

01;02;05

О роли динамического хаоса в рекомбинационно-стимулированных атомных процессах

© А.Б. Авилов, Б.А. Арапов, Б.Л. Оксенгендлер

Ошский государственный университет, г. Ош, Кыргызстан
Институт ядерной физики АН РУз, Ташкент

Поступило в Редакцию 15 сентября 1999 г.

Предлагается первое систематическое объяснение обнаруженных расходимостей теории и эксперимента на основе представлений о динамическом хаосе, развивающемся в дефектной квази-молекуле.

В 70-е гг. было показано, что перезарядка дефектов и примесей, вносящих глубокие уровни в запрещенную зону, чрезвычайно эффективно воздействует на атомные перестройки [1–2]. Весьма удобно этот канал стимулирования описывается в рамках подхода Райса–Рамспергера–Косселя (РПК) [3], согласно которому энергия электронного перехода (E_{ex}) выделяется на колебательных степенях свободы дефектной квази-молекулы (включающей N атомов, т. е. $S = 3N$ степеней свободы); после этого колебания S -степеней свободы интерферируют и возбуждают ”Координату реакции”, описывающую атомную перестройку с энергией активации $E_{def} = E_d$.

Отметим, что этот метод описания апробирован не только в рекомбинационно-стимулированных процессах в полупроводниках [1–2], но и в других областях диссоциации многоатомных молекул [3], распада колебательно-возбужденных кластеров [4], процессах лазерной фотохимии [5] и даже при распаде компаунд-ядра [6–7].

Несмотря на отмеченные успехи, этот подход не свободен и от проблем. Так, при анализе рекомбинационно-стимулированных реакций в полупроводниках было выявлено, что теоретически рассчитанная вероятность такого канала стимулирования всегда оказывается выше

экспериментальной величины:

$$W_{th} > W_{exp}$$

(см. [1–2]). Другой трудностью является логическая неясность имеющегося подхода — каков характер накопления энергии выделенной степенью свободы: координатой реакции в едином акте и порциями?

Мы полагаем, что оба отмеченных несоответствия могут быть учтены на основе ряда эффектов, т. е. динамического хаоса [8].

Суть идеи состоит в следующем. Пусть связанная многочастичная система (например, квазимолекула, кластер, ядро) возбуждается таким образом, что в момент времени $t = 0$ в этом процесс вовлечено большинство (или все) степеней свободы. Как известно [3], вероятность концентрации энергии E_d на выделенной степени свободы равна

$$P = [1 - E_d/E_{ex}]^{S-1}, \quad (1)$$

где S — число степеней свободы молекулы, E_{ex} — первоначальная энергия возбуждения молекулы.

Однако если рассмотреть процесс накопления энергии на выделенной степени свободы детально, то в случае (по-видимому, наиболее реальном) последовательного накопления этой энергии происходит постепенное увеличение амплитуды колебания этой степени свободы, вследствие чего должна возрастать вероятность обратного сброса избытка энергии в другие степени свободы квазимолекулы, соответствующего стохастизации состояний [8]. Более того, можно ожидать, что с увеличением значения энергии E_{ex} вся колеблющаяся молекула находится в некотором состоянии, когда перераспределение энергии между выделенной и остальными степенями свободы оказывается систематическим явлением, где сосуществуют как детерминизм, так и хаотизация, т. е. эффекты детерминированного хаоса. По-видимому, для обсуждаемой ситуации наиболее подходящим эффектом является перемежаемость, т. е. состояние, когда вслед за "ламинарным" накоплением энергии на выделенной степени свободы ("ламинарная фаза") следует стохастизация колебаний ("турбулентная фаза"); при этом каждая из фаз характеризуется своей длительностью (рис. 1). В этой ситуации можно говорить о статистическом распределении длин "ламинарного" и "турбулентного" участков: $P(t)$ и $\Omega(t)$ соответственно. Возвращаясь

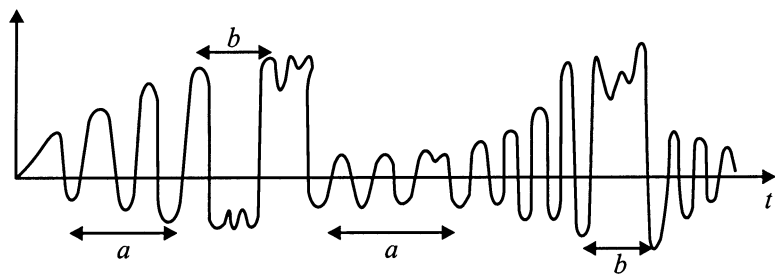


Рис. 1. Изменение во времени величины смещения координаты реакции, включающее как регулярные ("ламинарные") (а), так и стохастические (b) режимы движения.

