ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ

Том XXVI, № 10 *РАДИОФИЗИКА* *1983*

УДК 519.216

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ДЛИТЕЛЬНОСТИ ПРЕБЫВАНИЯ ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В ЗАДАННОЙ ОБЛАСТИ

А. А. Дубков, А. В. Якимов

Получено интегральное уравнение, определяющее точное выражение для характеристической функции длительности пребывания одномерного диффузионного телеграфного процесса в области с заданной шириной. Асимптотика больших длительностей пребывания для вероятностного распределения находится из решения классического уравнения диффузии, что позволяет рассматривать неодномерные и неограниченные области. Приводятся соответствующие примеры.

В различных задачах статистической радиофизики и радиотехники одним из актуальных вопросов является вычисление распределения длительности выброса случайного процесса за данный уровень, а также времени пребывания в заданном интервале [1–4]. Для диффузионных процессов, по-видимому, первой попыткой общего решения подобной задачи является работа [5], где получено интегральное уравнение типа Винера—Хопфа для отыскания характеристической функции длительности выбросов диффузионных процессов телеграфного типа.

Настоящая работа посвящена обобщению методики [5] на задачи отыскания распределения $W_\theta(\theta)$ времени пребывания θ диффузионных телеграфных процессов в заданном интервале. Отдельно определяется асимптотика больших θ для распределения времени пребывания произвольного диффузионного процесса в заданной области, например, неодномерной и частично ограниченной. В последнем случае используется хорошо разработанный аппарат решения классического уравнения диффузии (см., например, [6]).

1. Следуя [5], рассмотрим диффузионный телеграфный процесс

$$x(t_k) = x_k = x_0 + \sum_{m=1}^{k} \xi_m, \quad k = \overline{1, \infty}, \quad x_0 = x(0).$$

Обозначим через $W_\xi(\xi)$ распределение приращений ξ_m, которые на каждом «шаге» считаются независимыми. Интервалы между перескоками процесса также независимы и обладают распределением $W_\tau(\tau)$ и характеристической функцией

$$\Phi_\tau(u) = \int_0^\infty W_\tau(\tau) e^{ju\tau} d\tau.$$

Вычислим распределение длительности пребывания такого процесса в заданном интервале $[0; a]$. Реализации процесса из точки $x_0 \in (0; a)$, пересекая нулевой уровень, либо уровень $x = a$, попадают в интервале в точку $x_1 \in (0; a)$. Введем характеристическую функцию пребывания

$$\Phi_п(u, x_1) = \int_0^\infty W_п(\theta, x_1) e^{ju\theta} d\theta,$$

где $W_п(\theta, x_1)$ — распределение длительности пребывания в интервале. Для этой функции, по аналогии с [5], получим следующее интегральное уравнение:

$$\Phi_\tau^{-1} R(x) = q(x) + \int_0^a W_\xi(z-x) R(z)\,dz. \tag{1}$$

Здесь $R(x) = \Phi_п(u, x)$, $q(x) = 1 - \int_{-x}^{a-x} W_\xi(z)\,dz$.

Решением уравнения (1) является характеристическая функция времени пребывания диффузионного телеграфного процесса в области $[0; a]$. При $a \to \infty$ оно сводится к уравнению, полученному в [5] для характеристической функции длительности выброса за уровень $x = 0$.

2. Воспользуемся уравнением (1) для анализа шагового случайного процесса, обладающего распределением приращений:

$$W_\xi(z) = (1/2)\,(\delta(z+b) + \delta(z-b)), \quad b < a.$$

Здесь $\delta(z)$ — дельта-функция Дирака. Можно считать, что процесс $x(t)$ попадает в область $[0; a]$ снизу, т. е. через уровень $x = 0$. Для такого процесса подобное предположение не снижает общности рассмотрения. Учтем, что для x_1 выполняется соотношение $0 < x_1 < b$. Введем $M = 1 + E((a - x_1)/b)$ — количество «разрешенных» значений процесса в интервале, где $E(z)$ — целая часть действительного аргумента z. Аналогично [5] введем новые функции $y_k = R(x_1 + kb)$. В результате для $k = \overline{-1, M-2}$ получим следующую систему разностных уравнений:

