

Режимный критерий К включения порогового канала при селективной накачке в мезоструктурированных средах

Аннотация

Рассматривается класс мезоструктурированных систем, в которых внешняя накачка селективно вводит энергию в выделенную координату активного центра (вибрационную, конформационную, адсорбционную и т.п.), а диссипация приводит к потере направленности и перераспределению энергии по тепловым степеням свободы.

В стационарном режиме накопления-утечки статистическая доступность альтернативного порогового канала трансформации (смена маршрута, переключение состояния, изменение селективности) определяется безразмерным режимным параметром

$$K = p / (\Gamma \cdot E^*),$$

где p – мощность, поглощаемая одним активным центром именно в выделенную координату;

E^* – пороговая энергия альтернативного канала;

Γ^* – эффективная скорость потери направленности накопленной энергии в окрестности порога.

На основе минимальной стохастической модели накопления-утечки получено стационарное распределение уровней направленной энергии, хвост которого определяет вероятность включения порогового канала. Для линейных потерь показано, что при большом пороге возникает резкий кроссовер в области $K \sim 1$, с характерной шириной по $K \sim 1/\sqrt{n^*}$. Результат сохраняется для широкого класса нелинейных потерь при локально-эффективном определении Γ^* вблизи порога.

Критерий K имеет режимный характер: он не является следствием закона сохранения и применим к системам с селективной аккумуляцией энергии и стационарным режимом, при выполнении условий применимости.

Примечания к интерпретации.

По размерности K эквивалентен отношению времени потери направленности $t_{loss} \approx 1/\Gamma^*$ к времени накопления порога $t_{pump} \approx E/p^*$.

Экспериментальный «порог» задаётся выбранной метрикой события (вероятность, скорость, окно наблюдения) и не обязан совпадать с $K = 1$.

Стационарная вероятность включения канала $P_{open} = P\{n \geq n^*\}$ отличается от экспериментальной частоты событий, зависящей от времени первого достижения порога (first-passage) и последующей динамики; эти величины коррелируют, но не тождественны.

Величина Γ^* определяется по затуханию селективного маркера выделенной координаты в пороговой области; при отсутствии такого маркера Γ^* не определима, и критерий K в данной форме неприменим.

1. Условие стационарности и область применимости

Критерий применим при выполнении следующих условий:

– параметры режима (p , Γ^* , E^*) остаются квазистационарными в течение

- характерного времени накопления направленной энергии;
- параметры среды и накачки не изменяются существенно быстрее, чем характерное время релаксации направленной энергии;
 - не происходит необратимой перестройки системы, такой как деградация, фазовый переход или изменение числа эффективно активных центров;
 - существует нормируемое стационарное распределение уровней направленной энергии.

При наличии выраженного гистерезиса, дрейфа параметров или необратимой перестройки системы критерий К может не описывать наблюдаемое пороговое поведение.

2. Определения (в измеримых величинах)

Рассматривается система «активный центр + мезоструктурированная среда + селективная накачка».

Активный центр – минимальная локальная единица, на которой реализуется событие трансформации (молекула в поре, адсорбат на активном сайте, локальный конформационный узел, реакционный комплекс и т.п.). Под выделенной координатой понимается внутренняя степень свободы активного центра, в которой возможно направленное накопление энергии (вибрационная мода, конформационная координата, координата адсорбции/реакции и т.д.).

2.1. p – поглощённая мощность на один активный центр (Дж/с на центр)

Определение: $p = P_{abs,dir} / N_{eff}$, где $P_{abs,dir}$ – мощность, реально поглощаемая выделенной координатой, N_{eff} – эффективное число активных центров, фактически вовлечённых в адресное поглощение.

Селективная доля накачки. Вводится $s = P_{abs,dir} / P_{abs}$, где P_{abs} – полная поглощённая мощность (по калориметрии/балансу/оптике), а $P_{abs,dir}$ – адресная (селективная) часть, реально вводимая в выделенную координату. Тогда

$$p = (s \cdot P_{abs}) / N_{eff},$$

а режимный параметр может быть записан в эквивалентной форме

$$K = (s \cdot P_{abs}) / (N_{eff} \cdot \Gamma^* \cdot E^*).$$

При $s \rightarrow 0$ (отсутствие селективной компоненты) критерий в данной постановке вырождается, а наблюдаемая пороговость требует иной модели (термальной/структурной), не являющейся частным случаем критерия К.

Практический смысл: p – скорость адресного ввода энергии в выделенную координату на один центр. Величина $P_{abs,dir}$ определяется из независимых данных о поглощении или энергетическом балансе, а N_{eff} – по числу реально вовлечённых центров.

Оценка N_{eff} :

$N_{eff} = 1$ – локальное событие на одном центре (STM, одиночный адсорбат или сайт);
 $N_{eff} = (\text{плотность центров}) \times (\text{активная площадь или объём}) \times (\text{доля вовлечения})$ – ансамблевые системы.

Практическое замечание. В большинстве экспериментальных работ абсолютная оценка N_{eff} является основным источником неопределённости. При сравнении режимов одной и той же системы при неизменной геометрии допустим анализ относительных изменений К без точного знания абсолютного N_{eff} .

Дополнительное ограничение: N_{eff} может зависеть от внешнего драйва (вовлечение дополнительных областей/центров при росте мощности, "включение" новых локальных зон). В этом случае рост общей подведённой мощности не обязан означать рост r на центр, поскольку $r = P_{abs,dir}/N_{eff}$ может оставаться близким к прежнему при росте N_{eff} . Сравнение режимов по K требует фиксации N_{eff} по режимам либо постановок с $N_{eff} \approx \text{const}$ (в частности, локальные события с $N_{eff} = 1$).

В ансамблевых системах удобнее рассматривать не N_{eff} как отдельный параметр, а распределение локальной эффективности адресной накачки по центрам. Пусть для центра i локальная эффективность задаётся коэффициентом a_i , тогда локальный режимный параметр равен $K_i = a_i K_0$, где K_0 вычисляется по внешнему драйву. Наблюдаемая вероятность включения канала определяется усреднением по центрам $P_{open_total}(K_0) = \text{среднее значение } P_{open}(K_i)$. Рост эффективного числа вовлечённых центров при увеличении мощности соответствует вовлечению центров с меньшими a_i .

2.2. E^* – пороговая энергия канала (Дж на активный центр)

Определение: E^* – минимальная направленная энергия в выделенной координате активного центра, при достижении которой альтернативный пороговый канал становится доступным.

Практический смысл: E^* – параметр канала, а не режима накачки. Он оценивается по независимым данным (энергии барьеров, спектроскопические оценки, энергетика адсорбции/десорбции, литературные значения).

2.3. Γ^* – эффективная скорость потерь направленности в окрестности порога (1/с)

Определение $\Gamma(E)$ используется как локальная характеристика вблизи пороговой области $E \approx E^*$; глобальная форма $\Lambda(E)$ вне порога в критерий не входит.

Замечание об обозначениях. Далее используется: Γ – константа в линейной модели $g(n)=n\cdot\Gamma$; $\Gamma(E)$ – удельная скорость потерь направленности как функция энергии; Γ^* – значение $\Gamma(E)$ в пороговой области, $\Gamma^* = \Gamma(E^*)$.

Практический смысл: Γ^* – характеристика потери селективности выделенной координаты вблизи порога. Она определяется по временам релаксации адресного возбуждения или спектральным признакам утечки энергии и не обязана совпадать со скоростью тепловой релаксации при малых энергиях.

Операциональный смысл "потери направленности". Под потерей направленности понимается исчезновение адресной (селективной) компоненты возбуждения выделенной координаты: после потери направленности энергия может сохраняться в системе, но перестаёт быть "настроенной" на рассматриваемый пороговый канал. Поэтому Γ^* относится к затуханию селективного возбуждения выделенной координаты (например, по *ritmr-probe* сигналу, релаксационной полосе, затуханию амплитуды моды), а не к общему тепловому охлаждению или "нагреву" образца.

