

Абдулла Хайдар Абдо ИБРАГИМ<sup>1</sup>  
Сергей Юрьевич УДОВИЧЕНКО<sup>2</sup>

УДК 519.6, 004.421

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЗИСТИВНЫХ СОСТОЯНИЙ И ДИНАМИЧЕСКОГО ПЕРЕКЛЮЧЕНИЯ МЕМРИСТОРА НА ОСНОВЕ ОКСИДА МЕТАЛЛА

<sup>1</sup> аспирант кафедры прикладной и технической физики, инженер-исследователь НОЦ «Нанотехнологии», Тюменский государственный университет  
abdulla.ybragim@mail.ru

<sup>2</sup> доктор физико-математических наук, профессор кафедры прикладной и технической физики, руководитель НОЦ «Нанотехнологии», Тюменский государственный университет  
udotgu@mail.ru

### Аннотация

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. Найдено аналитическое решение для распределения концентрации кислородных вакансий по толщине слоя оксида гафния в приближении постоянного электрического поля. Модель мемристора в неоднородном электрическом поле реализована в виде специализированной программы на основе метода конечных разностей для решения стационарного нелинейного дифференциального уравнения первого порядка. Она хорошо описывает физический

---

**Цитирование:** 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

---

эффект замедления роста проводимости тонкого слоя оксида металла при доминирующем транспортном механизме туннелирования электронов через кислородные вакансии, возникающий в результате роста концентрации захваченных электронов с увеличением напряжения на электродах вблизи порогового напряжения переключения. Проведено численное моделирование дискретных резистивных состояний и динамического переключения мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее состояние. Построенная вольт-амперная характеристика мемристора с помощью численного моделирования лучше согласуется с экспериментальными данными по сравнению с аналитическим расчетом. Численную модель можно применять при исследовании и разработке мемристоров с заданными электрическими характеристиками. Простая аналитическая модель мемристора, не требующая большого объема вычислений, применима для моделирования процессов записи, сложения сигналов и ассоциативного самообучения в сверхбольших запоминающей и логической матрицах биоморфного нейропроцессора, в которых мемристоры используются в качестве синапсов нейронов.

#### **Ключевые слова**

Математическое моделирование, мемристор на основе оксида металла, численная и аналитическая модель резистивного переключения мемристора, метод конечных разностей, вольт-амперная характеристика.

**DOI: 10.21684/2411-7978-2020-6-2-127-144**

#### **Введение**

В последнее время значительное внимание уделяется созданию устройств энергонезависимой резистивной памяти на основе мемристоров — структур «металл — диэлектрик — металл», в том числе с использованием в качестве диэлектрика оксидов переходных металлов с высокой подвижностью кислородных вакансий [22]. При наложении электрического поля в тонкой пленке оксида разрывается слабая связь ионов металла и кислорода. Отрицательные ионы кислорода движутся к положительно заряженному электроду и обедняют содержание кислорода в объеме пленки, в результате чего проводимость мемристора возрастает. И наоборот, при изменении направления электрического поля на обратное ионы кислорода диффундируют в объем пленки, и проводимость мемристора уменьшается. Твердотельный мемристор является аналогом биологического синапса, связывающего нейроны мозга [2]. Если проводимость синапса уменьшается при прохождении электрического импульса от нейрона к нейрону, то в мозге происходит процесс забывания информации, а если проводимость увеличивается, происходит процесс запоминания.

Для описания процесса резистивного переключения в мемристоре было предложено несколько физических моделей. Среди них следует отметить модели электрополевой миграции зарядов в объеме диэлектрика [16, 18, 19]. В [8] представлена модель резистивного переключения в мемристорном устройстве

TiN/Ti/HfO<sub>2</sub>/TiN. Ионные процессы были симулированы с помощью кинетического метода Монте-Карло, уравнения Лапласа для поля, уравнения неразрывности для тока и уравнения теплопроводности. Рассмотрен один из возможных механизмов переноса заряда — туннелирование электронов через ловушки (кислородные вакансии). Недостатком этой модели является то, что она привязана к особой структуре мемристора, в которой рождение и рекомбинация пары Френкеля (ион кислорода и кислородная вакансия) наблюдаются преимущественно на поверхности титанового электрода. Это происходит благодаря высокому сродству титана к кислороду. Энергия активации для образования пары Френкеля оказывается значительно меньше на границе титанового электрода, чем в объеме оксида. В мемристорных структурах с электродами, обладающими низким сродством к кислороду, следует рассматривать объемные процессы рождения и рекомбинации пар Френкеля.

В [20] описано туннелирование захваченных электронов через вакансии кислорода в структуре «металл — оксид — металл» с последующей релаксацией атомного окружения этих вакансий. Предложенная модель является достаточно сложной, поскольку основана на ловушках не с одним энергетическим уровнем для электрона, а со спектром электронных состояний. Модель транспорта зарядов на основе ловушки с одним уровнем для электрона [3] является более простой по сравнению с моделью [20], однако в ней используется среднее значение концентрации вакансий по толщине оксида и отсутствует процедура расчета распределения вакансий в результате миграции под действием электрического поля.

В работе [7] сформулирована наиболее полная нелинейная модель тепло-массопереноса зарядов в структуре «металл — оксид — металл» при доминирующем транспортном механизме туннелирования электронов через кислородные вакансии, с помощью которой возможно построение модели, описывающей различные резистивные состояния и переключения мемристора из высокопроводящего в низкопроводящее состояние и наоборот. Термодинамическая модель учитывает процессы рождения и рекомбинации пар Френкеля в объеме оксида и включает нестационарное уравнение теплопроводности с нелинейным источником тепла, содержащим Джоулев нагрев и рекомбинацию зарядов, уравнение Пуассона для электрического поля и уравнений Шокли — Рида — Холла с учетом сильного электрон-фононного взаимодействия в процессах ионизации ловушек и переноса заряда в объеме оксида металла. Предложенные в работах [7, 20] физические модели переноса зарядов в оксиде металла достаточно сложны и требуют ресурсоемких численных квантово-химических расчетов, за которыми скрывается физический смысл протекающих процессов.

