

Режимный критерий K 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 $t_{\text{loss}} \approx 1/\Gamma^*$ к времени накопления порога $t_{\text{pump}} \approx E/p^*$.

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

Стационарная вероятность включения канала $P_{\text{open}} = P\{n \geq n^*\}$ 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: $p = P_{\text{abs,dir}} / N_{\text{eff}}$, где $P_{\text{abs,dir}}$ — мощность, реально поглощаемая выделенной координатой, N_{eff} — эффективное число активных центров, фактически вовлечённых в адресное поглощение.

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

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

а режимный параметр может быть записан в эквивалентной форме

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

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 $P_{\text{abs,dir}}$ определяется из независимых данных о поглощении или энергетическом балансе, а N_{eff} — по числу реально вовлечённых центров.

Оценка N_{eff} :

$N_{\text{eff}} = 1$ — локальное событие на одном центре (STM, одиночный адсорбат или сайт);
 $N_{\text{eff}} = (\text{плотность центров}) \times (\text{активная площадь или объём}) \times (\text{доля вовлечения})$ — 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 p на центр, поскольку $p = P_{abs,dir}/N_{eff}$ может оставаться близким к прежнему при росте N_{eff} . Сравнение режимов по K требует фиксации N_{eff} по режимам либо постановок с $N_{eff} \approx const$ (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 pump-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:

- pump-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 p и Γ^* не

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

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: $p = P_{\text{abs,dir}}/N_{\text{eff}}$, $\Gamma^* = 1/\tau_{\text{dir}}(E^*)$, $K = p/(\Gamma^* \cdot E^*)$, $n^* = \lceil E^*/e0 \rceil$ (в дискретной модели).

$$s = P_{\text{abs,dir}} / P_{\text{abs}} \text{ — селективная доля поглощённой мощности.}$$

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

$$n^* = \lceil E^*/e0 \rceil,$$

где e_0 — шаг энергии, а $\lceil \cdot \rceil$ означает округление вверх.

Замечание о дискретизации. При определении $n^* = \lceil E^*/e_0 \rceil$ выполняется $E^* \leq n^* \cdot e_0 < E^* + e_0$, то есть в дискретной модели пороговой энергии соответствует уровень $E^*_{\text{disc}} = n^* \cdot e_0$. Относительная ошибка замены порядка e_0/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 $G_1(n)$ равной сумме $m \cdot g_m(n)$ по всем m . Локально эффективная скорость потерь в пороговой области задаётся как $\Gamma^* = G_1(n^*)/n^*$, а режимный параметр принимает вид $K = W/G_1(n^*)$. При конечном среднем размере скачка граница режимов сохраняется в области K порядка единицы.

На уровне n накопленная направленная энергия равна $E = n \cdot e_0$. Каждый акт перехода $n \rightarrow n - 1$ уменьшает энергию на e_0 , поэтому мощность потерь направленности на уровне n имеет порядок $g(n) \cdot e_0$. 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 $p = W \cdot e_0$, то есть

$$W = p / e_0.$$

4.1.1. Эквивалентность форм критерия и независимость от шага e_0

Введём локально-эффективную скорость потерь направленности в окрестности порога:

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

При согласованном определении $E^* = n^* \cdot e_0$ получаем эквивалентность двух форм режимного критерия:

$$K = p / (\Gamma^* \cdot E^*) = (W \cdot e_0) / ((g(n^*)/n^*) \cdot (n^* \cdot e_0)) = W / g(n^*).$$

Следовательно, критерий K не зависит от выбора шага дискретизации e_0 при согласованной постановке порога ($E^*_{\text{disc}} = n^* \cdot e_0$): 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 $G_1(n^*) = \sum m \cdot g_m(n^*)$ по всем m . Тогда эквивалентные записи принимают вид $\Gamma^* = G_1(n^*)/n^*$ и $K = W/G_1(n^*)$, а все рассуждения о независимости от шага e_0 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

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

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

$$P(0) = 1 / (1 + \sum_{n=1..∞} \prod_{k=1..n} (W / g(k))).$$

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

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

Тогда для больших n имеем $W/g(n) \leq 1/(1+\epsilon)$, 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:

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

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

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

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/с) — 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

$$P(n^*) \approx (\text{константа}) \cdot n^{*-1/2} \cdot \exp(-n^* \cdot I(K)).$$

Поскольку отношение соседних термов равно $P(n+1)/P(n) = \mu/(n+1)$, то при $K < 1$ хвост $\sum_{n=n^*.. \infty} P(n)$ 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 $P_{\text{open}}(\cdot) = \sum_{n=n^*.. \infty} P(n)$.

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

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

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

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, $q(n)$ не возрастает по n .

Рассмотрим хвостовые суммы

$$S(k) = \sum_{n=k..∞} P(n),$$

$$S_+(k) = \sum_{n=k..∞} P_+(n) = \sum_{n=k..∞} q(n)P(n).$$

Поскольку $q(n)$ не возрастает, 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 $q(n)$ не возрастает, 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 $P_{\text{open}}(g)$ зажата 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 ρ и Γ^* : например, за счёт частотной избирательности поглощения выделенной координатой (влияет на ρ) или изменения диссипативных путей (влияет на Γ^*). Поэтому любой эффект, зависящий от этих параметров, должен рассматриваться через их влияние на режимный параметр $K = \rho / (\Gamma^* \cdot E^*)$.

