

Абдулла Хайдар Абдо ИБРАГИМ¹
Александр Николаевич БУСЫГИН²
Сергей Юрьевич УДОВИЧЕНКО³

УДК 519.6, 004.421

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЗИСТИВНОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ В МЕМРИСТОРЕ НА ОСНОВЕ ПОЛНОЙ МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ МАССОПЕРЕНОСА КИСЛОРОДНЫХ ВАКАНСИЙ И ИОНОВ

¹ аспирант кафедры прикладной и технической физики,
инженер-исследователь НОЦ «Нанотехнологии»,
Тюменский государственный университет
abdulla.ybragim@mail.ru; ORCID: 0000-0002-1709-9882

² лаборант-исследователь НОЦ «Нанотехнологии»,
Тюменский государственный университет
a.n.busygin@utmn.ru; ORCID: 0000-0002-3439-8067

³ доктор физико-математических наук,
профессор кафедры прикладной и технической физики,
руководитель НОЦ «Нанотехнологии»,
Тюменский государственный университет
udotgu@mail.ru

Аннотация

Создана относительно простая математическая модель динамического переключения мемристора на основе полной физической модели процессов стационарного массопереноса кислородных вакансий и ионов с учетом их рождения, рекомбинации и диффузии в электрическом поле в структуре «металл — оксид — металл» при доминирующем транспортном механизме туннелирования электронов через кислородные вакансии.

Цитирование: Ибрагим А. Х. А. Математическое моделирование резистивного переключения в мемристоре на основе полной модели процессов массопереноса кислородных вакансий и ионов / А. Х. А. Ибрагим, А. Н. Бусыгин, С. Ю. Удовиченко // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2022. Том 8. № 2 (30). С. 198-214.
DOI: 10.21684/2411-7978-2022-8-2-198-214

Представлены результаты численного моделирования массопереноса кислородных вакансий по толщине оксидного слоя мемристора. Найдены распределения концентрации вакансий в зависимости от приложенного напряжения на электроды и от температуры мемристора. Получено хорошее совпадение участка вольт-амперной характеристики при переключении мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее состояние, найденного в результате численного моделирования и экспериментально.

В бесформовочном нефиламентном мемристоре заметный градиент температуры отсутствует, поскольку джоулев нагрев мал из-за низкой плотности тока электронов. Поэтому температура присутствует в модели как параметр. Показано, что при температуре мемристора более 600 К можно пренебречь процессом рекомбинации вакансий с ионами и существенно упростить процедуру математического моделирования резистивного переключения мемристора, исключив уравнение массопереноса ионов кислорода, а также рекомбинационный член в стационарном уравнении массопереноса кислородных вакансий.

Разработанная математическая модель динамического переключения мемристора, включающая систему стационарных обыкновенных дифференциальных уравнений, предназначена для моделирования работы больших мемристорных массивов в нейроморфных вычислительных устройствах и может оказаться предпочтительней по отношению к известным схемотехническим моделям, которые включают в себя определенный набор подгоночных параметров для совпадения результатов моделирования с экспериментальными характеристиками мемристора.

Ключевые слова

Мемристор на основе оксида металла, кислородные вакансии и ионы, математическое моделирование, физическая модель массопереноса зарядов, вольт-амперная характеристика, резистивное переключение мемристора.

DOI: 10.21684/2411-7978-2022-8-2-198-214

Введение

Твердотельный мемристор является аналогом биологического синапса, связывающего нейроны мозга. В [4] определены электрические свойства мемристора на основе смешанного оксида металлов, подобные свойствам биологического синапса при распространении нервного импульса. Указана возможность использования мемристора как суммирующего элемента искусственного нейрона. Мемристорные массивы на основе оксидов металлов уже применяются для аппаратной реализации искусственных нейронных сетей. При обучении и работе этих устройств используются синаптические веса, которые реализуются в виде проводимостей мемристоров [2, 14-16].

Моделированию процессов переноса зарядов в мемристорах на основе оксидов металлов посвящено большое количество работ. В [3, 6, 13, 19, 20] представлены физико-математические модели тепло- и массопереноса при транспорте кислородных вакансий в электрическом поле мемристора. Миграция вакансий

происходит под действием трех факторов: локального электрического поля (механизм Хилла), градиента концентрации вакансий (закон Фика) и температурного градиента (эффект Соре), обусловленного джоулевым нагревом. Модели включают нестационарное уравнение непрерывности для вакансий, стационарное уравнение Лапласа для электрического поля [6] и нестационарное уравнение теплопереноса Фурье [3, 13].

Для моделирования высокопроизводительных систем обработки информации на основе больших мемристорных массивов необходимо иметь численную модель переключения резистивных состояний мемристоров, которая, с одной стороны, наиболее полно учитывает процессы тепло- и массопереноса зарядов, а с другой — является достаточно простой в расчетах.

Физические модели связывают электрические характеристики мемристоров с механизмами физических процессов, протекающих в них. Такие модели описываются системами дифференциальных уравнений в частных производных и могут быть реализованы только с помощью численных методов и специального программного обеспечения. Для решения задач проектирования нейроморфных систем на основе мемристорных массивов широко используются компактные схмотехнические модели, которые представляют реальную структуру мемристора в виде эквивалентной схемы и описываются системами обыкновенных дифференциальных уравнений. Схмотехническая модель, например [17], характеризуется достаточно простыми вычислениями. Однако если физическую модель мемристора также свести к решению более простой системы обыкновенных дифференциальных уравнений, то она может оказаться предпочтительней по отношению к схмотехнической модели, которая включает в себя определенный набор подгоночных параметров для совпадения результатов моделирования с экспериментальными характеристиками мемристора.

