

УДК 519.6

МОДЕЛИРОВАНИЕ МЕТОДОМ МОНТЕ- КАРЛО ЭЛЕКТРОННЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ СТОЛКНОВЕНИИ АТОМОВ С ПОВЕРХНОСТЬЮ

М. В. Гранкин

Аспирант

Кафедра информатики
Приазовский государственный
технический университет,
ул. Университетская 7, г. Мариуполь,
Украина, 87500

E-mail: theflint@gmail.com

А. А. Каргин

Доктор технических наук, профессор
Кафедра компьютерных технологий

Донецкий национальный университет
ул. Университетская 24, г. Донецк, Украина, 83001

E-mail: kargin@dongu.donetsk.ua

Розроблено модель механізму гетерогенної рекомбінації атомів на ZnS, ZnS, CdS-Ag за участю метастабільних електронних станів, що генеруються іонізуючим випромінюванням. Проведено чисельне та математичне моделювання, знайдено, що електронний канал може бути основним каналом акомодатії енергії рекомбінації атомів H на розглянутих зразках. Встановлені області активаційного і релаксаційного каталізу

Ключові слова: метод Монте-Карло, математичне моделювання, алгоритм, акомодатія, поверхня

Разработана модель механизма гетерогенной рекомбинации атомов на ZnS, ZnS, CdS-Ag при участии метастабильных электронных состояний, генерируемых ионизирующим излучением. Проведено численное и математическое моделирование, установлено, что электронный канал может быть основным каналом аккомодации энергии рекомбинации атомов H на рассматриваемых образцах. Установлены области активационного и релаксационного катализа

Ключевые слова: метод Монте-Карло, математическое моделирование, алгоритм, аккомодация, поверхность

1. Введение

Взаимодействие атомов (например, водорода) с поверхностью неметаллов может сопровождаться неравновесным свечением твердого тела, которое обусловлено энергией экзотермической рекомбинации атомов на поверхности и связано с электронным возбуждением поверхности. Исследование электронных процессов на поверхности твердых тел при хемовозбуждении важно для дальнейшего развития представлений о механизмах гетерогенной хемилюминесценции, хемоэмиссии и других электронных хемоэффектов. Неравновесные процессы и энергообмен в элементарных актах взаимодействия газ-твердое тело определяют поведение каталитических структур, полупроводниковых приборов опто- и микроэлектроники и могут быть высокочувствительным инструментом исследования твердого тела и элементарных актов энергообмена в системах газ – поверхность. Для ряда исследований (адсорбция атомов и молекул), приложений (химические и газовые лазеры), а также в гетерогенном катализе, плазмохимии и др. важно знать механизмы взаимодействия атомных частиц с поверхностью. Важным инструментом для этого является математическое моделирование. Для пространственно неоднородной поверхности наиболее эффективными сегодня являются стохастические методы, а именно метод Монте-Карло.

2. Анализ литературных данных и постановка проблемы

При взаимодействии атомных частиц из плазмы с поверхностью основное энерговыделение обусловлено химическими превращениями на поверхности. Большое число гетерогенных химических реакций протекает с большим энерговыделением (несколько электронвольт на локальный акт). К числу таких экзотермических реакций относится гетерогенная рекомбинация атомов простых газов (H, O и др). Выделяющаяся в акте рекомбинации атомов энергия в первый момент времени сосредоточена в виде колебаний ядер вновь образованной колебательно-возбужденной молекулы. Затем молекула релаксирует, отдавая свою энергию на различные степени свободы твердого тела [1] и продукта реакции [2] (процесс аккомодации). Наряду с фононным каналом аккомодации теплоты реакции сегодня активно обсуждается электронный канал аккомодации [3]. Электронная аккомодация проявляется в таких явлениях, как гетерогенная хемилюминесценция (ГХЛ), хемоэмиссия заряженных частиц с поверхности, неравновесная хемопроводимость и др [3]. Вследствие низкой энергии налетающих на поверхность атомных частиц и специфики гетерогенных реакций происходит электронное возбуждение собственно поверхности (несколько монослоев [4]), и

поэтому ГХЛ несет информацию собственно о поверхности и физико-химических процессах на ней.

