N \varphi &= \sum_{k=0}^{N-1} \xi_k U_k, \quad P_N : \Psi_2 \rightarrow \Psi_2, \quad \varphi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \xi_k U_k(x), \\ Q_N \psi &= \sum_{k=0}^{N-1} \eta_k U_k, \quad Q_N : \Psi_0 \rightarrow \Psi_0, \quad \psi(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \eta_k U_k(x), \end{aligned}$$

и рассмотрим конечномерные операторы $K_N = Q_N K P_N$, $N=1, 2, \dots$. Если $K\varphi = \psi$, то

$$\begin{aligned} \eta_n &= \sum_{k=0}^{\infty} a_{nk} \xi_k, \quad n \geq 0, \\ a_{nk} &= \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 K(x, y) U_n(x) U_k(y) \sqrt{1-x^2} \sqrt{1-y^2} dx dy. \end{aligned} \quad (16)$$

Аналогично, для K_N имеем

$$K_N \varphi = \psi, \quad \eta_k = \sum_{n=0}^{N-1} a_{nk} \xi_n, \quad 0 \leq k \leq N-1; \quad \eta_k = 0, \quad k > N. \quad (17)$$

Предположим, что для коэффициентов a_{nk} выполнено условие

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} (k+1)^{-2} |a_{nk}|^2 \leq C^2 < \infty. \quad (18)$$

Тогда по неравенству Коши – Буняковского получим

$$\|K\varphi\|_0^2 = \sum_{n=0}^{\infty} |\eta_n|^2 \leq \|\xi\|_2^2 \left(\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} |a_{nk}|^2 (k+1)^{-2} \right) \leq \|\xi\|_2^2 C^2 = \|\varphi\|_{\mathcal{W}}^2 C^2,$$

следовательно, $K : \Phi_2 \rightarrow \Phi_0$ и $\|K\| \leq C$. Далее,

$$\begin{aligned} \|(K - K_N)\varphi\|_0^2 &= \sum_{n=0}^{N-1} \left| \sum_{k=N}^{\infty} a_{nk} \xi_k \right|^2 + \sum_{n=N}^{\infty} \left| \sum_{k=0}^{\infty} a_{nk} \xi_k \right|^2 \leq \\ &\leq \|\varphi\|_2^2 \left(\sum_{k=N}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} (k+1)^{-2} |a_{nk}|^2 + \sum_{n=N}^{\infty} \sum_{k=0}^{\infty} (k+1)^{-2} |a_{nk}|^2 \right) \rightarrow 0 \end{aligned}$$

в силу (17) и (18), поэтому K есть предел по норме последовательности конечномерных операторов $\|K - K_N\| \rightarrow 0$, $N \rightarrow \infty$, и компактность будет доказана. Таким образом, достаточно установить справедливость (18).

С учетом (16) и ограниченности функции $K_1(x, y)$ на квадрате $[-1, 1] \times [-1, 1]$ имеем

$$\begin{aligned} \frac{1}{k+1} a_{nk} &= \frac{2}{\pi(k+1)} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 K(x, y) U_n(x) U_k(y) \sqrt{1-x^2} \sqrt{1-y^2} dx dy = \\ &= \frac{2}{\pi(k+1)} \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} U_n(x) \int_{-1}^1 \frac{\partial K_1(x, y)}{\partial y} \sin((k+1) \arccos x) dy dx = \\ &= \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} U_n(x) \int_{-1}^1 K_1(x, y) T_{k+1}(y) \frac{dy}{\sqrt{1-y^2}} dx. \end{aligned}$$

Последнее выражение совпадает (с точностью до константы) с коэффициентами Фурье функции $K_1(x, y) \in L_2^{(2)} \times L_2^{(1)}$, разложенной в ряд Фурье – Чебышева по многочленам $U_n(x) T_k(y)$ на квадрате $[-1, 1] \times [-1, 1]$. В силу $K_1(x, y) \in L_2^{(2)} \times L_2^{(1)}$ (оценка (15)) для этих коэффициентов выполнено неравенство Бесселя, которое совпадает с неравенством (18). Теорема 2 доказана.

Оператор K будет компактным и при менее сильных ограничениях на ядро.

Утверждение 8. Интегральный оператор с логарифмической особенностью ядра вида

$$L\varphi \equiv \int_{-1}^1 \ln \frac{1}{|x-y|} \varphi(y) \sqrt{1-y^2} dy \quad (19)$$

является компактным оператором $L: \hat{W}_2^1 \rightarrow L_2^{(2)}$.

Доказательство. Поскольку

$$\ln|x-y| = \frac{\partial}{\partial y} ((y-x) \ln|x-y| - (y-x))$$

и функция $(y-x) \ln|x-y| - (y-x)$ ограничена на квадрате $[-1,1] \times [-1,1]$, то из теоремы 2 получаем требуемое утверждение.

Теорема 3. Пусть для функции $K(x, y)$ выполнены условия теоремы 2, а α и β – произвольные числа. Тогда оператор

$$H + \alpha S + \beta L + K: \hat{W}_2^1 \rightarrow L_2^{(2)} \quad (20)$$

является фредгольмовым (с нулевым индексом).

Доказательство следует из формул (20), (19), (14), (13) (11), теорем 1, 2, следствия 3, утверждений 5, 8 и известных результатов о фредгольмовости суммы непрерывно обратимого и компактного операторов [9].

Заключение

Рассмотрены гиперсингулярные операторы на отрезке в специальных классах функций Ψ_p . Это классы функций, которые представляются рядами Фурье по многочленам Чебышева 2-го рода с некоторым ограничением на скорость убывания коэффициентов Фурье. Основным результатом настоящей статьи является доказательство фредгольмовости гиперсингулярного оператора в этих классах функций. Кроме того, сформулированы и доказаны критерии компактности операторов в классах Ψ_p . Эти результаты являются важными при формулировке и реализации численных методов решения гиперсингулярных уравнений.

Список литературы

1. Ilyinsky A. S., Smirnov Y. G. Electromagnetic Wave Diffraction by Conducting Screens. VSP, Utrecht, the Netherlands, 1998. 114 p.
2. Shestopalov Y. V., Smirnov Y. G., Chernokozhin E. V. Logarithmic Integral Equations in Electromagnetics. VSP, Utrecht, the Netherlands, 2000. 117 p.
3. Lifanov I. K., Poltavskii L. N., Vainikko M. M. Hypersingular Integral Equations and Their Applications. 1st ed. CRC Press, 2003. 396 p.
4. Сетуха А. В. Метод интегральных уравнений в математической физике : учеб. пособие. М. : Изд-во Моск. ун-та, 2023. 316 с.
5. Смирнов Ю. Г. Математические методы исследования задач электродинамики. Пенза : Инф.-изд. центр ПензГУ, 2009. 268 с.
6. Суетин П. К. Классические ортогональные многочлены. М. : Наука, 1979. 416 с.
7. Тейлор М. Псевдодифференциальные операторы. М. : Мир, 1985. 472 с.
8. Люк Ю. Специальные математические функции и их аппроксимации. М. : Мир, 1980. 608 с.
9. Треногин В. А. Функциональный анализ. М. : Наука, 1980. 440 с.

References

1. Ilyinsky A.S., Smirnov Y.G. *Electromagnetic Wave Diffraction by Conducting Screens*. VSP, Utrecht, the Netherlands, 1998:114.
2. Shestopalov Y.V., Smirnov Y.G., Chernokozhin E.V. *Logarithmic Integral Equations in Electromagnetics*. VSP, Utrecht, the Netherlands, 2000:117.
3. Lifanov I.K., Poltavskii L.N., Vainikko M.M. *Hypersingular Integral Equations and Their Applications*. 1st ed. CRC Press, 2003:396.
4. Setukha A.V. *Metod integral'nykh uravneniy v matematicheskoy fizike: ucheb. posobie*. = The method of integral equations in mathematical physics: textbook. Moscow: Izd-vo Mosk. un-ta, 2023:316. (In Russ.)
5. Smirnov Yu.G. *Matematicheskie metody issledovaniya zadach elektrodinamiki = Mathematical methods for studying problems of electrodynamics*. Penza: Inf.-izd. tsentr PenzGU, 2009:268. (In Russ.)
6. Suetin P.K. *Klassicheskie ortogonal'nye mnogochleny = Classical orthogonal polynomials*. Moscow: Nauka, 1979:416. (In Russ.)
7. Teylor M. *Psevdodifferentsial'nye operatory = Pseudodifferential operators*. Moscow: Mir, 1985:472. (In Russ.)
8. Lyuk Yu. *Spetsial'nye matematicheskie funktsii i ikh approksimatsii = Special mathematical functions and their approximations*. Moscow: Mir, 1980:608. (In Russ.)
9. Trenogin V.A. *Funktsional'nyy analiz = Functional analysis*. Moscow: Nauka, 1980:440. (In Russ.)

Информация об авторах / Information about the authors

Юрий Геннадьевич Смирнов

доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
математики и суперкомпьютерного
моделирования, Пензенский
государственный университет (Россия,
г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: mmm@pnzgu.ru

Yuriy G. Smirnov

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, head of the
sub-department of mathematics
and supercomputer modeling,
Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов / The author declares no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 20.03.2025

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 17.04.2025

Принята к публикации / Accepted 28.05.2025

УДК 517.3

doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-2

Определение структуры объектов и их визуализация в задаче восстановления диэлектрической проницаемости по результатам измерений ближнего электромагнитного поля

Б. А. Зайцев¹, М. Ю. Медведик²

^{1,2}Пензенский государственный университет, Пенза, Россия

¹zaytsevborist@gmail.com, ²_medv@mail.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Целью данного исследования является разработка эффективного метода определения свойств объекта сферической формы. Для этого, решается обратная задача дифракции с использованием модифицированных объединенных или обобщенных расчетных сеток. *Материалы и методы.* Представлено описание прямой и обратной задач, а также метод построения расчетной сетки. *Результаты и выводы.* Результат решения прямой задачи получают как решение соответствующего объемного интегрального уравнения. Для решения обратной задачи используется двухшаговый метод. Представлено подробное описание численного метода. Численные результаты решений задачи с зашумленными данными сравниваются с незашумленными данными.

Ключевые слова: задача дифракции, интегральное уравнение, метод коллокаций, визуализация, численный метод, математическая модель

Финансирование: работа выполнена при поддержке государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (Рег. № 124020200015-7)

Для цитирования: Зайцев Б. А., Медведик М. Ю. Определения структуры объектов и их визуализации в задаче восстановления диэлектрической проницаемости по результатам измерения ближнего электромагнитного поля // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2025. № 2. С. 15–26. doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-2

Determination of the structure of objects and their visualization in the problem of restoring the permittivity by the results of measurements of the near electromagnetic field

B.A. Zaytsev¹, M.Yu. Medvedik²

^{1,2}Penza State University, Penza, Russia

¹zaytsevborist@gmail.com, ²_medv@mail.ru

Abstract. The main purpose of this study is to develop an effective method for determining the structure of the spherical object. To do this, the inverse diffraction problem is solved using modified combined or generalized computational grids. The paper presents a description of the direct and inverse problems, as well as a method for constructing a computational grid. The result of solving the direct problem is obtained as a solution to the corresponding volume integral equation. To solve the inverse problem, a two-step method is used. A detailed description of the numerical method is presented. The numerical results of solving the problem with noisy data are compared with non-noisy data.

Keywords: diffraction problem, integral equation, collocation method, visualization, numerical method, mathematical model

Financing: the research was financed by the State task No. 124020200015-7 of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation.

For citation: Zaytsev B.A., Medvedik M.Yu. Determination of the structure of objects and their visualization in the problem of restoring the permittivity by the results of measurements of the near electromagnetic field. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2025;(2):15–26. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-2

Введение

Определение характеристик объектов через анализ внешних полей представляет ключевую научно-практическую задачу, особенно в контексте неразрушающего контроля и медицинской диагностики. Такой подход, известный как **обратная задача**, позволяет изучать внутреннюю структуру объектов без физического вмешательства. В медицине это направление играет важнейшую роль в диагностике патологий, включая онкологические заболевания.

Современные методы визуализации (рентген, магнитно-резонансная томография, ультразвуковое исследование, компьютерная томография) остаются основными инструментами, однако их точность на ранних стадиях заболеваний часто ограничена. Методы микроволновой томографии, основанные на решении обратных задач, предлагают альтернативу известным подходам. За счет математического моделирования взаимодействия полей с тканями можно реконструировать параметры объектов (плотность, проводимость, магнитную восприимчивость) с высокой детализацией. Например, анализируя характеристики отраженных радиоволн от тканей, можно построить изображение органов. Такой подход имеет ряд преимуществ: ранняя диагностика, отсутствие инвазивности, повышенная точность данных. Ранняя диагностика подразумевает выявление патологий до появления симптомов. Она демонстрирует высокое разрешение визуализации в процессе диагностики. Неинвазивность – это альтернатива болезненным процедурам, таким как биопсия. Повышенная точность данных означает, что магнитоэнцефалография превосходит электроэнцефалографию в анализе активности мозга за счет регистрации магнитных полей.

Однако решение обратных задач сопряжено с определенными вычислительными сложностями: нелинейность, некорректность и ресурсоемкость задачи. Нелинейность задачи требует использования нестандартных алгоритмов. Некорректность выражается в существенных ошибках при незначительных погрешностях в исходных данных (шум, погрешность измерений и т.д.). Ресурсоемкость означает, что классические численные методы требуют значительных временных и вычислительных затрат.

В исследовании предложен подход, преобразующий краевую задачу в интегральное уравнение, что исключает необходимость моделирования внешней среды. Компактная форма уравнения описывает взаимодействие волн с неоднородностями, а его решение позволяет восстановить параметры тканей на основе экспериментальных данных.

Несмотря на прогресс в технологиях, диагностика онкологических заболеваний остается сложной. Разработка новых алгоритмов и оборудования на базе обратных задач может повысить доступность, безопасность и точность медицинских исследований, что критически важно для улучшения диагностики [1–13].

Постановка задачи

Предметом исследования является распространение электромагнитных волн внутри тела биологического объекта и выявление скрытых неоднородностей в его структуре. Цель – восстановить параметры этих неоднородностей, т.е. их форму, размер и диэлектрические свойства, используя информацию о рассеянном поле. Решение этой задачи позволяет построить точную математическую модель, описывающую поведение электромагнитного поля вне тела, в частности, позволяющую определить значения напряженности поля в заранее заданных точках пространства. Важно избежать физического повреждения исследуемого объекта, неприемлемого для медицинского применения. Для моделирования мы рассматриваем точечный источник электромагнитного излучения, расположенный на некотором расстоянии от объекта. Этот источник генерирует электромагнитное поле, которое взаимодействует с объектом, проникая внутрь и рассеиваясь на неоднородностях. Будем использовать низкочастотные диапазоны электромагнитного спектра, поскольку это безопасно для здоровья пациентов. Кроме того, данный диапазон обладает большей глубиной проникновения в ткани и позволяет получить более полную информацию о внутренней структуре объекта.

Рассмотрим классическую задачу дифракции электромагнитного поля на этом объекте. Пусть тело $Q \in R^3$, расположенное в свободном пространстве, имеет диэлектрическую проницаемость, характеризующуюся функцией $\epsilon(x)$, и кусочно-гладкую границу ∂Q (рис. 1).

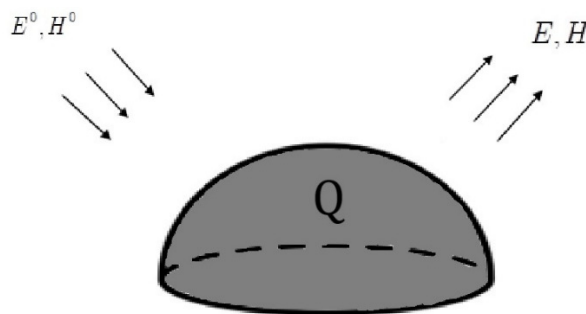


Рис. 1. Дифракционная модель поведения электромагнитных волн на неоднородном теле

Граница объекта предполагается кусочно-гладкой (это означает, что она может иметь изломы, но не бесконечно резкие перепады). За пределами объекта диэлектрическая проницаемость равна ϵ_0 – диэлектрической проницаемости свободного пространства. Рассмотрим задачу дифракции электромагнитного поля на теле Q . Вне тела Q диэлектрическая проницаемость $\epsilon = \epsilon_0$, где ϵ_0 – диэлектрическая проницаемость свободного пространства.

Источник поля $J_E^0 \in R^3 / \bar{Q}$ находится за пределами $\bar{Q}$. Падающее поле выражается через ток $\mathbf{J}_E^0$ [8].

Данная задача описывается системой уравнений Максвелла:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{\mathbf{H}} = -i\omega \hat{\epsilon} \vec{\mathbf{E}} + \vec{\mathbf{j}}_E^0, \\ \operatorname{rot} \vec{\mathbf{E}} = i\omega \mu_0 \vec{\mathbf{H}}. \end{cases} \quad (1)$$

Для $\vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{H}}$ должны выполняться краевые условия на границе тела:

$$[\vec{\mathbf{E}}_\tau] |_{\partial \bar{Q}} = 0, \quad [\vec{\mathbf{E}}_\tau] |_{\partial \bar{Q}} = 0, \quad (2)$$

где $[\cdot]$ – скачок предельных значений, а также условие конечности энергии в ограниченном объеме,

$$\mathbf{E}, \mathbf{H} \in L_{2,loc}(R^3). \quad (3)$$

Для $\vec{\mathbf{E}}, \vec{\mathbf{H}}$ должны выполняться краевые условия излучения на бесконечности

$$\left(\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial r} - ik\mathbf{E} \right) = o\left(\frac{1}{r} \right), \quad \left(\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial r} - ik\mathbf{H} \right) = o\left(\frac{1}{r} \right), \quad r \rightarrow \infty. \quad (4)$$

Пусть электромагнитное поле $\mathbf{E}, \mathbf{H}$ есть решение краевой задачи (1)–(4). Запишем систему уравнений Максвелла (1) для падающего поля:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{\mathbf{H}}_0 = -i\omega \epsilon_e \vec{\mathbf{E}}_0 \\ \operatorname{rot} \vec{\mathbf{E}}_0 = i\omega \mu_e \vec{\mathbf{H}}_0. \end{cases} \quad (5)$$

Вычитая (5) из (1), получим систему для рассеянного поля

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \vec{\mathbf{H}}_S = -i\omega \epsilon_e \vec{\mathbf{E}}_S + \mathbf{j}_E, \\ \operatorname{rot} \vec{\mathbf{E}}_S = i\omega \mu_e \vec{\mathbf{H}}_S. \end{cases} \quad (6)$$

Решение системы уравнений (6) представляется в виде

$$\mathbf{E}_S = i\omega \mu_e \mathbf{A} - \frac{1}{i\omega \epsilon_e} \operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{A}, \quad \mathbf{H}_S = \operatorname{rot} \mathbf{A}, \quad (7)$$

где $\mathbf{A}$ – векторный потенциал.

Применяя решения (7) в (6), перепишем уравнению в следующем виде:

$$\Delta \mathbf{A} + k_e^2 \mathbf{A} = -\mathbf{j}_E. \quad (8)$$

Последнее уравнение имеет единственное решение. Это решение записывается в форме объемного потенциала:

$$\mathbf{A}(x) = \int_Q G(x, y) \mathbf{j}_p(y) dy, \quad x \in R^3, \quad (9)$$

где $G(x, y) = \frac{e^{ik|x-y|}}{4\pi|x-y|}$.

Рассматриваемая задача является векторной и может быть сведена к объемному сингулярному интегральному уравнению [1] следующего вида:

$$\vec{E}^0(x) = \xi(x)\vec{J}(x) - k_0^2 \int_Q G(r)\vec{J}(y)dy - \text{grad div} \int_Q G(r)\vec{J}(y)dy, \quad x \in Q, \quad (10)$$

здесь $G(x, y)$ – функция Грина; $\vec{E}^0(x)$ – падающее поле; $\vec{J}(x)$ – токи поляризации внутри тела; $\xi(x) = \left(\frac{\varepsilon(x)}{\varepsilon_0} - 1\right)^{-1}$ и $\vec{J}(x) = \left(\frac{\varepsilon(x)}{\varepsilon_0} - 1\right)^{-1} \vec{E}(x)$.

Требуется определить электромагнитное поле $\vec{E}, \vec{H}$. Ядро уравнения (10) имеет особенность. Для задачи (1)–(4) справедливо следующее утверждение о единственности однозначной разрешимости [8].

Перепишем объемное интегральное уравнение (4) в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(x) = \mathbf{E}^0(x) + k_0^2 \int_Q G_E(x, y) \left(\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right) \mathbf{E}(y) dy + \\ + \text{grad div} \int_Q G_E(x, y) \left(\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right) \mathbf{E}(y) dy. \end{aligned} \quad (11)$$

Существует несколько методов решения данного интегрального уравнения, среди которых выберем метод коллокации [7–13]. Этот метод применяется для решения интегрального уравнения (11), благодаря чему определяются значения электромагнитного поля внутри определенной области, такой как внутренняя структура тела. Далее, основываясь на полученных значениях поля, строится модель, которая позволяет расширить расчет поля за пределы данной области. Для этого координаты каждой точки наблюдения подставляются в правую часть уравнения (11) и в соответствующую функцию Грина. Таким образом, мы получаем возможность рассчитать значения электромагнитного поля не только внутри исходной области, но и в окружающем пространстве, используя ранее найденное решение как основу для дальнейших расчетов. Функция Грина в данном контексте играет ключевую роль, позволяя учесть влияние поля внутри области на внешнее поле:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(x_{ob}) = \mathbf{E}^0(x_{ob}) + k_0^2 \int_Q G_E(x_{ob}, y) \left(\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right) \mathbf{E}(y) dy + \\ + \text{grad div} \int_Q G_E(x_{ob}, y) \left(\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right) \mathbf{E}(y) dy. \end{aligned} \quad (12)$$

Решение данного уравнения позволяет смоделировать значение поля в точках наблюдения x_{ob} .

Обратная задача восстановления неоднородностей на трехмерных объектах

Пусть неоднородное тело Q произвольной формы расположено в свободном пространстве. Рассмотрим такие вопросы, как распространение электромагнитных волн внутри тела и поиск в нем неоднородностей. Будем предполагать, что поиск решения второй задачи производится неинвазивным методом, не допускающим нарушения целостности объекта. В качестве источника электромагнитного поля рассматривается точечный излучатель, расположенный снаружи тела на некотором расстоянии от него. Электромагнитное поле, создаваемое этим источником, воздействует на тело. Одной из ключевых целей работы является восстановление характеристик неоднородностей при низких частотах, что особенно актуально в медицинской диагностике. Распределение электромагнитного поля в теле описывается уравнениями Максвелла. Используя метод, описанный ранее, сведем систему уравнений Максвелла к объемному интегральному уравнению на теле (11). Чтобы определить значения поля за пределами тела в заданных точках x_{ob} , используется модель перерасчета поля на основе известных значений, полученных при решении прямой задачи дифракции электромагнитной волны. Эта модель позволяет пересчитать параметры поля исходя из результатов решения исходной задачи, что дает возможность предсказывать поведение поля вне исследуемого объекта. Численно находим значение поля $E(y)$ и используем описанную выше модель, позволяющую вычислять значения поля за пределами тела. Для этого подставим координаты всех точек наблюдения x_{ob} в правую часть уравнения и его функцию Грина (12), где x_{ob} обозначает запись точек наблюдения.

Для выполнения реальных экспериментов используется специальная аппаратура, такая как векторный анализатор цепей, которая позволяет измерять значения электромагнитного поля в различных точках пространства с высокой точностью. После завершения этапа сбора данных мы можем перейти к решению следующей задачи – определению неоднородностей среды и их характеристик.

Важным аспектом является выбор местоположения точек наблюдения. Согласно условиям задачи эти точки должны находиться вне исследуемого объекта, на небольшом расстоянии от него. Проведенный анализ большого объема смоделированных данных показал, что наиболее эффективным способом размещения точек наблюдения является их равномерное распределение вокруг объекта. Тем не менее равномерное окружение объекта точками наблюдения не всегда оптимально, особенно если источник излучения находится близко к точкам наблюдения. В таком случае возникает эффект «засветки», когда интенсивность падающего излучения значительно превышает отраженную волну, что затрудняет анализ отраженного сигнала.

Пример расположения точек наблюдения представлен на рис. 2, где цветными прямоугольниками отмечены места неоднородностей. Далее, используя интегральное уравнение, можно выписать формулы, позволяющие определить значения и места расположения параметров неоднородности. Моделируя в точках x_{ob} значение электромагнитного поля, решаем поставленную задачу.

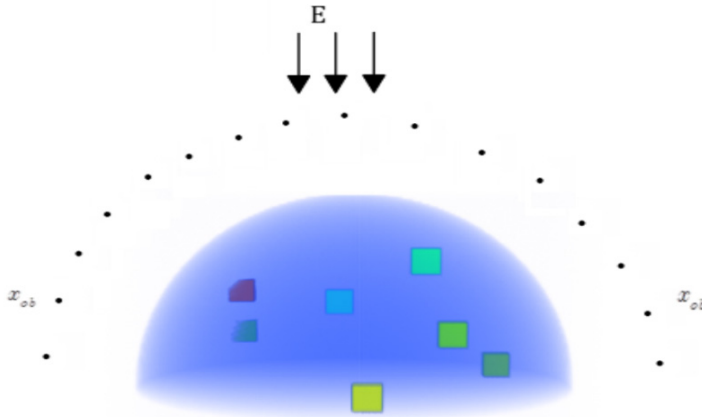


Рис. 2. Исследуемое неоднородное тело Q , имеющее форму полусферы, точки наблюдения x_{ob} , расположенные за пределами тела, источник поля E , неоднородности различного размера

Рассмотрим вопрос обнаружения неоднородностей внутри исследуемого объекта. Для поиска неоднородностей воспользуемся двухшаговым алгоритмом, подробно изложенным в трудах [7–13].

Определим значение тока $J(y)$ через поле $J(y) = \left[\frac{\varepsilon(y)}{\varepsilon_0} - 1 \right] E(y)$. Далее решим уравнение относительно тока $J(y)$:

$$E_m(x_{ob}) - E^0(x_{ob}) = k_0^2 \int_Q G_E(x_{ob}, y) J(y) dy + \text{grad div} \int_Q G_E(x_{ob}, y) J(y) dy, \quad x_{ob} \notin Q, \quad (13)$$

где $E_m(x_{ob})$ – моделируемое поле в точках x_{ob} .

Далее применяя формулу

$$\left(\frac{\varepsilon(x)}{\varepsilon_0} - 1 \right) = \frac{J(x)}{E^0(x) + \left(k_0^2 \int_Q G_E(x, y) J(y) dy + \text{grad div} \int_Q G_E(x, y) J(y) dy \right)}, \quad x \in Q,$$

вычислим значение диэлектрической проницаемости.

Уравнение (13) представляет собой объемное сингулярное интегральное уравнение первого рода. Оно характеризуется наличием особой точки в ядре интеграла, что делает его решение крайне сложным и требует применения специальных численных методов. Применим метод объединенных расчетных сеток для получения устойчивого решения уравнения. Важность правильного подхода к решению такого типа уравнений связана с необходимостью обеспечения устойчивости вычислительного процесса и получения физически корректных результатов. Ошибки в учете сингулярности могут при-

вести к значительным погрешностям в итоговых значениях диэлектрической проницаемости, что повлияет на точность всей модели.

Численные результаты

Для решения данного уравнения применим следующую схему. Построим на теле Q равномерную, регулярную расчетную сетку размером $N_1 \times N_2 \times N_3$. Таким образом определим ячейки сетки и их центральные точки:

$$\Pi_{klm} = \{x : x_{1,k} < x_1 < x_{1,k+1}, x_{2,l} < x_l < x_{2,l+1}, x_{3,m} < x_3 < x_{3,m+1}\},$$

$$x_{1,k} = a_1 + \frac{a_2 - a_1}{N_1}k, \quad x_{2,l} = b_1 + \frac{b_2 - b_1}{N_2}l, \quad x_{3,m} = c_1 + \frac{c_2 - c_1}{N_3}m,$$

где $k = 0, \dots, N_1 - 1$, $l = 0, \dots, N_2 - 1$, $m = 0, \dots, N_3 - 1$.

После этого, следуя процедуре построения объединенной расчетной сетки, смещаем все ячейки сетки на одинаковое расстояние по всем направлениям в обе стороны. В результате образуется расчетная сетка, состоящая из взаимно перекрывающихся ячеек. Такая конструкция позволяет более точно моделировать физические процессы и улучшает качество численных результатов.

Потребуем, чтобы для выбранных базисных функций выполнялось условие аппроксимации

$$\forall x \in X \lim_{n \rightarrow \infty} \inf_{\bar{x} \in X_n} \|x - \bar{x}\| = 0.$$

Для уравнения $A\varphi = f$, $(\varphi, f \in X)$ с линейным ограниченным оператором $A: X \rightarrow X$ в гильбертовом пространстве X приближенное решение $\varphi_n \in X_n$ определяется из уравнения $P_n A \varphi_n = P_n f$, где $\varphi_n \in X_n$ (X_n есть n -мерное подпространство пространства X), $P_n: X \rightarrow X_n$ – проективный оператор.

Уравнение $P_n A \varphi_n = P_n f$ эквивалентно

$$(A\varphi_n)(x^j) = f(x^j), \quad j = 1, \dots, n. \quad (14)$$

Представим приближенное решение уравнения в виде линейной комбинации базисных функций: $\varphi_n = \sum_{k=1}^n c_k v_k$. Подставив это представление в уравнение (14), получим систему линейных алгебраических уравнений для нахождения c_k :

$$\sum_{k=1}^n c_k (A v_k)(x^j) = f(x^j), \quad j = 1, \dots, n.$$

Матрицу, полученную из метода коллокации, представим в блочной форме:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} A_{11} & A_{12} & A_{13} & B_1 \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & B_2 \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & B_3 \end{array} \right).$$

Элементы B_k и A_{kl} определяются из соотношений:

$$B_k^s = E_0^k(x_s), \quad (15)$$

$$A_{kl}^{sj} = \xi_{kl} f_j^l(x_s) - \delta_{kl} k_0^2 \int_Q G(x_s, y) f_j^l(y) dy - \frac{\partial}{\partial x_k} \int_Q \frac{\partial}{\partial x_l} G(x_s, y) f_j^l(y) dy. \quad (16)$$

Решая систему линейных алгебраических уравнений, определяем значение тока электромагнитного поля. Далее, следуя схеме двухшагового метода, определяем значение диэлектрической проницаемости.

Для визуализации структуры объекта использовалась свободно распространяемая программа ParaView. На основе данных, полученных с применением описанного ранее алгоритма, был создан файл формата VTK. Для удобства исходная геометрия задачи задавалась на кубическом объекте. Информация о структуре неоднородностей хранилась в специальном векторе, описывающем геометрию задачи. Значения этого вектора заполнялись случайным образом. Для вычисления интеграла (16) по полусфере применялось интегрирование только по носителям, принадлежащим сфере. Если носитель лишь частично входил в сферу, интегрирование проводилось исключительно по точкам, расположенным внутри сферы. Процедура отбора носителей для верхней и нижней полусферы изображена на рис. 3.

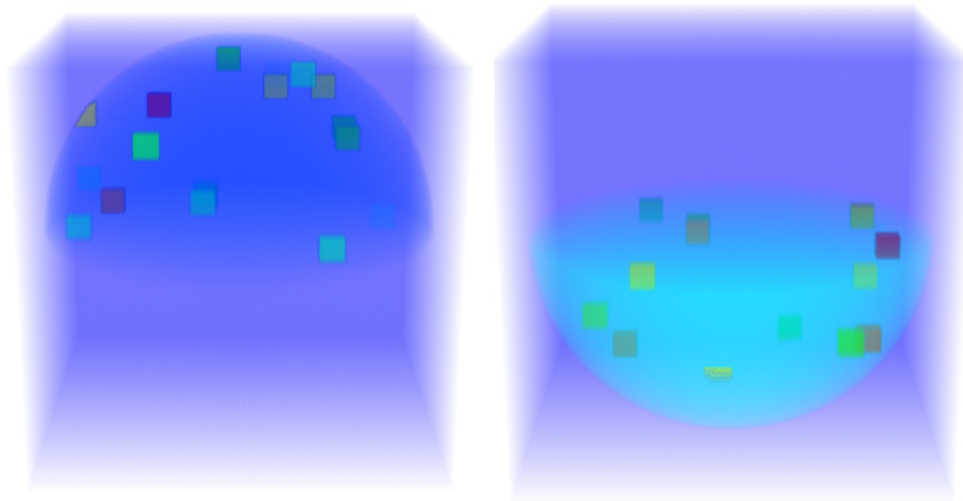


Рис. 3. Верхняя и нижняя полусферы, выделенные из кубического объекта. Цветными квадратиками обозначены неоднородности, попадающие внутрь полусфер

На рис. 4, 5 визуализирована структура исходного тела и структура тела, полученного на разных этапах решения задачи. Решение задачи производилось при частоте падающего поля 1,33 ГГц. Левая часть рис. 4 отображает

реальную структуру тела, правая показывает восстановленные значения при решении задачи с внесением случайной погрешности во входные данные на уровне 4 %. На правой части рисунка хорошо видны различные артефакты, являющиеся ложными решениями. Однако путем фильтрации, основанной на вращении объекта, удастся определить и удалить ложные решения (рис. 5).

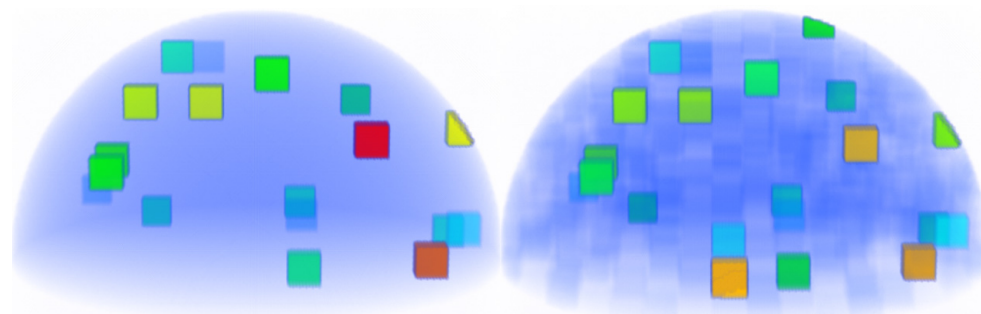


Рис. 4. Верхняя и нижняя полусферы, выделенные из кубического объекта. Цветными квадратиками обозначены неоднородности, попадающие внутрь полусфер

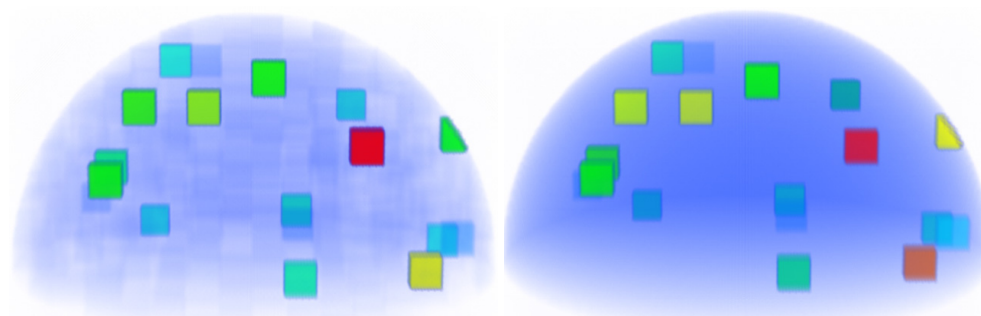


Рис. 5. Верхняя и нижняя полусферы, выделенные из кубического объекта. Цветными квадратиками обозначены неоднородности, попадающие внутрь полусфер

Заключение

Предложенный алгоритм позволяет эффективно восстанавливать значения диэлектрической проницаемости на сложных объектах и структурах при частотах от 1 до 10 ГГц. Данное свойство позволяет использовать алгоритм в медицинской диагностике. Опираясь на данные, полученные в процессе визуализации объекта, можно сделать вывод, что алгоритм устойчив к внесению помех на этапе решения задачи.

Список литературы

1. Самохин А. Б. Интегральные уравнения и итерационные методы в электромагнитном рассеянии. М. : Радио и связь, 1998. 160 с.
2. Ильинский А. С., Свешников А. Г. Прямые и обратные задачи электродинамики // Вестник Московского университета. Серия 15: Вычислительная математика и кибернетика. 1978. № 4. С. 3–11.
3. Буров В. А., Румянцева О. Д. Обратные волновые задачи акустической томографии. Ч. II: Обратные задачи акустического рассеяния. 2-е изд. М. : Ленанд, 2021. 760 с.

4. Дмитриев В. И. Обратные задачи геофизики. М. : МАКС Пресс, 2012. 340 с.
5. Smirnov Y. G., Tsupak A. A. *Diffraction of Acoustic and Electromagnetic Waves by Screens and Inhomogeneous Solids: Mathematical Theory*. Moscow : RU-SCIENCE, 2018. 212 p.
6. Medvedik M. Yu., Smirnov Yu. G. Ellipticity of the electric field integral equation for absorbing media and the convergence of the Rao-Wilton-Glisson method // *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2014. Vol. 54. P. 114–122.
7. Medvedik M. Yu., Lapich A. O. Method of Volume Singular Equations for Solving a Nonlinear Problem of Diffraction in a Semi-Infinite Rectangular Waveguide // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2023. Vol. 44 (9). P. 4028–4033.
8. Medvedik M. Yu., Smirnov Yu. G., Tsupak A. A. Inverse vector problem of diffraction by inhomogeneous body with a piecewise smooth permittivity // *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*. 2024. Vol. 32, № 3. P. 453–465.
9. Medvedik M. Yu., Moskaleva M. A. Numerical Method for Recovering Permittivity of an Inhomogeneous Dielectric Body Placed in a Semi-Infinite Rectangular Waveguide // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2022. Vol. 43 (5). P. 1245–1250.
10. Medvedik M. Yu., Evstigneev R. O. Problem of Determination of Inhomogeneity Parameters of Dielectric Body by Measurement of the Near Field // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2020. Vol. 41 (7). P. 1320–1324.
11. Medvedik M. Yu., Evstigneev R. O. Reconstruction of Inhomogeneities in a Hemisphere from the Field Measurements // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2019. Vol. 40 (10). P. 1653–1659.
12. Smirnov Yu. G., Medvedik M. Yu., Moskaleva M. A. Two-Step Method for Permittivity Determination of an Inhomogeneous Body Placed in a Rectangular Waveguide // *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2018. Vol. 39 (8). P. 1140–1147.
13. Smirnov Yu. G., Tsupak A. A., Medvedik M. Y. Non-iterative two-step method for solving scalar inverse 3D diffraction problem // *Inverse Problems in Science and Engineering*. 2020. Vol. 28. P. 1474–1492.

References

1. Samokhin A.B. *Integral'nye uravneniya i iteratsionnye metody v elektromagnitnom rasseyanii* = *Integral equations and iterative methods in electromagnetic scattering*. Moscow: Radio i svyaz', 1998:160. (In Russ.)
2. Il'inskiy A.S., Sveshnikov A.G. Direct and inverse problems of electrodynamics. *Vestnik Moskovskogo universiteta. Seriya 15: Vychislitel'naya matematika i kibernetika* = *Bulletin of Moscow University. Series 15: Computational mathematics and cybernetics*. 1978;(4):3–11. (In Russ.)
3. Burov V.A., Rummyantseva O.D. *Obratnye volnovye zadachi akusticheskoy tomografii. Ch. II: Obratnye zadachi akusticheskogo rasseyaniya. 2-e izd.* = *Inverse wave problems of acoustic tomography. Part 2: Inverse problems of acoustic scattering. The 2nd edition*. Moscow: Lenand, 2021:760. (In Russ.)
4. Dmitriev V.I. *Obratnye zadachi geofiziki* = *Inverse problems of geophysics*. Moscow: MAKS Press, 2012:340. (In Russ.)
5. Smirnov Y.G., Tsupak A.A. *Diffraction of Acoustic and Electromagnetic Waves by Screens and Inhomogeneous Solids: Mathematical Theory*. Moscow: RU-SCIENCE, 2018:212.
6. Medvedik M.Yu., Smirnov Yu.G. Ellipticity of the electric field integral equation for absorbing media and the convergence of the Rao-Wilton-Glisson method. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2014;54:114–122.
7. Medvedik M.Yu., Lapich A.O. Method of Volume Singular Equations for Solving a Nonlinear Problem of Diffraction in a Semi-Infinite Rectangular Waveguide. *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2023;44(9):4028–4033.

8. Medvedik M.Y., Smirnov Yu.G., Tsupak A.A. Inverse vector problem of diffraction by inhomogeneous body with a piecewise smooth permittivity. *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*. 2024;32(3):453–465.
9. Medvedik M.Yu., Moskaleva M.A. Numerical Method for Recovering Permittivity of an Inhomogeneous Dielectric Body Placed in a Semi-Infinite Rectangular Waveguide. *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2022;43(5):1245–1250.
10. Medvedik M.Yu., Evstigneev R.O. Problem of Determination of Inhomogeneity Parameters of Dielectric Body by Measurement of the Near Field. *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2020;41(7):1320–1324.
11. Medvedik M.Yu., Evstigneev R.O. Reconstruction of Inhomogeneities in a Hemisphere from the Field Measurements. *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2019;40(10):1653–1659.
12. Smirnov Yu.G., Medvedik M.Yu., Moskaleva M.A. Two-Step Method for Permittivity Determination of an Inhomogeneous Body Placed in a Rectangular Waveguide. *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2018;39(8):1140–1147.
13. Smirnov Yu.G., Tsupak A.A., Medvedik M.Y. Non-iterative two-step method for solving scalar inverse 3D diffraction problem. *Inverse Problems in Science and Engineering*. 2020;28:1474–1492.

Информация об авторах / Information about the authors

Борис Алексеевич Зайцев

студент, Пензенский
государственный университет
(Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: zaytsevborist@gmail.com

Boris A. Zaitsev

Student, Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Михаил Юрьевич Медведик

кандидат физико-математических наук,
доцент, доцент кафедры математики
и суперкомпьютерного моделирования,
Пензенский государственный
университет (Россия,
г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: _medv@mail.ru

Mikhail Yu. Medvedik

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor, associate
professor of the sub-department
of mathematics and supercomputer
modeling, Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 21.04.2025

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 14.05.2025

Принята к публикации / Accepted 20.05.2025

УДК 517.956

doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-3

Вариант формальной теоремы о нулях линейных дифференциальных операторов

В. И. Титаренко¹, А. И. Фомин²¹Государственный университет управления, Москва, Россия¹vera_xmel@mail.ru, ²fomin45@mail.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* В теории линейных дифференциальных уравнений существенную роль играют преобразования, порожденные дифференциальными заменами зависимых переменных. Исследование этих преобразований привело А. И. Фомина к созданию общей теории дифференциальных алгебр симметрии однородных линейных систем дифференциальных уравнений и к теории дифференциальных гомоморфизмов. Эти теории оказались тесно связанными с понятием теоремы о нулях линейных дифференциальных операторов (ЛДО). К настоящему времени доказано несколько теорем о нулях ЛДО, но этих теорем недостаточно для исследования алгебр дифференциальной симметрии и соотношений между разными типами линейных однородных систем дифференциальных уравнений. Формулировка и доказательство новых теорем о нулях ЛДО является актуальной задачей. Основная цель работы – формулировка и доказательство варианта формальной теоремы о нулях ЛДО. Другая важная цель – построение примеров применения теоремы, которые подтверждают ее полезность и основательность. *Материалы и методы.* Приведены общие сведения о работах, в которых представлены теоремы о нулях ЛДО. Поясняется смысл формальных теорем о нулях и роль, которую такие частные теоремы могут играть в общей теории. Представлены основные обозначения и понятия, приведено определение теоремы о нулях линейных дифференциальных операторов для семейства модулей над кольцом скалярных линейных дифференциальных операторов. Описаны элементы теории псевдообратных матриц и операторов, которые используются при доказательстве основной теоремы работы. *Результаты.* Формулируется и доказывается вариант формальной теоремы о нулях. Приведены примеры семейств линейных дифференциальных операторов, для которых выполняются условия теоремы 1 (теоремы 2, 3, 4). Описан метод построения локальных сечений в общей задаче псевдообращения; в новой ситуации применена псевдообратная матрица; использован специальный базис, в котором координаты ЛДО совпадают с его коэффициентами; введено полезное понятие матрицы главных символов ЛДО по столбцам. *Выводы.* Результат работы могут служить основой доказательства справедливости формальной теоремы о нулях для множества конкретных линейных дифференциальных операторов и семейств операторов.

Ключевые слова: линейный дифференциальный оператор, алгебры дифференциальной симметрии, теоремы о нулях, формальная теорема, псевдообратный оператор, псевдообратная матрица, матрица главных символов линейного дифференциального оператора по столбцам

Для цитирования: Титаренко В. И., Фомин А. И. Вариант формальной теоремы о нулях линейных дифференциальных операторов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2025. № 2. С. 27–43. doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-3

A variant of the formal theorem on the zeros of linear differential operators

V.I. Titarenko¹, A.I. Fomin²

¹State University of Management, Moscow, Russia

¹vera_xmel@mail.ru, ²fomin45@mail.ru

Abstract. *Background.* In the theory of linear differential equations, transformations generated by differential substitutions of dependent variables play an essential role. The study of these transformations led by A.I. Fomin to create a general theory of differential symmetry algebras of homogeneous linear systems of differential equations and to the theory of differential homomorphisms. These theories turned out to be closely related to the concept of the theorem on the zeros of linear differential operators (LDO). To date, several theorems on the zeros of linear equations have been proved, but these theorems are not sufficient to study the algebras of differential symmetry and the relations between different types of linear homogeneous systems of differential equations. The formulation and proof of new theorems about the zeros of L.D.O. is an urgent task. The main objective of the work is to formulate and prove a version of the formal theorem on the zeros of linear differential operators. Another important objective is to construct examples of the theorem's application that confirm its usefulness and validity. *Materials and methods.* Section 1 (Introduction) provides general information on the works that present theorems on zeros of LDO. The meaning of formal theorems on zeros and the role that such particular theorems can play in the general theory are explained. Section 2 presents the basic notations and concepts, and provides a definition of the theorem on zeros of linear differential operators for a family of modules over the ring of scalar linear differential operators. Section 3 describes the elements of the theory of pseudoinverses of matrices and operators, which are used in proving the main theorem of the work. *Results.* Section 4 formulates and proves a version of the formal theorem on zeros (Theorem 1). Section 5 gives examples of families of linear differential operators for which the conditions of Theorem 1 are satisfied (Theorems 2, 3, 4). In addition, a method for constructing local sections in the general pseudoinverse problem is described; a pseudoinverse matrix is applied in a new situation; a special basis is used in which the coordinates of the LDO coincide with its coefficients; a useful concept of the matrix of the main symbols of the LDO by columns is introduced. *Conclusions.* The results of the work can serve as the basis for proving the validity of the formal theorem on zeros for a set of specific linear differential operators and families of operators.

Keywords: linear differential operator, differential symmetry algebras, zero theorems, formal theorem, pseudo-inverse operator, pseudo-inverse matrix, matrix of the main symbols of LDO by columns

For citation: Titarenko V.I., Fomin A.I. A variant of the formal theorem on the zeros of linear differential operators. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* = *University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2025;(2):27–43. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-3

Введение

Теорема о нулях линейных дифференциальных операторов упоминалось в работах [1, 2], равносильные понятия были использованы в статье [3], в которой доказаны варианты глобальной теоремы о нулях невырожденных линейных дифференциальных операторов (ЛДО) с постоянными коэффициентами, эллиптических ЛДО с вещественно аналитическими коэффициентами и невырожденных обыкновенных ЛДО с бесконечно дифференцируемыми

коэффициентами (теоремы 5.1, 3.1 в [3]), а в теореме 4.1 установлен вариант локальной теоремы о нулях. Однако окончательный вид понятие теоремы о нулях ЛДО приобрело в работе [4].

Настоящую статью следует рассматривать как продолжение работ [3, 4]. Здесь устанавливается вариант формальной теоремы о нулях ЛДО. Суть формальных теорем состоит в том, что если некоторый линейный дифференциальный оператор G обращается в нуль на всех формальных решениях однородной линейной системы дифференциальных уравнений $Pv=0$ в некоторой области $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$, то он представляется в виде произведения $G = LP$ (делится на оператор этой системы). При этом на коэффициенты левого делителя L могут накладываться дополнительные условия. В частности, в точных формулировках теорем о нулях коэффициенты оператора L должны быть того же типа, что и коэффициенты оператора P (например, бесконечно дифференцируемые, если бесконечно дифференцируемы коэффициенты ЛДО). Более точный смысл этому условию придает понятие кольца коэффициентов.

Формальные теоремы выглядят как весьма частный случай по отношению ко всему многообразию теорем о нулях. Существуют еще локальные и глобальные теоремы о нулях. Однако при постановке общей задачи о делении одного заданного ЛДО на другой оператор обычно говорится, что все нули заданного ЛДО являются и нулями другого оператора. А формальные решения, конечно же, входят в число всех решений соответствующей однородной линейной системы уравнений.

Можно выдвинуть гипотезу, что если к решениям системы уравнений присоединить обобщенные решения, то оператор, который обращается в нуль на всех решениях системы, будет обязательно делиться на оператор этой системы. Но пока такая гипотеза ничем не обоснована. В то же время с технической точки зрения расширение запаса решений системы однородных линейных дифференциальных уравнений до формальных решений позволяет получать новые условия справедливости теорем о нулях ЛДО.

1. Предварительные понятия

Пусть Ω – область в $\mathbb{R}^n$, $x = (x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$, $\partial^\alpha = \partial^{|\alpha|} / \partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}$, $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{Z}_+^n$, $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_n$; $P = P(x, \partial) = \sum_{\alpha} a_{\alpha}(x) \partial^{\alpha}$ – скалярный (для одной функции) линейный дифференциальный оператор с коэффициентами $a_{\alpha}(x) \in C^{\infty}(\Omega, \mathbb{C})$; D – алгебра таких ЛДО конечного порядка $\text{ord } P = \max\{|\alpha| : a_{\alpha} \neq 0\}$; $\text{ord}_x P = \max\{|\alpha(x)| : a_{\alpha}(x) \neq 0\}$ – порядок ЛДО в точке x (точечный порядок); $D(r, m)$ – множество матричных ЛДО $P = \|P_{ij}\|$ размера $r \times m$ с элементами $P_{ij} \in D$; $\text{ord } P = \max(\text{ord } P_{ij})$ – порядок матричного ЛДО, $D^m(P)$ – подмодуль свободного левого D -модуля $D^m \approx D(1, m)$ с образующими $P_i = (P_{i1}, \dots, P_{im})$; $\mathfrak{M}_P = D^m / D^m(P)$, $\{V_{\gamma} : \gamma \in \Gamma\}$ – семейство левых унитарных D -модулей, $v^{\gamma} = (v_1^{\gamma}, \dots, v_m^{\gamma}) \in V_{\gamma}^m$;

$P_i v^\gamma = P_{i1} v_1^\gamma + \dots + P_{im} v_m^\gamma$, $P v^\gamma = (P_1 v^\gamma, \dots, P_r v^\gamma)$, $(V_\gamma^m)_P = \{v^\gamma \in V^m : P v^\gamma = 0\}$ – подпространство решений однородной линейной системы дифференциальных уравнений (уравнения) $P v^\gamma = 0$ в V_γ^m , $D^m(P, \{V_\gamma\}) = \{\beta \in D^m : \beta(V_\gamma^m)_P = 0, \forall \gamma \in \Gamma\}$; $A = D(m, m)$ – ассоциативная алгебра с единицей по отношению к стандартным операциям над матричными ЛДО; $J_P = \{a \in A : a_i \in D^m(P)\}$, $A_P = \{a \in A : J_P a \subseteq J_P\}$ – нормализатор левого идеала J_P ; $A_P \{V_\gamma\} = \{a \in A : a(V_\gamma^m)_P \subseteq (V_\gamma^m)_P, \forall \gamma \in \Gamma\}$ – алгебра операторов дифференциальной симметрии семейства уравнений $P v^\gamma = 0$; $J_P \{V_\gamma\} = \{a \in A : a(V_\gamma^m)_P = 0, \forall \gamma \in \Gamma\}$ – левый идеал A . Алгебры $A_P \{V_\gamma\}$ и A_P называются соответственно внешней и внутренней алгебрами дифференциальной симметрии семейства уравнений $P v^\gamma = 0$, а факторалгебры $T_P \{V_\gamma\} = A_P \{V_\gamma\} / J_P \{V_\gamma\}$ и $T_P = A_P / J_P$ – внешней и внутренней трансекторными алгебрами симметрии [3, 4].

Определение 1. Для ЛДО $P \in D(r, m)$ выполняется теорема о нулях над кольцом коэффициентов $C^\infty(\Omega, \mathbb{C})$ для семейства D -модулей $\{V_\gamma : \gamma \in \Gamma\}$, если справедливо равенство $D^m(P, \{V_\gamma\}) = D^m(P)$, другими словами, ЛДО $\beta \in D^m$ обращается в нуль на всех решениях семейства уравнений $P v^\gamma = 0$ тогда и только тогда, когда $\beta \in D^m(P)$.

В следующем предложении приводятся условия, эквивалентные теореме о нулях для семейства D -модулей $\{V_\gamma : \gamma \in \Gamma\}$.

Предложение 1 (теорема 1 в [4]). Теорема о нулях ЛДО $P \in D(r, m)$ над кольцом $C^\infty(\Omega, \mathbb{C})$ для семейства D -модулей $\{V_\gamma : \gamma \in \Gamma\}$ выполняется тогда и только тогда, когда выполнено любое из следующих условий:

1). ЛДО $G \in D(s, m)$ делится на ЛДО $P \in D(r, m)$ над кольцом коэффициентов $C^\infty(\Omega, \mathbb{C})$, т.е. имеет вид $G = LP$, $L \in D(s, r)$, тогда и только тогда, когда $(V_\gamma^m)_P \subseteq (V_\gamma^m)_G$ при всех $\gamma \in \Gamma$;

2) справедливо равенство $J_P \{V_\gamma\} = J_P$;

3) справедливо равенство алгебр $A_P \{V_\gamma\} = A_P$ и равенство факторалгебр $T_P \{V_\gamma\} = T_P$;

4) гомоморфизмы D -модуля $\mathfrak{M}_P = D^m / D^m(P)$ в D -модули V_γ для всех $\gamma \in \Gamma$ разделяют точки $\mathfrak{M}_P$.

2. Псевдообратная матрица и псевдообратный оператор

Определение 2. Пусть A – числовая матрица размера $m \times n$ и ранга η . Скелетным разложением матрицы A называется представление A в виде произведения $A = BC$ матриц B и C ранга η размеров $m \times \eta$ и $\eta \times n$. Матрица A^+ размера $n \times m$, заданная равенством

$$A^+ = C^*(CC^*)^{-1}(B^*B)^{-1}B^*, \quad (1)$$

называется псевдообратной матрицей по отношению к матрице A .

В равенстве (1) звездочка обозначает операцию эрмитова сопряжения: $X^* = \bar{X}^t$, где t – символ транспонирования, а черта над символом означает комплексное сопряжение. Нетрудно показать, что определенная равенствами $A = BC$ и (1) матрица A^+ удовлетворяет четырем условиям:

$$AA^+A = A; A^+AA^+ = A^+; (AA^+)^* = AA^+; (A^+A)^* = A^+A. \quad (2)$$

Эти условия можно заменить тремя равносильными условиями:

$$AA^+A = A, A^+ = UA^*, A^+ = A^*V, \quad (3)$$

где U, V – некоторые матрицы размеров $n \times n$ и $m \times m$ соответственно.

Равенство $AA^+A = A$ показывает, что если y – такая правая часть системы линейных уравнений $Ax = y$, что система совместна, то выражение A^+y является одним из возможных решений этой системы: $A(A^+y) = A(A^+Ax) = (AA^+A)x = Ax = y$. Следовательно, матрица A^+ является «разрешающей матрицей» системы линейных уравнений. Таких матриц может быть бесконечно много, но если выполнены все условия (2) или равносильные условия (3), то эти условия определяют единственную псевдообратную матрицу. Теорема существования и единственности псевдообратной матрицы A^+ вместе с ее конструктивным построением была доказана Элиакимом Муром [5], а затем независимо Роджером Пенроузом [6].

Определяющие условия (3), скелетное разложение матрицы и доказательство формулы (1) приводится в книге Ф. Р. Гантмахера (гл. 1, пар. 5 в [7]). Другие сведения о псевдообратной матрице содержатся в книге [8] (теорема 1, с. 191; предложение 10, с. 197; предложение 12, с. 199).

Для того чтобы определить псевдообратную матрицу с помощью равенства (1), необходимо знать матрицы B и C . Существует стандартный способ построения скелетного разложения матрицы A (гл. 1, пар. 5 в [9]). Именно этот способ понадобится нам для доказательства основной теоремы статьи в следующем разделе, поэтому мы его опишем.

Ранг матрицы A равен η , поэтому можно выделить η линейно независимых столбцов $\hat{b}_1, \dots, \hat{b}_\eta$ и составить из них матрицу B . Матрица C составляется из коэффициентов разложения столбцов матрицы A по базису из линейно независимых столбцов $\hat{b}_1, \dots, \hat{b}_\eta$. Для нахождения коэффициентов разложения можно применить известный метод (гл. 2, пар. 10 в [8]). Наряду с выделенными столбцами матрицы A надо выделить η линейно независи-

мых строк. Квадратная подматрица $\hat{a}$, составленная из элементов, расположенных на пересечении выделенных столбцов и строк, невырождена: $\det \hat{a} = \Delta \neq 0$. Теперь надо присоединить к столбцам $\hat{b}_1, \dots, \hat{b}_\eta$ столбец $\hat{b}$ матрицы A (или любой другой зависимый вектор-столбец $\hat{G}$). Получится матрица Λ ранга η и размера $m \times (\eta + 1)$. При этом к подматрице $\hat{a}$ присоединяется часть столбца $\hat{b}$ (или $\hat{G}$), и получается подматрица $\hat{a}$ размера $\eta \times (\eta + 1)$. К этой подматрице надо последовательно присоединять строки матрицы Λ и представлять определители возникающей квадратной подматрицы Λ_1 порядка $(\eta + 1)$ в виде суммы произведений элементов присоединенной строки на соответствующие алгебраические дополнения. Матрица Λ имеет ранг η , поэтому определитель подматрицы Λ_1 , полученной после присоединения строки, не являющейся строкой подматрицы $\hat{a}$, равен нулю. Определитель равен нулю и в том случае, когда в качестве присоединенной оказывается строка подматрицы $\hat{a}$, потому что в этом случае получается матрица, содержащая две одинаковых строки. В результате элемент присоединенного вектор-столбца и присоединенной строки представляется в виде суммы произведений элементов столбцов $\hat{b}_1, \dots, \hat{b}_\eta$ на частные от деления взятых с обратным знаком алгебраических дополнений на определитель $\Delta = \det \hat{a}$. Эти коэффициенты одинаковы для всех элементов присоединенного столбца. Возникает разложение присоединенного вектор-столбца по линейно независимым столбцам $\hat{b}_1, \dots, \hat{b}_\eta$. Построенная матрица C имеет размерность $\eta \times n$ и ранг η , потому что она содержит единичную подматрицу порядка η , образованную столбцами коэффициентов разложения базисных столбцов $\hat{b}_1, \dots, \hat{b}_\eta$.

Обращаясь к понятию псевдообратного оператора, отметим, что псевдообратный оператор можно рассматривать как частный случай более общей конструкции. Пусть E_1, E_2 – линейные пространства, $P: E_1 \rightarrow E_2$ – линейное отображение, $\ker P, \operatorname{im} P$ – ядро и образ оператора P , $Px = y, x \in E_1, y \in E_2$ – линейное операторное уравнение. Если $y \notin \operatorname{im} P$, то это уравнение не имеет решений. Если $y \in \operatorname{im} P$ и $\ker P \neq 0$, то решений уравнения $Px = y$ бесконечно много (совместное неопределенное уравнение). В каждом классе смежности пространства E_1 по подпространству $\ker P$ можно выбрать такой элемент x_y , что $Px_y = y$ и определить на подпространстве $\operatorname{im} P$ «разрешающий оператор» P_s^{-1} равенством $P_s^{-1}y = x_y$. Если фиксировать в пространстве E_1 дополнительное к $\ker P$ подпространство $(\ker P)_{ad}$ и представить E_1 в виде прямой суммы $E_1 = \ker P \dot{+} (\ker P)_{ad}$, то ограничение оператора P на подпространство $(\ker P)_{ad}$ будет изоморфизмом линейных пространств: $(\ker P)_{ad} \approx \operatorname{im} P$. В качестве решения $P_s^{-1}(y)$ уравнения $Px = y$ можно будет взять единственный прообраз $x_y \in (\ker P)_{ad}$ элемента $y \in \operatorname{im} P$. Выбор дополнительного подпространства эквивалентен построению дополнительного

базиса к базису в подпространстве $\ker P$. Можно выбрать базис подпространства $\operatorname{im} P$, а в качестве базиса в дополнительном подпространстве $(\ker P)_{\text{ad}}$ взять прообразы выбранных базисных элементов. Такой метод будет использован в следующем разделе при доказательстве первой части теоремы 1.

Оператор P_s^{-1} определен только на подпространстве $\operatorname{im} P$. Для его продолжения на все пространство можно выбрать в E_2 дополнительное к $\operatorname{im} P$ подпространство $(\operatorname{im} P)_{\text{ad}}$ и определить на этом подпространстве продолжение оператора P_s^{-1} . Проще всего считать, что продолженный оператор на дополнительном подпространстве обращается в нуль. Но если в линейных пространствах E_1, E_2 фиксированы эрмитовы скалярные произведения $(x, x')_1, (y, y')_2$, то в качестве дополнительных подпространств $(\ker P)_{\text{ad}}$ и $(\operatorname{im} P)_{\text{ad}}$ удобно брать ортогональные дополнения $(\ker P)^\perp, (\operatorname{im} P)^\perp$. В бесконечномерном случае необходимо потребовать, чтобы пространства E_1, E_2 были гильбертовыми, а оператор $P: E_1 \rightarrow E_2$ был непрерывным. При таких предположениях подпространства $\ker P, \operatorname{im} P$ замкнуты, пространства E_1, E_2 могут быть представлены как прямые суммы ортогональных подпространств: $E_1 = \ker P \oplus (\ker P)^\perp, E_2 = \operatorname{im} P \oplus (\operatorname{im} P)^\perp$, а псевдообратный оператор можно определить следующим образом.