Наблюдаемые признаки направленности (предварительное условие применимости)

Селективность накопления направленной энергии должна быть подтверждена экспериментально. К типовым маркерам относятся:

- *ritmr-probe* сигналы;
- резонансная частотная или поляризационная зависимость;
- специфическая мода в спектроскопии (ИК, Raman);
- изотопные или модовые селективные эффекты.

При отсутствии этих признаков и наличии только общего нагрева параметры r и Γ^* не

определимы как селективные, и критерий К в данной постановке не определён. Описание через «эффективную температуру» относится к иной модели и не является частным случаем критерия К.

3. Режимный критерий (формулировка)

В системах с селективной накачкой выделенной внутренней координаты активного центра и с альтернативным пороговым маршрутом трансформации статистическая доступность этого маршрута в стационарном режиме накопления–утечки определяется безразмерным параметром режима

$$K = p / (\Gamma^* \cdot E^*).$$

Физический смысл критерия состоит в сравнении двух времен: времени накопления пороговой энергии порядка E^*/p и времени потери направленности порядка $1/\Gamma^*$. При K порядка единицы эти времена становятся сравнимыми.

При $K \ll 1$ включение порогового канала является редким событием. При K порядка единицы возникает кроссовер к порогоподобному включению. При $K \gg 1$ альтернативный канал становится статистически типичным с учётом ограничений насыщения и конкурирующих процессов.

Под «кроссовером» в данной работе понимается относительно резкий (но непрерывный) переход между режимами редкого и типичного включения порогового канала при изменении K в области порядка единицы.

Параметр K не является температурой, поскольку не связан с тепловым распределением энергии по степеням свободы. Он характеризует режим направленного накопления энергии и конкуренцию с потерями направленности.

Утверждение (режимный критерий).

При выполнении условий стационарности и селективности статистическая доступность альтернативного порогового канала в системах с накоплением–утечкой определяется безразмерным параметром $K = p / (\Gamma^* \cdot E^*)$. При $n^* \gg 1$ кроссовер между режимами редкого и типичного включения локализован в области K порядка единицы с шириной порядка $1/\sqrt{n^*}$.

Сводка обозначений: $p = P_{abs,dir}/N_{eff}$, $\Gamma^* = 1/\tau_{dir}(E^*)$, $K = p / (\Gamma^* \cdot E^*)$, $n^* = \Gamma E^*/e01$ (в дискретной модели).

$s = P_{abs,dir} / P_{abs}$ – селективная доля поглощённой мощности.

4. Доказательство

4.1. Дискретная лестница энергии как минимальная модель

Доказательство строится как вывод вероятности достижения порога направленной энергии в выделенной координате при конкуренции селективной накачки и потерь направленности. Ключевой объект – стационарное распределение накопленной направленной энергии; включение порогового канала определяется хвостом этого распределения. Модель вводится в дискретной форме как минимальная и строго решаемая; дискретизация используется как удобный способ задания уровня накопленной энергии и не является физическим постулатом. Итоговый режимный критерий не зависит от выбора шага энергии.

Порог альтернативного канала задаётся уровнем

$$n^* = \Gamma E^*/e01,$$

где $e0$ – шаг энергии, а $\lceil \cdot \rceil$ означает округление вверх.

Замечание о дискретизации. При определении $n^* = \lceil E^*/e0 \rceil$ выполняется $E^* \leq n^* \cdot e0 < E^* + e0$, то есть в дискретной модели пороговой энергии соответствует уровень $E^*_{disc} = n^* \cdot e0$. Относительная ошибка замены порядка $e0/E^*$ и исчезает при $n^* \gg 1$. Величина n^* есть размер порога – безразмерная мера пороговой энергии в рамках выбранной дискретизации.

Динамика задаётся процессом рождения–гибели на уровнях $n = 0, 1, 2, \dots$:

- накачка поднимает уровень $n \rightarrow n + 1$ с постоянной интенсивностью W (1/с на активный центр);
- потери направленности опускают уровень $n \rightarrow n - 1$ с интенсивностью $g(n)$, где $g(n) \geq 0$ и, как правило, не убывает по n .

В общем случае потери направленности могут уменьшать уровень сразу на несколько шагов за один акт. Пусть переход $n \rightarrow n - m$ имеет интенсивность $g_m(n)$. Тогда эффективная суммарная утечка в пороговой области задаётся величиной $G1(n)$ равной сумме $m g_m(n)$ по всем m . Локально эффективная скорость потерь в пороговой области задаётся как $\Gamma^* = G1(n^*)/n^*$, а режимный параметр принимает вид $K = W/G1(n^*)$. При конечном среднем размере скачка граница режимов сохраняется в области K порядка единицы.

На уровне n накопленная направленная энергия равна $E = n \cdot e0$. Каждый акт перехода $n \rightarrow n - 1$ уменьшает энергию на $e0$, поэтому мощность потерь направленности на уровне n имеет порядок $g(n) \cdot e0$. Эффективная удельная скорость потерь направленности при энергии E определяется как

$$\Gamma(E) = (\text{мощность потерь направленности}) / E = g(n) / n \quad (\text{для } n \geq 1).$$

Связь с измеримыми величинами задаётся через баланс энергии на входе: средняя поглощаемая мощность на активный центр равна $p = W \cdot e0$, то есть

$$W = p / e0.$$

4.1.1. Эквивалентность форм критерия и независимость от шага $e0$

Введём локально-эффективную скорость потерь направленности в окрестности порога:

$$\Gamma^* = g(n^*) / n^*.$$

При согласованном определении $E^* = n^* \cdot e0$ получаем эквивалентность двух форм режимного критерия:

$$K = p / (\Gamma^* \cdot E^*) = (W \cdot e0) / ((g(n^*)/n^*) \cdot (n^* \cdot e0)) = W / g(n^*).$$

Следовательно, критерий K не зависит от выбора шага дискретизации $e0$ при согласованной постановке порога ($E^*_{disc} = n^* \cdot e0$): шаг дискретизации сокращается, и режим определяется отношением «интенсивность накачки на уровне порога / суммарная интенсивность потерь на уровне порога».

Для обобщённого случая многоквантовых потерь следует везде в этих формулах понимать суммарную интенсивность потерь на уровне порога как $G1(n^*)$ = сумма $m g_m(n^*)$ по всем m . Тогда эквивалентные записи принимают вид $\Gamma^* = G1(n^*)/n^*$ и $K = W/G1(n^*)$, а все рассуждения о независимости от шага $e0$ сохраняются без изменений.

4.2. Общая стационарная форма для произвольной $g(n)$

Для процесса рождения–гибели стационарное распределение $P(n)$ при стандартных условиях нормируемости удовлетворяет балансу потоков между соседними уровнями:

$$P(n) \cdot W = P(n+1) \cdot g(n+1), \quad n \geq 0,$$

где $g(0)$ понимается как 0 (переход $0 \rightarrow -1$ запрещён).

Из баланса следует рекурсия

$$P(n+1) = P(n) \cdot W / g(n+1),$$

и, следовательно, точная произведённая форма

$$P(n) = P(0) \cdot W^n / (g(1) g(2) \dots g(n)) = P(0) \cdot \text{произведение}_{\{k=1..n\}} (W / g(k)), \quad n \geq 1,$$

а нормировка задаётся условием $\sum_{n=0}^{\infty} P(n) = 1$:

$$P(0) = 1 / (1 + \sum_{n=1}^{\infty} \text{произведение}_{\{k=1..n\}} (W / g(k))).$$

Стационарный режим существует, если ряд нормировки сходится. Достаточным (не необходимым) условием является: существует n_0 и $\varepsilon > 0$ такие, что для всех $n \geq n_0$ выполняется

$$g(n) \geq (1 + \varepsilon) \cdot W.$$

Тогда для больших n имеем $W/g(n) \leq 1/(1+\varepsilon)$, произведения убывают не медленнее геометрически, и ряд нормировки сходится.