Для металлов, у которых нет запрета на величину аккомодируемой энергии по электронному каналу, определяющей скорость гетерогенной реакции может быть аккомодация колебательной энергии молекул свободными электронами металла [5]. Об электронном канале аккомодации теплоты реакции свидетельствует наблюдаемая в опытах генерация горячих электронов в диодах Шоттки [6]. В [7] было найдено, что электронный канал аккомодации может быть также эффективным и в случае релаксации колебательно-возбужденных молекул на широкозонных материалах, если они имеют систему мелких ловушек, которые заполнены при воздействии ионизирующим излучением.

На процессы аккомодации и скорость радиационно-стимулированных реакций в твердых телах и гетерогенной реакции влияют активные центры. При рассмотрении физико-химических процессов на поверхности твердого тела предполагается, что реакция на различных удаленных друг от друга активных участках поверхности протекает синхронно и адсорбционный слой случайно перемешан и содержит бесконечно много частиц [8]. Приближенный характер такого рассмотрения не всегда оправдан. Возможны флуктуации в концентрации реагентов и скорости реакции на отдельных участках поверхности, особенно если это наноразмерные участки, что наблюдается в случае, если на поверхности создана, например, система наноточек, осуществляющих катализ отдельных стадий реакции. Флуктуации в концентрации реагентов на отдельных участках поверхности можно создать также за счет активации квантовых центров ионизирующим излучением, которые являются центрами аккомодации теплоты реакции по электронному каналу.

Детальное изучение таких процессов требует привлечения стохастического моделирования, в основу которого может быть положен метод Монте-Карло [9].

3. Цель и задачи исследования

Цель работы – исследование механизмов взаимодействия атомов водорода с поверхностью кристаллофосфоров ZnS, ZnS,CdS-Ag и аккомодации энергии реакционных столкновений атомов по электронному каналу. Проведение численного моделирования реакционных взаимодействий атомов водорода с цинксульфидными кристаллофосфорами, на которые производится воздействие ионизирующего УФ излучения. Разработка алгоритма и создание программы для моделирования процессов на неоднородной поверхности полупроводников вероятностным методом Монте-Карло.

Задача исследований – рассчитать скорость реакции в зависимости от концентрации заполненных электронами центров электронной аккомодации и определить концентрацию всех реагентов, описываемых в модели.

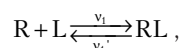
4. Влияние ионизирующего излучения на скорость реакции

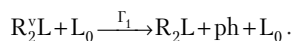
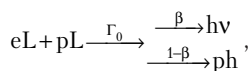
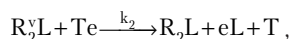
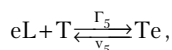
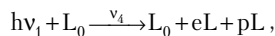
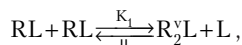
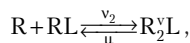
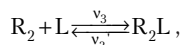
Удобной системой для изучения стимулированной ионизирующим излучением аккомодации теплоты реакции по электронному каналу являются запасающие кристаллофосфоры (такие как ZnS, ZnS,CdS-Ag) и водород. Молекула водорода, образующаяся в реакции, обладает самым большим колебательным квантом из всех молекул, многократно превышающим энергию фононов в кристалле, что затрудняет аккомодацию энергии по фонному каналу и ведет к увеличению времени жизни колебательно-возбужденных молекул на поверхности. Кристаллофосфоры ZnS, ZnS,CdS-Ag имеют яркую ГХЛ в атомарном водороде, которая связана с электронной аккомодацией энергии реакции, и систему мелких электронных ловушек, глубина которых меньше или близка к энергии колебательного кванта H_2^v . Исследуемый кристаллофосфор ZnS,CdS-Ag имел ловушки с глубиной залегания их под дном зоны проводимости 0,2 и 0,6 эВ. В монокристалле ZnS максимальная концентрация была для ловушек с глубиной $E=1,1$ эВ.