Целью данной работы является создание математической модели резистивных состояний и динамического переключения мемристора на основе более простой 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. Для этого необходимо реализовать модель мемристора в виде специализированной программы и провести численное моделирование состояний мемристора, а также сравнить полученные в результате расчета вольт-амперные характеристики мемристора с экспериментальными данными.

### Математическая модель мемристора

Нестационарные одномерные уравнения массопереноса кислородных вакансий и отрицательных ионов кислорода включают члены, описывающие процессы генерации, рекомбинации и миграции в электрическом поле [7]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial N}{\partial t} = & (N_{max} - N) \frac{W_{ph}}{h} \exp \left[ \frac{-\left( W_{ox} - \sqrt{\frac{q^3 E}{\pi \epsilon \epsilon_0}} \right)}{kT} \right] - \\ & - NN_{ox} v_{ox} \sigma_{ox} - \frac{\partial}{\partial z} \times \\ & \times \left\{ N \left( 1 - \frac{N}{N_{max}} \right) \frac{W_{ph}}{h} \exp \left[ \frac{-\left( W_{ox} - \frac{q^2}{\pi \epsilon \epsilon_0 s_0} \right)}{kT} \right] \sinh \left( \frac{qEs_0}{2kT} \right) \right\}, \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial N_{ox}}{\partial t} = & (N_{max} - N) \frac{W_{ph}}{h} \exp \left[ \frac{-\left( W_{ox} - \sqrt{\frac{q^3 E}{\pi \epsilon \epsilon_0}} \right)}{kT} \right] - \\ & - NN_{ox} v_{ox} \sigma_{ox} + \frac{\partial}{\partial z} (N_{ox} v_{ox}), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $N$  — концентрация кислородных вакансий (ловушек);  $N_{max}$  — максимально возможная концентрация вакансий;  $N_{ox}$  — концентрация междуузельных ионов кислорода;  $s_0 = N_{max}^{-1/3}$  — среднее расстояние между атомами;  $W_{ph}$  — энергия фонона;  $W_{ox}$  и  $\sigma_{ox}$  — энергия образования и рекомбинационное сечение для междуузельной-вакансионной пары;  $E$  — электрическое поле;  $v_{ox}$  — скорость дрейфа междуузельных атомов;  $T$  — температура диэлектрика;  $z$  — координата поперек пленки оксида металла;  $h$  — постоянная Планка;  $k$  — постоянная Больцмана;  $q$  — заряд вакансии;  $\epsilon$  — низкочастотная диэлектрическая проницаемость среды.

Первый член в правой части уравнения (1) описывает скорость генерации новой пары «междуузельный ион — вакансия» в сильном электрическом поле по механизму Френкеля [6]. Второй член в (1) описывает рекомбинацию кислородных вакансий с междуузельными ионами кислорода. Третий член связан с дрейфом вакансий кислорода, который происходит в виде прыжков соседних

ионов кислорода на позиции вакансий по механизму Хилла [9]. При этом первоначальные вакансии рекомбинируют, а на месте ионов образуются новые вакансии. Уравнение (2) описывает аналогичные процессы для междоузельных ионов кислорода. Первый и второй члены в правой части (2) аналогичны соответствующим членам в уравнении (1). Третий член описывает дрейф междоузельных ионов кислорода в электрическом поле.

Численное моделирование в [12] процесса генерации кислородных вакансий в структуре Pt/HfO<sub>2</sub>/TiN при толщине оксидного слоя  $d = 3$  нм и напряжении на электродах  $u = 1$  В показало, что концентрация вакансий выходит на постоянное значение через время  $t = 0,1$  мс. Время медленного процесса миграции отрицательных ионов кислорода по толщине оксидного слоя  $d = 10$  нм в структуре Pt/TiO<sub>x</sub>/Pt с подвижностью  $\mu_v \approx 10^{-10}$  см<sup>2</sup>/(с · В) [19] составляет порядка  $t_0 \approx \approx d^2/\mu_v u = 10$  мс. Время переключения структуры из низкопроводящего в высокопроводящее состояние является нелинейной функцией амплитуды приложенного напряжения. Так, время переключения структуры Pt/HfO<sub>2</sub>/TiN при напряжении до 3 В составило  $5 \cdot 10^{-2}$  мс, а в структуре Pt/TiO<sub>x</sub>/Pt при напряжении до 1 В — соответственно  $10^{-1}$  мс [14]. Следовательно, уравнения (1) и (2), определяющие концентрации ионов и вакансий, можно рассматривать в стационарном режиме. В результате сложения этих уравнений для концентрации вакансий получим следующее нелинейное дифференциальное уравнение первого порядка с переменным коэффициентом  $C(z)$ :

$$\frac{\partial N(z)}{\partial z} - \sigma_{ox} N^2(z) - C(z)[N_{max} - N(z)] = 0,$$

$$C(z) = \frac{\exp \left[ \frac{\left( \sqrt{\frac{q^3 E(z)}{\pi \epsilon \epsilon_0}} - \frac{q^2}{\pi \epsilon \epsilon_0 s_0} \right)}{kT} \right]}{s_0 \sinh \left( \frac{qE(z)s_0}{2kT} \right)}.$$
(3)

Поскольку в диэлектрике с низкой электропроводностью плотность тока свободных электронов мала и доминирующим транспортным механизмом является туннелирование электронов через мигрирующие в электрическом поле вакансии [8], представим плотность тока через оксидный слой мемристора в виде [3, 7]:

$$J = \frac{e}{s^2} \frac{n_t}{N} \left( 1 - \frac{n_t}{N} \right) P_{tun},$$
(4)

где  $n_t$  — концентрация захваченных в ловушки (вакансии) электронов;  $s = N^{-1/3}$  — среднее расстояние между ловушками;  $P_{tun}(u)$  — частота туннелирования электронов между ловушками.