$$y_{k+2} - (2/\Phi_\tau)\, y_{k+1} + y_k = 0.$$

Граничные условия для системы имеют вид $y_{-1} = y_M = 1$, что означает нулевую длительность пребывания, если ее отсчет ведется от уровней, не принадлежащих интервалу. Решение системы ищем в виде $y_k = C\lambda^k$, где C — произвольная постоянная. Как и в [5], найдем

$$\lambda_{1,2} = \left(1 \pm \sqrt{1 - \Phi_\tau^2}\right)/\Phi_\tau,$$

а решение имеет вид $y_k = C_1\lambda_1^k + C_2\lambda_2^k$. Заметим, что $\lambda_1\lambda_2 = 1$. Полагая теперь $k = 0$ и учитывая граничные условия, найдем

$$\Phi_п(u, x_1) = y_0 = (\lambda_2 + \lambda_2^M)/(1 + \lambda_2^{M+1}). \tag{2}$$

При $M \to \infty$ решение (2) переходит в полученное в [5] выражение для характеристической функции выброса. При $M = 1$ распределение времени пребывания в интервале, как и следовало ожидать, совпадает с распределением длительности интервалов $W_\tau(\tau)$.

Расчет из (2) распределения времени пребывания, в общем случае, не представляется возможным, однако можно определить его статистические моменты. Используя в (2) разложение по степеням $\sqrt{1 - \Phi_\tau^2}$, найдем среднее $\langle\theta\rangle$ и дисперсию $D(\theta)$ времени пребывания:

$$\langle\theta\rangle = M\langle\tau\rangle, \quad D(\theta) = MD(\tau) + (M/3)\,(M^2 - 1)\langle\tau\rangle^2.$$

Таким образом, величина $\langle\theta\rangle$ равна времени прохождения однонаправленной реализации через рассматриваемый интервал. При большой «дискретной ширине» интервала M дисперсия $D(\theta)$ пропорциональна M^3.

Следуя [5], рассмотрим случай экспоненциального распределения приращений:

$$W_\xi(z) = (\alpha/2)\, e^{-\alpha|z|}.$$

Опуская довольно громоздкие промежуточные выкладки, имеем

$$\Phi_\text{п}(u,\, 0) = \Phi_\tau(1 + \sqrt{1-\Phi_\tau}\,\mathrm{th}(\alpha a\sqrt{1-\Phi_\tau}/2))^{-1}.$$

Отсюда найдем среднее и дисперсию пребывания процесса в области:

$$\langle\theta\rangle = \langle\tau\rangle(1 + \alpha a/2),$$

$$D(\theta) = D(\tau)\,(1 + \alpha a/2) + (\alpha a/2)\langle\tau\rangle^2(1 + \alpha a/2 + \alpha^2 a^2/6).$$

Видим, что при $\alpha a \gg 1$ величина $\langle\theta\rangle$ практически пропорциональна ширине области a, а дисперсия $D(\theta) \sim a^3$.

Покажем теперь, что в случае, когда уместно использование асимптотики, пренебрегающей дискретностью процесса диффузии по времени и координате, решение задачи существенно упрощается. Распределение длительности выброса (либо пребывания в заданном объеме) можно найти из решения уравнения диффузии, описывающего изменение концентрации диффузанта в рассматриваемой области.

3. Согласно модели [4] фликкерных случайных процессов число атомов диффузанта, попадающих в рабочую область (РО) рассматриваемого прибора, можно представить пуассоновской последовательностью

$$n(t) = \sum_{k=0}^{K(t)} F(t - t_k,\, \theta_k) \tag{3}$$

прямоугольных импульсов $F(t,\, \theta) = 1(t) - 1(t - \theta)$, обладающих случайной длительностью θ. Здесь $1(z)$ — единичная функция Хевисайда. Введем ν — среднюю частоту возникновения импульсов, равную среднему количеству атомов, «входящих» в РО за единицу времени.