Предварительное облучение образцов УФ светом приводило к увеличению интенсивности ГХЛ – $I_{ГХЛ}$. Воздействие импульсным потоком атомов Н на образец ZnS,CdS-Ag приводило к увеличению $I_{ГХЛ}$ на 3 порядка величины по сравнению с невозбужденными УФ светом образцами. Для монокристалла ZnS увеличение $I_{ГХЛ}$ составляло 5 порядков величины [10]. Наблюдалась прямопропорциональная зависимость $I_{ГХЛ}$ от заполнения ловушек электронами. Это свидетельствует об участии возбужденных электронных состояний в аккомодации энергии реакции, а превышение на несколько порядков величины $I_{ГХЛ}$ по сравнению с $I_{ГХЛ}$ невозбужденных образцов указывает на большую вероятность этого процесса. В опытах вероятность возбуждения электрона на мелкой ловушке колебательно-возбужденной молекулой водорода была близка к 1 [10]. Столь высокая эффективность обусловлена миграцией горячей молекулы H_2^v по поверхности на большие (до 100 нм) длины пробега до момента ее релаксации (по фонному или электронному каналам) [10].

5. Модель механизма гетерогенной рекомбинации атомов при участии метастабильных электронных состояний, генерируемых ионизирующим излучением и результаты моделирования

Реакция гетерогенной рекомбинации атомов водорода на поверхности сопровождается образованием колебательно-возбужденных молекул H_2^v . Наличие колебательно-возбужденных молекул на поверхности может приводить к распаду H_2^v на атомы [11], генерации фононов в твердом теле и электронному возбуждению кристалла. Электроны на ловушках могут выступать в качестве центров аккомодации колебательной энергии молекул H_2^v по электронному каналу вследствие явления высокоэффективной электронной гетерогенной аккомодации (ВЭГА). Механизм данной реакции включает следующие стадии:





Здесь v_i, v_i' - отнесенные к единице времени скорости отдельных стадий реакции, Γ_i, k_i - константы скорости соответствующих процессов, μ - вероятность распада образованной в реакции колебательно-возбужденной молекулы R_2^vL на атомы. Кроме того введем обозначения для концентраций атомов и молекул на поверхности в момент времени t :



В соответствии с моделью, скорость реакции равна

$$v(t) = (\Gamma_1 N_0 + \Gamma_e N_0 + k_2 n_e(t)) \cdot N_2^v(t), \tag{1}$$

где $N_2^v(t)$ может быть найдена из уравнения:

$$\dot{N}_2^v(t) = v_2 N_1 + k_1 N_1^2 - (\Gamma_1 N_0 + \Gamma_e N_0 + k_2 n_e(t)) \cdot N_2^v - \mu N_2^v.$$

Из условия квазистационара:

$$N_2^v = \frac{v_2 N_1 + k_1 N_1^2}{\Gamma_1 N_0 + \Gamma_e N_0 + k_2 n_e + \mu}, \tag{2}$$

Подставив (2) в (1) имеем для скорости реакции:

$$v(t) = \frac{\Gamma_1 N_0 + \Gamma_e N_0 + k_2 n_e}{\Gamma_1 N_0 + \Gamma_e N_0 + k_2 n_e + \mu} (v_2 N_1 + k_1 N_1^2), \tag{3}$$