Частота туннелирования электронов между фонон-связанными ловушками имеет экспоненциальную зависимость от электрического поля и температуры:

$$P_{tun}(E, T) = \frac{2\sqrt{\pi}\hbar W_t}{m^* s^2 Q_0 \sqrt{kT}} \exp\left(-\frac{W_{opt} - W_t}{2kT}\right) \exp\left(-\frac{2s\sqrt{2m^* W_t}}{\hbar}\right) \sinh\left(\frac{esE}{2kT}\right), \quad (5)$$

где  $Q_0 = \sqrt{2(W_{opt} - W_t)}$ ;  $W_t$  и  $W_{opt}$  — термическая и оптическая энергия ионизации ловушки;  $m^* = 0,25m_e$  — эффективная масса носителя заряда;  $m_e$  — масса электрона;  $\hbar$  — приведенная постоянная Планка.

Концентрация захваченных в ловушки (вакансии) электронов, входящая в формулу (4), в стационарных условиях соответствует статистике Ферми на контакте «металл — диэлектрик» [7]:

$$n_t(z=0) = \frac{N}{1 + \exp\left(\frac{A_M - \chi_D - W_t - eu}{kT}\right)}, \quad (6)$$

где  $A_M$  — работа выхода электрона из металла в вакуум;  $\chi_D$  — электронное сродство в диэлектрике;  $u$  — отрицательный потенциал электрода, с которого происходит эмиссия электронов. Таким образом, в формуле (6) отражено уменьшение потенциального барьера на контакте «металл — диэлектрик» при приложении внешней разности потенциалов на электроды [10].

#### Аналитическая и численная модели переключения мемристора

Из-за малой электропроводности доминирующим транспортным механизмом электронов в слое оксида металла является туннелирование через ловушки. В этом случае внешнее электрическое поле  $E$  незначительно искажается свободными и захваченными носителями заряда, и его стационарное распределение в диэлектрическом слое определяется с помощью уравнения Лапласа [8]:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = 0, \quad E = -\frac{\partial \varphi}{\partial z} = -\frac{u}{d}, \quad (7)$$

$$\varphi|_{z=0} = 0, \quad \varphi|_{z=d} = u, \quad (8)$$

где  $d$  — толщина слоя оксида металла;  $u$  — разность потенциалов (напряжение) на электродах мемристора.

В этом случае уравнение (3) с постоянным коэффициентом  $C$  для концентрации вакансий допускает аналитическое решение:

$$N(z, u) = \frac{C(u)}{2\sigma_{ox}(u)} + \frac{D(u)}{2\sigma_{ox}(u)} \operatorname{tg} \left[ \frac{D(u)}{2}(z-d) + \operatorname{arctg} \left( \frac{2\sigma_{ox}(u)N_{z=d} - C(u)}{D(u)} \right) \right], \quad (9)$$

где  $D = \sqrt{4\sigma_{ox}N_0C - C^2}$ .

Процессом рекомбинации кислородных вакансий по сравнению с их дрейфом под действием электрического поля в уравнении (3) можно пренебречь, если

$N^2 \sigma_{ox} / N_{max} \ll C$ , где  $\sigma_{ox} = e/4\epsilon\epsilon_0 E$  [7]. Это условие хорошо выполняется при невысоких температурах и большом электрическом поле. Решение уравнения (3) в таком случае имеет вид:

$$N(z, u) = N_0 - (N_0 - N_{z=d}) \exp[-C(u)(d - z)]. \quad (10)$$

Концентрация захваченных электронов с увеличением напряжения на электродах приближается к концентрации вакансий, что приводит к ограничению роста плотности тока (4) при напряжении, равном напряжению переключения мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее состояние. Вблизи напряжения переключения мемристора справедливо уравнение Лапласа для электрического поля (7). При меньших напряжениях вместо этого уравнения необходимо решать уравнение Пуассона для электрического поля, в правой части которого присутствует разность плотности зарядов вакансий и электронов  $e(N - n_l)$ .

Поскольку определение концентрации захваченных в ловушки электронов является сложной задачей [7], найдем величину электрического поля из условия равенства диффузионного потока вакансий и их потока, обусловленного электрическим полем, т. е. при равновесном распределении вакансий [1]:

$$E(z) = -\frac{\partial\varphi(z)}{\partial z} = \frac{T}{qN(z)} \cdot \frac{dN(z)}{dz}, \quad (11)$$

где  $\varphi(0) = 0$ ,  $\varphi(d) = u$ . Это условие следует из стационарного уравнения дрейфа — диффузии вакансий при постоянных коэффициенте диффузии и температуре [17]. В такой постановке математической модели мемристора ставится задача о численном решении дифференциального уравнения первого порядка с переменным коэффициентом  $C(z)$  (3).

Искомый ток, который протекает через оксидный слой и измеряется на электроде с нулевым потенциалом (в месте эмиссии электронов), можно рассчитать аналитически с помощью выражений (4)-(9), определяя концентрации вакансий и инжектированных электронов у этого электрода с известной площадью. При численном расчете тока через мемристор для определения концентрации кислородных вакансий на границе электрода необходимо решать нелинейную систему уравнений (3) и (11).

### Реализация модели мемристора в виде программы

Программа для расчета резистивных состояний и переключения мемристора составлена на языке программирования Python версии 3.7 с применением библиотеки `numpy`. Значения всех переменных были представлены типом `numpy.double`, который соответствует типу `double` в языке C. При расчетах использовалась расчетная сетка с равномерным расположением узлов.