При условии $n(t = 0) = 0$ распределение длительности $W_\theta(\theta)$ определяет закон изменения во времени среднего количества атомов, накопившихся в РО:

$$Q(t) \equiv \langle n(t)\rangle = \nu\int_0^t \theta\, W_\theta(\theta)\, d\theta. \tag{4}$$

С другой стороны, величину Q можно определить, зная концентрационный профиль примесей в РО:

$$Q(t) = \int_0^a N(x, t)\, dx. \tag{5}$$

Здесь предполагается, что РО является одномерной и распространяется от сечения $x = 0$ до $x = a$. Однако соотношение (5) может быть обобщено и на случай неодномерной и неограниченной РО. Кроме того, количество Q можно найти интегрированием среднего потока диффундирующих вовнутрь РО частиц по времени в пределах от нуля до t.

Концентрация примесей (диффузанта) $N(x,\, t)$ определяется решением уравнения диффузии с заданными начальными и граничными условиями (см. [6], гл. 4). Аналогично находится и поток частиц. Если данная задача решена, то на основании (4) распределение длительности пребывания отдельного атома в РО определяется следующим образом:

$$W_\theta(\theta) = (1/\nu\theta)\,(dQ(t)/dt)\,|_{t=\theta}. \tag{6}$$

Для одномерной области при $a = \infty$ это соотношение дает распределение длительности выброса за уровень $x = 0$.

Рассмотрим отдельные примеры применения соотношения (6).

4. В [5] вычислено распределение длительности выброса для некоторых конкретных диффузионных процессов. Обнаружено, что при $\theta \to \infty$ распределение $W_\theta(\theta)$ изменяется по закону $\theta^{-3/2}$. Для выявления границ применимости данного результата рассмотрим (в соответствии с разд. 4.5-ж работы [6]) задачу о диффузии атомов из постоянного источника при $x = 0$ в полубесконечную одномерную область, $a = \infty$.

Обозначая через D_0 коэффициент диффузии, $D_0 = \mathrm{const}$, и вводя $N_0 = N(0, t) = \mathrm{const}$ — концентрацию атомов на границе, найдем $Q = 2N_0\sqrt{D_0 t/\pi}$. Отсюда, согласно (6), определим распределение длительности выброса

$$W_\theta(\theta) = (N_0/\nu)\sqrt{D_0/\pi}\,\theta^{-3/2},$$

действительно имеющее вид $\theta^{-3/2}$. Отметим, что это выражение, равно как и лежащее в его основе уравнение диффузии, справедливо при условии, когда дискретностью процесса диффузии можно пренебречь. Поэтому полученный результат следует рассматривать как асимптотический при $\theta \gg \langle\tau\rangle$, ν^{-1}.

Из приведенного примера следует вывод: если коэффициент диффузии D_0 процесса фиксирован, то при $\theta \to \infty$ распределение длительности выброса за данный уровень изменяется по закону $\theta^{-3/2}$.

5. Найдем распределение времени пребывания диффузионного процесса в заданной области конечной ширины. Аналогичная задача решалась в разд. 2 настоящей работы. Для использования соотношения (6) рассмотрим диффузию из постоянного источника при $x = 0$ в область $[0; a]$, обладающую связывающей границей при $x = a$. Анализ проведем по аналогии с разд. 4.5-а работы [6], воспользовавшись начальным условием $N(x, 0) = 0$ при $x = (0; a]$ и граничными условиями

$$N(0, t) = N_0, \quad N(a, t) = 0. \tag{7}$$

Введем $t_a = a^2/D_0$ — время, в течение которого дисперсия процесса становится равной a^2. В результате получим

$$W_\theta(\theta) = \frac{N_0 a}{t_a \nu}\,\frac{2}{\theta}\sum_{m=0}^{\infty}\exp\left(-\frac{\pi^2(2m+1)^2}{4t_a}\,\theta\right). \tag{8}$$