Если процессы релаксации R_2^vL происходят быстро и не лимитируют скорость реакции, то $\mu \ll \Gamma_1 N_0 + \Gamma_e N_0 + k_2 n_e$ и из (3) имеем:

$$v(t) = v_2 N_1 + k_1 N_1^2, \tag{4}$$

Видно, что величины μ и N_2^v не вошли в v , т. е. релаксационные процессы не влияют на скорость реакции в этих условиях, а v определяется только активационными процессами. По этой причине при $\Gamma_1 N_0 \gg \mu$ неравновесная диффузия колебательно-возбужденных молекул к центрам с локализованными электронами, где происходит их релаксация в результате аккомодации энергии колебательно-возбужденной молекулы по электронному каналу, будет пренебрежимо мала ввиду малой концентрации R_2^vL на поверхности, т. к. они быстро релаксируют по эффективному при данных условиях фононному каналу аккомодации энергии реакции. В случае, когда многофононный канал аккомодации энергии экзотермической реакции малоэффективен, то на поверхности возникают колебательно-возбужденные молекулы с большим временем жизни τ . Эти молекулы за время τ могут пробегать большие расстояния по поверхности в результате неравновесной диффузии. Большое τ R_2^vL увеличивает также вероятность их неравновесной диссоциации так, что μ становится соразмерной с величиной $\Gamma_1 N_0$ или превышает ее. При этом становится ощутимым перенос R_2^vL и энергии реакции к центру поверхности с локализованным электроном (центру аккомодации энергии R_2^vL по электронному каналу). Вследствие этого величины $N_{1,2}$ и v нужно искать из решения системы дифференциальных кинетических уравнений из общей кинетической модели и используя уравнение (3).

Для расчета во времени величин $N(t), N_1(t), N_2(t), N_2^v(t)$, скорости реакции и длины пробега колебательно-возбужденных молекул по поверхности использован стохастический метод решения. В работе разработан алгоритм и создана программа для моделирования процессов на поверхности полупроводников вероятностным методом Монте-Карло, который позволяет рассчитать v в зависимости от концентрации заполненных электронами центров электронной аккомодации, определять концентрации всех реагентов, описываемых в модели, а также получать длины пробега R_2^vL по поверхности полупроводника в ходе реакции. Расчеты произведены для поверхности с $N_0' = 10^6$ мест адсорбции и периодом решетки $d_0 = 0,5$ нм. При плотности потока j средний интервал времени между последовательным падением атомов на подложку составляет $\Delta t = N_0 / (j \cdot N_0')$ с и может сопровождаться образованием R_2^vL . В программе учтено условие квазистационара, увеличивающее на несколько порядков скорость расчета. Вследствие того, что время жизни τ R_2^vL много меньше τ адсорбированных молекул R_2L и атомов RL , сначала рассматривается полный сценарий поведения R_2^vL , а затем проводится последовательный расчет поведения всех N_1 атомов и N_2 молекул за время Δt . Изменение состояния каждого атома RL и молекулы R_2L на поверхности в интервале Δt производится методом случайных чисел с учетом вероятностей возможных процессов (десорбция, диффузия по поверхности, рекомбинация атомов и др.). Полученная нелинейная система кинетических уравнений использовалась для численного моделирования реакционных взаимодействий атомов с цинксulfидными кристаллофосфорами, которые подверглись воздействию ионизирующего излучения.

На рис. 1 представлена рассчитанная из модели зависимость скорости реакции на необлученной УФ светом поверхности в зависимости от вероятности $\Gamma_1' = \Gamma_1 N_0$ релаксации $R_2^v L$ по фоновому каналу аккомодации энергии, пересчитанной на один шаг (смещение колебательно-возбужденной молекулы на соседний атом поверхности), и длины пробега L_d молекулы $R_2^v L$ от Γ_1' для случая, когда $\mu = 1 \cdot 10^{-3}$. Здесь величина μ численно равна вероятности неравновесной диссоциации колебательно-возбужденной молекулы на один шаг (смещение на соседний атом поверхности) $R_2^v L$. Величину μ можно получить из соотношения $\mu \leq d_0 / L_d$. Например, для ZnS [10] $\mu \approx 1 \cdot 10^{-3}$, т. к. L_d несколько сотен нм, а $d_0 \approx 0,4$ нм. Зависимость имеет два характерных участка. При $\Gamma_1' \gg \mu$ скорость реакции максимальна и практически не зависит от Γ_1' . Длина пробега колебательно-возбужденной молекулы по поверхности образца наоборот уменьшается с ростом Γ_1' и при $\Gamma_1' \gg \mu$ также практически не зависит от Γ_1' . Т. е. при $\Gamma_1' \gg \mu$ процессы аккомодации энергии реакции не влияют на скорость реакции и не лимитируют ее. При $\Gamma_1' \gg \mu$ реализуется активационный катализ реакции рекомбинации атомов H на поверхности исследуемых образцов.