Вероятность включения порогового канала в рамках модели определяется как стационарная вероятность находиться на уровнях $n \geq n^*$, то есть как хвост распределения:

$$P_{\text{open}} = \sum_{n=n^*}^{\infty} P(n).$$

4.2.1. Связь P_{open} с наблюдаемыми величинами

Величина P_{open} задаёт статистическую доступность порога в стационарном режиме. $P_{\text{open}} = P\{n \geq n^*\}$ является стационарной мерой доступности порога; экспериментальные события обычно фиксируются по достижению порога за конечное время (first-passage) и по последующей постпороговой динамике. Эти величины коррелируют, но не тождественны; количественная связь задаётся выбранной метрикой события и окном наблюдения.

Экспериментально обычно регистрируют скорость событий или вероятность события за фиксированное время T .

Минимальная рабочая связь: событие запускается с некоторой интенсивностью (скоростью) $h(n)$, зависящей от уровня n . Тогда строгая формула для средней скорости событий имеет вид

$$R = \sum_{n=0}^{\infty} P(n) \cdot h(n),$$

а вероятность увидеть событие за окно времени T равна

$$P_{\text{event}}(T) = 1 - \exp(-R \cdot T).$$

Частный широко используемый предел: если для $n \geq n^*$ интенсивность события примерно постоянна, $h(n) \approx h_0$, то

$$R \approx h_0 \cdot P_{\text{open}}, P_{\text{event}}(T) \approx 1 - \exp(-h_0 \cdot P_{\text{open}} \cdot T).$$

Если же h_0 заметно зависит от драйва (частоты, мощности, напряжения, поля), то наблюдаемая статистика $P_{\text{event}}(T)$ уже не является функцией только P_{open} , и тогда коллапс по одному K может ломаться на уровне измеряемого сигнала даже при корректной модели накопления-утечки. В этом случае зависимость $h(n)$ от режима должна быть учтена отдельно.

4.3. Специальный случай: линейные потери $g(n) = n \cdot \Gamma$

Рассмотрим случай линейного роста суммарной скорости потерь:

$$g(n) = n \cdot \Gamma,$$

где Γ ($1/c$) – эффективная скорость потерь направленности в линейной модели ($g(n) = n \cdot \Gamma$). Подстановка в общую формулу даёт точное пуассоновское распределение:

$$P(n) = \exp(-\mu) \cdot \mu^n / n!,$$

где

$$\mu = W / \Gamma.$$

Вероятность включения канала равна хвостовой вероятности распределения Пуассона:

$$P_{\text{open}} = P\{n \geq n^*\} = 1 - F_{\text{Pois}}(n^* - 1; \mu),$$

где $F_{\text{Pois}}(k; \mu)$ – накопленная вероятность для $n \leq k$.

4.4. Переход к параметру режима K и исчезновение шага e_0

В линейном случае

$$\mu = W / \Gamma = (p / e_0) / \Gamma = p / (\Gamma \cdot e_0),$$

а пороговой уровень

$$n^* \approx E^* / e_0.$$

Тогда отношение среднего уровня к порогу

$$\mu / n^* \approx [p / (\Gamma \cdot e_0)] / [E^* / e_0] = p / (\Gamma \cdot E^*).$$

Шаг e_0 сокращается полностью. Переходя к локально-эффективной скорости потерь вблизи порога Γ^* (в линейной модели $\Gamma^* = \Gamma$), получаем режимный параметр

$$K = p / (\Gamma^* \cdot E^*).$$

В терминах линейной модели это эквивалентно записи

$$\mu = K \cdot n^*,$$

то есть хвост распределения и вероятность включения определяются только K и размером порога n^* .

4.5. Порогоподобный кроссовер при большом пороге (асимптотика в линейной модели)

В линейной модели $g(n)=n\cdot\Gamma$ распределение является пуассоновским:

$$P(n) = \exp(-\mu) \cdot \mu^n / n!, \quad \mu = W/\Gamma,$$

а вероятность включения

$$P_{\text{open}} = \sum_{n=n^*}^{\infty} \exp(-\mu) \cdot \mu^n / n!.$$

Введём

$$K = \mu/n^*,$$

и рассмотрим режим $n^* \gg 1$ при фиксированном $K \neq 1$. Используя формулу Стирлинга, для терма при $n=n^*$ получаем

$$\ln P(n^*) \approx -n^* \cdot (K - 1 - \ln K) - (1/2) \cdot \ln(2\pi n^*) + \text{малые поправки.}$$

Определим функцию скорости

$$I(K) = K - 1 - \ln K.$$

Тогда ведущая экспонента имеет вид

$$P(n^*) \approx (\text{константа}) \cdot n^{*^2} \cdot \exp(-n^* \cdot I(K)).$$

Поскольку отношение соседних термов равно $P(n+1)/P(n) = \mu/(n+1)$, то при $K < 1$ хвост суммы $\sum_{n=n^*}^{\infty} P(n)$ убывает геометрически, и сумма отличается от ведущего терма лишь полиномиальным множителем по n^* . Аналогично при $K > 1$ геометрически убывает дополнение до единицы. Следовательно:

- при $K < 1$: $P_{\text{open}} = \exp(-n^* \cdot I(K)) \cdot (\text{полиномиальный множитель по } n^*);$
- при $K > 1$: $1 - P_{\text{open}} = \exp(-n^* \cdot I(K)) \cdot (\text{полиномиальный множитель по } n^*).$

В точке $K=1$ имеем $I(1)=0$, что соответствует границе режимов и возникновению кроссовера.

4.5.1. Ширина перехода по K

Рассмотрим критическую окрестность

$$K = 1 + z/\sqrt{n^*},$$

где z – величина порядка единицы. Тогда

$$\mu = K \cdot n^* = n^* + z \cdot \sqrt{n^*}.$$

Для больших μ применима нормальная аппроксимация распределения Пуассона. В этом приближении вероятность хвоста оценивается как функция z :

$$P_{\text{open}} = P(n \geq n^*) \approx \Phi(z),$$

где $\Phi(z)$ – функция распределения (CDF) стандартного нормального закона. Следовательно, характерная ширина кроссовера по K убывает как $1/\sqrt{n^*}$.

4.6. Обобщение на нелинейные потери: локальная скорость и сравнение по функциям потерь

В общем случае $g(n)$ не обязана быть пропорциональна n . Введём удельную скорость потерь

$$\gamma(n) = g(n)/n \quad (n \geq 1),$$

и локально-эффективную скорость потерь в окрестности порога

$$\Gamma^* = \gamma(n^*) = g(n^*)/n^*.$$

Критерий режима эквивалентно записывается как

$$K = p/(\Gamma^* \cdot E^*) = W/g(n^*).$$

Ниже используется монотонность: при фиксированной накачке W увеличение $g(n)$ на всех уровнях делает стационарное распределение более смещённым к малым n и уменьшает хвостовую вероятность.

Теорема (сравнение по функциям потерь). Рассмотрим три стационарных процесса на уровнях $n = 0, 1, 2, \dots$ с одинаковой накачкой W и функциями потерь $g(n)$, $g_-(n)$, $g_+(n)$, такими что для всех $n \geq 1$ выполнено

$$g_+(n) \geq g(n) \geq g_-(n),$$

и все три процесса имеют нормируемые стационарные распределения. Тогда для любого порога n^* выполняется

$$P_{\text{open}}(g_+) \leq P_{\text{open}}(g) \leq P_{\text{open}}(g_-),$$

где $P_{\text{open}}(\cdot) = \text{сумма}_{\{n=n^..oo\}} P(n)$.

Доказательство.

Достаточно доказать неравенство $P_{\text{open}}(g_+) \leq P_{\text{open}}(g)$; второе неравенство получается аналогично.

Зафиксируем W и рассмотрим стационарные распределения $P(n)$ и $P_+(n)$, соответствующие функциям потерь $g(n)$ и $g_+(n)$. Оба распределения имеют произведённую форму

$$P(n) = C \cdot \text{произведение}_{\{k=1..n\}} (W/g(k)),$$

$$P_+(n) = C_+ \cdot \text{произведение}_{\{k=1..n\}} (W/g_+(k)),$$

где C и C_+ – нормировочные константы.