Определение 3. Пусть E_1, E_2 – гильбертовы пространства; $P: E_1 \rightarrow E_2$ – непрерывное линейное отображение; $\ker P, \operatorname{im} P$ – ядро и образ оператора P ; $E_1 = \ker P \oplus (\ker P)^\perp, E_2 = \operatorname{im} P \oplus (\operatorname{im} P)^\perp$ – разложения в прямые суммы ортогональных подпространств; $Px = y, x \in E_1, y \in E_2$, – линейное операторное уравнение. Псевдообратным оператором по отношению к оператору P называется оператор $P^+: E_2 \rightarrow E_1$, который равен нулю на подпространстве $(\operatorname{im} P)^\perp$, а на подпространстве $\operatorname{im} P$ совпадает с обратным оператором по отношению к изоморфизму $P: (\ker P)^\perp \rightarrow \operatorname{im} P$.

Конечно, оператор P^+ является одним из разрешающих операторов P_s^{-1} , но он обладает дополнительными свойствами, которые делают его удобным для решения многих прикладных задач. С прикладной точки зрения рассматривается и более сложная ситуация: оператор P определен на плотном в бесконечномерном гильбертовом пространстве E_1 множестве и всего лишь замкнут [9]. Но наибольший интерес для разного рода приложений и для целей этой статьи представляет случай конечномерных пространств. Именно в этом случае проявляется связь псевдообратного оператора с псевдообратной матрицей.

Предположим, что E_1, E_2 – конечномерные линейные пространства размерностей $\dim E_1 = n, \dim E_2 = m$ с базисами $\{e_i\}, \{f_j\}$; $x = \sum_{i=1}^n x_i e_i, y = \sum_{j=1}^m y_j f_j$ – координатные разложения векторов $x \in E_1, y \in E_2$. Эти ли-

нейные пространства превращаются в конечномерные гильбертовы пространства, если заданы стандартные координатные эрмитовы скалярные произведения: $(x, x') = \sum_{i=1}^n x_i \bar{x}'_i$, $(y, y') = \sum_{j=1}^m y_j \bar{y}'_j$. Очевидно, выбранные базисы $\{e_i\}$, $\{f_j\}$ относительно таких скалярных произведений становятся ортонормированными. Доказательство следующего утверждения можно найти, например, в книге Д. В. Беклемишева [8] (предложение 2, с. 200) или в статье [10].

Предложение 2. Если A – матрица оператора P относительно ортонормированных базисов в конечномерных линейных пространствах E_1 , E_2 размерностей $\dim E_1 = n$, $\dim E_2 = m$, то матрица псевдообратного оператора P^+ совпадает с псевдообратной матрицей A^+ . Другими словами, матрица оператора P^+ может быть представлена в виде произведения (1): $A^+ = C^*(CC^*)^{-1}(B^*B)^{-1}B^*$, где матрицы B и C имеют тот же ранг, что и матрица A , и справедливо равенство $A = BC$.

4. Вариант формальной теоремы о нулях линейных дифференциальных операторов

Введем обозначения DC – алгебра скалярных ЛДО с постоянными коэффициентами; DO – множество скалярных ЛДО, коэффициенты которых могут быть любыми функциями, определенными в области Ω ; D_x – ЛДО с постоянными коэффициентами, равными значениям коэффициентов ЛДО D в точке x ; F_x – пространство степенных рядов с центром в точке x ; S_d – подмножество множества ЛДО S , состоящее из операторов s порядка $\text{ord } s \leq d$. Если ЛДО $P \in D(r, m)$ и $a \in DC^r$, то равенство $P'(x)a = (aP)_x$ задает линейное отображение $P'(x): DC^r \rightarrow DC^m$. Пусть $\text{im } P'(x)$ – образ этого отображения; $P'_d(x)$ – ограничение $P'(x)$ на подпространство DC_d^r .

Теорема 1. Пусть $P \in D(r, m)$ – ЛДО порядка $\text{ord } P = k$, $v \in \mathbb{Z}_+$, и выполнены следующие условия:

- 1) размерность любого подпространства $(\text{im } P'(x))_v \subseteq DC_v^m$ не зависит от точки x ;
- 2) для любого целого числа $v \geq k$ существует целое неотрицательное число $d = d(v) = d_v$ такое, что $(\text{im } P'(x))_v = (\text{im } P'_d(x))_v$ для всех $x \in \Omega$.

Если выполнено только условие 1, то у каждой точки $x \in \Omega$ существует окрестность Ω_x такая, что если ЛДО $G \in D(1, m)$ обращается в нуль на всех формальных решениях системы уравнений $Pv = 0$ в области Ω_x , то существует ЛДО L размера $1 \times r$ с коэффициентами, принадлежащими $C^\infty(\Omega_x, \mathbb{C})$ такой, что в области Ω_x верно равенство $G = LP$.

Если выполнены оба условия, то для ЛДО P справедлива формальная теорема о нулях: $D^m(P, \{F_x\}) = D^m(P)$, т.е. ЛДО $G \in D(1, m)$ обращается

в нуль на всех формальных решениях уравнения $Pv=0$ в области Ω тогда и только тогда, когда $G \in D^m(P)$.

Доказательство. Основу доказательства доставляет следующие утверждение.

Предложение 3 (теорема 2 в [4]). Пусть $P \in D(r, m)$, $G \in D(1, m)$. Если любое формальное решение системы $Pv=0$ в области Ω является решением уравнения $Gv=0$, то существует ЛДО $L \in DO(1, r)$ такой, что верно равенство $G = LP$.

Теорема 2 [4] является следствием более общей теоремы 3 [4]. Из этой теоремы следует, что уравнение $G_x = (LP)_x = (L_x P)_x = P'(x)L_x$ имеет решение L_x тогда и только тогда, когда $(F_x)_P^m \subseteq (F_x)_G^m$. Таким образом, смысл теоремы 1 [4] заключается в том, что при сделанных предположениях из множества точечных решений L_x уравнения $G = LP$ можно сконструировать решение L с бесконечно дифференцируемыми коэффициентами. Сделать это можно в некоторой окрестности любой фиксированной точки $x \in \Omega$, если выполнено только условие 1. И это можно сделать во всей области Ω , если выполнены оба условия.

Перейдем к доказательству теоремы 1. Предположим, что выполнено условие 1. Пусть $\mu \in \mathbb{Z}_+$, $e_{\alpha, j} = (0, \dots, \partial^\alpha, \dots, 0)$ – элемент DC^μ , у которого от нуля отлична j -я компонента. Покомпонентные частные производные $e_{\alpha, j}$ образуют счетный базис в линейных пространствах DC^μ и конечный базис в подпространствах DC_τ^μ , $|\alpha| \leq \tau \in \mathbb{Z}_+$. Можно считать, что эти базисные векторы упорядочены и занумерованы (например, по порядкам мультииндексов, компонент j и лексикографически). **Преимущество базисов $\{e_{\alpha, j}\}$ – координаты ЛДО в базисах такого типа совпадают с коэффициентами оператора.**

Фиксируем точку x области Ω . Подпространство $(\text{im } P'(x))_v$ конечномерно, поэтому числа $\tilde{d}(v, x)$ такие, что верно равенство $(P'(x)DC^r)_v = (P'(x)DC_{\tilde{d}(v, x)}^r)_v$, существуют. Среди таких чисел выберем наименьшее число $d(v, x)$. Ограничим уравнение $P'(x)L_x = G_x$ на подпространства $DC_{d(v, x)}^r$, DC_v^m . Возникнут линейное отображение конечномерных пространств $P'_{d(v, x)}(x)$, операторное уравнение и соответствующая матричная координатная система уравнений:

$$P'_{d(v, x)}(x): DC_{d(v, x)}^r \rightarrow DC_v^m, \quad P'_{d(v, x)}(x)L_x = G_x, \quad A_{P, d(v, x)}\hat{L}_x = \hat{G}_x, \quad (4)$$

здесь $A_{P, d(v, x)}$ – матрица оператора $P'_{d(v, x)}(x)$ относительно базисов из элементов вида $e_{\alpha, j}$; $\hat{L}_x$, $\hat{G}_x$ – вектор-столбцы координат ЛДО L_x , G_x относительно тех же базисов.

Размерность образа линейного отображения $P'_{d(v,x)}(x)$ совпадает с рангом его матрицы $A_{P,d(v,x)}$. По предположению размерность $\dim(\operatorname{im} P'(x))_v = \eta(x) \in \mathbb{Z}_+$ в любом подпространстве DC_v^m не зависит от точки $x \in \Omega$, $\eta(x) = \eta$. Значит, можно выделить η линейно независимых столбцов $\hat{b}_1(x), \dots, \hat{b}_\eta(x)$ и η линейно независимых строк матрицы $A_{P,d(v,x)}$. Квадратная подматрица $\hat{a}(x)$, составленная из элементов на пересечении этих столбцов и строк, невырождена: $\Delta(x) = \det \hat{a}(x) \neq 0$.

Заменим фиксированную точку x переменной точкой $\tilde{x} \in \Omega$ и введем открытое подмножество $\Omega_x = \{\tilde{x} \in \Omega : \Delta(\tilde{x}) \neq 0\} \subseteq \Omega$. Элементы столбцов $\hat{b}_{\alpha,j}(\tilde{x})$ матрицы $A_{P,d(v,\tilde{x})}$ являются значениями коэффициентов разложения образов $P'(\tilde{x})(e_{\alpha,j}) = ((0, \dots, \partial^\alpha, \dots, 0)P)_{\tilde{x}} = b_{\alpha,j}(\tilde{x})$ одних и тех же векторов вида $e_{\alpha,j} \in DC_{d(v,x)}^r$ по аналогичным базисным векторам пространства DC_v^m . Поэтому все элементы матрицы $A_{P,d(v,x)}(\tilde{x})$ оказываются бесконечно дифференцируемыми функциями $\tilde{x}$.

На множестве Ω_x столбцы $\hat{b}_1(\tilde{x}), \dots, \hat{b}_\eta(\tilde{x})$ остаются линейно независимыми. Следовательно, эти столбцы состоят из коэффициентов векторов некоторого базиса $b_1(\tilde{x}), \dots, b_\eta(\tilde{x})$ подпространства $\operatorname{im} P'_{d(v,x)}(x) = (\operatorname{im} P'(x))_v$. При этом прообразы $e_{\alpha,j} \in DC_{d(v,x)}^r$ векторов $b_{\alpha,j}(\tilde{x})$ и, в частности, базисных векторов $b_i(\tilde{x})$, не зависят от точки $\tilde{x}$. Поэтому по-прежнему выполняется равенство $(P'(\tilde{x})DC^r)_v = (P'(\tilde{x})DC_{d(v,x)}^r)_v$, и можно считать, что число $d_v(\tilde{x})$ постоянно, $d_v(\tilde{x}) = d_v(x) = d_v$. Отметим, что хотя понятие порядка ЛДО является «точечным», при сделанных предположениях вместе с рангом отображения $P'_{d_v}(\tilde{x})$ не изменяется и порядок ЛДО.

Предположим теперь, что ЛДО $G \in D(1, m)$ обращается в нуль на всех формальных решениях системы уравнений $Pv = 0$. Тогда операторное уравнение $P'_{d_v}(\tilde{x})L_{\tilde{x}} = \hat{G}_{\tilde{x}}$ и соответствующее матричное уравнение $A_{P,d_v}(\tilde{x})\hat{L}_{\tilde{x}} = \hat{G}_{\tilde{x}}$ разрешимы в каждой точке $\tilde{x} \in \Omega_x$. В общем случае система линейных уравнений $A_{P,d_v}(\tilde{x})\hat{L}_{\tilde{x}} = \hat{G}_{\tilde{x}}$ является совместной неопределенной, т.е. имеет в каждой точке бесконечно много решений. Для того чтобы выделить в каждой точке $\tilde{x} \in \Omega_x$ из множества возникающих решений единственное решение, можно, как было отмечено ранее, построить дополнительное подпространство к ядру оператора $P'_{d_v}(\tilde{x})$. Разрешимость системы $A_{P,d_v}(\tilde{x})\hat{L}_{\tilde{x}} = \hat{G}_{\tilde{x}}$ в точке $\tilde{x} \in \Omega_x$ означает, что вектор-столбец координат $\hat{G}_{\tilde{x}}$ и столбцы $\hat{b}_i(\tilde{x})$ линейно зависимы. Поэтому вектор-столбец $\hat{G}_{\tilde{x}}$ можно разложить по вектор-столбцам $\hat{b}_1(\tilde{x}), \dots, \hat{b}_\eta(\tilde{x})$: $\hat{G}_{\tilde{x}} = \sum_{i=1}^{\eta} \alpha_i(\tilde{x})\hat{b}_i(\tilde{x})$. Коэффици-

енты разложения $\alpha_i(\tilde{x})$ можно найти так же, как это было описано в разд. 2 для числовой матрицы. В результате коэффициенты представляются в виде сумм произведений элементов вектор-столбцов $\hat{b}_1(\tilde{x}), \dots, \hat{b}_\eta(\tilde{x})$ и $\hat{G}_{\tilde{x}}$, деленных на ненулевой определитель $\det \hat{a}(\tilde{x})$, поэтому коэффициенты оказываются бесконечно дифференцируемыми в области Ω_x . Ясно, что с теми же коэффициентами раскладывается по векторам $b_1(\tilde{x}), \dots, b_\eta(\tilde{x})$ вектор $G_{\tilde{x}}$: $G_{\tilde{x}} = \sum_{i=1}^{\eta} \alpha_i(\tilde{x}) b_i(\tilde{x})$. В качестве локального решения операторного уравнения $P'_{d_v}(\tilde{x}) L_{\tilde{x}} = G_{\tilde{x}}$ можно взять ЛДО $L_{\tilde{x}} = \sum_{i=1}^{\eta} \alpha_i(\tilde{x}) \tilde{e}_i$. Первая часть теоремы 1 доказана.

Существует другое доказательство, в котором используются понятия псевдообратной матрицы и псевдообратного оператора. Эти понятия для числовой матрицы описаны в разд. 2 настоящей работы. В данном случае речь идет о функциональной системе линейных уравнений с бесконечно дифференцируемыми коэффициентами $A_{P,d_v}(\tilde{x}) \hat{L}_{\tilde{x}} = \hat{G}_{\tilde{x}}$. Введем в пространствах

DC^μ координатные эрмитовы скалярные произведения:

$$a = \sum_{j=1}^{\mu} \sum_{\alpha} a^{\alpha,j} e_{\alpha,j}, \quad b = \sum_{i=1}^{\mu} \sum_{\beta} b^{\beta,i} e_{\beta,i}, \quad (a,b)_{\mu} = \sum_{i=1}^{\mu} \sum_{\alpha} a_{\alpha,i} \bar{b}^{\alpha,i}.$$

Относительно таких произведений элементы $e_{\alpha,j}$ образуют ортонормированные базисы. В каждой фиксированной точке $\tilde{x} \in \Omega_x$ определим псевдообратный оператор $P_{d_v}^+(\tilde{x})$. Это элемент $\text{hom}_{\mathbb{C}}(DC_{d_v}^m, DC_{d_v}^r)$, который равен нулю на ортогональном дополнении $(\text{im } P'_{d_v}(\tilde{x}))^{\perp}$, а на $\text{im } P'_{d_v}(\tilde{x})$ является обратным по отношению к изоморфизму $(\ker P'_{d_v}(\tilde{x}))^{\perp} \approx \text{im } P'_{d_v}(\tilde{x})$, задаваемому оператором $P'_{d_v}(\tilde{x})$. С помощью оператора $P_{d_v}^+(\tilde{x})$ можно в каждой точке $\tilde{x} \in \Omega_x$ получить одно из возможных решений $L_{\tilde{x}} = P_{d_v}^+(\tilde{x}) G_{\tilde{x}}$ уравнения $G = LP$ в DO^m .

Матрица псевдообратного оператора в ортонормированном базисе совпадает с псевдообратной матрицей $A_{d_v}^+(\tilde{x})$. В координатной форме решение, полученное с помощью псевдообратного оператора, имеет вид $\hat{L}_{\tilde{x}} = A_{d_v}^+(\tilde{x}) \hat{G}_{\tilde{x}}$. Элементы вектор-столбца $\hat{G}_{\tilde{x}}$ совпадают с коэффициентами ЛДО $G_{\tilde{x}}$, следовательно, они бесконечно дифференцируемы. Для доказательства бесконечной дифференцируемости коэффициентов ЛДО $L_{\tilde{x}}$ достаточно показать, что элементы матрицы $A_{d_v}^+(\tilde{x})$ бесконечно дифференцируемы. В разд. 2 псевдообратная матрица определялась с помощью представления

матрицы $A_{P,d_v}(\tilde{x})$ в виде произведения $A_{P,d_v}(\tilde{x}) = B_{d_v}(\tilde{x})C_{d_v}(\tilde{x})$ матриц того же ранга, что и ранг матрицы $A_{P,d_v}(\tilde{x})$ (скелетное разложение). Матрица $B_{d_v}(\tilde{x})$ составлена из линейно независимых вектор-столбцов $\hat{b}_1(\tilde{x}), \dots, \hat{b}_\eta(\tilde{x})$ матрицы $A_{P,d_v}(\tilde{x})$, а матрица $C_{d_v}(\tilde{x})$ составлена из коэффициентов разложения столбцов матрицы $A_{P,d_v}(\tilde{x})$ по линейно независимым столбцам. Элементы столбцов совпадают с коэффициентами разложения соответствующих ЛДО по базису $\{e_{\alpha,j}\}$, следовательно, бесконечно дифференцируемы. Элементы матрицы $C_{d_v}(\tilde{x})$ представляются как суммы произведений элементов матрицы $A_{P,d_v}(\tilde{x})$, деленных на определитель $\Delta(\tilde{x})$, и тоже бесконечно дифференцируемы на множестве Ω_x .

Псевдообратная матрица может быть определена с помощью равенства (1): $A_{d_v}^+(\tilde{x}) = C^*(\tilde{x})(C(\tilde{x})C^*(\tilde{x}))^{-1}(B^*(\tilde{x})B(\tilde{x}))^{-1}B^*(\tilde{x})$. В этом представлении элементы всех матриц бесконечно дифференцируемы, поэтому бесконечно дифференцируемы элементы псевдообратной матрицы. Следовательно, бесконечно дифференцируемы на множестве Ω_x элементы вектор-столбца $\hat{L}_{\tilde{x}}$, т.е. коэффициенты ЛДО $L_{\tilde{x}} = P_{d_v}^+(\tilde{x})G_{\tilde{x}}$.

Предположим теперь, что выполнено не только условие 1, но и условие 2 теоремы 1. В таком случае для любого подпространства $(\text{im } P'(x))_v$ существует число $d = d_v$ такое, что $(P'(x)DC^r)_v = (P'(x)DC_d^r)_v$ в каждой точке $x \in \Omega$. И в окрестности каждой точки можно построить псевдообратный оператор так же, как это было сделано выше, и получить решение $L_{\tilde{x}}$ уравнения с бесконечно дифференцируемыми коэффициентами.

Отметим некоторые естественные ограничения на порядки ЛДО. В общем случае порядок ЛДО может существенно зависеть от точки $x \in \Omega$. Другими словами, существует точечный порядок ЛДО, а его порядок в обычном смысле совпадает с наибольшим точечным порядком. Пусть $\text{ord } P_x = k_x$, $\text{ord } G_x = l_x$, $\text{ord } P = k$, $\text{ord } G = l$ – точечные и обычные порядки ЛДО с переменными коэффициентами P и G , $a \in DC^r$. Порядок произведения операторов не превосходит суммы порядков сомножителей. Так как по определению $P'(x)a = (aP)_x$, то для любого целого неотрицательного числа d и точки $x \in \Omega$ образ $\text{im } P'_d(x)$ оператора $P'_d(x)$ принадлежит подпространству DC_{d+k}^m : $\text{im } P'_d(x) = P'(x)(DC_d^r) \subseteq DC_{d+k_x}^m \subseteq DC_{d+k}^m$. Более того, существует ЛДО $a \in DC_d^r$ (например, вида $(0, \dots, \partial^\alpha, \dots, 0)$, $|\alpha| = d$) такой, что порядок образа $P'(x)a$ равен в точности $d + k_x$. Если $(F_x)_P^m \subseteq (F_x)_G^m$, то $G_x \in \text{im } P'_d(x) \subseteq DC_{d+k_x}^m \subseteq DC_{d+k}^m$. Так как $\text{ord } G_x = l_x$, $\text{ord } G = l$, то должны выполняться неравенства $l_x \leq d + k_x$, $l \leq d + k$, $d \geq l_x - k_x$, $d \geq l - k$.

4. Примеры применения основной теоремы

Пример 1. Очевидно, для ЛДО с постоянными коэффициентами выполняются условия 1 и 2 теоремы 1. Но для таких операторов формальную теорему о нулях можно усилить.

Определение 4. Кольцо коэффициентов θ – это подалгебра алгебры бесконечно дифференцируемых комплекснозначных функций $C^\infty(\Omega, \mathbb{C})$, которая содержит единицу и все производные своих элементов.

Теорема 2. Пусть θ – произвольное кольцо коэффициентов, $P \in DC(r, m)$, $G \in D(1, m; \theta)$ – ЛДО с коэффициентами из кольца θ . Если любое формальное решение системы дифференциальных уравнений $Pu = 0$ в области Ω является решением уравнения $Gv = 0$, то существует ЛДО $L \in D(1, r; \theta)$ такой, что $G = LP$. Другими словами, формальная теорема о нулях ЛДО с постоянными коэффициентами справедлива над любым кольцом коэффициентов.

Доказательство. В этом случае псевдообратный оператор $P_{d_v}^+(\tilde{x})$ не зависит от точки $x \in \Omega$, матрица $A_{d_v}^+(\tilde{x})$ является числовой матрицей. Равенство $\hat{L}_{\tilde{x}} = A_{d_v}^+(\tilde{x})\hat{G}_{\tilde{x}}$ показывает, что элементы вектор-столбца $\hat{L}_{\tilde{x}}$, то есть коэффициенты ЛДО $L_{\tilde{x}}$, решения уравнения $P'_{d_v}(\tilde{x})L_{\tilde{x}} = G_{\tilde{x}}$ в представлении $L_{\tilde{x}} = P_{d_v}^+(\tilde{x})G_{\tilde{x}}$, принадлежат кольцу θ .

Пример 2. Напомним, что символ (главный символ) скалярного ЛДО $P = \sum_{\alpha} a_{\alpha}(x)\partial^{\alpha}$ порядка k – это функция $\sigma_P(x, \xi) = \sum_{|\alpha|=k} a_{\alpha}(x)\xi^{\alpha}$ от точки x и n вещественных переменных $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \mathbb{R}^n$. Если ЛДО $P = \|P_{ij}\| \in DO(r, m)$, $P_{ij} = \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{ij}(x)\partial^{\alpha}$ и $A_{\alpha}(x) = \|a_{\alpha}^{ij}(x)\|$, то такой матричный ЛДО можно записать в форме $P = \sum_{\alpha} A_{\alpha}(x)\partial^{\alpha}$. Главный символ матричного ЛДО порядка k можно определить по аналогии с символом обыкновенного оператора равенством $\sigma_P(x, \xi) = \sum_{|\alpha|=k} A_{\alpha}(x)\xi^{\alpha}$ или равенством $\sigma_P(x, \xi) = \left\| \sum_{|\alpha|=k} a_{\alpha}^{ij}(x)\xi^{\alpha} \right\|$.

Понятие главного символа является точечным, а определение порядка ЛДО как максимума точечных порядков не вполне убедительно. Однако, если

$L \in DO(s, r)$ – ЛДО порядка k_1 в точке x : $L = \|L_{ij}\| = \sum_{|\beta| \leq k_1} b_{\beta}(x)\partial^{\beta}$,

$b_{\beta}(x) = \|b_{\beta}^{ij}(x)\|$, $i = 1, \dots, s$, $j = 1, \dots, r$, $\text{ord}_x L = \max(\text{ord}_x L_{ij})$ и $P \in D(r, m)$ –

ЛДО порядка k в той же точке $x \in \Omega$, то справедливо равенство $(LP)_x = \sum_{|\beta|=k_1} \sum_{|\alpha|=k} b_{\beta}(x)a_{\alpha}(x)\partial^{\alpha+\beta} + \dots$, где многоточие обозначает ЛДО, по-

рядок которого не превосходит числа $k_1 + k - 1$. Из этого равенства вытекает, что порядок произведения LP в точке x равен сумме порядков сомножителей тогда и только тогда, когда произведение символов $\sigma_L(x, \xi)\sigma_P(x, \xi)$ не равно нулю в этой точке. И только в этом случае главный символ произведения в точке равен произведению главных символов: $\sigma_{LP}(x, \xi) = \sigma_L(x, \xi)\sigma_P(x, \xi)$.

Однако сами главные символы и, тем более, их произведение, в общем случае могут в некоторых точках и на подмножествах области Ω обращаться в нуль. В скалярном случае главный символ произведения равен произведению главных символов только тогда, когда оба символа в данной точке не обращаются в нуль. Если оба скалярных ЛДО L и P имеют бесконечно дифференцируемые коэффициенты и не обращаются в нуль в точке x , то верны равенства: $\sigma_L(x, \xi)\sigma_P(x, \xi) = \sigma_P(x, \xi)\sigma_L(x, \xi) = \sigma_{LP}(x, \xi)$. Наконец, главный символ скалярного ЛДО равен нулю тогда и только тогда, когда сам этот ЛДО равен нулю.

Главный символ скалярного ЛДО является однородной функцией оператора: $\sigma_{\alpha P}(x, \xi) = \alpha \sigma_P(x, \xi)$, но символ суммы скалярных операторов равен сумме символов только тогда, когда операторы имеют одинаковый порядок. Другими словами, символ скалярного оператора в общем случае не является линейной функцией от оператора. Но главный символ скалярного оператора все же является линейной функцией от операторов, если все операторы соответствующей линейной комбинации имеют одинаковый порядок.

В следующей теореме вместо главного символа матричного ЛДО используется более общее понятие, а именно матрица размера $r \times m$, составленная из главных символов столбцов P^j оператора P : $\sigma(P; x, \xi) = \sigma(P^1, \dots, P^m; x, \xi) = \|\sigma_{P^j}(x, \xi)\|$. Аналогично можно ввести главный символ вектора-строки $a = (a_1, \dots, a_r) \in DC^r$, $\text{ord } a = l$: $\sigma(a; x, \xi) = (\sigma_{a_i}(x, \xi) : \text{ord } a_i = l)$. В результате главный символ вектор-столбца произведения вектора-строки на вектор-столбец будет равен произведению главных символов: $\sigma(aP^j; x, \xi) = \sigma(a; x, \xi)\sigma(P^j; x, \xi)$. А матрицы главных символов строки и столбца перемножаются как числовые матрицы, поэтому для главных символов элементов произведения будет справедливым равенство:

$$\sigma((aP^j)_{ij}; x, \xi) = \sum_i \left(\sigma(a_i; x, \xi)\sigma(P_{ij}^j; x, \xi) : \text{ord } a_i = l, \text{ord } P_{ij}^j = \text{ord } P^j \right). \quad (5)$$

Теорема 3. Пусть $P \in D(r, m)$ – ЛДО порядка k , выполняется неравенство $r \leq m$, ранг матрицы символов столбцов $\sigma(P; x, \xi)$ в каждой точке $x \in \Omega$ и хотя бы при одном значении $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \mathbb{R}^n$ равен значению r , если $r \leq m$, и значению m , если $m \leq r$. Тогда отображение $P'_d(x) : DC_d^r \rightarrow DC^m$ при любом значении d является вложением, ранг этого отображения равен размерности подпространства DC_d^r , и для любого целого числа $v \geq k$ суще-

стствует целое неотрицательное число d_v такое, что $(\operatorname{im} P'(x))_v = (\operatorname{im} P'_d(x))_v$ для всех $x \in \Omega$.

Доказательство. Из условия теоремы следует, что в каждой точке $x \in \Omega$ существует квадратная, невырожденная в точке $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \mathbb{R}^n$ подматрица матрицы символов столбцов $\sigma(P; x, \xi)$ порядка r или m . Если произведение числовой вектора-строки на такую подматрицу равно нулю, то эта вектор-строка равна нулю. Формула (5) показывает, что при умножении операторной вектора-строки на операторную подматрицу главные символы строки и столбца перемножаются как числовые матрицы. Но главные символы r столбцов образуют невырожденную числовую матрицу, по меньшей мере, в одной точке $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \mathbb{R}^n$. Поэтому матрица (вектор-строка) главных символов строки равна нулю. Следовательно, сама вектор-строка равна нулю. Значит, при сделанных предположениях ядро отображения $P'_d(x): DC_d^r \rightarrow DC^m$ при любом значении d равно нулю, и это отображение является вложением подпространства DC_d^r в пространство DC^r . Утверждение про ранг отображения очевидно, а существование числа d_v является следствием конечномерности подпространства DC_d^r .

Замечание. Условие невырожденности матрицы главных символов вектор-столбцов всего лишь в одной точке является искусственным. Дело в том, что множество нулей определителя невырожденной подматрицы при фиксированном значении $x \in \Omega$ является однородным алгебраическим многообразием $\mathbb{R}^n$ коразмерности один. Поэтому дополнительное подмножество всюду плотно в $\mathbb{R}^n$. При значениях $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n)$, принадлежащих этому подмножеству, определитель матрицы не равен нулю, а матрица невырожденная. По непрерывности из условия обращения в нуль главного символа вектор-строки на всюду плотном в области Ω множестве следует, что эта вектор-строка равна нулю при всех $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \mathbb{R}^n$.

Пример 3 демонстрирует преимущества матрицы главных символов по столбцам по сравнению с главным символом ЛДО.

Пример 3. Ниже в пространстве $\mathbb{R}^2$ (на координатной плоскости) используются привычные обозначения координат $x = (x, y)$ и соответствующие обозначения частных производных. Главный символ ЛДО.

$$P = \begin{pmatrix} x\partial_y & \partial_{xy} \\ (x^2 + y^2)\partial_{xy} & y^2\partial_x \end{pmatrix} \text{ имеет вид } \sigma_P(x, \xi) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ (x^2 + y^2)\partial_{xy}\xi_1\xi_2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Матрица вырожденная, но ее ранг сохраняется при ненулевых значениях координат и не равных нулю значениях ξ_1, ξ_2 . В то же время матрица главных

$$\text{символов столбцов } \sigma(P; x, \xi) = \begin{pmatrix} 0 & \partial_{xy}\xi_1\xi_2 \\ (x^2 + y^2)\partial_{xy}\xi_1\xi_2 & 0 \end{pmatrix} \text{ невырожденная}$$

при ненулевых значениях координат x, y и не равных нулю значениях координат ξ_1, ξ_2 .

Пример 4. Справедлива следующая теорема.

Теорема 4. Пусть $P \in D(r, m)$ – ЛДО порядка k , и ранг матрицы символов столбцов $\sigma(P; x, \xi)$ в каждой точке $x \in \Omega$ и хотя бы при одном значении $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \mathbb{R}^n$ равен одному и тому же значению $\eta \leq r$, если $r \leq m$, и $\eta \leq m$, если $m \leq r$. Тогда размерность любого подпространства $(\text{im } P'(x))_{\mathcal{V}} \subseteq DC_{\mathcal{V}}^m$ не зависит от точки x . Ранг отображения $P'_d(x): DC_d^r \rightarrow DC^m$ при любом значении d равен размерности подпространства $(\text{im } P'(x))_d$. И для любого целого числа $d \geq k$ существует целое неотрицательное число $d_{\mathcal{V}}$ такое, что $(\text{im } P'(x))_{\mathcal{V}} = (\text{im } P'_d(x))_{\mathcal{V}}$ для всех $x \in \Omega$.

Доказательство. Выше было показано, что матрицы главных символов столбцов умножаются на главные символы строк как обычные матрицы. Если ранг матрицы столбцов ЛДО $P \in D(r, m)$ имеет постоянное значение $\eta \leq r$, то в каждой точке $x \in \Omega$ существуют хотя бы при одном значении $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_n) \in \mathbb{R}^n$, а тогда и при всех значениях, ровно η линейно независимых столбцов и столько же строк матрицы главных символов столбцов. В результате применения вектор-строки главных символов получается линейная комбинация этих базисных вектор-строк. И такими комбинациями заполняется образ любого подпространства DC_d^r в пространстве DC^m . С помощью базисных вектор-строк вида $e_{0,j} = (0, \dots, 1, \dots, 0)$ можно просто получить сами базисные вектор-строки. Другие элементы образа отображения $P'_d(x)$ будут просто линейными комбинациями этих строк над кольцом скалярных ЛДО. Очевидно, размерность подпространства $(\text{im } P'(x))_d$ будет равна рангу матрицы главных символов $\eta \leq r$, если $r \leq m$, и $\eta \leq m$, если $m \leq r$. И эта размерность не изменяется.

Список литературы

1. Fomin A. I. Differential Homomorphisms of Linear Homogeneous Systems of Differential Equations // Russian Journal of Mathematical Physics. 2012. Vol. 19, № 2. P. 159–181.
2. Фомин А. И. Преобразования Лапласа как дифференциальные изоморфизмы // Научная дискуссия: вопросы математики, физики, химии, биологии : сб. ст. по материалам XLIV–XLVIII Междунар. науч.-практ. конф. М. : Интернаука, 2016. № 8-12 (35). С. 5–12.
3. Fomin A. I. Differential symmetry algebras for linear homogeneous differential equations // Russian Journal of Mathematical Physics. 1997. Vol. 5, № 2. P. 189–210.
4. Фомин А. И. Титаренко В. И. Теоремы о нулях линейных дифференциальных операторов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2024. № 4. С. 18–34.
5. Moore H. On the reciprocal of the general algebraic matrix // Bulletin of the American Mathematical Society. 1920. Vol. 26. P. 394–395.
6. Пенроуз Р. A generalized inverse for matrices // Proceedings of the Cambridge Philosophical Society. 1955. Vol. 51. P. 406–413.
7. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. М. : Физматлит, 2016. 576 с.
8. Беклемишев Д. В. Дополнительные главы линейной алгебры. М. : Наука, главная редакция физико-математической литературы, 1983. 336 с.
9. Курош А. Г. Курс высшей алгебры. М. : Изд. Лань, 2024. 432 с.

10. Пытьев Ю. П. Псевдообратный оператор. Свойства и применения // Математический сборник. 1982. Т. 118 (160), № 1 (5). С. 19–49.

References

1. Fomin A.I. Differential Homomorphisms of Linear Homogeneous Systems of Differential Equations. *Russian Journal of Mathematical Physics*. 2012;19(2):159–181.
2. Fomin A.I. Laplace transforms as differential isomorphisms. *Nauchnaya diskussiya: voprosy matematiki, fiziki, khimii, biologii: sb. st. po materialam XLIV–XLVIII Mezhdunar. nauch.-prakt. konf. = Scientific discussion: issues of mathematics, physics, chemistry, biology: proceedings of the 44th – 48th International scientific and practical conference*. Moscow: Internauka, 2016;(8-12):5–12. (In Russ.)
3. Fomin A.I. Differential symmetry algebras for linear homogeneous differential equations. *Russian Journal of Mathematical Physics*. 1997;5(2):189–210.
4. Fomin A.I. Titarenko V.I. Theorems on the zeros of linear differential operators. *Izvesti vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2024;(4):18–34. (In Russ.)
5. Moore H. On the reciprocal of the general algebraic matrix. *Bulletin of the American Mathematical Society*. 1920;26:394–395.
6. Penrouz R. A generalized inverse for matrices. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. 1955;51:406–413.
7. Gantmakher F.R. *Teoriya matrits = Matrix theory*. Moscow: Fizmatlit, 2016:576. (In Russ.)
8. Beklemishev D.V. *Dopolnitel'nye glavy lineynoy algebry = Additional chapters in linear algebra*. Moscow: Nauka, glavnaya redaktsiya fiziko-matematicheskoy literatury, 1983:336. (In Russ.)
9. Kurosh A.G. *Kurs vysshey algebry = Course of higher algebra*. Moscow: Izd. Lan', 2024:432. (In Russ.)
10. Pyt'ev Yu.P. Pseudo-inverse operator. Properties and applications. *Matematicheskii sbornik = Mathematical collection*. 1982;118(160):19–49. (In Russ.)

Информация об авторах / Information about the authors

Вера Ивановна Титаренко

кандидат физико-математических наук,
доцент кафедры математики
и информатики, Институт
информационных систем,
Государственный университет
управления (Россия, г. Москва,
Рязанский проспект, 99)

E-mail: vera_xmel@mail.ru

Vera I. Titarenko

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor of the
sub-department of mathematics
and computer science, Institute
of Information Systems, State University
of Management (99 Ryazanskiy avenue,
Moscow, Russia)

Александр Иванович Фомин

кандидат физико-математических наук,
доцент, независимый исследователь
(Россия, г. Москва)

E-mail: fomin45@mail.ru

Aleksandr I. Fomin

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor, independent
researcher (Moscow, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 28.05.2025

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 16.06.2025

Принята к публикации / Accepted 29.06.2025

УДК 519.63

doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-4

Конечно-разностный метод решения первой краевой задачи для нагруженного нестационарного уравнения влагопереноса

М. Х. Бештоков

Институт прикладной математики и автоматизации,
Кабардино-Балкарский научный центр Российской академии наук, Нальчик, Россия
beshtokov-murat@yandex.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Одним из важных разделов теории дифференциальных уравнений являются нагруженные уравнения. Они позволяют моделировать процессы, в которых влияние внешних факторов существенно изменяет поведение системы. Особенно это важно в таких областях, как механика, гидрология и материаловедение. Изучение нагруженных уравнений способствует созданию более точных моделей, которые используются для анализа устойчивости и надежности конструкций, а также для прогнозирования различных явлений в природных и инженерных системах. Построены новые разностные схемы повышенного порядка точности для приближенного решения первой краевой задачи для нестационарного нагруженного уравнения влагопереноса в одномерных и многомерных областях. Нагруженные интегральные уравнения позволяют глубже понять распределение нагрузок и взаимодействие элементов в сложных системах. Изученные в данной работе уравнения играют значительную роль в решении актуальных задач экологии, сельского хозяйства, строительства и климатологии. Точное моделирование процессов влагопереноса позволяет эффективно управлять водными ресурсами, прогнозировать уровень грунтовых вод, оптимизировать орошение, обеспечивать устойчивость строительных конструкций и предсказывать последствия климатических изменений. Кроме того, развитие таких моделей способствует прогрессу в гидрологии и смежных науках. *Материалы и методы.* Для приближенного решения поставленных задач используется метод конечных разностей и метод энергетических неравенств для получения априорных оценок решений предложенных разностных схем. *Результаты.* Для каждой задачи построена разностная схема повышенного порядка аппроксимации. Методом энергетических неравенств для решения каждой разностной задачи получена априорная оценка. Из полученных оценок следуют единственность и устойчивость решения по правой части и начальным данным, а также сходимости решения разностной задачи к решению соответствующей исходной дифференциальной задачи со скоростью равной порядку аппроксимации разностной схемы. *Выводы.* Разработаны новые разностные схемы повышенного порядка аппроксимации для приближенного решения поставленных задач.

Ключевые слова: первая краевая задача, многомерное уравнение влагопереноса, нагруженное уравнение, априорная оценка, разностная схема, схема повышенного порядка точности, устойчивость и сходимость схемы

Для цитирования: Бештоков М. Х. Конечно-разностный метод решения первой краевой задачи для нагруженного нестационарного уравнения влагопереноса // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2025. № 2. С. 44–62. doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-4

Finite-difference method for solving the first boundary value problem for a non-stationary loaded moisture transfer equation

M.Kh. Beshtokov

Institute of Applied Mathematics and Automation KBSC RAS, Nalchik, Russia

beshtokov-murat@yandex.ru

Abstract. *Background.* One of the important sections of the theory of differential equations is loaded equations. They allow us to model processes in which the influence of external factors significantly changes the behavior of the system. This is especially important in fields such as mechanics, hydrology, and materials science. The study of loaded equations contributes to the creation of more accurate models that are used to analyze the stability and reliability of structures, as well as to predict various phenomena in natural and engineering systems. New difference schemes of an increased order of accuracy are constructed for an approximate solution of the first boundary value problem for an unsteady loaded moisture transfer equation in one-dimensional and multidimensional regions. Loaded integral equations allow for a deeper understanding of the distribution of loads and the interaction of elements in complex systems. The equations studied in this paper play a significant role in solving urgent problems of ecology, agriculture, construction and climatology. Accurate modeling of moisture transfer processes makes it possible to effectively manage water resources, predict groundwater levels, optimize irrigation, ensure the stability of building structures, and predict the effects of climate change. In addition, the development of such models contributes to progress in hydrology and related sciences. *Materials and methods.* For an approximate solution of the tasks set, the finite difference method and the energy inequality method are used to obtain a priori estimates of the solutions of the proposed difference schemes. *Results.* A high-order approximation difference scheme is constructed for each problem. An a priori estimate is obtained by the method of energy inequalities for solving each difference problem. The obtained estimates imply the uniqueness and stability of the solution on the right side and the initial data, as well as the convergence of the solution of the difference problem to the solution of the corresponding initial differential problem with a speed equal to the order of approximation of the difference scheme. *Conclusions.* New high-order difference schemes of approximation have been developed for the approximate solution of the tasks set.

Keywords: the first boundary value problem, multidimensional moisture transfer equation, loaded equation, a priori estimate, difference scheme, high-order accuracy scheme, stability and convergence of the scheme.

For citation: Beshtokov M.Kh. Finite-difference method for solving the first boundary value problem for a non-stationary loaded moisture transfer equation. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* = *University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2025;(2):44–62. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-4

Введение

Одним из важных разделов теории дифференциальных уравнений являются нагруженные уравнения. Они позволяют моделировать процессы, в которых влияние внешних факторов существенно изменяет поведение системы. Особенно это важно в таких областях науки, как механика, гидрология и материаловедение. Изучение нагруженных уравнений способствует созданию более точных моделей, которые используются для анализа устойчивости и надежности конструкций, а также для прогнозирования различных явлений в природных и инженерных системах.

Работы, посвященные исследованию нагруженных уравнений, можно условно разделить на два типа: исследования, сосредоточенные на нагруженных интегральных уравнениях, и исследования, касающиеся нагруженных дифференциальных уравнений. Исторически первые работы в этой области были ориентированы на нагруженные интегральные уравнения, что связано с их применением в различных задачах, требующих анализа влияния внешних факторов на системы. Нагруженные интегральные уравнения позволяют глубже понять распределение нагрузок и взаимодействие элементов в сложных системах. Этому классу нагруженных уравнений посвящены работы [1–6]. Важность изучения таких уравнений подчеркивали А. Н. Крылов, В. И. Смирнов, А. Н. Тихонов и А. А. Самарский, которые приводили примеры прикладных задач из техники и физики, сводящихся к нагруженным интегральным уравнениям.

С течением времени, по мере развития теории и методов решения, внимание ученых стало смещаться к нагруженным дифференциальным уравнениям, которые обеспечивают более точное описание динамики процессов и позволяют учитывать временные изменения в системах [7–15].

Таким образом, исследование обоих типов уравнений является важным для дальнейшего развития теории и практических приложений в различных областях науки и техники.

В данной работе рассматривается первая начально-краевая задача для одномерного и многомерного нагруженного нестационарного уравнения влагопереноса. Уравнения такого вида играют значительную роль в решении актуальных задач экологии, сельского хозяйства, строительства и климатологии. Точное моделирование процессов влагопереноса позволяет эффективно управлять водными ресурсами, прогнозировать уровень грунтовых вод, оптимизировать орошение, обеспечивать устойчивость строительных конструкций и предсказывать последствия климатических изменений [16, 17]. Кроме того, развитие таких моделей способствует прогрессу в гидрологии и смежных науках.

Для исследования поставленных задач используется метод энергетических неравенств, который позволяет получить априорные оценки в разностной интерпретации задачи. В результате получены априорные оценки в разностной форме, позволяющие установить ряд важных свойств решений рассматриваемых задач. В частности, из полученных оценок следует, что решение соответствующей задачи является единственным и устойчивым относительно правой части уравнения и начальных данных. Это означает, что небольшие изменения в исходных условиях или в правой части уравнения не приводят к значительным изменениям в решении.

Также доказана сходимость решения разностной задачи к решению исходной дифференциальной задачи, подтверждающая, что при переходе от разностной модели к непрерывной (дифференциальной) решения будут близкими, что важно для понимания поведения системы в предельном случае и при численном решении. Проведены численные расчеты тестового примера для одномерной задачи.

Таким образом, работа предоставляет теоретическую основу для численного анализа нагруженного нестационарного уравнения влагопереноса в одномерных и многомерных областях и подтверждает надежность методов, используемых для их решения.

Численные методы играют ключевую роль в исследовании нагруженных уравнений как интегральных, так и дифференциальных. Поскольку аналитические решения таких уравнений часто либо отсутствуют, либо крайне сложны для получения, численные методы позволяют эффективно приближенно решать задачи, моделирующие реальные процессы [18–23].

1. Постановка одномерной задачи

В прямоугольнике $\bar{D} = \{(x, t) : 0 \leq x \leq l, 0 \leq t \leq T\}$ рассмотрим первую краевую задачу для одномерного нестационарного нагруженного уравнения влагопереноса:

$$u_t = k(t) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + A \frac{\partial^3 u}{\partial t \partial x^2} - \sum_{s=1}^m q_s(x, t) u(\xi_s, t) + f(x, t), \quad 0 < x < l, \quad 0 < t \leq T, \quad (1)$$

$$u(0, t) = u(l, t) = 0, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (2)$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad 0 \leq x \leq l, \quad (3)$$

где

$$u(x, t) \in C^{6,3}(\bar{D}), \quad k(t) \in C^1[0, T], \quad q_s(x, t), f(x, t) \in C^{4,1}(\bar{D}), \quad (4)$$

$$0 < c_0 \leq k(t) \leq c_1, \quad |q_s(x, t)|, |q_{s,xx}(x, t)| \leq c_2, \quad A > 0, \quad s = 1, 2, \dots, m,$$

$\xi_s, (s = 1, 2, \dots, m)$ – произвольные точки интервала $(0, l) : 0 < \xi_1 < \dots < \xi_m < l$.

В дальнейшем предполагаем, что решение дифференциальной задачи (1)–(3) существует и единственно.

2. Устойчивость и сходимость разностной схемы.

Для решения задачи (1)–(3) применим метод конечных разностей. Для этого на равномерной сетке $\bar{\omega}_{h\tau} = \bar{\omega}_h \times \bar{\omega}_\tau$, где $\bar{\omega}_h = \{x_i = ih, i = 0, N, h = l / N\}$, $\bar{\omega}_\tau = \{t_j = j\tau, j = 0, 1, \dots, j_0, \tau = T / j_0\}$, дифференциальной задаче (1)–(3) поставим в соответствие разностную схему порядка аппроксимации $O(h^4 + \tau^2)$:

$$\mathcal{H}_h y_t = \frac{1}{2} a Y_{\bar{x}\bar{x}} + A y_{\bar{x}\bar{x}t} - \frac{1}{2} \sum_{s=1}^m \mathcal{H}_h d_s Y(\xi_s, t_j) + \mathcal{H}_h \varphi, \quad (5)$$

$$y_0 = y_N = 0, \quad y(x_i, 0) = u_0(x_i), \quad (6)$$

$$y_t = \frac{y^{j+1} - y^j}{\tau}, \quad \mathcal{H}_h y_i^j = \frac{1}{12} (y_{i+1}^j + 10y_i^j + y_{i-1}^j) = y_i^j + \frac{h^2}{12} y_{\bar{x}\bar{x},i}^j, \quad i = 1, \dots, N-1,$$

$$Y^{j+1} = y^{j+1} + y^j, \quad a^j = k \left(t_{j+\frac{1}{2}} \right),$$

$$d_{s,i}^j = q_s \left(x_i, t_{j+\frac{1}{2}} \right), \quad \varphi_i^j = f \left(x_i, t_{j+\frac{1}{2}} \right), \quad x_{i_s} \leq \xi_s \leq x_{i_{s+1}},$$

$$\eta_s^j = \frac{(\xi_s - x_{i_s})(\xi_s - x_{i_{s+1}})(\xi_s - x_{i_{s+2}})}{-6h^3} y_{i_{s-1}}^j +$$

$$+ \frac{(\xi_s - x_{i_{s-1}})(\xi_s - x_{i_{s+1}})(\xi_s - x_{i_{s+2}})}{2h^3} y_{i_s}^j +$$

$$+ \frac{(\xi_s - x_{i_{s-1}})(\xi_s - x_{i_s})(\xi_s - x_{i_{s+2}})}{-2h^3} y_{i_{s+1}}^j + \frac{(\xi_s - x_{i_{s-1}})(\xi_s - x_{i_s})(\xi_s - x_{i_{s+1}})}{6h^3} y_{i_{s+2}}^j,$$

где $\eta_s^j = y(\xi_s, t_j)$, $Y(\xi_s, t_j) = \eta_s^{j+1} + \eta_s^j$.

В дальнейшем будем считать, что $h < \min\{\xi_1, l - \xi_m\}$, j_0 – количество узлов сетки на $[0, T]$, N – количество узлов сетки на $[0, l]$.

Найдем априорную оценку решения (5), (6) методом энергетических неравенств, в связи с чем введем скалярные произведения и норму в виде:

$$(u, v) = \sum_{i=1}^{N-1} u_i v_i h, \quad (u, v] = \sum_{i=1}^N u_i v_i h, \quad (u, u) = (1, u^2) = \|u(\cdot, t)\|^2 = \|u\|^2.$$

Чтобы найти априорную оценку решения задачи (5), (6), умножим уравнение (5) скалярно на $Y = y^j + y^{j+1}$:

$$(Y, \mathcal{H}_h y_t) = \frac{1}{2} (a Y_{\bar{x}\bar{x}}, Y) + A(y_{\bar{x}t}, Y) - \left(\frac{1}{2} \sum_{s=1}^m \mathcal{H}_h d_s Y(\xi_s, t_j), Y \right) + (\mathcal{H}_h \varphi, Y). \quad (7)$$

Преобразуем слагаемые, входящие в (6):

$$(Y, \mathcal{H}_h y_t) = \left(y^{j+1} + y^j, y_t + \frac{h^2}{12} y_{\bar{x}t} \right) = \left(y^{j+1} + y^j, y_t \right) + \left(y^{j+1} + y^j, \frac{h^2}{12} y_{\bar{x}t} \right) =$$

$$= \left(y^{j+1} + y^j, \frac{1}{\tau} (y^{j+1} - y^j) \right) - \frac{h^2}{12} \left(y_{\bar{x}}^{j+1} + y_{\bar{x}}^j, \frac{1}{\tau} (y_{\bar{x}}^{j+1} - y_{\bar{x}}^j) \right) =$$

$$= \left(\|y\|^2 \right)_t - \frac{h^2}{12} \left(\|y_{\bar{x}}\|^2 \right)_t, \quad (8)$$

$$\frac{1}{2} (a Y_{\bar{x}\bar{x}}, Y) = -\frac{1}{2} \left(a, (Y_{\bar{x}})^2 \right] \leq -\frac{c_0}{2} \|Y_{\bar{x}}\|^2, \quad (9)$$

$$A(y_{\bar{x}t}, Y) = -A(y_{\bar{x}t}, Y_{\bar{x}}] = -A\left(\frac{1}{\tau} (\hat{y}_{\bar{x}} - y_{\bar{x}}), (\hat{y}_{\bar{x}} + y_{\bar{x}})\right] =$$

$$= -A \left(\frac{1}{\tau}, (\hat{y}_{\bar{x}})^2 - (y_{\bar{x}})^2 \right) = -A \left(1, \left(y_{\bar{x}}^2 \right)_t \right) = -A \left(\| y_{\bar{x}} \|^2 \right)_t, \quad (10)$$

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \left(\sum_{s=1}^m \mathcal{H}_h d_s Y(\xi_s, t_j), Y \right) = -\frac{1}{2} \sum_{s=1}^m Y(\xi_s, t_j) (\mathcal{H}_h d_s, Y) \leq \\ & \leq \sum_{s=1}^m \left(\frac{1}{4} Y^2(\xi_s, t_j) + \frac{c_2^2}{4} (1, Y)^2 \right) \leq M_1 \sum_{s=1}^m Y^2(\xi_s, t_j) + \frac{m l c_2^2}{4} (1, Y^2) \leq \\ & \leq M_2 \left(\varepsilon \| Y_{\bar{x}} \|^2 + \frac{1}{4\varepsilon} \| Y \|^2 \right) + \frac{m l c_2^2}{4} (1, Y^2) \leq M_3 \left(\| Y_{\bar{x}} \|^2 + \| Y \|^2 \right), \quad (11) \end{aligned}$$

$$(\mathcal{H}_h \Phi, Y) \leq \frac{1}{2} \| Y \|^2 + \frac{1}{2} \| \mathcal{H}_h \Phi \|^2. \quad (12)$$

Учитывая полученные преобразования (7)–(12), из (6) находим

$$\begin{aligned} & \left(\| y \|^2 \right)_t + A \left(\| y_{\bar{x}} \|^2 \right)_t - \frac{h^2}{12} \left(\| y_{\bar{x}} \|^2 \right)_t + \frac{c_0}{2} \| Y_{\bar{x}} \|^2 \leq \\ & \leq M_4 \left(\| Y \|^2 + \| Y_{\bar{x}} \|^2 \right) + M_5 \| \mathcal{H}_h \Phi \|^2. \end{aligned}$$

Здесь и далее через M_i ($i=1,2,\dots$) обозначим положительные постоянные, зависящие только от входных данных исходной дифференциальной задачи.

Выбирая $h \leq h_0 = \sqrt{6}A$, из последнего находим

$$\left(\| y \|^2 \right)_t + \frac{A}{2} \left(\| y_{\bar{x}} \|^2 \right)_t + \frac{c_0}{4} \| Y_{\bar{x}} \|^2 \leq M_4 \left(\| Y \|^2 + \| Y_{\bar{x}} \|^2 \right) + M_5 \| \mathcal{H}_h \Phi \|^2. \quad (13)$$

Просуммируем (13) по j' от 0 до j , умножив обе части на τ , тогда получаем

$$\begin{aligned} & \| y^{j+1} \|^2 + \| y_{\bar{x}} \|^2 + \sum_{j'=0}^j \| Y_{\bar{x}}^{j'} \|^2 \tau \leq \\ & \leq M_6 \sum_{j'=0}^j \left(\| Y^{j'} \|^2 + \| Y_{\bar{x}}^{j'} \|^2 \right) \tau + M_7 \left(\sum_{j'=0}^j \| \mathcal{H}_h \Phi^{j'} \|^2 \tau + \| y^0 \|^2 + \| y_{\bar{x}}^0 \|^2 \right). \quad (14) \end{aligned}$$

Преобразуем первое слагаемое в правой части (14), тогда получим с учетом $(a+b)^2 \leq 2(a^2+b^2)$:

$$\sum_{j'=0}^j \| Y^{j'} \|^2 \tau = \sum_{j'=0}^j \| y^{j'+1} + y^{j'} \|^2 \tau \leq 2 \sum_{j'=0}^j \left(\| y^{j'+1} \|^2 + \| y^{j'} \|^2 \right) \tau =$$

$$\begin{aligned}
 &= 2 \sum_{j'=0}^j \|y^{j'+1}\|^2 \tau + 2 \sum_{j'=0}^j \|y^{j'}\|^2 \tau = 2 \sum_{j'=1}^{j+1} \|y^{j'}\|^2 \tau + 2 \sum_{j'=0}^j \|y^{j'}\|^2 \tau = \\
 &= 2 \|y^{j+1}\|^2 + 2 \|y^0\|^2 + 4 \sum_{j'=1}^j \|y^{j'}\|^2 \tau. \quad (15)
 \end{aligned}$$

Учитывая (15), из (14) находим

$$\begin{aligned}
 &\left[(1 - 2M_6\tau) \|y^{j+1}\|^2 + \|y_{\bar{x}}\|^2 + \sum_{j'=0}^j \|Y_{\bar{x}}^{j'}\|^2 \right]^2 \tau \leq \\
 &\leq M_7 \sum_{j'=0}^j \left(\|y^{j'}\|^2 + \|y_{\bar{x}}^{j'}\|^2 \right) \tau + M_8 \left(\sum_{j'=0}^j \|\mathcal{H}_h \phi^{j'}\|^2 \tau + \|y^0\|^2 + \|y_{\bar{x}}^0\|^2 \right). \quad (16)
 \end{aligned}$$

Выбирая $\tau \leq \tau_0 = \frac{1}{M_6}$, из (16) находим

$$\begin{aligned}
 &\left[\|y^{j+1}\|^2 + \|y_{\bar{x}}^{j+1}\|^2 + \sum_{j'=0}^j \|Y_{\bar{x}}^{j'}\|^2 \right]^2 \tau \leq \\
 &\leq M_9 \sum_{j'=0}^j \left(\|y\|^2 + \|y_{\bar{x}}\|^2 \right) \tau + M_{10} \left(\sum_{j'=0}^j \|\mathcal{H}_h \phi^{j'}\|^2 \tau + \|y^0\|^2 + \|y_{\bar{x}}^0\|^2 \right). \quad (17)
 \end{aligned}$$

Применяя к неравенству (17) разностный аналог леммы Гронуолла [24, лемма 4, с. 171], находим оценку

$$\begin{aligned}
 &\left[\|y^{j+1}\|^2 + \|y_{\bar{x}}^{j+1}\|^2 + \sum_{j'=0}^j \|Y_{\bar{x}}^{j'}\|^2 \right]^2 \tau \leq \\
 &\leq M \left(\sum_{j'=0}^j \|\mathcal{H}_h \phi^{j'}\|^2 \tau + \|y^0\|^2 + \|y_{\bar{x}}^0\|^2 \right), \quad (18)
 \end{aligned}$$

где $M = \text{const} > 0$, зависящая только от входных данных рассматриваемой задачи (1)–(3) и не зависящая от h и τ .

Теорема 1. Пусть выполнены условия (4), тогда существуют такие τ_0 , h_0 , что если $\tau \leq \tau_0(c_0, c_1, c_2, T, l)$, $h \leq h_0(c_0, c_1, c_2, T, l)$, то для решения разностной задачи (5), (6) справедлива априорная оценка (18).

Из априорной оценки (18) следуют единственность решения разностной задачи (5), (6), а также непрерывная зависимость решения задачи от входных данных.

Пусть $u(x, t)$ – решение задачи (1)–(3), $y(x_i, t_j) = y_i^j$ – решение разностной задачи (5), (6). Для оценки точности разностной схемы (5), (6) рассмотрим разность $z_i^j = y_i^j - u_i^j$, где $u_i^j = u(x_i, t_j)$. Тогда, подставляя $y = z + u$ в соотношения (5), (6), получаем задачу для функции z :

$$\mathcal{H}_h z_t = \frac{1}{2} a Z_{\bar{x}x} + \frac{1}{2} A z_{\bar{x}x} - \frac{1}{2} \sum_{s=1}^m \mathcal{H}_h d_s Z(\xi_s, t_j) + \mathcal{H}_h \Psi, \quad (19)$$

$$z_0 = z_N = 0, \quad z(x_i, 0) = 0, \quad (20)$$

где $\mathcal{H}_h \Psi = O(h^4 + \tau^2)$ – погрешности аппроксимации дифференциальной задачи (1)–(3) разностной схемой (5), (6) в классе решения $u = u(x, t)$ задачи (1)–(3).

Применяя априорную оценку (18) к решению задачи (19), (20), получаем неравенство

$$\|z^{j+1}\|^2 + \|z_{\bar{x}}^{j+1}\|^2 + \sum_{j'=0}^j \|Z_{\bar{x}}^{j'}\|^2 \tau \leq M \sum_{j'=0}^j \|\mathcal{H}_h \Psi^{j'}\|^2 \tau, \quad (21)$$

где $M = \text{const} > 0$, не зависящая от h и τ .

Из априорной оценки (21) следует сходимость решения разностной задачи (5), (6) к решению дифференциальной задачи (1)–(3) в смысле нормы $\|z^{j+1}\|^2$ на каждом слое, при этом существуют такие τ_0 , h_0 , что если $\tau \leq \tau_0(c_0, c_1, c_2, T, l)$, $h \leq h_0(c_0, c_1, c_2, T, l)$, то справедлива оценка

$$\|y^{j+1} - u^{j+1}\| \leq M(h^4 + \tau^2),$$

$$\text{где } \|z^{j+1}\|_{\bar{h}}^2 = \|z^{j+1}\|^2 + \|z_{\bar{x}}^{j+1}\|^2 + \sum_{j'=0}^j \|Z_{\bar{x}}^{j'}\|^2 \tau.$$

3. Постановка многомерной задачи

В цилиндре $\bar{Q}_T = \bar{G} \times [0 \leq t \leq T]$, основанием которого является p -мерный прямоугольный параллелепипед $\bar{G} = \{x = (x_1, x_2, \dots, x_p) : 0 \leq x_\alpha \leq l_\alpha, \alpha = 1, 2, \dots, p\}$ с границей Γ , $\bar{G} = G \cup \Gamma$, рассматривается задача

$$\frac{\partial u}{\partial t} = Lu + \bar{L}u + f(x, t), \quad (x, t) \in Q_T, \quad (22)$$

$$u|_{\Gamma} = 0, \quad 0 \leq t \leq T, \quad (23)$$

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad x \in \bar{G}, \quad (24)$$

где

$$\begin{aligned}\bar{L}u &= \sum_{\alpha=1}^p \bar{L}_{\alpha}u, \quad \bar{L}_{\alpha}u = A \frac{\partial^3 u}{\partial x_{\alpha}^2 \partial t}, \quad Lu = \sum_{\alpha=1}^p L_{\alpha}u, \\ L_{\alpha}u &= k_{\alpha}(t) \frac{\partial^2 u}{\partial x_{\alpha}^2} - \sum_{s=1}^m q_{\alpha,s}(x, t) u(x_1, \dots, x_{\alpha-1}, \xi_{\alpha}^s, x_{\alpha+1}, \dots, x_p, t), \\ u(x, t) &\in C^{6,3}(\bar{Q}_T), \quad k_{\alpha}(t) \in C^1[0, T], \quad q_{\alpha,s}(x, t), f(x, t) \in C^{4,1}(\bar{Q}_T), \quad (25) \\ 0 &< c_0 \leq k_{\alpha}(t) \leq c_1, \quad |q_{\alpha,s}(x, t)| \leq c_2, \quad A > 0, \quad s = 1, 2, \dots, m, \\ \alpha &= \overline{1, p}, \quad c_0, c_1, c_2 = \text{const} > 0,\end{aligned}$$

$\xi_{\alpha}^s, (s = 1, 2, \dots, m)$ – произвольные точки интервала $(0, l_{\alpha})$,

$$Q_T = G \times (0 < t \leq T].$$

4. Построение разностной схемы повышенного порядка точности

Разобьем p -мерное пространство переменных $x_1, \dots, x_p$ (гиперплоскость размерности p) $(p-1)$ -мерными гиперплоскостями $x_{\alpha}^{i_{\alpha}} = i_{\alpha} h_{\alpha}$, $\alpha = 1, 2, \dots, p$, где $h_{\alpha} = \frac{l_{\alpha}}{N_{\alpha}}$, i_{α} – целые числа, на p -мерные параллелепипеды [24, с. 486]. Вершины этих параллелепипедов будем называть узлами сетки. Множество узлов, принадлежащих открытой области $G = \bar{G} \setminus \Gamma$, назовем внутренними узлами и обозначим через

$$\omega_h = \left\{ x_i = \left(x_1^{(i_1)}, \dots, x_p^{(i_p)} \right), 0 < l_{\alpha} < N_{\alpha} \right\}.$$

Множество узлов, принадлежащих границе Γ , назовем граничными узлами $\gamma_h = \{x_i \in \Gamma\}$.