В другой области, где $\Gamma_1' < 10\mu$ (рис. 1) наблюдается резкая зависимость v и L_d молекул $R_2^v L$ от вероятности релаксации колебательно-возбужденных молекул по фоновому каналу.

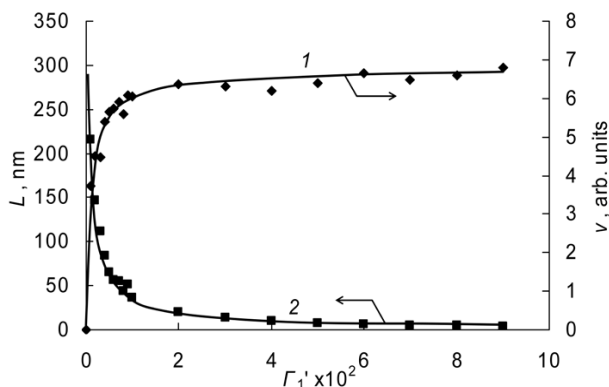


Рис. 1. Расчетное значение зависимости от вероятности релаксации колебательно-возбужденной молекулы водорода по фоновому каналу: 1 – скорости реакции гетерогенной рекомбинации атомов и 2 – длины пробега H_2^v по поверхности, $\mu = 1 \cdot 10^{-3}$.

Скорость реакции монотонно уменьшается с уменьшением Γ_1' и стремится к нулю при $\Gamma_1' \rightarrow 0$. В области, где $\mu < \Gamma_1' < 10\mu$ (рис. 1) не только процессы активации физико-химических процессов на поверхности, но и процессы релаксации вновь образованных возбужденных связей влияют на скорость реакции.

Если процессы релаксации колебательно-возбужденных молекул являются лимитирующими, то $\mu \gg \Gamma_1 N_0, \Gamma_e N_0, k_2 n_e$ и из (3) имеем:

$$v_L(t) = \frac{\Gamma_1 N_0 + \Gamma_e N_0 + k_2 n_e}{\mu} (v_2 N_1 + k_1 N_1^2), \quad (5)$$

Максимальный выход квантов ГХЛ на акт рекомбинации атомов наблюдается на ZnS-Tm при его возбуждении атомами H и равен 10^{-2} , т. е. $\Gamma_e \leq 10^{-2} \Gamma_1$. Тогда из (5) $v(t)$ будет:

$$v_L(t) = \frac{\Gamma_1 N_0 + \Gamma_e N_0 + k_2 n_e}{\mu} (v_2 N_1 + k_1 N_1^2) = v_{ph}(t) + v_e(t). \quad (6)$$

Здесь

$$v_{ph}(t) = \frac{\Gamma_1 N_0}{\mu} (v_2 N_1 + k_1 N_1^2), \quad (7)$$

скорость реакции, определяемая фоновым каналом аккомодации энергии, а

$$v_e(t) = \frac{k_2 n_e}{\mu} (v_2 N_1 + k_1 N_1^2), \quad (8)$$

скорость реакции, определяемая ВЭГА.