В работе [1] представлена математическая модель резистивных состояний и динамического переключения мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее состояние на основе физической модели массопереноса зарядов без учета процесса теплопереноса в структуре «металл — оксид — металл» при доминирующем транспортном механизме туннелирования электронов через кислородные вакансии, мигрирующие под действием неоднородного самосогласованного электрического поля. В уравнении непрерывности для вакансий кислорода, как и в работе [5], пренебрегалось диффузионным членом, связанным с наличием градиента концентрации в оксидном слое. В этом приближении путем сложения стационарных уравнений непрерывности для кислородных вакансий и ионов удалось получить сравнительно простое нелинейное дифференциальное уравнение первого порядка, описывающее распределение концентрации вакансий. Причем в случае пренебрежения процессом рекомбинации кислородных вакансий и ионов при низкой температуре в условиях слабого нагрева мемристора это уравнение становится линейным.

Целью настоящего исследования является создание относительно простой математической модели динамического переключения мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее состояние на основе полной физической модели

процессов массопереноса кислородных вакансий и ионов с учетом их рождения, рекомбинации, дрейфа в электрическом поле и диффузии в структуре «металл — оксид — металл» при доминирующем транспортном механизме туннелирования электронов через кислородные вакансии. Такое резистивное переключение мемристора используется при ассоциативном самообучении аппаратной нейросети на основе мемристорного массива [16].

Далее будет исследовано резистивное переключение в бесформовочном нефиламентном мемристоре на основе оксида металла, когда электрический ток протекает через всю поверхность электрода и не образуются филаменты с повышенной проводимостью в объеме оксида. Этот тип мемристора, обладающий многоуровневым характером резистивного переключения, является наиболее перспективным элементом для создания нейроморфных вычислительных систем.

Физико-математическая модель массопереноса кислородных вакансий и ионов в бесформовочном мемристоре

В общем виде систему уравнений тепло-массопереноса при транспорте кислородных вакансий и ионов в электрическом поле мемристора можно записать следующим образом [1, 3, 5, 6, 13, 19, 20]:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \frac{d}{dz} \left(D \frac{dN}{dz} - NV_E \right) + G(N) - R(N, N_{ox}) + \frac{d}{dz} \left(SDN \frac{dT}{dz} \right), \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_{ox}}{\partial t} = & \frac{d}{dz} \left(D_{ox} \frac{dN_{ox}}{dz} + N_{ox} V_{Eox} \right) + \\ & + G(N) - R(N, N_{ox}) + \frac{d}{dz} \left(S_{ox} D_{ox} N_{ox} \frac{dT}{dz} \right), \end{aligned} \quad (2)$$

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(N) \frac{\partial T}{\partial z} \right) + J \cdot E - G(N) E_g + R(N, N_{ox}) E_r, \quad (3)$$

$$\frac{dE}{dz} = 0, \quad (4)$$

где приняты следующие обозначения: $D = \frac{1}{2} a^2 f_0 \exp \left(-\frac{E_{avac}}{kT} \right) \cos h \left(\frac{Eq a}{2kT} \right)$ — коэффициент диффузии вакансий [12]; $V_E = a f_0 \exp \left(-\frac{E_{avac}}{kT} \right) \sin h \left(\frac{Eq a}{2kT} \right) \left(1 - \frac{N}{N_m} \right)$ — полевая скорость вакансий [12]; $D_{ox} = \frac{1}{2} a^2 f_0 \exp \left(-\frac{E_{aiox}}{kT} \right) \cos h \left(\frac{Eq a}{2kT} \right)$ — коэффициент диффузии ионов; $V_{Eox} = a f_0 \exp \left(-\frac{E_{aiox}}{kT} \right) \sin h \left(\frac{Eq a}{2kT} \right) \left(1 - \frac{N_{ox}}{N_m} \right)$ — дрейфовая скорость ионов; $G = (N_{max} - N) f_0 \exp \left(-\frac{E_g - \sqrt{\frac{q^3 E}{\pi \epsilon \epsilon_0}}}{kT} \right)$ — скорость генерации пар Френкеля [5]; $R = N N_{ox} V_{Eox} \sigma_{ox}$ — скорость рекомбинации ионов с вакансиями [5];

$\sigma_{ox} = q/(4\epsilon\epsilon_0 E)$ — сечение рекомбинации; N_{max} — максимальное число вакансий; E — электрическое поле; J — плотность тока захваченных электронов; a — длина прыжка для частицы; q — заряд частицы (иона или вакансии); k — постоянная Больцмана; T — температура; $f_0 = W_{ph}/h$ — частота колебаний кристаллической решетки; W_{ph} — энергия фононов; h — постоянная Планка; E_{avac} и E_{aox} — соответственно энергия активации движения вакансий и ионов кислорода; E_{gi} — ширина запрещенной зоны диэлектрика; E_g и E_r — соответственно энергия генерации и рекомбинации пары вакансий и иона; λ_r — коэффициент теплопроводности; ρ — плотность оксида металла; c — удельная теплоемкость диэлектрика; $S = -E_{avac}/kT^2$ и $S_{ox} = -E_{aox}/kT^2$ — соответственно коэффициенты термофореза для вакансий и ионов; z — координата, направленная поперек оксидного слоя мемристора.

Включение в уравнения (1)-(2) диффузионных членов, определяемых градиентами концентраций dN/dz , dN_{ox}/dz и отсутствующих в [1, 5], не позволяет свести эти уравнения к одному уравнению для концентрации вакансий N , учитывающего, в отличие от [20], рекомбинацию вакансий с ионами.