На отрезке $0 \leq t \leq T$ введем сетку

$$\bar{\omega}_{\tau} = \{t_j = j\tau, j = 0, 1, \dots, m, m\tau = T\}.$$

Таким образом, в замкнутой области $\bar{Q}_T$ вводится равномерная сетка [24]:

$$\bar{\omega}_{h\tau} = \bar{\omega}_h \times \bar{\omega}_{\tau} = \{(x_i, t_j), x \in \bar{\omega}_h, t \in \bar{\omega}_{\tau}\},$$

$$\bar{\omega}_h = \prod_{\alpha=1}^p \bar{\omega}_{h_{\alpha}}, \quad \bar{\omega}_{h_{\alpha}} = \{x_{\alpha}^{i_{\alpha}} = i_{\alpha} h_{\alpha}, i_{\alpha} = 0, 1, \dots, N_{\alpha}, N_{\alpha} h_{\alpha} = l_{\alpha}\},$$

$$\bar{\omega}_{\tau} = \{t_j = j\tau, j = 0, 1, \dots, m, m\tau = T\}.$$

На сетке $\bar{\omega}_{h\tau}$ дифференциальной задаче (22)–(25) поставим в соответствие разностную схему порядка аппроксимации $O(|h|^4 + \tau^2)$:

$$y_t = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^p a_{\alpha} Y_{\bar{x}_{\alpha} x_{\alpha}} + A \sum_{\alpha=1}^p y_{\bar{x}_{\alpha} x_{\alpha} t} - \sum_{\alpha=1}^p \frac{h_{\alpha}^2}{12} y_{\bar{x}_{\alpha} x_{\alpha} t} -$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^p \left(\sum_{s=1}^m \mathcal{H}_{\alpha, h_{\alpha}} d_{\alpha, s} Y(x_1, \dots, x_{\alpha-1}, \xi_{\alpha}^s, x_{\alpha+1}, \dots, x_p, t_j), Y \right)_{\alpha} + \mathcal{H}_h \varphi, (x, t) \in \omega_{h\tau}, \quad (26)$$

$$y|_{\gamma_h} = 0, \quad y(x, 0) = u_0(x), \quad (27)$$

где

$$\mathcal{H}_h = \sum_{\alpha=1}^p \mathcal{H}_{\alpha, h_{\alpha}},$$

$$\mathcal{H}_{\alpha, h_{\alpha}} y_{i_{\alpha}}^j = \frac{1}{12} (y_{i_{\alpha}+1}^j + 10y_{i_{\alpha}}^j + y_{i_{\alpha}-1}^j) = y_{i_{\alpha}}^j + \frac{h_{\alpha}^2}{12} y_{\bar{x}_{\alpha} x_{\alpha}, i_{\alpha}}^j, \quad i_{\alpha} = \overline{1, N_{\alpha}-1},$$

$$y_t = \frac{y^{j+1} - y^j}{\tau}, \quad \hat{y} = y^{j+1}, \quad y = y^j, \quad y_{\bar{x}_{\alpha}} = \frac{y_{i_{\alpha}} - y_{i_{\alpha}-1}}{h_{\alpha}}, \quad y_{x_{\alpha}} = \frac{y_{i_{\alpha}+1} - y_{i_{\alpha}}}{h_{\alpha}},$$

$$Y^{j+1} = y^{j+1} + y^j, \quad a_{\alpha} = k_{\alpha}(\bar{t}_j), \quad d_{\alpha, s} = q_{\alpha, s}(x, \bar{t}_j), \quad \varphi = f(x, \bar{t}_j),$$

$$\bar{t} = (j + 0.5)\tau = t_j + 0.5\tau = t_{j+0.5}, \quad t_{j+\frac{\alpha}{p}} = t_j + \frac{\alpha\tau}{p} = \left(j + \frac{\alpha}{p}\right)\tau,$$

$$x_{\alpha}^{(i_{\alpha_s})} \leq \xi_{\alpha}^s \leq x_{\alpha}^{(i_{\alpha_s}+1)}, \quad \eta_s^j = \frac{\left(\xi_{\alpha}^s - x_{\alpha}^{(i_{\alpha_s})}\right)\left(\xi_{\alpha}^s - x_{\alpha}^{(i_{\alpha_s}+1)}\right)\left(\xi_{\alpha}^s - x_{\alpha}^{(i_{\alpha_s}+2)}\right)}{-6h^3} y_{i_{\alpha_s}-1}^{(\alpha)} +$$

$$+ \frac{\left(\xi_{\alpha}^s - x_{\alpha}^{(i_{\alpha_s}-1)}\right)\left(\xi_{\alpha}^s - x_{\alpha}^{(i_{\alpha_s}+1)}\right)\left(\xi_{\alpha}^s - x_{\alpha}^{(i_{\alpha_s}+2)}\right)}{2h^3} y_{i_{\alpha_s}}^{(\alpha)} +$$

$$+ \frac{\left(\xi_{\alpha}^s - x_{\alpha}^{(i_{\alpha_s}-1)}\right)\left(\xi_{\alpha}^s - x_{\alpha}^{(i_{\alpha_s})}\right)\left(\xi_{\alpha}^s - x_{\alpha}^{(i_{\alpha_s}+2)}\right)}{-2h^3} y_{i_{\alpha_s}+1}^{(\alpha)} +$$

$$+ \frac{\left(\xi_{\alpha}^s - x_{\alpha}^{(i_{\alpha_s}-1)}\right)\left(\xi_{\alpha}^s - x_{\alpha}^{(i_{\alpha_s})}\right)\left(\xi_{\alpha}^s - x_{\alpha}^{(i_{\alpha_s}+1)}\right)}{6h^3} y_{i_{\alpha_s}+2}^{(\alpha)},$$

здесь

$$\eta_s^j = y(x_1, \dots, x_{\alpha-1}, \xi_\alpha^s, x_{\alpha+1}, \dots, x_p, t_j),$$

$$Y(x_1, \dots, x_{\alpha-1}, \xi_\alpha^s, x_{\alpha+1}, \dots, x_p, t_j) = \eta_s^{j+1} + \eta_s^j.$$

В дальнейшем будем считать, что $h < \min\{\xi_\alpha^1, l - \xi_\alpha^m\}$:

$$x^{\delta\alpha} = x_1, \dots, x_{\alpha-1}, x_\alpha + \delta h_\alpha, x_{\alpha+1}, \dots, x_p, \quad \bar{t} = (j + 0.5)\tau = t_j + 0.5\tau = t_{j+0.5},$$

$$|h|^4 = h_1^4 + h_2^4 + \dots + h_p^4, \quad \tau, h - \text{шаги сетки.}$$

5. Устойчивость и сходимость разностной схемы

Для получения априорной оценки решения разностной задачи (26), (27) воспользуемся методом энергетических неравенств. Введем скалярное произведение в следующем виде:

$$\begin{aligned} (u, v) &= \sum_{x \in \omega_h} u(x)v(x)h_1h_2 \cdots h_p = \\ &= \sum_{i_1=1}^{N_1-1} \sum_{i_2=1}^{N_2-1} \cdots \sum_{i_p=1}^{N_p-1} u(i_1h_1, i_2h_2, \dots, i_ph_p)v(i_1h_1, i_2h_2, \dots, i_ph_p)h_1h_2 \cdots h_p; \\ (u, v)_\alpha &= \sum_{i_1=1}^{N_1-1} \sum_{i_2=1}^{N_2-1} \cdots \sum_{i_\alpha=1}^{N_\alpha-1} \cdots \sum_{i_p=1}^{N_p-1} u(x)v(x)h_1h_2 \cdots h_p = \\ &= \sum_{i_\beta \neq i_\alpha} \left(\sum_{i_\alpha=1}^{N_\alpha-1} u(x)v(x)h_\alpha \right) H / h_\alpha, \\ (u, v]_\alpha &= \sum_{i_1=1}^{N_1-1} \sum_{i_2=1}^{N_2-1} \cdots \sum_{i_\alpha=1}^{N_\alpha} \cdots \sum_{i_p=1}^{N_p-1} u(x)v(x)h_1h_2 \cdots h_p = \\ &= \sum_{i_\beta \neq i_\alpha} \left(\sum_{i_\alpha=1}^{N_\alpha} u(x)v(x)h_\alpha \right) H / h_\alpha, \quad H = \prod_{\alpha=1}^p h_\alpha. \end{aligned}$$

В пространстве функции определим норму и введем ее в таком виде:

$$(y, y) = \|u\|^2, \quad (y, y] = \|u\|^2, \quad (y, v] = \sum_{\alpha=1}^p (y, v]_\alpha, \quad \|y_{\bar{x}}\|^2 = \sum_{\alpha=1}^p \|y_{\bar{x}_\alpha}\|^2.$$

Умножим (26) скалярно на $Y = \hat{y} + y$:

$$(y_t, Y) = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^p (a_{\alpha} Y_{\bar{x}_{\alpha} x_{\alpha}}, Y) + \left(A \sum_{\alpha=1}^p y_{\bar{x}_{\alpha} x_{\alpha} t}, Y \right) - \left(\sum_{\alpha=1}^p \frac{h_{\alpha}^2}{12} y_{\bar{x}_{\alpha} x_{\alpha} t}, Y \right) -$$

$$-\frac{1}{2} \left(\sum_{\alpha=1}^p \left(\sum_{s=1}^m \mathcal{H}_{\alpha, h_{\alpha}} d_{\alpha, s} Y(x_1, \dots, x_{\alpha-1}, \xi_{\alpha}^s, x_{\alpha+1}, \dots, x_p, t_j), Y \right)_{\alpha} \right) + (\mathcal{H}_h \Phi, Y). \quad (28)$$

Преобразуем суммы, входящие в тождество (28) с учетом первой разностной формулы Грина [24]:

$$(y_t, Y) = \left(\frac{1}{\tau} (\hat{y} - y), (\hat{y} + y) \right) = \frac{(1, \hat{y}^2) - (1, y^2)}{\tau} = (1, y^2)_t = (\|y\|^2)_t, \quad (29)$$

$$\frac{1}{2} \left(\sum_{\alpha=1}^p a_{\alpha} Y_{\bar{x}_{\alpha} x_{\alpha}}, Y \right) = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^p \left(a_{\alpha}, Y_{\bar{x}_{\alpha}}^2 \right)_{\alpha} \leq -\frac{c_0}{2} \|Y_{\bar{x}}\|^2, \quad (30)$$

$$\left(A \sum_{\alpha=1}^p y_{\bar{x}_{\alpha} x_{\alpha} t}, Y \right) = A \sum_{\alpha=1}^p (y_{\bar{x}_{\alpha} x_{\alpha} t}, Y) = -A \sum_{\alpha=1}^p (y_{\bar{x}_{\alpha} t}, Y_{\bar{x}_{\alpha}}) =$$

$$= -A \sum_{\alpha=1}^p \left(\frac{1}{\tau} (\hat{y}_{\bar{x}_{\alpha}} - y_{\bar{x}_{\alpha}}), (\hat{y}_{\bar{x}_{\alpha}} + y_{\bar{x}_{\alpha}}) \right) = -A \sum_{\alpha=1}^p \left(\frac{1}{\tau} (\hat{y}_{\bar{x}_{\alpha}})^2 - (y_{\bar{x}_{\alpha}})^2 \right) =$$

$$= -A \sum_{\alpha=1}^p \left(1, (y_{\bar{x}_{\alpha}}^2)_t \right) = -A \sum_{\alpha=1}^p (\|y_{\bar{x}_{\alpha}}\|^2)_t, \quad (31)$$

$$-\left(\sum_{\alpha=1}^p \frac{h_{\alpha}^2}{12} y_{\bar{x}_{\alpha} x_{\alpha} t}, Y \right) = \sum_{\alpha=1}^p \frac{h_{\alpha}^2}{12} (y_{\bar{x}_{\alpha} t}, Y_{\bar{x}_{\alpha}})_{\alpha} =$$

$$= \sum_{\alpha=1}^p \frac{h_{\alpha}^2}{12} \left(\frac{1}{\tau} (y_{\bar{x}_{\alpha}}^{j+1} - y_{\bar{x}_{\alpha}}^j), y_{\bar{x}_{\alpha}}^{j+1} + y_{\bar{x}_{\alpha}}^j \right)_{\alpha} =$$

$$= \left(\sum_{\alpha=1}^p \frac{h_{\alpha}^2}{12} \|y_{\bar{x}_{\alpha}}\|^2 \right)_t = \sum_{\alpha=1}^p \frac{h_{\alpha}^2}{12} (\|y_{\bar{x}_{\alpha}}\|^2)_t, \quad (32)$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^p \left(\sum_{s=1}^m \mathcal{H}_{\alpha, h_{\alpha}} d_{\alpha, s} Y(x_1, \dots, x_{\alpha-1}, \xi_{\alpha}^s, x_{\alpha+1}, \dots, x_p, t_j), Y \right)_{\alpha} =$$

$$= -\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^p Y(x_1, \dots, x_{\alpha-1}, \xi_{\alpha}^s, x_{\alpha+1}, \dots, x_p, t_j) \left(\sum_{s=1}^m \mathcal{H}_{\alpha, h_{\alpha}} d_{\alpha, s}, Y \right)_{\alpha} \leq$$

$$\begin{aligned} &\leq \frac{1}{4} \sum_{\alpha=1}^p \left(Y^2 \left(x_1, \dots, x_{\alpha-1}, \xi_{\alpha}^s, x_{\alpha+1}, \dots, x_p, t_j \right) + \left(\sum_{s=1}^m \mathcal{H}_{\alpha, h_{\alpha}} d_{\alpha, s}, Y \right)_{\alpha}^2 \right) \leq \\ &\leq M_1 \sum_{\alpha=1}^p \left(\|Y\|^2 + \|Y_{\bar{x}_{\alpha}}\|^2 + (1, Y^2)_{\alpha} \right) \leq M_2 \left(\|Y\|^2 + \|Y_{\bar{x}}\|^2 \right), \end{aligned} \quad (33)$$

$$(\mathcal{H}_h \Phi, Y) \leq \frac{1}{2} \|Y\|^2 + \frac{1}{2} \|\mathcal{H}_h \Phi\|^2. \quad (34)$$

Учитывая оценки (29)–(34), после ряда преобразований из (28) получаем следующее неравенство^

$$\begin{aligned} &\left(\|y\|^2 \right)_t + \sum_{\alpha=1}^p \left(A - \frac{h_{\alpha}^2}{12} \right) \left(\|y_{\bar{x}_{\alpha}}\|^2 \right)_t + c_0 \|Y_{\bar{x}}\|^2 \leq \\ &\leq M_3 \left(\|Y\|^2 + \|Y_{\bar{x}}\|^2 \right) + \frac{1}{2} \|\mathcal{H}\Phi\|^2. \end{aligned} \quad (35)$$

Выбирая $h_{\alpha} \leq h_{\alpha}^0 = \frac{A}{2}$, из (35) находим

$$\left(\|y\|^2 \right)_t + \left(\|y_{\bar{x}}\|^2 \right)_t + \|Y_{\bar{x}}\|^2 \leq M_4 \left(\|Y\|^2 + \|Y_{\bar{x}}\|^2 \right) + M_5 \|\mathcal{H}\Phi\|^2. \quad (36)$$

Умножим обе части (36) на τ и просуммируем по j' от 0 до j , тогда имеем:

$$\begin{aligned} &\|y^{j+1}\|^2 + \|y_{\bar{x}}^{j+1}\|^2 + \sum_{j'=0}^j \|Y_{\bar{x}}^{j'}\|^2 \tau \leq M_4 \sum_{j'=0}^j \left(\|Y^{j'}\|^2 + \|Y_{\bar{x}}^{j'}\|^2 \right) \tau + \\ &+ M_6 \left(\sum_{j'=0}^j \|\mathcal{H}\Phi^{j'}\|^2 \tau + \|y^0\|^2 + \|y_{\bar{x}}^0\|^2 \right). \end{aligned} \quad (37)$$

С помощью (15) преобразуем первое слагаемое в правой части (37):

$$\begin{aligned} &(1 - M_4 \tau) \left(\|y^{j+1}\|^2 + \|y_{\bar{x}}^{j+1}\|^2 \right) + \sum_{j'=0}^j \|Y_{\bar{x}}^{j'}\|^2 \tau \leq M_7 \sum_{j'=0}^j \left(\|y^{j'}\|^2 + \|y_{\bar{x}}^{j'}\|^2 \right) \tau + \\ &+ M_8 \left(\sum_{j'=0}^j \|\mathcal{H}\Phi^{j'}\|^2 \tau + \|y^0\|^2 + \|y_{\bar{x}}^0\|^2 \right). \end{aligned} \quad (38)$$

Выбирая τ таким образом, что для всех $\tau \leq \tau_0$, $\tau_0 = \frac{1}{2M_4}$, из (38) получаем

$$\begin{aligned} \|y^{j+1}\|^2 + \|y_{\bar{x}}^{j+1}\|^2 + \sum_{j'=0}^j \|Y_{\bar{x}}\|^2 \tau \leq M_9 \sum_{j'=1}^j \left(\|y^{j'}\|^2 + \|y_{\bar{x}}^{j'}\|^2 \right) \tau + \\ + M_{10} \left(\sum_{j'=0}^j \|\mathcal{H}\varphi^{j'}\|^2 \tau + \|y^0\|^2 + \|y_{\bar{x}}^0\|^2 \right). \end{aligned} \quad (39)$$

Применяя к (39) аналог леммы Гронуолла для сеточной функций [25, лемма 4, с. 171], получаем априорную оценку

$$\begin{aligned} \|y^{j+1}\|^2 + \|y_{\bar{x}}^{j+1}\|^2 + \sum_{j'=0}^j \|(y^{j'+1} + y^{j'})_{\bar{x}}\|^2 \tau \leq \\ \leq M \left(\sum_{j'=0}^j \|\mathcal{H}\varphi^{j'}\|^2 \tau + \|y^0\|^2 + \|y_{\bar{x}}^0\|^2 \right), \end{aligned} \quad (40)$$

где M – положительная постоянная, не зависящая от $|h|$ и τ .

Из априорной оценки (40) следует следующая теорема.

Теорема 2. Пусть выполнены условия (25), тогда для решения разностной задачи (26), (27) при малом $\tau \leq \tau_0(c_0, c_1, c_2, l, T)$, $h_\alpha \leq h_\alpha^0(c_0, c_1, c_2, l, T)$ справедлива априорная оценка (40) на каждом временном слое.

Таким образом, доказаны единственность и устойчивость решения разностной задачи (26), (27) по начальным данным и правой части в смысле

нормы $\|y\|_{\tau}^2 = \|y^{j+1}\|^2 + \|y_{\bar{x}}^{j+1}\|^2 + \sum_{j'=0}^j \|(y^{j'+1} + y^{j'})_{\bar{x}}\|^2 \tau$ на слое.

Пусть $u(x, t)$ – решение многомерной задачи (22)–(24), y_i^j – решение разностной задачи (26), (27), тогда обозначим через $z_i^j = y_i^j - u_i^j$ погрешность аппроксимации. Подставляя $y_i^j = z_i^j + u_i^j$ в (26), (27) и считая $u(x_i, t_j)$ заданной функцией, получим задачу для z :

$$\begin{aligned} z_t = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^p a_\alpha Z_{\bar{x}_\alpha} x_\alpha + A \sum_{\alpha=1}^p z_{\bar{x}_\alpha} x_{\alpha t} - \sum_{\alpha=1}^p \frac{h_\alpha^2}{12} z_{\bar{x}_\alpha} x_{\alpha t} - \\ - \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^p \left(\sum_{s=1}^m \mathcal{H}_{\alpha, h_\alpha} d_{\alpha, s} Z(x_1, \dots, x_{\alpha-1}, \xi_\alpha^s, x_{\alpha+1}, \dots, x_p, t_j), Z \right)_\alpha + \mathcal{H}_h \varphi, \end{aligned} \quad (41)$$

$$z|_{\gamma_h} = 0, \quad z(x, 0) = 0, \quad (42)$$

где $\mathcal{H}_h \varphi = O(|h|^4 + \tau^2)$ – погрешность аппроксимации (39) на решении исходной задачи при каждом фиксированном $t = \bar{t}$.

Применяя априорную оценку (40) в силу линейности разностной задачи (26), (27) к задаче для погрешности (41), (42), получим оценку

$$\|z^{j+1}\|^2 + \|z_{\bar{x}}^{j+1}\|^2 + \sum_{j'=0}^j \|(z^{j'+1} + z^{j'})_{\bar{x}}\|^2 \tau \leq M \sum_{j'=0}^j \|\mathcal{H}_h \Psi^{j'}\|^2 \tau. \quad (43)$$

Из априорной оценки (43) следует сходимость схемы (26), (27) со скоростью $O(|h|^4 + \tau^2)$, $|h|^4 = h_1^4 + h_2^4 + \dots + h_p^4$.

6. Тестовый пример и результаты численных расчетов задачи (1)–(3)

Коэффициенты уравнения и граничных условий дифференциальной задачи (1)–(3) подбираются таким образом, чтобы точным решением задачи (1)–(3) была функция

$$u(x, t) = t^3 (x^6 - lx^5).$$

Отметим, что для приведения разностной схемы (1)–(3) к расчетному виду можно воспользоваться методом параметрической прогонки [26].

В табл. 1, 2 при уменьшении шагов сетки приведены максимальные значения погрешности ($z = y - u$) и вычислительный (апостериорный) порядок сходимости (ПС) в нормах $\|\cdot\|_{L_2(\bar{w}_{h\tau})}$ и $\|\cdot\|_{C(\bar{w}_{h\tau})}$, где $\|y\|_{C(\bar{w}_{h\tau})} = \max_{(x_i, t_j) \in \bar{w}_{h\tau}} |y|$. Погрешность уменьшается в соответствии с порядком аппроксимации $O(h^4 + \tau^2)$.

Таблица 1
Изменение погрешности и порядка сходимости в нормах $\|\cdot\|_{L_2(\bar{w}_{h\tau})}$, $\|\cdot\|_{C(\bar{w}_{h\tau})}$
для задачи (1)–(3) при уменьшении параметров сетки на $t=1$, когда $h^2 = \tau$

h	$\max_{0 \leq j < m} \ z^j\ _{L_2(\bar{w}_{h\tau})}$	ПС в $\ \cdot\ _{L_2(\bar{w}_{h\tau})}$	$\ z\ _{C(\bar{w}_{h\tau})}$	ПС в $\ \cdot\ _{C(\bar{w}_{h\tau})}$
1/5	4,68078e-4		6,24591e-6	
1/10	2,66724e-5	4,133330	3,68762e-5	4,082149
1/20	1,66821e-6	3,998979	2,30620e-6	3,999098
1/40	1,04342e-7	3,998909	1,44237e-7	3,999004
1/80	6,51831e-9	4,000676	9,01512e-9	3,999954
1/160	4,07668e-10	3,999028	5,63786e-10	3,999126

Вычислительный (апостериорный) порядок сходимости будем определять по формуле

$$\text{ПС} = \log_2 \frac{\|z_1\|}{\|z_2\|},$$

где z_1 и z_2 – погрешности, соответствующие шагам $0,5\bar{h}$, $\bar{h}$.

Таблица 2

Изменение погрешности и порядка сходимости в нормах $\|\cdot\|_{L_2(\bar{w}_{h\tau})}$, $\|\cdot\|_{C(\bar{w}_{h\tau})}$ для задачи (1)–(3) при уменьшении τ на $t=1$, когда $h=1/200$

τ	$\max_{0 \leq j < m} \ z^j\ _{L_2(\bar{w}_{h\tau})}$	ПС в $\ \cdot\ _{L_2(\bar{w}_{h\tau})}$	$\ z\ _{C(\bar{w}_{h\tau})}$	ПС в $\ \cdot\ _{C(\bar{w}_{h\tau})}$
1/5	3,48543e-4		6,83514e-4	
1/10	8,71451e-5	1,999846	1,70896e-4	1,999845
1/20	2,17866e-5	1,999977	4,27251e-5	1,999971
1/40	5,44643e-6	2,000058	5,44643e-6	2,000032
1/80	1,36135e-6	2,000270	1,36135e-6	2,000164
1/160	3,40081e-7	2,001090	3,40081e-7	2,000663

Заключение

Разработаны новые разностные схемы для приближенного решения первой начально-краевой задачи для нагруженного нестационарного уравнения влагопереноса в одномерных и многомерных областях. Порядок аппроксимации для одномерной задачи составляет $O(h^4 + \tau^2)$, а для многомерной $-O(|h|^4 + \tau^2)$. Исследование основано на методе энергетических неравенств, что позволило получить априорные оценки в разностной форме для решений разностных задач. Эти оценки подтверждают единственность и устойчивость решений в зависимости от входных данных, а также обеспечивают сходимость решения разностной задачи к решению исходной дифференциальной задачи с точностью порядка $O(h^4 + \tau^2)$ и $O(|h|^4 + \tau^2)$ при условии, что решение дифференциальной задачи принадлежит классу достаточно гладких функций. Проведены численные эксперименты с тестовым примером для одномерного случая, которые подтверждают теоретические результаты, полученные в ходе исследования.

Список литературы

1. Knezer A. Belastete integralgleichungen // Rendiconti del Circolo Matematico di Palermo. 1914. Vol. 37. P. 169–197.
2. Kneser A. Die Integralgleichungen und ihre Anwendung in der matem. Phusik, 1922. 248 p.
3. Lichtenstein L. Vorlesungen`ber einige Klassen nichtlinear Integralgleichungen und Integraldifferentialgleichungen nebst Anwendungen. Berlin : Springer, 1931. P. 164.
4. Gunther N. Sur le probleme des Belastete Integralgleichungen // Studia math. 1933. № IV. P. 8–14.
5. Назаров Н. Н. Об одном новом классе линейных интегральных уравнений // Труды института математики и механики АН УзССР. 1948. Т. 4. С. 77–106.
6. Габиб-заде А. Ш. Исследование решения одного класса линейных нагруженных интегральных уравнений // Труды Института физики и математики АН АзССР, Серия: математика. 1959. Т. 8. С. 177–182.
7. Смирнов М. М. Вырождающиеся гиперболические уравнения. Минск : Высшая школа, 1977. 157 с.
8. Будаков Б. М., Искендеров А. Д. Об одном классе краевых задач с неизвестными коэффициентами // Доклады Академии наук СССР. 1967. Т. 175, № 1. С. 13–16.

9. Нахушев А. М. Нагруженные уравнения и их приложения // Дифференциальные уравнения. 1983. Т. 19, № 1. С. 86–94.
10. Нахушев А. М. Нагруженные уравнения и их применение. М. : Наука, 2012. 231 с.
11. Нахушев А. М., Борисов В. Н. Краевые задачи для нагруженных параболических уравнений и их приложения к прогнозу уровня грунтовых вод // Дифференциальные уравнения. 1977. Т. 13, № 1. С. 105–110.
12. Бородин А. В. Дифференцируемость по параметру решений нелинейно нагруженных краевых задач для уравнений в частных производных второго порядка // Дифференциальные уравнения. 1979. Т. 15, № 1. С. 18–26.
13. Казиев В. М. Задача Трикоми для нагруженного уравнения Лаврентьева – Бицадзе // Дифференциальные уравнения. 1979. Т. 15. С. 173–175.
14. Джениалиев М. Т. К теории линейных краевых задач для нагруженных дифференциальных уравнений. Алматы, 1995. 270 с.
15. Krall A. M. The development of general differential and general differential boundary systems // Rocky Mountain Journal of Mathematics. 1975. Vol. 5 (4). P. 493–542.
16. Нахушев А. М. Нелокальная задача и задача Гурса для нагруженного уравнения гиперболического типа и их приложения к прогнозу почвенной влаги // Доклады Академии наук СССР. 1978. Т. 242, № 5. С. 1008–1011.
17. Карданов Р. Г., Нахушев А. М. О некоторых способах идентификации математической модели динамики грунтовой воды и почвенной влаги // САПР и АСПР в мелиорации : сб. науч. трудов. Нальчик, 1983. С. 3–20.
18. Айда-заде К. Р., Абдуллаев В. М. О численном решении нагруженных систем обыкновенных дифференциальных уравнений с неразделенными многоточечными и интегральными условиями // Сибирский журнал вычислительной математики. 2014. Т. 17, № 1. С. 1–16.
19. Абдуллаев В. М. Решение дифференциальных уравнений с неразделенными многоточечными и интегральными условиями // Сибирский журнал вычислительной математики. 2012. Т. 15, № 3. С. 3–15.
20. Айда-заде К. Р., Абдуллаев В. М. Численный метод решения нагруженных нелокальных граничных задач для обыкновенных дифференциальных уравнений // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2014. Т. 54, № 7. С. 1096–1109.
21. Бештоков М. Х. Дифференциальные и разностные краевые задачи для нагруженных псевдопараболических уравнений третьего порядка и разностные методы их численной реализации // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2017. Т. 57, № 12. С. 2021–2041.
22. Бештоков М. Х. Краевые задачи для нагруженного модифицированного уравнения влагопереноса дробного по времени порядка с оператором Бесселя и разностные методы их решения // Вестник Удмуртского университета. Математика. Механика. Компьютерные науки. 2020. Т. 30, № 2. С. 158–175.
23. Beshtokov M. Kh., Khudalov M. Z. Difference Methods for Solving Local and Nonlocal Boundary Value Problems for a Loaded Fractional Order Heat Equation // Stability, Control and Differential Games : Lecture Notes in Control and Information Sciences – Proceedings. Ed. by A. Tarasyev, V. Maksimov, T. Filippova. Cham : Springer, 2020. P. 187–201.
24. Самарский А. А. Теория разностных схем. М. : Наука, 1983. 616 с.
25. Самарский А. А., Гулин А. В. Устойчивость разностных схем. М. : Наука, 1973. 415 с.
26. Воеводин А. Ф., Шугрин С. М. Численные методы расчета одномерных систем. Новосибирск : Наука, Сиб. отд-ние, 1981. 208 с.

References

1. Knezer A. Belastete integralgleichungen. *Rendiconti del Circolo Matematico di Palermo*. 1914;37:169–197.

2. Kneser A. *Die Integralgleichungen und ihre Anwendung in der matem.* Phusik, 1922:248.
3. Lichtenstein L. *Vorlesungen`ber einege Klassen nichtlinear Integralgleichungen und Integraldifferentialgleihungen nebst Anwendungen.* Berlin: Springer, 1931:164.
4. Gunther N. Sur le probleme des Belastete Integralgleichungen. *Studia math.* 1933;(IV):8–14.
5. Nazarov H.H. On a new class of linear integral equations. *Trudy instituta matematiki i mekhaniki AN UzSSR = Proceedings of the Institute of Mathematics and Mechanics of the Academy of Sciences of the Uzbek SSR.* 1948;4:77–106. (In Russ.)
6. Gabib-zade A.Sh. Study of the solution of one class of linear loaded integral equations. *Trudy Instituta fiziki i matematiki AN AzSSR, Seriya: matematika = Proceedings of the Institute of Physics and Mathematics of the Academy of Sciences of the Azerbaijan SSR, Series: Mathematics.* 1959;8:177–182. (In Russ.)
7. Smirnov M.M. *Vyrozhdnyushchiesya giperbolicheskie uravneniya = Degenerate hyperbolic equations.* Minsk: Vysshaya shkola, 1977:157.
8. Budak B.M., Iskenderov A.D. On a class of boundary value problems with unknown coefficients. *Doklady Akademii nauk SSSR = Reports of the USSR Academy of Sciences.* 1967;175(1):13–16. (In Russ.)
9. Nakhushev A.M. Loaded equations and their applications. *Differentsial'nye uravneniya = Differential equations.* 1983;19(1):86–94. (In Russ.)
10. Nakhushev A.M. *Nagruzhennye uravneniya i ikh primeneniye = Loaded equations and their applications.* Moscow: Nauka, 2012:231. (In Russ.)
11. Nakhushev A.M., Borisov V.N. Boundary value problems for loaded parabolic equations and their applications to groundwater level prediction. *Differentsial'nye uravneniya = Differential equations.* 1977;13(1):105–110. (In Russ.)
12. Borodin A.B. Differentiability with respect to the parameter of solutions of nonlinear loaded boundary value problems for second-order partial differential equations. *Differentsial'nye uravneniya = Differential equations.* 1979;15(1):18–26. (In Russ.)
13. Kaziev V.M. Tricoti problem for loaded Lavrentiev-Bitsadze equation. *Differentsial'nye uravneniya = Differential equations.* 1979;15:173–175. (In Russ.)
14. Dzhenaliev M.T. *K teorii lineynykh kraevykh zadach dlya nagruzhennykh differentsial'nykh uravneniy = On the theory of linear boundary value problems for loaded differential equations.* Almaty, 1995:270. (In Russ.)
15. Krall A.M. The development of general differential and general differential boundary systems. *Rocky Mountain Journal of Mathematics.* 1975;5(4):493–542.
16. Nakhushev A.M. Nonlocal and Goursat problems for loaded hyperbolic equations and their applications to soil moisture forecasting. *Doklady Akademii nauk SSSR = Reports of the USSR Academy of Sciences.* 1978;242(5):1008–1011. (In Russ.)
17. Kardanov R.G., Nakhushev A.M. On some methods of identifying a mathematical model of the dynamics of groundwater and soil moisture. *SAPR i ASPR v melioratsii: sb. nauch. trudov = SAPR and ASPR in land reclamation: collected papers.* Nal'chik, 1983:3–20. (In Russ.)
18. Ayda-zade K.R., Abdullaev V.M. On the numerical solution of loaded systems of ordinary differential equations with non-separated multipoint and integral conditions. *Sibirskiy zhurnal vychislitel'noy matematiki = Siberian journal of computational mathematics.* 2014;17(1):1–16. (In Russ.)
19. Abdullaev V.M. Solution of differential equations with non-separated multi-point and integral conditions. *Sibirskiy zhurnal vychislitel'noy matematiki = Siberian journal of computational mathematics.* 2012;15(3):3–15. (In Russ.)
20. Ayda-zade K.R., Abdullaev V.M. Numerical method for solving loaded nonlocal boundary value problems for ordinary differential equations. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki = Journal of computational mathematics and mathematical physics.* 2014;54(7):1096–1109. (In Russ.)

21. Beshtokov M.Kh. Differential and diverse boundary problems for the loaded pseudo-parabolic equation of the third phase and different methods for their numerical implementation. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki = Journal of computational mathematics and mathematical physics*. 2017;57(12):2021–2041. (In Russ.)
22. Beshtokov M.Kh. Regional tasks for loading modified level of moisture-permeable fractional time-lapse with operator Besselya and different methods of their solution. *Vestnik Udmurtskogo universiteta. Matematika. Mekhanika. Komp'yuternye nauki = Bulletin of Udmurt University. Mathematics. Mechanics. Computer sciences*. 2020;30(2):158–175. (In Russ.)
23. Beshtokov M.Kh., Khudalov M.Z. Difference Methods for Solving Local and Nonlocal Boundary Value Problems for a Loaded Fractional Order Heat Equation. *Stability, Control and Differential Games: Lecture Notes in Control and Information Sciences – Proceedings*. Ed. by A. Tarasyev, V. Maksimov, T. Filippova. Cham: Springer, 2020:187–201.
24. Samarskiy A.A. *Teoriya raznostnykh skhem = Theory of difference schemes*. Moscow: Nauka, 1983:616. (In Russ.)
25. Samarskiy A.A., Gulin A.B. *Ustoychivost' raznostnykh skhem = Stability of difference schemes*. Moscow: Nauka, 1973:415. (In Russ.)
26. Voevodin A.F., Shugrin S.M. *Chislennyye metody rascheta odnomernykh system = Numerical methods for calculating one-dimensional systems*. Novosibirsk: Nauka, Sib. otd-nie, 1981:208. (In Russ.)

Информация об авторах / Information about the authors

Мурат Хамидбиевич Бештоков

ведущий научный сотрудник,
Институт прикладной математики
и автоматизации, Кабардино-Балкарский
научный центр Российской академии
наук (Россия, г. Нальчик,
ул. Шортанова, 89а)

E-mail: beshtokov-murat@yandex.ru

Murat Kh. Beshtokov

Leading researcher, Institute of Applied
Mathematics and Automation KBSC RAS
(89a Shortanova street, Nalchik, Russia)

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов / The author declares no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 30.05.2025

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 17.06.2025

Принята к публикации / Accepted 10.07.2025

УДК 517.3, 517.6

doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-5

Задача дифракции электромагнитной волны на однородном диэлектрическом шаре, покрытом графеном

Ю. Г. Смирнов¹, О. В. Кондырев²^{1,2}Пензенский государственный университет, Пенза, Россия¹mmm@pnzgu.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Краевые задачи сопряжения для уравнений Максвелла находят широкое применение в различных областях электродинамики благодаря своей способности моделировать сложные физические ситуации, связанные с взаимодействием электромагнитных волн с границами и тонкими слоями материалов. Задачей данной работы является вывод и анализ системы интегральных уравнений для задачи дифракции электромагнитной волны на диэлектрическом шаре, покрытом графеном, и доказательство существования и единственности решения краевой задачи. *Материалы и методы.* С помощью комбинации формул Страттона-Чу получена система векторных интегральных уравнений по поверхности шара. *Результаты.* Получена система скалярных сингулярных интегральных уравнений для поиска четырех неизвестных функций. Доказана теорема о существовании и единственности решения системы уравнений, а также существование и единственность решения краевой задачи дифракции. *Вывод.* Выполнено исследование задачи дифракции электромагнитной волны на диэлектрическом шаре, покрытом графеном, получена система уравнений для численного решения.

Ключевые слова: сингулярное интегральное уравнение, уравнения Максвелла, диэлектрическое тело, графен

Для цитирования: Смирнов Ю. Г., Кондырев О. В. Задача дифракции электромагнитной волны на однородном диэлектрическом шаре, покрытом графеном // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2025. № 2. С. 63–76. doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-5

Problem of electromagnetic wave diffraction on homogeneous dielectric ball coated with graphene

Yu.G. Smirnov¹, O.V. Kondyrev²^{1,2}Penza State University, Penza, Russia¹mmm@pnzgu.ru

Abstract. *Background.* Boundary value problems for Maxwell's equations are widely used in various fields of electrodynamics due to their ability to model complex physical situations associated with the interaction of electromagnetic waves with boundaries and thin layers of materials. The objective of this work is to derive and analyze a system of integral equations for the problem of electromagnetic wave diffraction on a dielectric ball coated with graphene, and to prove the existence and uniqueness of a solution to the boundary value problem. *Materials and methods.* Using a combination of Stratton-Chu formulas, a system of vector integral equations over the surface of a sphere is obtained. *Results.* A system of scalar singular integral equations is obtained for searching for four unknown functions. The theorem on the existence and uniqueness of the solution of the system of equations, as

well as the existence and uniqueness of the solution of the boundary value problem of diffraction is proved. *Conclusions.* The problem of electromagnetic wave diffraction on a dielectric ball coated with graphene has been studied, and a system of equations for numerical solution has been obtained.

Keywords: singular integral equation, Maxwell equations, dielectric body, graphene

For citation: Smirnov Yu.G., Kondyrev O.V. Problem of electromagnetic wave diffraction on homogeneous dielectric ball coated with graphene. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences.* 2025;(2):63–76. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-5

Введение

Краевые задачи имеют широкую применимость на практике: анализ дифракции и рассеяния электромагнитных волн, исследование собственных колебаний и резонансов, моделирование взаимодействия с тонкими слоями и наноструктурами, учет нелинейных эффектов.

Стандартные задачи сопряжения в математической физике (и, в частности, в электродинамике) достаточно хорошо изучены [1–5]. В последнее время появился интерес к краевым задачам с особыми условиями сопряжения, которые предполагают наличие тонкого слоя «двумерного» материала на границе раздела сред. Такая постановка приводит к новому классу задач сопряжения [6–13].

Для решения задачи дифракции электромагнитной волны на однородном диэлектрическом шаре, покрытом графеном, выбран метод интегральных уравнений. С помощью этого метода можно свести задачу к системе интегральных уравнений по поверхности тела. Преимущество такого подхода – он позволяет использовать численные методы и эффективные параллельные алгоритмы для решения задачи.

В статье рассмотрена задача дифракции на теле с заданным внешним полем и получена система скалярных уравнений в сферических координатах. Доказана теорема о существовании и единственности решения системы уравнений, а также существование и единственность решения краевой задачи дифракции.

1. Постановка задачи

Рассмотрим ограниченную область $\Omega_1 \in \mathbb{R}^3$ с границей Γ класса гладкости C^2 и значениями диэлектрической и магнитной проницаемости ε_1, μ_1 в области Ω_1 и ε_2, μ_2 в $\Omega_2 := \mathbb{R}^3 \setminus \bar{\Omega}_1$, причем $\varepsilon_i > 0$ и $\mu_i > 0$.

Электромагнитное поле $\{\mathbf{E}, \mathbf{H}\}$ в области Ω_1 представим как $\{\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1\}$, а в области Ω_2 как $\{\mathbf{E}_2, \mathbf{H}_2\}$. Компоненты $\mathbf{E}_2$ и $\mathbf{H}_2$ выражаются как

$$\begin{aligned}\mathbf{E}_2 &= \mathbf{E}_0 + \mathbf{E}_s, \\ \mathbf{H}_2 &= \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_s,\end{aligned}\tag{1}$$

где $\{\mathbf{E}_0, \mathbf{H}_0\}$ – падающее поле, удовлетворяющее системе уравнений Максвелла:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \mathbf{H}_0 = -i\omega\epsilon_2 \mathbf{E}_0 \\ \operatorname{rot} \mathbf{E}_0 = i\omega\mu_2 \mathbf{H}_0 \end{cases} \text{ в } \mathbf{R}^3, \quad (2)$$

а $\{\mathbf{E}_s, \mathbf{H}_s\}$ – рассеянное поле. Для определения указанных компонент необходимо решить систему уравнений Максвелла:

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \mathbf{H}_1 = -i\omega\epsilon_1 \mathbf{E}_1 \\ \operatorname{rot} \mathbf{E}_1 = i\omega\mu_1 \mathbf{H}_1 \end{cases} \text{ в } \Omega_1, \quad (3)$$

$$\begin{cases} \operatorname{rot} \mathbf{H}_s = -i\omega\epsilon_2 \mathbf{E}_s \\ \operatorname{rot} \mathbf{E}_s = i\omega\mu_2 \mathbf{H}_s \end{cases} \text{ в } \Omega_2, \quad (4)$$

где ω – круговая частота.

На границе Γ должны выполняться условия сопряжения:

$$\begin{aligned} [\mathbf{v} \times \mathbf{H}]_{\Gamma} &= \sigma \mathbf{E}_{\tau}, \\ [\mathbf{v} \times \mathbf{E}]_{\Gamma} &= 0, \end{aligned} \quad (5)$$

где $[f]_{\Gamma} = f_2 - f_1$ означает разность следов функции с разных сторон Γ ; $\mathbf{v}$ – вектор нормали к границе Γ , направленный в область Ω_2 ; индекс τ означает взятие касательных компонент; $\times$ – векторное произведение;

$$\sigma = \sigma_1 + \sigma_3 |\mathbf{E}_{\tau}|^2 - \quad (6)$$

нелинейная проводимость графена [14, 15], выраженная законом Керра.

Также должны выполняться условия на бесконечности:

$$(\mathbf{e}_r \times \mathbf{E}_s) + \sqrt{\frac{\mu_2}{\epsilon_2}} (\mathbf{e}_r \times (\mathbf{e}_r \times \mathbf{H}_s)) = o\left(\frac{1}{r}\right) \text{ при } r \rightarrow \infty, \quad (7)$$

где $\mathbf{e}_r$ – вектор внешней нормали к единичной сфере, $r := |x|$ и $x = (x_1, x_2, x_3)$.

В статье мы будем считать, что $\sigma_1 \neq 0$, $\sigma_3 = 0$, т.е. рассматривать только линейный случай.

2. Система интегро-дифференциальных уравнений

Выразим поле $\{\mathbf{E}_1, \mathbf{H}_1\}$ в области Ω_1 в виде комбинации электрических и магнитных токов на поверхности с помощью формул Стрэттона-Чу [4, с. 124]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_1 &= \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{i\omega\epsilon_1} \int_{\Gamma} \Phi_1(x, y) (\mathbf{v}(y) \times \mathbf{H}_1(y)) ds(y) - \\ &\quad - \operatorname{rot} \int_{\Gamma} \Phi_1(x, y) (\mathbf{v}(y) \times \mathbf{E}_1(y)) ds(y), \\ \mathbf{H}_1 &= -\operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{i\omega\mu_1} \int_{\Gamma} \Phi_1(x, y) (\mathbf{v}(y) \times \mathbf{E}_1(y)) ds(y) - \end{aligned}$$

$$-\operatorname{rot} \int_{\Gamma} \Phi_1(x, y)(\mathbf{v}(y) \times \mathbf{H}_1(y)) ds(y), \quad (8)$$

где $x \in \Omega_1$. В области Ω_2 имеем представление [4, с. 124]:

$$\begin{aligned} 0 &= -\operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{i\omega\epsilon_2} \int_{\Gamma} \Phi_2(x, y)(\mathbf{v}(y) \times \mathbf{H}_0(y)) ds(y) + \\ &\quad + \operatorname{rot} \int_{\Gamma} \Phi_2(x, y)(\mathbf{v}(y) \times \mathbf{E}_0(y)) ds(y), \\ 0 &= \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{i\omega\mu_2} \int_{\Gamma} \Phi_2(x, y)(\mathbf{v}(y) \times \mathbf{E}_0(y)) ds(y) + \\ &\quad + \operatorname{rot} \int_{\Gamma} \Phi_2(x, y)(\mathbf{v}(y) \times \mathbf{H}_0(y)) ds(y), \end{aligned} \quad (9)$$

где $x \in \Omega_2$.

Также можем записать рассеянное поле как [4, с. 124]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_s(x) &= -\operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{i\omega\epsilon_2} \int_{\Gamma} \Phi_2(x, y)(\mathbf{v}(y) \times \mathbf{H}_s(y)) ds(y) + \\ &\quad + \operatorname{rot} \int_{\Gamma} \Phi_2(x, y)(\mathbf{v}(y) \times \mathbf{E}_s(y)) ds(y), \\ \mathbf{H}_s(x) &= \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{i\omega\mu_2} \int_{\Gamma} \Phi_2(x, y)(\mathbf{v}(y) \times \mathbf{E}_s(y)) ds(y) + \\ &\quad + \operatorname{rot} \int_{\Gamma} \Phi_2(x, y)(\mathbf{v}(y) \times \mathbf{H}_s(y)) ds(y), \end{aligned} \quad (10)$$

где $x \in \Omega_2$.

Сложим (9) и (10) с учетом (1), получим:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_2(x) - \mathbf{E}_0(x) &= -\operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{i\omega\epsilon_2} \int_{\Gamma} \Phi_2(x, y)(\mathbf{v}(y) \times \mathbf{H}_2(y)) ds(y) + \\ &\quad + \operatorname{rot} \int_{\Gamma} \Phi_2(x, y)(\mathbf{v}(y) \times \mathbf{E}_2(y)) ds(y), \\ \mathbf{H}_2(x) - \mathbf{H}_0(x) &= \operatorname{rot} \operatorname{rot} \frac{1}{i\omega\mu_2} \int_{\Gamma} \Phi_2(x, y)(\mathbf{v}(y) \times \mathbf{E}_2(y)) ds(y) + \\ &\quad + \operatorname{rot} \int_{\Gamma} \Phi_2(x, y)(\mathbf{v}(y) \times \mathbf{H}_2(y)) ds(y). \end{aligned} \quad (11)$$

Определим

$$\Phi_1(x, y) = \frac{e^{ik_1|x-y|}}{4\pi|x-y|}, k_1^2 = \omega^2 \epsilon_1 \mu_1, \quad \Phi_2(x, y) = \frac{e^{ik_2|x-y|}}{4\pi|x-y|}, k_2^2 = \omega^2 \epsilon_2 \mu_2.$$

Выполним замену:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_1 &= \mathbf{v} \times \mathbf{H}_1, \mathbf{m}_1 = \mathbf{v} \times \mathbf{E}_1, \\ \mathbf{j}_2 &= \mathbf{v} \times \mathbf{H}_2, \mathbf{m}_2 = \mathbf{v} \times \mathbf{E}_2. \end{aligned} \quad (12)$$

Перепишем условия (5) с учетом замены (13), получим:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_2 - \mathbf{j}_1 &= \sigma \mathbf{E}_\tau, \\ \mathbf{m}_2 - \mathbf{m}_1 &= 0. \end{aligned} \quad (13)$$

С помощью (13) неизвестные $\mathbf{j}_1$, $\mathbf{j}_2$, $\mathbf{m}_1$, $\mathbf{m}_2$ выразим через $\mathbf{j}$ и $\mathbf{m}$ следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_1 &= \mathbf{m}_2 = \mathbf{m}, \\ \mathbf{j}_1 &= \mathbf{j}, \mathbf{j}_2 = \mathbf{j} + \sigma(\mathbf{m} \times \mathbf{v}) = \mathbf{j} + \sigma(\mathbf{m} \times \mathbf{v}). \end{aligned} \quad (14)$$

В (8)–(11) применим замены (12)–(14), используем условия сопряжения на границе, получим:

$$\begin{aligned} -\mathbf{v} \times \mathbf{E}_0(x) &= -\mathbf{v} \times \text{rot rot} \int_{\Gamma} \left(\frac{\Phi_1(x, y)}{i\omega\epsilon_1} + \frac{\Phi_2(x, y)}{i\omega\epsilon_2} \right) \mathbf{j}(y) ds(y) - \\ &-\mathbf{v} \times \text{rot rot} \int_{\Gamma} \frac{\Phi_2(x, y)}{i\omega\epsilon_2} \sigma(\mathbf{m}(y) \times \mathbf{v}(y)) ds(y) + \\ &+\mathbf{v} \times \text{rot} \int_{\Gamma} (\Phi_1(x, y) + \Phi_2(x, y)) \mathbf{m}(y) ds(y), \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} -\mathbf{v} \times \mathbf{H}_0(x) &= \mathbf{v} \times \text{rot rot} \int_{\Gamma} \left(\frac{\Phi_1(x, y)}{i\omega\mu_1} + \frac{\Phi_2(x, y)}{i\omega\mu_2} \right) \mathbf{m}(y) ds(y) + \\ &+\mathbf{v} \times \text{rot} \int_{\Gamma} (\Phi_1(x, y) + \Phi_2(x, y)) \mathbf{j}(y) ds(y) + \\ &+\mathbf{v} \times \text{rot} \int_{\Gamma} \Phi_2(x, y) \sigma \mathbf{m}(y) \times \mathbf{v}(y) ds(y) - \sigma \mathbf{m}(x) \times \mathbf{v}(x). \end{aligned} \quad (16)$$

Для численного решения требуется понизить порядок сингулярности системы (15)–(16) и перейти к системе скалярных уравнений.

Преобразуем двойной ротор по следующей формуле [16]:

$$\text{rot rot} = \text{grad div} - \Delta = \text{grad div} + k^2, \quad (17)$$

перенесем операцию дивергенции на функции токов (см. [17, с. 92–93]) и получим

$$\begin{aligned}
 & -\operatorname{grad}_{\mathbf{r}_x} \int_{\Gamma} \left(\frac{\Phi_1(x, y)}{i\omega\epsilon_1} + \frac{\Phi_2(x, y)}{i\omega\epsilon_2} \right) \operatorname{Div}_y \mathbf{j}(y) ds(y) - \\
 & - \int_{\Gamma} \left(\frac{k_1^2 \Phi_1(x, y)}{i\omega\epsilon_1} + \frac{k_2^2 \Phi_2(x, y)}{i\omega\epsilon_2} \right) \mathbf{j}(y) ds(y) - \\
 & - \operatorname{grad}_{\mathbf{r}_x} \int_{\Gamma} \frac{\Phi_2(x, y)}{i\omega\epsilon_2} \operatorname{Div}_y (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{m}(y) \times \mathbf{v}(y)) ds(y) - \\
 & - \int_{\Gamma} \frac{k_2^2 \Phi_2(x, y)}{i\omega\epsilon_2} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{m}(y) \times \mathbf{v}(y) ds(y) + \\
 & + \operatorname{rot}_{\mathbf{r}_x} \int_{\Gamma} (\Phi_1(x, y) + \Phi_2(x, y)) \mathbf{m}(y) ds(y) = -\mathbf{v} \times \mathbf{E}_0(x), \quad (18)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \operatorname{grad}_{\mathbf{r}_x} \int_{\Gamma} \left(\frac{\Phi_1(x, y)}{i\omega\mu_1} + \frac{\Phi_2(x, y)}{i\omega\mu_2} \right) \operatorname{Div}_y \mathbf{m}(y) ds(y) + \\
 & + \int_{\Gamma} \left(\frac{k_1^2 \Phi_1(x, y)}{i\omega\mu_1} + \frac{k_2^2 \Phi_2(x, y)}{i\omega\mu_2} \right) \mathbf{m}(y) ds(y) + \\
 & + \operatorname{rot}_{\mathbf{r}_x} \int_{\Gamma} (\Phi_1(x, y) + \Phi_2(x, y)) \mathbf{j}(y) ds(y) + \\
 & + \operatorname{rot}_{\mathbf{r}_x} \int_{\Gamma} \Phi_2(x, y) (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{m}(y) \times \mathbf{v}(y)) ds(y) - \boldsymbol{\sigma} \mathbf{m}(x) \times \mathbf{v}(x) = -\mathbf{v} \times \mathbf{H}_0(x). \quad (19)
 \end{aligned}$$

Так как рассматривается задача на сфере, то будем использовать формулы перехода:

$$\begin{aligned}
 F_x &= \hat{F}_\rho \sin \theta \cos \varphi + \hat{F}_\theta \cos \theta \cos \varphi - \hat{F}_\varphi \sin \theta, \\
 F_y &= \hat{F}_\rho \sin \theta \sin \varphi + \hat{F}_\theta \cos \theta \sin \varphi + \hat{F}_\varphi \cos \theta, \\
 F_z &= \hat{F}_\rho \cos \theta - \hat{F}_\theta \sin \theta.
 \end{aligned}$$

Представим дивергенцию и градиент в сферической системе координат [16], а также введем обозначение:

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial}{\partial \phi_x} \Phi_k(x, y) = G_{k, \phi_x}(x, y), \quad \frac{\partial}{\partial \theta_x} \Phi_k(x, y) = G_{k, \theta_x}(x, y); \quad (20) \\
 & -\frac{1}{r_x} \int_{\Gamma} \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \left(\frac{G_{1, \theta_x}(x, y)}{i\omega\epsilon_1} + \frac{G_{2, \theta_x}(x, y)}{i\omega\epsilon_2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (j_\theta(y) \sin \theta_y) + \frac{\partial j_\phi(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) \mathbf{I}_\theta(x) - \\
 & - \frac{1}{r_x \sin \theta_x} \int_{\Gamma} \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \left(\frac{G_{1, \phi_x}(x, y)}{i\omega\epsilon_1} + \frac{G_{2, \phi_x}(x, y)}{i\omega\epsilon_2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (j_\theta(y) \sin \theta_y) + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\partial j_\phi(y)}{\partial \phi} \Big) ds(y) \mathbf{I}_\phi(x) - \int_\Gamma \left(\frac{k_1^2 \Phi_1(x, y)}{i\omega \epsilon_1} + \frac{k_2^2 \Phi_2(x, y)}{i\omega \epsilon_2} \right) \mathbf{j}(y) ds(y) - \\
& - \frac{1}{r_x} \int_\Gamma \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \frac{G_{2, \theta_x}(x, y)}{i\omega \epsilon_2} \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (\sigma m_\phi(y) \sin \theta_y) - \frac{\partial \sigma m_\theta(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) \mathbf{I}_\theta(x) - \\
& - \frac{1}{r_x \sin \theta_x} \int_\Gamma \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \frac{G_{2, \phi_x}(x, y)}{i\omega \epsilon_2} \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (\sigma m_\phi(y) \sin \theta_y) - \frac{\partial \sigma m_\theta(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) \mathbf{I}_\phi(x) - \\
& - \int_\Gamma \frac{k_2^2 \Phi_2(x, y)}{i\omega \epsilon_2} \sigma \mathbf{m}(y) \times \mathbf{v}(y) ds(y) + \\
& + \int_\Gamma \operatorname{rot}_{\mathbf{tx}} \{ (\Phi_1(x, y) + \Phi_2(x, y)) \mathbf{m}(y) \} ds(y) = -\mathbf{v}(x) \times \mathbf{E}_0(x), \quad (21)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{r_x} \int_\Gamma \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \left(\frac{G_{1, \theta_x}(x, y)}{i\omega \mu_1} + \frac{G_{2, \theta_x}(x, y)}{i\omega \mu_2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (m_\theta(y) \sin \theta_y) + \frac{\partial m_\phi(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) \mathbf{I}_\theta(x) + \\
& + \frac{1}{r_x \sin \theta_x} \int_\Gamma \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \left(\frac{G_{1, \phi_x}(x, y)}{i\omega \mu_1} + \frac{G_{2, \phi_x}(x, y)}{i\omega \mu_2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (m_\theta(y) \sin \theta_y) + \right. \\
& \left. + \frac{\partial m_\phi(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) \mathbf{I}_\phi(x) + \int_\Gamma \left(\frac{k_1^2 \Phi_1(x, y)}{i\omega \mu_1} + \frac{k_2^2 \Phi_2(x, y)}{i\omega \mu_2} \right) \mathbf{m}(y) ds(y) + \\
& + \int_\Gamma \operatorname{rot}_{\mathbf{tx}} \{ (\Phi_1(x, y) + \Phi_2(x, y)) \mathbf{j}(y) \} dy + \\
& + \int_\Gamma \operatorname{rot}_{\mathbf{tx}} \{ \Phi_2(x, y) (\sigma \mathbf{m}(y) \times \mathbf{v}(y)) \} dy - \frac{1}{2} \sigma \mathbf{m}(x) \times \mathbf{v}(x) = -\mathbf{v}(x) \times \mathbf{H}_0(x). \quad (22)
\end{aligned}$$

Ротор, который действует на произведение вектора и скаляра, можно представить, как [16, с. 172]:

$$\operatorname{rot}_x (\Phi(x, y) \mathbf{m}(y)) = \operatorname{grad}_x (\Phi(x, y)) \times \mathbf{m}(y). \quad (23)$$

Применим (23) и снова преобразуем градиент:

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{r_x} \int_\Gamma \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \left(\frac{G_{1, \theta_x}(x, y)}{i\omega \epsilon_1} + \frac{G_{2, \theta_x}(x, y)}{i\omega \epsilon_2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (j_\theta(y) \sin \theta_y) + \frac{\partial j_\phi(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) \mathbf{I}_\theta(x) - \\
& - \frac{1}{r_x \sin \theta_x} \int_\Gamma \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \left(\frac{G_{1, \phi_x}(x, y)}{i\omega \epsilon_1} + \frac{G_{2, \phi_x}(x, y)}{i\omega \epsilon_2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (j_\theta(y) \sin \theta_y) + \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\partial j_\phi(y)}{\partial \phi} \Big) ds(y) \mathbf{I}_\phi(x) - \int_\Gamma \left(\frac{k_1^2 \Phi_1(x, y)}{i\omega \epsilon_1} + \frac{k_2^2 \Phi_2(x, y)}{i\omega \epsilon_2} \right) \mathbf{j}(y) ds(y) - \\
 & - \frac{1}{r_x} \int_\Gamma \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \frac{G_{2, \theta_x}(x, y)}{i\omega \epsilon_2} \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (\sigma m_\phi(y) \sin \theta_y) - \frac{\partial \sigma m_\theta(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) \mathbf{I}_\theta(x) - \\
 & - \frac{1}{r_x \sin \theta_x} \int_\Gamma \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \frac{G_{2, \phi_x}(x, y)}{i\omega \epsilon_2} \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (\sigma m_\phi(y) \sin \theta_y) - \frac{\partial \sigma m_\theta(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) \mathbf{I}_\phi(x) - \\
 & - \int_\Gamma \frac{k_2^2 \Phi_2(x, y)}{i\omega \epsilon_2} \sigma \mathbf{m}(y) \times \mathbf{v}(y) ds(y) + \int_\Gamma \left\{ \frac{1}{r_x} (G_{1, \theta_x}(x, y) + G_{2, \theta_x}(x, y)) \mathbf{I}_\theta(x) + \right. \\
 & \left. + \frac{1}{r_x \sin \theta_x} (G_{1, \phi_x}(x, y) + G_{2, \phi_x}(x, y)) \mathbf{I}_\phi(x) \right\} \times \mathbf{m}(y) ds(y) = -\mathbf{v}(x) \times \mathbf{E}_0(x), \quad (24) \\
 & \frac{1}{r_x} \int_\Gamma \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \left(\frac{G_{1, \theta_x}(x, y)}{i\omega \mu_1} + \frac{G_{2, \theta_x}(x, y)}{i\omega \mu_2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (m_\theta(y) \sin \theta_y) + \frac{\partial m_\phi(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) \mathbf{I}_\theta(x) + \\
 & + \frac{1}{r_x \sin \theta_x} \int_\Gamma \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \left(\frac{G_{1, \phi_x}(x, y)}{i\omega \mu_1} + \frac{G_{2, \phi_x}(x, y)}{i\omega \mu_2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (m_\theta(y) \sin \theta_y) + \right. \\
 & \left. + \frac{\partial m_\phi(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) \mathbf{I}_\phi(x) + \int_\Gamma \left(\frac{k_1^2 \Phi_1(x, y)}{i\omega \mu_1} + \frac{k_2^2 \Phi_2(x, y)}{i\omega \mu_2} \right) \mathbf{m}(y) ds(y) + \\
 & + \int_\Gamma \left\{ \frac{1}{r_x} (G_{1, \theta_x}(x, y) + G_{2, \theta_x}(x, y)) \mathbf{I}_\theta(x) + \frac{1}{r_x \sin \theta_x} (G_{1, \phi_x}(x, y) + G_{2, \phi_x}(x, y)) \mathbf{I}_\phi(x) \right\} \times \mathbf{j}(y) ds(y) + \\
 & + \int_\Gamma \left\{ \frac{1}{r_x} G_{2, \theta_x}(x, y) \mathbf{I}_\theta(x) + \frac{1}{r_x \sin \theta_x} G_{2, \phi_x}(x, y) \mathbf{I}_\phi(x) \right\} \times (m_\phi(y) \mathbf{I}_\theta(y) - m_\theta(y) \mathbf{I}_\phi(y)) \sigma ds(y) - \\
 & - \frac{\sigma}{2} (m_\phi(x) \mathbf{I}_\theta(x) - m_\theta(x) \mathbf{I}_\phi(x)) = -\mathbf{v}(x) \times \mathbf{H}_0(x), \quad (25)
 \end{aligned}$$

где единичные векторы $\mathbf{I}_\theta(x)$ и $\mathbf{I}_\phi(x)$ образуют базис на поверхности в точке x .