Поделив (4) на (6) имеем:

$$\frac{v(t)}{v_L(t)} = \frac{\mu}{\Gamma_1 N_0 + k_2 n_e}. \quad (9)$$

Выражение (9) определяет во сколько раз уменьшается скорость реакции в случае, если процессы релаксации $R_2^v L$ будут лимитировать скорость реакции. В случае, когда процессы аккомодации теплоты реакции являются лимитирующими, колебательно-возбужденная молекула будет жить на поверхности значительное время (в масштабе жизни однофононных возбуждений) до момента ее релаксации (по фоновому или электронному каналу аккомодации энергии) или распада до исходного состояния. В [2, 10] было показано, что образующаяся в реакции $R_2^v L$ не покоится, а движется по поверхности на длину пробега L за время жизни τ . Согласно (6), чем больше вероятность распада $R_2^v L$ по отношению к вероятности аккомодации энергии реакции по фоновому и электронному каналам, тем меньше скорость реакции и тем больше будет длина пробега $R_2^v L$.

Исследовано влияние ионизирующего излучения на скорость гетерогенной реакции атомов H на цинк-сульфидных образцах. Ионизирующее излучение приводило к заселению электронных ловушек и включению электронного канала аккомодации энергии колебательно-возбужденных продуктов химической реакции. На рис. 2 представлена зависимость скорости реакции от концентрации n_e электронов на ловушках при $\Gamma_1 N_0 \approx \mu$:

Увеличение n_e приводило к росту скорости реакции (рис. 2, кривая 1) и было обусловлено электронным каналом аккомодации энергии реакции. При этом вклад электронного канала аккомодации энергии $R_2^v L$ в скорость реакции при больших n_e был соизмерим с вкладом в скорость реакции фонового канала. Создание центров ВЭГА излучением приводило к релаксации $R_2^v L$ при их «столкновении» с такими центрами (электроны на ловушках). Это приводило к уменьшению длины пробега колебательно-возбужденных молекул по поверхности (рис. 3, кривая 1). Длина пробега $R_2^v L$ была тем меньше, чем больше была

скорость реакции (рис. 4). Значительно большее влияние на скорость реакции и длину пробега колебательно-возбужденных молекул влиял электронный канал аккомодации энергии реакции в области релаксационного катализа ($\Gamma_1 N_0 \ll \mu$). На рис. 5 представлена зависимость общей скорости реакции (кривая 1), скорости реакции определяемой электронным (кривая 2) и фоновым (кривая 3) каналами аккомодации энергии $R_2^y L$. В области релаксационного катализа ($\mu > \Gamma_1 N_0 + \Gamma_c N_0 + k_2 n_e$), электронный канал аккомодации энергии реакции может определять скорость реакции (см. кривые 1 и 2 на рис. 5). Воздействие ионизирующим излучением и заселение электронных ловушек приводит к увеличению скорости реакции в несколько раз (рис. 5, кривая 1). Заселение электронных ловушек в этой области приводит также к существенному уменьшению длины пробега $R_2^y L$ по поверхности с ростом n_e (рис. 3, кривая 2).

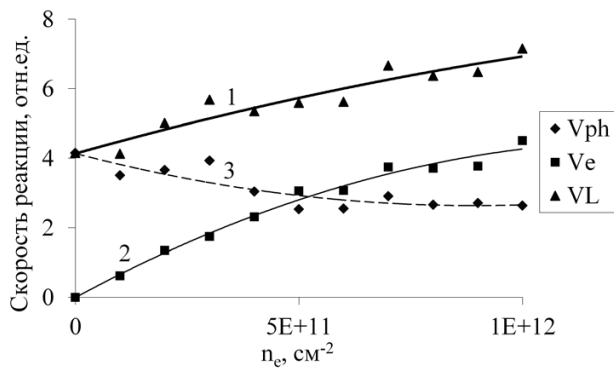


Рис. 2. Расчетные значения зависимости скорости рекомбинации атомов Н на поверхности ZnS,CdS-Ag от концентрации электронов на ловушках: 1 – зависимость общей скорости реакции, 2 – зависимость скорости, определяемой электронным каналом, 3 – скорость, определяемая фоновым каналом; T = 300 K, $j_H = 1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$, $\mu/\Gamma_1 = 1,7$