Определим отношение

$$q(n) = P_+(n)/P(n).$$

Тогда

$$q(n+1)/q(n) = g(n+1)/g_+(n+1) \leq 1,$$

и, следовательно, $q(n)$ невозрастает по n .

Рассмотрим хвостовые суммы

$$S(k) = \text{сумма}_{\{n=k.. \infty\}} P(n),$$

$$S_+(k) = \text{сумма}_{\{n=k.. \infty\}} P_+(n) = \text{сумма}_{\{n=k.. \infty\}} q(n)P(n).$$

Поскольку $q(n)$ невозрастает, для всех $n \geq k$ выполнено $q(n) \leq q(k)$, и поэтому

$$S_+(k) \leq q(k) \cdot S(k).$$

Так как суммарная вероятность равна единице, а $q(n)$ невозрастает, то для области хвоста (в частности, для $k = n^*$) выполняется $q(k) \leq 1$, откуда следует

$$S_+(n^*) \leq S(n^*).$$

Следовательно, $P_{\text{open}}(g_+) \leq P_{\text{open}}(g)$. Аналогично выводится $P_{\text{open}}(g) \leq P_{\text{open}}(g_-)$. Теорема доказана.

Следствие (линейные оболочки). Если существуют $\Gamma^* > 0$ и $0 < \delta < 1$ такие, что для всех $n \geq 1$ выполнено

$$(1-\delta) \cdot \Gamma^* \cdot n \leq g(n) \leq (1+\delta) \cdot \Gamma^* \cdot n,$$

то $P_{\text{open}}(g)$ лежит между хвостами двух линейных процессов

$$g_-(n) = (1-\delta) \cdot \Gamma^* \cdot n,$$

$$g_+(n) = (1+\delta) \cdot \Gamma^* \cdot n,$$

для которых стационарные распределения пуассоновские. В этом случае кроссовер по K сохраняется в окрестности K порядка единицы с точностью, задаваемой δ :

- при $K < 1-\delta$ включение экспоненциально подавлено при $n^* \gg 1$;
- при $K > 1+\delta$ экспоненциально подавлено дополнение до единицы при $n^* \gg 1$.

Замечание о практической проверке условий. Для инженерных оценок достаточно, чтобы сравнение оболочек выполнялось в области хвоста (по крайней мере для $n \geq n^*$) и чтобы рост $g(n)$ при больших n обеспечивал существование нормируемого стационарного распределения. Строгое утверждение теоремы в приведённом виде использует неравенства $g_+(n) \geq g(n) \geq g_-(n)$ для всех $n \geq 1$.

4.6.1. Численная проверка устойчивости к нелинейным потерям (контроль кроссовера по K)

Для проверки того, что именно K фиксирует положение кроссовера не только при линейных потерях, рассматриваются семейства функций потерь $g(n)$:

- линейные: $g(n) = n$;
- суперлинейные: $g(n) = n^{(3/2)}$;
- с насыщением: $g(n) = n/(1+n/n_{\text{sat}})$;

Важно. Для $g(n)=n/(1+n/n_{\text{sat}})$ имеем $g(n) \rightarrow n_{\text{sat}}$ при $n \rightarrow \infty$. Нормируемое стационарное распределение существует только при $W < n_{\text{sat}}$; при $W \geq n_{\text{sat}}$ сумма

нормировки расходится. В случае $W \geq n_{\text{sat}}$ P_{open} в стационарном смысле не определена, и для описания процесса требуется нестационарная модель.

Для каждого семейства выбирается порог n^* и задаётся W так, чтобы заданное K выполнялось по локальному определению Γ^* на пороге:

$$\Gamma^* = g(n^*)/n^*, K = W/g(n^*) \quad (\text{эквивалентно } K = p/(\Gamma^* \cdot E^*)).$$

Далее вычисляется точный стационарный хвост P_{open} как сумма $P(n)$ по $n \geq n^*$, где $P(n)$ берётся из произведённой стационарной формы.

Результаты проверки:

- при $K = 1$ во всех трёх семействах P_{open} оказывается порядка $1/2$ (с учётом конечного значения n^*);
- при $K < 1$ хвост стремится к 0 экспоненциально по n^* ;
- при $K > 1$ хвост стремится к 1 экспоненциально по n^* ;
- в проверенных семействах нелинейных функций потерь наблюдается, что характерная ширина кроссовера по K убывает примерно как $1/\sqrt{n^*}$; строгое обоснование универсальности этого масштаба для произвольных $g(n)$ выходит за рамки данной работы.

Тем самым, даже при существенно нелинейной $g(n)$ параметр K задаёт положение кроссовера, если Γ^* определять локально как $g(n^*)/n^*$ в окрестности порога.

5. Следствия критерия (теоретические предсказания)

Режимный критерий задаёт статистическую доступность порогового альтернативного канала через параметр K и тем самым даёт предсказания, не зависящие от микроскопических деталей активного центра при выполнении условий применимости и корректном определении p, Γ^* и E^* .

5.1. Порогоподобность при фиксированном канале

При плавном изменении внешних условий, увеличивающих поглощённую мощность на центр p или уменьшающих скорость потерь направленности Γ^* (то есть повышающих K), вероятность включения канала P_{open} меняется порогоподобно в области K порядка единицы. Резкость перехода усиливается при росте размера порога n^* : характерная ширина области переключения по K сжимается примерно как $1/\sqrt{n^*}$. Вне области переключения вероятность включения (или дополнение до единицы) подавлена экспоненциально по n^* .

5.2. Частотная селективность как следствие зависимости p

Если адресное поглощение селективно по частоте (например, за счёт резонансного возбуждения выделенной координаты или связанных мод), то p является функцией частоты, а следовательно, K также становится функцией частоты. Это приводит к окнам включения порогового канала: при сканировании частоты возможны резкие переключения маршрута и селективности в узких диапазонах, соответствующих росту p и выходу K в область порядка единицы. В режиме, где селективность по частоте исчезает и поглощение становится неспецифичным, критерий в форме селективного p теряет смысл и ожидаемый частотный контраст по K пропадает.

Замечание. Частота, поляризация, геометрия возбуждения и другие экспериментальные параметры не входят в выражение для K непосредственно. Их

влияние реализуется исключительно через изменение значений параметров r и Γ^* : например, за счёт частотной избирательности поглощения выделенной координатой (влияет на r) или изменения диссипативных путей (влияет на Γ^*). Поэтому любой эффект, зависящий от этих параметров, должен рассматриваться через их влияние на режимный параметр $K = r / (\Gamma^* \cdot E^*)$.

5.3. Геометрическая и структурная селективность как следствие зависимости Γ^*

Мезоструктура влияет на диссипативные пути утечки направленной энергии (сопряжение с матрицей, число каналов рассеяния, локальные моды, степень контакта с тепловыми степенями свободы) и тем самым изменяет Γ^* . Поэтому при одинаковой подведённой мощности и даже при сопоставимом тепловом фоне разные геометрии (поры, нанозазоры, интерфейсы, заполнение, шероховатость, состояние поверхности, давление/влажность) могут находиться в разных режимах включения, поскольку задают разные значения Γ^* и, следовательно, разные значения K .

Если геометрия создаёт пространственное окно наблюдения (активация заметна только в некоторой зоне, например по расстоянию/координате), это может быть следствием конкуренции пространственных зависимостей r и Γ^* (или E^*), а не нарушением критерия: окно возникает как область, где K выходит к значениям порядка единицы.

5.4. Перенормировка режима и проверяемый коллапс по K

Если для разных условий одной и той же системы корректно оценены r , Γ^* и E^* , то статистика включения должна определяться K , а не являться самостоятельной функцией температуры, частоты или общей подведённой мощности. В зависимости от того, что именно измеряется, коллапс проверяется в двух уровнях:

1. Коллапс на уровне доступности порога: P_{open} как функция K (в модельном смысле).
2. Коллапс на уровне наблюдаемого события: скорость событий R или вероятность события за окно времени T .