Процедура расчета профиля вакансий кислорода при определенном напряжении на электродах состоит из трех этапов. В качестве начального приближения распределение вакансий вычисляется при постоянном электрическом поле по толщине оксидного слоя мемристора. Затем рассчитывается электри-

ческое поле, соответствующее найденному скалярному полю вакансий. Далее, на основе получившегося электрического поля вычисляется итоговый профиль концентраций вакансий по толщине пленки. Расчет электрического поля, соответствующего определенному профилю вакансий кислорода, осуществляется с использованием формулы (11). При этом для численного вычисления производной концентрации вакансий по толщине слоя применяется двусторонняя конечная разность:

$$\left(\frac{dN}{dz}\right)_i = \frac{N_{i+1} - N_{i-1}}{z_{i+1} - z_{i-1}}, \quad i = 1..(M - 1). \quad (12)$$

На границах слоя диэлектрика использованы соответствующие односторонние конечные разности:

$$\left(\frac{dN}{dz}\right)_0 = \frac{N_1 - N_0}{z_1 - z_0}, \quad \left(\frac{dN}{dz}\right)_M = \frac{N_M - N_{M-1}}{z_M - z_{M-1}}. \quad (13)$$

Скалярное поле концентраций вакансий рассчитывается путем численного решения задачи Коши для уравнения (3) методом Эйлера. Подставляя одностороннюю конечную разность в уравнение (3), получим соответствующую итерационную формулу:

$$N_{i+1} = N_i + (z_{i+1} - z_i) \cdot (\sigma_{ox} N_i^2 + C(z_i) \cdot [N_{max} - N_i]). \quad (14)$$

Концентрация вакансий  $N_0$  для начальной итерации соответствует концентрации вакансий в отсутствие электрического поля. Для уменьшения погрешности при численном расчете была выполнена процедура обезразмеривания путем следующих замен:  $N = n \cdot N_{max}$ ,  $z = x \cdot d$ .

Плотность тока рассчитывается по формулам аналитической модели с использованием скорректированного значения электрического поля вблизи катода. Построение вольт-амперной характеристики выполняется путем последовательного расчета профиля вакансий и соответствующей плотности тока при разных напряжениях.

### Моделирование резистивных состояний и переключения мемристора

Для аналитического и численного моделирования расчетные параметры ловушек в пленке оксида гафния  $\text{HfO}_2$  взяты из работы [3]:  $W_t = 1,25$  эВ,  $W_{opt} = 2,5$  эВ. Параметры, связанные с геометрией мемристора, позаимствованы из [11], в которой исследована структура  $\text{Pt}/\text{HfO}_2/\text{TiN}$  с толщиной оксидного слоя 6 нм и площадью электродов  $2 \times 2$  мкм<sup>2</sup>.

Рис. 1 показывает распределения электрического поля по толщине оксидного слоя мемристора, используемые при аналитическом и численном моделировании.

На рис. 2 представлены распределения концентрации кислородных вакансий по толщине пленки оксида гафния  $\text{HfO}_2$  в мемристоре при разной температуре.

Из рис. 2 следует, что большей температуре вакансий соответствует более высокая их концентрация. С ростом концентрации вакансий увеличивается электронный ток через мемристор, что, в свою очередь, увеличивает тепловыделение в результате омического нагрева в локальной области оксида, в которой протекает

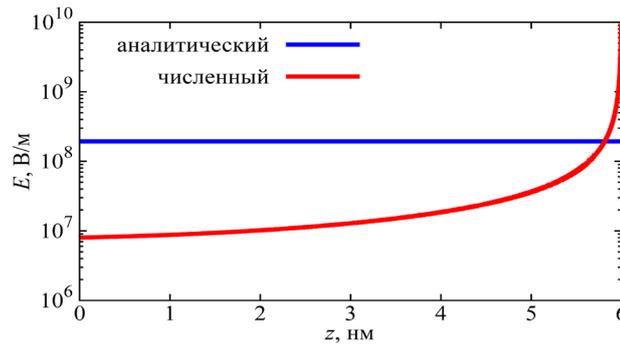


Рис. 1. Распределение электрического поля по толщине оксидного слоя мемристора согласно формулам (7) и (11) для аналитического и численного моделирования соответственно

Fig. 1. Electric field distribution over the thickness of the memristor oxide layer according to formulas (7) and (11) for analytical and numerical simulation, respectively

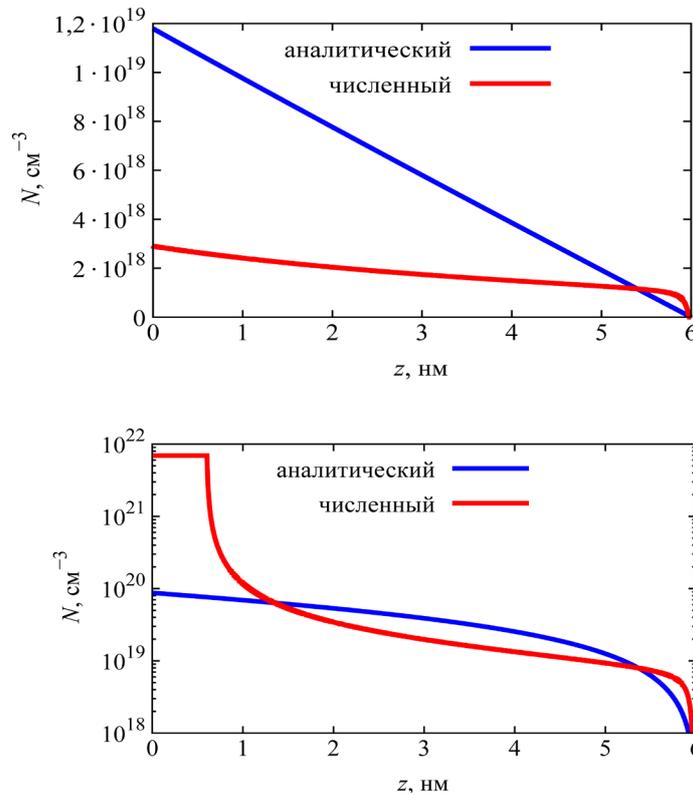


Рис. 2. Распределение концентрации кислородных вакансий по толщине пленки оксида гафния  $\text{HfO}_2$ : сверху — 200 °С, снизу — 313 °С

Fig. 2. Distribution of the oxygen vacancies concentration over the  $\text{HfO}_2$  film thickness: from above — 200 °С, from below — 313 °С

ток. Результаты измерений в [11] свидетельствуют о том, что в мемристоре выделяется мощность порядка 100 мкВт и в области протекания тока температура достигает значений более 630 °С. Согласно рис. 2 (снизу), численная модель, учитывающая самосогласованное электрическое поле, более точно описывает процесс увеличения и выхода на полку концентрации вакансий с ростом температуры вблизи электрода с отрицательным потенциалом. Подобный равновесный профиль концентрации вакансий получен в работе [15].