Это распределение при $\theta/t_a < 2/\pi^2$, как показывает численный расчет, изменяется по закону $\theta^{-3/2}$. Т. е. для таких длительностей пребывания наличием границы $x = a$ можно пренебречь (реализации покидают область, в основном, через границу $x = 0$). При больших длительностях, $\theta/t_a > 4/\pi^2$, в сумме (8) можно ограничиться только первым слагаемым ($m = 0$), тогда распределение принимает вид

$$W_\theta(\theta) = (N_0 a/t_a\nu)\,(2/\theta)\exp(-\pi^2\theta/4t_a),$$

т. е. быстро убывает при росте θ.

На основании проведенного анализа аппроксимируем распределение (8) зависимостью вида $\theta^{-3/2}$ при $t_0 \leqslant \theta \leqslant 2t_a/\pi^2$, считая его равным нулю вне данного интервала. Здесь t_0 — среднее время элементарного диффузионного скачка, $t_0 \ll t_a$. Нетрудно убедиться, что среднее время пребывания $\langle\theta\rangle$ пропорционально ширине области, а дисперсия $D(\theta) \sim a^3$. Этот результат согласуется с полученным в разд. 2 настоящей работы.

Аналогичные результаты имеют место при анализе диффузии в область из постоянных источников, находящихся на обеих ее границах.

Соотношение (8) следует лишь преобразовать, уменьшив время t_a в два раза и удвоив концентрацию N_0.

6. Модифицируем задачу, учтя передвижение связывающей границы. При росте окисных пленок, например, данное движение обусловлено тем, что связываемые атомы кислорода, играющего роль диффузанта, приводят к образованию новых слоев окисла. В этом случае входящее в (7) граничное условие при $x = a$ следует дополнить условиями (в случае одномерной задачи)

$$pa_{\mathrm{p}}D_0(\partial N(x, t)/\partial x)\,|_{x=a} = v_a, \quad a(t = 0) = 0.$$

Здесь $v_a = da/dt$ — скорость перемещения связывающей границы, $p = \exp(-E_{\mathrm{x}}/k_{\mathrm{B}}T)$ — вероятность хемсорбции отдельного атома при $x = a$, E_{x} — энергия активации хемосорбции физисорбированного атома, $k_{\mathrm{Б}}$ — постоянная Больцмана, T — абсолютная температура, $a_{\mathrm{p}} = \sqrt{D_0 t_0}$ — средний шаг диффузии, имеющий обычно смысл постоянной кристаллической решетки материала, в котором происходит диффузия.

Подобная постановка является типичной для задачи Стефана (см., например, [7]), когда по заданным граничным условиям требуется определить закон перемещения связывающей границы. Из [7] найдем, что это движение происходит по параболическому закону

$$a(t) = 2\beta a_{\mathrm{p}}\sqrt{t/t_0}. \tag{9}$$

Параметр β находится из решения трансцендентного уравнения

$$\sqrt{\pi}\beta e^{\beta^2}\Phi(\beta) = pN_0 a_{\mathrm{p}}, \tag{10}$$

где $\Phi(\beta)$ — функция ошибки.

Используя результаты работы [7] и соотношения (5), (6) и (9), а также полагая $\beta \ll 1$, найдем распределение длительности пребывания диффузионного процесса в рассматриваемой области:

$$W_\theta(\theta) = (1/2\nu)\beta N_0\sqrt{D_0}\theta^{-3/2}.$$

Таким образом, учет перемещения связывающей границы приводит к зависимости распределения $W_\theta(\theta)$, имеющей для больших значений аргумента вид $\theta^{-3/2}$.

7. Согласно [4] по виду распределения $W_\theta(\theta)$ можно определить вид и величину спектра $S_n(\omega)$ флуктуаций числа атомов диффузанта в рассматриваемой области. В частности, если при $\theta \to \infty$ распределение изменяется по закону $\theta^{-\chi}$, то спектр имеет вид $|\omega|^{-\gamma}$, причем $\gamma = 3 - \chi$.