Основные допущения, упрощающие математическую модель процессов тепломассопереноса зарядов, связаны с решением уравнений (1)-(4) в стационарном режиме. Как показано в [1] для оксида гафния, при времени миграции кислородных вакансий $t_0 \approx 10$ мс через оксид [18] их концентрация выходит на постоянное значение за время $t = 0,1$ мс [9], а время переключения мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее состояние соответствует 10^{-1} мс [11]. Следовательно, уравнения (1)-(2), определяющие концентрации ионов и вакансий, можно рассматривать в стационарном режиме. Использование стационарного уравнения тепломассопереноса (3), представленного в [19, 20], оправдано, поскольку время выхода температуры оксидного слоя на постоянное значение составляет менее $0,1$ нс [10, 21]. В правой части этого уравнения кроме члена, связанного с джоулевым нагревом из-за протекания тока, присутствуют члены, связанные с охлаждением оксида за счет генерации пар «вакансия — ион» и нагревом диэлектрика при их рекомбинации. Цитируемые здесь работы не учитывают эти процессы. А в [5] помимо джоулева нагрева учитывается выделение тепла при рекомбинации захваченных электронов и дырок в диэлектрике. В уравнениях непрерывности для вакансий и ионов (1)-(2) можно не учитывать члены, связанные с термофорезом и пропорциональные градиенту температуры, из-за малого диапазона изменения температуры по толщине даже формованного мемристора [19], в котором из-за высокой плотности тока в филаменте наблюдается разогрев до высоких температур 900 К и выше.

И наконец, из-за малой электропроводности доминирующим транспортным механизмом электронов в диэлектрическом слое оксида металла является туннелирование через кислородные вакансии. В этом случае внешнее электрическое поле E незначительно искажается свободными и захваченными носителями заряда, и его распределение в диэлектрическом слое определяется с помощью стационарного уравнения Лапласа [6]. Решением этого уравнения является $E = -d\varphi/dz = -u/d$, где $\varphi|_{z=0} = 0$, $\varphi|_{z=d} = u$, d — толщина оксидного слоя, u — потенциал электрода.

Граничные условия первого рода на положительно заряженном электроде ($z = d$) для дифференциальных уравнений второго порядка (1)-(2) следующие:

$$N(d) = N_{ox}(d) = N_0 = N_{\max} \exp\left(-\frac{E_g}{kT}\right), \quad (5)$$

где N_0 — равновесная концентрация дефектов по Френкелю в диэлектрике в отсутствие электрического поля. Граничными условиями второго рода для этих уравнений на заземленном электроде ($z = 0$) являются равенства нулю плотности потоков вакансий и ионов [12]:

$$D \frac{dN}{dz} - NV_E = 0; D_{ox} \frac{dN_{ox}}{dz} + N_{ox} V_{E_{ox}} = 0. \quad (6)$$

На обоих электродах мемристора $T|_{z=0,d} = T_0$, а на границе «диэлектрик — электрод» изменения температур и теплового потока равны нулю [5]:

$$\left[T|_{z=0,d}\right] = 0; \left[\lambda \frac{dT}{dz}\right]_{z=0,d} = 0. \quad (7)$$

Для получения вольт-амперной характеристики мемристора и исследования его резистивного переключения из низкопроводящего в высокопроводящее состояние систему уравнений (1)-(4), описывающих процессы тепло- и массопереноса в электрическом поле мемристора, необходимо дополнить уравнением для плотности тока захваченных электронов J [7].

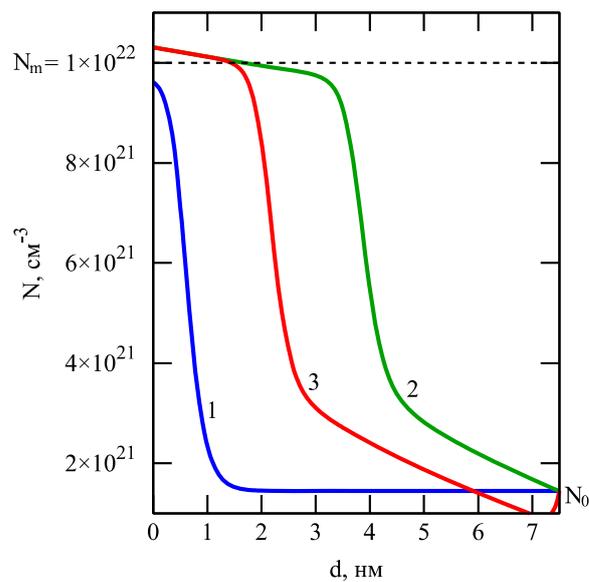
Численное моделирование процесса переноса кислородных вакансий и резистивного переключения мемристора

Для расчета распределения концентраций кислородных вакансий и резистивного переключения мемристора использована программа [1] на языке программирования Python версии 3.7 с применением библиотеки numpy. При расчетах использовалась сетка с равномерным расположением узлов. Скалярное поле концентраций вакансий рассчитывается путем численного решения задачи Коши для уравнений (1)-(2) методом Эйлера.

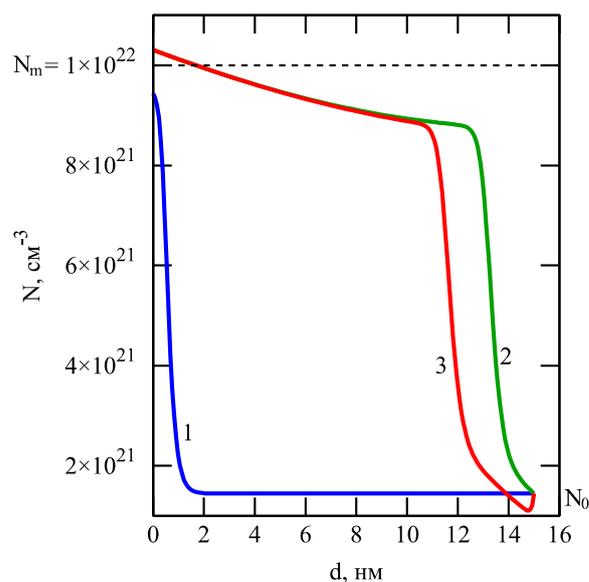
Построение участка вольт-амперной характеристики мемристора выполняется путем последовательного расчета профиля вакансий, концентрации и плотности тока электронов на границе с заземленным электродом ($z = 0$) при разных потенциалах u на противоположном электроде ($z = d$) [1, 5].