Для окончательного вида системы уравнений умножим (24) и (25) на $\mathbf{I}_\theta(x)$ и $\mathbf{I}_\phi(x)$. В итоге получаем систему из четырех скалярных уравнений:

$$\begin{aligned}
 & - \frac{1}{r_x} \int_\Gamma \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \left(\frac{G_{1, \theta_x}(x, y)}{i\omega \epsilon_1} + \frac{G_{2, \theta_x}(x, y)}{i\omega \epsilon_2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (j_\theta(y) \sin \theta_y) + \frac{\partial j_\phi(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) - \\
 & - \int_\Gamma \left(\frac{k_1^2 \Phi_1(x, y)}{i\omega \epsilon_1} + \frac{k_2^2 \Phi_2(x, y)}{i\omega \epsilon_2} \right) \left(\{ \cos(\theta_y) \cos(\theta_x) \cos(\phi_y - \phi_x) + \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sin(\theta_y) \sin(\theta_x) \Big\} j_\theta(y) + \cos(\theta_x) \sin(\phi_x - \phi_y) j_\phi(y) \Big\} ds(y) - \\
& - \frac{1}{r_x} \int_{\Gamma} \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \frac{G_{2,\theta_x}(x,y)}{i\omega \epsilon_2} \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (\sigma m_\phi(y) \sin \theta_y) - \frac{\partial \sigma m_\theta(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) - \\
& - \int_{\Gamma} \sigma \frac{k_2^2 \Phi_2(x,y)}{i\omega \epsilon_2} \left(\left\{ \cos(\theta_y) \cos(\theta_x) \cos(\phi_y - \phi_x) + \sin(\theta_y) \sin(\theta_x) \right\} m_\phi(y) - \right. \\
& \left. - \cos(\theta_x) \sin(\phi_x - \phi_y) m_\theta(y) \right) ds(y) + \int_{\Gamma} \frac{1}{r_x \sin \theta_x} \left(G_{1,\phi_x}(x,y) + \right. \\
& + G_{2,\phi_x}(x,y) \Big) \left(\left\{ \cos(\theta_y) \sin(\theta_x) \cos(\phi_y - \phi_x) - \sin(\theta_y) \cos(\theta_x) \right\} m_\theta(y) + \right. \\
& \left. + \sin(\theta_x) \sin(\phi_x - \phi_y) m_\phi(y) \right) ds(y) = -\mathbf{v}(x) \times \mathbf{E}_0(x) \cdot \mathbf{I}_\theta(x), \quad (26) \\
& - \frac{1}{r_x \sin \theta_x} \int_{\Gamma} \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \left(\frac{G_{1,\phi_x}(x,y)}{i\omega \epsilon_1} + \frac{G_{2,\phi_x}(x,y)}{i\omega \epsilon_2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (j_\theta(y) \sin \theta_y) + \right. \\
& \left. + \frac{\partial j_\phi(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) - \int_{\Gamma} \left(\frac{k_1^2 \Phi_1(x,y)}{i\omega \epsilon_1} + \frac{k_2^2 \Phi_2(x,y)}{i\omega \epsilon_2} \right) \left(\left\{ \cos(\theta_y) \sin(\phi_y - \phi_x) \right\} j_\theta(y) + \right. \\
& + \cos(\phi_y - \phi_x) j_\phi(y) \Big) ds(y) - \frac{1}{r_x \sin \theta_x} \int_{\Gamma} \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \frac{G_{2,\phi_x}(x,y)}{i\omega \epsilon_2} \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (\sigma m_\phi(y) \sin \theta_y) - \right. \\
& \left. - \frac{\partial \sigma m_\theta(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) - \int_{\Gamma} \sigma \frac{k_2^2 \Phi_2(x,y)}{i\omega \epsilon_2} \left(\left\{ \cos(\theta_y) \sin(\phi_y - \phi_x) \right\} m_\phi(y) + \right. \\
& + \cos(\phi_y - \phi_x) m_\theta(y) \Big) ds(y) - \int_{\Gamma} \frac{1}{r_x} (G_{1,\theta_x}(x,y) + G_{2,\theta_x}(x,y)) \left(\left\{ \cos(\theta_y) \sin(\theta_x) \cos(\phi_y - \phi_x) - \right. \right. \\
& \left. \left. - \sin(\theta_y) \cos(\theta_x) \right\} m_\theta(y) + \sin(\theta_x) \sin(\phi_x - \phi_y) m_\phi(y) \right) ds(y) = \\
& = -\mathbf{v}(x) \times \mathbf{E}_0(x) \cdot \mathbf{I}_\phi(x), \quad (27)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{r_x} \int_{\Gamma} \frac{1}{r_y \sin \theta_y} \left(\frac{G_{1,\theta_x}(x,y)}{i\omega \mu_1} + \frac{G_{2,\theta_x}(x,y)}{i\omega \mu_2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \theta_y} (m_\theta(y) \sin \theta_y) + \frac{\partial m_\phi(y)}{\partial \phi} \right) ds(y) + \\
& + \int_{\Gamma} \left(\frac{k_1^2 \Phi_1(x,y)}{i\omega \mu_1} + \frac{k_2^2 \Phi_2(x,y)}{i\omega \mu_2} \right) \left(\left\{ \cos(\theta_y) \cos(\theta_x) \cos(\phi_y - \phi_x) + \sin(\theta_y) \sin(\theta_x) \right\} m_\theta(y) + \right. \\
& \left. + \cos(\theta_x) \sin(\phi_x - \phi_y) m_\phi(y) \right) ds(y) + \int_{\Gamma} \frac{1}{r_x \sin \theta_x} \left(G_{1,\phi_x}(x,y) + \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & +G_{2,\phi_x}(x,y)\left(\left\{\cos(\theta_y)\sin(\theta_x)\cos(\phi_y-\phi_x)-\sin(\theta_y)\cos(\theta_x)\right\}j_\theta(y)+\right. \\
 & \quad \left.+\sin(\theta_x)\sin(\phi_x-\phi_y)j_\phi(y)\right)ds(y)+ \\
 & +\int_{\Gamma}\frac{1}{r_x\sin\theta_x}G_{2,\phi_x}(x,y)\left(\left\{\cos(\theta_y)\sin(\theta_x)\cos(\phi_y-\phi_x)-\sin(\theta_y)\cos(\theta_x)\right\}m_\phi(y)-\right. \\
 & \quad \left.-\sin(\theta_x)\sin(\phi_x-\phi_y)m_\theta(y)\right)\sigma ds(y)-\frac{\sigma}{2}m_\phi(x)=-\mathbf{v}(x)\times\mathbf{H}_0(x)\cdot\mathbf{I}_\theta(x), \quad (28) \\
 & \frac{1}{r_x\sin\theta_x}\int_{\Gamma}\frac{1}{r_y\sin\theta_y}\left(\frac{G_{1,\phi_x}(x,y)}{i\omega\mu_1}+\frac{G_{2,\phi_x}(x,y)}{i\omega\mu_2}\right)\left(\frac{\partial}{\partial\theta}(m_\theta(y)\sin\theta_y)+\frac{\partial m_\phi(y)}{\partial\phi}\right)ds(y)+ \\
 & +\int_{\Gamma}\left(\frac{k_1^2\Phi_1(x,y)}{i\omega\mu_1}+\frac{k_2^2\Phi_2(x,y)}{i\omega\mu_2}\right)\left(\cos(\theta_y)\sin(\phi_y-\phi_x)m_\theta(y)+\right. \\
 & \quad \left.+\cos(\phi_y-\phi_x)m_\phi(y)\right)ds(y)-\int_{\Gamma}\frac{1}{r_x}(G_{1,\theta_x}(x,y)+G_{2,\theta_x}(x,y)) \\
 & \quad \left(\left\{\cos(\theta_y)\sin(\theta_x)\cos(\phi_y-\phi_x)-\sin(\theta_y)\cos(\theta_x)\right\}j_\theta(y)+\right. \\
 & \quad \left.+\sin(\theta_x)\sin(\phi_x-\phi_y)j_\phi(y)\right)ds(y)- \\
 & -\int_{\Gamma}\frac{1}{r_x}G_{2,\theta_x}(x,y)\left(\left\{\cos(\theta_y)\sin(\theta_x)\cos(\phi_y-\phi_x)-\sin(\theta_y)\cos(\theta_x)\right\}m_\phi(y)-\right. \\
 & \quad \left.-\sin(\theta_x)\sin(\phi_x-\phi_y)m_\theta(y)\right)\sigma ds(y)+\frac{\sigma}{2}m_\theta(x)=-\mathbf{v}(x)\times\mathbf{H}_0(x)\cdot\mathbf{I}_\phi(x). \quad (29)
 \end{aligned}$$

Отметим, что система уравнений (26)–(29) остается в силе и в случае графена с учетом нелинейности.

3. Теорема о существовании и единственности решения задачи дифракции

Рассмотрим вопрос о существовании и единственности решения задачи дифракции (2)–(7) и системы интегральных уравнений (26)–(29).

Лемма 1 (о единственности) [18, теорема 1]. Если $\operatorname{Re}\sigma\geq 0$ и $\omega>0$, то задача (2)–(7) имеет единственное решение.

Введем оператор:

$$T_i \mathbf{a} = 2 \int_{\Gamma} \mathbf{v}(x) \times \operatorname{rot}_x \operatorname{rot}_x \Phi_i(x, y) \mathbf{a}(y) ds(y), \quad i = 1, 2. \quad (30)$$

Будем рассматривать все операторы в пространстве [5, с. 204]:

$$C^{0,\alpha}(\operatorname{Div}, \Gamma), \quad 0 < \alpha < 1,$$

$$C^{0,\alpha}(\text{Div}, \Gamma) := \left\{ \mathbf{a} \in C_t^{0,\alpha}(\Gamma) : \text{Div } \mathbf{a} \in C^{0,\alpha}(\Gamma) \right\},$$

$$\| \mathbf{a} \|_{C^{0,\alpha}(\text{Div}, \Gamma)} := \| \mathbf{a} \|_{\alpha, \Gamma} + \| \text{Div } \mathbf{a} \|_{\alpha, \Gamma}.$$

Лемма 2 (о фредгольмовости) [18, теорема 2]. Если выполняются условия

$$\| T_2 \| \cdot | \sigma \omega | + \mu_1^{-1} \| T_2 \| \cdot \| T_1 - T_2 \| < (\mu_1^{-1} + \mu_2^{-1}) | k_2 |^2 \quad (31)$$

и

$$\epsilon_1^{-1} \| T_2 \| \cdot \| T_1 - T_2 \| < (\epsilon_1^{-1} + \epsilon_2^{-1}) | k_2 |^2, \quad (32)$$

то оператор системы (26)–(29) фредгольмов с нулевым индексом.

Теорема 1. Если $\text{Re } \sigma \geq 0$, $\omega > 0$ и выполнены условия (31) и (32), то система уравнений (26)–(29) имеет единственное решение при всех правых частях из $C^{0,\alpha}(\text{Div}, \Gamma)$.

Доказательство. Пусть однородная система уравнений (26)–(29) (при нулевых правых частях) имеет нетривиальное решение. Тогда по формулам (8), (10), (12)–(14) имеем решение краевой задачи (2)–(7), которое также будет нетривиальным (для проверки достаточно перейти в формулах (8) и (10) к пределу на границу шара и использовать теоремы о предельных значениях потенциалов в (8) и (10); см. [3, 5]). Но в силу леммы 1 однородная краевая задача (2)–(7) имеет единственное решение, и оно только тривиальное. Противоречие доказывает, что однородная система уравнений (26)–(29) (при нулевых правых частях) имеет только тривиальное решение. Тогда в силу леммы 2 система уравнений (26)–(29) имеет единственное решение при всех правых частях из $C^{0,\alpha}(\text{Div}, \Gamma)$. Теорема доказана.

Поскольку при выполнении условий теоремы 1 система уравнений (26)–(29) имеет единственное решение, то по формулам (12)–(14), (8), (10) получаем представление решения, а также существование и единственность решения краевой задачи (2)–(7).

Исследование вопроса о разрешимости системы уравнений в нелинейном случае требует дополнительного изучения.

Заключение

Исследована векторная электромагнитная задача дифракции на диэлектрическом шаре, покрытом графеном. Задано внешнее поле и с использованием формул Стрэттона-Чу получена векторная система интегральных уравнений на поверхности тела. С использованием формул преобразования градиента и дивергенции в сферической системе координат получена система из четырех скалярных уравнений, удобная для численного решения.

Доказана теорема о существовании и единственности решения системы интегральных уравнений, а также существование и единственность решения краевой задачи при выполнении некоторых ограничений на параметры задачи.

Список литературы

1. Ладыженская О. А. Краевые задачи математической физики. М. : Наука, 1973. 408 с.
2. Санчес-Паленсия Э. Неоднородные среды и теория колебаний. М. : Мир, 1984. 472 с.
3. Nedelec J.-Cl. Acoustic and Electromagnetic Equations. Integral Representations for Harmonic Problems. Springer, 2001. 329 p.
4. Колтон Д., Кресс Р. Методы интегральных уравнений в теории рассеяния. М. : Мир, 1987. 311 с.
5. Colton D., Kress R. Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory. Springer, 2013. 418 с.
6. Смирнов Ю. Г., Кондырев О. В. О фредгольмовости и разрешимости системы интегральных уравнений в задаче сопряжения для уравнения Гельмгольца // Дифференциальные уравнения. 2023. Т. 59, № 8. С. 1089–1097. doi: 10.31857/S0374064123080083
7. Смирнов Ю. Г., Тихов С. В. Распространение электромагнитных ТЕ- и ТМ-волн в плоском волноводе, покрытом графеном, с учетом нелинейности // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. 2023. № 4. С. 70–79. doi: 10.18469/1810-3189.2023.26.4.70-79
8. Смирнов Ю. Г. О фредгольмовости системы интегральных уравнений в задаче о распространении электромагнитных волн в стержне, покрытом графеном // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2023. № 3. С. 74–86. doi: 10.21685/2072-3040-2023-3-6
9. Smirnov Yu. G., Tikhov S. V. On the Ability of TE- and TM-waves Propagation in a Dielectric Layer Covered with Nonlinear Graphene // Lobachevskii Journal of Mathematics. 2023. Vol. 44, № 11. P. 390–403. doi: 10.1134/S1995080223110380
10. Smirnov Y. G., Smolkin E. Y. On the Existence of an Infinite Spectrum of Damped Leaky TE-Polarized Waves in an Open Inhomogeneous Cylindrical Metal–Dielectric Waveguide Coated with a Graphene Layer // Differential Equations. 2023. Vol. 59, № 9. P. 1193–1198. doi: 10.1134/S0012266123090057
11. Smolkin E. Y., Smirnov Y. G. Numerical Study of the Spectrum of TE-Polarized Electromagnetic Waves of a Goubau Line Coated with Graphene // Photonics. 2023. Vol. 10. P. 1297. doi: 10.3390/photonics10121297
12. Smirnov Yu. G., Smolkin E. G. The Method of Integral Variational Relations in the Problem of Eigenwaves of a Plane Dielectric Layer Coated with Graphene // Lobachevskii Journal of Mathematics. 2023. Vol. 44, № 9. P. 4070–4078. doi: 10.1134/S1995080223090408
13. Smirnov Yu. G., Tikhov S. V. The Nonlinear Eigenvalue Problem of Electromagnetic Wave Propagation in a Dielectric Layer Covered with Graphene // Photonics. 2023. Vol. 10. P. 523. doi: 10.3390/photonics10050523
14. Mikhailov S. A. Quantum theory of the third-order nonlinear electrodynamic effects of graphene // Phys. Rev. B. 2016. Vol. 93, № 8. P. 085403. doi: 10.1103/PhysRevB.93.085403
15. Hanson G. W. Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene // Journal of Applied Physics. 2008. Vol. 103, № 6. P. 064302. doi: 10.1063/1.2891452
16. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике (для научных работников и инженеров). М. : Наука, 1977. 831 с.
17. Ильинский А. С., Смирнов Ю. Г. Дифракция электромагнитных волн на проводящих тонких экранах. М. : ИПРЖР, 1996. 176 с.
18. Смирнов Ю. Г., Кондырев О. В. Интегро-дифференциальные уравнения в задаче рассеяния электромагнитных волн на диэлектрическом теле, покрытом графеном // Дифференциальные уравнения. 2024. Т. 60, № 9. С. 1089–1097. doi: 10.31857/S0374064124090053

References

1. Ladyzhenskaya O.A. *Kraevye zadachi matematicheskoy fiziki = Boundary value problems of mathematical physics*. Moscow: Nauka, 1973:408. (In Russ.)
2. Sanches-Palensiya E. *Neodnorodnye sredy i teoriya kolebaniy = Inhomogeneous media and the theory of oscillations*. Moscow: Mir, 1984:472. (In Russ.)
3. Nedelec J.-Cl. *Acoustic and Electromagnetic Equations. Integral Representations for Harmonic Problems*. Springer, 2001:329.
4. Kolton D., Kress R. *Metody integral'nykh uravneniy v teorii rasseyaniya = Methods of integral equations in scattering theory*. Moscow: Mir, 1987:311. (In Russ.)
5. Colton D., Kress R. *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*. Springer, 2013:418.
6. Smirnov Yu.G., Kondyrev O.V. On the Fredholm property and solvability of a system of integral equations in the conjugation problem for the Helmholtz equation. *Differentsial'nye uravneniya = Differential equations*. 2023;59(8):1089–1097. (In Russ.). doi: 10.31857/S0374064123080083
7. Smirnov Yu.G., Tikhov S.V. Propagation of electromagnetic TE and TM waves in a graphene-coated planar waveguide taking into account nonlinearity. *Fizika volnovykh protsessov i radiotekhnicheskie sistemy = Physics of wave processes and radio engineering systems*. 2023;(4):70–79. (In Russ.). doi: 10.18469/1810-3189.2023.26.4.70-79
8. Smirnov Yu.G. On the Fredholm property of a system of integral equations in the problem of electromagnetic wave propagation in a graphene-coated rod. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2023;(3):74–86. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2023-3-6
9. Smirnov Yu.G., Tikhov S.V. On the Ability of TE- and TM-waves Propagation in a Dielectric Layer Covered with Nonlinear Graphene. *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2023;44(11):390–403. doi: 10.1134/S1995080223110380
10. Smirnov Y.G., Smolkin E.Y. On the Existence of an Infinite Spectrum of Damped Leaky TE-Polarized Waves in an Open Inhomogeneous Cylindrical Metal–Dielectric Waveguide Coated with a Graphene Layer. *Differential Equations*. 2023;59(9):1193–1198. doi: 10.1134/S0012266123090057
11. Smolkin E.Y., Smirnov Y.G. Numerical Study of the Spectrum of TE-Polarized Electromagnetic Waves of a Goubau Line Coated with Graphene. *Photonics*. 2023;10:1297. doi: 10.3390/photonics10121297
12. Smirnov Yu.G., Smolkin E.G. The Method of Integral Variational Relations in the Problem of Eigenwaves of a Plane Dielectric Layer Coated with Graphene. *Lobachevskii Journal of Mathematics*. 2023;44(9):4070–4078. doi: 10.1134/S1995080223090408
13. Smirnov Yu.G., Tikhov S.V. The Nonlinear Eigenvalue Problem of Electromagnetic Wave Propagation in a Dielectric Layer Covered with Graphene. *Photonics*. 2023;10:523. doi: 10.3390/photonics10050523
14. Mikhailov S.A. Quantum theory of the third-order nonlinear electrodynamic effects of graphene. *Phys. Rev. B*. 2016;93(8):085403. doi: 10.1103/PhysRevB.93.085403
15. Hanson G.W. Dyadic Green's functions and guided surface waves for a surface conductivity model of graphene. *Journal of Applied Physics*. 2008;103(6):064302. doi: 10.1063/1.2891452
16. Korn G., Korn T. *Spravochnik po matematike (dlya nauchnykh rabotnikov i inzhenerov) = Handbook of mathematics (for scientists and engineers)*. Moscow: Nauka, 1977:831. (In Russ.)
17. Il'inskiy A.S., Smirnov Yu.G. *Difraktsiya elektromagnitnykh voln na provodyashchikh tonkikh ekranakh = Diffraction of electromagnetic waves on conducting thin screens*. Moscow: IPRZhR, 1996:176. (In Russ.)

18. Smirnov Yu.G., Kondyrev O.V. Integro-differential equations in the problem of scattering of electromagnetic waves on a dielectric body covered with graphene. *Differentsial'nye uravneniya* = *Differential equations*. 2024;60(9):1089–1097. (In Russ.). doi: 10.31857/S0374064124090053

Информация об авторах / Information about the authors

Юрий Геннадьевич Смирнов

доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
математики и суперкомпьютерного
моделирования, Пензенский
государственный университет (Россия,
г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: mmm@pnzgu.ru

Yuriy G. Smirnov

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, head of the
sub-department of mathematics
and supercomputer modeling,
Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Олег Владимирович Кондырев

аспирант, Пензенский
государственный университет
(Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40)

Oleg V. Kondyrev

Postgraduate student, Penza State
University (40 Krasnaya street,
Penza, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 27.05.2025

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 02.06.2025

Принята к публикации / Accepted 27.06.2025

УДК 517.958, 535.42

doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-6

Задача дифракции ТЕ-волны на тонком слое кремния, покрытом графеном

С. В. Тихов

Пензенский государственный университет, Пенза, Россия

tik.stanislav2015@yandex.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Затронута проблема изучения оптических свойств графена с учетом присущей данному материалу оптической нелинейности и влияния окружающей среды. Цель работы – исследование задачи дифракции ТЕ-поляризованной волны на двумерном слое, покрытом монослоем графена либо регулярной решеткой из бесконечных (в одном из продольных направлений) графеновых полос. *Материалы и методы.* С помощью метода функций Грина задача дифракции сводится к нелинейному гиперсингулярному интегральному уравнению, для решения которого применяется метод коллокаций, дополненный итерационным методом для учета эффекта оптической нелинейности графена. *Результаты и выводы.* Получены результаты численного моделирования процесса рассеяния электромагнитной волны с частотой 6 ТГц на плоском диэлектрическом слое толщиной 20 мкм, заполненном кремнием и покрытом графеном. Результаты демонстрируют, что изменение химического потенциала графена влечет существенные изменения в профиле отраженной волны, что может быть использовано для управления (модуляции) оптическими сигналами.

Ключевые слова: электромагнитные волны, дифракция, графен, нелинейная проводимость, двумерный слой, интегральные уравнения

Финансирование: работа поддержана Стипендией Президента Российской Федерации для аспирантов и адъюнктов.

Для цитирования: Тихов С. В. Задача дифракции ТЕ-волны на тонком слое кремния, покрытом графеном // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2025. № 2. С. 77–91. doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-6

Scattering problem of TE-wave on a thin silicon layer covered with graphene

S.V. Tikhov

Penza State University, Penza, Russia

tik.stanislav2015@yandex.ru

Abstract. *Background.* This work focuses on study of optical properties of graphene accounting for the intrinsic optical nonlinearity of this material as well as the effects of the surrounding media. The purpose of the study is to consider a diffraction problem of an electromagnetic wave on a two-dimensional slab covered with a graphene monolayer or a regular lattice of infinite (in one of the longitudinal directions) graphene strips. *Materials and methods.* Using Green's functions approach, the diffraction problem is reduced to a nonlinear hypersingular integral equation for solving which we apply the collocation method together with an iterative one in order to account for the effect of optical nonlinearity of graphene. *Conclusions.* The results of numerical simulation of electromagnetic wave scattering at 6 THz on a planar dielectric layer 20 microns thick

filled with silicon and covered with graphene are obtained. The results show that changing the chemical potential of graphene leads to a significant change in the reflected wave profile, which can be used to control (modulate) optical signals.

Keywords: electromagnetic waves, diffraction, graphene, nonlinear conductivity, two-dimensional slab, integral equations

Financing: the work was supported by the Russian Federation Presidential Scholarship for postgraduate and adjunct students.

For citation: Tikhov S.V. Scattering problem of TE-wave on a thin silicon layer, covered with graphene. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* = *University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2025;(2):77–91. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-6

Введение

Сегодня во всем мире активно ведутся исследования двумерных материалов. Среди них наиболее известным является графен.

Графен представляет собой двумерный слой атомов углерода, образующих гексагональную решетку [1]. Благодаря такому строению данный материал обладает многими уникальными физическими свойствами, в том числе оптическими [2]. Так, например, графен поглощает свет в очень широком диапазоне, включая терагерцовые частоты [3], это принципиально отличает его от большинства полупроводниковых материалов, которые используются сегодня в оптоэлектронике и фотонике, причем величиной поглощения можно управлять с помощью легирования или приложения к графену электрического и/или магнитного полей [4]. Кроме того, при взаимодействии достаточно интенсивного электромагнитного излучения с графеном возникают такие нелинейные оптические эффекты, как двухфотонное поглощение, генерация высших гармоник, эффект Керра [5, 6]. Таким образом, интегрируя графен с традиционными для оптоэлектроники и фотоники полупроводниковыми материалами, скажем с кремнием, можно создавать эффективные модуляторы, фотодетекторы, поляризаторы [7, 8].

Как известно, изготовлению опытного образца того или иного устройства всегда предшествует этап математического моделирования характеристик. Это верно и для графен-интегрированных оптоэлектронных и фотонных устройств. Отметим, что возникающие в этой связи задачи математического моделирования не только имеют большое практическое значение, но и богаты математическим содержанием. Действительно, учет двумерной природы графена и присущей ему оптической нелинейности требует построения и изучения новых математических моделей. Так, например, рассматривается новый класс краевых задач с нестандартными граничными условиями, нелинейным образом зависящими от искомой функции [9–13]. Для исследования таких задач требуется разработка новых подходов, поскольку классические математические методы к ним, как правило, малоприменимы.

Настоящая работа посвящена изучению математической модели дифракции ТЕ-поляризованной электромагнитной волны на плоском диэлектрическом слое, на поверхности которого размещен либо монослой графена, либо регулярная решетка из бесконечных (в одном из продольных направлений) графеновых полос.

Материалы и методы

Пусть $h > 0$ есть некоторая постоянная. Определим множества

$$\Omega_1 := \{(x, z) : x > h, z \in \mathbb{R}\}, \quad \Omega_2 := \{(x, z) : 0 < x < h, z \in \mathbb{R}\},$$

$$\Gamma_0 := \{(x, z) : x = 0, z \in \mathbb{R}\}, \quad \Gamma_h := \{(x, z) : x = h, z \in \mathbb{R}\}.$$

Как показано в работе [14], исследование математической модели дифракции монохроматической ТЕ-поляризованной электромагнитной волны на плоском диэлектрическом слое Ω_2 , имеющем с одной стороны (на границе Γ_0) абсолютно проводящий экран, а с другой стороны (на границе Γ_h) покрытом монослоем графена, приводит к краевой задаче, которая заключается в нахождении пары функций $u_1 \equiv u_1(x, z) \in C^2(\Omega_1) \cap C(\bar{\Omega}_1)$, $u_2 \equiv u_2(x, z) \in C^2(\Omega_2) \cap C(\bar{\Omega}_2)$, удовлетворяющих:

– уравнениям Гельмгольца:

$$\Delta u_1(x, z) + k_1^2 u_1(x, z) = 0, \quad (x, z) \in \Omega_1, \quad (1)$$

$$\Delta u_2(x, z) + k_2^2 u_2(x, z) = 0, \quad (x, z) \in \Omega_2; \quad (2)$$

– однородному условию первого рода на границе Γ_0 :

$$u_2(x, z)|_{\Gamma_0} = 0; \quad (3)$$

– условиям сопряжения на границе Γ_h следующего вида:

$$u_1(x, z)|_{\Gamma_h} + u_{inc}(x, z)|_{\Gamma_h} = u_2(x, z)|_{\Gamma_h}, \quad (4)$$

$$\left. \frac{\partial u_1(x, z)}{\partial x} \right|_{\Gamma_h} + \left. \frac{\partial u_{inc}(x, z)}{\partial x} \right|_{\Gamma_h} = \left. \frac{\partial u_2(x, z)}{\partial x} \right|_{\Gamma_h} - i\omega\mu_0\sigma_g u_2(x, z)|_{\Gamma_h}; \quad (5)$$

– условию излучения Зоммерфельда:

$$u_1(x, z) = O\left(r^{-\frac{1}{2}}\right), \quad \frac{\partial u_1(x, z)}{\partial r} - ik_1 u_1(x, z) = o\left(r^{-\frac{1}{2}}\right), \quad r = \sqrt{x^2 + z^2}. \quad (6)$$

Здесь k_1^2 и k_2^2 есть относительные диэлектрические постоянные в областях Ω_1 и Ω_2 соответственно; μ_0 – магнитная постоянная; ω – круговая частота падающей электромагнитной волны. Искомая функция u_1 соответствует касательной компоненте электрического поля отраженной от поверхности Γ_h электромагнитной волны, а u_2 соответствует касательной составляющей электрического поля, прошедшей вглубь Ω_2 электромагнитной волны. Функция u_{inc} соответствует касательной компоненте электрического поля падающей волны; в качестве u_{inc} можно использовать фундаментальное решение уравнения Гельмгольца в области Ω_1 , имеющее вид

$$u_{\text{inc}}(x, z) = \frac{Ai}{4} H_0^{(1)} \left(k_1 \sqrt{(x - x_0)^2 + (z - z_0)^2} \right),$$

где $H_0^{(1)}$ – функция Ханкеля первого рода; A , x_0 , z_0 – вещественные параметры.

Величина σ_g в формуле (5) есть поверхностная проводимость графена, которая с учетом оптической нелинейности данного двумерного материала определяется как

$$\sigma_g = \sigma^{(1)} + \sigma^{(3)} |\theta|^2,$$

где $\theta = u_2(x, z)|_{\Gamma_h}$, а $\sigma^{(1)}$ и $\sigma^{(3)}$ – некоторые комплексные постоянные.

В данной работе будем считать $\sigma^{(1)}$ и $\sigma^{(3)}$ произвольными (ограниченными) функциями переменной z , что не только добавляет общности нашему рассмотрению, но и обладает физическим содержанием. Так, например, выбирая $\sigma^{(1)}$, $\sigma^{(3)}$ в виде кусочно-постоянных функций, можно моделировать рассеяние электромагнитных волн на решетках из бесконечных (в продольном направлении Oy) графеновых полос.

Введем обозначения

$$f(z) = u_{\text{inc}}(x, z)|_{\Gamma_h}, \quad f'(z) = \frac{\partial u_{\text{inc}}(x, z)}{\partial x} \Big|_{\Gamma_h}.$$

В работе [14] с помощью метода функций Грина краевая задача (1)–(6) сведена к граничному интегральному уравнению

$$(N_2 v)(z) + (N_1 v)(z) - \gamma \sigma_g v(z) = F(z), \quad (7)$$

где $\gamma = (ic\epsilon_0)^{-1}$, $v(z)$ – след решения $u_2(x, z)$ на границе Γ_h ; N_j – гиперсингулярные интегральные операторы, имеющие вид

$$(N_j \varphi)(z) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \varphi(\eta) \frac{\partial G_j(x, z, \xi, \eta)}{\partial \xi} \Big|_{\xi=h} d\eta \right]_{x=h},$$

$G_j \equiv G_j(x, z, \xi, \eta)$ – функция Грина задачи Дирихле для двумерного уравнения Гельмгольца в области Ω_j , и $F(z) = (N_1 f)(z) - f'(z)$. Подчеркнем, что уравнение (7) определено на всей действительной прямой $\mathbb{R}$ и является нелинейным относительно искомой функции (см. определение проводимости графена σ_g).

В работе [14] разработан новый эффективный метод для нахождения приближенного решения интегрального уравнения (7), включающий следующую последовательность действий.

Шаг 1. С помощью замены переменных

$$z = \ln \frac{1+\zeta}{1-\zeta}, \quad \eta = \ln \frac{1+p}{1-p}$$

осуществляется переход от интегрального уравнения на всей прямой $\mathbb{R}$ к интегральному уравнению, определенному на отрезке $[-1, 1]$. В результате этого гиперсингулярный интегральный оператор в уравнении принимает почти «канонический» вид

$$(1-\xi^2) \frac{d}{d\xi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\zeta-p} \tilde{v}(p) \sqrt{1-p^2} dp, \quad (8)$$

где $\tilde{v}$ – новая искомая функция.

Шаг 2. Заменяя $\tilde{v}(p)$ на сумму

$$\tilde{v}_N(\zeta) = \sum_{n=0}^N c_n U_n(\zeta), \quad (9)$$

где c_n – некоторые (неизвестные) комплексные числа; U_n – многочлены Чебышева второго рода, и используя хорошо известную формулу для действия гиперсингулярного интегрального оператора на многочлены Чебышева второго рода [15], гиперсингулярный интегральный оператор (8) вычисляем аналитически, при этом уравнение принимает следующий вид:

$$\sum_{n=0}^N c_n (\Upsilon_n(\zeta) - \gamma \sigma_g \sin((n+1) \arccos \zeta)) = F \left(\ln \frac{1+\zeta}{1-\zeta} \right), \quad (10)$$

где

$$\sigma_g = \sigma^{(1)}(\zeta) + \sigma^{(3)}(\zeta) |\tilde{v}|^2(\zeta),$$

$$\Upsilon_n(\zeta) = (n+1) \sqrt{1-\zeta^2} \sin((n+1) \arccos \zeta) + 2 \sum_{i=1}^3 K_i^{(n)}(\zeta),$$

здесь

$$K_i^{(n)}(\zeta) = \int_0^\pi \tilde{K}_i(\zeta, \cos \theta) \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin \theta} d\theta,$$

$$\tilde{K}_1(\zeta, p) = -\frac{1}{2\pi} \left(1 - \frac{(1-p\zeta)^2}{(\zeta-p)^2} + \operatorname{arctanh}^{-2} \frac{\zeta-p}{1-p\zeta} \right),$$

два других интегральных ядра определяются следующим образом:

$$\tilde{K}_i(\zeta, p) = K_i \left(\ln \frac{1+\zeta}{1-\zeta}, \ln \frac{1+p}{1-p} \right),$$

где $K_2(z, \eta) = S_1(z, \eta) + S_2(z, \eta)$,

$$S_1(z, \eta) = \frac{1}{h} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{q_n^2 \exp(-\beta_n |z - \eta|)}{\beta_n} - \frac{q_n^2 \exp(-q_n |z - \eta|)}{q_n},$$

$$S_2(z, \eta) = \frac{\pi \exp\left(-\frac{\pi}{h} |z - \eta|\right)}{h^2 \left(1 - \exp\left(-\frac{\pi}{h} |z - \eta|\right)\right)^2} - \frac{1}{\pi(z - \eta)^2},$$

$$K_3(z, \eta) = \frac{ik_1^2}{2} \left(\frac{H_1^{(1)}(k_1 |z - \eta|)}{k_1 |z - \eta|} + \frac{2i\pi^{-1}}{k_1^2 |z - \eta|^2} \right),$$

$q_n = \pi n h^{-1}$, $\beta_n = \sqrt{q_n^2 - k_2^2}$. Подчеркнем, что все интегралы $K_i^{(n)}$ в Υ_n имеют либо непрерывные ядра, либо ядра с логарифмической особенностью, поэтому легко вычисляются.

Шаг 3. Для нахождения приближенного решения уравнения (10) с учетом оптической нелинейности графена применяется следующий метод. Положим сначала $\sigma^{(3)} = 0$. В этом случае уравнение (10) является линейным и для его решения можно использовать классический метод коллокаций.

Введем сетку

$$-1 < \zeta_0 < \zeta_1 < \dots < \zeta_N < 1$$

с узлами ζ_k , являющимися корнями полинома Чебышева $U_{N+1}(\zeta)$. Найдем коэффициенты c_n в сумме (9) из системы, состоящей из $N + 1$ уравнений

$$\sum_{n=0}^N c_n \left[Y_n(\zeta_k) - \gamma \sigma^{(1)}(\zeta_k) \sin((n+1) \arccos \zeta_k) \right] = F \left(\ln \frac{1 + \xi_k}{1 - \xi_k} \right), \quad (11)$$

которую можно решить при помощи метода Гаусса или какого-либо итерационного метода.

Пусть теперь $\sigma^{(3)}$ отлична от нуля. Ясно, что в проводимости графена слагаемое $\sigma^{(3)} |\tilde{v}|^2$ является небольшой поправкой для $\sigma^{(1)}$. Отсюда следует, что, как и прежде, приближенное решение уравнения (10) можно искать в виде

$$\tilde{v}_{N,M}(\zeta) = \sum_{n=0}^N c_n^{(M)} U_n(\zeta), \quad (12)$$

но коэффициенты $c_n^{(M)}$ при этом определяются с помощью следующей итерационной схемы:

$$\sum_{n=0}^N c_n^{(M+1)} \left[Y_n(\zeta_k) - \gamma \sin((n+1) \arccos \zeta_k) \sigma_{N,M}(\zeta_k) \right] = F \left(\ln \frac{1 + \xi_k}{1 - \xi_k} \right), \quad (13)$$

где $M = 0, 1, \dots$, и

$$\sigma_{N,M}(\zeta) = \sigma^{(1)}(\xi) + \sigma^{(3)}(\xi) |\tilde{v}_{N,M}|^2(\zeta).$$

В качестве начального приближения $\tilde{v}_{N,0}$ имеет смысл использовать линейное решение $\tilde{v}_N$.

Шаг 4. Приближенные решения u_1 , u_2 задачи дифракции (1)–(6) вычисляются при помощи формул

$$u_1(x, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} v(\eta) \frac{\partial G_1(x, z, \xi, \eta)}{\partial \xi} \Big|_{\xi=h} d\eta - \int_{-\infty}^{+\infty} f(\eta) \frac{\partial G_1(x, z, \xi, \eta)}{\partial \xi} \Big|_{\xi=h} d\eta,$$

$$u_2(x, z) = - \int_{-\infty}^{+\infty} v(\eta) \frac{\partial G_2(x, z, \xi, \eta)}{\partial \xi} \Big|_{\xi=h} d\eta,$$

где в качестве $v(\eta)$ нужно использовать приближенное решение $\tilde{v}_{N,M}(\eta)$ уравнения (12). Подчеркнем, что данные интегралы не имеют особенностей вне границы Γ_h и, следовательно, легко вычисляются при помощи стандартных квадратурных формул.

Результаты и обсуждение

Линейная часть проводимости графена состоит из межзонной и внутризонной составляющих, т.е. $\sigma^{(1)} = \sigma_{\text{intra}} + \sigma_{\text{inter}}$. Полагая, что графен сильно легирован $|\mu_c| \gg k_b T$, где μ_c – химический потенциал, и энергия фотонов падающей волны удовлетворяет неравенству $\hbar\omega \langle 2|\mu_c|$, компоненты σ_{intra} , σ_{inter} можно вычислить по формулам:

$$\sigma_{\text{intra}}(\Omega) = \frac{ie^2}{\pi\hbar} \frac{1}{\Omega + i\nu_{\text{intra}}}, \quad \sigma_{\text{inter}}(\Omega) = \frac{ie^2}{4\pi\hbar} \ln \frac{2 - |\Omega| - i\nu_{\text{inter}}}{2 + |\Omega| + i\nu_{\text{inter}}},$$

где $\Omega = \hbar\omega/\mu_c$, $\nu_{\text{intra}} = \hbar/(|\mu_c|\tau_{\text{intra}})$, $\nu_{\text{inter}} = \hbar/(|\mu_c|\tau_{\text{inter}})$ [16]. Заметим, что величины ν_{intra} и ν_{inter} призваны учесть потери, обусловленные рассеянием электронов при конечных температурах. В вычислениях будут использованы $\tau_{\text{intra}} = 100$ фс, $\tau_{\text{inter}} = 1$ пс и $\mu_c = 0,5$ эВ.

Нелинейный коэффициент $\sigma^{(3)}$ в проводимости графена определяется по формуле

$$\sigma^{(3)}(\Omega) = -i \frac{3}{32} \frac{e^2}{\pi\hbar} \frac{(eV_F)^2 \hbar^2}{\mu_c^4 \Omega^3},$$

где V_F – скорость Ферми [5].

В вычислениях использованы следующие параметры: $k_1 = 1$ (воздух), $k_2 = 3,42$ (кремний Si), $h = 0,6$. Считаем, что источник света расположен в точке с координатами $x_0 = 10h$, $z_0 = 0$ и излучает электромагнитную волну с «амплитудой» $A = 10^7$ на частоте $\omega/2\pi = 6$ ТГц.

Подчеркнем, что безразмерная толщина h слоя Ω_2 должна коррелировать с его физическим размером. Действительно, h должна вычисляться по формуле $h = k_0 \tilde{h}$, где $\tilde{h}$ – реальная толщина слоя. Пусть $\tilde{h} = 20$ мкм. Для $\omega/2\pi = 6$ ТГц имеем $k_0 \approx 3 \cdot 10^4 \text{ м}^{-1}$. Отсюда находим $h \approx 0,6$.

На рис. 1 представлено приближенное решение (12) уравнения (10) с $N = 800$ и $M = 2$, а также приближенное решение (9) уравнения (10) с $N = 800$ в отсутствие графена ($\sigma^{(1)} = \sigma^{(3)} = 0$).

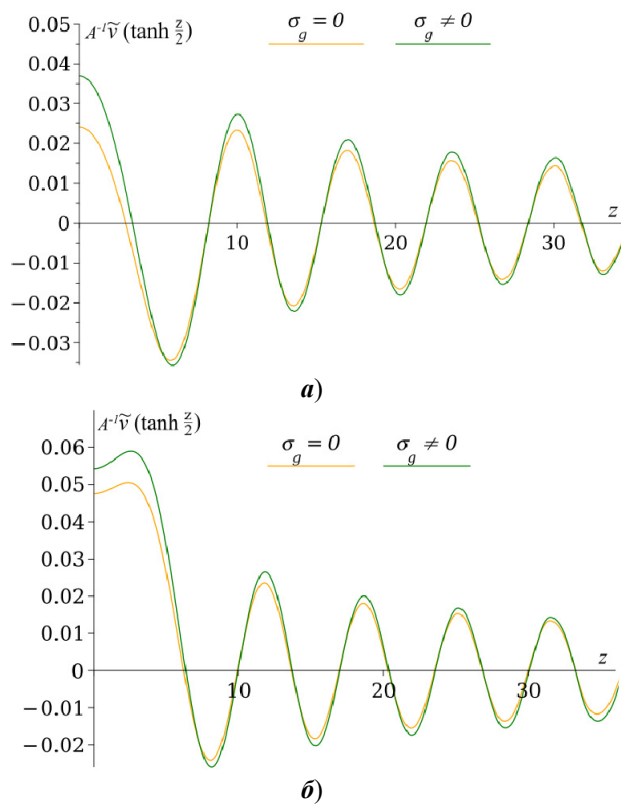


Рис. 1. Действительная (а) и мнимая (б) части приближенных решений уравнения (10) с нулевым (оранжевые кривые) и ненулевым (зеленые кривые) значениями проводимости σ_g графена

На рис. 2 представлены приближенные решения (12) уравнения (10) с $N = 800$ и $M = 2$ для разных значений химического потенциала μ_c графена.

На рис. 3–5 представлены результаты моделирования дифракции ТЕ-волны на диэлектрическом слое, на поверхности которого размещена

регулярная решетка из бесконечных (в направлении Oy) графеновых полос с периодом d . В этом случае проводимость σ_g в уравнении (10) задается кусочно-постоянной функцией вида

$$\sigma_g(\zeta) = \begin{cases} \sigma^{(1)} + \sigma^{(3)} |\tilde{v}|^2(\zeta), & \tanh \frac{d}{2} \left(2n - \frac{1}{2} \right) \leq \zeta \leq \tanh \frac{d}{2} \left(2n + \frac{1}{2} \right), \\ 0, & \tanh \frac{d}{2} \left(2n + \frac{1}{2} \right) \leq \zeta \leq \tanh \frac{d}{2} \left(2n + \frac{3}{2} \right), \end{cases} \quad (14)$$

где $n \in \mathbb{Z}$, а $\sigma^{(1)}$ и $\sigma^{(3)}$ – постоянные, которые определяются в соответствии с указанными выше соотношениям.

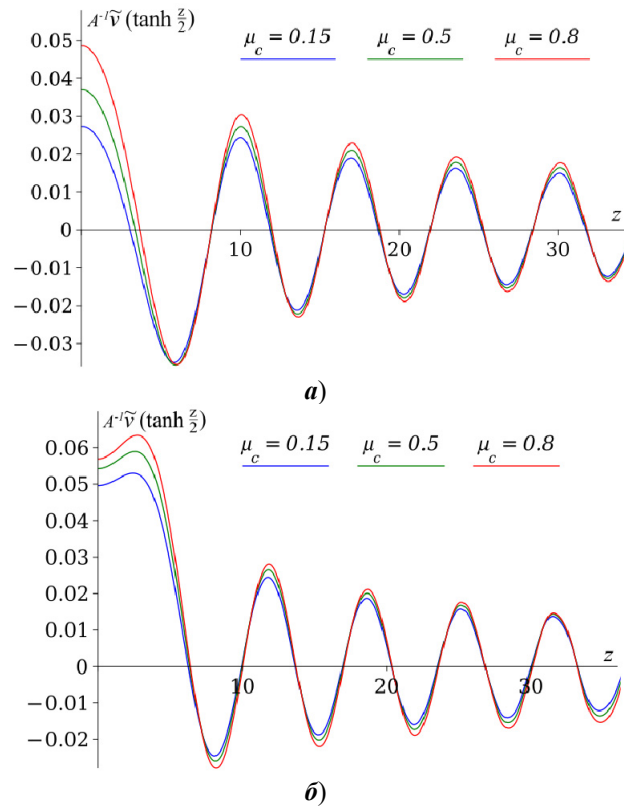


Рис. 2. Действительная (а) и мнимая (б) части приближенных решений (12) нелинейного уравнения (10) для разных значений химического потенциала μ_c графена

На рис. 6–9 представлены приближенные решения $u_1(x, z)$, $u_2(x, z)$ исходной задачи дифракции ТЕ-поляризованной волны на плоском диэлектрическом слое, покрытом графеном с одной стороны и имеющем абсолютно проводящую стенку на другой своей границе. Функции u_1 , u_2 есть касательные компоненты электрических полей прошедшей и отраженной электромагнитных волн соответственно.

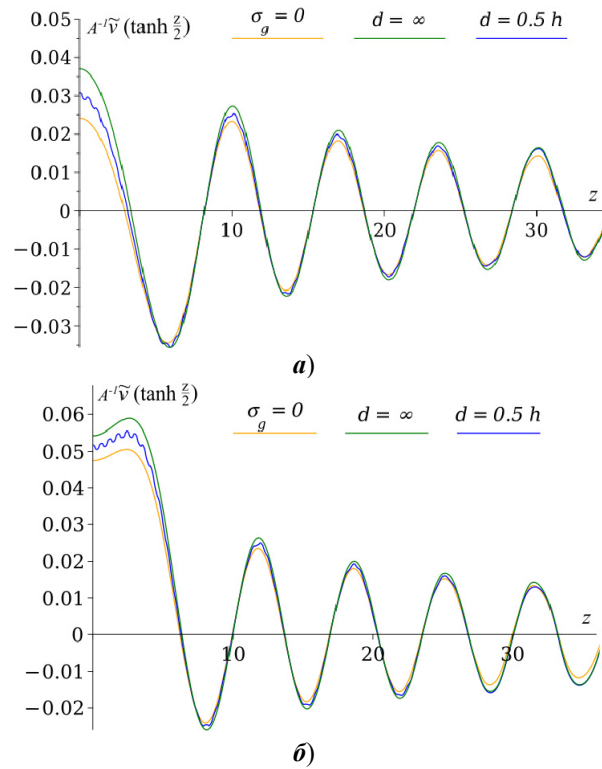


Рис. 3. Действительная (а) и мнимая (б) части приближенных решений уравнения (10) для трех случаев: оба коэффициента $\sigma^{(1)}, \sigma^{(3)}$ в σ_g равны нулю (оранжевые кривые); коэффициенты $\sigma^{(1)}, \sigma^{(3)}$ в σ_g – отличные от нуля постоянные (зеленые кривые); коэффициенты $\sigma^{(1)}, \sigma^{(3)}$ в σ_g – кусочно-постоянные функции (14) с $d = 0,5h$

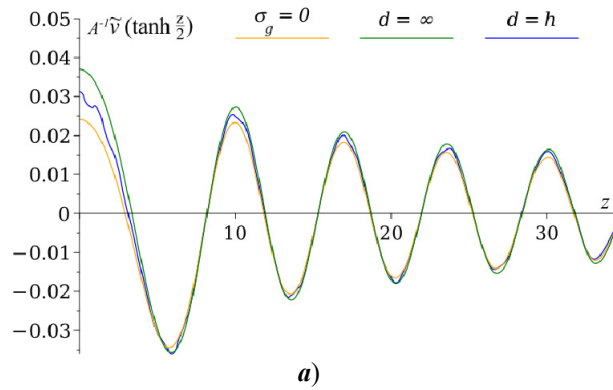


Рис. 4. Действительная (а) и мнимая (б) части приближенных решений уравнения (10) для трех случаев: оба коэффициента $\sigma^{(1)}, \sigma^{(3)}$ в σ_g равны нулю (оранжевые кривые); коэффициенты $\sigma^{(1)}, \sigma^{(3)}$ в σ_g – отличные от нуля постоянные (зеленые кривые); коэффициенты $\sigma^{(1)}, \sigma^{(3)}$ в σ_g – кусочно-постоянные функции (14) с $d = h$ (начало)

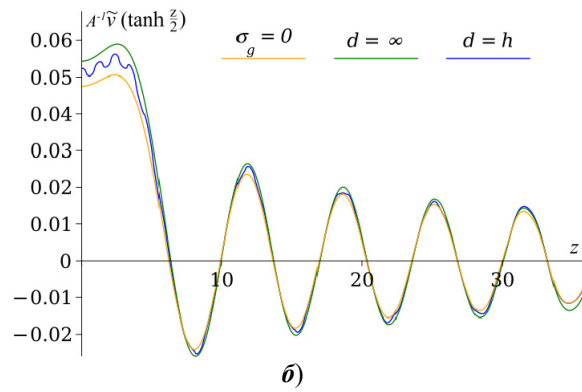


Рис. 4. Окончание

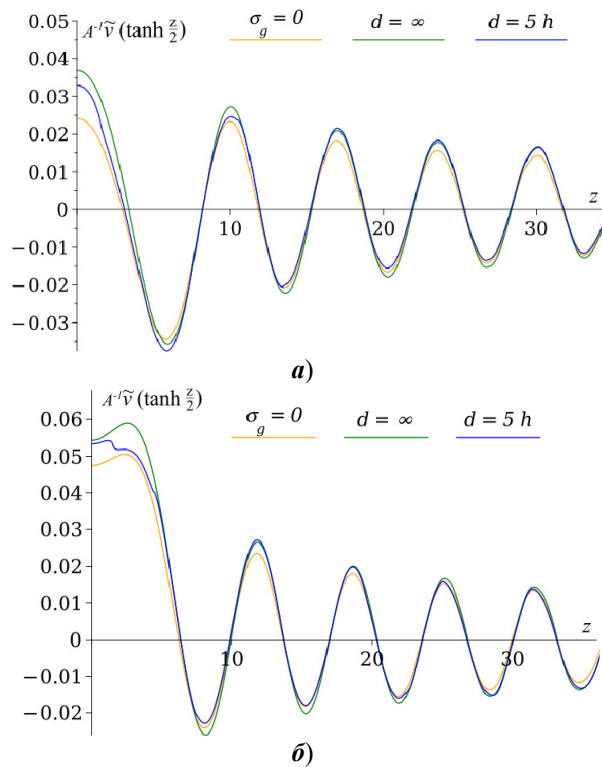


Рис. 5. Действительная (а) и мнимая (б) части приближенных решений уравнения (10) для трех случаев: оба коэффициента $\sigma^{(1)}$, $\sigma^{(3)}$ в σ_g равны нулю (оранжевые кривые); коэффициенты $\sigma^{(1)}$, $\sigma^{(3)}$ в σ_g – отличные от нуля постоянные (зеленые кривые); коэффициенты $\sigma^{(1)}$, $\sigma^{(3)}$ в σ_g – кусочно-постоянные функции (14) с $d = 5h$

Представленные на рис. 2, 8, 9 результаты наглядно демонстрируют возможность модуляции оптического сигнала при помощи управления химическим потенциалом графена (прикладывая к монослою графена напряжение или магнитное поле).

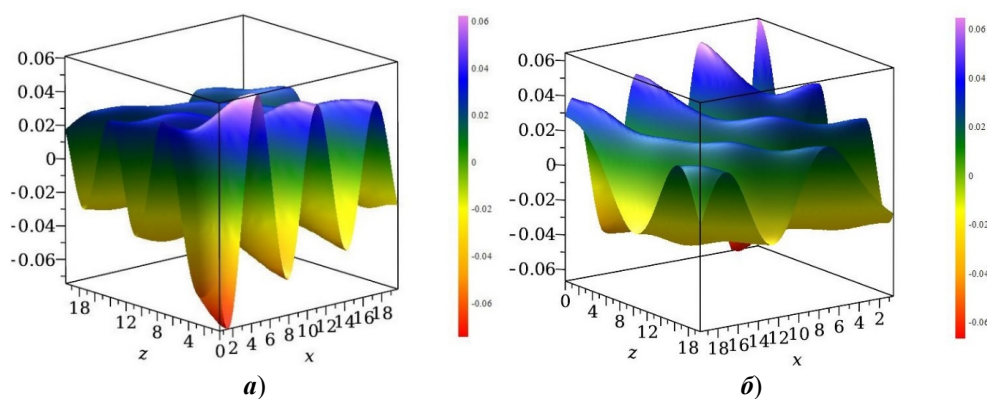


Рис. 6. Действительная (а) и мнимая (б) части приближенного решения задачи дифракции в Ω_1 (касательная компонента электрического поля отраженной волны)

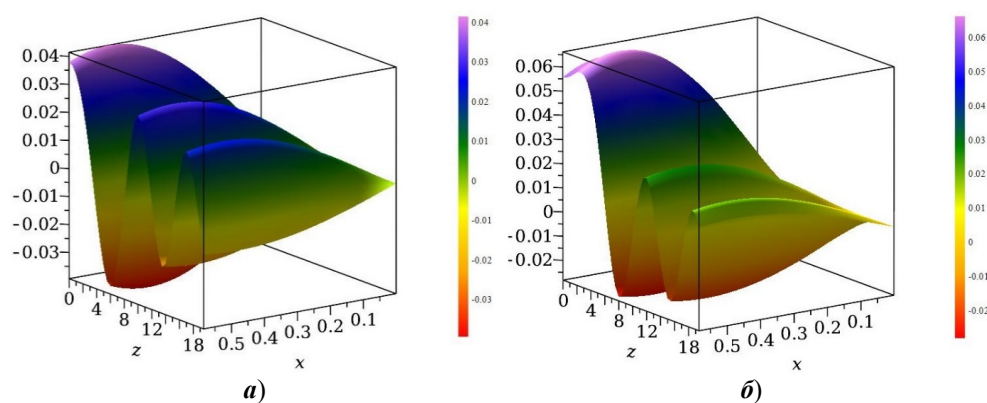


Рис. 7. Действительная (а) и мнимая (б) части приближенного решения задачи дифракции в Ω_2 (касательная компонента электрического поля прошедшей волны)

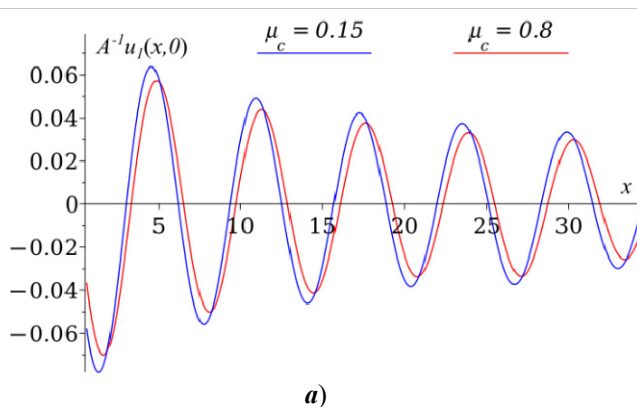


Рис. 8. Действительная (а) и мнимая (б) части приближенного решения задачи дифракции в Ω_2 (касательная компонента электрического поля прошедшей волны), вычисленного при $z = 0$, для разных значений химического потенциала μ_c графена (начало)

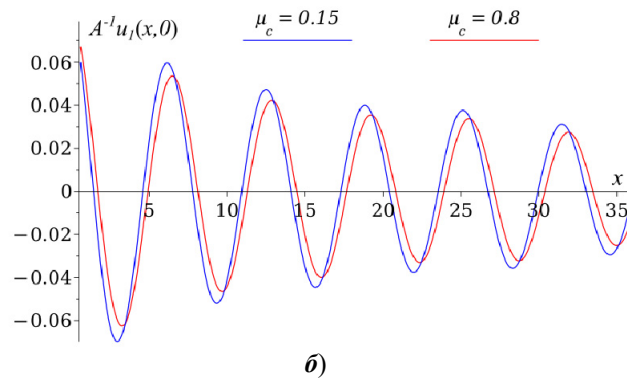


Рис. 8. Окончание

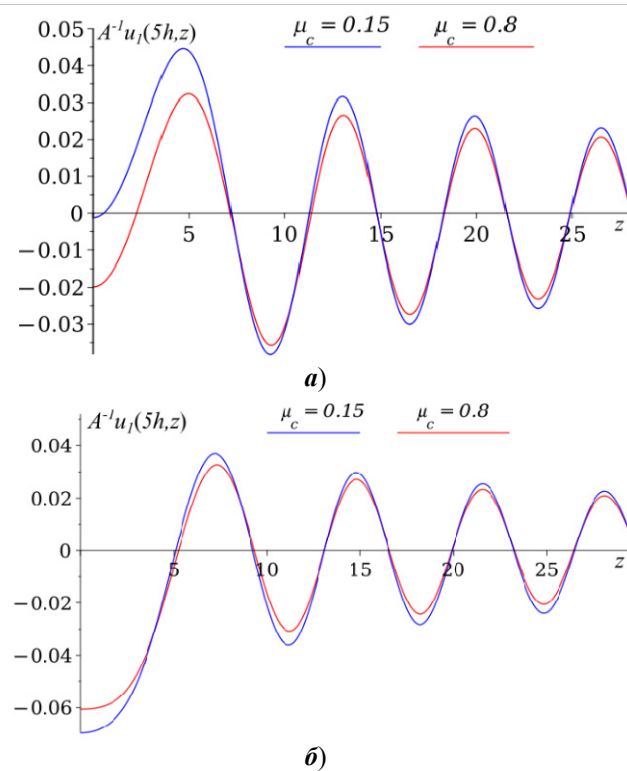


Рис. 9. Действительная (**а**) и мнимая (**б**) части приближенного решения задачи дифракции в Ω_2 (касательная компонента электрического поля прошедшей волны), вычисленного при $x = 5h$, для разных значений химического потенциала μ_c графена

Заключение

Исследована задача дифракции монохроматической ТЕ-волны на двумерном диэлектрическом слое, на поверхности которого размещен монослой графена или регулярная решетка из графеновых полос, с учетом оптической нелинейности графена. Задача дифракции при помощи метода функций Грина сводится к нелинейному гиперсингулярному интегральному уравнению.

Для нахождения приближенных решений этого уравнения использован численный метод, разработанный в [14]. Выполнено моделирование дифракции ТЕ-поляризованной электромагнитной волны на частоте 6 ТГц на слое кремния толщиной 20 мкм, покрытом монослоем графена либо решеткой из графеновых полос, причем при моделировании использовались разные значения химического потенциала графена и периода решетки. Полученные результаты демонстрируют возможность управления (модуляции) оптического сигнала при помощи изменения химического потенциала графена.