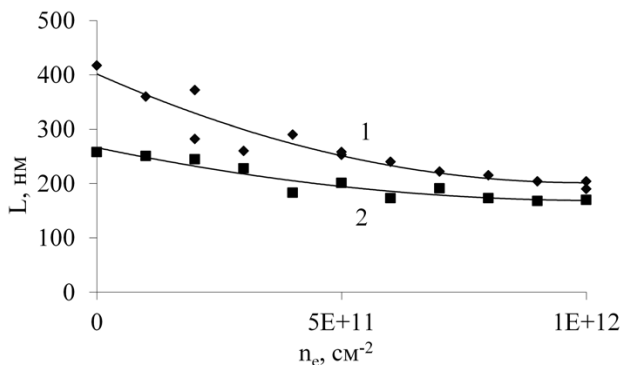


Рис. 3. Расчетные значения зависимости длины пробега $H_2^y L$ на поверхности ZnS,CdS-Ag от концентрации электронов на ловушках: 1 – $\mu/\Gamma_1 = 10$; 2 – $\mu/\Gamma_1 = 1,7$; T = 300 K, $j_H = 1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$

Найдено, что вклад электронного канала аккомодации теплоты реакции в исследованной системе возрастает с уменьшением температуры образца.

В области $T > 400 \text{ K}$ реализуется условие $\mu < \Gamma_1 N_0 + \Gamma_c N_0 + k_2 n_e$ и уменьшается влияние ионизирующего излучения на скорость электронной аккомодации и скорость реакции, изменение которой при действии ионизирующего излучения практически не наблюдается.

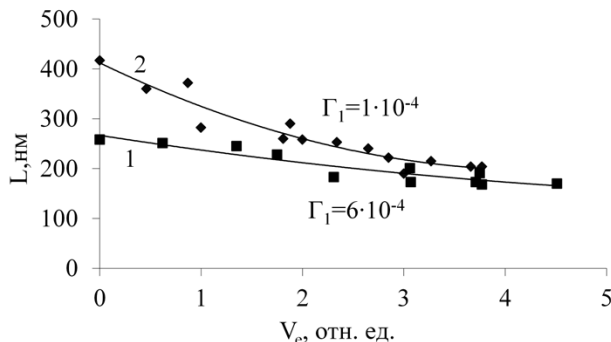


Рис. 4. Расчетные значения зависимости длины пробега $H_2^y L$ на поверхности ZnS,CdS-Ag до релаксации от скорости реакции, определяемой электронным каналом аккомодации энергии: 1 – $\mu/\Gamma_1 = 10$; 2 – $\mu/\Gamma_1 = 1,7$; T = 300 K

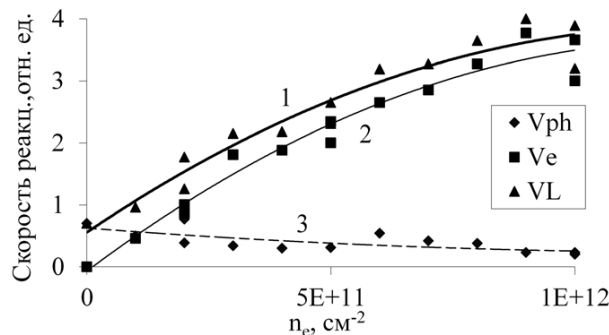


Рис. 5. Расчетные значения зависимости скорости рекомбинации атомов Н на поверхности ZnS, CdS-Ag от концентрации электронов на ловушках: 1 – общая зависимость скорости реакции, 2 – скорость, определяемая электронным каналом, 3 – скорость, определяемая фоновым каналом; T = 300 K, $j_H = 1 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-2} \text{ с}^{-1}$, $\mu/\Gamma_1 = 10$

6. Выводы

Разработан механизм и построена нелинейная система кинетических уравнений для численного моделирования реакционных взаимодействий атомов водорода с цинксульфидными кристаллофосфорами, на которые производится воздействие ионизирующего УФ излучения. Проведено моделирование процессов на неоднородной поверхности полупроводников вероятностным методом Монте-Карло. Рассчитана скорость реакции в зависимости от концентрации заполненных электронами центров электронной аккомодации, определены концентрации всех реагентов, описываемых в модели, а также получены длины

пробега R_2^yL по поверхности полупроводника в ходе реакции.