Для программирования уравнений (1)-(4) и граничных условий (5)-(7) к ним были использованы следующие значения констант для мемристора на основе оксида тантала (Ta_2O_5): $N_m = 10^{22} \text{ см}^{-3}$; $a = 0,05 \text{ нм}$ [20]; $E_{avac} = 0,7 \text{ эВ}$; $E_{aox} = 0,65 \text{ эВ}$; $E_g = 1,666 \text{ 25 эВ}$ [22]; $E_r = 0,15 \text{ эВ}$ [23]; $W_{opt} = 2,5 \text{ эВ}$; $W_t = 0,767 \text{ эВ}$; $m^* = 0,25m_e$ [7].

На рис. 1 представлены результаты численного моделирования процессов стационарного массопереноса кислородных вакансий по толщине оксидного слоя мемристора.



(а)



(б)

Рис. 1. Профиль концентрации вакансий по толщине оксидного слоя при диффузии в электрическом поле (1), с учетом генерации (2), с учетом генерации и рекомбинации с ионами (3): а) при $d = 7,5$ нм, $u = 1,5$ В; б) при $d = 15$ нм, $u = 3$ В

Fig. 1. Vacancy concentration profile along oxide layer thickness at diffusion in electric field (1), including generation (2), including generation and recombination with ions (3): а) at $d = 7.5$ nm, $u = 1.5$ V; б) at $d = 15$ nm, $u = 3$ V

Рис. 1а иллюстрирует распределение концентрации вакансий при их диффузии в электрическом поле и температуре 600 К с учетом процессов генерации и рекомбинации с ионами в Ta_2O_5 толщиной $d = 7,5$ нм и напряжении на электродах $u = 1,5$ В [20], а рис. 1б — соответственно при $d = 15$ нм и $u = 3$ В [8]. Профиль концентрации вакансий имеет ярко выраженную полку вблизи заземленного электрода ($z = 0$), как и в работе [12].

Как следует из рис. 1, стационарное распределение концентрации вакансий существенным образом зависит от процессов генерации и рекомбинации пары «вакансия — ион».

На рис. 2а отражена зависимость распределения профиля концентрации вакансий по толщине оксида от приложенного напряжения на электроды мемристора [20] с учетом генерации (2), с учетом генерации и рекомбинации с ионами (3), а на рис. 2б — соответственно от температуры.

С ростом напряжения на электродах и температуры оксида обедненная отрицательными ионами кислорода область, обрамляемая кривой (3) на рис. 2, в которой увеличивается проводимость для электронов, приближается к положительно заряженному электроду, пока не наступит эффект свободного туннелирования электронов на этот электрод (эффект Шоттки). При таком критическом напряжении происходит переключение состояния мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее. Этот процесс соответствует бесформовочному нефиламентному переключению мемристора, когда электрический ток протекает через всю поверхность электрода [8].

Видно, что профили концентрации вакансий практически совпадают при температуре оксида металла 300 и 900 К и сильно разнятся при температуре порядка 600 К. Следовательно, в условиях высокого нагрева мемристора можно пренебречь процессом рекомбинации вакансий с ионами и существенно упростить процедуру математического моделирования резистивного переключения мемристора, исключив уравнение массопереноса ионов (2), а также рекомбинационный член $R(N, N_{ox})$ в стационарном уравнении массопереноса вакансий (1).

Рис. 3 иллюстрирует процесс переключения мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее состояние при возрастании напряжения u на электроде от 0 до 3 В: красная кривая — результат расчета с учетом генерации и рекомбинации пар «вакансия — ион», черная кривая взята из экспериментальной вольт-амперной характеристики для бесформовочного мемристора [8], в котором в качестве анода использовался электрод из тантала Ta диаметром $D = 100$ мкм с соответствующими константами для этого материала: работой выхода $A_M = 4,25$ эВ [22], сродством к электрону в оксиде тантала $\chi_D = 3,2$ эВ [24].

Для рассмотренного примера резистивного переключения в бесформовочном нефиламентном мемригоре на основе Ta_2O_5 [8], когда электрический ток протекает через всю поверхность электрода и не образуются филаменты с повышенной проводимостью в объеме оксида, одномерное уравнение теплопереноса (3) не дает правильного распределения температуры по толщине мемристора, сравнимого с экспериментальными результатами. Джоулев нагрев

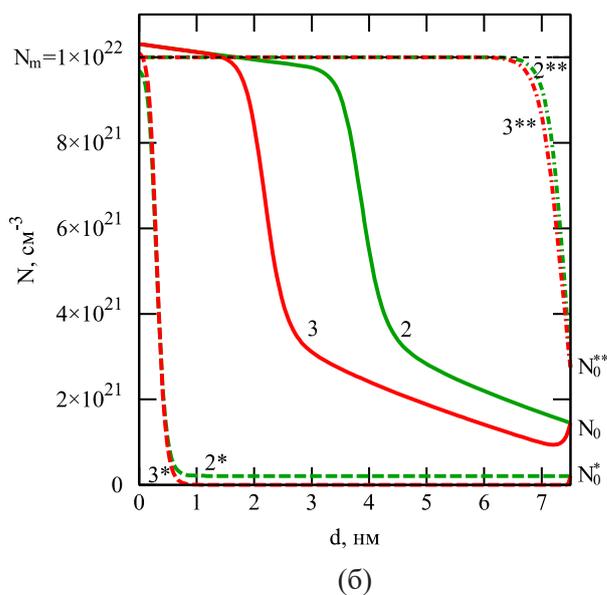
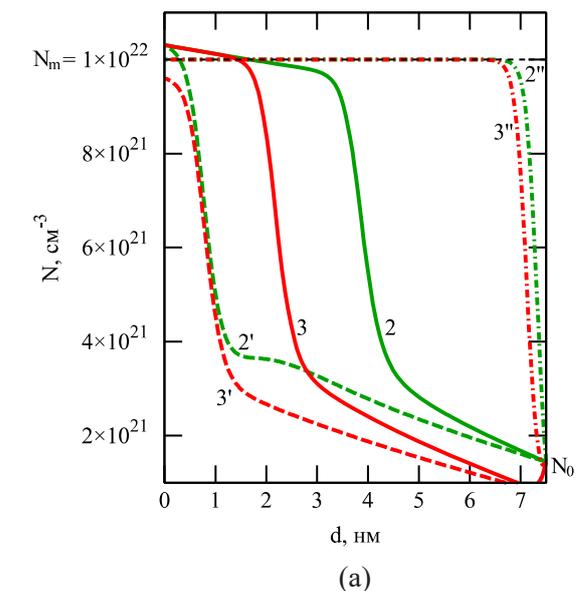