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 ρ 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 ρ , 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: $P_{\text{ореп}}$ 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 $P_{\text{event}}(T)$ 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 ρ (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 K 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 K порядка единицы.

Для корректной интерпретации важно отличать режимный кроссовер по K 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 $p(t)=\text{const}$ и $\Gamma^*(t)=\text{const}$ условие сводится к режимному параметру $K = p/(\Gamma^* \cdot E^*)$.

Практическое условие аккумуляции. Вводится $\lambda = \nu \cdot \tau_{\text{dir}}$, где ν — частота актов адресной накачки (частота импульсов/событий ввода), $\tau_{\text{dir}} = 1/\Gamma^*$ — 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

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

где ν — частота импульсов, m — средний скачок уровня за импульс, Γ_{imp} — скорость экспоненциального забывания (потери направленности) между импульсами, n^* — пороговый уровень. В пределе частых импульсов ($\nu/\Gamma \gg 1$) 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: pump-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 $P_{\text{event}}(T) = P_0$) 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).

— $\Gamma^* = 1/\tau_{\text{dir}}$ — 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 $\Gamma^*_{\text{min}} \dots \Gamma^*_{\text{max}}$ и расчётом интервала $K_{\text{min}} \dots K_{\text{max}}$;

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/восстанавливаемых величин: $K = (P_{\text{abs,dir}}/N_{\text{eff}}) / (E^*/\tau_{\text{dir}})$
 $= (P_{\text{abs,dir}} \cdot \tau_{\text{dir}})/(N_{\text{eff}} \cdot E^*)$,

где $P_{\text{abs,dir}}$ — мощность, действительно поступающая в выделенную координату (селективный вклад), N_{eff} — эффективное число реально вовлечённых центров, $\tau_{\text{dir}}(E^*)$ — характерное время потери направленности в режиме энергий порядка E^* , $\Gamma^* = 1/\tau_{\text{dir}}(E^*)$. 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 $A(t)$ (pump-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 неопределённость выбора участка и возможную смену каналов релаксации в пороговой области.

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

Оценка неопределённости. При независимых ошибках параметров приближённо:

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

В практических расчётах K следует приводить интервалом $K \in [K_{\text{min}}; K_{\text{max}}]$, 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, $R(P)$, $P_{\text{event}}(T)$, подгонка $K \approx 1$). Γ^* задаётся только по независимому селективному маркеру потери направленности в пороговой области (pump-probe, временное затухание модового/спектрального признака, поляризационная/частотная селективность с измеримым временем распада) либо интервалом $\Gamma^*_{\text{min}} \dots \Gamma^*_{\text{max}}$ при наблюдаемой смене релаксационных каналов. Несогласие расчёта K с наблюдаемым откликом при независимой Γ^* трактуется как неверная оценка $P_{\text{abs,dir}}$ (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 $P_{\text{event}}(T)$, 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. Операциональная 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

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

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} :

$$K_1 = (\eta_{\text{inel}} \cdot I \cdot V) / (N_{\text{eff}} \cdot \Gamma^*_1 \cdot E^*_1), \quad \Gamma^*_1 = 1/\tau_{\text{dir},1}, \quad K_2 = (\eta_{\text{inel}} \cdot I \cdot V) / (N_{\text{eff}} \cdot \Gamma^*_2 \cdot E^*_2), \\ \Gamma^*_2 = 1/\tau_{\text{dir},2}.$$

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

$$K_1/K_2 = (\Gamma^*_2 \cdot E^*_2) / (\Gamma^*_1 \cdot E^*_1) = (E^*_2/E^*_1) \cdot (\tau_{\text{dir},2}/\tau_{\text{dir},1}).$$

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

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

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

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

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

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

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 $P_{\text{event}}(T)$) 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, $\eta_{\text{inel}} \in [0.02; 0.05]$, $\tau_{\text{dir}} \in [0.2; 0.5]$ нс, $E^* \approx 0.3$ эВ, $N_{\text{eff}} = 1$. Тогда
 $K = (\eta_{\text{inel}} \cdot I \cdot V \cdot \tau_{\text{dir}}) / (N_{\text{eff}} \cdot E^*)$.

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 (r 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 $R \approx h_0 \cdot P_{\text{open}}$ 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 $P_{\text{event}}(T)$ 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 $\lambda = v \cdot \tau_{\text{dir}}$, где v — частота актов адресной накачки, $\tau_{\text{dir}} = 1/\Gamma^*$ — время жизни селективной компоненты в пороговой области.

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

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 и Γ^*_i и собственный параметр режима

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

При сильной обратной связи открытие одного канала меняет параметры других (p , Γ^*_i , E^*_i), то есть параметры становятся состояниемзависимыми. 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/структуры/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^* , Γ^*).
- 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 ρ , 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 ρ , 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 ρ , 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