Связь между этими уровнями определяется интенсивностью события $h(n)$. В общем виде скорость событий равна

$$R = \sum_{n=0..\infty} P(n) \cdot h(n),$$

и коллапс наблюдаемой метрики по K гарантирован только при дополнительном условии, что в пороговой области интенсивность события слабо зависит от драйва и уровня возбуждения (например, $h(n) \approx h_0$ для $n \geq n^*$). Если h_0 существенно зависит от мощности, частоты, поля или состояния системы, то коллапс по одному K на уровне $P_{event}(T)$ может отсутствовать даже при корректном описании накопления-утечки.

5.5. Класс проявлений критерия

Ожидаемым проявлением является ситуация, когда при плавном изменении частоты, интенсивности, геометрии или условий среды наблюдается резкое переключение маршрута или селективности без обязательной корреляции с плавным ростом теплового фона. В таких системах изменение условий действует преимущественно через r (селективное поглощение выделенной координатой) и/или через Γ^* (изменение диссипативных путей в мезоструктуре), тогда как E^* является характеристикой порогового канала.

Критерий применим к системам, где энергия вводится селективно в выделенную координату и конкурирует с диссипацией: фотостимулированная десорбция и

перестройки адсорбат–поверхность, селективно возбуждаемые каталитические маршруты под действием ИК/ТГц накачки, пороговые структурные перестройки в нанозазорах и пористых матрицах, конформационные переключения в мягкой материи при адресной накачке внутренних мод.

5.6. Замечание для интерпретации

Предсказанные переключения по К не обязаны сопровождаться сопоставимым по масштабу термальным изменением выхода. Резкая смена маршрута возможна при слабом или трудноразличимом нагреве, если меняются p и/или Γ^* и система проходит через область К порядка единицы.

Для корректной интерпретации важно отличать режимный кроссовер по К от структурной перестройки системы. Наличие сильного гистерезиса, деградации или заметного дрейфа параметров указывает на изменение самих p , Γ^* , E^* или N_{eff} и требует явного учёта обратной связи “накачка → структура”.

5.7. Практическое применение

Для определения режима включения порогового канала требуется:

1. оценить p – поглощённую мощность на активный центр именно в выделенную координату;
2. определить E^* – пороговую энергию альтернативного канала по независимым энергетическим характеристикам (барьер, энергия перехода, энергетика адсорбции/десорбции и т.п.);
3. определить Γ^* – эффективную скорость потерь направленности в окрестности порога по временам релаксации или спектральным признакам затухания селективной компоненты;
4. вычислить $K = p/(\Gamma^* \cdot E^*)$ и использовать как режимный параметр, управляющий доступностью порога.

При $K \ll 1$ включение является редким; при $K \gg 1$ – типичным.

5.8. Нестационарный режим и границы применимости

При импульсной или временно-модулированной накачке $p = p(t)$, а потери направленности могут зависеть от времени и уровня возбуждения. В этом случае достижимость порога определяется тем, может ли направленная энергия накопиться до уровня порядка E^* за время, пока сохраняется направленность выделенной координаты. В стационарном пределе $p(t)=const$ и $\Gamma^*(t)=const$ условие сводится к режимному параметру $K = p/(\Gamma^* \cdot E^*)$.

Практическое условие аккумуляции. Вводится $\lambda = v \cdot t_{dir}$, где v – частота актов адресной накачки (частота импульсов/событий ввода), $t_{dir} = 1/\Gamma^*$ – время жизни селективной компоненты в пороговой области. Режим аккумуляции соответствует $\lambda \gg 1$; одноударный (неаккумуляционный) режим соответствует $\lambda \ll 1$. В этом случае процесс относится к неаккумуляционному (одноударному) режиму и требует отдельной модели, учитывающей временную структуру накачки и статистику ударов.

Для такого режима вводится ударный параметр

$$K_{imp} = (m \cdot v) / (\Gamma_{imp} \cdot n^*),$$

где v – частота импульсов, m – средний скачок уровня за импульс, Γ_{imp} – скорость экспоненциального забывания (потери направленности) между импульсами, n^* – пороговый уровень. В пределе частых импульсов ($v/\Gamma \gg 1$) ударная модель переходит в стационарный режим и K_{imp} стремится к K .

Важно: Γ_{imp} (забывание между импульсами) не тождественна Γ^* из стационарного критерия; Γ^* относится к потере селективности выделенной координаты в режиме квазистационара в окрестности порога.

6. Операционализация критерия и протокол определения параметров

В данном разделе задаётся воспроизводимая процедура применения критерия $K = p/(\Gamma^* \cdot E^*)$ к реальным системам и извлечения параметров p , E^* и Γ^* из экспериментальных данных (в том числе из публикаций). Раздел фиксирует правила интерпретации, чтобы исключить подмену величин и “подгонку” параметров под ожидаемый результат.

Тест 0 (до любых расчётов): проверка наличия направленности.

Перед применением критерия необходимо убедиться, что существует экспериментальный маркер селективного (адресного) возбуждения выделенной координаты, по которому можно определить τ_{dir} и Γ^* как скорость потери направленности, а не как тепловую релаксацию образца. Типовые маркеры: p_{imp} -probe; резонансная частотная/поляризационная зависимость; специфическая мода (ИК/Raman); изотопные/модовые селективные эффекты. При отсутствии таких признаков (наблюдается только общий нагрев) критерий K в данной форме не применяется.

Аналогично, если пороговое поведение определяется одноударным или резонансным процессом с ультракоротким временем жизни промежуточного состояния, исключающим аккумуляцию направленной энергии ($\lambda \ll 1$), режимный критерий K в аккумуляционном смысле неприменим.

Критерий сопоставляется с наблюдаемыми метриками (скорость событий или вероятность события за окно времени T), а не с условием “ $K = 1$ в точке порога”. Порог в эксперименте определяется операционально – по достижению фиксированного уровня отклика (например, $R = R_0$ или $R_{event}(T) = P_0$) при заранее заданных правилах определения p , Γ^* и E^* .

6.1. Операциональные определения и расчётные формы

Параметры определяются следующим образом:

- p – адресная мощность, приходящаяся на один эффективно вовлечённый центр (Вт/центр).
- E^* – пороговый энергетический масштаб включения альтернативного канала (Дж/центр).
- $\Gamma^* = 1/\tau_{dir}$ – эффективная скорость потери направленности в пороговой области; τ_{dir} – время потери селективной (направленной) компоненты энергии в выделенной координате.

τ_{dir} и Γ^* относятся к утрате селективной компоненты возбуждения выделенной координаты.

Практическое замечание. τ_{dir} должно относиться к пороговой области $E \approx E^*$. Использование малосигнального τ_{dir} допускается только как верхняя/нижняя оценка с явным интервалом $\Gamma^*_{min} \dots \Gamma^*_{max}$ и расчётом интервала $K_{min} \dots K_{max}$;

точечное значение Γ^* по малосигнальному режиму как «единственно верное» не используется.

Поскольку $\Gamma^* \cdot E^*$ имеет размерность мощности, K является безразмерным параметром режима, отражающим соотношение адресной накачки и пороговой “пропускной способности” утечки направленности в пороговой области.

Расчётные формы критерия:

1. Основная форма: $K = p / (\Gamma^* \cdot E^*)$.

2. В терминах измеряемых/восстановляемых величин: $K = (P_{abs,dir} / N_{eff}) / (E^* / \tau_{dir}) = (P_{abs,dir} \cdot \tau_{dir}) / (N_{eff} \cdot E^*)$,

где $P_{abs,dir}$ – мощность, действительно поступающая в выделенную координату (селективный вклад), N_{eff} – эффективное число реально вовлечённых центров, $\tau_{dir}(E^*)$ – характерное время потери направленности в режиме энергий порядка E^* , $\Gamma^* = 1 / \tau_{dir}(E^*)$. Если τ_{dir} зависит от уровня возбуждения, в расчёте используется τ_{dir} , соответствующее пороговой области по наблюдаемому признаку включения канала.