Рассматриваемая задача аккомодации энергии экзотермической реакции имеет достаточно общий характер. Найдено, что в случае большой скорости аккомодации энергии реакции рекомбинации атомов по фононному каналу, облучение полупроводника ионизирующим УФ излучением никак не влияет на скорость реакции, а в случае, когда вероятность многофононной релаксации колебательно-возбужденных

молекул мала и меньше вероятности неравновесной диссоциации, то в этом случае катализ реакции может определяться электронным каналом аккомодации энергии колебательно-возбужденных молекул. Таким образом, полученные в моделировании результаты указывают на то, что для ряда широкозонных твердых тел, на которые действует ионизирующее излучение, основным каналом аккомодации энергии колебательно возбуждения или химических взаимодействий, может быть электронный, а не фононный канал.

Литература

1. Zhdanov, V. P. Elementary Physicochemical Processes on Solid Surfaces [Text] / V. P. Zhdanov. – New-York: Springer-Verlag, 2007. – 314 p.
2. Гранкин, В. П. Автоколебательная реакция гетерогенной рекомбинации атомов водорода и неравновесная десорбция молекул с поверхности (тефлона) [Текст] / В. П. Гранкин, В. В. Стыров, Ю. И. Тюрин // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2002. – Т. 121, № 2. – С. 274–285.
3. Стыров, В. В. Неравновесные хемосорбционные эффекты на поверхности твердых тел [Текст] / В. В. Стыров, Ю. И. Тюрин. – М.: Энергоатомиздат, 2003. – 507 с.
4. Стыров, В. В. Гетерогенная хемилуминесценция на границе газ – твердое тело [Текст] / В. В. Стыров // Изв. АН СССР. Сер. Физ. – 1987. – Т. 51, № 3. – С. 524–530.
5. Koshushner, M. A. Heterogeneous relaxation of molecule vibrational energy on metals [Text] / M. A. Koshushner, V. G. Kustarev, B. R. Shub // Surface Science. – 1979. – Т. 81, №2. – С. 261-272.
6. Karpov, E. G. Nonadiabatic chemical-to-electrical energy conversion in heterojunction nanostructures [Text] / E. G. Karpov // Physical Review B. – 2010. – Т. 81. – С. 205443-205447.
7. Гранкин, В. П. Катализ гетерогенной рекомбинации атомов водорода электронной подсистемой широкозонных твердых тел [Текст] / В. П. Гранкин // Кинетика и катализ. – 1996. – Т. 37, № 6. – С. 863-868.
8. Слинко, М. Г. Автоколебания скорости гетерогенных каталитических реакций [Текст] / М. Г. Слинко, М. М. Слинко // Успехи химии. – 1980. – Т. 49, № 4. – С. 561-581.
9. Newman, M. E. J. Monte Carlo Methods in Statistical Physics [Text] / M. E. J. Newman, G. T. Barkema. – Oxford: Oxford Univ. Press, 1999 – 496 с.
10. Grankin, V. P. High-efficiency electronic accommodation of energy of heterogeneous recombination of hydrogen atoms on the surface of the monocrystal ZnS [Text] / V. P. Grankin, V. Yu. Shalamov, N. K. Uzunoglu // Chem. Phys. Lett. – 2000. – Т. 328, № 10. – С. 10-16.
11. Семенов, Н. Н. Влияние поверхности на гомогенные цепные реакции и возможность гетерогенных цепных процессов [Текст] / Семенов Н. Н., Воеводский В. В. / Гетерогенный катализ в химической промышленности: материалы всесоюз. совещ. 1953 г. // отв. ред. Г.К.Боресков. - 1955. - С. 233-255.