Рис. 2. Профиль концентрации вакансий по толщине оксидного слоя:
 а) для $T = 600$ К и различного напряжения на электродах (2 и 3 — при $u = 1,4$ В, 2' и 3' — при $u = 1,5$ В, 2'' и 3'' — при $u = 1,6$ В);
 б) для различной температуры при $u = 1,5$ В (2 и 3 — при 600 К, 2* и 3* — при 300 К, 2** и 3** — при 900 К)

Fig. 2. Vacancy concentration profile along oxide layer thickness:
 а) for $T = 600$ K and different electrode voltages (2 and 3 — at $u = 1.4$ V, 2' and 3' — at $u = 1.5$ V, 2'' and 3'' — at $u = 1.6$ V);
 б) for different temperatures at $u = 1.5$ V (2 and 3 — at 600 K, 2* and 3* — at 300 K, 2** and 3** — at 900 K)

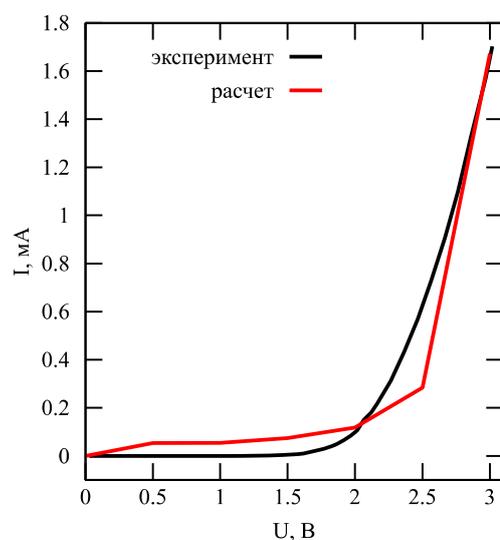


Рис. 3. Зависимость тока $I = J\pi D^2/4$ от напряжения u на аноде, описывающая переключение мемристора на основе Ta_2O_5 из низкопроводящего в высокопроводящее состояние

Fig. 3. Current $I = J\pi D^2/4$ dependence on the anode voltage u , describing Ta_2O_5 memristor switching from a low-conducting to a high-conducting state

достаточно мал из-за низкой плотности тока электронов, и какого-либо заметного градиента температуры не наблюдается. Причем охлаждение оксида из-за процесса генерации пар «вакансия — ион» по величине значительно меньше джоулева нагрева и значительно больше нагрева из-за рекомбинации этих пар, поскольку скорость генерации G всегда больше скорости рекомбинации R , а энергия генерации E_g значительно превышает энергию рекомбинации E_r . В формовочном мемристоре из-за создания узких каналов повышенной проводимости диаметром порядка 10 нм необходимо рассматривать цилиндрическую геометрию при тепломассопереносе зарядов [19, 20]. Из-за высокой плотности тока электронов в филаменте и, соответственно, высокого уровня джоулева нагрева, по толщине мемристора формируется большой градиент температуры с максимальным значением более 900 К.

Заключение

Относительно простая математическая модель динамического переключения мемристора построена на основе полной физической модели процессов стационарного массопереноса кислородных вакансий и ионов с учетом их рождения в сильном электрическом поле по механизму Френкеля, рекомбинации, дрейфа в электрическом поле по механизму Хилла и диффузии из-за градиента концентрации по закону Фика в структуре «металл — оксид — металл» при доминирующем транспортном механизме туннелирования электронов через кислородные вакансии.

С помощью численного моделирования получены распределения концентрации вакансий в зависимости от приложенного напряжения на электроды и температуры мемристора. Получено хорошее совпадение участка вольт-амперной характеристики при переключении мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее состояние, найденное в результате численного моделирования и экспериментально.

Расчетные профили концентраций показывают сильную зависимость от температуры активного слоя мемристора. В условиях нагрева мемристора менее 300 и более 600 К можно пренебречь процессом рекомбинации вакансий с ионами и существенно упростить процедуру математического моделирования резистивного переключения мемристора, исключив уравнение массопереноса ионов кислорода, а также рекомбинационный член в стационарном уравнении массопереноса кислородных вакансий. Кроме этого, с увеличением толщины активного слоя влияние рекомбинации на профиль концентрации вакансии ослабевает.

Для рассмотренного примера резистивного переключения в бесформовочном нефиламентном мемристоре, когда электрический ток протекает через всю поверхность электрода, одномерное уравнение теплопереноса не дает правильного распределения температуры по толщине мемристора, сравнимого с экспериментальными результатами. Джоулев нагрев мал из-за низкой плотности тока электронов, и какого-либо заметного градиента температуры не наблюдается.