Рис. 3 свидетельствует о высокой зависимости максимального значения концентрации вакансий на границе с электродом от приложенного напряжения.

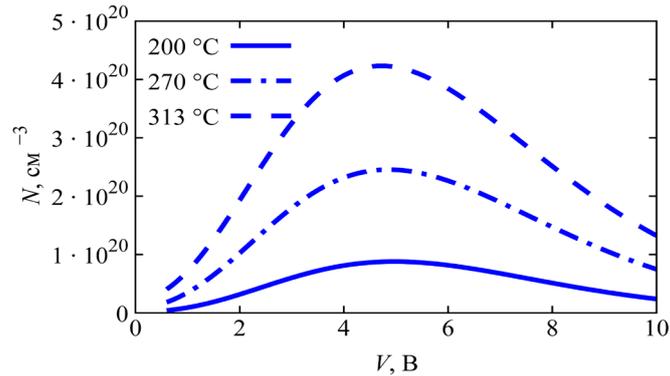


Рис. 3. Зависимость концентрации вакансий от приложенного напряжения при разных температурах вблизи электрода с низким потенциалом

Fig. 3. Dependence of the vacancy concentration on the applied voltage at different temperatures near the electrode with lower potential

На рис. 4 построены зависимости концентрации вакансий и инжектируемых в оксид электронов, захватываемых ловушками, от приложенного напряжения на электродах мемристора.

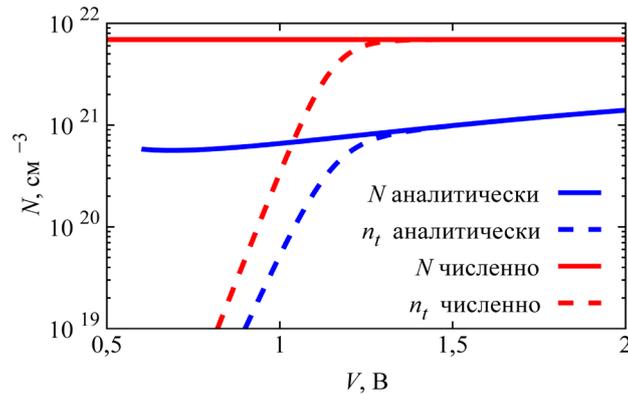


Рис. 4. Зависимости концентрации кислородных вакансий и инжектированных электронов от приложенного напряжения при температуре 313 °С

Fig. 4. Dependences of the oxygen vacancies concentration and injected electrons from the applied voltage at the temperature of 313 °С

Из этой зависимости следует, что с ростом напряжения происходит выравнивание концентраций захваченных электронов и вакансий кислорода, что должно в итоге привести к насыщению тока. Математически это следует из формулы (4): экспоненциальный рост частоты туннелирования электронов через ловушки компенсируется уменьшением множителя  $(1 - n_i/N)$ .

На рис. 5 показаны расчетные и экспериментальные вольт-амперные характеристики (ВАХ): а — для структуры Pt/HfO<sub>2</sub>/TiN [11] и б — для TiN/HfO<sub>2</sub>/Ti/TiN [21], в которой толщина оксидного слоя 10 нм и площадь электродов 1 × 1 мкм<sup>2</sup>. Разработанные аналитическая и численная модели мемристора позволяют определить температуру в мемристоре, при которой достигается совмещение площадей ВАХ и совпадение соответствующих параметров мемристора в низкопроводящем и высокопроводящем состояниях.

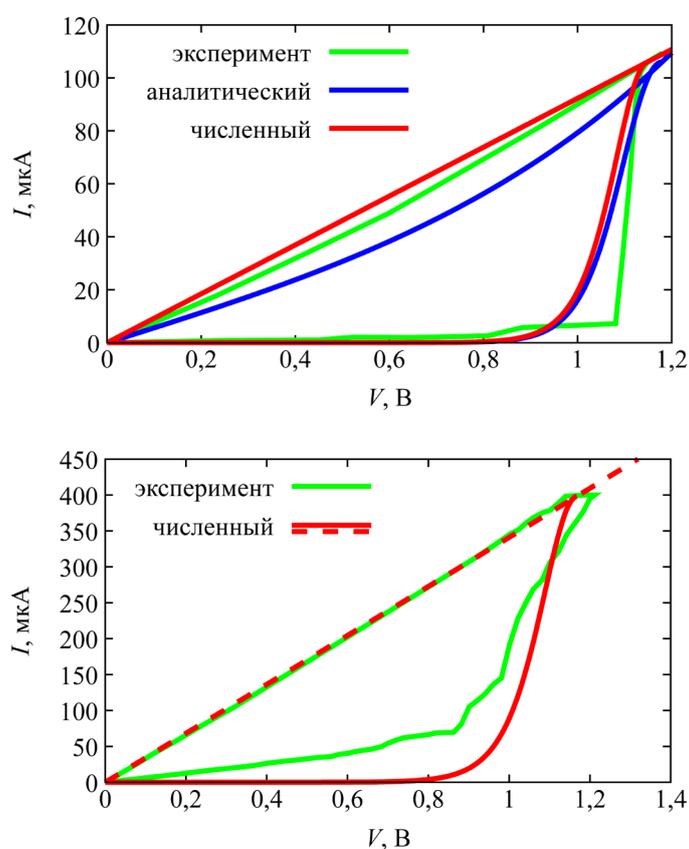


Рис. 5. Расчетные и экспериментальные ВАХ: сверху — мемристора [11], аналитический расчет при 435 °С и численный — при 313 °С; снизу — мемристора [21], численный расчет при 434 °С

Fig. 5. Calculated and experimental VAC: from above — memristor [11], analytical calculation at 435 °С and numerical — at 313 °С; from below — memristor [21], numerical calculation at 434 °С

Сравнение ВАХ на рис. 5 (сверху) показывает, что численное моделирование переключения мемристора из низкопроводящего в высокопроводящее состояние с учетом самосогласованного электрического поля дает более точное совпадение расчетной и экспериментальной ВАХ по сравнению с аналитическим приближением.