Список литературы

1. Geim A. K., Novoselov K. S. The rise of graphene // *Nature Materials*. 2007. Vol. 6. P. 183–191. doi: 10.1038/nmat1849
2. Castro Neto A. H., Guinea F., Peres N. M. R. [et al.]. The electronic properties of graphene // *Reviews of Modern Physics*. 2009. Vol. 81. P. 109–162. doi: 10.1103/RevModPhys.81.109
3. Nair R. R., Blake P., Grigorenko A. N. [et al.]. Fine structure constant defines visual transparency of graphene // *Science*. 2008. Vol. 320, № 5881. P. 1308–1308. doi: 10.1126/science.1156965
4. Wang F., Zhang Y., Tian C. [et al.]. Gate-variable optical transitions in graphene // *Science*. 2008. Vol. 320, № 5873. P. 206–209. doi: 10.1126/science.1152793
5. Mikhailov S. A., Ziegler K. Nonlinear electromagnetic response of graphene: frequency multiplication and self-consistent field effects // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2008. Vol. 20, № 38. P. 384204. doi: 10.1088/0953-8984/20/38/384204
6. Cheng J. L., Vermeulen N., Sipe J. E. Third order optical nonlinearity of graphene // *New Journal of Physics*. 2014. Vol. 16, № 5. P. 053014. doi: 10.1088/1367-2630/16/5/053014
7. Liu M., Yin X., Ulin-Avila E. [et al.]. A graphene-based broadband optical modulator // *Nature*. 2011. Vol. 474. P. 64–67. doi: 10.1038/nature10067
8. Xia F., Mueller T., Lin Y. [et al.]. Ultrafast graphene photodetector // *Nature Nanotech.* 2009. Vol. 4. P. 839–843. doi: 10.1038/nnano.2009.292
9. Gorbach A. V. Nonlinear graphene plasmonics: Amplitude equation for surface plasmons // *Physical Review A*. 2013. Vol. 87. P. 013830. doi: 10.1103/PhysRevA.87.013830
10. Gorbach A. V., Marini A., Skryabin D. V. Graphene-clad tapered fiber: effective nonlinearity and propagation losses // *Optics Letters*. 2013. Vol. 38, № 24. P. 5244–5247. doi: 10.1364/OL.38.005244
11. Savostianova N. A., Mikhailov S. A. Third harmonic generation from graphene lying on different substrates: optical-phonon resonances and interference effects // *Opt Express*. 2017. Vol. 25, № 4. P. 3268–3285. doi: 10.1364/OE.25.003268
12. Smirnov Yu., Tikhov S. The nonlinear eigenvalue problem of electromagnetic wave propagation in a dielectric layer covered with graphene // *Photonics*. 2023. Vol. 10, № 5. doi: 10.3390/photonics10050523
13. Tikhov S., Valovik D. Electromagnetic guided wave in goubau line with graphene covering: Te case // *Photonics*. 2023. Vol. 10, № 11. doi: 10.3390/photonics10111205
14. Smirnov Yu., Tikhov S. Boundary Integral Equations Approach for a Scattering Problem of a TE-Wave on a Graphene-Coated Slab // *Photonics*. 2025. Vol. 12, № 456. doi: 10.3390/photonics12050456
15. Ervin V. J., Stephan E. P. Collocation with Chebyshev polynomials for a hypersingular integral equation on an interval // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 1992. Vol 43, № 1. P. 221–229. doi: 10.1016/0377-0427(92)90267-2
16. Mikhailov S. A., Ziegler K. New Electromagnetic Mode in Graphene // *Physical Review Letters*. 2007. Vol. 99. P. 016803. doi: 10.1103/PhysRevLett.99.016803

References

1. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of graphene. *Nature Materials*. 2007;6:183–191. doi: 10.1038/nmat1849
2. Castro Neto A.H., Guinea F., Peres N.M.R. et al. The electronic properties of graphene. *Reviews of Modern Physics*. 2009;81:109–162. doi: 10.1103/RevModPhys.81.109
3. Nair R.R., Blake P., Grigorenko A.N. et al. Fine structure constant defines visual transparency of graphene. *Science*. 2008;320(5881):1308–1308. doi: 10.1126/science.1156965
4. Wang F., Zhang Y., Tian C. et al. Gate-variable optical transitions in graphene. *Science*. 2008;320(5873):206–209. doi: 10.1126/science.1152793
5. Mikhailov S.A., Ziegler K. Nonlinear electromagnetic response of graphene: frequency multiplication and self-consistent field effects. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2008;20(38):384204. doi: 10.1088/0953-8984/20/38/384204
6. Cheng J.L., Vermeulen N., Sipe J.E. Third order optical nonlinearity of graphene. *New Journal of Physics*. 2014;16(5):053014. doi: 10.1088/1367-2630/16/5/053014
7. Liu M., Yin X., Ulin-Avila E. et al. A graphene-based broadband optical modulator. *Nature*. 2011;474:64–67. doi: 10.1038/nature10067
8. Xia F., Mueller T., Lin Y. et al. Ultrafast graphene photodetector. *Nature Nanotech.* 2009;4:839–843. doi: 10.1038/nnano.2009.292
9. Gorbach A.V. Nonlinear graphene plasmonics: Amplitude equation for surface plasmons. *Physical Review A*. 2013;87:013830. doi: 10.1103/PhysRevA.87.013830
10. Gorbach A.V., Marini A., Skryabin D.V. Graphene-clad tapered fiber: effective nonlinearity and propagation losses. *Optics Letters*. 2013;38(24):5244–5247. doi: 10.1364/OL.38.005244
11. Savostianova N.A., Mikhailov S.A. Third harmonic generation from graphene lying on different substrates: optical-phonon resonances and interference effects. *Opt Express*. 2017;25(4):3268–3285. doi: 10.1364/OE.25.003268
12. Smirnov Yu., Tikhov S. The nonlinear eigenvalue problem of electromagnetic wave propagation in a dielectric layer covered with graphene. *Photonics*. 2023;10(5). doi: 10.3390/photonics10050523
13. Tikhov S., Valovik D. Electromagnetic guided wave in goubau line with graphene covering: Te case. *Photonics*. 2023;10(11). doi: 10.3390/photonics10111205
14. Smirnov Yu., Tikhov S. Boundary Integral Equations Approach for a Scattering Problem of a TE-Wave on a Graphene-Coated Slab. *Photonics*. 2025;12(456). doi: 10.3390/photonics12050456
15. Ervin V.J., Stephan E.P. Collocation with Chebyshev polynomials for a hypersingular integral equation on an interval. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 1992;43(1):221–229. doi: 10.1016/0377-0427(92)90267-2
16. Mikhailov S.A., Ziegler K. New Electromagnetic Mode in Graphene. *Physical Review Letters*. 2007;99:016803. doi: 10.1103/PhysRevLett.99.016803

Информация об авторах / Information about the authors

Станислав Вячеславович Тихов

аспирант, Пензенский
государственный университет (Россия,
г. Пенза, ул. Красная, 40)

Stanislav V. Tikhov

Postgraduate student, Penza State
University (40 Krasnaya street,
Penza, Russia)

E-mail: tik.stanislav2015@yandex.ru

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов / The author declares no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 06.06.2025

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 24.06.2025

Принята к публикации / Accepted 10.07.2025

УДК 517.968.4

doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-7

Об одном численном алгоритме восстановления порядка дробной производной в обобщенном волновом уравнении

В. А. Рязанцев

Пензенский государственный университет, Пенза, Россия

ryazantsev@mail.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Целью работы является разработка численного алгоритма приближенного восстановления порядка производной в одном уравнении в частных производных дробного порядка, известном как обобщенное волновое уравнение. Актуальность работы обусловлена как значительной практической потребностью в совершенствовании математического аппарата решения обратных и некорректных задач, так и возрастающим числом приложений уравнений в частных производных дробного порядка к математическому моделированию в различных областях физики и техники. *Материалы и методы.* Для решения поставленной задачи применяется подход, основанный на сведении ее к интегральному уравнению, нелинейному относительно искомого параметра, и решению этого уравнения при помощи непрерывного операторного метода решения нелинейных уравнений в банаховых пространствах. *Результаты.* Применение непрерывного операторного метода позволило построить численный алгоритм восстановления порядка дробной производной в обобщенном волновом уравнении в дополнительном предположении о знании значения решения уравнения в одной произвольной точке. *Выводы.* Описанный подход является достаточно эффективным при решении обратных задач для уравнений в частных производных дробного порядка. Представляет значительный интерес распространение этого подхода на более широкие классы обратных и некорректных задач для уравнений с дробными производными.

Ключевые слова: обобщенное волновое уравнение, дробные производные Римана – Лиувилля, обратные задачи, непрерывный операторный метод, логарифмическая норма, теория устойчивости

Для цитирования: Рязанцев В. А. Об одном численном алгоритме восстановления порядка дробной производной в обобщенном волновом уравнении // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2025. № 2. С. 92–103. doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-7

On a numerical method for recovery of fractional derivative order in the generalized wave equation

V.A. Ryazantsev

Penza State University, Penza, Russia

ryazantsev@mail.ru

Abstract. *Background.* The purpose of the paper is the development of a computational algorithm for approximate recovery of derivative order in the generalized wave equation. Urgency of the stated problem is dictated not only by significant need for improvement of mathematical apparatus for solution of inverse and ill-posed problems but also by the growing number of applications of equations with partial derivatives of fractional order to math-

emational modelling in different fields of physical and technical sciences. *Materials and methods.* The approach for solution of the stated problem is based on its reduction to a nonlinear in the unknown parameter integral equation and subsequent solution of this integral equation with the help of continuous operator method for solution of nonlinear equations in Banach spaces. *Results.* Application of the continuous operator equation made it possible to develop the numerical algorithm for recovery of fractional derivative order in the generalized wave equation on the extra assumption of that the solution of this equation is additionally known at one arbitrary point. *Conclusions.* The approach described in this paper appears to be quite efficient for solution of inverse problems for partial differential equations with fractional order derivatives. Extending of the used approach to a wider range of inverse and ill-posed problems for equations with fractional order derivatives is of considerable interest.

Keywords: generalized wave equation, fractional order Riemann-Liouville derivatives, inverse problems, continuous operator method, logarithmic norm, stability theory

For citation: Ryazantsev V.A. On a numerical method for recovery of fractional derivative order in the generalized wave equation. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences.* 2025;(2):92–103. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-7

Введение

Теория и практика решения обратных задач является молодым и активно развивающимся разделом современной математической науки, что связано в первую очередь с большим числом приложений таких задач в различных областях физики и техники. С другой стороны, интерес исследователей к обратным задачам во многом обусловлен тем, что к ним принадлежит значительное число весьма сложных задач из самых разных разделов математики (интегральных уравнений, обыкновенных дифференциальных уравнений, уравнений математической физики и т.д.). Значительные трудности, возникающие при исследовании и решении обратных задач, связаны как с возможной неединственностью, так и с возможной неустойчивостью их решений, что вызывает к жизни необходимость в разработке специальных методов регуляризации.

Обратная задача, состоящая в определении порядка дробной производной в различных дифференциальных уравнениях, является относительно новой задачей, которая в последние годы вызывает большой интерес исследователей: при использовании уравнений с дробными производными в математическом моделировании различных физических процессов порядок таких производных зачастую является неизвестным, в то время как его непосредственное измерение может быть сильно затруднено или даже невозможно [1]. Свойства обратной задачи по определению порядка дробной производной в волновом уравнении исследовались, например, в работах [1–6]. Стоит упомянуть также ряд работ, посвященных численному определению порядка дробных производных в дифференциальных уравнениях; например, в работе [7] задача определения порядка дробной производной сводится к задаче одномерной оптимизации, решаемой с помощью итерационного метода Левенберга – Марквардта, а в работе [8] для решения построенного конечно-разностного аналога задачи идентификации порядка дробной производной в модели аномальной диффузии применяется итерационный метод секущих.

Данная работа продолжает цикл исследований, посвященных разработке вычислительных алгоритмов решения различных обратных и некорректных задач математической физики, в число которых входят, например, коэффициентные обратные задачи [9–12], задача восстановления начальных условий [13] и задача восстановления граничных условий [14, 15]. Теоретической основой алгоритмов, построенных в указанных работах, послужил непрерывный операторный метод, ранее предложенный И. В. Бойковым [16] и позволяющий находить решение нелинейных операторных уравнений в банаховых пространствах при помощи их сведения к задачам Коши для обыкновенных дифференциальных уравнений, которые затем могут быть решены произвольным численным методом решения таких задач. Сходимость непрерывного операторного метода обосновывается в терминах теории устойчивости.

В настоящей статье описывается применение подхода на основе непрерывного операторного метода к построению численного алгоритма решения обратной задачи для одного уравнения в частных производных дробного порядка, известного как обобщенное волновое уравнение. Дробно-дифференциальное исчисление, являясь относительно новым разделом современной математики, в настоящее время активно развивается благодаря возрастающему числу приложений дробно-дифференциальных уравнений в математическом моделировании различных физических процессов и явлений (см., например, [17–19]).

Рассмотрим задачу Коши для обобщенного волнового уравнения:

$$\frac{\partial u(t, x)}{\partial t} + {}_0D_s^\alpha u(t, x) = 0, \quad x > 0, \quad t > 0, \quad (1)$$

$$u(0, x) = u_0(x), \quad (2)$$

где $0 < \alpha < 1$, ${}_0D_x^\alpha(t, x)$ – производная Римана – Лиувилля дробного порядка α по неотрицательной переменной x функции $u(t, x)$, определяемая при $0 < \alpha < 1$ формулой [17]:

$${}_0D_x^\alpha u(t, x) = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \int_0^x \frac{u(t, \xi)}{(x-\xi)^\alpha} d\xi.$$

Требуется восстановить значение неизвестного порядка α дробной производной Римана – Лиувилля ${}_0D_x^\alpha(t, x)$ в задаче (1)–(2), если дополнительно известным является значение решения $u(t, x)$ этой задачи в некоторой фиксированной точке (t^*, x^*) .

1. О непрерывном операторном методе

Приведем краткое описание непрерывного операторного метода, следуя работе [16].

Пусть имеется в общем случае нелинейное операторное уравнение

$$A(x) - f = 0, \quad x \in \mathbb{X}, \quad f \in \mathbb{X}. \quad (3)$$

Здесь $A: \mathbb{X} \rightarrow \mathbb{X}$ – оператор, отображающий банахово пространство $\mathbb{X}$ в себя.

В рамках непрерывного операторного метода уравнению (3) ставится в соответствие следующая задача Коши для обыкновенного дифференциального уравнения:

$$\frac{d\bar{x}(t)}{dt} = A(\bar{x}(t)) - f, \quad (4)$$

$$\bar{x}(0) = \chi, \quad (5)$$

где $\bar{x}(t)$ – вспомогательная функция; χ фиксируется произвольным образом.

Условия применимости непрерывного операторного метода устанавливаются следующей теоремой, находящей применение в приложениях.

Теорема 1. Пусть уравнение (3) имеет решение x^* и на любой дифференцируемой кривой $\varphi(t)$, расположенной в шаре $R(x^*, r)$, имеют место следующие условия:

1) при всяком t ($t > 0$) выполняется неравенство

$$\int_0^t \Lambda(A'(\varphi(s))) ds \leq 0;$$

2) справедливо неравенство

$$\lim_{t \in \infty} \left[\frac{1}{t} \int_0^t \Lambda(A'(\varphi(s))) ds \right] \leq -\gamma, \quad \gamma > 0.$$

Тогда решение задачи Коши (4)–(5) сходится к x^* , так что

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \bar{x}(t) = x^*.$$

Здесь под $\Lambda(A')$ следует понимать логарифмическую норму производной в смысле Фреше A' оператора A , которая определяется выражением

$$\Lambda(A') = \lim_{h \downarrow 0} \frac{\|I + hA\| - 1}{h},$$

где $h \downarrow 0$ означает, что h стремится к нулю, убывая.

2. Описание алгоритма решения задачи

Пусть функция $u(t, x)$ такова, что при всяком фиксированном $t \geq 0$ для нее выполняется условие

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^x \frac{u(t, \eta)}{(x-\eta)^\alpha} d\eta = 0.$$

Следуя [19], применим к задаче (1)–(2) преобразование Лапласа $\mathcal{L}_x[\]$ по переменной x , определяемое (вместе с обратным к нему преобразованием $\mathcal{L}_p^{-1}[\]$) формулами

$$F(p) = \mathcal{L}_x[f(x)](p) = \int_0^{+\infty} e^{-pt} f(t) dt,$$

$$f(x) = \mathcal{L}_p^{-1}[F(p)](x) = \frac{1}{2\pi i} \lim_{\omega \rightarrow \infty} \int_{\mu^* - i\omega}^{\mu^* + i\omega} e^{px} F(p) dp, \quad (6)$$

где μ^* – некоторое действительное число.

В результате, имея в виду [11]:

$$\mathcal{L}_x \left[{}_0D_x^\alpha u(t, x) \right] (p) = p^\alpha U(t, p), \quad U(t, p) = \mathcal{L}_x[u(t, x)],$$

приходим к следующей задаче:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + p^\alpha U(t, p) = 0, \quad (7)$$

$$U(0, p) = U_0(p), \quad (8)$$

где $U_0(p) = \mathcal{L}_x[u_0(x)](p)$.

Нетрудно убедиться, что задача (7)–(8), представляющая собой задачу Коши для обыкновенного дифференциального уравнения с разделяющимися переменными, имеем следующее решение:

$$u(t, p) = U_0(p) \cdot \exp(-p^\alpha t).$$

Применяя к этому решению обратное преобразование Лапласа по переменной p и используя теорему о свертке, получаем:

$$u(t, x) = t^{-1/\alpha} \int_0^x u_0(x - \eta) g_+(t^{-1/\alpha} \eta; \alpha) d\eta, \quad (9)$$

где функция $g_+(x; \alpha)$, называемая [11] односторонней устойчивой плотностью, определяется формулой

$$g_+(x; \alpha) = \mathcal{L}_p^{-1} \left[\exp(-p^\alpha) \right] (x). \quad (10)$$

Заметим, что функция $g_+(x; \alpha)$ может быть выражена аналитически только для некоторых значений параметра α , в частности:

$$g_+\left(x; \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\exp\left(-\frac{1}{4x}\right)}{x^{3/2}}, \quad g_+\left(x; \frac{1}{3}\right) = \frac{1}{3\pi} \cdot \frac{K_{1/3}\left(\frac{4}{27} \cdot \frac{1}{\sqrt{x}}\right)}{x^{3/2}},$$

где $K_\nu(\cdot)$ – модифицированная функция Бесселя второго рода порядка ν . В общем случае функция $g_+(x; \alpha)$ определяется приближенно в результате аппроксимации обратного преобразования Лапласа в формуле (10).

Интегральное уравнение (9) лежит в основе предлагаемого в настоящей работе численного метода восстановления неизвестного параметра α .

Зафиксировав в уравнении (9) и $t = t^*$ и $x = x^*$, перепишем это уравнение в следующем виде:

$$\left(t^*\right)^{-1/\alpha} \int_0^{x^*} u_0(x^* - \eta) g_+\left(\left(t^*\right)^{-1/\alpha} \eta; \alpha\right) d\eta = u\left(t^*, x^*\right). \quad (11)$$

Нетрудно видеть, что левая часть уравнения (11) представляет собой нелинейный оператор, отображающий значение α в $u\left(t^*, x^*\right)$.

Применим к нелинейному уравнению (11) непрерывный операторный метод для нахождения неизвестного порядка α . Пусть $\bar{\alpha}(\sigma)$ ($\sigma \geq 0$) – вспомогательная функция такая, что $\lim_{\sigma \rightarrow \infty} \bar{\alpha}(\sigma) = \alpha$.

Вспомогательная функция $\bar{\alpha}(\sigma)$ является решением следующей задачи Коши:

$$\frac{d\bar{\alpha}}{d\sigma} = \gamma \left\{ \left(t^*\right)^{-1/\bar{\alpha}(\sigma)} \int_0^{x^*} u_0(x^* - \eta) g_+\left(\left(t^*\right)^{-1/\bar{\alpha}(\sigma)} \eta; \bar{\alpha}(\sigma)\right) d\eta - u\left(t^*, x^*\right) \right\}, \quad (12)$$

$$\bar{\alpha}(0) = \chi, \quad (13)$$

где значение $\gamma = \pm 1$ фиксируется таким образом, чтобы обеспечить сходимость метода, а начальное значение $\chi \in (0, 1)$ может быть зафиксировано произвольным образом.

Для приближенного решения задачи (12)–(13) можно воспользоваться любым численным методом решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Воспользуемся методом Эйлера как одним из самых простых и в то же время достаточно эффективных. Пусть θ – шаг метода Эйлера, а L – число итераций метода Эйлера. Тогда приближенное решение задачи (12)–(13) реализуется следующей вычислительной схемой:

$$\bar{\alpha}_{r+1} = \bar{\alpha}_r + \theta \gamma \left\{ \left(t^*\right)^{-1/\bar{\alpha}_r} \int_0^{x^*} u_0(x^* - \eta) g_+\left(\left(t^*\right)^{-1/\bar{\alpha}_r} \eta; \bar{\alpha}_r\right) d\eta - u\left(t^*, x^*\right) \right\}, \quad (14)$$

где

$$\bar{\alpha}_r = \bar{\alpha}(\sigma_r), \quad \sigma_r = r\theta \text{ и } r = \overline{0, L-1}.$$

Приближенное решение исходной задачи восстановления α фиксируется формулой $\alpha \approx \bar{\alpha}_L$.

3. Решение модельного примера

Поставим задачу о восстановлении порядка α дробной производной в задаче (1)–(2) при $u_0(x) = 1$ в предположении о том, что дополнительно известным является значение $u(t^*, x^*) = 0,617$, где $t^* = 1$ и $x^* = 2$.

Отметим, что точное значение α в рассматриваемом примере равняется $1/2$ при соответствующем точном решении задачи (1)–(2), определяемом формулой

$$u(t, x) = \operatorname{erfc}\left(\frac{t}{2\sqrt{x}}\right),$$

где $\operatorname{erfc}(\cdot) = 1 - \operatorname{erf}(\cdot)$ – дополнительная функция ошибок.

Для приближения обратного преобразования Лапласа функции (10) могут быть применены различные способы (см., например, [20]). Один из наиболее простых способов аппроксимации интеграла (6) заключается в следующем.

Пусть A – достаточно большое вещественное положительное число. Тогда интеграл (6), где $F(p) = \exp(-p^\alpha)$, будем аппроксимировать следующим образом:

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\mu^* - i\infty}^{\mu^* + i\infty} e^{px - p^\alpha} dp \approx \frac{1}{2\pi i} \int_{\mu^* - iA}^{\mu^* + iA} e^{px - p^\alpha} dp \approx \frac{h}{2\pi i} \sum_{k=1}^N e^{p_k x - p_k^\alpha}, \quad (15)$$

где $p_k = \mu^* + i\left[-A + k\left(h - \frac{1}{2}\right)\right]$, $h = 2A/N$, N – достаточно большое целое положительное число.

При расчетах было зафиксировано значение $\mu^* = 0$. Шаг θ метода Эйлера при вычислении по итерационной формуле (14) был взят равным 10^{-1} .

Следует отметить, что – как было обнаружено в ходе численных экспериментов – уменьшение значения шага $\theta = 10^{-1}$ при численном решении поставленной задачи не приводит к увеличению точности восстановления значения α , а вызывает лишь увеличение объема вычислений. По этой причине результаты расчетов при $\theta < 10^{-1}$ далее не приводятся.

Вычисление интеграла в формуле (14) проводилось по составной формуле средних прямоугольников с шагом сетки, равным $\tau = 10^{-2}$. Вычисление значений функции $g_+(x; \bar{\alpha}_r)$ выполнялось по формуле (15), где было зафиксировано $A = 50$ и $h = 10^{-2}$.

В табл. 1–4 приведены результаты численных расчетов, выполненных в процессе приближенного решения модельного примера предлагаемым численным алгоритмом. В этих таблицах приведены значения L числа итераций алгоритма вместе с соответствующими им приближенными решениями $\bar{\alpha}_L$ и погрешностями решения задачи, определяемыми как величины модуля разности точного и приближенного значений α .

Таблица 1

Восстановление α при $(t^*, x^*) = (1, 2)$ и $\chi = 0,9$

L	Решение	Погрешность	L	Решение	Погрешность
10	0,700884	0,200884	60	0,509898	0,009898
20	0,607053	0,107053	70	0,505356	0,005356
30	0,558447	0,058447	80	0,502783	0,002783
40	0,532339	0,032339	90	0,501321	0,001321
50	0,517950	0,017950	100	0,500490	0,000490

Таблица 2

Восстановление α при $(t^*, x^*) = (1, 2)$ и $\chi = 0,1$

L	Решение	Погрешность	L	Решение	Погрешность
10	0,303615	0,196385	60	0,487500	0,012500
20	0,390252	0,109748	70	0,492597	0,007403
30	0,436667	0,063333	80	0,495515	0,004485
40	0,463246	0,036754	90	0,497182	0,002818
50	0,478626	0,021374	100	0,498133	0,001867

Таблица 3

Восстановление α при $(t^*, x^*) = (5/2, 3/2)$ и $\chi = 0,9$

L	решение	погрешность	L	решение	погрешность
200	0,578938	0,078938	1200	0,526008	0,026008
400	0,552500	0,052500	1400	0,523650	0,023650
600	0,540626	0,040626	1600	0,521844	0,021844
800	0,533724	0,033724	1800	0,520426	0,020426
1000	0,529198	0,029198	2000	0,519289	0,019289

Таблица 4

Восстановление α при $(t^*, x^*) = (5/2, 3/2)$ и $\chi = 0,1$

L	Решение	Погрешность	L	Решение	Погрешность
200	0,427807	0,072193	1200	0,483292	0,016708
400	0,456162	0,043838	1400	0,485614	0,014386
600	0,468556	0,031444	1600	0,487381	0,012619
800	0,475590	0,024410	1800	0,488763	0,011237
1000	0,480129	0,019871	2000	0,489868	0,010132

В табл. 1 начальное приближение $\bar{\alpha}(0) = \bar{\alpha}_0$ было зафиксировано значением $\chi = 0,9$.

При получении результатов, представленных в табл. 2, значение $\bar{\alpha}(0) = \bar{\alpha}_0$ было взято равным 0,1.

Наконец, приведем также результаты решения рассматриваемого модельного примера при тех же значениях параметров θ , τ , A и h в случае если дополнительно известным является значение $u(t^*, x^*) = 0,149$, где $t^* = 5/2$ и

$x^* = 3/2$. Таблица 3 соответствует случаю $\bar{\alpha}(0) = \bar{\alpha}_0 = 0,9$, в то время как табл. 4, как и ранее, отвечает случаю $\bar{\alpha}(0) = \bar{\alpha}_0 = 0,1$.

Представленные табл. 1–4 результаты восстановления порядка α в задаче (1)–(2) свидетельствуют о достаточно высокой точности определения α предложенным численным методом как при различных значениях начального приближения χ , так и при различных дополнительно известных значениях $u(t^*, x^*)$ решения задачи (1)–(2).

Заключение

Построен численный алгоритм решения обратной задачи восстановления порядка дробной производной Римана – Лиувилля в задаче Коши для обобщенного волнового уравнения при дополнительно известном значении решения задачи Коши в одной произвольной точке. В основе алгоритма лежит непрерывный операторный метод решения нелинейных уравнений в банаховых пространствах. Достоинствами предложенного алгоритма являются его простота, а также его применимость к весьма широкому классу задач. Решение модельного примера продемонстрировало высокую эффективность алгоритма. Представляет значительный теоретический и практический интерес распространение идей, лежащих в основе предложенного алгоритма, на другие обратные задачи для уравнений в частных производных дробных порядков.

Список литературы

1. Ашуров Р. Р., Файзиев Ю. Э. Обратная задача по определению порядка дробной производной в волновом уравнении // Математические заметки. 2021. Т. 110, № 6. С. 824–836. doi: 10.4213/mzm13090
2. Ashurov R., Sitnik S. Identification of the order of the fractional derivative for the fractional wave equation // Fractal and fractional. 2023. Vol. 7, № 1. P. 67. doi: 10.3390/fractalfract7010067
3. Li Z., Yamamoto M. Inverse problems of determining coefficients of the fractional partial differential equations // Handbook of fractional calculus with applications. 2019. Vol. 2. P. 443–464. doi: 10.48550/arXiv.1904.05505
4. Tatar S., Ulusoy S. A uniqueness result for an inverse problem in a space-time fractional diffusion equation // Electronic Journal of Differential Equations. 2013. Vol. 257. P. 1–9.
5. Cheng J., Nakagawa J., Yamamoto M., Yamazaki T. Uniqueness in an inverse problem for a one-dimensional fractional diffusion equation // Inverse Problems. 2009. Vol. 25, № 11. id. 115002. doi: 10.1088/0266-5611/25/11/115002
6. Zheng X., Cheng J., Wang H. Uniqueness of determining the variable fractional order in variable-order time-fractional diffusion equations // Inverse Problems. 2019. Vol. 35, № 12. id. 125002. doi: 10.1088/1361-6420/ab3aa3
7. Твердый Д. А., Паровик Р. И. Решение обратной задачи по идентификации порядка дробной производной в математической модели динамики солнечной активности на стадии подъема // Вестник КРАУНЦ. Физико-математические науки. 2023. Т. 45, № 4. С. 36–51. doi: 10.26117/2079-6641-2023-45-4-36-51
8. Васильев В. И., Кардашевский А. М. Численная идентификация порядка дробной производной по времени модели субдиффузии // Математические заметки СВФУ. 2020. Т. 27, № 4. С. 60–71. doi: 10.25587/SVFU.2020.98.14.005
9. Бойков И. В., Рязанцев В. А. Об одном приближенном методе определения коэффициента теплопроводности // Журнал Средневолжского математического общества. 2019. Т. 21, № 2. С. 149–163. doi: 10.15507/2079-6900.21.201902.149-163

10. Бойков И. В., Рязанцев В. А. О численном решении коэффициентной обратной задачи для гиперболических уравнений // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2019. № 3. С. 47–62. doi: 10.21685/2072-3040-2019-3-4
11. Бойков И. В., Рязанцев В. А. Об одном приближенном методе решения обратной коэффициентной задачи для уравнения теплопроводности // Сибирский журнал индустриальной математики. 2021. Т. 24, № 2 (86). С. 5–22. doi: 10.33048/SIBJIM.2021.24.201
12. Бойков И. В., Рязанцев В. А. Об одном итерационном методе решения прямых и обратных задач для параболических уравнений // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Математика. Механика. Информатика. 2023. Т. 23, № 3. С. 286–310. doi: 10.18500/1816-9791-2023-23-3-286-310
13. Бойков И. В., Рязанцев В. А. Численное восстановление начального условия в задачах Коши для линейных параболических и гиперболических уравнений // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2020. № 3. С. 68–84. doi: 10.21685/2072-3040-2020-3-6
14. Бойков И. В., Рязанцев В. А. Об одном методе восстановления граничного условия для линейных уравнений параболического типа // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2020. № 4. С. 42–56. doi: 10.21685/2072-3040-2020-4-4
15. Boykov I. V., Ryazantsev V. A. On the problem of recovering boundary conditions in the third value problem for parabolic equation // University Proceedings. Volga region. Physical and Mathematical Sciences. 2021. № 2 (58). P. 3–13. doi: 10.21685/2072-3040-2021-2-1
16. Бойков И. В. Об одном непрерывном методе решения нелинейных операторных уравнений // Дифференциальные уравнения. 2012. Т. 48, № 9. С. 1308–1314.
17. Самко С. Г., Килбас А. А., Маричев О. И. Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. Минск : Наука и техника, 1987. 688 с.
18. Нахушев А. М. Дробное исчисление и его применение. М. : Физматлит, 2003. 272 с.
19. Учайкин В. В. Метод дробных производных. Ульяновск : Артишок, 2008. 512 с.
20. Крылов В. И., Скобля Н. С. Методы приближенного преобразования Фурье и обращения преобразования Лапласа. М. : Наука, 1974. 224 с.

References

1. Ashurov R.R., Fayziev Yu.E. Inverse problem of determining the order of the fractional derivative in the wave equation. *Matematicheskie zametki = Mathematical notes*. 2021;110(6):824–836. (In Russ.). doi: 10.4213/mzm13090
2. Ashurov R., Sitnik S. Identification of the order of the fractional derivative for the fractional wave equation. *Fractal and fractional*. 2023;7(1):67. doi: 10.3390/fractalfract7010067
3. Li Z., Yamamoto M. Inverse problems of determining coefficients of the fractional partial differential equations. *Handbook of fractional calculus with applications*. 2019;2:443–464. doi: 10.48550/arXiv.1904.05505
4. Tatar S., Ulusoy S. A uniqueness result for an inverse problem in a space-time fractional diffusion equation. *Electronic Journal of Differential Equations*. 2013;257:1–9.
5. Cheng J., Nakagawa J., Yamamoto M., Yamazaki T. Uniqueness in an inverse problem for a one-dimensional fractional diffusion equation. *Inverse Problems*. 2009;25(11). id. 115002. doi: 10.1088/0266-5611/25/11/115002
6. Zheng X., Cheng J., Wang H. Uniqueness of determining the variable fractional order in variable-order time-fractional diffusion equations. *Inverse Problems*. 2019;35(12). id. 125002. doi: 10.1088/1361-6420/ab3aa3

7. Tverdy D.A., Parovik R.I. Solution of the inverse problem of identifying the order of fractional derivative in a mathematical model of solar activity dynamics at the rise stage. *Vestnik KRAUNTs. Fiziko-matematicheskie nauki = Bulletin KRASEC. Physical and mathematical sciences*. 2023;45(4):36–51. (In Russ.). doi: 10.26117/2079-6641-2023-45-4-36-51
8. Vasil'ev V.I., Kardashevskiy A.M. Numerical identification of the order of fractional time derivative of the subdiffusion model. *Matematicheskie zametki SVFU = Proceedings of the North-Eastern Federal University*. 2020;27(4):60–71. (In Russ.). doi: 10.25587/SVFU.2020.98.14.005
9. Boykov I.V., Ryazantsev V.A. On one approximate method for determining the thermal conductivity coefficient. *Zhurnal Srednevolzhskogo matematicheskogo obshchestva = Journal of the Middle Volga Mathematical Society*. 2019;21(2):149–163. (In Russ.). doi: 10.15507/2079-6900.21.201902.149-163
10. Boykov I.V., Ryazantsev V.A. On the numerical solution of the coefficient inverse problem for hyperbolic equations. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2019;(3):47–62. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2019-3-4
11. Boykov I.V., Ryazantsev V.A. On an approximate method for solving the inverse coefficient problem for the heat conduction equation. *Sibirskiy zhurnal industrial'noy matematiki = Siberian Journal of Industrial Mathematics*. 2021;24(2):5–22. (In Russ.). doi: 10.33048/SIBJIM.2021.24.201
12. Boykov I.V., Ryazantsev V.A. On an iterative method for solving direct and inverse problems for parabolic equations. *Izvestiya Saratovskogo uni-versiteta. Novaya seriya. Seriya: Matematika. Mekhanika. Informatika = Proceedings of Saratov University. New series. Series: Mathematics. Mechanics. Computer sciences*. 2023;23(3):286–310. (In Russ.). doi: 10.18500/1816-9791-2023-23-3-286-310
13. Boykov I.V., Ryazantsev V.A. Numerical reconstruction of the initial condition in Cauchy problems for linear parabolic and hyperbolic equations. *Izve-stiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2020;(3):68–84. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2020-3-6
14. Boykov I.V., Ryazantsev V.A. On a method of reconstructing the boundary condition for linear equations of parabolic type. *Izvestiya vysshikh uchebnykh za-vedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2020;(4):42–56. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2020-4-4
15. Boykov I.V., Ryazantsev V.A. On the problem of recovering boundary conditions in the third value problem for parabolic equation. *University Proceedings. Volga region. Physical and Mathematical Sciences*. 2021;(2):3–13. doi: 10.21685/2072-3040-2021-2-1
16. Boykov I.V. On a continuous method for solving nonlinear operator equations. *Differentsial'nye uravneniya = Differential equations*. 2012;48(9):1308–1314. (In Russ.)
17. Samko S.G., Kilbas A.A., Marichev O.I. *Integraly i proizvodnye drobnogo poryadka i nekotorye ikh prilozheniya = Integrals and derivatives of fractional order and some of their applications*. Minsk: Nauka i tekhnika, 1987:688. (In Russ.)
18. Nakhushev A.M. *Drobnoe ischislenie i ego primenenie = Fractional calculus and its applications*. Moscow: Fizmatlit, 2003:272. (In Russ.)
19. Uchaykin V.V. *Metod drobnykh proizvodnykh = Fractional derivative method*. Ul'yanovsk: Artishok, 2008:512. (In Russ.)
20. Krylov V.I., Skoblya N.S. *Metody priblizhennogo preobrazovaniya Fur'e i obrashcheniya preobrazovaniya Laplasa = Approximate Fourier transform and Laplace transform inversion methods*. Moscow: Nauka, 1974:224. (In Russ.)

Информация об авторах / Information about the authors

Владимир Андреевич Рязанцев

кандидат технических наук, доцент
кафедры высшей и прикладной
математики, Пензенский
государственный университет
(Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: ryazantsevv@mail.ru

Vladimir A. Ryazantsev

Candidate of engineering sciences, associate
professor of the sub-department
of higher and applied mathematics,
Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов / The author declares no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 22.05.2025

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 16.06.2025

Принята к публикации / Accepted 06.07.2025

УДК 538.911:548.562
doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-8

Особенности определения параметров кубической кристаллической решетки клатратных гидратов

Н. А. Шостак

Кубанский государственный технологический университет, Краснодар, Россия
nikeith@mail.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Рассматриваются особенности определения параметров кубической кристаллической решетки клатратных гидратов. Многие свойства клатратных гидратов аналогичны гексагональному льду, тем не менее взаимодействие поглощенных молекул с льдоподобной кристаллической решеткой имеет особенности. *Материалы и методы.* Основным методом, который используется в работе, является получение параметров функциональной зависимости методом наименьших квадратов. Полиномиальный подход к единому описанию предлагается ввиду сложной природы движения гостевых молекул с их многочисленными степенями свободы, различных степеней связи этого движения с решеткой хозяина. *Результаты.* Предложено использование полученного соотношения в зависимости от температуры системы и типа гидратообразователя. Средние расхождения согласно предложенному методу для гидратообразователей в температурных диапазонах от 10 до 280 К составляют 0,04 % и не превышают 0,09 %. *Выводы.* Развитый подход позволяет получать более точные результаты в широком диапазоне условий.

Ключевые слова: гидратообразователь, гидратообразование, гидратная структура, коэффициент теплового расширения, кристаллическая решетка, параметр кристаллической решетки

Для цитирования: Шостак Н. А. Особенности определения параметров кубической кристаллической решетки клатратных гидратов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2025. № 2. С. 104–115. doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-8

Features of determining the parameters of the cubic crystal lattice of clathrate hydrates

N.A. Shostak

Kuban State Technological University, Krasnodar, Russia
nikeith@mail.ru

Abstract. *Background.* The features of determining the parameters of the cubic crystal lattice of clathrate hydrates are considered. Many properties of clathrate hydrates are similar to hexagonal ice, however, the interaction of absorbed molecules with the ice-like crystal lattice has its own characteristics. *Materials and methods.* The main method used in the work is to obtain the parameters of the functional dependence using the least squares method. A poly-

© Шостак Н. А., 2025. Контент доступен по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 License / This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 License.

nomial approach to a unified description is proposed in view of the complex nature of the motion of guest molecules with their numerous degrees of freedom and various degrees of coupling of this motion with the host lattice. *Results.* It is proposed to use the obtained ratio depending on the system temperature and the type of hydrate former. Average discrepancies according to the proposed method for hydrate formers in temperature ranges from 10 to 280 K are 0.04% and do not exceed 0.09%. *Conclusions.* The developed approach allows to obtain more accurate results in a wide range of conditions.

Keywords: hydrate former, hydrate formation, hydrate structure, coefficient of thermal expansion, crystal lattice, crystal lattice parameter

For citation: Shostak N.A. Features of determining the parameters of the cubic crystal lattice of clathrate hydrates. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* = *University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2025;(2):104–115. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-8

Введение

Клатратными гидратами (далее просто – гидратами) называют кристаллические соединения, образующиеся при определенных термобарических условиях из льдоподобных структур из молекул воды и поглощенных ими молекул гидратообразователей.

Актуальность изучения клатратных гидратов связана с огромными запасами содержащихся в них углеводородов, ресурсы которых, по различным оценкам, на два порядка превышают известные запасы природного газа. Одним из важнейших молекулярных параметров клатратных гидратов является параметр их кристаллической решетки.

Хотя многие свойства гидратов аналогичны гексагональному льду (лед Ih), взаимодействие поглощенных молекул с льдоподобной кристаллической решеткой имеет особенности. Было показано [1], что теплопроводность гидратов в 5 раз ниже, чем у льда Ih, что объясняется фононным рассеянием, вызванным поглощенными молекулами.

Наряду с большими различиями в теплопроводности гидратов, авторы [2] сообщили, что гидраты имеют тепловое расширение, намного большее, чем у льда Ih, особенно при температурах ниже 200 K, из-за негармонических колебаний поглощенных молекул в структуре гидрата. Данные о коэффициенте расширения обычно основаны на дифракционном измерении параметров решетки [3]. Наряду с различиями в тепловом расширении между льдом Ih и гидратом, было показано, что тепловое расширение гидратов является функцией конкретной структуры гидрата.

Кристаллографическими исследованиями [4] выявлено, что полости молекулярного размера в клатратных структурах образуются из ассоциации 20, 24 и 28 молекул воды. Различают несколько типов кристаллической решетки гидратов (рис. 1). Полостями молекулярного размера в клатратных структурах могут являться 12-, 14-, 15-, 16- и 20-гранники (вершинами являются атомы кислорода, а ребра – водородные связи). На рис. 2 они обозначены индексами D, D', T, P, H, E соответственно.

12-гранные полости D и D' (рис. 2) принято называть малыми, а остальные (T, T', P, H, E) – большими.

КС-I – объемноцентрированная кубическая решетка с параметром $a = 1,20$ nm (при 273,1 K) содержит 46 молекул воды, 2 малых полости

(D-типа – пентагональные додекаэдры со средним диаметром $\approx 0,52$ nm) и 6 больших полостей (тетраэдры со средним диаметром $\approx 0,59$ nm).

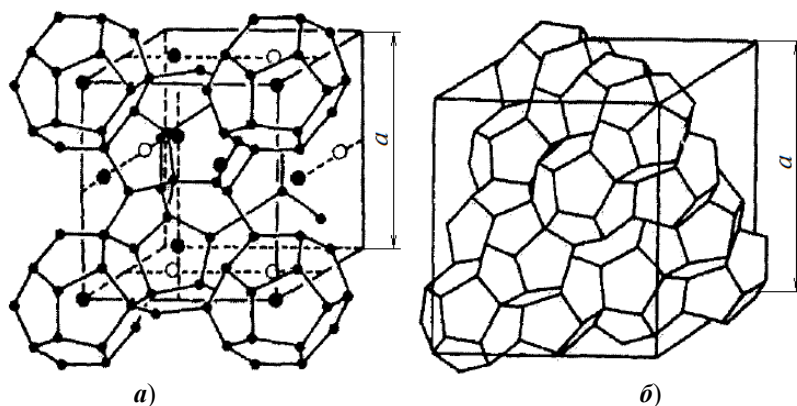


Рис. 1. Структуры элементарных ячеек кристаллических решеток гидратов:
 a – кубическая структура I (КС-I); b – кубическая структура II (КС-II)

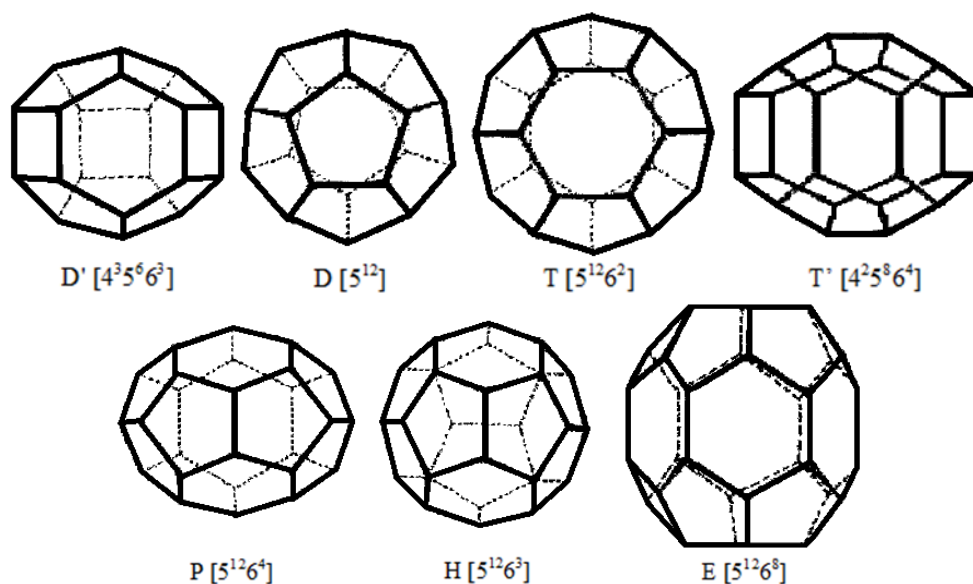


Рис. 2. Многогранники (полости) водных гидратных каркасов
 (m^γ – γ граней с числом ребер m)

КС-II – гранецентрированная кубическая решетка с параметром $a = 1,74$ nm (при 273,1 K), кубической сингонии, содержит 136 молекул воды, 16 малых (D-типа – деформированные пентагональные додекаэдры диаметром $\approx 0,48$ nm) и 8 больших полостей (гексадекаэдры диаметром $\approx 0,69$ nm).

Обнаружено [5], что типы решеток КС-I и КС-II сопоставимы, но структура КС-I имеет больший коэффициент теплового расширения по сравнению с КС-II. Увеличение объема при изменении температуры от 20 до 273,15 K для гидрата оксирана (КС-I) составило 4,4 %, в то время как гидрат тетрагидрофурана (КС-I) увеличил свой объем на 3,4 %. Авторы работы [6] связывают это ещё и с увеличением водородных связей в решетке.

1. Связь теплового расширения с параметром решетки

Тепловое расширение газовых гидратов изучается с 1950 гг., но исследования в основной своей массе распространяются на диапазон температур выше таяния льда при давлении окружающей среды. Для сравнения, в табл. 1 представлены значения величин параметров кристаллических решеток различных гидратов при 273 К.

Таблица 1

Константы кристаллических решеток гидратов

Гидратообразователь	<i>a</i> , nm	Источник	Гидратообразователь	<i>a</i> , nm	Источник
CH ₄	1,202	[7]	CHF ₃	1,205	[9]
C ₂ H ₆	1,203	[7]	CHCl ₃	1,729	[8]
C ₃ H ₈	1,740	[8]	CH ₂ Cl ₂	1,728	[8]
C ₄ H ₁₀	1,744	[7]	CH ₃ I	1,714	[9]
H ₂ S	1,202	[8]	CH ₃ Cl	1,200	[8]
CO ₂	1,207	[9]	CFCl ₃	1,729	[9]
Cl ₂	1,188	[10]	CF ₂ Cl ₂	1,737	[9]
Ne	1,202	[7]	CCl ₃ Br	1,757	[8]
Ar	1,202	[7]	CCl ₄	1,746	[8]
Kr	1,202	[7]	C ₂ H ₄ O	1,200	[11]
Xe	1,197	[8]	C ₂ H ₄ O (дейтрат)	1,190	[12]
Br ₂	1,204	[8]	SF ₆	1,721	[9]
SO ₂	1,197	[9]	C ₆ H ₆	1,748	[8]
N ₂ O	1,203	[8]	CCl ₃ -NO ₂	1,760	[9]
H ₂ Se	1,206	[8]	<i>n</i> -C ₃ H ₇ Br	1,742	[9]
CS ₂	1,730	[8]	C ₄ H ₄ O	1,730	[11]
C ₂ H ₅ Cl	1,730	[8]	C ₄ H ₈ O	1,724	[13]
C ₂ H ₅ Br	1,726	[8]	CHClF ₂	1,197	[14]
CH ₂ =CHF	1,211	[9]	C ₂ H ₅ Br+H ₂ S	1,729	[8]
CH ₂ Cl-CH ₂ Cl	1,751	[9]	CCl ₃ Br+H ₂ S	1,759	[8]
CH ₃ ·CHF	1,121	[9]	CCl ₃ NO ₂ +H ₂ S	1,756	[8]
CH ₃ ·CF ₂ Cl	1,729	[9]	CCl ₄ +H ₂ S	1,746	[8]
CH ₃ SH	1,212	[8]	CS ₂ +H ₂ S	1,226	[9]
(CH ₃) ₂ O	1,747	[9]	COS+H ₂ S	1,725	[9]
(CH ₃) ₂ S	1,739	[9]	CHF=CF ₂ +H ₂ S	1,740	[9]
(CH ₃) ₂ CH	1,757	[8]	CH ₃ ·CF ₂ Cl+H ₂ S	1,735	[9]

Имеют место существенные отклонения между различными наборами данных, опубликованными в литературе, и причины не всегда ясны. Авторы [3] причиной такого поведения считают систематические ошибки в процедурах сбора данных.

Постоянные решетки, указанные в литературе, могут зависеть от неопределенностей измеренных постоянных решетки, но также и от погрешности измерения температуры. Что касается достижимой точности, измерения температуры в криостатах определены более надежно, чем сбор данных с помощью открытых систем с охлаждением потоком азота. С другой стороны, криостаты с потоком жидкого гелия (например, используемые в экспериментах по нейтронной дифракции) могут регулярно достигать точности в доли градуса.

Большой размер поглощенной молекулы уменьшает негармоничность колебаний, снижая коэффициент теплового расширения [5]. Однако авторы [15] предполагают, что вращательные движения в асимметричных гостях будут действовать противоположным образом, увеличивая вибрационную негармоничность. Поэтому даже при увеличении размера гостя, такие как оксидан, должны увеличивать тепловое расширение гидрата по сравнению с ксеноном из-за их вращательных движений. Наряду с изменениями объема из-за температуры, были показаны другие искажения решетки гидрата для систем под давлением и с различными смесями гостей в пределах одной и той же структуры.

В работе [16] экспериментально установлена зависимость параметра элементарной ячейки гидрата окиси этилена от температуры для нескольких составов и указали на его зависимость от степени заполнения полостей.

Авторы статьи [17] сообщили о зависимости постоянной решетки от молекулярного объема (гидратообразователи – изопентан, неогексан, пинаколон, пинаколиловый спирт, адамантин, метилциклогексан, 2-метилтетрагидрофуран, 2-метилциклогексанон, 3-метилтетрагидропиран и 4-метилциклогексанон).

К. Imasato и соавторы [18] показали, что постоянные решетки увеличиваются с уменьшением молекулярных радиусов и молекулярного объема.

Таким образом, можно подытожить, что единого мнения и четкого понимания по этому вопросу нет. Для улучшения термодинамического описания фазовых равновесий гидратов в широком диапазоне температур и давлений необходимы систематические измерения параметров решетки газовых гидратов. Поскольку гидраты могут быть смесью многих компонентов при любом составе, измерить параметр решетки для каждой системы гидратов при каждом составе представляется излишним.

Целью этой работы была аппроксимация имеющихся данных для создания формализованного описания параметра решетки гидратов как функции температуры (т.е. теплового расширения) для расчетов процессов и параметров гидратов (особенно, молекулярных).

Вообще, коэффициент теплового расширения α связан с параметром кристаллической решетки a соотношением

$$\alpha = \frac{1}{a} \left(\frac{\partial a}{\partial T} \right)_P, \quad (1)$$

где P и T – давление и температура гидратообразования.

Значение коэффициента α при разных температурах определено авторами [19] для гидратов кубических структур КС-I, КС-II и льда. Было показано, что значения коэффициента α гидрата значительно больше, чем у льда при соответствующих температурах между 100 К и 200 К, помимо того что они отличаются и для самого гидрата у разных исследователей.

Это показывает, что тепловое расширение гидратов определяется межмолекулярными взаимодействиями между поглощенными молекулами и структурой из льдоподобных ассоциатов молекул воды. Кроме того, различия между коэффициентами α у льда и гидрата уменьшаются с повышением температуры, что согласуется с менее ограниченным движением гостевых молекул при температуре, близкой к температуре диссоциации, и уменьшением межмолекулярных взаимодействий в структуре.

Более существенные различия, наблюдаемые при более низких температурах, могут быть результатом несовершенств структуры льда, образующихся в процессе диссоциации гидрата. Несмотря на структурные отличия между различными типами клатратных гидратов, все гидраты показывают большую расширяемость, чем лед Ih. Это свойство может быть общей чертой, присущей всем клатратным гидратам.

Другой особенностью является одновременное образование льда Ih и Ic при диссоциации гидрата. При температурах ниже 230–240 К лед Ic является основным продуктом диссоциации гидрата, который при более высокой температуре переходит в лед Ih. Этот вывод объясняет значительные отклонения параметров элементарной ячейки льда Ih от ожидаемых значений в диапазоне температур 200–240 К, вызванные резким ростом погрешности. Ошибка может возникнуть из-за одновременного присутствия в образце как ледяных фаз Ih, так и ледяных фаз Ic.

В области проявления эффекта самосохранения [20] элементарные ячейки гидратов расширяются несколько меньше, чем можно было бы ожидать из экстраполяции другой части кривой [21].

Таким образом, тепловое расширение гидрата в значительной степени определяется колебаниями молекул воды при высокой температуре и не сильно отличается от льда [2]. Поскольку движущей силой скорости диссоциации является медленная диффузия поглощенной молекулы через льдоподобные ассоциаты, разложение гидратов будет происходить при разных температурах в неравновесных условиях.

2. Существующие зависимости определения параметра кристаллической решетки

Имеется сравнительно небольшое количество моделей и уравнений для описания изменения параметра кристаллической решетки индивидуальных гидратов и конкретных составов гидратов в довольно ограниченных температурных диапазонах.

Так, авторами [22] получена зависимость параметра элементарной ячейки для гидрата хлора от температуры в следующем виде:

$$a = a_0 (1 + \alpha \cdot T). \quad (2)$$

Коэффициент линейного расширения в этом случае составляет: $\alpha = 8,25 \cdot 10^{-4}$ 1/К при том, что для льда $\alpha = 9,2 \cdot 10^{-5}$ 1/К, т.е. у гидратов на порядок больше, чем у льда.

Для гидрата метана авторы [23] получили зависимость вида

$$a = 11,80 + 5,39 \times 10^{-5} T + 1,78 \times 10^{-6} T^2. \quad (3)$$

Авторы работы [24] для природного гидрата месторождения ZaiAngo получили в диапазоне температур от 80 до 200 К зависимость вида

$$a = 11,83625 + 3,055 \cdot 10^{-4} \cdot T + 7,085 \cdot 10^{-7} \cdot T^2. \quad (4)$$

В работе [19] для кубических структур КС-I и КС-II предложена система уравнений

$$\frac{a_I - a_{I,0}}{a_{I,0}} = \exp(1,128 \times 10^{-4} [T - T_0]) +$$

$$+1,8003 \times 10^{-7} [T - T_0]^2 - 1,5898 \times 10^{-11} [T - T_0]^3) - 1, \quad (5)$$

$$\frac{a_{II} - a_{II,0}}{a_{II,0}} = \exp(6,7659 \times 10^{-5} [T - T_0] +$$

$$+6,1706 \times 10^{-8} [T - T_0]^2 - 6,2649 \times 10^{-11} [T - T_0]^3) - 1. \quad (6)$$

3. Предлагаемый метод определения параметра кристаллической решетки

В настоящей работе предлагается использование полученного автором соотношения в зависимости от суммы вкладов, пропорциональных температуре системы T^n с показателем степени $n = 0, 1, 2$, и типа гидратообразователя (включая многокомпонентные):

$$a = \sum_{i=1}^k (X_i \cdot A_i \cdot T^2 + X_i \cdot B_i \cdot T + C_i), \quad (7)$$

где X_i – массовая доля гидратообразователя в структуре гидрата; k – число гидратообразующих компонентов; A, B, C – коэффициенты для компонентов, определяемые опытным путем (табл. 2).

Таблица 2

Значения коэффициентов для некоторых компонентов в уравнении (7)

Гидратообразователь	A	B	C
метан (КС-I)	10^{-6}	$2 \cdot 10^{-4}$	11,818
метан (КС-II)	10^{-6}	$13 \cdot 10^{-4}$	16,762
этан (КС-I)	$5 \cdot 10^{-7}$	$5 \cdot 10^{-4}$	11,854
диоксид углерода (КС-I)	$2 \cdot 10^{-6}$	$2 \cdot 10^{-4}$	11,812
ксенон (КС-I)	$2 \cdot 10^{-6}$	10^{-4}	11,834
ксенон (КС-II)	$7 \cdot 10^{-7}$	$15 \cdot 10^{-4}$	16,790
пропан (КС-II)	$2 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-5}$	17,085
изо-бутан (КС-II)	$2 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-4}$	17,143
азот (КС-II)	$2 \cdot 10^{-6}$	$8 \cdot 10^{-5}$	17,074
сероводород (КС-II)	$7 \cdot 10^{-7}$	$14 \cdot 10^{-4}$	16,751

Уравнение алгебраического типа (7) получено на основе статистической обработки экспериментальных данных и выявления зависимостей изменения параметра a от параметров гидратообразующей среды. Полиномиальный подход к единому описанию предлагается ввиду сложной природы движения гостевых молекул с их многочисленными степенями свободы и различных степеней связи этого движения с решеткой хозяина.

4. Результаты и обсуждение

Значения параметра a , рассчитанные по формуле (7), сопоставленные с известными экспериментальными данными [5, 6, 21, 23, 25–33], для гидратов некоторых гидратообразователей кубических структур КС-I и КС-II представлены в виде графиков на рис. 3 и 4.

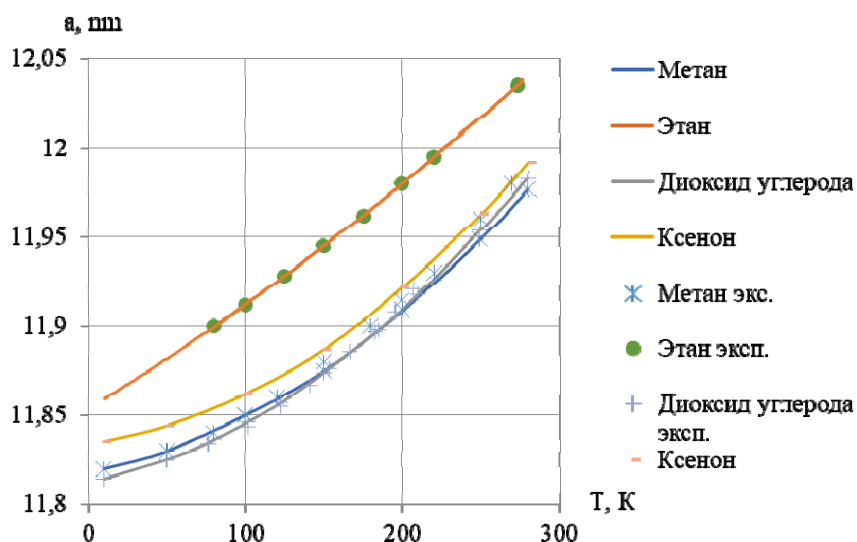


Рис. 3. Значения параметра кристаллических решеток гидратов структуры КС-I

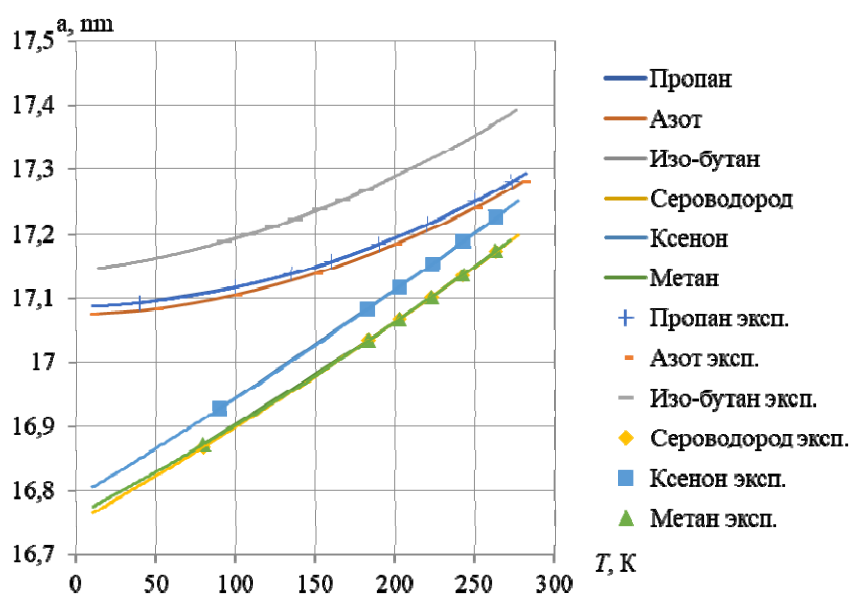


Рис. 4. Значения параметра кристаллических решеток гидратов структуры КС-II

Средние расхождения составили для представленных выше гидратообразователей в температурных диапазонах от 10 до 280 К для структуры КС-I: диоксида углерода 0,01 %, метана 0,05 %, этана 0,03 %, ксенона 0,08 %; для структуры КС-II: метана 0,03 %, пропана 0,09 %, изо-бутана 0,01 %, сероводорода 0,003 %, ксенона 0,02 %, азота 0,06 %, что в среднем не превышает 0,038 % и позволяет говорить о точности предложенного подхода. Доверительные интервалы для кривых были получены с помощью моделирования методом Монте-Карло с учетом матрицы дисперсии-ковариации стандартных отклонений, оцененных методом наименьших квадратов для коэффициентов полинома.

Заключение

Проанализирована связь коэффициента теплового расширения с параметром кристаллической решетки гидратов. Рассмотрены существующие модели и математические зависимости для описания изменения параметра кристаллической решетки гидратов и конкретных составов гидратов в ограниченных температурных диапазонах. Ввиду сложной природы движения гостевых молекул с их многочисленными степенями свободы, различных степеней связи этого движения с решеткой хозяина предложен полиномиальный подход.