Определение Γ^* по данным. Пусть наблюдается селективный маркер направленного возбуждения $A(t)$ (rump-probe сигнал, амплитуда моды, селективная заселённость). Тогда локальная скорость потери направленности определяется как

$$\Gamma(E) = -d(\ln A)/dt.$$

Значение Γ^* выбирается по режиму, соответствующему энергии порядка E^* , то есть по пороговой области, выделенной по экспериментальному признаку включения альтернативного канала. При неэкспоненциальном затухании $A(t)$ Γ^* задаётся либо как локальный наклон на выбранном участке, либо как интервал значений, отражающий неопределенность выбора участка и возможную смену каналов релаксации в пороговой области.

Единицы: 1 эВ = $1.602176634 \times 10^{-19}$ Дж, $E^*[\text{Дж}] = E^*[\text{эВ}] \cdot 1.602176634 \times 10^{-19}$.

Оценка неопределенности. При независимых ошибках параметров приближенно:

$$(\Delta K / K)^2 \approx (\Delta P_{abs,dir} / P_{abs,dir})^2 + (\Delta \tau_{dir} / \tau_{dir})^2 + (\Delta N_{eff} / N_{eff})^2 + (\Delta E^* / E^*)^2.$$

В практических расчётах K следует приводить интервалом $K \in [K_{min}; K_{max}]$, получаемым подстановкой граничных значений параметров в допустимых диапазонах.

Анти-подгонка Γ^* . Γ^* запрещено определять из той же пороговой статистики, которую критерий должен объяснить (положение «порога» по драйву, $R(P)$, $P_{event}(T)$, подгонка $K \approx 1$). Γ^* задаётся только по независимому селективному маркеру потери направленности в пороговой области (rump-probe, временное затухание модового/спектрального признака, поляризационная/частотная селективность с измеримым временем спада) либо интервалом $\Gamma^*_{min} \dots \Gamma^*_{max}$ при наблюдаемой смене релаксационных каналов. Несогласие расчёта K с наблюдаемым откликом при независимой Γ^* трактуется как неверная оценка $P_{abs,dir}$ (или s), неверный выбор E^* или неприменимость стационарной схемы.

6.2. Процедура верификации по публикации

1. Операционально выделить режимы “ниже порога / пороговая область / выше порога” по экспериментальному признаку включения альтернативного канала (по R , по $P_{event}(T)$, по смене селективности, по появлению альтернативного пути и т.п.).

2. Извлечь параметры внешнего воздействия (интенсивность, мощность, ток/напряжение, длительность импульсов, частоту повторения, геометрию активной зоны), необходимые для оценки $P_{abs,dir}$ и проверки стационарности (в том числе сравнение временных масштабов).
3. Задать E^* как энергетический масштаб альтернативного канала, используя независимые энергетические данные для той же системы либо значения, обоснованные в рассматриваемой публикации. Если E^* выбирается из самой пороговой статистики, это должно быть явно отмечено как внутренняя оценка с последующей проверкой самосогласованности.
4. Оценить $\tau_{dir}(E^*)$ как время потери селективной компоненты именно выделенной координаты в пороговом режиме; положить $\Gamma^* = 1/\tau_{dir}(E^*)$. При отсутствии селективного маркера (только тепловой отклик) критерий в данной форме не применяется.
5. Оценить N_{eff} как эффективное число реально вовлечённых центров по геометрии и плотности центров (площадь/объём активной зоны, заполнение, концентрация, доля вовлечения, локализация поля). Если есть признаки, что N_{eff} меняется с драйвом (например, включаются новые "горячие точки"), это фиксируется отдельно, и сравнение режимов по одному K без учёта изменения N_{eff} некорректно.
6. Рассчитать K для каждого режима и проверить самосогласованность: при единой трактовке p , E^* и Γ^* наблюдаемый отклик (R или $P_{event}(T)$) должен монотонно возрастать при росте K . Центральная область кроссовера соответствует K порядка единицы в модельном смысле, однако операционально определённый "порог" может соответствовать любому фиксированному уровню отклика и не обязан совпадать с $K = 1$.
Необходимо проверить или явно оговорить, что интенсивность события $h(n)$ в пороговой области слабо зависит от управляющих параметров. Если $h(n)$ существенно зависит от режима, отсутствие коллапса по K может быть связано с изменением $h(n)$, а не с нарушением модели накопления-утечки.
7. При наличии неопределённостей задать диапазоны параметров и вычислить интервалы $K_{min}...K_{max}$ для каждого режима. Проверка самосогласованности считается успешной, если порядок режимов по наблюдаемому отклику согласуется с порядком режимов по K при неизменных правилах определения параметров, и если пересечение интервалов не разрушает вывод о монотонности в пределах ошибок.

Замечание о N_{eff} . Во многих работах абсолютная оценка N_{eff} затруднена. В этом случае критерий применим в двух практических формах: – для локальных событий допустимо принимать $N_{eff} = 1$, если событие реализуется на одном активном центре; – при сравнении режимов одной и той же системы достаточно анализировать относительные изменения K при изменении условий, если N_{eff} не меняется между сравниваемыми состояниями. Операционная калибровка N_{eff} по условию "пороговой области" допустима только как внутренняя калибровка данной постановки и требует последующей проверки согласованности на других режимах и/или независимых оценок.

6.3. Пример А: STM-индуцированная трансформация (десорбция/перемещение/переключение)

Адресная мощность в выделенную координату оценивается как $P_{abs,dir} \approx \eta_{inel} \cdot I \cdot V$, где I – ток, V – напряжение, η_{inel} – доля туннельной мощности, передаваемая в адресное возбуждение выделенной координаты.

Тогда $p = (\eta_{inel} \cdot I \cdot V) / N_{eff}$ и

$$K = (\eta_{inel} \cdot I \cdot V) / (N_{eff} \cdot \Gamma^* \cdot E^*) = (\eta_{inel} \cdot I \cdot V \cdot \tau_{dir}) / (N_{eff} \cdot E^*).$$

Пороговая энергия E^* выбирается как энергия барьера/десорбции/переключения либо эквивалентный пороговый энергетический масштаб альтернативного события. Время τ_{dir} относится к потере селективности выделенной координаты и не подменяется общим тепловым временем образца.

6.4. Пример В: STM-сравнение двух состояний (внутренняя проверка)

Для двух вариантов одной системы (1 и 2) при близких I , V и различающихся E^* и τ_{dir} :

$$K_1 = (\eta_{inel} \cdot I \cdot V) / (N_{eff} \cdot \Gamma^*_{-1} \cdot E^*_{-1}), \quad \Gamma^*_{-1} = 1/\tau_{dir,1}, \quad K_2 = (\eta_{inel} \cdot I \cdot V) / (N_{eff} \cdot \Gamma^*_{-2} \cdot E^*_{-2}), \quad \Gamma^*_{-2} = 1/\tau_{dir,2}.$$

Отношение не зависит от η_{inel} и N_{eff} :

$$K_1/K_2 = (\Gamma^*_{-2} \cdot E^*_{-2}) / (\Gamma^*_{-1} \cdot E^*_{-1}) = (E^*_{-2} / E^*_{-1}) \cdot (\tau_{dir,2} / \tau_{dir,1}).$$

Если по данным событие реализуется легче у варианта 1, то условие согласованности имеет вид $K_1 > K_2$ при единой трактовке параметров.

6.5. Пример С: оптическая/плазмонная накачка (SERS, наноструктуры) с порогом по мощности

Адресная мощность оценивается как $P_{abs,dir} \approx \eta_{abs} \cdot P_{in}$, где P_{in} – подводимая мощность (или мощность в локальной активной зоне), η_{abs} – доля, реально адресуемая выделенной координате.