Несовпадение расчетной и экспериментальной кривых при увеличении тока в мемристоре [21] на рис. 5 (снизу) связано с высокой температурой в области протекания тока с повышенной концентрацией электронов. При выделяемой мощности 400 мкВт средняя температура оксидной пленки из-за теплопереноса поперек и вдоль направления тока составила всего 140 °С.

Для построения более точной математической модели мемристора необходимо включать в нее расчет теплопереноса на основе трехмерного нелинейного дифференциального уравнения второго порядка. Отметим также, что представленная модель мемристора не учитывает структуру и элементный состав электродов мемристора, различные приэлектродные процессы рождения и рекомбинации ионов кислорода и вакансий. Влияние материала электродов в модели описывается только работой выхода электронов.

Если подавать на электроды напряжение меньше, чем критическое напряжение переключения в крайнее высокопроводящее состояние, то можно достигнуть разных дискретных состояний мемристора. На практике этого добиваются ограничением тока во внешней цепи путем последовательного с мемристором включения токоограничивающего резистора. Кривые 1-4 на рис. 6 описывают дискретные состояния мемристора [11] с разной величиной проводимости.

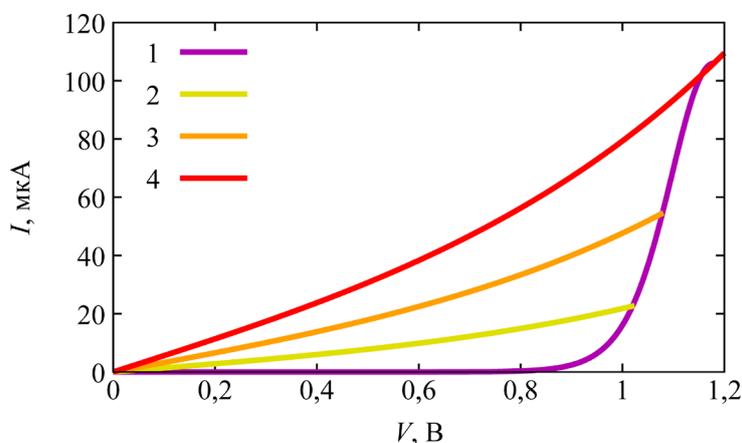


Рис. 6. Дискретные состояния мемристора: 1 — закрытое, 2 — при 65% от максимума вакансий, 3 — при 84% от максимума вакансий, 4 — минимальное сопротивление (максимум вакансий)

Fig. 6. Discrete states of the memristor: 1 — closed, 2 — at 65% of the maximum vacancies, 3 — at 84% of the maximum vacancies, 4 — minimum resistance (maximum of vacancies)

### Заключение

Создана 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 приближении постоянного электрического поля реализована аналитическая модель мемристора с активным слоем из оксида переходного металла. Представлена численная модель мемристора в виде специализированной программы, построенной с помощью разностной схемы и позволяющей учесть неоднородность самосогласованного электрического поля для определения его влияния на электрические характеристики мемристора.

Найдены распределения концентраций вакансий по толщине оксида и в зависимости от приложенного напряжения на электродах. Показано, что насыщение тока происходит при достижении напряжения переключения мемристора, когда сравниваются концентрации электронов и ловушек вблизи электрода с отрицательным потенциалом. При этом наблюдается стабилизация неустойчивости — неограниченного роста электронного тока, — обусловленной экспоненциальным ростом частоты туннелирования электронов между фонон-связанными ловушками при увеличении напряжения на электродах.

Построенная с помощью разработанной математической модели переключения мемристора вольт-амперная характеристика согласуется с экспериментальными данными. Численную модель можно применять при исследовании и разработке мемристорных устройств с заданными электрическими характеристиками.

Модель динамического переключения мемристора описывает дискретные состояния мемристора с разной величиной проводимости, что позволяет применять ее для моделирования работы устройств искусственного интеллекта, использующих мемристоры в качестве синапсов нейронов. Модель, построенная на основе простого аналитического выражения для электронного тока, может эффективно быть задействована при оптимизации процессов обработки сигналов в сверхбольших запоминающей и логической матрицах [4, 5] нейропроцессора, созданных на мемристорных кроссбарах.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Горшков О. Н. Изучение диффузии ионов кислорода в МДМ-структурах на основе стабилизированного диоксида циркония, проявляющих резистивное переключение / О. Н. Горшков, И. Н. Антонов, А. И. Белов, А. П. Касаткин, С. В. Тихов, М. Е. Шенина, М. Н. Коряжкина // Вестник Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского. 2013. № 5 (1). С. 51-54.
2. Журавский Д. В. Установление подобия свойств синапса и мемристора, используемого в электронном устройстве / Д. В. Журавский, А. Н. Бобылев, С. Ю. Удовиченко, В. А. Филиппов // Нейрокомпьютеры: разработка и применение. 2015. № 11. С. 95-101.