Найдено соотношение для определения параметра кубической кристаллической решетки клатратных гидратов в широком диапазоне температур. Установлено, что средние расхождения согласно предложенному методу в температурных диапазонах от 10 до 280 К составляют 0,04 % и не превышают 0,09 %.

Список литературы

1. Stoll R. D., Bryan G. M. Physical properties of sediments containing gas hydrates // *Journal of Geophysical Research*. 1979. Vol. 84, № 4. P. 1629–1634.
2. Tse J. S., McKinnon W. R., Marshi M. Thermal Expansion of structure I Ethylene Oxide Hydrate // *Journal of Physical Chemistry*. 1987. Vol. 91. P. 4188–4193.
3. Hansen T. C.; Falenty A., Kuhs W. F. Lattice constants and expansivities of gas hydrates from 10 K up to the stability limit // *Journal of Chemical Physics*. 2016. Vol. 144. P. 054301. doi: 10.1063/1.4940729
4. Дядин Ю. А., Удачин К. А., Бондарюк И. В. Соединения включения. Новосибирск : Изд-во Новосибирского ун-та, 1988. 92 с.
5. Hester K. C., Huo Z., Ballard A. L., Koh C. A., Miller K. T., Sloan E. D. Thermal Expansivity for sI and sII Clathrate Hydrates // *Journal of Physical Chemistry*. 2007. Vol. 111. P. 8830–8835. doi: 10.1021/jp0715880
6. Alavi S., Ripmeester J. A. Effect of small cage guests on hydrogen bonding of tetrahydrofuran in binary structure II clathrate hydrates // *Journal of Chemical Physics*. 2012. Vol. 137. P. 054712. doi: 10.1063/1.4739928
7. Макогон Ю. Ф. Плотность гидратов природных газов // *Труды МИНХиГП*. 1970. № 88. С. 232–235.
8. Stackelberg M., Müller H. R. Feste gashydrate II // *Z. Electrochem*. 1954. Bd. 58, № 1. S. 25–39.
9. Stackelberg M., Jahns W. Feste gashydrate VI. Die ditteraufweit ungsarbeit // *Z. Electrochem*. 1954. Bd. 58, № 3. S. 162–164.
10. Pauling L. A., Marsh R. E. The structure of chlorine hydrate // *Proceedings of the National Academy of Sciences USA*. 1952. Vol. 38. P. 112–118.
11. Stackelberg M., Meuthen B. Feste Gashydrate VII. Hydrate wasscrloslicher. Ather // *Z. Electrochem*. 1958. Bd. 62. S. 130–131.
12. Bertie J. E., Othen D. A. The infrared spectrum of ethylene oxide clathrate at 100 K between 4000 and 360 cm^{-1} // *Canadian Journal of Chemistry*. 1973. Vol. 51, № 8. P. 1159–1168.
13. Gough S. R., Davidson D. W. Composition of tetrahydrofuran hydrate and the effect of pressure on decomposition // *Canadian Journal of Chemistry*. 1971. Vol. 49. P. 2691–2699.
14. Wittstruck T. A., Brey W. S., Buswell A. M., Rodebush W. H. Solid hydrates of some halomethanes // *Journal of Chemical & Engineering Data*. 1961. Vol. 6, № 3. P. 343–346.
15. Tanaka H., Tamai Y., Koga K. Large thermal expansivity of clathrate hydrates // *The Journal of Physical Chemistry B*. 1997. Vol. 101 (33). P. 6560–6565.

16. McIntyre J. A., Petersen D. K. Thermal and composition expansion of clathrates in the Ethylene Oxide – Water system // *Journal of Chemical Physics*. 1967. Vol. 47, № 10. P. 3850–3852.
17. Takeya S., Hori A., Uchida T., Ohmura R. Crystal Lattice Size and Stability of Type H Clathrate Hydrates with Various Large-Molecule Guest Substances // *Journal of Physical Chemistry B*. 2006. Vol. 110. P. 12943. doi: 10.1021/jp060198v
18. Imasato K., Murayama K., Takeya S., Alavi S., Ohmura R. Effect of nitrogen atom substitution in cyclic guests on properties of structure H clathrate hydrates // *Canadian Journal of Chemistry*. 2015. Vol. 93 (8). P. 906–912. doi: 10.1139/cjc-2014-0553
19. Hester K. C., Huo Z., Ballard A. L., Koh C. A., Miller K. T., Sloan E. D. Thermal expansivity for sI and sII clathrate hydrates // *Journal of Physical Chemistry B*. 2007. Vol. 111 (30). P. 8830–8835. doi: 10.1021/jp0715880.
20. Запорожец Е. П., Шостак Н. А. Математическое моделирование некоторых особенностей диссоциации газовых гидратов // *Вестник Воронежского государственного университета инженерных технологий*. 2018. Т. 80, № 2. С. 313–322.
21. Ogienko A. G., Kurnosov A. V., Manakov A. Y., Larionov E. G., Ancharov A. I., Sheromov M. A., Nesterov A. N. Gas hydrates of argon and methane synthesized at high pressures: composition, thermal expansion, and self-preservation // *Journal of Physical Chemistry B*. 2006. Vol. 110 (6). P. 2840–2846. doi: 10.1021/jp053915e
22. Wilms D. A., Haute A. A. Thermodynamics and composition of chlorine hydrates // *Desalination*. 1973. Vol. 12, № 3. P. 379–393.
23. Shpakov V. P., Tse J. S., Tulk C. A., Kvamme B., Belosludov V. R. Elastic moduli calculation and instability in structure I methane clathrate hydrate // *Chemical Physics Letters*. 1998. Vol. 282. P. 107–114. doi: 10.1016/s0009-2614(97)01241-4
24. Bourry C., Charlou J.-L., Donval J.-P., Brunelli M., Focsa C., Chazallon B. X-ray synchrotron diffraction study of natural gas hydrates from African margin art. no. L22303 // *Geophysical Research Letters*. 2007. Vol. 34, № 22. P. N146–N150. doi: 10.1029/2007GL031285
25. Ikeda T., Mae S. Distortion of Host Lattice in Clathrate Hydrate as a Function of Guest Molecule and Temperature // *Journal of Physical Chemistry A*. 2000. Vol. 104 (46). P. 10623–10630.
26. Gutt C., Asmussen B., Press W., Johnson M. R., Handa Y. P., Tse J. S. The structure of deuterated methane-hydrate // *Journal of Chemical Physics*. 2000. Vol. 113. P. 4713–4721.
27. Udachin K. A., Ratcliffe C. I., Ripmeester J. A. Structure, composition, and thermal expansion of CO₂ hydrate from single crystal X-ray diffraction measurements // *Journal of Physical Chemistry*. 2001. Vol. 105. P. 4200–4204.
28. Huo Z. Hydrate Phase Equilibria Measurements by X-Ray Diffraction and Raman Spectroscopy : PhD Thesis. Colorado School of Mines, 2002. 171 p.
29. Jones C. Y., Marshall S. L., Chakoumakos B. C., Rawn C. J., Ishii Y. Structure and thermal expansivity of tetrahydrofuran deuterate determined by neutron powder diffraction // *Journal of Physical Chemistry B*. 2003. Vol. 107. P. 6026–6031.
30. Takeya S., Fujihisa H., Hachikubo A., Sakagami H., Gotoh Y. Distribution of butane in the host water cage of structure II clathrate hydrates // *Chemistry*. 2014. Vol. 20 (51). P. 17207–17213. doi: 10.1002/chem.201403575
31. Igawa N., Taguchi T., Hoshikawa A., Fukazawa H., Yamauchi H., Utsumi W., Ishii Y. CO₂ motion in carbon dioxide deuterohydrate determined by applying maximum entropy method to neutron powder diffraction data // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2010. Vol. 6 (71). P. 899–905.
32. Jäger A., Václav V., Johannes G., Roland S., Hrubý J. Phase equilibria with hydrate formation in H₂O-CO₂ mixtures modeled with reference equations of state // *Fluid Phase Equilibria*. 2013. Vol. 338. P. 100–113.
33. Takeya S., Muromachi S., Yamamoto Y., Umeda H., Matsuo S. Preservation of CO₂ hydrate under different atmospheric conditions // *Fluid Phase Equilibria*. 2016. Vol. 413. P. 137–141.

References

1. Stoll R.D., Bryan G.M. Physical properties of sediments containing gas hydrates. *Journal of Geophysical Research*. 1979;84(4):1629–1634.
2. Tse J.S., McKinnon W.R., Marshi M. Thermal Expansion of structure I Ethylene Oxide Hydrate. *Journal of Physical Chemistry*. 1987;91:4188–4193.
3. Hansen T.C.; Falenty A., Kuhs W.F. Lattice constants and expansivities of gas hydrates from 10 K up to the stability limit. *Journal of Chemical Physics*. 2016;144:054301. doi: 10.1063/1.4940729
4. Dyadin Yu.A., Udachin K.A., Bondaryuk I.V. *Soedineniya vklucheniya = Inclusion connections*. Novosibirsk: Izd-vo Novosibirskogo un-ta, 1988:92. (In Russ.)
5. Hester K.C., Huo Z., Ballard A.L., Koh C.A., Miller K.T., Sloan E.D. Thermal Expansivity for sI and sII Clathrate Hydrates. *Journal of Physical Chemistry*. 2007;111:8830–8835. doi: 10.1021/jp0715880
6. Alavi S., Ripmeester J.A. Effect of small cage guests on hydrogen bonding of tetrahydrofuran in binary structure II clathrate hydrates. *Journal of Chemical Physics*. 2012;137:054712. doi: 10.1063/1.4739928
7. Makogon Yu.F. Density of natural gas hydrates. *Trudy MINKhiGP = Proceedings of Gubkin Russian State University of Oil and Gas*. 1970;(88):232–235. (In Russ.)
8. Stackelberg M., Müller H.R. Feste gashydrate II. *Z. Electrochem*. 1954;58(1):25–39.
9. Stackelberg M., Jahns W. Feste gashydrate VI. Die ditteraufweit ungsarbeit. *Z. Electrochem*. 1954;58(3):162–164.
10. Pauling L.A., Marsh R.E. The structure of chlorine hydrate. *Proceedings of the National Academy of Sciences USA*. 1952;38:112–118.
11. Stackelberg M., Meuthen B. Feste Gashydrate VII. Hydrate wasscrloslicher. *Ather. Z. Electrochem*. 1958;62:130–131.
12. Bertie J.E., Othen D.A. The infrared spectrum of ethylene oxide clathrate at 100 K between 4000 and 360 cm⁻¹. *Canadian Journal of Chemistry*. 1973;51(8):1159–1168.
13. Gough S.R., Davidson D.W. Composition of tetrahydrofuran hydrate and the effect of pressure on decomposition. *Canadian Journal of Chemistry*. 1971;49:2691–2699.
14. Wittstruck T.A., Brey W.S., Buswell A.M., Rodebush W.H. Solid hydrates of some halo-methanes. *Journal of Chemical & Engineering Data*. 1961;6(3):343–346.
15. Tanaka H., Tamai Y., Koga K. Large thermal expansivity of clathrate hydrates. *The Journal of Physical Chemistry B*. 1997;101(33): 6560–6565.
16. McIntyre J.A., Petersen D.K. Thermal and composition expansion of clathrates in the Ethylene Oxide – Water system. *Journal of Chemical Physics*. 1967;47(10):3850–3852.
17. Takeya S., Hori A., Uchida T., Ohmura R. Crystal Lattice Size and Stability of Type H Clathrate Hydrates with Various Large-Molecule Guest Substances. *Journal of Physical Chemistry B*. 2006;110:12943. doi: 10.1021/jp060198v
18. Imasato K., Murayama K., Takeya S., Alavi S., Ohmura R. Effect of nitrogen atom substitution in cyclic guests on properties of structure H clathrate hydrates. *Canadian Journal of Chemistry*. 2015;93(8):906–912. doi: 10.1139/cjc-2014-0553
19. Hester K.C., Huo Z., Ballard A.L., Koh C.A., Miller K.T., Sloan E.D. Thermal expansivity for sI and sII clathrate hydrates. *Journal of Physical Chemistry B*. 2007;111(30):8830–8835. doi: 10.1021/jp0715880.
20. Zaporozhets E.P., Shostak N.A. Mathematical modeling of some features of gas hydrate dissociation. *Vestnik Voronezhskogo gosudarstvennogo universiteta inzhenernykh tekhnologiy = Bulletin of Voronezh State University of Engineering Technology*. 2018;80(2):313–322. (In Russ.)
21. Ogienko A.G., Kurnosov A.V., Manakov A.Y., Larionov E.G., Ancharov A.I., Sheromov M.A., Nesterov A.N. Gas hydrates of argon and methane synthesized at high pressures: composition, thermal expansion, and self-preservation. *Journal of Physical Chemistry B*. 2006;110(6):2840–2846. doi: 10.1021/jp053915e

22. Wilms D.A., Haute A.A. Thermodynamics and composition of chlorine hydrates. *Desalination*. 1973;12(3):379–393.
23. Shpakov V.P., Tse J.S., Tulk C.A., Kvamme B., Belosludov V.R. Elastic moduli calculation and instability in structure I methane clathrate hydrate. *Chemical Physics Letters*. 1998;282:107–114. doi: 10.1016/s0009-2614(97)01241-4
24. Bourry C., Charlou J.-L., Donval J.-P., Brunelli M., Focsa C., Chazallon B. X-ray synchrotron diffraction study of natural gas hydrates from African margin art. no. L22303. *Geophysical Research Letters*. 2007;3422:NIL46–NIL50. doi: 10.1029/2007GL031285
25. Ikeda T., Mae S. Distortion of Host Lattice in Clathrate Hydrate as a Function of Guest Molecule and Temperature. *Journal of Physical Chemistry A*. 2000;104(46):10623–10630.
26. Gutt C., Asmussen B., Press W., Johnson M.R., Handa Y.P., Tse J.S. The structure of deuterated methane-hydrate. *Journal of Chemical Physics*. 2000;113:4713–4721.
27. Udachin K.A., Ratcliffe C.I., Ripmeester J.A. Structure, composition, and thermal expansion of CO₂ hydrate from single crystal X-ray diffraction measurements. *Journal of Physical Chemistry*. 2001;105:4200–4204.
28. Huo Z. *Hydrate Phase Equilibria Measurements by X-Ray Diffraction and Raman Spectroscopy: PhD Thesis*. Colorado School of Mines, 2002:171.
29. Jones C.Y., Marshall S.L., Chakoumakos B.C., Rawn C.J., Ishii Y. Structure and thermal expansivity of tetrahydrofuran deuterate determined by neutron powder diffraction. *Journal of Physical Chemistry B*. 2003;107:6026–6031.
30. Takeya S., Fujihisa H., Hachikubo A., Sakagami H., Gotoh Y. Distribution of butane in the host water cage of structure II clathrate hydrates. *Chemistry*. 2014;20(51):17207–17213. doi: 10.1002/chem.201403575
31. Igawa N., Taguchi T., Hoshikawa A., Fukazawa H., Yamauchi H., Utsumi W., Ishii Y. CO₂ motion in carbon dioxide deuterohydrate determined by applying maximum entropy method to neutron powder diffraction data. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2010;6(71):899–905.
32. Jäger A., Václav V., Johannes G., Roland S., Hrubý J. Phase equilibria with hydrate formation in H₂O-CO₂ mixtures modeled with reference equations of state. *Fluid Phase Equilibria*. 2013;338:100–113.
33. Takeya S., Muromachi S., Yamamoto Y., Umeda H., Matsuo S. Preservation of CO₂ hydrate under different atmospheric conditions. *Fluid Phase Equilibria*. 2016;413:137–141.

Информация об авторах / Information about the authors

Никита Андреевич Шостак

кандидат технических наук, доцент,
заместитель директора Высшей
инженерной школы «Нефтегазовый
и энергетический инжиниринг»,
Кубанский государственный
технологический университет (Россия,
г. Краснодар, ул. Московская, 2)

E-mail: nikeith@mail.ru

Nikita A. Shostak

Candidate of engineering sciences, associate
professor, deputy director of the Higher
Engineering School “Oil, gas and energy
engineering”, Kuban State Technological
University (2 Moskovskaya street,
Krasnodar, Russia)

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов / The author declares no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 26.02.2025

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 17.04.2025

Принята к публикации / Accepted 22.05.2025

УДК 621.371

doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-9

Магнитоплазмонные эффекты при дифракции терагерцовых волн на магнитно-смещенных графеновых метаповерхностях

Г. С. Макеева¹, М. С. Никитин²

^{1,2}Пензенский государственный университет, Пенза, Россия

¹radiotech@pnzgu.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* Целью данной работы является численное исследование особенностей магнитоплазмонных эффектов, возникающих при дифракции терагерцовых (ТГц) волн на графеновых метаповерхностях во внешних магнитных полях. *Материалы и методы.* Преимуществом графена перед обычными плазмонными материалами для применения в плазмонных и магнитооптических устройствах является высокая чувствительность поверхностных магнитоплазмон-поляритонов к внешним магнитным полям, поскольку циклотронная частота сравнима с плазмонной частотой в ТГц- и дальнем инфракрасном диапазонах. Численное исследование магнитоплазмонных резонансов графеновых метаповерхностей в зависимости от величины внешнего магнитного поля и моделирование 3D-*e-Field* диаграмм рассеяния на элементе графеновой метаповерхности (прямоугольной графеновой наноленте) проведено с помощью программы CST Microwave Studio. Для решения электродинамической задачи дифракции с помощью MWS CST выбран метод анализа графеновой метаповерхности (бесконечной периодической 2D-структуры) путем применения условий периодичности, которые сводят задачу для бесконечной структуры к анализу одного периода. *Результаты.* Получены результаты моделирования 3D-*e-Field*-диаграммы рассеяния на элементе магнитно-смещенной графеновой метаповерхности (прямоугольной графеновой наноленте) падающей ТЕМ-волны *p*- и *s*-поляризации для вертикальной E_y и горизонтальной E_x компонент дифрагированного поля на частотах магнитоплазмонного резонанса в ТГц-диапазоне. Проведен анализ магнитоплазмонных эффектов на основе расчета отношения компонент дифрагированного поля и осевого соотношения в точках сечения ($\varphi=0^\circ$) главного лепестка 3D-*e-Field* диаграмм рассеяния при нормальном падении ТЕМ-волны *p*- и *s*-поляризации. *Выводы.* Из результатов численного исследования характеристик магнитно-смещенных графеновых метаповерхностей следует, что на резонансных частотах наблюдаются магнитоплазмонные эффекты: появление другой компоненты дифрагированного поля, ортогональной по отношению к возбуждающей, а также магнитооптические эффекты вращения плоскости поляризации прошедшей волны (эффект Фарадея) и поворота плоскости поляризации и появления эллиптичности при отражении линейно поляризованной волны от поверхности графена (магнитооптический эффект Керра), зависящие от величины внешнего магнитного поля.

Ключевые слова: графеновая метаповерхность, внешнее магнитное поле, циклотронная частота, магнитоплазмонные резонансы, 3D-*e-Field*-диаграмма рассеяния

Для цитирования: Макеева Г. С., Никитин М. С. Магнитоплазмонные эффекты при дифракции терагерцовых волн на магнитно-смещенных графеновых метаповерхностях // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2025. № 2. С. 116–133. doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-9

Magnetoplasmonic effects at the diffraction of terahertz waves on magnetically biased graphene metasurfaces

© Макеева Г. С., Никитин М. С., 2025. Контент доступен по лицензии Creative Commons Attribution 4.0 License / This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 License.

G.S. Makeeva¹, M.S. Nikitin²^{1,2}Penza State University, Penza, Russia¹radiotech@pnzgu.ru

Abstract. *Background.* The purpose of this work is a numerical study of the features of magnetoplasmonic effects arising from the diffraction of THz waves on graphene metasurfaces in external magnetic fields. *Materials and methods.* The advantage of graphene over conventional plasmonic materials for use in plasmonic and magneto-optical devices is the high sensitivity of surface magnetoplasmon-polaritons to external magnetic fields, since the cyclotron frequency is comparable to the plasmonic frequency in the THz and far IR ranges. A numerical study of magnetoplasmonic resonances of graphene metasurfaces depending on the induction of an external magnetic field and modeling of 3D *e-Field* scattering patterns on an element of a graphene metasurface (rectangular graphene nanoribbon) was carried out using the CST Microwave Studio program. To solve the electrodynamic diffraction problem using MWS CST, a method was chosen to analyze a graphene metasurface (an infinite periodic 2D structure) by applying periodicity conditions that reduce the problem for an infinite structure to the analysis of one period. *Results.* The results of modeling the 3D *e-Field* scattering diagram on an element of a magnetically biased graphene metasurface (a rectangular graphene nanoribbon) of an incident *TEM*-wave of *p*- and *s*-polarization for the vertical and horizontal components of the diffracted field at magnetoplasmon resonance frequencies in the THz range. An analysis of magnetoplasmonic effects was performed based on the calculation of the ratio of components of the diffracted field and the axial ratio at the points of cross-section ($\varphi=0^\circ$) of the main lobe of the 3D *e-Field* scattering diagrams at normal incidence of a *TEM*-wave of *p*- and *s*-polarization. *Conclusions.* From the results of the numerical study of the characteristics of the magnetically biased graphene metasurfaces it follows that magnetoplasmonic effects are observed at resonant frequencies, i.e. the appearance of another component of the diffracted field, orthogonal to the exciting one, as well as the magneto-optical effects of rotation of the plane of polarization of the transmitted wave (Faraday effect), rotation of the plane of polarization and the appearance of ellipticity of a linearly polarized wave during reflection of a linearly polarized wave from the graphene surface (magneto-optical Kerr effect), depending on the magnitude of the external magnetic field.

Keywords: graphene metasurface, external magnetic field, cyclotron frequency, magnetoplasmonic resonances, 3D *e-Field* scattering diagram

For citation: Makeeva G.S., Nikitin M.S. Magnetoplasmonic effects at the diffraction of terahertz waves on magnetically biased graphene metasurfaces. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences.* 2025;(2):116–133. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-9

Введение

Магнитные поля могут оказывать сильное влияние на движение электронов в квантовых материалах. Двумерные (2D) электронные системы при воздействии сильных магнитных полей демонстрируют квантованную холловскую проводимость, киральные краевые токи и характерные коллективные моды, называемые магнитоэкситонами и магнитоплазмонами [1]. Графен стал образцовым материалом для магнитооптических (МО) исследований [1–11]. Графен демонстрирует квантовый эффект Холла и сильный эффект циклотронных резонансов уже в умеренно сильных магнитных полях при комнатной температуре [3–6].

Приложение внешнего магнитного поля к графену приводит к циркуляции носителей заряда по циклотронным орбитам, и графеновый конус Дирака распадается на дискретный набор неэквидистантных энергетических уровней Ландау. Для магнитооптики слой графена оказывает резонансное воздействие при энергиях фотонов, равных разности уровней Ландау [5]. Приложенное магнитное поле также изменяет коллективные моды электронов и дырок в графене. Объединяющим термином для таких мод являются магнитоэкситоны. Магнитоэкситоны, происходящие в результате оптических переходов между соседними уровнями Ландау, называют магнитоплазмонами [1].

В области частот от терагерцового (ТГц) до инфракрасного (ИК) диапазона графен поддерживает распространение поверхностных плазмон-поляритонов (ППП), сильно локализованных поверхностью графена. Поверхностные плазмон-поляритоны в графене могут активно перестраиваться с помощью внешнего магнитного поля, происходит гибридизация ППП и циклотронных возбуждений, что приводит к появлению другой квазичастицы, называемой поверхностным магнитоплазмон-поляритоном (МППП) графена. Одним из преимуществ графена перед обычными плазмонными материалами для применения в плазмонных и МО-устройствах является высокая чувствительность МППП к внешним магнитным полям, поскольку циклотронная частота сравнима с плазмонной частотой в ТГц- и дальнем ИК диапазонах [6–8].

При приложении внешнего магнитного поля к графену возникают анизотропные эффекты, вызванные силой Лоренца, действующей на электроны. В результате появляется множество интересных физических явлений, в том числе гиротропия, невязанность и поддержка МППП [9, 10]. Магнитоплазмон-поляритоны графена наряду с модуляцией плазмонных свойств внешним магнитным полем также определяют невязанный эффект и многодиапазонность по частоте, что применимо в разработке интегральных магнитоплазмонных устройств ТГц-, ИК-диапазонов на основе графена для биосенсоров и телекоммуникационных приложений [11]. Однако на данный момент мало что известно о магнитоплазмоне графена и топологических эффектах в графеновых наноструктурах [5].

Целью данной работы является численное исследование особенностей магнитоплазмонных эффектов, возникающих при дифракции ТГц-волн на графеновых метаповерхностях во внешних магнитных полях.

1. Модель графеновой метаповерхности во внешнем магнитном поле

Анизотропию графена в магнитном поле, перпендикулярном плоскости графена, можно охарактеризовать тензором анизотропной поверхностной проводимости:

$$\hat{\sigma} = \begin{pmatrix} \hat{\sigma}_{xx} & \hat{\sigma}_{xy} & 0 \\ \hat{\sigma}_{yx} & \hat{\sigma}_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \hat{\sigma}_d \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где компоненты тензора имеют следующий вид [12]:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{e^2 |E_f|}{\pi \hbar^2} \cdot \frac{i(\omega + i/\tau)}{(\omega + i/\tau)^2 - \omega_c^2},$$

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{e^2 |E_f|}{\pi \hbar^2} \cdot \frac{\omega_c}{(\omega + i/\tau)^2 - \omega_c^2}, \quad \sigma_{xx} = \sigma_d \quad (\sigma_d \text{ при } B = 0);$$

здесь E_f – уровень Ферми; τ – время релаксации, $\tau = \mu E_f / e V_f^2$; μ – плотность носителей заряда $\mu = 10^5 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$; ω_c – циклотронная частота, $\omega_c = e B V_f^2 / E_f$; V_f – скорость Ферми, $V_f = 10^6 \text{ м/с}$.

Результаты расчета частотных зависимостей действительной и мнимой частей диагональной σ_{xx} и недиагональной σ_{xy} компонент тензора проводимости $\hat{\sigma}$ графена в ТГц- и дальнем ИК-диапазонах частот представлены на рис. 1.

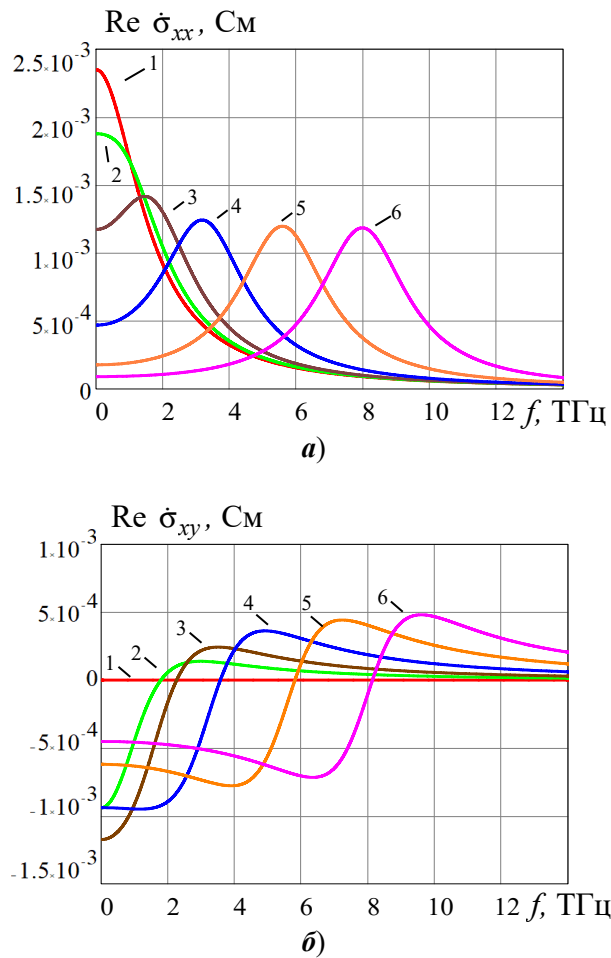


Рис. 1. Зависимости действительной (а, б) и мнимой (в, г) частей диагональной σ_{xx} (а, в) и недиагональной σ_{xy} (б, г) компонент тензора проводимости графена от частоты для различных значений индукции B внешнего магнитного поля; кривые: 1 – 0; 2 – 1 Тл; 3 – 2 Тл; 4 – 4 Тл; 5 – 7 Тл, 6 – 10 Тл; $\tau = 0,1 \text{ пс}$, $E_f = -0,2 \text{ эВ}$

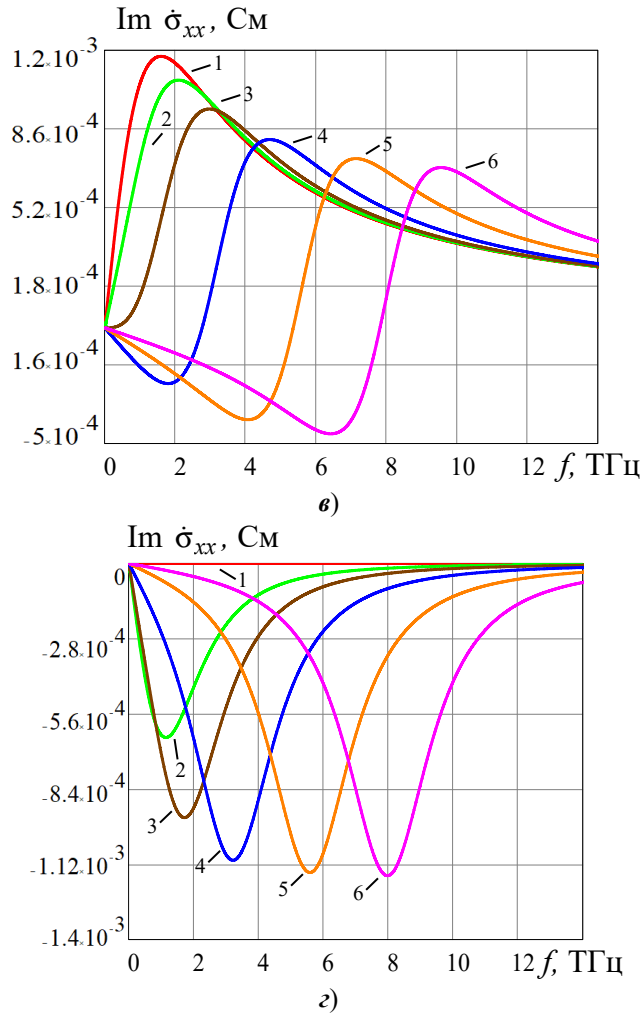


Рис. 1. Окончание

Тензор комплексной диэлектрической проницаемости графена $\hat{\epsilon}$ при приложении перпендикулярного магнитного поля выражается следующим образом:

$$\hat{\epsilon} = \hat{I} + \frac{i}{\omega t \epsilon_0} \begin{pmatrix} \dot{\sigma}_{xx} & \dot{\sigma}_{xy} & 0 \\ \dot{\sigma}_{yx} & \dot{\sigma}_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \dot{\sigma}_{zz} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где t – толщина графена; ϵ_0 – электрическая постоянная.

Для создания модели магнитно-смещенной графеновой метаповерхности, включающей тензор комплексной диэлектрической проницаемости графена $\hat{\epsilon}$, действительные и мнимые части компонент тензора $\hat{\epsilon}$ (2) вводились в виде формул в программу MWS CST [13].

В программе MWS CST разработана модель ячейки метаповерхности (период d), содержащей прямоугольную графеновую наноленту (ГНЛ) (ши-

риной w , длиной l) на диэлектрической подложке (диэлектрическая проницаемость ϵ , толщина h) (рис. 2).

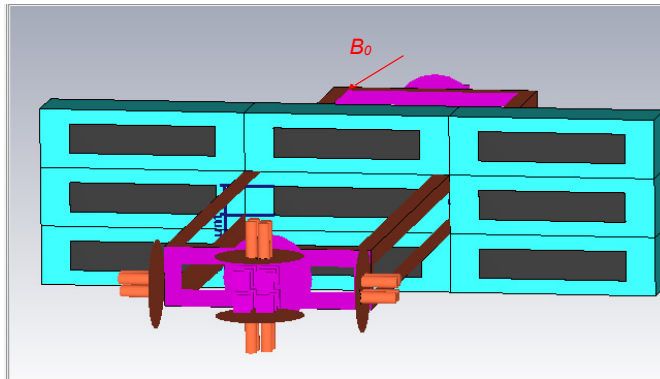


Рис. 2. Модель ячейки метаповерхности из прямоугольных ГНЛ в CST MWS: канал Флоке и ориентация вектора индукции B_0 внешнего магнитного поля

Для описания границы раздела сред используем канал Флоке и охватим ячейку периодическими граничными условиями *Unit Cell* [14], условные обозначения которых показаны на рис. 2.

Для решения электродинамической задачи дифракции с помощью программы MWS CST выбран метод анализа графеновой метаповерхности (бесконечной периодической 2D-структуры) путем применения условий периодичности, которые сводят задачу для бесконечной структуры к анализу одного периода [14]. Анализируемый фрагмент – ячейка графеновой метаповерхности (рис. 2) – охватывается каналом Флоке [14]; электродинамическая задача решается в частотной области численным методом конечных элементов (FEM) [13].

2. Магнитоплазмонные резонансы метаповерхности из прямоугольных ГНЛ во внешнем магнитном поле

С помощью программы MWS CST проведено моделирование рассеяния нормально падающих ТЕМ-волн p - и s -поляризации (см. вставки к рис. 3, а, в) на графеновую метаповерхность при приложении внешнего магнитного поля B_0 в направлении, перпендикулярном плоскости графена (рис. 2).

Методом каналов Флоке рассчитаны частотные зависимости коэффициентов прохождения $|S_{21}|$ и отражения $|S_{11}|$ p - и s - поляризованных ТЕМ-волн (при нормальном падении) от магнитно-смещенной графеновой метаповерхности в ТГц диапазоне. Результаты расчета $|S_{21}|$ и $|S_{11}|$ для метаповерхности ($d = 1$ мкм) из ГНЛ ($w = 0,5$ мкм, $l = 2,5$ мкм) на диэлектрической подложке ($\epsilon = 4$, $h = 1$ мкм) при различных значениях индукции B_0 внешнего магнитного поля (0, 1, 2, 4, 7, 10 Тл) приведены на рис. 3. Параметры графена $E_f = 0,2$ эВ, $\tau = 0,1$ пс и $T = 300$ К.

В отсутствие внешнего магнитного поля ($B_0 = 0$) на каждой из частотных зависимостей имеются минимумы $|S_{21}|$, $|S_{11}|$, обусловленные резонансом мод ППП в прямоугольной ГНЛ на частотах плазмонного резонанса (первый минимум $|S_{21}|$ – резонанс основной моды ППП на частоте f_{0res} (рис. 3, б)), зави-

сящих от поляризации падающей ТЕМ-волны и значений уровня Ферми графена E_f .

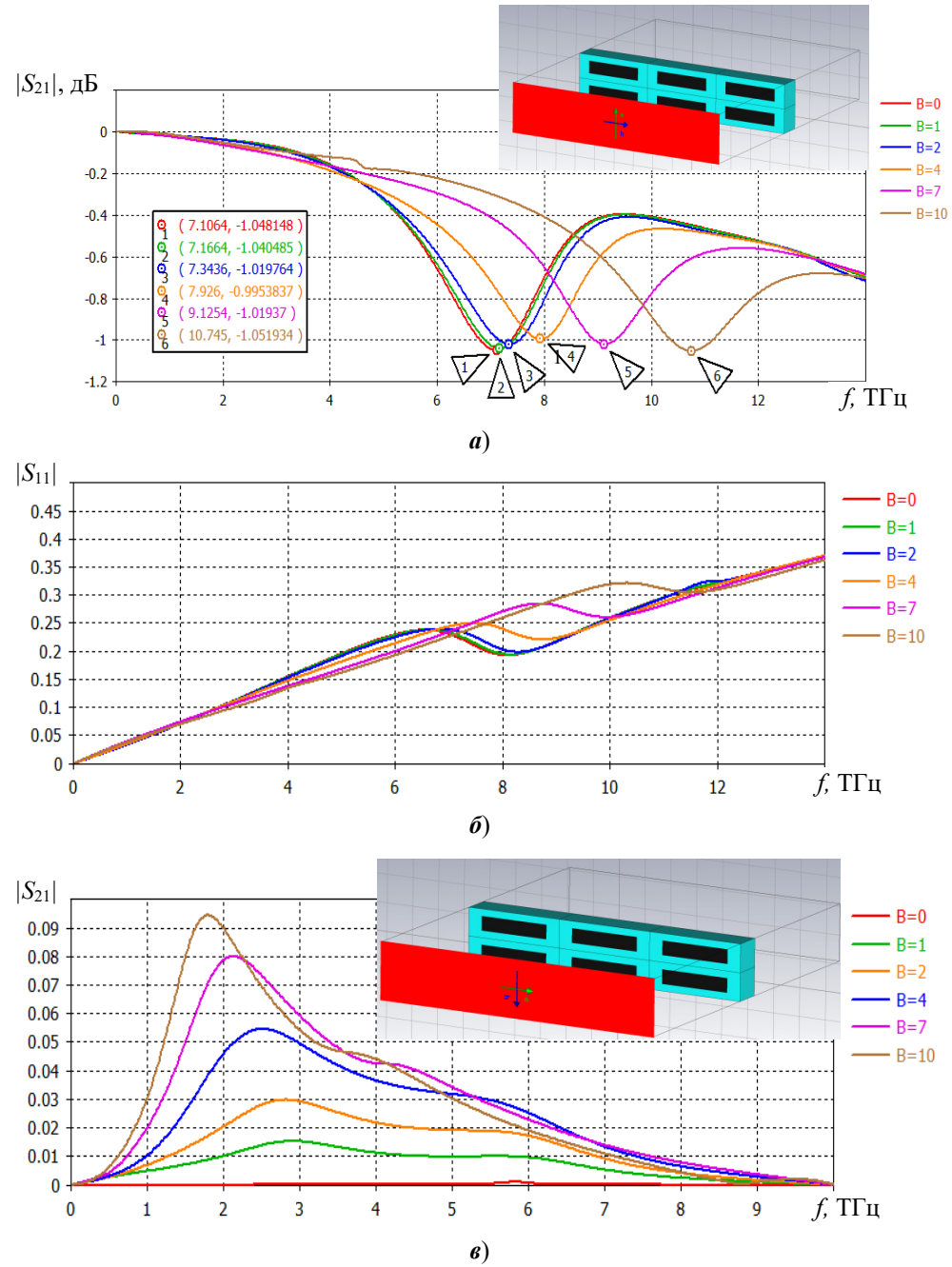


Рис. 3. Частотные зависимости коэффициентов прохождения $|S_{21}|$ (а, в) и отражения $|S_{11}|$ (б, з) от графеновой метаповерхности падающей ТЕМ-волны p -поляризации (а, б) и s -поляризации (в, з) для различных значений индукции B_0 внешнего магнитного поля; кривые: 1 – $B_0 = 0$; 2 – 1 Тл; 3 – 2 Тл; 4 – 4 Тл; 5 – 7 Тл; 6 – 10 Тл; $E_f = -0,2$ эВ, $\tau = 0,1$ пс, $T = 300$ К. На вставках: ориентация векторов поля нормально падающей ТЕМ-волны: p -поляризации (а), s - поляризации (в)

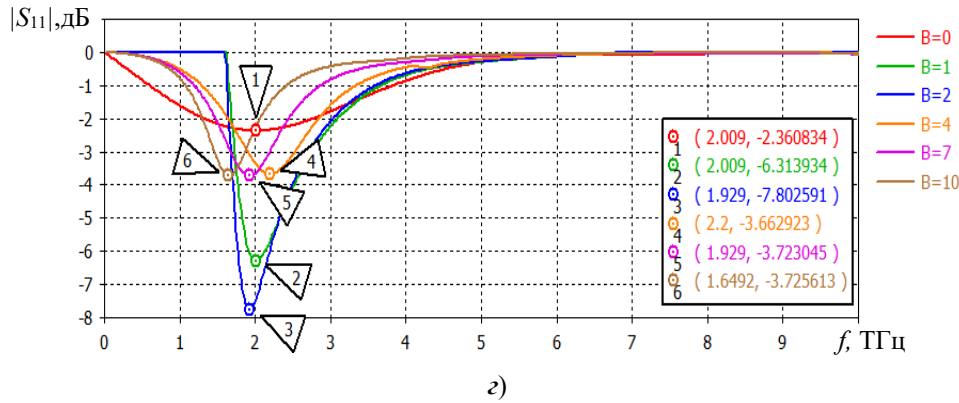


Рис. 3. Окончание

При приложении внешнего магнитного поля наблюдаются минимумы коэффициентов прохождения $|S_{21}|$ (рис. 3,а) и отражения $|S_{11}|$ (рис. 3,з) на частотах магнитоплазменных резонансов f_{res} , которые отличаются от частот плазменного резонанса f_{0res} (при $B_0 = 0$) и определяются величиной внешнего магнитного поля. Положение и глубина минимумов $|S_{21}|$, $|S_{11}|$ зависят от индукции B_0 магнитного поля; возрастание B_0 приводит к смещению магнито-плазменных резонансов в сторону более высоких ТГц-частот (см. рис. 3).

Наличие магнитостатического смещения вызывает резонансы на всех компонентах тензора проводимости (1), значительно обогащая характеристики поддерживаемых ППП [15]. Как и следует из резонансного характера частотных зависимостей компонент тензора проводимости графена $\hat{\sigma}$ (1), коэффициенты прохождения $|S_{21}|$ и отражения $|S_{11}|$ имеют особенности вблизи резонансов (см. рис. 3). Так как вблизи частоты циклотронного резонанса ω_c (1) на частотах, соответствующих переходам носителей между уровнями Ландау [2], резко возрастает проводимость графена (см. рис. 1), то это приводит к увеличению коэффициента поглощения, а, следовательно, уменьшению коэффициента прохождения $|S_{21}|$ и увеличению коэффициента отражения $|S_{11}|$ (рис. 3,а,б). Увеличение внешнего магнитного поля приводит к смещению резонансов в сторону более высоких частот, эта особенность становится более заметной на частотных зависимостях коэффициентов $|S_{21}|$, $|S_{11}|$ (см. рис. 3).

Из результатов моделирования (см. рис. 3) следует, что магнито-плазменные резонансы графеновой метаповерхности зависят от поляризации падающей волны. Для волны p -поляризации, когда вектор электрического поля E падающей ТЕМ-волны перпендикулярен оси ГНЛ (см. вставки к рис. 3,а,в), глубина минимумов $|S_{21}|$, а значит и магнито-плазменные резонансы, максимальны (рис. 3,а,б); для волны s -поляризации, когда вектор E падающей ТЕМ-волны параллелен оси ГНЛ (см. вставку к рис. 3,в)) магнито-плазменные резонансы менее выражены (рис. 3,в,з).

Это объясняется тем, что, в отличие от ППП, которые ТМ-поляризованы, магнито-плазмоны в графене представляют собой гибридные ТМ-ТЕ-моды (все компоненты электрического и магнитного полей отличны от нуля) [5]. В прямоугольной ГНЛ поверхностные магнито-плазмон-поляритоны, распространяющиеся в поперечном направлении, образуют резонансы стоячей волны по ширине ГНЛ [16]. Такие моды называют объемными 2D-модами ГНЛ [16]. Возбуждение этих магнито-плазменных мод существенно влияет на магнитооп-

тический МО-отклик графеновой метаповерхности и определяет зависимость частот магнитоплазмонных резонансов от размеров прямоугольной ГНЛ.

3. Анализ магнитоплазмонных эффектов на основе расчета отношения компонент дифрагированного поля 3D-*e-Field*-диаграммы рассеяния и осевого соотношения

С помощью программы MWS CST проведено моделирование 3D-*e-Field*-диаграммы рассеяния [14], т.е. величины E -поля дифрагированной на магнитно-смещенной графеновой метаповерхности волны (в дальнем поле) на заданном расстоянии в зависимости от угловых сферических координат θ , φ . Результаты моделирования 3D-*e-Field*-диаграмм рассеяния на элементе графеновой метаповерхности (прямоугольной ГНЛ) ($w = 0,5$ мкм, $l = 2,5$ мкм) нормально падающей ТЕМ-волны p - и s -поляризации (см. вставки к рис. 3, а, в) для вертикальной E_y и горизонтальной E_x компонент дифрагированного поля на частоте магнитоплазмонного резонанса $f_{res} = 10,614$ ТГц (при $B_0 = 10$ Тл) представлены на рис. 4, 5 соответственно.

Вертикальная E_y и горизонтальная E_x составляющие рассчитываются следующим образом [2]:

$$E_x = E_\theta \cos \varphi - E_\varphi \sin \varphi, \quad E_y = E_\theta \sin \varphi + E_\varphi \cos \varphi. \quad (2)$$

В случае магнитно-смещенной графеновой метаповерхности из-за гиротропии графена электромагнитную волну нельзя классифицировать на ТЕ- и ТМ-волны [5]. Как следует из результатов моделирования, при рассеянии на элементе магнитно-смещенной графеновой метаповерхности (прямоугольной ГНЛ) нормально падающей линейно-поляризованной ТЕМ-волны, имеющей в случае p -поляризации только вертикальную компоненту E_y (см. вставку к рис. 3, а) (в случае s -поляризации – только горизонтальную компоненту E_x (см. вставку к рис. 3, в)), при приложении перпендикулярного внешнего магнитного поля появляется другая – ортогональная компонента дифрагированного поля (в случае p -поляризации E_x (рис. 4, б), в случае s -поляризации E_y (рис. 5, б)).

Результаты расчета отношения амплитуд горизонтальной и вертикальной компонент E_x/E_y дифрагированного поля в точках сечения ($\varphi = 0^\circ$) главного лепестка 3D-*e-Field*-диаграмм рассеяния (рис. 4, 5, в, г) при нормальном падении ТЕМ-волны p - и s -поляризации представлены на рис. 6, 7 для $B_0 = 2$ Тл, $f_{res} = 7,327$ ТГц и $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц, а также для углов падения $\alpha = 0^\circ$ и $\alpha = 30^\circ$, где для сравнения приведены значения E_x/E_y для плоскости из идеально проводящего металла (РЕС) при $B_0 = 0$, $f_{0res} = 7,346$ ТГц.

При приложении перпендикулярного магнитного поля отношение E_x/E_y в случае нормально падающей ($\alpha = 0^\circ$) линейно-поляризованной ТЕМ-волны p -поляризации при $B_0 = 2$ Тл на частоте магнитоплазмонного резонанса $f_{0res} = 7,346$ ТГц отношение E_x/E_y (кривая 1 на рис. 6) равно: в точке 5 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая волна) $E_x/E_y = 0,091$ ($\text{arcctg } E_x/E_y = 84,8^\circ$), в точке 6 ($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $E_x/E_y = 0,109$ ($\text{arcctg } E_x/E_y = 83,7^\circ$). Если угол падения волны $\alpha = 30^\circ$, отношение E_x/E_y (кривая 3 на рис. 6) в точке 3 (прошедшая волна) ($\theta = 180^\circ$) $E_x/E_y = 0,09$ ($\text{arcctg } E_x/E_y = 84,8^\circ$), в точке 4 ($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $E_x/E_y = 0,1$ ($\text{arcctg } E_x/E_y = 84,2^\circ$). т.е. при $B_0 = 2$ Тл, $f_{0res} = 7,346$ ТГц при изменении угла падения волны α отношение E_x/E_y для прошедшей и отраженной волн изменяется незначительно: для прошедшей – на 1,1 %, отраженной – на 8,3 %.

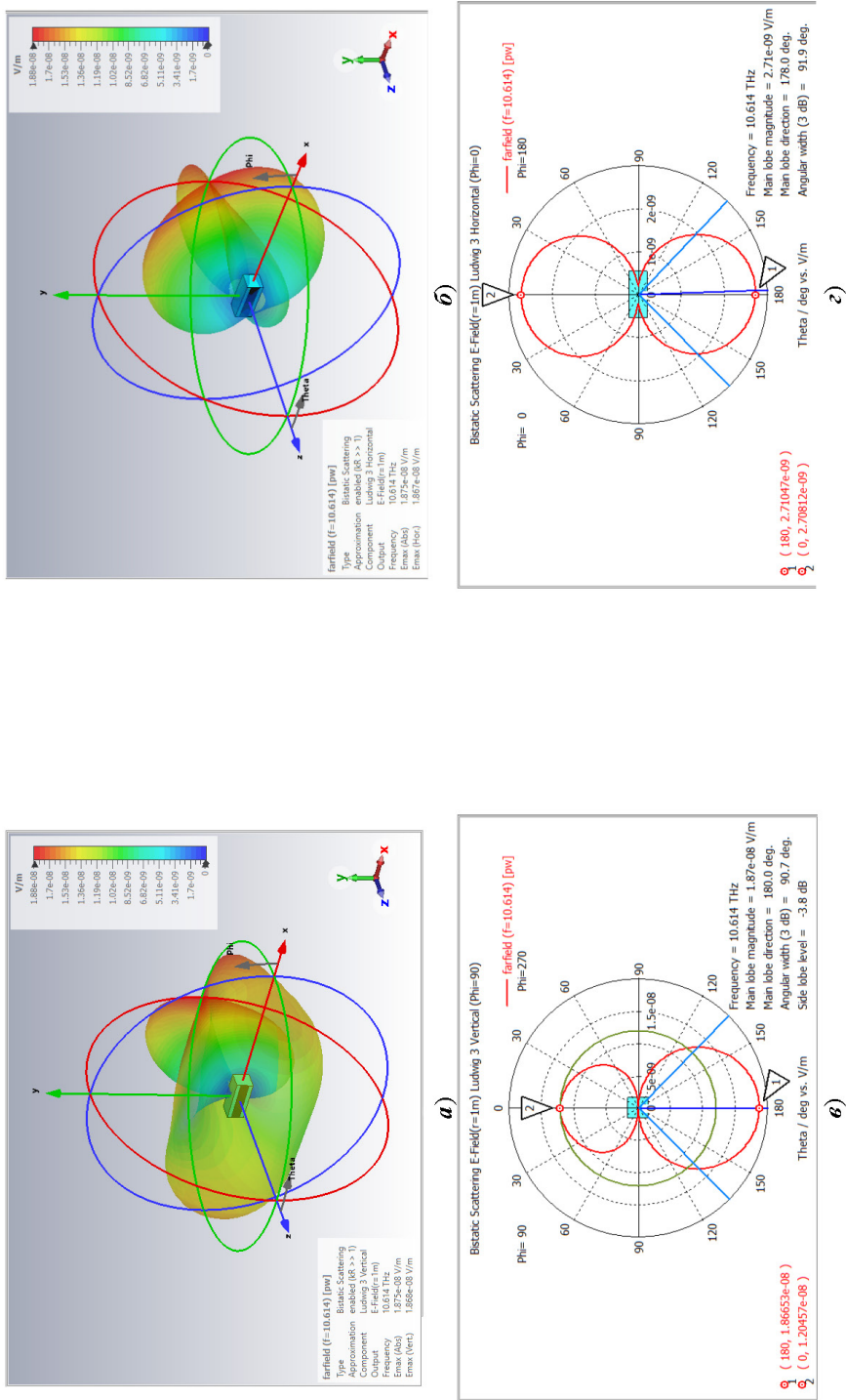


Рис. 4. 3D- и 2D-*e-Field*-диаграммы рассеяния на элементе магнитно-смещенной графеновой метаповерхности (прямоугольной ГНЛ) нормально падающей ТЕМ-волны *p*-поляризации для вертикальной E_y (a) и горизонтальной E_x (b) компонент дифрагированного поля: $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц, $w = 0,5$ мкм, $l = 2,5$ мкм

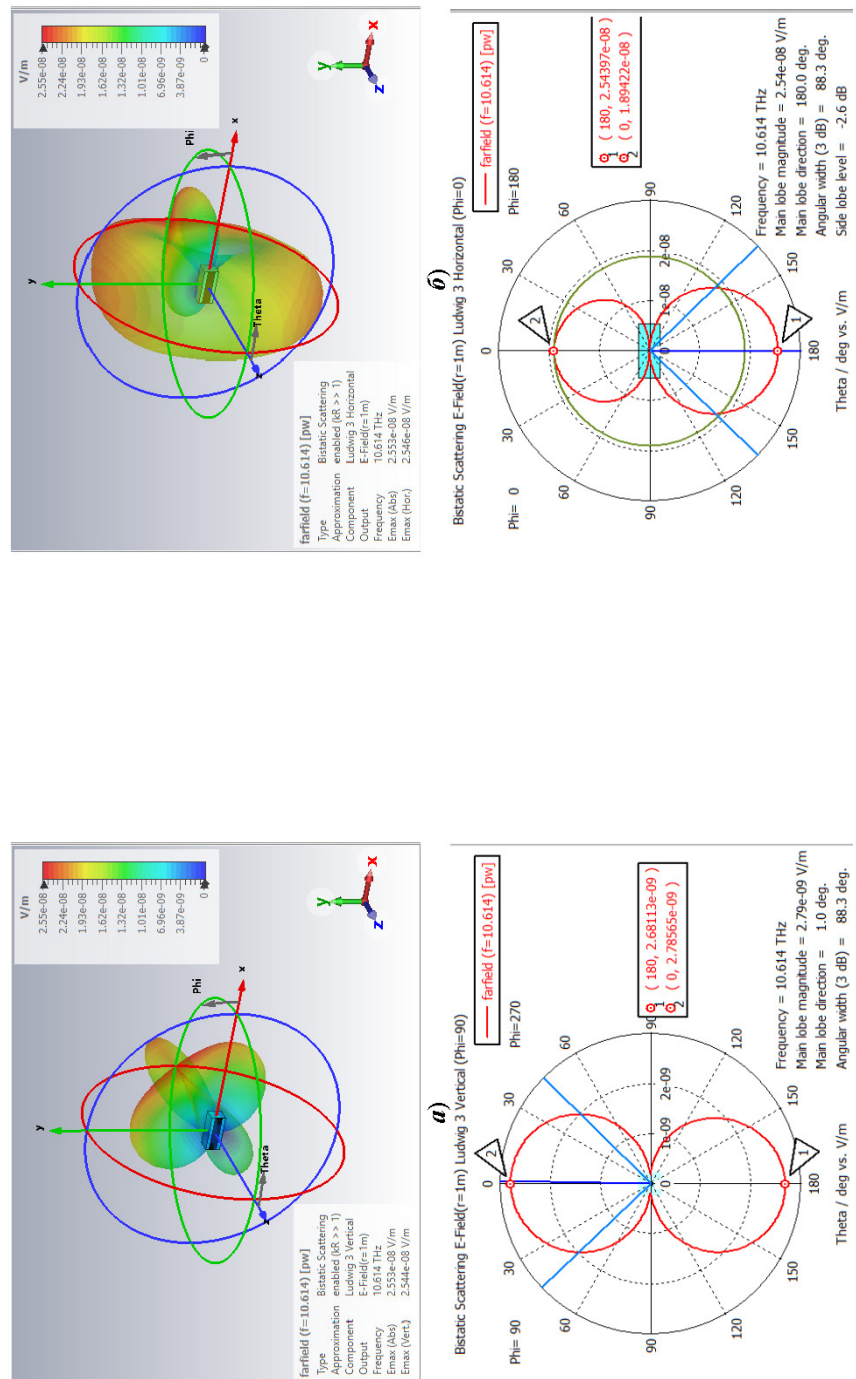


Рис. 5. 3D- и 2D-*e-Field*-диаграммы рассеяния на элементе магнитно-смещенной графеновой метаповерхности (прямоугольной ГНЛ) нормально падающей ТЕМ-волны *s*-поляризации для вертикальной E_y (**a**) и горизонтальной E_x (**b**) компонент дифрагированного поля: $B_0 = 10$ Тл, $f_{\text{res}} = 10,614$ ТГц, $w = 0,5$ мкм, $l = 2,5$ мкм

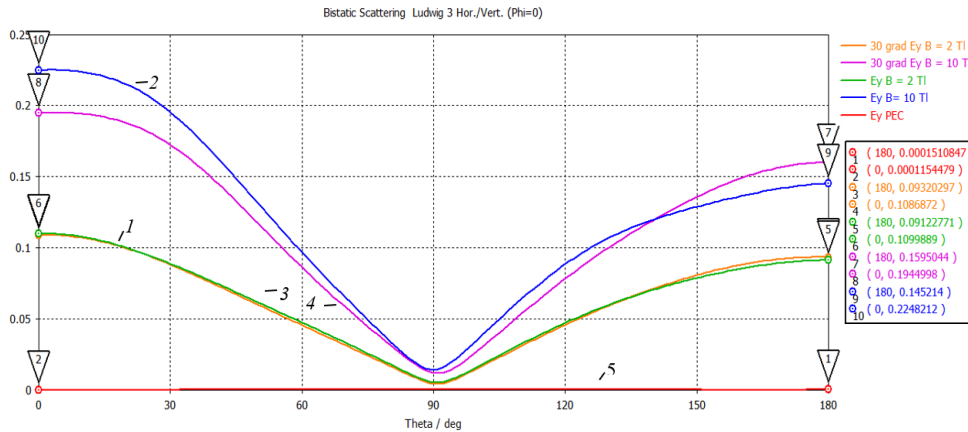


Рис. 6. Отношение амплитуд горизонтальной и вертикальной компонент E_x/E_y в точках сечения ($\varphi=0^\circ$) главного лепестка 3D-*e-Field*-диаграммы рассеяния в зависимости от θ при падении ТЕМ-волны *p*-поляризации; кривые: 1 – $B_0 = 2$ Тл, $f_{res} = 7,346$ ТГц, $\alpha = 0^\circ$ (5, 6); 2 – $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц, $\alpha = 0^\circ$ (9, 10); 3 – $B_0 = 2$ Тл, $f_{res} = 7,346$ ТГц, $\alpha = 30^\circ$ (3, 4); 4 – $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц, $\alpha = 30^\circ$ (7, 8); 5 – *PEC*, $f_{res} = 7,346$ ТГц, $\alpha = 0^\circ$ (1, 2)

При $B_0 = 10$ Тл на частоте магнитоплазмонного резонанса $f_{res} = 10,614$ ТГц ($\alpha = 0^\circ$) отношение E_x/E_y (кривая 2 на рис. 6) равно: в точке 5 (прошедшая) ($\theta = 180^\circ$) $E_x/E_y = 0,145$ ($\text{arctg } E_x/E_y = 81,74^\circ$), в точке 6 (отраженная) ($\theta = 0^\circ$) $E_x/E_y = 0,224$ ($\text{arctg } E_x/E_y = 77,3^\circ$). Если угол падения волны $\alpha = 30^\circ$, отношение E_x/E_y (кривая 4 на рис. 6) в точке 7 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая волна) $E_x/E_y = 0,159$ ($\text{arctg } E_x/E_y = 80,9^\circ$), в точке 8 ($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $E_x/E_y = 0,194$ ($\text{arctg } E_x/E_y = 79^\circ$), т.е. при $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц при изменении угла падения волны α отношение E_x/E_y для прошедшей и отраженной волн изменяется заметнее: для прошедшей – на 9,7 %, отраженной – на 13,4 %.

Из результатов моделирования следует, что в случае падающей ТЕМ-волны *p*-поляризации на частотах магнитоплазмонных резонансов при увеличении внешнего магнитного поля B_0 угол β фарадеевского вращения плоскости поляризации прошедшей волны изменяется ($\beta_2 = 81,74^\circ$ при $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц в сравнении с $\beta_1 = 84,8^\circ$ при $B_0 = 2$ Тл, $f_{res} = 7,346$ ТГц). Угол γ поворота плоскости поляризации отраженной волны изменяется более существенно ($\gamma_2 = 77,3^\circ$ при $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц в сравнении с $\gamma_1 = 83,7^\circ$ при $B_0 = 2$ Тл, $f_{res} = 7,346$ ТГц).

Для сравнения отношение E_x/E_y в случае полосы из идеально проводящего металла (*PEC*) при $B_0 = 0$, $f_{0res} = 7,346$ ТГц (кривая 5 на рис. 6) равно: в точке 1 (прошедшая волна) ($\theta = 180^\circ$) $E_x/E_y = 0,00015$ ($\text{arctg } E_x/E_y = 90^\circ$), в точке 2 (отраженная волна) ($\theta = 0^\circ$) $E_x/E_y = 0,00011$ ($\text{arctg } E_x/E_y = 90^\circ$), т.е. появление другой – ортогональной компоненты дифрагированного поля E_x (в случае *p*-поляризации) отсутствует, и эффекта поворота плоскости поляризации прошедшей и отраженной волн, естественно, не наблюдается.

При приложении перпендикулярного магнитного поля в случае нормально падающей ($\alpha = 0^\circ$) линейно-поляризованной ТЕМ-волны *s*-поляризации при $B_0 = 2$ Тл на частоте $f_{res} = 7,346$ ТГц отношение E_x/E_y равно: в точке 1 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая волна) $E_x/E_y = 10,6$ ($\text{arctg } E_x/E_y = 5,67^\circ$), в точке 2

($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $E_x/E_y = 9.09$ ($\text{arccctg } E_x/E_y = 6,27^\circ$). Если угол падения волны $\alpha = 30^\circ$, отношение E_x/E_y (кривая 3 на рис. 11) равно: в точке 5 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая волна) $E_x/E_y = 9,48$ ($\text{arccctg } E_x/E_y = 6^\circ$), в точке 6 ($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $E_x/E_y = 6,79$ ($\text{arccctg } E_x/E_y = 8,37^\circ$), т.е. при $B_0 = 2$ Тл, $f_{\text{res}} = 7,346$ ТГц при изменении угла падения волны α отношение E_x/E_y для прошедшей волны изменяется незначительно, а для отраженной волны весьма заметно.