Тогда $p = (\eta_{abs} \cdot P_{in}) / N_{eff}$ и

$$K = (\eta_{abs} \cdot P_{in}) / (N_{eff} \cdot \Gamma^* \cdot E^*) = (\eta_{abs} \cdot P_{in} \cdot \tau_{dir}) / (N_{eff} \cdot E^*).$$

Пороговый масштаб E^* задаётся энергетикой включения альтернативного канала либо эквивалентным энергетическим масштабом накопления в рамках выбранной модели.

6.6. Иллюстративный расчёт (оценка чувствительности K)

Пусть $E^* = 0.20$ эВ = $0.20 \cdot 1.602176634 \times 10^{-19}$ Дж = $3.204353268 \times 10^{-20}$ Дж. Пусть $\eta_{inel} \in [0.01; 0.05]$, $\tau_{dir} \in [0.1; 1.0]$ нс, $N_{eff} = 1$. Тогда

$$K = (\eta_{inel} \cdot I \cdot V \cdot \tau_{dir}) / (N_{eff} \cdot E^*).$$

Выбор трёх режимов по (I , V): ниже порога: $I = 0.20$ нА, $V = 0.60$ В; пороговая область: $I = 0.80$ нА, $V = 0.70$ В; выше порога: $I = 2.00$ нА, $V = 0.80$ В.

Интервальные оценки K для этих условий используются как демонстрация чувствительности K к диапазонам η_{inel} , τ_{dir} и выбору N_{eff} . Такой расчёт является иллюстративным и не заменяет проверку на конкретной системе, которая требует сопоставления наблюдаемой величины (R или $P_{event}(T)$) с рассчитанным K при единой трактовке p , E^* и Γ^* .

Реальный численный кейс из литературы (интервальная оценка). Рассмотрим данные работы Stokbro et al., Phys. Rev. Lett. 80, 2618 (1998) для STM-индуцированной десорбции Н с поверхности Si(100).

Берём параметры: $V \approx 1.5$ В, $I = 0.5\text{--}3$ нА, $\eta_{inel} \in [0.02; 0.05]$, $\tau_{dir} \in [0.2; 0.5]$ нс, $E^* \approx 0.3$ эВ, $N_{eff} = 1$. Тогда $K = (\eta_{inel} \cdot I \cdot V \cdot \tau_{dir}) / (N_{eff} \cdot E^*)$.

При $I = 1$ нА получаем $K \in [0.12; 0.75]$.
При $I = 3$ нА получаем $K \in [0.36; 2.25]$.

Переход через область K порядка единицы попадает в диапазон пороговых токов, где наблюдается резкий рост вероятности десорбции. Пример следует рассматривать как проверку порядка величины, а не как точную калибровку.

6.7. Критерии применимости и неприменимости (операциональная проверка)

Операциональная проверка считается успешной, если:

— наблюдаемый отклик (скорость события или вероятность события за фиксированное время) монотонно возрастает при росте K ; — изменения условий, увеличивающие r или уменьшающие Γ^* , сопровождаются ростом K одновременно с ростом наблюдаемого отклика; — согласованность достигается при единой трактовке параметров r , E^* и Γ^* во всех режимах без подмены r общей подведённой мощностью и без подмены Γ^* тепловым временем всей системы; — независимая оценка Γ^* (через время забывания селективного состояния) согласуется по порядку величины с Γ^* , используемым в расчётах.

Критерий неприменим в указанной форме, если отсутствуют экспериментальные признаки селективного возбуждения выделенной координаты (Γ^* как скорость потери направленности не определима), либо если система не находится в квазистационарном режиме (необратимая перестройка, деградация, выраженный гистерезис, дрейф N_{eff} или параметров канала).

7. Границы применимости

Режимный критерий относится к системам, в которых одновременно выполняются следующие условия.

1. Селективная выделенная координата. Существует внутренняя координата активного центра, в которую энергия может вводиться адресно и сохраняться в направленной (селективной) форме достаточно долго, чтобы конкурировать с утечкой в тепло.
2. Пороговый характер альтернативного маршрута. Существует хорошо определённый порог E^* включения альтернативного канала: до достижения энергии порядка E^* канал статистически недоступен, после достижения — становится доступным.
3. Описуемость потерь направленности через Γ^* . Потери направленности в окрестности порога могут быть охарактеризованы эффективной скоростью Γ^* как локальной величиной, относящейся к исчезновению селективной компоненты возбуждения выделенной координаты при энергиях порядка E^* .

Если альтернативный маршрут не является пороговым (нет E^*), если накачка не селективна (р не определима как мощность, поступающая именно в выделенную координату), либо если релаксация исключает аккумуляцию направленной энергии (Γ^* столь велика, что K остаётся малым при всех доступных условиях), критерий K не

предсказывает порогоподобного переключения сверх обычного кинетического/термального поведения.

7.1. Нестационарность и необратимая перестройка

Критерий предполагает квазистационарность параметров p , Γ^* и E^* на времени накопления направленной энергии и применим только при отсутствии необратимой перестройки системы. При необратимой перестройке системы (деградация, фазовый переход, изменение состояния поверхности, изменение N_{eff} , дрейф E^* или Γ^*) прямое применение критерия без учёта обратной связи "накачка \rightarrow структура" некорректно. В этом случае наблюдаемый "порог" может отражать изменение самих параметров системы, а не режимный кроссовер при фиксированных p , Γ^* и E^* .

7.2. Различие метрик P_{open} и наблюдаемого события

Критерий управляет статистической доступностью порога через P_{open} – хвост стационарного распределения уровней направленной энергии. Экспериментально обычно измеряется скорость события R или вероятность события за окно времени T . Связь вида $R \approx h_0 \cdot P_{open}$ применима только при корректно заданной "опасности" события в пороговой области и при слабой зависимости h_0 от драйва и состояния системы.

Если h_0 существенно зависит от мощности, частоты, поля, напряжения, локальной температуры или конфигурации активного центра, то наблюдаемая статистика $P_{event}(T)$ может не сводиться к функции одного P_{open} . В таком случае коллапс данных по K может нарушаться даже при корректной модели накопления-утечки, и это следует трактовать как признак необходимости расширения модели (включение зависимости "hazard" от режима или явное описание постпороговой динамики).

7.3. Одноударные и неаккумуляционные режимы

Вводится $\lambda = v \cdot \tau_{dir}$, где v – частота актов адресной накачки, $\tau_{dir} = 1/\Gamma^*$ – время жизни селективной компоненты в пороговой области.

Режим аккумуляции: $\lambda \gg 1$. Применим стационарный критерий $K = p/(\Gamma^* \cdot E^*)$ и выводы о $P_{open}(K)$.

Одноударный (неаккумуляционный) режим: $\lambda \ll 1$. Применима расширенная ударная постановка раздела 5.8 (параметр K_{imp} и статистика ударов); стационарный критерий K без расширения модели не используется.

7.4. Несколько конкурирующих пороговых каналов

Если в системе существует несколько альтернативных пороговых маршрутов, каждому каналу i соответствуют собственные параметры $E^*_{i,j}$ и $\Gamma^*_{i,j}$ и собственный параметр режима

$$K_{i,j} = p_{i,j}/(\Gamma^*_{i,j} \cdot E^*_{i,j}).$$

При сильной обратной связи открытие одного канала меняет параметры других (p , $\Gamma^*_{i,j}$, $E^*_{i,j}$), то есть параметры становятся состоянию зависимыми. Тогда используется кусочно-стационарное описание по состояниям s с наборами $(p_s, \Gamma^*_{\{i,s\}}, E^*_{\{i,s\}})$ и параметрами $K_{\{i,s\}}$; критерий K выступает диагностическим внутри состояния, а переходы между состояниями задаются отдельной моделью переключений (смена режима/структуре/канала).

При изменении условий возможны конкурирующие или последовательные переключения маршрута в зависимости от того, какие K_i входят в область порядка единицы. Критерий задаёт статистическую доступность каждого канала; фактическая

селективность после открытия нескольких каналов определяется совместной динамикой конкурирующих процессов и может требовать отдельного описания (в частности, при сильной конкуренции по общему ресурсу накачки или при общих структурных ограничениях).