Разработанная математическая модель динамического переключения мемристора, включающая систему стационарных обыкновенных дифференциальных уравнений, предназначена для моделирования работы больших мемристорных массивов в нейроморфных вычислительных устройствах и может оказаться предпочтительней по отношению к известным схемотехническим моделям, которые включают в себя определенный набор подгоночных параметров для совпадения результатов моделирования с экспериментальными характеристиками мемристора.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Ибрагим А. Х. Математическое моделирование резистивных состояний и динамического переключения мемристора на основе оксида металла / А. Х. Ибрагим, С. Ю. Удовиченко // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2020. Том 6. № 2 (22). С. 127-144. DOI: 10.21684/2411-7978-2020-6-2-127-144
2. Alibart F. Pattern classification by memristive crossbar circuits using *ex situ* and *in situ* training / F. Alibart, E. Zamanidoost, D. B. Strukov // Nature Communications. 2013. Vol. 4. Art. 2072. DOI: 10.1038/ncomms3072
3. Basnet P. Substrate dependent resistive switching in amorphous-HfO_x memristors: An experimental and computational investigation / P. Basnet, D. G. Pahinkar, M. P. West, C. J. Perini, S. Graham, E. M. Vogel // Journal of Materials Chemistry C. 2020. Vol. 8. Pp. 5092-5101. DOI: 10.1039/c9tc06736a

4. Bobylev A. N. Electrical properties of a TiN/Ti_xAl_{1-x}O_y/TiN memristor device manufactured by magnetron sputtering / A. N. Bobylev, S. Yu. Udovichenko // Russian Microelectronics. 2016. Vol. 45. No. 6. Pp. 396-401. DOI: 10.1134/S1063739716060020
5. Chernov A. A. Three-dimensional non-linear complex model of dynamic memristor switching / A. A. Chernov, D. R. Islamov, A. A. Pik'nik, T. V. Perevalov, V. A. Gritsenko // ECS Transactions. 2017. Vol. 75. No. 32. Pp. 95-104. DOI: 10.1149/07532.0095ecst
6. Dirkmann S. Filament growth and resistive switching in hafnium oxide memristive devices / S. Dirkmann, J. Kaiser, C. Wenger, T. Mussenbrock // ACS Applied Materials and Interfaces. 2018. Vol. 10. No. 17. Pp. 14857-14868. DOI: 10.1021/acsami.7b19836
7. Islamov D. R. Charge transport in thin hafnium and zirconium oxide films / D. R. Islamov, V. A. Gritsenko, A. Chin // Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing. 2017. Vol. 53. No. 2. Pp. 184-189. DOI: 10.3103/S8756699017020121
8. Kuzmichev D. S. Neuromorphic properties of forming-free non-filamentary TiN/Ta₂O₅/Ta structures with an asymmetric current-voltage characteristic / D. S. Kuzmichev, A. M. Markeev // Nanobiotechnology Reports. 2021. Vol. 16. No. 6. Pp. 804-810. DOI: 10.1134/S2635167621060136
9. Matveyev Yu. Crossbar nanoscale HfO₂-based electronic synapses / Yu. Matveyev, R. Kirtaev, A. Fetisova, S. Zakharchenko, D. Negrov, A. Zenkevich // Nanoscale Research Letters. 2016. Vol. 11. Art. 147. DOI: 10.1186/s11671-016-1360-6
10. Mazady A. Memristor: Part I — The underlying physics and conduction mechanism / A. Mazady, M. Anwar // IEEE Transactions on Electron Devices. 2014. Vol. 61. No. 4. Pp. 1054-1061. DOI: 10.1109/TED.2014.2304436
11. Menzel S. Physics of the switching kinetics in resistive memories / S. Menzel, U. Böttger, M. Wimmer, M. Salinga // Advanced Functional Materials. 2015. Vol. 25. No. 40. Pp. 6306-6325. DOI: 10.1002/adfm.201500825
12. Noman M. Computational investigations into the operating window for memristive devices based on homogeneous ionic motion / M. Noman, W. Jiang, P. A. Salvador, M. Skowronski, J. A. Bain // Applied Physics A. 2011. Vol. 102. Pp. 877-883. DOI: 10.1007/s00339-011-6270-y
13. Pahinkar D. G. Experimental and computational analysis of thermal environment in the operation of HfO₂ memristors / D. G. Pahinkar, P. Basnet, M. P. West, B. Zivasatienraj, A. Weidenbach, W. A. Doolittle, E. Vogel, S. Graham // AIP Advances. 2020. Vol. 10. No. 3. Art. 035127. DOI: 10.1063/1.5141347
14. Pisarev A. D. 3D memory matrix based on a composite memristor-diode crossbar for a neuromorphic processor / A. D. Pisarev, A. N. Busygin, S. Yu. Udovichenko, O. V. Maevsky // Microelectronic Engineering. 2018. Vol. 198. Pp. 1-7. DOI: 10.1016/j.mee.2018.06.008
15. Pisarev A. D. A biomorphic neuromorphic processor based on a composite memristor-diode crossbar / A. D. Pisarev, A. N. Busygin, S. Yu. Udovichenko, O. V. Maevsky // Microelectronics Journal. 2020. Vol. 102. Art. 104827. DOI: 10.1016/j.mejo.2020.104827
16. Pisarev A. D. Fabrication technology and electrophysical properties of a composite memristor-diode crossbar used as a basis for hardware implementation of a biomorphic neuromorphic processor / A. D. Pisarev, A. N. Busygin, A. N. Bobylev, A. A. Gubin, S. Yu. Udovichenko // Microelectronic Engineering. 2021. Vol. 236. Art. 111471. DOI: 10.1016/j.mee.2020.111471