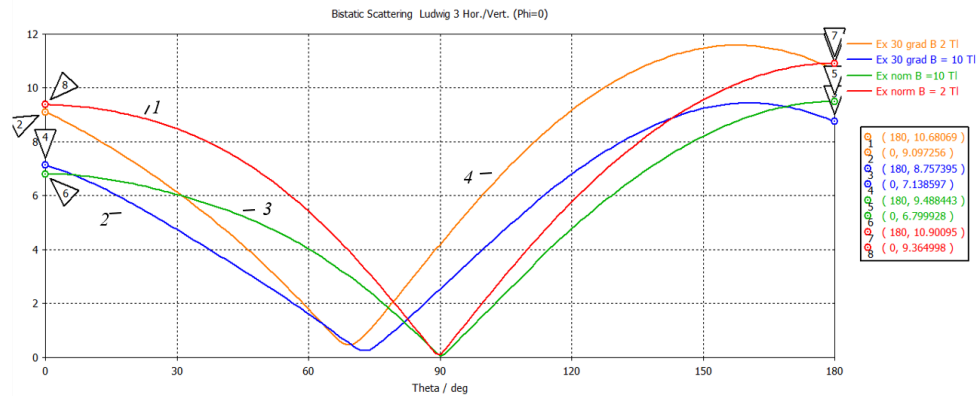


Рис. 7. Отношение амплитуд горизонтальной и вертикальной компонент E_x/E_y в точках сечения ($\varphi = 0^\circ$) главного лепестка 3D-*e-Field*-диаграммы рассеяния в зависимости от θ при падении *TEM*-волны *s*-поляризации; кривые: 1 – $B_0 = 2$ Тл, $f_{\text{res}} = 7,346$ ТГц, $\alpha = 0^\circ$ (1, 2); 2 – $B_0 = 10$ Тл, $f_{\text{res}} = 10,614$ ТГц, $\alpha = 0^\circ$ (3, 4); 3 – $B_0 = 2$ Тл, $f_{0\text{res}} = 7,346$ ТГц, $\alpha = 30^\circ$ (5, 6); 4 – $B_0 = 10$ Тл, $f_{\text{res}} = 10,614$ ТГц, $\alpha = 30^\circ$ (7, 8)

При $B_0 = 10$ Тл, $f_{\text{res}} = 10,614$ ТГц ($\alpha = 0^\circ$) отношение E_x/E_y (кривая 2 на рис. 7) равно: в точке 3 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая волна) $E_x/E_y = 8,75$ ($\text{arccctg } E_x/E_y = 6,51^\circ$), в точке 4 ($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $E_x/E_y = 7,13$ ($\text{arccctg } E_x/E_y = 7,98^\circ$). Если угол падения волны $\alpha = 30^\circ$, отношение E_x/E_y (кривая 4 на рис. 7) в точке 7 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая волна) $E_x/E_y = 10,9$ ($\text{arccctg } E_x/E_y = 5,24^\circ$), в точке 8 ($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $E_x/E_y = 9,36$ ($\text{arccctg } E_x/E_y = 6^\circ$), т.е. при изменении угла падения волны α отношение E_x/E_y для прошедшей волны изменяется более заметно – на 24,5 %, а для отраженной волны существенно – на 31,2 % в сравнении с волной *p*-поляризации.

Из результатов моделирования следует, что в случае падающей *TEM*-волны *s*-поляризации при увеличении внешнего магнитного поля B_0 угол β фарадеевского вращения плоскости поляризации прошедшей волны возрастает ($\beta_2 = 6,51^\circ$ при $B_0 = 10$ Тл, $f_{\text{res}} = 10,614$ ТГц в сравнении с $\beta_1 = 5,24^\circ$ при $B_0 = 2$ Тл, $f_{\text{res}} = 7,346$ ТГц). Угол γ поворота плоскости поляризации отраженной волны возрастает более существенно ($\gamma_2 = 7,98^\circ$ при $B_0 = 10$ Тл, $f_{0\text{res}} = 10,614$ ТГц в сравнении с $\gamma_1 = 6,27^\circ$ при $B_0 = 2$ Тл, $f_{0\text{res}} = 7,346$ ТГц) в сравнении с волной *p*-поляризации.

С помощью программы MWS CST проведен расчет осевого отношения AR [14], которое (в соответствии со стандартом IEEE) представляет собой отношение большой оси к малой оси поляризационного эллипса. Результаты расчета осевого отношения AR в точках сечения ($\varphi = 0^\circ$) главного лепестка 3D-*e-Field*-диаграммы рассеяния (рис. 4, 5, 6, 2) в зависимости от θ представлены на рис. 8, 9 для падающей линейно-поляризованной *TEM*-волны в случае *p*- и *s*-поляризации соответственно.

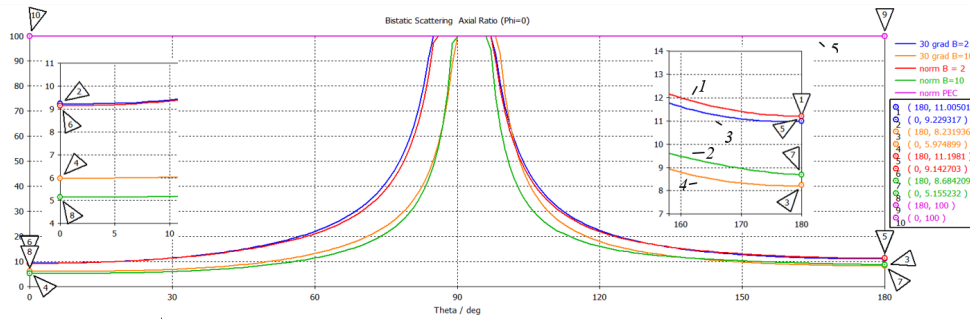


Рис. 8. Осевое отношение AR поляризационного эллипса при падении линейно-поляризованной ТЕМ-волны p -поляризации в точках сечения ($\varphi = 0^\circ$) главного лепестка 3D- e -Field в зависимости от θ : 1 – $B_0 = 2$ Тл, $f_{res} = 7,346$ ТГц, $\alpha = 0^\circ$ (5, 6); 2 – $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц, $\alpha = 0^\circ$ (7, 8); 3 – $B_0 = 2$ Тл, $f_{res} = 7,346$ ТГц, $\alpha = 30^\circ$ (1, 2); 4 – $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц, $\alpha = 30^\circ$ (3, 4); 5 – PEC, $f_{res} = 7,346$ ТГц, $\alpha = 0^\circ$ (9, 10)

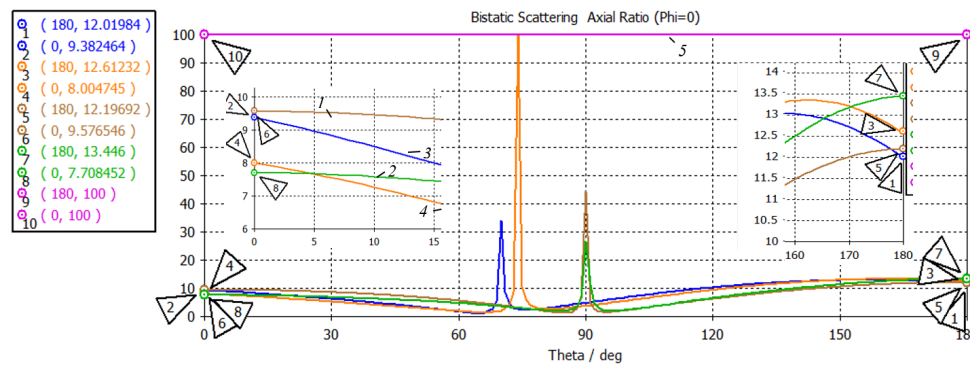


Рис. 9. Осевое отношение поляризационного эллипса AR в точках сечения ($\varphi = 0^\circ$) главного лепестка 3D- e -Field-диаграммы рассеяния в зависимости от θ , при падении ТЕМ-волны s -поляризации: 1 – $B_0 = 2$ Тл, $f_{res} = 7,346$ ТГц, $\alpha = 0^\circ$ (5, 6); 2 – $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц, $\alpha = 0^\circ$ (7, 8); 3 – $B_0 = 2$ Тл, $f_{res} = 7,346$ ТГц, $\alpha = 30^\circ$ (1, 2); 4 – $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц, $\alpha = 30^\circ$ (3, 4); 5 – PEC, $f_{res} = 7,346$ ТГц, $\alpha = 0^\circ$ (9, 10)

При приложении перпендикулярного магнитного поля осевое отношение в точках сечения ($\varphi = 0^\circ$) главного лепестка 3D- e -Field-диаграммы рассеяния при нормальном ($\alpha = 0^\circ$) падении ТЕМ-волны p -поляризации при $B_0 = 2$ Тл на частоте $f_{res} = 7,346$ ТГц (кривая 1 на рис. 8) равно: в точке 5 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая волна) $AR = 11,2$, в точке 6 ($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $AR = 9,1$. Если угол падения волны $\alpha = 30^\circ$, осевое отношение (кривая 3 на рис. 8) в точке 1 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая волна) $AR = 11$, в точке 2 ($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $AR = 9,2$. Следовательно, при $B_0 = 2$ Тл, $f_{res} = 7,346$ ТГц для $\alpha = 0^\circ$ и $\alpha = 30^\circ$ прошедшая и отраженная волны имеют эллиптическую поляризацию близкую к линейной (при этом поляризационный эллипс сильно вытянут).

При $B_0 = 10$ Тл на частоте $f_{res} = 10,614$ ТГц в случае нормального падения волны ($\alpha = 0^\circ$) осевое отношение AR (кривая 2 на рис. 12) равно: в точке 7 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая) $AR = 8,68$, в точке 8 ($\theta = 0^\circ$, отраженная вол-

на) $AR = 5,15$. Если угол падения волны $\alpha = 30^\circ$, осевое отношение (кривая 4 на рис. 8) в точке 3 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая волна) $AR = 8,23$, в точке 4 ($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $AR = 5,97$. Следовательно, при $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц для $\alpha = 0^\circ$ и $\alpha = 30^\circ$, прошедшая волна имеет эллиптическую поляризацию (при этом поляризационный эллипс вытянут), отраженная волна имеет эллиптическую поляризацию, близкую к круговой, причем в случае $\alpha = 0^\circ$ поляризационные МО-эффекты выражены сильнее.

Для сравнения в случае полоски из идеально проводящего металла (PEC) при $B_0 = 0$, $f_{res} = 7,346$ ТГц (кривая 5 на рис. 8) осевое отношение равно в точке 1 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая волна) $AR = 100$, в точке 2 ($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $AR = 100$, т.е. прошедшая и отраженная волны имеют строго линейную поляризацию.

При приложении перпендикулярного магнитного поля осевое отношение эллипса поляризации в точках сечения ($\phi = 0$) главного лепестка 3D-*e-Field*-диаграммы рассеяния (кривая 1 на рис. 9) при нормальном ($\alpha = 0^\circ$) падении TEM-волны s -поляризации при $B_0 = 2$ Тл, $f_{res} = 7,346$ ТГц равно: в точке 5 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая волна) $AR = 12,2$, в точке 6 ($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $AR = 9,57$. Если угол падения волны $\alpha = 30^\circ$, при $B_0 = 2$ Тл, $f_{res} = 7,346$ ТГц осевое отношение равно (кривая 3 на рис. 9): в точке 1 (прошедшая волна) ($\theta = 180^\circ$) $AR = 12$, в точке 2 (отраженная) волна ($\theta = 0^\circ$) $AR = 9,38$. Следовательно, при $B_0 = 2$ Тл, $f_{res} = 7,346$ ТГц для $\alpha = 0^\circ$ и $\alpha = 30^\circ$ прошедшая и отраженная волны имеют эллиптическую поляризацию, близкую к линейной (при этом поляризационный эллипс вытянут сильнее, чем в случае падающей волны p -поляризации).

При $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц ($\alpha = 0^\circ$) осевое отношение (кривая 2 на рис. 9) равно: в точке 7 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая волна) $AR = 13,4$, в точке 8 ($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $AR = 7,7$. Если угол падения волны $\alpha = 30^\circ$ при $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц осевое отношение равно (кривая 4 на рис. 13): в точке 3 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая волна) $AR = 12,6$, в точке 4 ($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $AR = 8$. Следовательно, при $B_0 = 10$ Тл, $f_{res} = 10,614$ ТГц для $\alpha = 0^\circ$ и $\alpha = 30^\circ$, прошедшая волна имеет эллиптическую поляризацию (при этом поляризационный эллипс вытянут), отраженная волна имеет эллиптическую поляризацию, близкую к круговой, причем в случае s -поляризации падающей волны поляризационные эффекты выражены слабее, чем p -поляризации.

Для сравнения в случае полоски из идеально проводящего металла (PEC) при $B_0 = 0$, $f_{res} = 7,346$ ТГц осевое отношение (кривая 5 на рис. 13): в точке 1 ($\theta = 180^\circ$, прошедшая волна) $AR = 100$, в точке 2 ($\theta = 0^\circ$, отраженная волна) $AR = 100$, т.е. прошедшая и отраженная волны имеют строго линейную поляризацию.

Таким образом, анализ 3D-*e-Field*-диаграмм рассеяния на элементе магнитно-смещенной графеновой метаповерхности (прямоугольной ГНЛ) падающих линейно-поляризованных ТГц-волн p - и s -поляризации показывает, что на частотах магнитоплазмонных резонансов для ТГц-волн p -поляризации наблюдаются магнитоплазмонные эффекты – появление и зависимость от величины внешнего магнитного поля B_0 другой – ортогональной по отношению к возбуждающей компоненты дифрагированного поля E_x , а для ТГц-волн s -поляризации – компоненты E_y , (несмотря на отсутствие магнитоплазмонного резонанса для ТГц-волны s -поляризации на этой частоте). Это вызывается

тем, что при приложении перпендикулярного магнитного поля принципиально новым является возникновение холловской проводимости графена (недиагональных компонентов тензора проводимости (1)), и эта анизотропия проводимости обуславливает эффект вращения плоскости поляризации прошедшей волны (эффект Фарадея), также поворота плоскости поляризации и появлении эллиптичности при отражении линейно поляризованной волны от поверхности (МО-эффект Керра) графена.

Как следует из результатов моделирования, возбуждение МППП вызывает сильные магнитоплазменные резонансы в графеновой метаповерхности и значительно усиливает МО-эффекты. При увеличении величины внешнего магнитного поля наблюдается возрастание угла фарадеевского вращения плоскости поляризации прошедшей волны и особенно угла поворота плоскости поляризации и эллиптичности отраженной волны как для p -поляризации, так и s -поляризации падающих ТГц-волн, причем в случае s -поляризации эффекты выражены сильнее.

Сильные магнитоплазменные резонансы в графеновых метаповерхностях с магнитным смещением потенциально позволяют использовать эти явления в широком ТГц-диапазоне для применения в таких устройствах, как изоляторы, ответвители, фазовращатели Фарадея, преобразователи поляризации, а также интегральных невзаимных плазмонных компонентах [11]. Полученные результаты могут проложить путь к разработке планарных сверхчувствительных датчиков, линз, невзаимных компонентов и систем визуализации в ТГц диапазоне [15].

Список литературы

1. Dapolito M., Tsuneto M., Zheng, W. [et al.]. Infrared nano-imaging of Dirac magnetoexcitons in graphene // *Nat. Nanotechnol.* 2023. Vol. 18. P. 1409–1415. doi: 10.1038/s41565-023-01488-y
2. Gusynin V. P., Sharapov S. G., Carbotte J. P. Magneto-optical conductivity in graphene // *Journal of Physics: Condensed Matter.* 2007. Vol. 19. P. 026222.
3. Crassee I., Levallois J., Walter A. [et al.]. Giant Faraday rotation in single- and multilayer graphene // *Nature Phys.* 2011. Vol. 7. P. 48–51. doi: 10.1038/nphys1816
4. Goerbig M. O. Electronic properties of graphene in a strong magnetic field // *Reviews of Modern Physics.* 2011. Vol. 83. P. 1193.
5. Кузьмин Д. А. Магнитооптические и плазмонные эффекты в наноструктурах на основе графена : дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Челябинск, 2022.
6. Ningning Wang, Linhui Ding, Weihua Wang. Chemical potential and magnetic field effects on graphene magnetoplasmons // *Physical Review B.* 2023. Vol. 108, № 8. P. 085406–085415.
7. Poumirol J. M., Liu P., Slipchenko T. [et al.]. Electrically controlled terahertz magneto-optical phenomena in continuous and patterned graphene // *Nature Communications.* 2017. Vol. 8. P. 14626. doi: 10.1038/ncomms14626
8. Ben Rhouma M., Guizal B., Bonnet P. [et al.]. Semi-analytical model for the analysis of a magnetically biased 1D subwavelength graphene-strip-grating // *Opt. Continuum.* 2022. Vol. 1. P. 1144–1156.
9. Amanatiadis S. A., Ohtani T., Kanai Y. [et al.]. Tuning of magnetosplamon coupling between graphene scatterers for the optimal design of adjustable metasurfaces // *AIP Advances.* 2024. Vol. 14. P. 025225. doi: 10.1063/9.0000808
10. Maha Benrhouma, Kofi Sényo Edee, Brahim Guizal. Modeling the Excitation of Graphene Magnetoplasmons in Periodic Grating of Magnetostatic Biased Graphene Rib-

- bons // PhotonIcs & Electromagnetics Research Symposium (PIERS), PIERS Academy. Prague, Czech Republic, 2023(hal-04172452).
11. Chamanara N., Caloz C. Graphene magnetoplasmonic principles, structures and devices // 2015 9th European Conference on Antennas and Propagation (EuCAP). Lisbon, Portugal, 2015. P. 1–2.
12. Falkovsky L. A. Quantum magneto-optics of graphite with trigonal warping // Physical Review B. 2011. Vol. 84 (11). P. 115414.
13. CST Microwave Studio. 2023. URL: <https://www.3ds.com/products/simulia>
14. Курушин А. А. Школа проектирования СВЧ устройств в CST STUDIO. М., 2016. 433 с.
15. Gomez-Diaz J. S., Alù A. Magnetically-biased graphene-based hyperbolic metasurfaces // 2016 IEEE International Symposium on Antennas and Propagation (APSURSI). Fajardo, PR, USA, 2016. P. 359–360. doi: 10.1109/APS.2016.7695888
16. Sounas D. L., Caloz C. Edge surface modes in magnetically biased chemically doped graphene strips // Applied Physics Letters. 2011. Vol. 99, № 23. P. 231902.

References

1. Dapolito M., Tsuneto M., Zheng, W. et al. Infrared nano-imaging of Dirac magnetoexcitons in graphene. *Nat. Nanotechnol.* 2023;18:1409–1415. doi: 10.1038/s41565-023-01488-y
2. Gusynin V.P., Sharapov S.G., Carbotte J.P. Magneto-optical conductivity in graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2007;19:026222.
3. Crassee I., Levallois J., Walter A. et al. Giant Faraday rotation in single- and multilayer graphene. *Nature Phys.* 2011;7:48–51. doi: 10.1038/nphys1816
4. Goerbig M.O. Electronic properties of graphene in a strong magnetic field. *Reviews of Modern Physics*. 2011;83:1193.
5. Kuz'min D.A. *Magneto-optical and plasmonic effects in graphene-based nanostructures*. DSc dissertation. Chelyabinsk, 2022. (In Russ.)
6. Ningning Wang, Linhui Ding, Weihua Wang. Chemical potential and magnetic field effects on graphene magnetoplasmons. *Physical Review B*. 2023;108(8):085406–085415.
7. Poumirol J.M., Liu P., Slipchenko T. et al. Electrically controlled terahertz magneto-optical phenomena in continuous and patterned graphene. *Nature Communications*. 2017;8:14626. doi: 10.1038/ncomms14626
8. Ben Rhouma M., Guizal B., Bonnet P. et al. Semi-analytical model for the analysis of a magnetically biased 1D subwavelength graphene-strip-grating. *Opt. Continuum*. 2022;1:1144–1156.
9. Amanatiadis S.A., Ohtani T., Kanai Y. et al. Tuning of magnetoplasmon coupling between graphene scatterers for the optimal design of adjustable metasurfaces. *AIP Advances*. 2024;14:025225. doi: 10.1063/9.0000808
10. Maha Benrhouma, Kofi Sényo Edee, Brahim Guizal. Modeling the Excitation of Graphene Magnetoplasmons in Periodic Grating of Magnetostatic Biased Graphene Ribbons. *PhotonIcs & Electromagnetics Research Symposium (PIERS), PIERS Academy*. Prague, Czech Republic, 2023(hal-04172452).
11. Chamanara N., Caloz C. Graphene magnetoplasmonic principles, structures and devices. *2015 9th European Conference on Antennas and Propagation (EuCAP)*. Lisbon, Portugal, 2015:1–2.
12. Falkovsky L.A. Quantum magneto-optics of graphite with trigonal warping. *Physical Review B*. 2011;84(11):115414.
13. CST Microwave Studio. 2023. Available at: <https://www.3ds.com/products/simulia>
14. Kurushin A.A. *Shkola proektirovaniya SVCh ustroystv v CST STUDIO = School of microwave design in CST STUDIO*. Moscow, 2016:433. (In Russ.)
15. Gomez-Diaz J.S., Alù A. Magnetically-biased graphene-based hyperbolic metasurfaces. *2016 IEEE International Symposium on Antennas and Propagation (APSURSI)*. Fajardo, PR, USA, 2016:359–360. doi: 10.1109/APS.2016.7695888

16. Sounas D.L., Caloz C. Edge surface modes in magnetically biased chemically doped graphene strips. *Applied Physics Letters*. 2011;99(23):231902.

Информация об авторах / Information about the authors

Галина Степановна Макеева

доктор физико-математических наук,
профессор, профессор кафедры
радиотехники и радиоэлектронных
систем, Пензенский государственный
университет (Россия, г. Пенза,
ул. Красная, 40)

E-mail: radiotech@pnzgu.ru

Galina S. Makeeva

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, professor
of the sub-department of radioengineering
and radioelectronic systems,
Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Михаил Сергеевич Никитин

студент, Пензенский государственный
университет (Россия, г. Пенза,
ул. Красная, 40)

Mikhail S. Nikitin

Student, Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 19.05.2025

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 10.06.2025

Принята к публикации / Accepted 22.06.2025

УДК 539.23; 539.216.1
doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-10

Фотодиэлектрический эффект, связанный с возбуждением примесных комплексов $A^+ + e$ в квазиульмерных структурах в условиях 1D-диссипативного туннелирования во внешнем магнитном поле

В. Д. Кревчик¹, А. В. Разумов², М. Б. Семенов³

^{1,2,3}Пензенский государственный университет, Пенза, Россия

¹physics@pnzgu.ru

Аннотация. *Актуальность и цели.* В настоящее время значительный интерес представляют способы бесконтактного управления диэлектрическими свойствами полупроводниковых наноструктур и окружающей их матрицы. Оптическая модуляция диэлектрической проницаемости в сочетании с управляемыми туннельными процессами дают возможность направленного изменения свойств низкоразмерных структур и, как следствие, оптимизации характеристик приборов полупроводниковой наноэлектроники. В этой связи полупроводниковые квантовые точки, туннельно-связанные с окружающей матрицей, представляют интерес, так как в таких структурах возможно образование примесных комплексов $A^+ + e$, фотовозбуждение которых может приводить к фотодиэлектрическому эффекту (ФДЭ). Цель работы заключается в теоретическом исследовании влияния туннельной прозрачности потенциального барьера на ФДЭ, связанный с возбуждением примесных комплексов $A^+ + e$ в квазиульмерных структурах во внешнем магнитном поле. *Материалы и методы.* Относительное изменение диэлектрической проницаемости (ОИДП) рассчитано в дипольном приближении. Кривые полевой зависимости ОИДП построены для InSb квантовой точки. Численные расчеты и построение графиков проводились с помощью систем численной математики Mathcad 14.0 и Wolfram Mathematica 10.2. *Результаты.* В дипольном приближении исследована зависимость ОИДП в квазиульмерной полупроводниковой наноструктуре от величины индукции внешнего магнитного поля и параметров 1D-диссипативного туннелирования. Выявлен дихроизм ФДЭ, связанный с наличием внешнего магнитного поля. Показано, что внешнее магнитное поле подавляет ФДЭ, что связано с усилением локализации электронной волновой функции в магнитном поле, а также с модификацией электронного адиабатического потенциала. Показано, что величина ОИДП зависит от параметров диссипативного 1D-туннелирования. *Выводы.* В магнитном поле возможно эффективное управление ФДЭ за счет модификации электронного адиабатического потенциала и электронной волновой функции путем варьирования параметров диссипативного туннелирования.

Ключевые слова: фотодиэлектрический эффект, магнитное поле, квантовая точка, адиабатическое приближение, примесный комплекс, относительная диэлектрическая проницаемость, 1D-диссипативное туннелирование, электронный адиабатический потенциал, квазиульмерная структура

Финансирование: работа выполнена при поддержке гранта Министерства науки и высшего образования Российской Федерации 0748-2020-0012.

Для цитирования: Кревчик В. Д., Разумов А. В., Семенов М. Б. Фотодиэлектрический эффект, связанный с возбуждением примесных комплексов $A^+ + e$ в квазиульмерных структурах в условиях 1D-диссипативного туннелирования во внешнем маг-

Photodielectric effect associated with excitation of impurity complexes $A^+ + e$ in quasi-zero-dimensional structures under conditions of 1D-dissipative tunneling in an external magnetic field

V.D. Krevchik¹, A.V. Razumov², M.B. Semenov³

^{1,2,3}Penza State University, Penza, Russia

¹physics@pnzgu.ru

Abstract. *Background.* Currently, methods of contactless control of the dielectric properties of semiconductor nanostructures and the matrix surrounding them are of considerable interest. Optical modulation of permittivity in combination with controlled tunneling processes makes it possible to change the properties of low-dimensional structures in a targeted manner and, as a consequence, optimize the characteristics of semiconductor nanoelectronic devices. In this regard, semiconductor quantum dots tunnel-coupled to the surrounding matrix are of interest, since in such structures the formation of impurity complexes $A^+ + e$ is possible, the photoexcitation of which can lead to the photodielectric effect (PDE). The purpose of the work is to theoretically study the influence of tunnel transparency of the potential barrier on the PDE associated with the excitation of impurity complexes $A^+ + e$ in quasi-zero-dimensional structures in an external magnetic field. *Materials and methods.* The relative change in permittivity (RCDP) is calculated in the dipole approximation. The field dependence curves of RCDP are plotted for an InSb quantum dot. Numerical calculations and plotting were performed using the numerical mathematics systems Mathcad 14.0 and Wolfram Mathematica 10.2. *Results.* The dependence of the RCDP in a quasi-zero-dimensional semiconductor nanostructure on the magnitude of the external magnetic field induction and the parameters of 1D dissipative tunneling was investigated in the dipole approximation. Dichroism of PDE associated with the presence of an external magnetic field was detected. It is shown that an external magnetic field suppresses PDE, which is associated with an increase in the localization of the electron wave function in the magnetic field, as well as with a modification of the electron adiabatic potential. It is shown that the magnitude of the RCDP depends on the parameters of dissipative 1D tunneling. *Conclusions.* In a magnetic field, effective control of the PDE is possible by modifying the electron adiabatic potential and the electron wave function by varying the parameters of dissipative tunneling.

Keywords: photodielectric effect, magnetic field, quantum dot, adiabatic approximation, impurity complex, relative permittivity, 1D-dissipative tunneling, electron adiabatic potential, quasi-zero-dimensional structure

Financing: the research was supported by the grant 0748-2020-0012 of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation.

For citation: Krevchik V.D., Razumov A.V., Semenov M.B. Photodielectric effect associated with excitation of impurity complexes $A^+ + e$ in quasi-zero-dimensional structures under conditions of 1D-dissipative tunneling in an external magnetic field. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences.* 2025;(2):134–165. (In Russ.). doi: 10.21685/2072-3040-2025-2-10

Введение

В настоящей работе проанализирована возможность регистрации возбужденных состояний примесных комплексов $A^+ + e$ по их вкладу в диэлектрическую проницаемость полупроводниковой квазиульмерной структуры

при внутризонных оптических переходах электронов во внешнем магнитном поле в условиях туннельного распада. Ранее [1–3] нами было показано, что фотовозбуждение примесных комплексов $A^+ + e$ за счет роста поляризуемости может приводить к заметному изменению диэлектрической проницаемости полупроводниковой квазиульмерной структуры – фотодиэлектрическому эффекту (ФДЭ). В данной работе мы учли влияние 1D-диссипативного туннелирования на ФДЭ в квазиульмерной структуре во внешнем магнитном поле. Учет 1D-диссипативного туннелирования дает дополнительные степени свободы для управления ФДЭ путем варьирования таких параметров диссипативного туннелирования, как температура, частота фононной моды и константа взаимодействия с контактной средой.

Цель настоящей работы заключается в теоретическом исследовании влияния внешнего магнитного поля и параметров 1D-туннельного распада на ФДЭ, связанный с возбуждением примесных комплексов $A^+ + e$ в квазиульмерных структурах, представляющих собой прозрачную диэлектрическую матрицу с синтезированными в ней полупроводниковыми квантовыми точками (КТ).

1. Энергия связи комплекса $A^+ + e$ в полупроводниковой квантовой точке в условиях фотовозбуждения во внешнем магнитном поле при наличии 1D-диссипативного туннелирования

Процесс фотовозбуждения примесного комплекса $A^+ + e$ связан с оптическими переходами электрона из основного состояния КТ в возбужденные состояния размерно-квантованной зоны проводимости во внешнем магнитном поле. Учет кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой, локализованной на A^0 -центре, приводит к тому, что в результате электронных переходов будет изменяться энергия связанного состояния дырки вследствие изменения электронного адиабатического потенциала, который при фиксированном радиусе КТ зависит только от начального и конечного состояния электрона.

Рассмотрим задачу о связанных состояниях дырки в примесном комплексе $A^+ + e$ в полупроводниковой сферически симметричной КТ во внешнем магнитном поле в условиях 1D-диссипативного туннелирования. В качестве модели удерживающего потенциала КТ используем потенциал бесконечно глубокой сферически симметричной ямы:

$$U(\rho) = \begin{cases} 0, & \text{если } \rho \leq R_0 \\ \infty, & \text{если } \rho \geq R_0, \end{cases} \quad (1)$$

где R_0 – радиус КТ.

Взаимодействие электрона, находящегося в основном состоянии КТ с дыркой, локализованной на A^0 -центре, будем рассматривать в рамках адиабатического приближения. В этом случае электронный потенциал $V_{n,l,m}(\vec{r})$, действующий на дырку, можно считать усредненным по движению электрона [4]:

$$V_{n,l,m}(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon} \int_0^{R_0} \frac{|\Psi_{n,l,m}(\vec{r}_e)|^2}{|\vec{r} - \vec{r}_e|} d\vec{r}_e, \quad (2)$$

где e – заряд электрона; ϵ – статическая диэлектрическая проницаемость материала КТ; ϵ_0 – электрическая постоянная; $\Psi_{n,l,m}(\vec{r}_e)$ – волновая функция электрона в КТ; n – радиальное квантовое число электрона; $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ – магнитное квантовое число; $l = 0, 1, 2, \dots$ – орбитальное квантовое число.

В первом порядке теории возмущений для основного состояния электрона ($m = 0, l = 0$) потенциал (2) может быть записан в виде [5]:

$$V_{n,0,0}(\rho, z) = -\frac{e^2\beta_n}{4\pi\epsilon_0\epsilon R_0} + \frac{m_h^*\omega_n^2}{2}(\rho^2 + z^2), \quad (3)$$

где $\beta_n = \gamma_0 - Ci(2\pi n) + \ln(2\pi n)$; $\hbar\omega_n = \left[\left(2\hbar^2\pi^2 n^2 e^2 \right) / \left(3m_h^* R_0^3 4\pi\epsilon_0\epsilon \right) \right]^{1/2}$; ρ, z – цилиндрические координаты; $\gamma_0 = 1,781$ – постоянная Эйлера; $Ci(x)$ – интегральный косинус; m_h^* – эффективная масса дырки.

Наложение действующего на дырку внешнего магнитного поля требует модификации формулы (3) путем введения слагаемого, содержащего циклотронную частоту $\omega_B = |e|B / m_h^*$, что в итоге приводит к следующему выражению для адиабатического потенциала (3):

$$V_{n,0,0}^B(\rho, z) = -\frac{e^2\beta_n}{4\pi\epsilon_0\epsilon R_0} + \frac{m_h^*}{2} \left(\omega_n^2 + \frac{\omega_B^2}{4} \right) \rho^2 + \frac{m_h^* z^2}{2} \omega_n^2. \quad (4)$$

Как известно [6], волновая функция и энергетический спектр, соответствующие потенциалу (4), имеют вид

$$\begin{aligned} \Psi_{n_1, m, n_2}(\rho, \varphi, z) = & \frac{1}{a_1^2} \left(\frac{n_1!}{2^{n_2+1} \pi^{\frac{3}{2}} n_2! (n_1 + |m|)! a_n} \right)^{\frac{1}{2}} \left(\frac{\rho^2}{2a_1^2} \right)^{\frac{|m|}{2}} \times \\ & \times \exp \left[- \left(\frac{\rho^2}{4a_1^2} + \frac{z^2}{2a_n^2} \right) \right] H_{n_2} \left(\frac{z}{a_n} \right) L_{n_1}^{|m|} \left(\frac{\rho^2}{2a_1^2} \right) \exp(im\varphi), \end{aligned} \quad (5)$$

где $n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots$ – квантовые числа, соответствующие уровням Ландау и уровням энергии осцилляторной сферически симметричной ямы; $a_1^2 = a_n^2 / \left(2\sqrt{1 + a_n^4 / (4a_B^4)} \right)$; $a_n = \sqrt{\hbar / (m_h^* \omega_n)}$ – характерная длина осцилля-

тора; $a_B = \sqrt{\hbar / (m^* \omega_B)}$ – магнитная длина; $H_n(x)$, $L_n^c(x)$ – полиномы Эрмита и Лаггера соответственно [7];

$$E_{n_1, m, n_2}^{n, 0, 0} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon R_0} \beta_n + \hbar\omega_n \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_n (2n_1 + |m| + 1) \sqrt{1 + \frac{\omega_B^2}{8\omega_n^2}} + \frac{\hbar\omega_B m}{2}. \quad (6)$$

Далее используем процедуру потенциала нулевого радиуса для получения дисперсионного уравнения, определяющего зависимость энергии связи примесного комплекса $A^+ + e$ в КТ от внешнего магнитного поля и параметров диссипативного туннелирования.

Короткодействующий потенциал примеси описывается в рамках модели потенциала нулевого радиуса

$$V_\delta(\rho, \varphi, z; \rho_a, \varphi_a, z_a) = \gamma \frac{\delta(\rho - \rho_a)}{\rho} \delta(\varphi - \varphi_a) \delta(z - z_a) \times \left[1 + (\rho - \rho_a) \frac{\partial}{\partial \rho} + (z - z_a) \frac{\partial}{\partial z} \right], \quad (7)$$

где $\gamma = 2\pi\hbar^2 / (\alpha m_h^*)$ – мощность потенциала нулевого радиуса; α определяется энергией E_i связанного состояния этого же A^+ -центра в объемном полупроводнике; ρ_a , z_a – координаты A^+ -центра в КТ.

Однодырочная функция Грина $G(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a, E_{\lambda h0})$ к уравнению Шредингера, соответствующая источнику в точке $\vec{r}_1 = (\rho_1, \varphi_1, z_1)$ и энергии $E_{\lambda h0}$, запишется в виде

$$G(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a, E_{\lambda h0}) = - \sum_{n_1, m, n_2} \frac{\Psi_{n_1, m, n_2}^{(n)*}(\rho_1, \varphi_1, z_1) \Psi_{n_1, m, n_2}^{(n)}(\rho, \varphi, z)}{-E_{\lambda h0} + E_{n_1, m, n_2}^{n, 0, 0} + i\hbar\Gamma_0}, \quad (8)$$

где $E_{\lambda h0}$ – энергия связи дырки, отсчитываемая от дна электронного адиабатического потенциала; Γ_0 – вероятность диссипативного туннелирования.

Используя выражения для одночастичных волновых функций (5) и энергетического спектра (6), для функции Грина $G(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a, E_{\lambda h0})$ в единицах эффективной боровской энергии $E_h = \hbar^2 / (2m_h^* a_h^2)$ и эффективного боровского радиуса дырки $a_h = 4\pi\epsilon_0\epsilon\hbar^2 / (m_h^* |e|^2)$, получим

$$\begin{aligned}
G(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a, E_{\lambda h}) = & \frac{-\beta_{h0}}{2\pi^{\frac{3}{2}} a_n^3 E_h} \exp \left[- \left(\frac{\rho^2 + \rho_a^2}{4a_1^2} + \frac{z^2 + z_a^2}{2a_n^2} \right) \right] \times \\
& \times \int_0^{+\infty} dt \exp \left[- \left(-\eta_{\lambda h0}^2 \beta_{h0} - \beta_0 + i\Gamma_0^* \beta_{h0} + w + 1 \right) t \right] \times \\
& \times \sum_{n_2=0}^{\infty} \left(\frac{e^{-t}}{2} \right)^{n_2} \frac{H_{n_2} \left(\frac{z_a}{a_n} \right) H_{n_2} \left(\frac{z}{a_n} \right)}{n_2!} \times \\
& \times \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \exp(-w|m|t) \left(\frac{\rho^2 \rho_a^2}{2a_1^2} \right)^{|m|} \exp \left(im \left((\varphi - \varphi_a) - \beta_h a^{*-2} t \right) \right) \times \\
& \times \sum_{n_1=0}^{+\infty} \frac{n_1!}{(n_1 + |m|)!} L_{n_1}^{|m|} \left(\frac{\rho^2}{2a_1^2} \right) L_{n_1}^{|m|} \left(\frac{\rho_a^2}{2a_1^2} \right) \exp[-2n_1 wt], \quad (9)
\end{aligned}$$

здесь $\eta_{\lambda h0}^2 = |E_{\lambda h0}|/E_h$; $\beta_0 = \beta_n e^2 / 4\pi\epsilon_0 \epsilon R_0^* a_h E_h$; $\Gamma_0^* = \hbar\Gamma_0 / E_h$; $R_0^* = R_0 / a_h$; $\beta_{h0} = E_h / \hbar\omega_n$; $a^* = a_B / a_h$; $w = \sqrt{1 + \beta_h^2 a^{*-4}} / 2$; $z_a^* = z_a / a_h$; $\rho_a^* = \rho_a / a_h$; a_h – эффективный борковский радиус дырки.

Далее, выполняя суммирования по квантовым числам n_1 , n_2 , m и выделяя расходящуюся часть (см. например [8]), получим

$$\begin{aligned}
G(\rho, \varphi, z, \rho_a, \varphi_a, z_a; E_{\lambda h0}) = & - \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\beta_{h0}} E_h a_h^3} \left\{ \exp \left[- \frac{(\rho_a^2 + \rho^2)w + z_a^2 + z^2}{4\beta_{h0} a_h^2} \right] \times \right. \\
& \times \int_0^{+\infty} dt \exp \left[- \left(-\beta_{h0} (\eta_{\lambda h0}^2 - i\Gamma_0^*) - \beta_0 + w + \frac{1}{2} \right) t \right] \times \\
& \times \left[w(1 - e^{-2t})^{-\frac{1}{2}} (1 - \exp[-2wt])^{-1} \times \right. \\
& \times \exp \left\{ \frac{2z_a z e^{-t} - (z_a^2 + z^2) e^{-2t}}{2\beta_{h0} a_h^2 (1 - e^{-2t})} \right\} \exp \left[- \exp[-2wt] \frac{(\rho_a^2 + \rho^2)w}{2\beta_{h0} a_h^2 (1 - \exp[-2wt])} \right] \times \\
& \times \exp \left[\frac{1}{2} \left(\exp \left[i(\varphi - \varphi_a) - \beta_{h0} a^{*-2} t \right] + \exp \left[-i(\varphi - \varphi_a) + \beta_{h0} a^{*-2} t \right] \right) \right] \times
\end{aligned}$$

$$\times \frac{w \rho_a \rho \exp[-wt]}{\beta_{h0} a_h^2 (1 - \exp[-2wt])} \left[-t^{-\frac{3}{2}} \exp \left[-\frac{(\rho - \rho_a)^2 w + (z - z_a)^2}{4\beta_{h0} a_h^2 t} \right] \right] + 2\sqrt{\pi\beta_{h0}} a_h \times$$

$$\exp \left[-\sqrt{\frac{(-2\beta_{h0} \eta_{\lambda h0}^2 - 2\beta_0 + i2\Gamma_0^* \beta_{h0} + 2w + 1) \left((\rho - \rho_a)^2 w + (z - z_a)^2 \right)}{2\beta_{h0} a_h^2}} \right] \left\{ \right.$$

$$\times \left. \frac{1}{\sqrt{(\rho - \rho_a)^2 w + (z - z_a)^2}} \right\}. \quad (10)$$

Энергия связанного состояния дырки в суммарном поле (включая магнитное поле, адиабатический потенциал и яму нулевого радиуса, находящуюся в точке ρ_a, Φ_a, z_a) является полюсом функции Грина и решением уравнения [8]

$$\alpha = \frac{2\pi\hbar^2}{m^*} (\hat{T}G)(\rho_a, \Phi_a, z_a, \rho_a, \Phi_a, z_a; E_{\lambda h}), \quad (11)$$

где

$$(\hat{T}G)(\rho_a, \Phi_a, z_a, \rho_a, \Phi_a, z_a; E_{\lambda h}) =$$

$$= \lim_{\substack{\rho \rightarrow \rho_a \\ \Phi \rightarrow \Phi_a \\ z \rightarrow z_a}} \left[1 + (\rho - \rho_a) \frac{\partial}{\partial \rho} + (z - z_a) \frac{\partial}{\partial z} \right] G(\rho, \Phi, z, \rho_a, \Phi_a, z_a; E_{\lambda h}).$$

Подставляя (10) в (11) и выполняя необходимые преобразования, получим дисперсионное уравнение дырки, локализованной на A^0 -центре в КТ в магнитном поле:

$$\sqrt{-\eta_{\lambda h0}^2 - \beta_0 \beta_{h0}^{-1} + (2\beta_{h0})^{-1} + w_0 \beta_{h0}^{-1} + i\Gamma_0^*} = \eta_i -$$

$$- \sqrt{\frac{2}{\pi\beta_{h0}}} \int_0^{+\infty} dt \exp \left[- \left(-\beta_{h0} \eta_{\lambda h0}^2 - \beta_0 + w_0 + i\beta_{h0} \Gamma_0^* + \frac{1}{2} \right) t \right] \times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{2t\sqrt{2t}} - w_0 (1 - e^{-2t})^{-\frac{1}{2}} (1 - \exp(-2w_0 t))^{-1} \exp \left[-\frac{z_a^{*2}}{2\beta_{h0}} \operatorname{ctg} \left(\frac{t}{2} \right) \right] \times \right.$$

$$\times \exp \left[-\frac{w_0 \rho_a^{*2} (1 + \exp(-2w_0 t) - 2\exp(-w_0 t) \operatorname{ch}(\beta_{h0} a^{*-2} t))}{2\beta_{h0} (1 - \exp(-2w_0 t))} \right] \left. \right\}, \quad (12)$$

где $\eta_{\lambda h0}^2 = E_{\lambda h0}/E_h$; $E_{\lambda h0}$ – энергия связи дырки, отсчитываемая от дна электронного адиабатического потенциала; E_h – эффективная боровская

энергия дырки; $\beta_0 = \beta_{h0} e^2 / 4\pi\epsilon_0 \epsilon R_0^* a_h E_h$; $R_0^* = R_0 / a_h$; $\beta_{h0} = E_h / \hbar \omega_n$;
 $w_0 = \sqrt{1 + \beta_{h0}^2 a^{*-4}} / 2$; $a^* = a_B / a_h$; $a_B = \sqrt{\hbar / (m_e^* \omega_B)}$ – магнитная длина;
 $\eta_i^2 = |E_i| / E_h$; E_i – энергия связанного состояния дырки, локализованной на
 таком же A^+ -центре в объемном полупроводнике; причем средняя энергия
 связи $\bar{E}_{\lambda h}$ квазистационарного A^+ -состояния определяется как $\bar{E}_{\lambda h} =$
 $= E_{0,0,0} - \text{Re } E_{\lambda h}$, $E_{0,0,0}$ – энергия основного состояния КТ, а уширение ква-
 зистационарного уровня $\Delta E = 2 \text{Im } E_{\lambda h}$.

В одноинстантонном приближении вероятность туннельного распада
 (диссипативного туннелирования) Γ_0 можно представить в виде

$$\Gamma_0 = B^* \exp(-S_B), \quad (13)$$

где B_0 и S_B определяются следующим образом (в боровских единицах) [9]:

$$B^* = \frac{E_d}{\hbar} \frac{2\sqrt{U_0^*}(1+b^*)\sqrt{\epsilon_T^*}}{\sqrt{\pi}} \times$$

$$\times \left\{ \frac{A^* \left[\beta_1^* \text{ch} \left(\frac{\beta_1^*}{2} \right) - 1 \right] + D^* \left[\beta_2^* \text{ch} \left(\frac{\beta_2^*}{2} \right) - 1 \right]}{\left\{ A^* \left[\frac{\beta_1^*}{2} \frac{\text{ch} \left(\frac{\beta_1^*}{2} - \tau_{01}^* \right)}{\text{sh} \left(\frac{\beta_1^*}{2} \right)} - 1 \right] + D^* \left[\frac{\beta_2^*}{2} \frac{\text{ch} \left(\frac{\beta_2^*}{2} - \tau_{02}^* \right)}{\text{sh} \left(\frac{\beta_2^*}{2} \right)} - 1 \right] \right\}^{1/2}} + \right.$$

$$+ \frac{A^* \left[1 - \frac{\beta_1^*}{2} \frac{\text{ch} \left(\frac{\beta_1^*}{2} - \tau_{01}^* \right)}{\text{sh} \left(\frac{\beta_1^*}{2} \right)} \right] + D^* \left[\frac{\beta_2^*}{2} \frac{\text{ch} \left(\frac{\beta_2^*}{2} - \tau_{02}^* \right)}{\text{sh} \left(\frac{\beta_2^*}{2} \right)} - 1 \right]}{\left\{ A^* \left[\frac{\beta_1^*}{2} \frac{\text{ch} \left(\frac{\beta_1^*}{2} - \tau_{01}^* \right)}{\text{sh} \left(\frac{\beta_1^*}{2} \right)} - 1 \right] + D^* \left[\frac{\beta_2^*}{2} \frac{\text{ch} \left(\frac{\beta_2^*}{2} - \tau_{02}^* \right)}{\text{sh} \left(\frac{\beta_2^*}{2} \right)} - 1 \right] \right\}^{1/2}}, \quad (14)$$

где

$$A^* = \omega_0^2 \frac{A}{2\gamma_1} = \frac{2\epsilon_L^* a^{*2} - \gamma_{\delta,p}^{(-)}}{(\gamma_{\delta,p}^{(-)} - \gamma_{\delta,p}^{(+)})\gamma_{\delta,p}^{(-)}}, D^* = \omega_0^2 \frac{D}{2\gamma_1} = \frac{2\epsilon_L^* a^{*2} - \gamma_{\delta,p}^{(+)}}{(\gamma_{\delta,p}^{(-)} - \gamma_{\delta,p}^{(+)})\gamma_{\delta,p}^{(+)}} ,$$

$$\beta_1^* = \sqrt{\gamma_1} \beta = \frac{\sqrt{2} \sqrt{U_0^*}}{a^* \epsilon_T^*} \sqrt{\gamma_{\delta,p}^{(-)}}, \quad \beta_2^* = \sqrt{\gamma_2} \beta = \frac{\sqrt{2} \sqrt{U_0^*}}{a^* \epsilon_T^*} \sqrt{\gamma_{\delta,p}^{(+)}} ,$$

$$\tau_{01}^* = 2\sqrt{\gamma_1} \tau_0 = \sqrt{\gamma_{\delta,p}^{(-)}} \tau_0^* \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \tau_{02}^* = 2\sqrt{\gamma_2} \tau_0 = \sqrt{\gamma_{\delta,p}^{(+)}} \tau_0^* \frac{1}{\sqrt{2}} .$$

Выражение для S_B имеет вид

$$S_B = a^* \sqrt{U_0^*} \left\{ \frac{1}{2} (b^* + 1)(3 - b^*) \tau_0^* - \frac{(b^* + 1)^2 (\tau_0^*)^2}{2\beta^*} - \frac{(b^* + 1)^2}{2\gamma'} \times \right.$$

$$\times \left[\frac{(1 - \tilde{x}_2')}{\sqrt{\tilde{x}_1'}} \left[\text{cth}(\beta^* \sqrt{\tilde{x}_1'}) - \frac{1}{\text{sh}(\beta^* \sqrt{\tilde{x}_1'})} \left\{ \text{ch}((\beta^* - \tau_0^*) \sqrt{\tilde{x}_1'}) - \text{ch}(\beta^* \sqrt{\tilde{x}_1'}) \right\} + \right. \right.$$

$$\left. \left. + \text{ch}((\beta^* - \tau_0^*) \sqrt{\tilde{x}_1'}) \right] - \frac{(1 - \tilde{x}_1')}{\sqrt{\tilde{x}_2'}} \left[\text{cth}(\beta^* \sqrt{\tilde{x}_2'}) - \frac{1}{\text{sh}(\beta^* \sqrt{\tilde{x}_2'})} \times \right. \right.$$

$$\left. \left. \times \left\{ \text{ch}((\beta^* - \tau_0^*) \sqrt{\tilde{x}_2'}) - \text{ch}(\beta^* \sqrt{\tilde{x}_2'}) \right\} + \text{ch}((\beta^* - \tau_0^*) \sqrt{\tilde{x}_2'}) \right] \right\} , \quad (15)$$

где

$$\tau_0^* = \text{arcsch} \left(\frac{1 - b^*}{1 + b^*} \text{sh} \beta^* \right) + \beta^* ; \quad b^* = \frac{b}{a} ; \quad \beta^* = \frac{\sqrt{U_0^*}}{a^* \epsilon_T^*} ; \quad \epsilon_T^* = \frac{kT}{E_d} ;$$

$$\gamma' = \sqrt{\left(\frac{\epsilon_L^{*2} a^{*2}}{4U_0^*} + 1 + \frac{\epsilon_c^4 a^{*2}}{4\epsilon_L^{*2} U_0^*} \right)^2 - \frac{\epsilon_L^{*2} a^{*2}}{U_0^*}} ; \quad \epsilon_c^* = \frac{h\sqrt{c}}{E_d} ; \quad \epsilon_L^* = \frac{h\omega_L}{E_d} ;$$

$$\tilde{x}_1' = \frac{1}{2} \left[\frac{\epsilon_L^{*2} a^{*2}}{4U_0^*} + 1 + \frac{\epsilon_c^4 a^{*2}}{4\epsilon_L^{*2} U_0^*} - \sqrt{\left(\frac{\epsilon_L^{*2} a^{*2}}{4U_0^*} + 1 + \frac{\epsilon_c^4 a^{*2}}{4\epsilon_L^{*2} U_0^*} \right)^2 - \frac{\epsilon_L^{*2} a^{*2}}{U_0^*}} \right] ;$$

$$\tilde{x}_2' = \frac{1}{2} \left[\frac{\epsilon_L^{*2} a^{*2}}{4U_0^*} + 1 + \frac{\epsilon_c^4 a^{*2}}{4\epsilon_L^{*2} U_0^*} + \sqrt{\left(\frac{\epsilon_L^{*2} a^{*2}}{4U_0^*} + 1 + \frac{\epsilon_c^4 a^{*2}}{4\epsilon_L^{*2} U_0^*} \right)^2 - \frac{\epsilon_L^{*2} a^{*2}}{U_0^*}} \right] .$$

Явный вид потенциала $V_{n,l,m}(\vec{r}_h)$, определяемого формулой (2), в случае, когда электрон находится в возбужденных состояниях КТ, был получен в работе [5]:

1) возбужденное p -состояние ($l = 1; m = 0$):

$$V_{n,1,0}^B(\rho, z) = -\frac{e^2 \beta_{n,0}}{4\pi \epsilon_0 \epsilon R_0} + \frac{m_h^*}{2} \left(\omega_{n,0}^2 + \frac{\omega_B^2}{4} \right) \rho^2 + \frac{m_h^* z^2}{2} \omega_{n,0}^2 , \quad (16)$$

2) возбужденное p -состояние ($l=1; m=\pm 1$):

$$V_{n,1,\pm 1}^B(\rho, z) = -\frac{e^2 \beta_{n,\pm 1}}{4\pi \epsilon_0 \epsilon R_0} + \frac{m_h^*}{2} \left(\omega_{n,\pm 1}^2 + \frac{\omega_B^2}{4} \right) \rho^2 + \frac{m_h^* z^2}{2} \omega_{n,\pm 1}^2, \quad (17)$$

где величины $\beta_{n,0}$, $\beta_{n,\pm 1}$, $\omega_{n,0}$ и $\omega_{n,\pm 1}$ определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \beta_{n,0} = & \frac{X_{n,1}}{30R_0^2 r_{h\min}^3 \left(3X_{n,1} \cos(X_{n,1}) + (X_{n,1}^2 - 3) \sin(X_{n,1}) \right)^2} \times \\ & \times \left[6r_{h\min}^5 X_{n,1}^3 - 3r_{h\min}^5 X_{n,1} - 15r_{h\min}^3 X_{n,1} R_0^2 + 40r_{h\min}^3 X_{n,1}^3 R_0^2 + \right. \\ & + 3r_{h\min}^5 X_{n,1} \cos(2X_{n,1}) + 15r_{h\min}^3 X_{n,1} R_0^2 \cos(2X_{n,1}) + \\ & + 30r_{h\min} X_{n,1} R_0^4 \cos\left(\frac{2r_{h\min} X_{n,1}}{R_0}\right) - 30r_{h\min}^3 X_{n,1}^3 R_0^2 Ci(2X_{n,1}) + \\ & + 30r_{h\min}^3 X_{n,1}^3 R_0^2 Ci\left(\frac{2r_{h\min} X_{n,1}}{R_0}\right) - 30r_{h\min}^3 X_{n,1}^3 R_0^2 \ln\left(\frac{r_{h\min}}{R_0}\right) + \\ & + 6r_{h\min}^5 X_{n,1}^2 \sin(2X_{n,1}) + 30r_{h\min}^3 X_{n,1}^2 R_0^2 \sin(2X_{n,1}) - \\ & \left. - 15r_{h\min}^2 X_{n,1}^2 R_0^3 \sin\left(\frac{2r_{h\min} X_{n,1}}{R_0}\right) - 15R_0^5 \sin\left(\frac{2r_{h\min} X_{n,1}}{R_0}\right) \right], \quad (18) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta_{n,\pm 1} = & \frac{X_{n,1}^2}{2 \left(3X_{n,1} \cos(X_{n,1}) + (X_{n,1}^2 - 3) \sin(X_{n,1}) \right)^2} \left[\cos(2X_{n,1}) - 1 + 2\gamma_0 X_{n,1}^2 - \right. \\ & \left. - 2X_{n,1}^2 - 2X_{n,1}^2 Ci(2X_{n,1}) + 2X_{n,1}^2 \ln(2X_{n,1}) + 2X_{n,1} \sin(2X_{n,1}) \right], \quad (19) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hbar \omega_{n,0} = & \left[\frac{\hbar^2 e^2 X_{n,1}}{m_h 5r_{h\min}^5 R_0^3 \left(3X_{n,1} \cos(X_{n,1}) + (X_{n,1}^3 - 3) \sin(X_{n,1}) \right)^2} \left(r_{h\min}^5 X_{n,1} + \right. \right. \\ & + 2r_{h\min}^5 X_{n,1}^3 - 5r_{h\min}^3 X_{n,1}^3 R_0^2 - r_{h\min}^5 X_{n,1} \cos(2X_{n,1}) + \\ & + 15r_{h\min} X_{n,1} R_0^2 \left(r_{h\min}^2 X_{n,1}^2 - 4R_0^2 \right) \cos\left(\frac{2r_{h\min} X_{n,1}}{R_0}\right) - 2r_{h\min}^5 X_{n,1}^2 \sin(2X_{n,1}) - \\ & \left. \left. - 45r_{h\min}^2 X_{n,1}^2 R_0^3 \sin\left(\frac{2r_{h\min} X_{n,1}}{R_0}\right) + 30R_0^5 \sin\left(\frac{2r_{h\min} X_{n,1}}{R_0}\right) \right) \right]^{1/2}, \quad (20) \end{aligned}$$

$$\hbar\omega_{n,\pm 1} = \left[\frac{\hbar^2 e^2 X_{n,1}^2 \left(2X_{n,1}^4 - 1 - 2X_{n,1}^2 + \cos(2X_{n,1}) + 2X_{n,1} \sin(2X_{n,1}) \right)}{m_h 10 R_0^3 \epsilon \left(3X_{n,1} \cos(X_{n,1}) + (X_{n,1}^3 - 3) \sin(X_{n,1}) \right)^2} \right]^{1/2}. \quad (21)$$

Таким образом, вид адиабатического потенциала в случае возбужденных состояний электрона (16) и (17) аналогичен (4). Для получения дисперсионного уравнения, определяющего зависимость энергии связи примесного комплекса $A^+ + e$ в КТ в случае возбуждения от внешнего магнитного поля и параметров диссипативного туннелирования, нет необходимости повторять уже приведенные выше рассуждения (7)–(12) и имеет смысл привести лишь конечный результат. Энергия связи дырки в комплексе $A^+ + e$ в случае, когда электрон находится в возбужденном состоянии КТ с учетом (16) и (17) будет определяться решением следующего трансцендентного уравнения:

$$\begin{aligned} & \sqrt{-\eta_{\lambda h(1,2)}^2 - \beta_{(1,2)} \beta_{h(1,2)}^{-1} + (2\beta_{h(1,2)})^{-1} + w_{(1,2)} \beta_{h(1,2)} + i\Gamma_0^*} = \\ & = \eta_i - \sqrt{\frac{2}{\pi \beta_{h(1,2)}}} \int_0^{+\infty} dt \exp \left[- \left(-\beta_{h(1,2)} \eta_{\lambda h(1,2)}^2 - \beta_{(1,2)} + w_{(1,2)} + i\beta_{h(1,2)} \Gamma_0^* + \frac{1}{2} \right) t \right] \times \\ & \times \left[\frac{1}{2t\sqrt{2t}} - w_{(1,2)} (1 - e^{-2t})^{-\frac{1}{2}} (1 - \exp(-2w_{(1,2)}t))^{-1} \exp \left[-\frac{z_a^{*2}}{2\beta_{h(1,2)}} \operatorname{ctg} \left(\frac{t}{2} \right) \right] \right] \times \\ & \times \exp \left[-\frac{w_{(1,2)} \rho_a^{*2}}{2\beta_{h(1,2)}} \times \frac{1 + \exp(-2w_{(1,2)}t) - 2\exp(-w_{(1,2)}t) \operatorname{ch}(\beta_{h(1,2)} a^{*-2}t)}{1 - \exp(-2w_{(1,2)}t)} \right], \quad (22) \end{aligned}$$

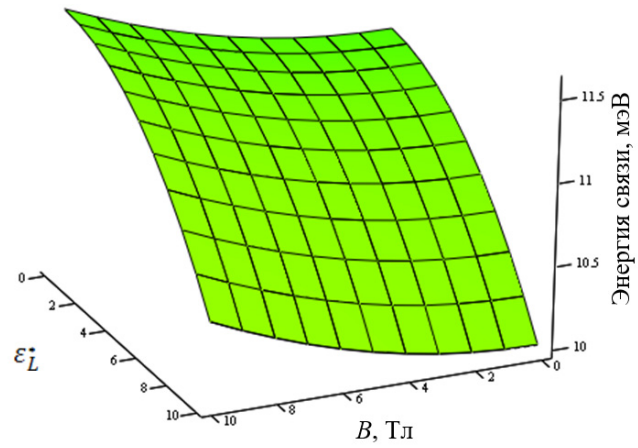
где

$$\eta_{\lambda h1}^2 = E_{\lambda h1}/E_h; \quad \eta_{\lambda h2}^2 = E_{\lambda h2}/E_h; \quad \beta_1 = \beta_{n,0} e^2 / 4\pi\epsilon_0 \epsilon R_0^* a_h E_h;$$

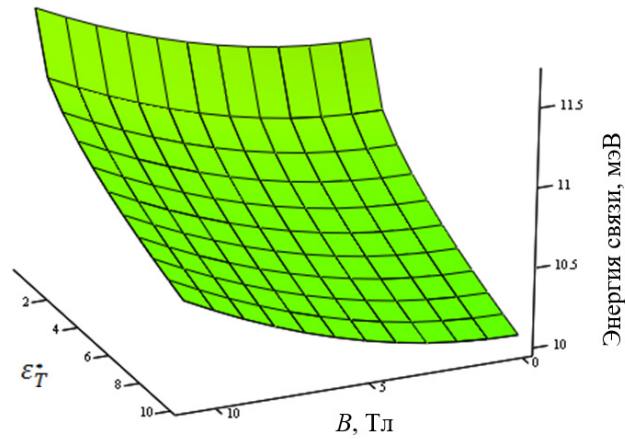
$$\beta_2 = \beta_{n,\pm 1} e^2 / 4\pi\epsilon_0 \epsilon R_0^* a_h E_h; \quad \beta_{h1} = E_h / \hbar\omega_{n,0}; \quad \beta_{h2} = E_h / \hbar\omega_{n,\pm 1};$$

$$w_1 = \sqrt{1 + \beta_{h1}^2 a^{*-4}} / 2; \quad w_2 = \sqrt{1 + \beta_{h2}^2 a^{*-4}} / 2.$$

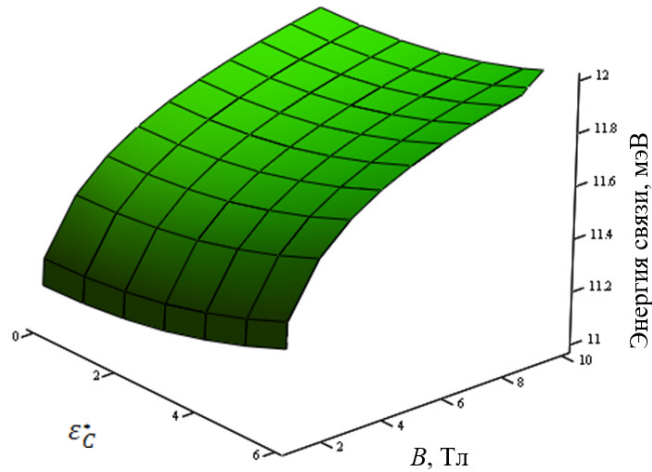
На рис. 1 приведена зависимость средней энергии связи примесного комплекса $A^+ + e$ в InSb КТ, полученная путем численных расчетов из формулы (12), от величины внешнего магнитного поля и параметров диссипативного туннелирования. Из рис. 1, **a, б** видно, что с ростом параметров ϵ_L^* и ϵ_T^* величина $\bar{E}_{\lambda h}$ уменьшается, а с увеличением «вязкости» контактной среды (параметр ϵ_C^*) величина $\bar{E}_{\lambda h}$ растет из-за уменьшения вероятности диссипативного туннелирования.



a)



б)



в)

Рис. 1. Зависимость средней энергии связи квазистационарного A^+ -состояния от величины внешнего магнитного поля B и параметров 1D-диссипативного туннелирования при $R_0 = 70$ нм ; $\eta_i = 4$:

$$a - \varepsilon_T^* = 1, \varepsilon_C^* = 1; \quad б - \varepsilon_L^* = 1, \varepsilon_C^* = 1; \quad в - \varepsilon_T^* = 1, \varepsilon_L^* = 1$$

2. Расчет матричных элементов фотовозбуждения комплексов $A^+ + e$ в КТ в случаях продольной и поперечной по отношению к направлению внешнего магнитного поля поляризации света

Рассмотрим далее процесс фотовозбуждения комплексов $A^+ + e$ в КТ, синтезированных в прозрачной диэлектрической матрице, в магнитном поле. Будем считать, что A^+ -центр локализован в точке $\vec{R}_a = (0, 0, 0)$. Энергетический спектр электрона в магнитном поле во втором порядке теории возмущений будет определяться выражением вида

$$E = E^{(0)} + V_{n,l,m;n,l,m} + \sum_{n'l'm'} \frac{R_0^{*2} |V_{n,l,m;n',l',m'}|^2}{\pi^2 - \tilde{X}_{n',l'}^2}, \quad (23)$$

здесь $E^{(0)} = \tilde{X}_{n,l}^2 E_h / R_0^{*2}$ – нулевое приближение к энергии электрона в размерно-квантованной зоне; $V_{n,l,m;n',l',m'}$ – матричный элемент оператора возмущения [10]:

$$\begin{aligned} V_{n,l,m;n'l'm'} = & \sum_{n'=0}^{\infty} \left\{ \frac{\hbar \omega_B m}{4\pi (\tilde{X}_{n,l}^2 - \tilde{X}_{n',l}^2) J_{l+\frac{3}{2}}(\tilde{X}_{n,l}) J_{l+\frac{3}{2}}(\tilde{X}_{n',l})} \times \right. \\ & \times \left[R_0^* \tilde{X}_{n',l} J_{l+\frac{1}{2}}(R_0^* \tilde{X}_{n',l}) J_{l+\frac{3}{2}}(R_0^* \tilde{X}_{n,l}) - \right. \\ & \left. - R_0^* \tilde{X}_{n,l} J_{l+\frac{1}{2}}(R_0^* \tilde{X}_{n,l}) J_{l+\frac{3}{2}}(R_0^* \tilde{X}_{n',l}) \right] + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k m_h^* \omega_B^2 R_0^* \left(\tilde{X}_{n,l}^{l+\frac{3}{2}} \right)^{2k+1}}{k! \Gamma\left(l+k+\frac{5}{2}\right) 2^{l+4+2k}} \times \\ & \times \left[\sqrt{\frac{(l-m+4)(l-m+3)(l-m+2)(l-m+1)}{(2l+1)(2l-1)^2(2l-3)}} \frac{F\left(-k, -l-k-\frac{3}{2}, l+\frac{5}{2}, \frac{\tilde{X}_{n',l-2}^2}{\tilde{X}_{n,l}^2}\right)}{(2l+2k+2)\Gamma\left(l+\frac{1}{2}\right)} - \right. \\ & \left. - \frac{2F\left(-k, -l-k-\frac{3}{2}, l+\frac{5}{2}, \frac{\tilde{X}_{n',l}^2}{\tilde{X}_{n,l}^2}\right)}{(2l+3)(2l-1)(2l+2k+4)} \sqrt{(l-m)(l-m-1)(l+m+2)(l+m+1)} + \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{F\left(-k, -l-k-\frac{3}{2}, l+\frac{5}{2}, \frac{\tilde{X}_{n',l+2}^2}{\tilde{X}_{n,l}^2}\right)}{2l+2k+6} \times \\
& \times \sqrt{\frac{(l+m+4)(l+m+3)(l+m+2)(l+m+1)}{(2l+5)(2l+3)^2(2l+1)}} \Bigg\}. \quad (24)
\end{aligned}$$

Учтем, что волновая функция дырки, локализованной на A^+ -центре, запишется в виде

$$\begin{aligned}
\Psi_{h(0,1,2)}(\rho, \varphi, z) &= C_{(0,1,2)} \exp\left(-\frac{w_{(0,1,2)}\rho^2 + z^2}{4\beta_{h(0,1,2)}a_h^2}\right) \times \\
&\times \int_0^{+\infty} dt \exp\left[-\left(-\beta_{h(0,1,2)}\eta_{\lambda h(0,1,2)}^2 - \beta_{(0,1,2)} + w_{(0,1,2)} + i\beta_{h(0,1,2)}\Gamma_0^* + \frac{1}{2}\right)t\right] \times \\
&\times (1-e^{-2t})^{-\frac{1}{2}} \left(1 - \exp[-2w_{(0,1,2)}t]\right)^{-1} \exp\left\{-\frac{z^2 \exp[-2t]}{2\beta_{h(0,1,2)}a_h^2(1-\exp[-2t])}\right\} \times \\
&\times \exp\left[-\frac{w_{(0,1,2)}\rho^2 \exp[-2w_{(0,1,2)}t]}{4\beta_{h(0,1,2)}a_h^2(1-\exp[-2w_{(0,1,2)}t])}\right], \quad (25)
\end{aligned}$$

где $C_{(0,1,2)}$ – нормировочный множитель, определяемый выражением вида

$$\begin{aligned}
C_{(0,1,2)} &= \left[-2^{-\frac{1}{2}} \pi^{-\frac{3}{2}} a_h^3 \frac{\beta_{h(0,1,2)}^{3/2} w_{(0,1,2)} \Gamma\left(\frac{1}{2} - w_{(0,1,2)}\right)}{\left(\frac{\beta_{h(0,1,2)}\left(-\eta_{\lambda h(0,1,2)}^2 + i\Gamma_0^*\right) + w_{(0,1,2)}\right) + \frac{1}{4}} \right]^2 \times \\
&\times \Gamma^{-1} \left(\frac{\beta_{h(0,1,2)}\left(-\eta_{\lambda h(0,1,2)}^2 + i\Gamma_0^*\right) - w_{(0,1,2)}}{2} + \frac{3}{4} \right) \times \\
&\times \Gamma \left(\frac{\beta_{h(0,1,2)}\left(-\eta_{\lambda h(0,1,2)}^2 + i\Gamma_0^*\right) + w_{(0,1,2)}}{2} + \frac{5}{4} \right) \times
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \left[\left(\frac{\beta_{h(0,1,2)} \left(-\eta_{\lambda h(0,1,2)}^2 + i\Gamma_0^* \right) + w_{(0,1,2)}}{2} + \frac{1}{4} \right) \times \right. \\ & \times \left[\left[\Psi \left(\frac{\beta_{h(0,1,2)} \left(-\eta_{\lambda h(0,1,2)}^2 + i\Gamma_0^* \right) + w_{(0,1,2)}}{2} + \frac{5}{4} \right) - \right. \right. \\ & \left. \left. - \Psi \left(\frac{\beta_{h(0,1,2)} \left(-\eta_{\lambda h(0,1,2)}^2 + i\Gamma_0^* \right) - w_{(0,1,2)}}{2} + \frac{3}{4} \right) \right] - 1 \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (26)$$

Далее рассмотрим случаи продольной $\vec{e}_\lambda \uparrow \uparrow \vec{B}$ и поперечной $\vec{e}_\lambda \perp \vec{B}$ к направлению внешнего магнитного поля поляризации света. Эффективный гамильтониан взаимодействия $\hat{H}_{\text{int } B}$ с полем световой волны, характеризуемой волновым вектором $\vec{q}_s$ (для продольной поляризации), $\vec{q}_t$ (для поперечной поляризации) и единичным вектором поляризации $\vec{e}_\lambda$ с полем световой волны запишется для случая, когда $\vec{e}_\lambda \uparrow \uparrow \vec{B}$:

$$\hat{H}_{\text{int } B}^{(s)} = -i\hbar\lambda_0 \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\alpha^*}{m^{*2}\omega}} I_0 \exp(i\vec{q}_s \vec{r}) (\vec{e}_{\lambda s} \nabla_{\vec{r}}), \quad (27)$$

и случая, когда $\vec{e}_\lambda \perp \vec{B}$:

$$\hat{H}_{\text{int } B}^{(t)} = -i\hbar\lambda_0 \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2\alpha^*}{m^{*2}\omega}} I_0 \exp(i\vec{q}_t \vec{r}) \left((\vec{e}_{\lambda t} \nabla_{\vec{r}}) - \frac{i|e|B}{2\hbar} [\vec{e}_{\lambda t}, \vec{r}]_z \right), \quad (28)$$

здесь λ_0 – коэффициент локального поля; α^* – постоянная тонкой структуры с учетом статической относительной диэлектрической проницаемости ϵ ; I_0 – интенсивность света с частотой; $\nabla_{\vec{r}}$ – оператор Гамильтона.