7.5. Большие K и ограничения сверху

При $K \gg 1$ возможны ограничения применимости из-за насыщения адресного поглощения, конкурирующих каналов, изменения N_{eff} , смещения E^* и/или перестройки диссипативных путей (изменение Γ^*). Эти эффекты не отменяют режимный смысл критерия, но ограничивают область его прямого применения без учёта обратного влияния режима на параметры и без учёта нелинейностей в канале накачки и релаксации.

В случаях, когда при $K \gg 1$ включение альтернативного канала не наблюдается, это трактуется как нарушение предположений стационарности и/или селективности (изменение p, Γ^*, E^* или N_{eff}), а не как опровержение режимного критерия.

Насыщение адресного поглощения означает, что интенсивность накачки W может уменьшаться при росте уровня n . Тогда в пороговой области следует использовать локальную накачку W на уровне n^* . Режимный параметр в этом случае следует понимать как $K = W$ на уровне n^* делить на g на уровне n^* . Если W изменяется слабо в окрестности порога, то положение кроссовера остаётся в области K порядка единицы и ширина перехода по K масштабируется как $1/\sqrt{n^*}$. Если W заметно падает в окрестности порога, переход по внешнему драйву размывается и может смещаться.

В случае многоквантовых потерь в этих оценках вместо g на уровне n^* следует использовать G_1 на уровне n^* , то есть суммарную интенсивность потерь с учётом размера скачка.

7.6. Диагностический тест режимной природы

Для отделения режимного кроссовера, обусловленного изменением K , от структурной перестройки системы используются операциональные тесты:

- Воспроизводимость: при фиксированном драйве повторные серии, разнесённые по времени, дают одинаковую статистику события; наличие тренда/дрейфа трактуется как изменение параметров ($p, N_{eff}, E^*, \Gamma^*$).
- Масштабирование по числу центров: проверяется зависимость события от площади/объёма активной области и изменение N_{eff} с драйвом; при выявленном росте N_{eff} сравнение режимов по одному K без явного учёта N_{eff} считается некорректным.
- Пространственная локализация: карта “горячих точек” и её изменение с драйвом; в случае неоднородной накачки используется не один p , а верхний хвост распределения p_i , например квантиль p_q ($q \approx 0.99$), и соответствующий параметр $K_q = p_q / (\Gamma^* \cdot E^*)$. Коллапс по K_q при изменении драйва поддерживает режимную интерпретацию; отсутствие коллапса указывает на структурную/геометрическую перестройку или изменение механизма события.

8. Заключение

Сформулирован и доказан режимный критерий включения альтернативного порогового канала трансформации в мезоструктурированных средах при селективной накачке выделенной координаты активного центра. Введён безразмерный параметр режима

$$K = p / (\Gamma \cdot E)^{**},$$

который в стационарном режиме накопления–утечки определяет статистическую доступность порогового маршрута через сравнение адресной накачки и потерь направленности в окрестности порога.

В рамках минимальной стохастической модели рождения–гибели получено точное стационарное распределение уровней направленной энергии, а вероятность включения порогового канала определена хвостом этого распределения. Для линейной модели потерь установлено, что при большом размере порога включение приобретает порогоподобный характер: кроссовер локализован в области K порядка единицы и становится более резким при росте n^* , при экспоненциальной подавленности хвоста вне области переключения. Получена функция скорости $I(K) = K - 1 - \ln K$, а характерная ширина перехода по K масштабируется как $1/\sqrt{n^*}$. Показано, что выводы сохраняются для широкого класса нелинейных потерь при локально-эффективном определении Γ^* в пороговой области и при сравнении процессов по функциям потерь.

Критерий K имеет режимный характер: он не подменяет микроскопическую физико-химию конкретных процессов, но задаёт универсальный параметр статистической доступности порогового альтернативного маршрута через r , Γ^* и E^* . Это позволяет интерпретировать резкие переключения маршрутов и селективности при плавном изменении внешних условий, влияющих на адресное поглощение и потери направленности, без необходимости вводить температуру как управляющий параметр режима.

Практический вывод состоит в том, что режим включения управляется тремя величинами: увеличением адресной мощности r , уменьшением скорости потерь направленности Γ^* (например, за счёт изменения диссипативного окружения/мезоструктуры) и изменением порогового масштаба E^* при выборе альтернативного канала. Наблюдаемым подтверждением режимной природы критерия служит согласованность роста экспериментального отклика (скорости события или вероятности события за фиксированное время) с ростом K при единой операциональной трактовке r , Γ^* и E^* и при выполнении условий применимости. Значение K порядка единицы соответствует центральной области кроссовера в модельном смысле, тогда как операционально определяемый «порог» зависит от выбранной метрики регистрации и окна наблюдения.

Список литературы

1. Nicolis G., Prigogine I. *Self-Organization in Nonequilibrium Systems: From Dissipative Structures to Order through Fluctuations*. New York: Wiley, 1977. 491 p.
2. Zwanzig R. *Nonequilibrium Statistical Mechanics*. Oxford: Oxford University Press, 2001.
3. Van Kampen N. G. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. 3rd ed. Amsterdam: North-Holland (Elsevier), 2007.
4. Gardiner C. W. *Stochastic Methods: A Handbook for the Natural and Social Sciences*. 4th ed. Berlin; Heidelberg: Springer, 2009.
5. Touchette H. The large deviation approach to statistical mechanics. *Physics Reports*. 2009. Vol. 478, No. 1–3. P. 1–69.
6. Dembo A., Zeitouni O. *Large Deviations Techniques and Applications*. 2nd ed. Berlin; Heidelberg: Springer, 2010.
7. Feller W. *An Introduction to Probability Theory and Its Applications*. Vol. 1. 3rd ed. New York: Wiley, 1968.
8. Hänggi P., Talkner P., Borkovec M. Reaction-rate theory: fifty years after Kramers. *Reviews of Modern Physics*. 1990. Vol. 62. P. 251–341.
9. Eyring H. The Activated Complex in Chemical Reactions. *The Journal of Chemical Physics*. 1935. Vol. 3, No. 2. P. 107–115.
10. Cugliandolo L. F. The effective temperature. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2011. Vol. 44. 483001.

11. Rugh H. H. Dynamical Approach to Temperature. *Physical Review Letters*. 1997. Vol. 78, No. 5. P. 772–774.
12. Berthier L., Biroli G. Theoretical perspective on the glass transition and amorphous materials. *Reviews of Modern Physics*. 2011. Vol. 83. P. 587–645.
13. Stokbro K., Thirstrup C., Sakurai M., Quaade U., Hu B. Y.-K., Perez-Murano F., Grey F. STM-Induced Hydrogen Desorption via a Hole Resonance. *Physical Review Letters*. 1998. Vol. 80, No. 12. P. 2618–2621.
14. Avouris P., Walkup R. E., Rossi A. R. STM-induced H atom desorption from Si(100): isotope effects and site selectivity. *Chemical Physics Letters*. 1996. Vol. 257, No. 1–2. P. 148–154.
15. Ueba H. Adsorbate motions induced by inelastic-tunneling current. *The Journal of Chemical Physics*. 2005. Vol. 123, No. 8. 084707.
16. Maher R. C., Galloway C. M., Le Ru E. C., Cohen L. F., Etchegoin P. G. Vibrational pumping in surface enhanced Raman scattering (SERS). *Chemical Society Reviews*. 2008. Vol. 37, No. 5. P. 965–979.
17. Redner S. *A Guide to First-Passage Processes*. Cambridge: Cambridge University Press, 2001.

© 2025 Рыбаков Павел Игоревич. Все права защищены.

Лицензия: Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International

Идентификаторы:

10.5281/zenodo.18033955

ORCID: 0009-0001-7921-9499

Контакты:

Email: pavel_rabota1996@mail.ru

VK: vk.com/id1059469430