17. Ryndin E. Compact model for bipolar and multilevel resistive switching in metal-oxide memristors / E. Ryndin, N. Andreeva, V. Luchinin // *Micromachines*. 2022. Vol. 13. No. 1. Art. 98. DOI: 10.3390/mi13010098
18. Strukov D. B. The missing memristor found / D. B. Strukov, G. S. Snider, D. R. Stewart, R. S. Williams // *Nature*. 2008. Vol. 453. Pp. 80-83. DOI: 10.1038/nature06932
19. Sungho Kim. Comprehensive physical model of dynamic resistive switching in an oxide memristor / Sungho Kim, ShinHyun Choi, Wei Lu // *ACS Nano*. 2014. Vol. 8. No. 3. Pp. 2369-2376. DOI: 10.1021/nn405827t
20. Sungho Kim. Physical electro-thermal model of resistive switching in bi-layered resistance-change memory / Sungho Kim, Sae-Jin Kim, Kyung Min Kim, Seung Ryul Lee, Man Chang, Eunju Cho, Young-Bae Kim, Chang Jung Kim, U.-In Chung, In-Kyeong Yoo // *Scientific Reports*. 2013. Vol. 3. Art. 1680. DOI: 10.1038/srep01680
21. Yoshihiro Sato, Kentaro Kinoshita, Masaki Aoki, Yoshihiro Sugiyama. Consideration of switching mechanism of binary metal oxide resistive junctions using a thermal reaction model // *Applied Physics Letters*. 2007. Vol. 90. Art. 033503. DOI: 10.1063/1.2431792
22. Yuzheng Guo. Materials selection for oxide-based resistive random access memories / Yuzheng Guo, J. Robertson // *Applied Physics Letters*. 2014. Vol. 105. Art. 223516. DOI: 10.1063/1.4903470
23. Zeumault A. Memristor compact model with oxygen vacancy concentrations as state variables / A. Zeumault, Sh. Alam, M. O. Faruk, A. Aziz // *Journal of Applied Physics*. 2022. Vol. 131. Art. 124502. DOI: 10.1063/5.0087038
24. Zhuo V. Y.-Q. Band alignment between Ta₂O₅ and metals for resistive random access memory electrodes engineering / V. Y.-Q. Zhuo, Y. Jiang, M. H. Li, E. K. Chua, Z. Zhang, J. S. Pan, R. Zhao, L. P. Shi, T. C. Chong, J. Robertson // *Applied Physics Letters*. 2013. Vol. 102. Art. 062106. DOI: 10.1063/1.4792274

Abdulla H. A. EBRAHIM¹
Alexander N. BUSYGIN²
Sergey Yu. UDOVICHENKO³

UDC 519.6, 004.421

**MATHEMATICAL MODELING
OF MEMRISTOR RESISTIVE SWITCHING
BASED ON MASS TRANSFER FULL MODEL
OF OXYGEN VACANCIES AND IONS**

¹ Postgraduate Student, Department of Applied and Technical Physics,
Research Engineer, Scientific and Educational Centre “Nanotechnologies”,
University of Tyumen
abdulla.ybragim@mail.ru; ORCID: 0000-0002-1709-9882

² Researcher Laboratory Assistant,
Scientific and Educational Centre “Nanotechnologies”,
University of Tyumen
a.n.busygin@utmn.ru; ORCID: 0000-0002-3439-8067

³ Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor,
Department of Applied and Technical Physics,
Head of Scientific and Educational Centre “Nanotechnologies”,
University of Tyumen
udotgu@mail.ru

Abstract

A relatively simple mathematical model of dynamic switching of a memristor has been created based on a fairly complete physical model of the processes of stationary mass transfer of oxygen vacancies and ions, considering their generation, recombination and diffusion in electric field in the “metal-oxide-metal” structure with the dominant transport mechanism of electron tunneling through oxygen vacancies.

Citation: Ebrahim A. H. A., Busygin A. N., Udovichenko S. Yu. 2022. “Mathematical modeling of memristor resistive switching based on mass transfer full model of oxygen vacancies and ions”. Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy, vol. 8, no. 2 (30), pp. 198-214.
DOI: 10.21684/2411-7978-2022-8-2-198-214

The results of numerical simulation of mass transfer of oxygen vacancies along thickness of the oxide layer of the memristor are presented. The distributions of vacancy concentration during their diffusion in an electric field are found, taking into account the processes of generation and recombination with ions, depending on the applied voltage to the electrodes and on the temperature of the memristor. A good coincidence of the volt-ampere characteristics part found as a result of numerical simulation and a series of experiments is obtained.

It is shown that under conditions of more than 600 K memristor temperature, it is possible to neglect the process of ion-vacancy recombination and significantly simplify the procedure for mathematical modeling of memristor resistive switching by eliminating the oxygen mass transfer equation, as well as the recombination term in the stationary equation of oxygen vacancies mass transfer.

The developed mathematical model of memristor dynamic switching, including a system of stationary ordinary differential equations, is designed to simulate the operation of large memristor arrays in neuromorphic computing devices and may be preferable in relation to known circuit models that include a certain set of fitting parameters to match the simulation results with the memristor experimental characteristics.

Keywords

Metal oxide memristor, oxygen vacancies and ions, mathematical modeling, physical model of stationary mass transfer of charges, volt-ampere characteristic, resistive switching of the memristor.

DOI: 10.21684/2411-7978-2022-8-2-198-214

REFERENCES

1. Ebrahim A. H., Udovichenko S. Yu. 2020. "Mathematical modeling of resistive states and dynamic switching of a metal oxide memristor". Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy, vol. 6, no. 2 (22), pp. 127-144. DOI: 10.21684/2411-7978-2020-6-2-127-144 [In Russian]
2. Alibart F., Zamanidoost E., Strukov D.B. 2013. "Pattern classification by memristive crossbar circuits using *ex situ* and *in situ* training". Nature Communications, vol. 4, art. 2072. DOI: 10.1038/ncomms3072
3. Basnet P., Pahinkar D. G., West M. P., Perini C. J., Graham S., Vogel E. M. 2020. "Substrate dependent resistive switching in amorphous-HfO_x memristors: an experimental and computational investigation". Journal of Materials Chemistry C, vol. 8, pp. 5092-5101. DOI: 10.1039/c9tc06736a
4. Bobylev A. N., Udovichenko S. Yu. 2016. "Electrical properties of a TiN/Ti_xAl_{1-x}O_y/TiN memristor device manufactured by magnetron sputtering". Russian Microelectronics, vol. 45, no. 6, pp. 396-401. DOI: 10.1134/S1063739716060020
5. Chernov A. A., Islamov D. R., Pikhnik A. A., Perevalov T. V., Gritsenko V. A. 2017. "Three-dimensional non-linear complex model of dynamic memristor switching". ECS Transactions, vol. 75, no. 32, pp. 95-104. DOI: 10.1149/07532.0095ecst