Из проведенного анализа следует, что при диффузии атомов какого-либо вещества в одномерную полуограниченную область их количество в области флуктуирует фликкерным образом, причем параметр формы спектра этих флуктуаций равен $\gamma = 3/2$. Аналогичным образом флуктуирует количество атомов кислорода в окисной пленке, если ее толщина увеличивается во времени по параболическому закону (9).

Отметим, однако, что параболический закон роста окисных пленок наблюдается лишь при высоких температурах [8, 9], как правило, существенно превышающих рабочую температуру прибора, содержащего данную пленку. При низких температурах рост толщины пленки происходит по логарифмическому закону

$$a(t) = A\ln(1 + Bt). \tag{11}$$

Здесь A, B — параметры, определяемые эмпирически, поскольку общей теории логарифмического роста окисных пленок на сегодняшний день, по-видимому, не существует. На основании теорий [8,9] можно найти, что количество атомов Q в пленке изменяется во времени по закону, аналогичному (11). Отсюда, учитывая (6), видим, что при больших значениях аргумента распределение длительности пребывания $W_\theta(\theta)$ имеет вид θ^{-2}. Число этих атомов в слое флуктуирует фликкерным образом, а параметр формы спектра равен $\gamma = 1$. При этом, согласно [4], параметр B в (10) по порядку величины совпадает с верхней частотой перегиба в спектре $S_n(\omega)$, выше которой спектр спадает при увеличении $|\omega|$ быстрее, чем $1/|\omega|$.

Получено интегральное уравнение для определения характеристической функции времени пребывания диффузионного телеграфного процесса в заданном интервале.

Разработана методика вычисления распределения длительности выбросов произвольных диффузионных процессов за данный уровень, а также распределения времени пребывания в заданной области. Методика применима для рассмотрения неодномерных областей, поскольку опирается на анализ классического уравнения диффузии. Это существенно расширяет возможности методики по сравнению с проводившимися ранее исследованиями.

Полученные результаты ориентированы на анализ фликкерных флуктуаций параметров радиоэлектронных элементов согласно модели [4], но могут быть использованы и в других приложениях статистической радиофизики и радиотехники.

Авторы благодарны А. Н. Малахову и С. Н. Гурбатову за полезное обсуждение настоящей работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тихонов В. И. Выбросы случайных процессов.— М.: Наука, 1970.
2 Фомин Я. А. Теория выбросов случайных процессов — М: Связь, 1980.
3 Левин Б. Р. Теоретические основы статистической радиотехники.— М: Сов радио, 1969.— Т. 1.
4. Якимов А. В.— Изв. вузов — Радиофизика, 1980, 23, № 2, с. 238
5. Дубков А. А, Якимов А. В — Изв. вузов — Радиофизика, 1981, 24, № 9, с. 1121.
6 Болтакс Б. И Диффузия в полупроводниках.— М.: Физматгиз, 1961.
7. Гринберг Г А. — ЖТФ, 1974, 44, № 10, с 2033
8 Данков П Д, Игнатов Д. В., Шишаков Н А. Электронографические исследования окисных и гидроокисных пленок на металлах — М: Изд. АН СССР, 1953.
9. Кубашевский О., Гопкинс Б Окисление металлов и сплавов. Гл. 2. / Пер. с англ.— М.: Металлургия, 1965.

Горьковский государственный университет

Поступила в редакцию 1 февраля 1983 г.

THE GIVEN REGION SOJOURN TIME DISTRIBUTION FOR DIFFUSION PROCESSES

A A. Dubkov, A. V. Yakimov

The integral equation is carried out which determine the exact form for the sojourn time characteristic function of the one-dimensional diffusion telegraphic process in a region with a given width The large sojourn time asymptotic distribution is calculated by the classical diffusion equation solving, that allows one to consider poly-dimensional and infinite regions as well. Appropriate examples are given.