к обсуждаемой нами системе колеблющейся многоатомной квазимолекулы следует предположить, что накопление энергии E возможно лишь только в том случае, когда длительность ламинарной фазы превосходит некоторое критическое значение t^* , которое может быть выражено как

$$t^* = t_0 [E_{ex}/(E_{ex} - E_d)]^{S-1}. \quad (2)$$

Здесь t_0 — средний период колебаний атомов в молекуле. Из существующих 3 видов перемежаемости — 1, 2 и 3 родов наш случай разрыва химической связи как результат суперпозиции колебаний многоатомной квазимолекулы, характеризуемый отклонением выбранной химической связи от положения равновесия как в положительную, так и в отрицательную стороны, соответствует перемежаемости 3 рода. Тогда распределение длин ламинарных участков имеет вид [9]

$$P(t) = \exp 4\epsilon t / (\exp 4\epsilon t - 1)^{1.5}, \quad (3)$$

где ϵ — параметр системы, указывающий на близость системы к состоянию бифуркации, разделяющий чисто детерминистическое ее поведение от появления хаоса. В нашем случае эта величина должна зависеть как от степени ангармонизма системы, так и от уровня ее возбуждения. Таким образом, вероятность того, что выделенная степень свободы успеет накопить энергию E_d прежде, чем случится хаотизация,

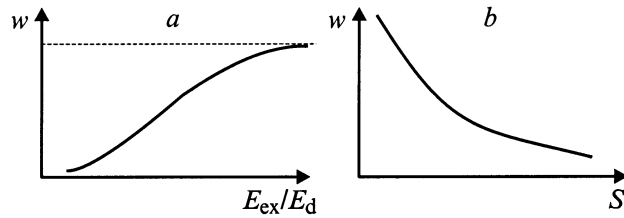


Рис. 2. Вероятности достижения критической величины координаты реакции, достаточной для процесса атомной перестройки, в зависимости от отношения энергии возбуждения E_{ex} к порогу реакции E_d (а) и от размера дефектной квазимолекулы S (б).

будет равна:

$$\omega = \int_{t^*}^{\infty} p(t)dt / \int_{t_0}^{\infty} p(t)dt = \frac{\exp\{-2\varepsilon t_0 [E_{ex}/(E_{ex} - E_d)]^{S-1}\}}{\exp(-2\varepsilon t_0)} \times \left[\frac{1 - \exp(-4\varepsilon t_0)}{1 - \exp[-4\varepsilon t_0 (E_{ex}/(E_{ex} - E_d))]^{S-1}} \right]^{1/2}. \quad (4)$$

При этом ω зависит от всех энергетических параметров (E_{ex} , E_d) и числа степеней свободы S (рис. 2).

Таким же образом можно рассчитать аналогичные вероятности ω и для перемежаемостей остальных типов. Это может оказаться важным для ряда других физических систем.

Пытаясь решить указанные выше проблемы теории РРК, общую вероятность реализации процесса (1) теперь можно записать с учетом эффектов динамического хаоса в следующем виде:

$$W = \omega [1 - E_d/E_{ex}]^{S-1}. \quad (5)$$

Если существует некое распределение вероятности получения энергии возбуждения — $R(E_{ex})$, то

$$\langle W \rangle = \int R(E_{ex})w(E_{ex})[1 - E_d/E_{ex}]^{S-1}dE_{ex}. \quad (6)$$

Конкретно для задачи о фрагментации кластеров-дефектов необходимо учесть и вероятность образования кластеров с различным числом степеней свободы S . Если распределение этой вероятности $\varphi(S)$, то

$$\langle\langle W \rangle\rangle = \iint R(E_{ex})\varphi(S)\omega(E_{ex}, S)[1 - E_d/E_{ex}]^{S-1}dE_{ex}dS. \quad (7)$$

Подводя итог, можно сказать, что многочастичные нелинейные колеблющиеся системы, уровень возбуждения которых позволяет осуществиться процессам распада хотя бы по одной степени свободы, должны характеризоваться сложным состоянием неустойчивости типа перемежаемости. В этом состоянии реализуется детерминированный хаос, адекватный анализ которого позволяет проанализировать распад системы в рамках теории РПК, но с учетом характера накопления энергии. Можно предположить, что развитые выше соображения имеют достаточно широкую область применения.

Список литературы

- [1] Юнусов М.С. и др. Подпороговые радиационные эффекты в полупроводниках. Ташкент: Фан, 1989. 189 с.
- [2] Kimellhlg L. // Sol. St. Electron. 1978. V. 21. N 11–12. P. 1391–1401.
- [3] Робинсон П., Холбрук К. Мономолекулярные реакции. М.: Мир, 1975.
- [4] Dzheimley N. et al. // Illt. 1. Mass. Spectroh. Ion. Processes. 1991. V. 107. P. 19.
- [5] Zewail A. // Plisics Today. 1980. N 11. P. 27.
- [6] Бор Н. Избранные научные труды. М.: Наука, 1971. Т. 2. С. 192–202.
- [7] Ахиезер А., Померанчук Н. Некоторые вопросы теорий ядра. М., 1948. 318 с.
- [8] Chirikov B.V. // Phis. Rep. 1979. V. 52. P. 463.
- [9] Шустер Г. Детерминированный хаос. М.: Мир, 1983. 232 с.