3. Исламов Д. Р. О транспорте заряда в тонких пленках оксида гафния и циркония / Д. Р. Исламов, В. А. Гриценко, А. Чин // Автометрия. 2017. Том 53. № 2. С. 102-108. DOI: 10.15372/AUT20170212
4. Маевский О. В. Логический коммутатор и запоминающее устройство на основе мемристорных ячеек для электрической схемы нейропроцессора / О. В. Маевский, А. Д. Писарев, А. Н. Бусыгин, С. Ю. Удовиченко // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2016. Том 2. № 4. С. 100-111. DOI: 10.21684/2411-7978-2016-2-4-100-111
5. Писарев А. Д. Комбинированный мемристорно-диодный кроссбар как основа запоминающего устройства / А. Д. Писарев, А. Н. Бусыгин, А. Н. Бобылев, С. Ю. Удовиченко // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2017. Том 3. № 4. С. 142-149. DOI: 10.21684/2411-7978-2017-3-4-142-149
6. Френкель Я. И. К теории электрического пробоя в диэлектриках и электронных полупроводниках / Я. И. Френкель // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 1938. Том 8. № 12. С. 1292-1301.
7. Chernov A. A. Three-dimensional non-linear complex model of dynamic memristor switching / A. A. Chernov, D. R. Islamov, A. A. Pil'nik, T. V. Perevalov, V. A. Gritsenko // ECS Transactions. 2017. Vol. 75. No. 32. Pp. 95-104. DOI: 10.1149/07532.0095
8. 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
9. Hill R. M. Poole-Frenkel conduction in amorphous solids / R. M. Hill // Philosophical Magazine. 1971. Vol. 23. Pp. 59-86. DOI: 10.1080/14786437108216365
10. Ielmini D. Resistive Switching. From Fundamentals of Nanoionic Redox Processes to Memristive Device Applications / D. Ielmini, R. Waser. Germany: Wiley-VCH, 2016. 784 p.
11. Kumar S. Oxygen migration during resistance switching and failure of hafnium oxide memristors / S. Kumar, Z. Wang, X. Huang, N. Kumari, N. Davila, J. P. Strachan, D. Vine, A. L. D. Kilcoyne, Y. Nishi, S. Williams // Applied Physics Letters. 2017. Vol. 110. Article 103503. DOI: 10.1063/1.4974535
12. Matveyev Yu. Crossbar nanoscale HfO<sub>2</sub>-based electronic synapses / Yu. Matveyev, R. Kirtaev, A. Fetisova, S. Zakharchenko, D. Negrov, A. Zenkevich // Nanoscale Research Letters. 2016. Vol. 11. P. 147. DOI: 10.1186/s11671-016-1360-6
13. Matveyev Yu. Resistive switching and synaptic properties of fully atomic layer deposition grown TiN/HfO<sub>2</sub>/TiN devices / Yu. Matveyev, K. Egorov, A. Markeev, A. Zenkevich // Journal of Applied Physics. 2015. Vol. 117. Article 044901. DOI: 10.1063/1.4905792
14. Menzel S. Physics of the switching kinetics in resistive memories / S. Menzel, M. Salinga, U. Böttger, M. Wimmer // Advanced Functional Materials. 2015. Vol. 25. Pp. 6306-6325.
15. 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
16. Rozenberg M. J. Mechanism for bipolar resistive switching in transition-metal oxides / M. J. Rozenberg, M. J. Sanchez, R. Weht, C. Acha, F. Gomez-Marlasca, P. Levy // Physical Review B. 2010. Vol. 81. Article 115101. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.115101

17. Savel'ev S. E. Molecular dynamics simulations of oxide memory resistors (memristors) / S. E. Savel'ev, A. S. Alexandrov, A. M. Bratkovsky, R. S. Williams // *Nanotechnology*. 2011. Vol. 22. Article 254011. DOI: 10.1088/0957-4484/22/25/254011
18. Strukov D. B. Exponential ionic drift: fast switching and low volatility of thin-film memristors / D. B. Strukov, R. S. Williams // *Applied Physics A*. 2009. Vol. 94. Pp. 515-519. DOI: 10.1007/s00339-008-4975-3
19. 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
20. Vandelli L. A physical model of the temperature dependence of the current through SiO<sub>2</sub>/HfO<sub>2</sub> stacks / L. Vandelli, A. Padovani, L. Larcher, R. G. Southwick III, W. B. Knowlton, G. Bersuker // *IEEE Transaction Electron on Devices*. 2011. Vol. 58. No. 9. Pp. 2878-2887. DOI: 10.1109/TED.2011.2158825
21. Walczyk C. Impact of temperature on the resistive switching behavior of embedded HfO<sub>2</sub>-based RRAM devices / C. Walczyk, D. Walczyk, T. Schroeder // *IEEE Transactions on Electron Devices*. 2011. Vol. 58. No. 9. Pp. 3124-3131. DOI: 10.1109/TED.2011.2160265
22. Waser R. Nanoionics-based resistive switching memories / R. Waser, M. Aono // *Nature Materials*. 2007. Vol. 6. No. 11. Pp. 833-840. DOI: 10.1038/nmat2023

**Abdulla H. EBRAHIM<sup>1</sup>**  
**Sergey Yu. UDOVICHENKO<sup>2</sup>**

UDC 519.6, 004.421

## **MATHEMATICAL MODELING OF RESISTIVE STATES AND DYNAMIC SWITCHING OF A METAL OXIDE MEMRISTOR**

<sup>1</sup> Postgraduate Student, Department of Applied and Technical Physics,  
Research Engineer of REC “Nanotechnology”, University of Tyumen  
abdulla.ybragim@mail.ru

<sup>2</sup> Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Department of Applied and Technical Physics,  
Head of REC “Nanotechnology”, University of Tyumen  
udotgu@mail.ru

### **Abstract**

A mathematical model of resistive states and dynamic switching of a memristor from a low-conductive to a highly-conductive state is presented. The model based on a physical model of charge transport without taking into account the heat transfer process in the metal-oxide-metal structure with the dominant transport mechanism of electron tunneling through oxygen vacancies migrating under the influence of an inhomogeneous self-consistent electric field. An analytical solution for the oxygen vacancies distribution over the oxide layer was found by the approximation of a constant electric field. The memristor model with inhomogeneous electric field is implemented as a specialized program based on the finite difference method for solving a stationary nonlinear first-order differential equation. This model well describes the physical effect of reduction in the conductivity growth of a thin dielectric layer under the dominant transport mechanism of electron tunneling through oxygen vacancies, which arises as a result of an increase in the concentration of trapped electrons with increasing voltage at the electrodes near the threshold switching voltage. Numerical modeling of discrete resistive states and dynamic resistive switching of a memristor has been carried out. The obtained current-voltage characteristic of the memristor with the help of numerical simulation is in better agreement with the experimental data compared to the analytical simulation. The

---

**Citation:** 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

numerical model can be used in the research and development of memristors with given electrical characteristics. A simple analytical memristor model, which does not require a large amount of computation, is applicable for modeling basic processes such as write operation, signal summation, and associative self-learning that occur in super-large memory and logic matrices of a biomorphic neuroprocessor when memristors are used as synapses of neurons.