6. Dirkmann S., Kaiser J., Wenger C., Mussenbrock T. 2018. "Filament growth and resistive switching in hafnium oxide memristive devices". *ACS Applied Materials and Interfaces*, vol. 10, no. 17, pp. 14857-14868. DOI: 10.1021/acsami.7b19836
7. Islamov D. R., Gritsenko V. A., Chin A. 2017. "Charge transport in thin hafnium and zirconium oxide films". *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, vol. 53, no. 2, pp.184-189. DOI: 10.3103/S8756699017020121
8. Kuzmichev D. S., Markeev A. M. 2021. "Neuromorphic properties of forming-free non-filamentary TiN/Ta₂O₅/Ta structures with an asymmetric current-voltage characteristic". *Nanobiotechnology Reports*, vol. 16, no. 6, pp. 804-810. DOI: 10.1134/S2635167621060136
9. Matveyev Yu., Kirtaev R., Fetisova A., Zakharchenko S., Negrov D., Zenkevich A. 2016. "Crossbar nanoscale HfO₂-based electronic synapses". *Nanoscale Research Letters*, vol. 11, art. 147. DOI: 10.1186/s11671-016-1360-6
10. Mazady A., Anwar M. 2014. "Memristor: Part 1 — The underlying physics and conduction mechanism". *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 61, no. 4. pp. 1054-1061. DOI: 10.1109/TED.2014.2304436
11. Menzel S., Böttger U., Wimmer M., Salinga M. 2015. "Physics of the switching kinetics in resistive memories". *Advanced Functional Materials*, vol. 25, no. 40, pp. 6306-6325. DOI: 10.1002/adfm.201500825
12. Noman M., Jiang W., Salvador P. A., Skowronski M., Bain J. A. 2011. "Computational investigations into the operating window for memristive devices based on homogeneous ionic motion". *Applied Physics A*, vol. 102, pp. 877-883. DOI: 10.1007/s00339-011-6270-y
13. Pahinkar D. G., Basnet P., West M. P., Zivasatienraj B., Weidenbach A., Doolittle W. A., Vogel E., Graham S. 2020. "Experimental and computational analysis of thermal environment in the operation of HfO₂ memristors". *AIP Advances*, vol. 10, no. 3, art. 035127. DOI: 10.1063/1.5141347
14. Pisarev A. D., Busygin A. N., Udovichenko S. Yu., Maevsky O. V. 2018. "3D memory matrix based on a composite memristor-diode crossbar for a neuromorphic processor". *Microelectronic Engineering*, vol. 198, pp. 1-7. DOI: 10.1016/j.mee.2018.06.008
15. Pisarev A. D., Busygin A. N., Udovichenko S. Yu., Maevsky O. V. 2020. "A biomorphic neuromorphic processor based on a composite memristor-diode crossbar". *Microelectronics Journal*, vol. 102, art. 104827. DOI: 10.1016/j.mejo.2020.104827
16. Pisarev A. D., Busygin A. N., Bobylev A. N., Gubin A. A., Udovichenko S. Yu. 2021. "Fabrication technology and electrophysical properties of a composite memristor-diode crossbar used as a basis for hardware implementation of a biomorphic neuromorphic processor". *Microelectronic Engineering*, vol. 236, art. 111471. DOI: 10.1016/j.mee.2020.111471
17. Ryndin E., Andreeva N., Luchinin V. 2022. "Compact model for bipolar and multilevel resistive switching in metal-oxide memristors". *Micromachines*, vol. 13, no. 1, art. 98. DOI: 10.3390/mi13010098
18. Strukov D. B., Snider G. S., Stewart D. R., Williams R. S. 2008. "The missing memristor found". *Nature*, vol. 453, pp. 80-83. DOI: 10.1038/nature06932
19. Sungho Kim, ShinHyun Choi, Wei Lu. 2014. "Comprehensive physical model of dynamic resistive switching in an oxide memristor". *ACS Nano*, vol. 8, no. 3, pp. 2369-2376. DOI: 10.1021/nn405827t

20. Sungho Kim, Sae-Jin Kim, Kyung Min Kim, Seung Ryul Lee, Man Chang, Eunju Cho, Young-Bae Kim, Chang Jung Kim, U.-In Chung, In-Kyeong Yoo. 2013. "Physical electro-thermal model of resistive switching in bi-layered resistance-change memory". *Scientific Reports*, vol. 3, art. 1680. DOI: 10.1038/srep01680
21. Yoshihiro Sato, Kentaro Kinoshita, Masaki Aoki, Yoshihiro Sugiyama. 2007. "Consideration of switching mechanism of binary metal oxide resistive junctions using a thermal reaction model". *Applied Physics Letters*, vol. 90, art. 033503. DOI: 10.1063/1.2431792
22. Yuzheng Guo, Robertson J. 2014. "Materials selection for oxide-based resistive random access memories". *Applied Physics Letters*, vol. 105, art. 223516. DOI: 10.1063/1.4903470
23. Zeumault A., Alam Sh., Faruk M. O., Aziz A. 2022. "Memristor compact model with oxygen vacancy concentrations as state variables". *Journal of Applied Physics*, vol. 131, art. 124502. DOI: 10.1063/5.0087038
24. Zhuo V. Y.-Q., Jiang Y., Li M. H., Chua E. K., Zhang Z., Pan J. S., Zhao R., Shi L. P., Chong T. C., Robertson J. 2013. "Band alignment between Ta₂O₅ and metals for resistive random access memory electrodes engineering". *Applied Physics Letters*, vol. 102, art. 062106. DOI: 10.1063/1.4792274