Матричный элемент $M_{f',f}^{(s)}$, определяющий величину силы осциллятора дипольных оптических переходов электрона и дырки из основного состояния $\Phi_{in}(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$ примесного комплекса в возбужденные состояния $\Phi_{out}(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$ КТ, запишется как

$$\begin{aligned} M_{f',f}^{(s)} &= i \sqrt{\frac{2\pi\alpha^* I_0}{\omega}} (E_{n,1,0} - E_{1,0,0} - (E_{\lambda h1} - E_{\lambda h})) \times \\ &\times \left\langle \Phi_{out}^{(s)}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \left| (\vec{e}_{\lambda s}, \vec{r}_e) \right| \Phi_{in}^{(s)}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \right\rangle = \end{aligned}$$

$$= i \sqrt{\frac{2\pi\alpha^* I_0}{\omega}} (E_{n,1,0} - E_{1,0} - (E_{\lambda h1} - E_{\lambda h})) \times \\ \times \langle \Psi_{h1}(\vec{r}_h) | \Psi_h(\vec{r}_h) \rangle \langle \Psi_{n,l,m}(\vec{r}_e) | (\vec{e}_{\lambda s}, \vec{r}_e) | \Psi_{1,0,0}(\vec{r}_e) \rangle. \quad (29)$$

В дипольном приближении матричный элемент $M_{f',f}^{(t)}$ рассматриваемых оптических переходов в случае поперечной по отношению к направлению внешнего магнитного поля поляризации можно представить в виде

$$M_{f',f}^{(t)} = \lambda_0 \sqrt{\frac{2\pi\alpha^* I_0}{\omega}} \left[i (E_{n,1,\pm 1} - E_{1,0} - (E_{\lambda h2} - E_{\lambda h})) \times \right. \\ \times \langle \Phi_{out}^{(t)}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) | (\vec{e}_{\lambda t}, \vec{r}_e) | \Phi_{in}^{(t)}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \rangle - \\ \left. - \frac{\hbar\omega_B}{2} \langle \Phi_{out}^{(t)}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) | [\vec{e}_{\lambda t}, \vec{r}_e]_z | \Phi_{in}^{(t)}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \rangle \right]. \quad (30)$$

В результате расчета для матричных элементов (29) и (30) получим:

а) для $M_{f',f}^{(s)}$:

$$M_{f',f}^{(s)} = i \sqrt{\frac{2\pi\alpha^* I_0}{\omega}} \left(\frac{k(X_{n,1}^2 - \pi^2)}{(\bar{R}_0^* u)^2} - (E_{\lambda h(1,2)} - E_{\lambda h0}) + \right. \\ \left. + \bar{R}_0^{*2} \sum_{n'l'm'} \frac{|V_{n,1,(0,\pm 1);n',l',m'}|^2 - |V_{1,0,0;n',l',m'}|^2}{(\pi^2 - \tilde{X}_{n',l'}^2) E_h} \right) \times \left[2^{-1} \pi^{-3} a_h^6 \beta_{h0}^{\frac{3}{2}} \beta_{h1}^{\frac{3}{2}} w_0 w_1 \times \right. \\ \times \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - w\right) \Gamma\left(\frac{\beta_h(-\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{5}{4}\right)}{\left(\frac{\beta_{h0}(-\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{1}{4}\right)^2 \Gamma\left(\frac{\beta_{h0}(-\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) - w_0}{2} + \frac{3}{4}\right)} \times \\ \times \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - w_1\right) \Gamma\left(\frac{\beta_{h1}(-\eta_{\lambda h1}^2 + i\Gamma_0^*) + w_1}{2} + \frac{5}{4}\right)}{\left(\frac{\beta_{h1}(-\eta_{\lambda h1}^2 + i\Gamma_0^*) + w_1}{2} + \frac{1}{4}\right)^2 \Gamma\left(\frac{\beta_{h1}(-\eta_{\lambda h1}^2 + i\Gamma_0^*) - w_1}{2} + \frac{3}{4}\right)} \times$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left[\left(\frac{\beta_{h1}(-\eta_{\lambda h1}^2 + i\Gamma_0^*) + w_1}{2} + \frac{1}{4} \right) \times \right. \\
 & \times \left[\Psi \left(\frac{\beta_{h1}(-\eta_{\lambda h1}^2 + i\Gamma_0^*) + w_1}{2} + \frac{5}{4} \right) - \Psi \left(\frac{\beta_{h1}(-\eta_{\lambda h1}^2 + i\Gamma_0^*) - w_1}{2} + \frac{3}{4} \right) \right] - 1 \Big] \times \\
 & \times \left[\left(\frac{\beta_{h0}(-\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{1}{4} \right) \times \right. \\
 & \times \left[\Psi \left(\frac{\beta_{h0}(-\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{5}{4} \right) - \Psi \left(\frac{\beta_{h0}(-\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) - w_0}{2} + \frac{3}{4} \right) \right] - 1 \Big]^{-\frac{1}{2}} \times \\
 & \times \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \exp \left[- \left(\beta_{h0}(-\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) - \beta_0 + w_0 + \frac{1}{2} \right) t - \right. \\
 & \quad \left. - \left(\beta_{h1}(-\eta_{\lambda h1}^2 + i\Gamma_0^*) - \beta_1 + w_1 + \frac{1}{2} \right) t' \right] dt dt' \times \\
 & \times (1 - e^{-2t})^{-\frac{1}{2}} (1 - e^{-2t'})^{-\frac{1}{2}} (1 - \exp[-2w_0 t])^{-1} (1 - \exp[-2w_1 t'])^{-1} \times \\
 & \times \frac{\sqrt{\pi} R_0^*}{\sqrt{3} (\tilde{X}_{1,0}^2 - \tilde{X}_{n,1}^2)} \times \frac{\left[\operatorname{erf} \left(-\frac{R_0^*}{2} \left(\frac{1 + \exp(-2t)}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2t))} + \frac{1 + \exp(-2t')}{\beta_{h1}(1 - \exp(-2t'))} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \right]}{\left(\frac{1 + \exp(-2t)}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2t))} + \frac{1 + \exp(-2t')}{\beta_{h1}(1 - \exp(-2t'))} \right)^{\frac{1}{2}}} \times \\
 & \times \left[2\sqrt{\pi} \frac{\left[\operatorname{erf} \left(\left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2wt))} + \frac{w_1}{\beta_{h1}(1 - \exp(-2w_1 t'))} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{R_0^*}{2} \right) \right]}{\left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2wt))} + \frac{w_1}{\beta_{h1}(1 - \exp(-2w_1 t'))} \right)^{\frac{3}{2}}} - \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -2R_0^* \frac{\exp \left[- \left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1-\exp(-2wt))} + \frac{w_1}{\beta_{h1}(1-\exp(-2w_1 t'))} \right) \frac{R_0^{*2}}{4} \right]}{\left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1-\exp(-2w_0 t))} + \frac{w_1}{\beta_{h1}(1-\exp(-2w_1 t'))} \right)} \Bigg] \times \\
& \times \left(R_0^* \tilde{X}_{n,1} J_{\frac{3}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{n,1} \right) J_{\frac{3}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{1,0} \right) - R_0^* \tilde{X}_{1,0} J_{\frac{1}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{1,0} \right) J_{\frac{5}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{n,1} \right) \right), \quad (31)
\end{aligned}$$

здесь $erf(x)$ – функция ошибок.

Интегралы в (31) имеют следующий вид:

$$\begin{aligned}
& \int_0^{R_0^*} \exp \left[- \left(\frac{1+\exp(-2t)}{\beta_{h0}(1-\exp(-2t))} + \frac{1+\exp(-2t')}{\beta_{h1}(1-\exp(-2t'))} \right) \frac{z^{*2}}{4} \right] dz^* = \\
& = \sqrt{\pi} \frac{\operatorname{erf} \left[- \frac{R_0^*}{2} \left(\frac{1+\exp(-2t)}{\beta_{h0}(1-\exp(-2t))} + \frac{1+\exp(-2t')}{\beta_{h1}(1-\exp(-2t'))} \right)^{\frac{1}{2}} \right]}{\left(\frac{1+\exp(-2t)}{\beta_{h0}(1-\exp(-2t))} + \frac{1+\exp(-2t')}{\beta_{h1}(1-\exp(-2t'))} \right)^{\frac{1}{2}}}, \quad (32) \\
& \int_0^{R_0^*} r_h^{*2} \exp \left[- \left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1-\exp(-2wt))} + \frac{w_1}{\beta_{h1}(1-\exp(-2w_1 t'))} \right) \frac{r_h^{*2}}{4} \right] dr_h^* = \\
& = 2\sqrt{\pi} \frac{\operatorname{erf} \left[\left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1-\exp(-2wt))} + \frac{w_1}{\beta_{h1}(1-\exp(-2w_1 t'))} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{R_0^*}{2} \right]}{\left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1-\exp(-2wt))} + \frac{w_1}{\beta_{h1}(1-\exp(-2w_1 t'))} \right)^{\frac{3}{2}}} - \\
& - 2R_0^* \frac{\exp \left[- \left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1-\exp(-2wt))} + \frac{w_1}{\beta_{h1}(1-\exp(-2w_1 t'))} \right) \frac{R_0^{*2}}{4} \right]}{\left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1-\exp(-2wt))} + \frac{w_1}{\beta_{h1}(1-\exp(-2w_1 t'))} \right)}. \quad (33) \\
& \int_0^{R_0^*} dr_e^* r_e^* J_{\frac{3}{2}} \left(\frac{\tilde{X}_{1,0}}{R_0^*} r^* \right) J_{\frac{5}{2}} \left(\frac{\tilde{X}_{n,1}}{R_0^*} r_e^* \right) = \frac{R_0^*}{(\tilde{X}_{1,0}^2 - \tilde{X}_{n,1}^2)} \times
\end{aligned}$$

$$\times \left[R_0^* \tilde{X}_{n,1} J_{\frac{3}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{n,1} \right) J_{\frac{3}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{1,0} \right) - R_0^* \tilde{X}_{1,0} J_{\frac{1}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{1,0} \right) J_{\frac{5}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{n,1} \right) \right]. \quad (34)$$

Интегрирование по угловым переменным в (31) дает

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \cos \theta Y_{l,m}(\theta, \varphi) Y_{0,0}(\theta, \varphi) = \frac{\delta_{m,0} \delta_{l,1}}{\sqrt{3}} \quad (35)$$

и

$$\begin{aligned} M_{f',f}^{(t)} = & i\lambda_0 \sqrt{\frac{\pi \alpha^* I_0}{3\omega}} \times \frac{R_0^*}{\tilde{X}_{1,0}^2 - \tilde{X}_{n,1}^2} \left(E_{n,1,\pm 1} - E_{1,0} - (E_{\lambda h 2} - E_{\lambda h 0}) + \frac{\hbar \omega_B}{2} \right) \times \\ & \times \left[R_0^* \tilde{X}_{n,1} J_{\frac{3}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{n,1} \right) J_{\frac{3}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{1,0} \right) - R_0^* \tilde{X}_{1,0} J_{\frac{1}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{1,0} \right) J_{\frac{5}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{n,1} \right) \right] \times \\ & \times \left[2^{-1} \pi^{-3} a_h^6 \frac{\beta_{h0}^{\frac{3}{2}} \beta_{h2}^{\frac{3}{2}} w_0 w_2 \Gamma\left(\frac{1}{2} - w_0\right) \Gamma\left(\frac{\beta_{h0}(\eta_{h\lambda 0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{5}{4}\right)}{\left(\frac{\beta_{h0}(\eta_{h\lambda 0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{1}{4}\right)^2 \Gamma\left(\frac{\beta_{h0}(\eta_{h\lambda 0}^2 + i\Gamma_0^*) - w_0}{2} + \frac{3}{4}\right)} \times \right. \\ & \times \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - w_2\right) \Gamma\left(\frac{\beta_{h2}(\eta_{h\lambda 2}^2 + i\Gamma_0^*) + w_2}{2} + \frac{5}{4}\right)}{\left(\frac{\beta_{h2}(\eta_{h\lambda 2}^2 + i\Gamma_0^*) + w_2}{2} + \frac{1}{4}\right)^2 \Gamma\left(\frac{\beta_{h2}(\eta_{h\lambda 2}^2 + i\Gamma_0^*) - w_2}{2} + \frac{3}{4}\right)} \times \\ & \times \left[\left(\frac{\beta_{h2}(\eta_{h\lambda 2}^2 + i\Gamma_0^*) + w_2}{2} + \frac{1}{4} \right) \times \right. \\ & \times \left. \left[\Psi\left(\frac{\beta_{h2}(\eta_{h\lambda 2}^2 + i\Gamma_0^*) + w_2}{2} + \frac{5}{4}\right) - \Psi\left(\frac{\beta_{h2}(\eta_{h\lambda 2}^2 + i\Gamma_0^*) - w_2}{2} + \frac{3}{4}\right) \right] - 1 \right]^{-\frac{1}{2}} \times \\ & \times \left[\left(\frac{\beta_h(\eta_{\lambda h}^2 + i\Gamma_0^*) + w}{2} + \frac{1}{4} \right) \times \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left[\Psi \left(\frac{\beta_{h0} (\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{5}{4} \right) - \Psi \left(\frac{\beta_{h0} (\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) - w_0}{2} + \frac{3}{4} \right) \right] - 1 \Bigg]^{-\frac{1}{2}} \times \\
& \times \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \exp \left[- \left(\beta_{h0} (\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) - \beta_0 + w_0 + \frac{1}{2} \right) t - \right. \\
& \quad \left. - \left(\beta_{h2} (\eta_{\lambda h2}^2 + i\Gamma_0^*) - \beta_2 + w_2 + \frac{1}{2} \right) t' \right] dt dt' \times \\
& \times (1 - e^{-2t})^{-\frac{1}{2}} (1 - e^{-2t'})^{-\frac{1}{2}} (1 - \exp[-2w_0 t])^{-1} (1 - \exp[-2w_2 t'])^{-1} \times \\
& \times \frac{\operatorname{erf} \left[-\frac{R_0^*}{2} \left(\frac{1 + \exp(-2t)}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2t))} + \frac{1 + \exp(-2t')}{\beta_{h2}(1 - \exp(-2t'))} \right)^{\frac{1}{2}} \right]}{\left(\frac{1 + \exp(-2t)}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2t))} + \frac{1 + \exp(-2t')}{\beta_{h2}(1 - \exp(-2t'))} \right)^{\frac{1}{2}}} \times \\
& \times \left\{ 2\sqrt{\pi} \frac{\operatorname{erf} \left[\left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2w_0 t))} + \frac{w_2}{\beta_{h2}(1 - \exp(-2w_2 t'))} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{R_0^*}{2} \right]}{\left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2w_0 t))} + \frac{w_2}{\beta_{h2}(1 - \exp(-2w_2 t'))} \right)^{\frac{3}{2}}} - \right. \\
& \quad \left. - 2R_0^* \frac{\exp \left[- \left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2w_0 t))} + \frac{w_2}{\beta_{h2}(1 - \exp(-2w_2 t'))} \right) \frac{R_0^{*2}}{4} \right]}{\left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2w_0 t))} + \frac{w_2}{\beta_{h2}(1 - \exp(-2w_2 t'))} \right)} \right\}. \quad (36)
\end{aligned}$$

Расчет матричного элемента (36) приводит к следующему интегралу по угловым переменным:

$$\int_0^\pi d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \sin^2 \theta \cos(\varphi - \vartheta) Y_{00}(\varphi, \theta) Y_{lm}(\varphi, \theta) = \frac{\sqrt{3}}{3\sqrt{2}} \delta_{m,\pm 1} \delta_{l,1} \exp(-mi\vartheta), \quad (37)$$

где ϑ – полярный угол единичного вектора поляризации $\vec{e}_{\lambda l}$ в цилиндрической системе координат.

Нетрудно заметить, что дальнейшее интегрирование приводит к уже полученным ранее результатам в (32)–(24).

3. Расчет радиационного времени жизни возбужденных электронных состояний

При относительно небольших изменениях диэлектрической проницаемости ϵ ($\Delta\epsilon \leq 3\epsilon$) изменение величины ϵ при фотовозбуждении в дипольном приближении с учетом дисперсии радиуса КТ определяется как:

$$\Delta\epsilon(\omega) = \frac{4\pi N_0 I_0}{\hbar\omega} \sum_n \int_0^{3/2} \sigma_n(\omega) \tau_n \alpha_n P(u) du, \quad (38)$$

где I_0 – интенсивность излучения; ω – частота падающего света; α_n – поляризуемость возбужденных состояний электрона в КТ; τ_n – время жизни возбужденных электронных состояний; $\sigma_n(\omega)$ – парциальное сечение поглощения фотона КТ с комплексом $A^+ + e$.

Поскольку величина $1/\tau_n$ определяет суммарную вероятность, отнесенную к единице времени, спонтанного испускания фотонов при квантовых переходах электрона из p -состояния (с различными квантовыми числами n) в основное состояние, то в предположении, что система характеризуется только радиационным временем жизни, выражение для τ_n запишется как

$$\frac{1}{\tau_n} = \varpi, \quad (39)$$

где полная вероятность перехода ϖ определяется выражением вида

$$\varpi = \frac{2\pi}{\hbar} \int \sum_{\sigma} \left| \langle \Phi_{out}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) | \hat{V} | \Phi_{in}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \rangle \right|^2 d\rho(E_{out}), \quad (40)$$

при этом величина $d\rho(E_{out})$ характеризует плотность числа конечных состояний системы и определяется как

$$d\rho(E_{out}) = \frac{V(\tilde{\omega})^2 d\Omega}{(2\pi)^3 \hbar c^3}, \quad (41)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{\omega} = (E_{in} - E_{out})/\hbar = & \left(\hbar^2 (X_{n,1}^2 - \pi^2) / 2m_e^* a_h^2 R_0^{*2} - (E_{\lambda h(1,2)} - E_{\lambda h}) + \right. \\ & \left. + \bar{R}_0^{*2} \sum_{n'l'm'} \left(|V_{n,1,(0,\pm 1);n',l',m'}|^2 - |V_{1,0,0;n',l',m'}|^2 \right) / (\pi^2 - \tilde{X}_{n,l'}^2) E_h \right) / \hbar; \end{aligned}$$

$d\Omega$ – бесконечно малый элемент телесного угла, а оператор взаимодействия частицы с электромагнитным полем (в однофотонном приближении) имеет вид

$$\hat{V} = -\frac{e}{m_e c} \hat{A}(\vec{r}) \hat{p}, \quad (42)$$

здесь $\hat{A}(\vec{r})$ – оператор векторного потенциала, определяемый формулой (в кулоновской калибровке):

$$\hat{A}(\vec{r}) = \sum_{k,\sigma} \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{V\omega_k} \right)^{1/2} \vec{e}_{k,\sigma} \left(\hat{a}_{k,\sigma} e^{i\vec{k}\vec{r}} + \hat{a}_{k,\sigma}^\dagger e^{-i\vec{k}\vec{r}} \right) \quad (43)$$

$\hat{a}_{k,\sigma}$ и $\hat{a}_{k,\sigma}^\dagger$ – операторы уничтожения и рождения фотона с волновым вектором $\vec{k}$ и поляризацией σ соответственно. В случае дипольного приближения выражение для полной вероятности, в боровских единицах с учетом дисперсии размера КТ будет определяться следующим образом:

$$\begin{aligned} \varpi = & \frac{4e^2 E_h^3}{3\hbar^4 c^3} \left(\frac{k(X_{n,1}^2 - \pi^2)}{R_0^{*2}} - \left(\eta_{\lambda h(1,2)}^2 - \eta_{\lambda h0}^2 \right) \vec{R}_0^{*2} \times \right. \\ & \left. \times \sum_{n'l'm'} \frac{|V_{n,1,(0,\pm 1);n',l',m'}|^2 - |V_{1,0,0;n',l',m'}|^2}{\left(\pi^2 - \tilde{X}_{n,l'}^2 \right) E_h} \right)^3 |P_n^{0,\pm 1}|^2, \end{aligned} \quad (44)$$

где величина $P_n^{0,\pm 1}$ определяется выражением

$$|P_n^{0,\pm 1}|^2 = \left\langle \Psi_{\lambda h}^{0,\pm 1}(\vec{r}_h) \middle| \Psi_{\lambda h}(\vec{r}_h) \right\rangle^2 \left\langle \Psi_n^{0,\pm 1}(\vec{r}_e) \middle| \left(\vec{e}_\lambda^{(s,t)}, \vec{r}_e \right) \middle| \Psi_{1,0}(\vec{r}_e) \right\rangle^2. \quad (45)$$

С учетом полученных ранее выражений для матричных элементов (31) и (36) выражения для (45) запишутся как:

– для случая, когда $\vec{e}_\lambda \uparrow \uparrow \vec{B}$:

$$\begin{aligned} |P_n^0|^2 = & \left[\frac{2^{-1} \pi^{-3} a_h^6 \beta_{h0}^{\frac{3}{2}} \beta_{h1}^{\frac{3}{2}} w_0 w_1 \Gamma\left(\frac{1}{2} - w_0\right) \Gamma\left(\frac{\beta_{h0}(\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{5}{4}\right)}{\left(\frac{\beta_{h0}(\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{1}{4}\right)^2 \Gamma\left(\frac{\beta_{h0}(\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) - w_0}{2} + \frac{3}{4}\right)} \times \right. \\ & \left. \times \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2} - w_1\right) \Gamma\left(\frac{\beta_{h1}(\eta_{\lambda h1}^2 + i\Gamma_0^*) + w_1}{2} + \frac{5}{4}\right)}{\left(\frac{\beta_{h1}(\eta_{\lambda h1}^2 + i\Gamma_0^*) + w_1}{2} + \frac{1}{4}\right)^2 \Gamma\left(\frac{\beta_{h1}(\eta_{\lambda h1}^2 + i\Gamma_0^*) - w_1}{2} + \frac{3}{4}\right)} \right]^{1/2} \times \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left[\left(\frac{\beta_{h1} (\eta_{\lambda h1}^2 + i\Gamma_0^*) + w_1}{2} + \frac{1}{4} \right) \times \right. \\
 & \times \left[\Psi \left(\frac{\beta_{h1} (\eta_{\lambda h1}^2 + i\Gamma_0^*) + w_1}{2} + \frac{5}{4} \right) - \Psi \left(\frac{\beta_{h1} (\eta_{\lambda h1}^2 + i\Gamma_0^*) - w_1}{2} + \frac{3}{4} \right) \right] - 1 \left. \right]^{\frac{1}{2}} \times \\
 & \times \left[\left(\frac{\beta_{h0} (\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{1}{4} \right) \times \right. \\
 & \times \left[\Psi \left(\frac{\beta_{h0} (\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{5}{4} \right) - \Psi \left(\frac{\beta_{h0} (\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) - w_0}{2} + \frac{3}{4} \right) \right] - 1 \left. \right]^{\frac{1}{2}} \times \\
 & \times \left[\int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \exp \left[- \left(\beta_{h0} (\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) - \beta_0 + w_0 + \frac{1}{2} \right) t \right] \times \right. \\
 & \times \exp \left[- \left(\beta_{h1} (\eta_{\lambda h1}^2 + i\Gamma_0^*) - \beta_1 + w_1 + \frac{1}{2} \right) t' \right] dt dt' \times \\
 & \times \left(1 - e^{-2t} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - e^{-2t'} \right)^{-\frac{1}{2}} \left(1 - \exp[-2w_0 t] \right)^{-1} \left(1 - \exp[-2w_1 t'] \right)^{-1} \times \\
 & \times \frac{\sqrt{\pi} R_0^*}{\sqrt{3} (\tilde{X}_{1,0}^2 - \tilde{X}_{n,1}^2)} \times \frac{\left[\operatorname{erf} \left(-\frac{R_0^*}{2} \left(\frac{1 + \exp(-2t)}{\beta_{h0} (1 - \exp(-2t))} + \frac{1 + \exp(-2t')}{\beta_{h1} (1 - \exp(-2t'))} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \right]}{\left(\frac{1 + \exp(-2t)}{\beta_{h0} (1 - \exp(-2t))} + \frac{1 + \exp(-2t')}{\beta_{h1} (1 - \exp(-2t'))} \right)^{\frac{1}{2}}} \times \\
 & \times \left[2\sqrt{\pi} \frac{\left[\operatorname{erf} \left(\left(\frac{w_0}{\beta_{h0} (1 - \exp(-2w_0 t))} + \frac{w_1}{\beta_{h1} (1 - \exp(-2w_1 t'))} \right)^{1/2} \frac{R_0^*}{2} \right) \right]}{\left(\frac{w_0}{\beta_{h0} (1 - \exp(-2w_0 t))} + \frac{w_1}{\beta_{h1} (1 - \exp(-2w_1 t'))} \right)^{3/2}} - \right.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -2R_0^* \frac{\exp \left[- \left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2w_0 t))} + \frac{w_1}{\beta_{h1}(1 - \exp(-2w_1 t'))} \right) \frac{R_0^{*2}}{4} \right]}{\left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2w_0 t))} + \frac{w^{(0)}}{\beta_{h1}(1 - \exp(-2w_1 t'))} \right)} \Bigg\} \times \\
& \times \left(R_0^* \tilde{X}_{n,1} J_{\frac{3}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{n,1} \right) J_{\frac{3}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{1,0} \right) - R_0^* \tilde{X}_{1,0} J_{\frac{1}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{1,0} \right) J_{\frac{5}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{n,1} \right) \right)^2; \quad (46)
\end{aligned}$$

– для случая, когда $\vec{e}_\lambda \perp \vec{B}$:

$$\begin{aligned}
|P_n^{\pm 1}|^2 &= \left[R_0^* \tilde{X}_{n,1} J_{\frac{3}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{n,1} \right) J_{\frac{3}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{1,0} \right) - R_0^* \tilde{X}_{1,0} J_{\frac{1}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{1,0} \right) J_{\frac{5}{2}} \left(R_0^* \tilde{X}_{n,1} \right) \right]^2 \times \\
& \times \left[2^{-1} \pi^{-3} a_h^6 \frac{\beta_{h0}^{\frac{3}{2}} \beta_{h2}^{\frac{3}{2}} w_0 w_2 \Gamma \left(\frac{1}{2} - w_0 \right) \Gamma \left(\frac{\beta_{h0} (\eta_{h\lambda 0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{5}{4} \right)}{\left(\frac{\beta_{h0} (\eta_{h\lambda 0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{1}{4} \right)^2 \Gamma \left(\frac{\beta_{h0} (\eta_{h\lambda 0}^2 + i\Gamma_0^*) - w_0}{2} + \frac{3}{4} \right)} \times \right. \\
& \times \left. \frac{\Gamma \left(\frac{1}{2} - w_2 \right) \Gamma \left(\frac{\beta_{h2} (\eta_{h\lambda 2}^2 + i\Gamma_0^*) + w_2}{2} + \frac{5}{4} \right)}{\left(\frac{\beta_{h2} (\eta_{h\lambda 2}^2 + i\Gamma_0^*) + w_2}{2} + \frac{1}{4} \right)^2 \Gamma \left(\frac{\beta_{h2} (\eta_{h\lambda 2}^2 + i\Gamma_0^*) - w_2}{2} + \frac{3}{4} \right)} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\
& \times \left[\left(\frac{\beta_{h2} (\eta_{h\lambda 2}^2 + i\Gamma_0^*) + w_2}{2} + \frac{1}{4} \right) \times \right. \\
& \times \left. \left[\Psi \left(\frac{\beta_{h2} (\eta_{h\lambda 2}^2 + i\Gamma_0^*) + w_2}{2} + \frac{5}{4} \right) - \Psi \left(\frac{\beta_{h2} (\eta_{h\lambda 2}^2 + i\Gamma_0^*) - w_2}{2} + \frac{3}{4} \right) \right] - 1 \right]^{-\frac{1}{2}} \times
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \left[\left(\frac{\beta_{h0} (\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{1}{4} \right) \times \right. \\
 & \times \left[\Psi \left(\frac{\beta_{h0} (\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) + w_0}{2} + \frac{5}{4} \right) - \Psi \left(\frac{\beta_{h0} (\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) - w_0}{2} + \frac{3}{4} \right) \right] - 1 \left. \right]^{-\frac{1}{2}} \times \\
 & \times \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \exp \left[- \left(\beta_{h0} (\eta_{\lambda h0}^2 + i\Gamma_0^*) - \beta_0 + w_0 + \frac{1}{2} \right) t - \right. \\
 & \quad \left. - \left(\beta_{h2} (\eta_{\lambda h2}^2 + i\Gamma_0^*) - \beta_2 + w_2 + \frac{1}{2} \right) t' \right] dt dt' \times \\
 & \times (1 - e^{-2t})^{-\frac{1}{2}} (1 - e^{-2t'})^{-\frac{1}{2}} (1 - \exp[-2w_0 t])^{-1} (1 - \exp[-2w_2 t'])^{-1} \times \\
 & \times \frac{\operatorname{erf} \left[-\frac{R_0^*}{2} \left(\frac{1 + \exp(-2t)}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2t))} + \frac{1 + \exp(-2t')}{\beta_{h2}(1 - \exp(-2t'))} \right)^{\frac{1}{2}} \right]}{\left(\frac{1 + \exp(-2t)}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2t))} + \frac{1 + \exp(-2t')}{\beta_{h2}(1 - \exp(-2t'))} \right)^{\frac{1}{2}}} \times \\
 & \times \left[\frac{\operatorname{erf} \left[\left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2w_0 t))} + \frac{w_2}{\beta_{h2}(1 - \exp(-2w_2 t'))} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{R_0^*}{2} \right]}{2\sqrt{\pi} \left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2w_0 t))} + \frac{w_2}{\beta_{h2}(1 - \exp(-2w_2 t'))} \right)^{\frac{3}{2}}} - \right. \\
 & \quad \left. - 2R_0^* \frac{\exp \left[- \left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2w_0 t))} + \frac{w_2}{\beta_{h2}(1 - \exp(-2w_2 t'))} \right) \frac{R_0^{*2}}{4} \right]}{\left(\frac{w_0}{\beta_{h0}(1 - \exp(-2w_0 t))} + \frac{w_2}{\beta_{h2}(1 - \exp(-2w_2 t'))} \right)} \right]^2. \quad (47)
 \end{aligned}$$

Соответственно для времени жизни электрона на возбужденном уровне с учетом дисперсии радиуса КТ будет иметь

$$\tau_n = \frac{3\hbar^4 c^3}{4e^2 E_h^3 |P_n^{0,\pm 1}|^2} \left(\frac{k(X_{n,1}^2 - \pi^2)}{R_0^{*2}} - \left(\eta_{\lambda h(1,2)}^2 - \eta_{\lambda h0}^2 \right) \bar{R}_0^{*2} \sum_{n'l'm'} \frac{|V_{n,1,(0,\pm 1);n',l',m'}|^2 - |V_{1,0,0;n',l',m'}|^2}{(\pi^2 - \tilde{X}_{n',l'}^2) E_h} \right)^{-3}. \quad (48)$$

4. Зависимость фотодиэлектрического эффекта в квазиуменьшенной структуре с примесными комплексами $A^+ + e$ от величины внешнего магнитного поля и параметров 1D-диссипативного туннелирования

Поляризуемость α_n электронных состояний в КТ с комплексом $A^+ + e$ определяется выражением вида (в боровских единицах):

$$\alpha_n = \frac{4a_h^3}{E_h} \left(\frac{k(X_{n,1}^2 - \pi^2)}{R_0^{*2}} - \left(\eta_{\lambda h(1,2)}^2 - \eta_{\lambda h0}^2 \right) + \bar{R}_0^{*2} \sum_{n'l'm'} \frac{|V_{n,1,(0,\pm 1);n',l',m'}|^2 - |V_{1,0,0;n',l',m'}|^2}{(\pi^2 - \tilde{X}_{n',l'}^2) E_h} \right)^{-1} |P_{n,(0,\pm 1)}|^2. \quad (49)$$

Парциальные сечения поглощения фотонов КТ с комплексом $A^+ + e$ можно записать в виде (в боровских единицах):

$$\sigma_n(X) = \frac{2\pi}{\hbar I_0} |M_{f'\lambda',f\lambda}^{(s,t)}|^2 \Gamma_0^* \left[\frac{k(X_{n,1}^2 - \pi^2)}{(\bar{R}_0^* u)^2} - \left(\eta_{\lambda h(1,2)}^2 - \eta_{\lambda h}^2 \right) - X + \bar{R}_0^{*2} u^2 \sum_{n'l'm'} \frac{|V_{n,1,(0,\pm 1);n',l',m'}|^2 - |V_{1,0,0;n',l',m'}|^2}{(\pi^2 - \tilde{X}_{n',l'}^2) E_h} \right]^2 + \Gamma_0^{*2} \Bigg]^{-1}, \quad (50)$$

где $M_{f'\lambda',f\lambda}^{(s,t)}$ определяется формулами (31) и (34) для случаев $\vec{e}_\lambda \uparrow\uparrow \vec{B}$ и $\vec{e}_\lambda \perp \vec{B}$ соответственно.

Таким образом, выражение (50) примет вид:

– для случая $\vec{e}_\lambda \uparrow\uparrow \vec{B}$:

$$\begin{aligned} \Delta \epsilon^{(s)}(X) = & \frac{12 N_0 I_0 \pi^2 \hbar^4 c^3 a_h^5 \alpha^*}{e^2 E_h^5} \sum_{n=1}^M \int_0^{3/2} du \frac{|P_{n,0}|^2}{X^2} \times \\ & \times \left(\frac{k(X_{n,1}^2 - \pi^2)}{(\bar{R}_0^*)^2} - (\eta_{\lambda h1}^2 - \eta_{\lambda h0}^2) + \bar{R}_0^{*2} \sum_{n'l'm'} \frac{|V_{n,1,0;n',l',m'}|^2 - |V_{1,0,0;n',l',m'}|^2}{(\pi^2 - \tilde{X}_{n',l'}^2) E_h} \right)^{-2} \times \\ & \times \Gamma_0^* \left[\left(\frac{k(X_{n,1}^2 - \pi^2)}{(\bar{R}_0^* u)^2} - (\eta_{\lambda h1}^2 - \eta_{\lambda h0}^2) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \bar{R}_0^{*2} \sum_{n'l'm'} \frac{|V_{n,1,0;n',l',m'}|^2 - |V_{1,0,0;n',l',m'}|^2}{(\pi^2 - \tilde{X}_{n',l'}^2) E_h} \right)^2 + \Gamma_0^{*2} \right]^{-1}; \end{aligned} \quad (51)$$

– для случая $\vec{e}_\lambda \perp \vec{B}$:

$$\begin{aligned} \Delta \epsilon^{(t)}(X) = & \frac{12 N_0 I_0 \pi^2 \hbar^4 c^3 a_h^5 \alpha^*}{e^2 E_h^5} \sum_{n=1}^M \int_0^{3/2} du \frac{|P_{n,\pm 1}|^2}{X^2} \times \\ & \times \left(\frac{k(X_{n,1}^2 - \pi^2)}{R_0^{*2}} - (\eta_{\lambda h2}^2 - \eta_{\lambda h0}^2) + \bar{R}_0^{*2} \sum_{n'l'm'} \frac{|V_{n,1,\pm 1;n',l',m'}|^2 - |V_{1,0,0;n',l',m'}|^2}{(\pi^2 - \tilde{X}_{n',l'}^2) E_h} \right)^{-2} \times \\ & \times \Gamma_0^* \left[\left(\frac{k(X_{n,1}^2 - \pi^2)}{R_0^{*2}} - (\eta_{\lambda h2}^2 - \eta_{\lambda h0}^2) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \bar{R}_0^{*2} \sum_{n'l'm'} \frac{|V_{n,1,\pm 1;n',l',m'}|^2 - |V_{1,0,0;n',l',m'}|^2}{(\pi^2 - \tilde{X}_{n',l'}^2) E_h} \right)^2 + \Gamma_0^{*2} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (52)$$

На рис. 2 и 3 представлена зависимость относительного изменения диэлектрической проницаемости (ОИДП) $\Delta \epsilon / \epsilon$ квазиульмерной структуры с InSb КТ от величины внешнего магнитного поля и параметров диссипативного туннелирования ϵ_L^* , ϵ_T^* и ϵ_C^* , рассчитанная по формулам (51) и (52) для случая $\vec{e}_\lambda \uparrow \uparrow \vec{B}$ (рис. 2) и $\vec{e}_\lambda \perp \vec{B}$ (рис. 3).

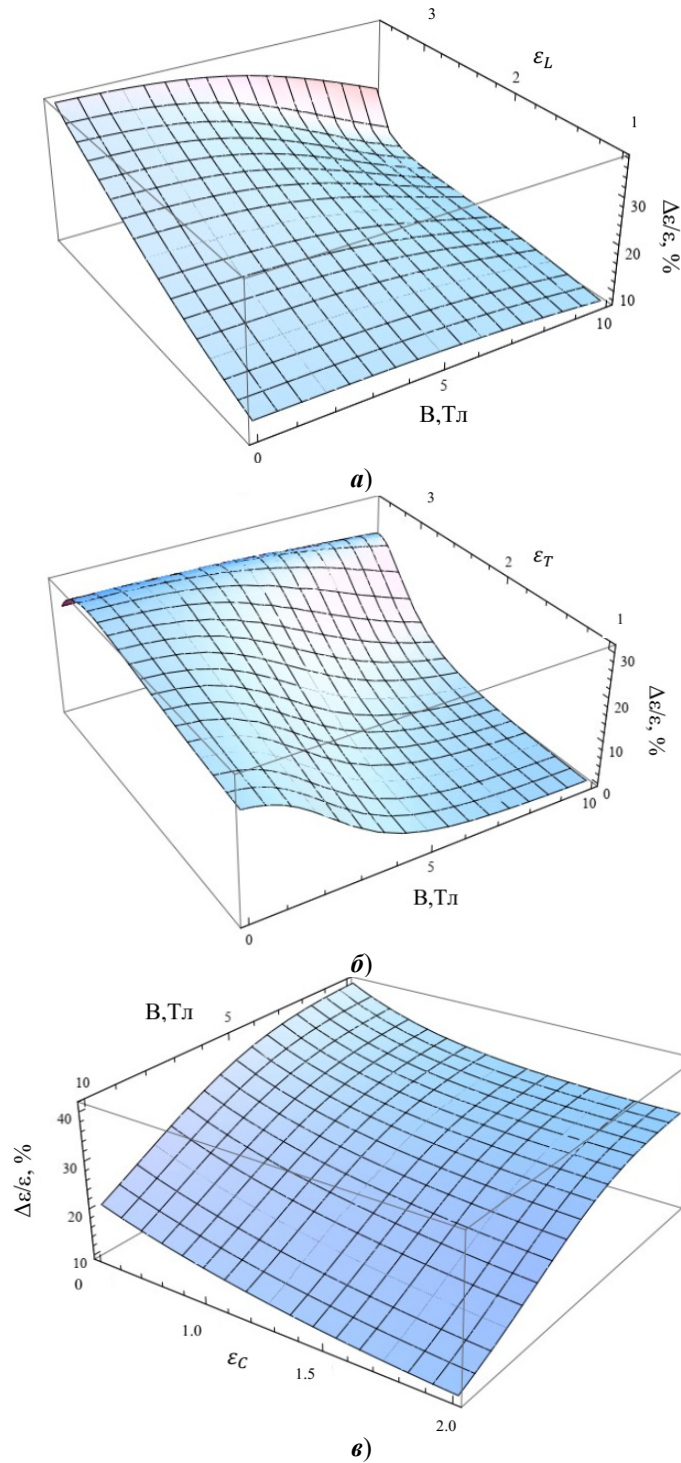


Рис. 2. Зависимость относительного изменения диэлектрической проницаемости квазиульмерной структуры с InSb КТ от величины внешнего магнитного поля B и параметров диссипативного туннелирования для случая $\vec{e}_\lambda \uparrow \uparrow \vec{B}$ при $E_i = 4$ мэВ; $\bar{R}_0 = 75$ нм; $\hbar\omega = 1$ мэВ: а – $\epsilon_T^* = 1, \epsilon_C^* = 1$; б – $\epsilon_L^* = 1, \epsilon_C^* = 1$; в – $\epsilon_T^* = 1, \epsilon_L^* = 1$

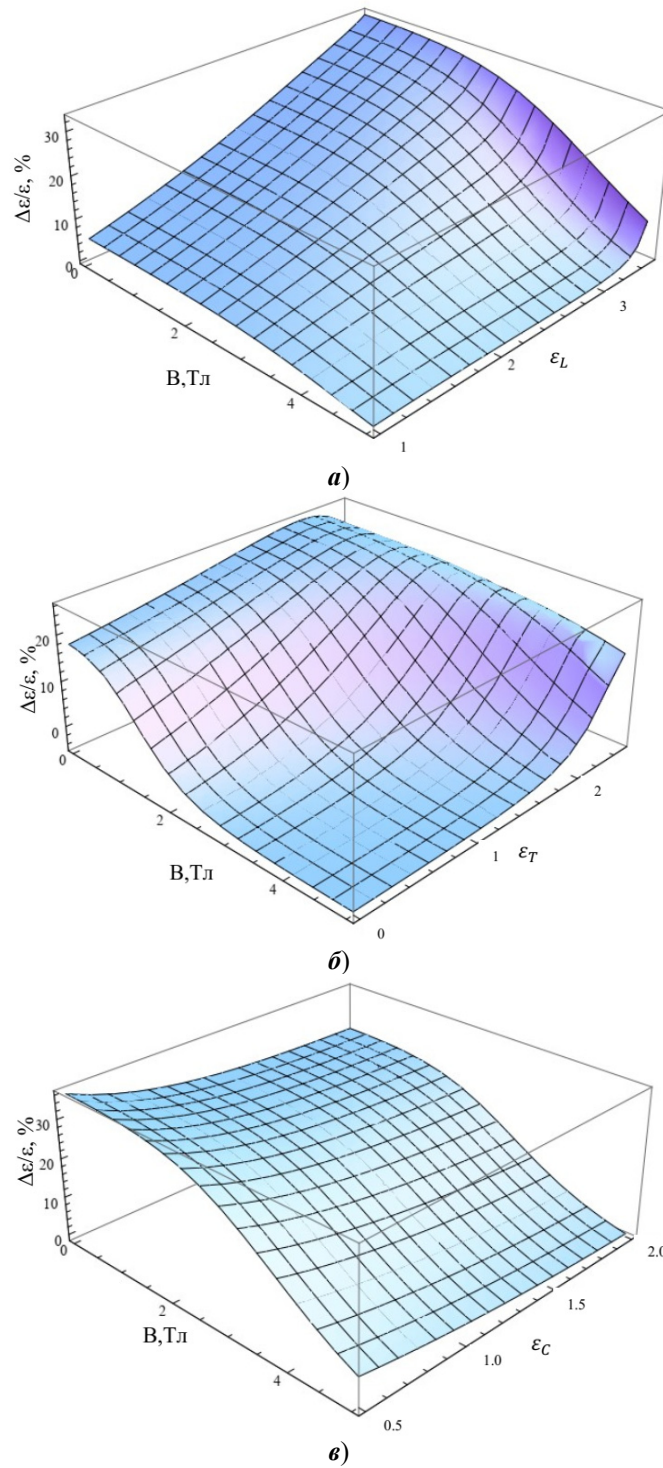


Рис. 3. Зависимость относительного изменения диэлектрической проницаемости квазиуменьшенной структуры с InSb КТ от величины внешнего магнитного поля B и параметров диссипативного туннелирования для случая $\vec{e}_\lambda \perp \vec{B}$ при $E_i = 4$ мЭВ; $\bar{R}_0 = 75$ нм; $\hbar\omega = 1$ мЭВ: **а** – $\epsilon_T^* = 1, \epsilon_C^* = 1$; **б** – $\epsilon_L^* = 1, \epsilon_C^* = 1$; **в** – $\epsilon_T^* = 1, \epsilon_L^* = 1$

Сравнение графиков на рис. 2 и 3 позволяет выявить дихроизм ФДЭ, связанный с наличием внешнего магнитного поля, проявляющийся в изменении формы кривой и уменьшении величины ОИДП при переходе от продольной (рис. 2) к поперечной (рис. 3) по отношению к направлению внешнего магнитного поля поляризации света. Как можно видеть из рис. 2 и 3, рост величины фононной моды, температуры и параметра ϵ_C^* , характеризующего «вязкость» контактной среды, приводит к значительному изменению величины ОИДП, что связано с изменением эффективного радиуса возбужденных состояний примесного комплекса $A^+ + e$ в условиях туннельного распада A^+ -состояния и, как следствие, к изменению поляризуемости электронных состояний в КТ.

Таким образом, прозрачность туннельного барьера существенно влияет на ФДЭ в квазиульмерной структуре вследствие изменения эффективного радиуса возбужденных состояний примесного комплекса $A^+ + e$ при варьировании таких параметров диссипативного туннелирования, как частота фононной моды, температура и константа взаимодействия с контактной средой.

Заключение

В рамках модели потенциала нулевого радиуса в адиабатическом приближении теоретически исследовано влияние 1D-диссипативного туннелирования на ФДЭ, связанный с возбуждением примесных комплексов $A^+ + e$ в квазиульмерной структуре во внешнем магнитном поле. Показано, что в этом случае возможно эффективное управление ФДЭ за счет модификации электронного адиабатического потенциала во внешнем магнитном поле, а также волновой функции квазистационарного A^+ -состояния при варьировании таких параметров диссипативного туннелирования, как частота фононной моды, температура и константа взаимодействия с контактной средой. Такая модификация приводит к изменению поляризуемости электронных состояний в КТ и, как следствие, заметному изменению диэлектрической проницаемости квазиульмерной структуры.

Список литературы

1. Кревчик В. Д., Левашов А. В. Фотодиэлектрический эффект, связанный с возбуждением комплекса $A^+ + e$ в квазиульмерных структурах // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2007. № 3. С. 77–92.
2. Krevchik V. D., Razumov A. V., Semenov M. B. Photoinduced Modulation of the Dielectric Permittivity in a System of Interacting Quantum Dots in an External Electric Field // Technical Physics. 2023. Vol. 68, № 4. P. 81–92.
3. Кревчик В. Д., Разумов А. В., Семенов М. Б. Фотоиндуцированная модуляция диэлектрической проницаемости в системе взаимодействующих квантовых точек во внешнем электрическом поле // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2023. № 2. С. 122–143.
4. Екимов А. И., Онущенко А. А., Эфрос Ал. Л. Квантование энергетического спектра дырок в адиабатическом потенциале электрона // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1986. Т. 43, № 6. С. 292–294.
5. Кревчик В. Д., Левашов А. В. Энергетический спектр комплекса $A^+ + e$ в квантовой точке в адиабатическом приближении // Физика твердого тела. 2006. Т. 48,

№ 3. С. 548–550.

6. Кревчик В. Д., Разумов А. В., Будянский П. С. Особенности фотодиэлектрического эффекта, связанного с возбуждением примесных комплексов $A^+ + e$ в квази-нульмерных структурах во внешнем магнитного поле // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2015. № 4. С. 111–144.
7. Кревчик В. Д., Грунин А. Б., Зайцев Р. В. Анизотропия магнитооптического поглощения комплексов «квантовая точка – примесный центр» // Физика и техника полупроводников. 2002. Т. 36, № 10. С. 1225–1232.
8. Бейтман Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. М. : Наука, 1966. Т. 2. С. 296.
9. Кревчик В. Д., Жуковский В. Ч., Дахновский Ю. И. [и др.]. Изучение управляемости диссипативного туннелирования в системах взаимодействующих квантовых молекул // Вестник Московского государственного университета. Серия 3: Физика. Астрономия. 2007. № 2. С. 10–14.
10. Кревчик В. Д., Разумов А. В., Будянский П. С. Влияние магнитного поля на комбинационное излучение, связанное с A^+ -центрами в квантовых точках // Известия вузов. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2015. № 3. С. 125–143.

References

1. Krevchik V.D., Levashov A.V. Photodielectric effect associated with excitation of the $A^+ + e$ complex in quasi-zero-dimensional structures. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2007;(3):77–92. (In Russ.)
2. Krevchik V.D., Razumov A.V., Semenov M.B. Photoinduced Modulation of the Dielectric Permittivity in a System of Interacting Quantum Dots in an External Electric Field. *Technical Physics*. 2023;68(4):81–92.
3. Krevchik V.D., Razumov A.V., Semenov M.B. Photoinduced modulation of permittivity in a system of interacting quantum dots in an external electric field. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2023;(2):122–143. (In Russ.)
4. Ekimov A.I., Onushchenko A.A., Efros A.I. Quantization of the energy spectrum of holes in the adiabatic potential of an electron. *Pis'ma v Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki = Notes to the Journal of experimental and theoretical physics*. 1986;43(6):292–294. (In Russ.)
5. Krevchik V.D., Levashov A.V. Energy spectrum of the $A^+ + e$ complex in a quantum dot in the adiabatic approximation. *Fizika tverdogo tela = Solid-state physics*. 2006;48(3):548–550. (In Russ.)
6. Krevchik V.D., Razumov A.V., Budyanskiy P.S. Features of the photodielectric effect associated with the excitation of impurity complexes $A^+ + e$ in quasi-zero-dimensional structures in an external magnetic field. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki = University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2015;(4):111–144. (In Russ.)
7. Krevchik V.D., Grunin A.B., Zaytsev R.V. Anisotropy of magneto-optical absorption of “quantum dot – impurity center complexes”. *Fizika i tekhnika poluprovodnikov = Physics and technology of semiconductors*. 2002;36(10):1225–1232. (In Russ.)
8. Beytman G., Erdeyi A. *Vysshie transtsendentnye funktsii = Higher transcendental functions*. Moscow: Nauka, 1966;2:296. (In Russ.)
9. Krevchik V.D., Zhukovskiy V.Ch., Dakhnovskiy Yu.I. et al. Study of controllability of dissipative tunneling in systems of interacting quantum molecules. *Vestnik Moskovskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya 3: Fizika. Astronomiya = Bulletin of Moscow State University. Series 3: Physics. Astronomy*. 2007;(2):10–14. (In Russ.)

10. Krevchik V.D., Razumov A.V., Budyanskiy P.S. Effect of magnetic field on recombination radiation associated with A⁺ centers in quantum dots. *Izvestiya vuzov. Povolzhskiy region. Fiziko-matematicheskie nauki* = *University proceedings. Volga region. Physical and mathematical sciences*. 2015;(3):125–143. (In Russ.)

Информация об авторах / Information about the authors

Владимир Дмитриевич Кревчик

доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
физики, декан факультета
информационных технологий
и электроники, Пензенский
государственный университет
(Россия, г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: physics@pnzgu.ru

Vladimir D. Krevchik

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, head of the
sub-department of physics, dean of the
faculty of information technology
and electronics, Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Алексей Викторович Разумов

кандидат физико-математических наук,
доцент, доцент кафедры общей физики
и методики обучения физике,
Пензенский государственный
университет (Россия, г. Пенза,
ул. Красная, 40)

E-mail: razumov_alex@mail.ru

Aleksey V. Razumov

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor, associate
professor of the sub-department of general
physics and methods of teaching physics,
Penza State University
(40 Krasnaya street, Penza, Russia)

Михаил Борисович Семенов

доктор физико-математических наук,
профессор, профессор кафедры
физики, Пензенский государственный
университет (Россия,
г. Пенза, ул. Красная, 40)

E-mail: Misha29.02.2@gmail.com

Mikhail B. Semenov

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, professor of the
sub-department of physics, Penza
State University (40 Krasnaya street,
Penza, Russia)

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов / The authors declare no conflicts of interests.

Поступила в редакцию / Received 23.01.2025

Поступила после рецензирования и доработки / Revised 03.03.2025

Принята к публикации / Accepted 26.03.2025

Уважаемые читатели!

Для гарантированного и своевременного получения журнала «**Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки**» рекомендуем вам оформить подписку.

Журнал выходит 4 раза в год. Научные направления (группы специальностей):

- 1.1.2. Дифференциальные уравнения и математическая физика
- 1.1.6. Вычислительная математика
- 1.3.3. Теоретическая физика
- 1.3.6. Оптика
- 1.3.8. Физика конденсированного состояния
- 1.3.11. Физика полупроводников
- 1.3.15. Физика атомных ядер и элементарных частиц, физика высоких энергий

Стоимость одного номера журнала – 500 руб. 00 коп.

Для оформления подписки через редакцию необходимо заполнить и отправить заявку в редакцию журнала: факс/тел. +7 (8412) 64-32-89. E-mail: volgavuz@pnzgu.ru

Подписку можно также оформить по объединенному каталогу «Пресса России» тематические разделы «Научно-технические издания. Известия РАН. Известия ВУЗов». Подписной индекс – 82413.

ЗАЯВКА

Прошу оформить подписку на журнал «Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки» на 20__ г.

№ 1 – _____ шт., № 2 – _____ шт., № 3 – _____ шт., № 4 – _____ шт.

Наименование организации (полное) _____

ИНН _____ КПП _____

Почтовый индекс _____

Республика, край, область _____

Город (населенный пункт) _____

Улица _____ Дом _____

Корпус _____ Офис _____

ФИО ответственного _____

Должность _____

Тел. _____ Факс _____ E-mail _____

Руководитель предприятия _____

(подпись)

(ФИО)

Дата « ____ » _____ 20__ г.