**Keywords**

Mathematical modeling, metal oxide-based memristor, numerical and analytical models of memristor resistive switching, finite difference method, current-voltage characteristic.

**DOI: 10.21684/2411-7978-2020-6-2-127-144**

**REFERENCES**

1. Gorshkov O. N., Antonov I. N., Belov A. I., Kasatkin A. P., Tikhov S. V., Shenina M. E., Koryazhkina M. N. 2013. "Investigation of oxygen ion diffusion in resistive switching MIM structures based on yttria-stabilized zirconia". *Vestnik of Lobachevsky University of Nizhni Novgorod*, no. 5 (1), pp. 51-54. [In Russian]
2. Zhuravskij D. V., Bobylev A. N., Udovichenko S. Yu., Filippov V. A. 2015. "The similarity of synapse properties and properties of memristor used in an electronic device establishing". *Neurocomputers: Design and Application*, no. 11, pp. 95-101. [In Russian]
3. 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 [In Russian]
4. Maevsky O. V., Pisarev A. D., Busygin A. N., Udovichenko S. Yu. 2016. "Logical commutator and a storage device based on memristor cells for electrical circuits of neuroprocessor". *Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy*, vol. 2, no. 4, pp. 100-111. DOI: 10.21684/2411-7978-2016-2-4-100-111 [In Russian]
5. Pisarev A. D., Busygin A. N., Bobylev A. N., Udovichenko S. Yu. 2017. "Combined memristor-diode crossbar as a memory storage base". *Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy*, vol. 3, no. 4, pp. 142-149. DOI: 10.21684/2411-7978-2017-3-4-142-149 [In Russian]
6. Frenkel J. 1938. "On pre-breakdown phenomena in insulators and electronic semi-conductors". *Physical Review*, vol. 54, no. 8, pp. 647-648. DOI: 10.1103/PhysRev.54.647 [In Russian]
7. Chernov A. A., Islamov D. R., Pilnik 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: 10.1149/07532.0095
8. 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
9. Hill R. M. 1971. "Poole-Frenkel conduction in amorphous solids". *Philosophical Magazine*, vol. 23, pp. 59-86. DOI: 10.1080/14786437108216365

10. Ielmini D., Waser R. 2016. Resistive Switching. From Fundamentals of Nanoionic Redox Processes to Memristive Device Applications. Germany: Wiley-VCH, 784 pp.
11. Kumar S., Wang Z., Huang X., Kumari N., Davila N., Strachan J. P., Vine D., Kilcoyne A. L. D., Nishi Y., Willians S. 2017. "Oxygen migration during resistance switching and failure of hafnium oxide memristors". *Applied Physics Letters*, vol. 110, art. 103503. DOI: 10.1063/1.4974535
12. Matveyev Yu., Kirtaev R., Fetisova A., Zakharchenko S., Negrov D., Zenkevich A. 2016. "Crossbar nanoscale HfO<sub>2</sub>-based electronic synapses". *Nanoscale Research Letters*, vol. 11, pp. 147. DOI: 10.1186/s11671-016-1360-6
13. Matveyev Yu., Egorov K., Markeev A., Zenkevich A. 2015. "Resistive switching and synaptic properties of fully atomic layer deposition grown TiN/HfO<sub>2</sub>/TiN devices". *Journal of Applied Physics*, vol. 117, art. 044901. DOI: 10.1063/1.4905792
14. Menzel S., Salinga M., Böttger U., Wimmer M. 2015. "Physics of the switching kinetics in resistive memories". *Advanced Functional Materials*, vol. 25, pp. 6306-6325.
15. 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
16. Rozenberg M. J., Sanchez M. J., Weht R., Acha C., Gomez-Marlasca F., Levy P. 2010. "Mechanism for bipolar resistive switching in transition-metal oxides". *Physical Review B*, vol. 81, art. 115101. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.115101
17. Savelev S. E., Alexandrov A. S., Bratkovsky A. M., Williams R. S. 2011. "Molecular dynamics simulations of oxide memory resistors (memristors)". *Nanotechnology*, vol. 22, art. 254011. DOI: 10.1088/0957-4484/22/25/254011
18. Strukov D. B., Williams R. S. 2009. "Exponential ionic drift: fast switching and low volatility of thin-film memristors". *Applied Physics A*, vol. 94, pp. 515-519. DOI: 10.1007/s00339-008-4975-3
19. 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
20. Vandelli L., Padovani A., Larcher L., Southwick R. G. III, Knowlton W. B., Bersuker G. 2011. "A physical model of the temperature dependence of the current through SiO<sub>2</sub>/HfO<sub>2</sub> stacks". *IEEE Transaction Electron on Devices*, vol. 58, no. 9, pp. 2878-2887. DOI: 10.1109/TED.2011.2158825
21. Walczyk C., Walczyk D., Schroeder T. 2011. "Impact of temperature on the resistive switching behavior of embedded HfO<sub>2</sub>-based RRAM devices". *IEEE Transactions on Electron Devices*, vol. 58, no. 9, pp. 3124-3131. DOI: 10.1109/TED.2011.2160265
22. Waser R., Aono M. 2007. "Nanoionics-based resistive switching memories". *Nature Materials*, vol. 6, no. 11, pp. 833-840. DOI: 10.1038/nmat2023