

Влияние процессов генерации и рекомбинации кислородных вакансий и ионов на тепломассоперенос и электрофизические свойства металлооксидного мемристора

Бауржан Хайруллович Габдулин[✉], Александр Николаевич Бусыгин,
Сергей Юрьевич Удовиченко

Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия
Контакт для переписки: b.k.gabdulin@utmn.ru[✉]

Аннотация. Развита теплофизическая модель металлооксидного мемристора на основе стационарного уравнения непрерывности плотности тока электронов, учитывающая процессы генерации и рекомбинации кислородных вакансий. В модель введена скорость рекомбинации кислородных пар ион–вакансия, а для скорости их генерации использовано более точное выражение; введено нестационарное уравнение непрерывности концентрации ионов кислорода, необходимое для определения скорости рекомбинации пар; внесены изменения в формулы коэффициента диффузии и скорости дрейфа вакансий, связанные с температурой и электрическим полем мемристора.

Процессы генерации и рекомбинации ионов влияют на перераспределение концентраций вакансий и ионов кислорода, что приводит кроме увеличения плотности электронного тока к изменению электрического поля и, соответственно, величины джоулема источника тепла. Показано, что вольт-амперная кривая при переключении мемристора в высокопроводящее состояние, полученная при учете всех вышеуказанных процессов, обладает наименьшим среднеквадратичным отклонением от экспериментальной кривой. Пренебрежение хотя бы одним из эффектов приводит к значительному росту среднеквадратичного отклонения.

В результате численного расчета на основе развитой теплофизической модели мемристора показано, что при учете процессов генерации и рекомбинации кислородных вакансий и ионов существенно изменяется величина профиля тем-

пературы по толщине пленки и во времени при моделировании вольт-амперной характеристики мемристора.

Точное моделирование резистивного переключения особенно важно при разработке нейроморфных устройств, поскольку электрические схемы искусственных синапсов используют промежуточные резистивные состояния.

Ключевые слова: перенос заряда в мемристоре, теплоперенос в активном слое мемристора, металлооксидные мемристоры, движение ионов кислорода, вольт-амперная характеристика мемристора, численное моделирование

Благодарности: Работа выполнена по гранту Министерства науки и высшего образования РФ в рамках НИР ГЗ (проект FEWZ-2024-0020).

Цитирование: Габдулин Б. Х., Бусыгин А. Н., Удовиченко С. Ю. 2025. Влияние процессов генерации и рекомбинации кислородных вакансий и ионов на теплоперенос и электрофизические свойства металлооксидного мемристора // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. Том 11. № 2 (42). С. 40–52. <https://doi.org/10.21684/2411-7978-2025-11-2-40-52>

Поступила 30.05.2025; одобрена 16.06.2025; принята 17.06.2025

The effect of oxygen ions and vacancies generation and recombination processes on heat and mass transfer and electrophysical properties of metal oxide memristor

Baurzhan Kh. Gabdulin[✉], Alexander N. Busygin,
Sergey Yu. Udovichenko

University of Tyumen, Tyumen, Russia

Corresponding author: b.k.gabdulin@utmn.ru[✉]

Abstract. A thermophysical model of metal oxide memristor based on the stationary continuity equation of electron current density is developed. The model considers the processes of generation and recombination of oxygen vacancies and ions. The oxygen ion-vacancy pairs recombination rate was introduced into the model, and a more precise expression was used for the rate of their generation. A non-stationary continuity equation of oxygen ion concentration was introduced, which is necessary

for determining the recombination rate of pairs. Changes were made in the formulas for the diffusion coefficient and vacancy drift rate related to the temperature and electric field of the memristor.

The processes of ion generation and recombination affect the redistribution of vacancy and oxygen ion concentrations, which leads, in addition to an increase in the electron current density, to a change in the electric field and, consequently, in the value of the Joule heat source. It is shown that the current-voltage curve at switching of the memristor into a highly conductive state, obtained by taking into account all the above processes, has the smallest mean-square deviation from the experimental curve.

As a result of numerical simulation on the basis of the developed thermophysical model of the memristor, it is shown that when the processes of generation and recombination of oxygen vacancies and ions are taken into consideration, the temperature profile along the film thickness and in time changes significantly when modeling the current-voltage characteristic of the memristor.

The presented model is in demand for numerical simulation of signal processing in large memristor arrays used in neuromorphic devices.

Keywords: charge transfer in memristor, heat transfer in memristor active layer, metal oxide memristor, oxygen ion dynamics, current-voltage characteristic, numerical simulation

Acknowledgements: the work was carried out under a grant from the Ministry Science and Higher Education of the Russian Federation within the framework of research and Development (project FEZ-2024-0020).

Citation: Gabdulin, B. Kh., Busyggin, A. N., & Udovichenko, S. Yu. (2025). The effect of oxygen ions and vacancies generation and recombination processes on heat and mass transfer and electrophysical properties of metal oxide memristor. *Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling Oil, Gas, Energy*, 11(2), 40–52. <https://doi.org/10.21684/2411-7978-2025-11-1-40-52>

Received May 30, 2025; Reviewed Jun. 16, 2025; Accepted Jun. 17, 2025

Введение

В процессе формовки мемристора на его электродах присутствует высокое напряжение, которое превышает напряжение порога резистивного переключения. При этом в оксидном слое мемристора образуется область с высокими электропроводностью и плотностью электронного тока (один или несколько филаментов). В [Larentis et al., 2012; Kim et al., 2013; Liu et al., 2014; Brivio et al., 2019; Umnyagin et al., 2019; Basnet et al., 2020; Pahinkar et al., 2020; Zhang et al., 2020; Lin et al., 2021; Parit et al., 2021; Zhang et al., 2022; Gooran-Shoorakchaly et al., 2025; Li et al., 2025; Zhu et al., 2025] предложена физико-математическая модель для тепло- и массопереноса в мемристоре на основе оксидов переходных металлов. Для упрощения в этой модели отказались от решения

уравнения Пуассона для электрического потенциала из-за сложности расчета концентрации захваченных в кислородные вакансию электронов. Система уравнений этой модели содержит уравнение непрерывности для концентрации кислородных вакансий (1), уравнение непрерывности электрического тока (3) и уравнение теплопроводности (4). Причем уравнение (3) является стационарным, в отличие от (1) и (4). С помощью этой модели найдены распределения температуры поперек и вдоль оксидной пленки в результате джоулевого нагрева при протекании электронного тока через филамент. Эта модель является упрощенной и учитывает только перераспределение кислородных вакансий. Только в варианте [Kim et al., 2013] рассматривается процесс их генерации. Процесс рекомбинации вакансий с ионами кислорода не учитывается вообще.

В результате исследования массопереноса кислородных вакансий в оксида металла [Noman et al., 2011] показано, что коэффициент диффузии D должен иметь зависимость от электрического поля, а скорость дрейфа вакансий множитель, который при стремлении концентрации вакансий к своему максимуму замедляет скорость их движения вплоть до полной остановки. Эти изменения в коэффициенте диффузии и скорости дрейфа могут привести к существенному перераспределению профиля концентрации вакансий по сравнению с вышеприведенной моделью их массопереноса.

В данной статье предлагается физико-математическая модель металлооксидного мемристора, учитывающая отмеченные в обзоре особенности и содержащая более полное описание процессов тепло- и массопереноса в оксида переходного металла. В рамках предложенной модели решена теплофизическая задача об изменении температурного поля, полученного в условиях джоулева нагрева оксида металла электронным током, при учете процессов генерации и рекомбинации вакансий и ионов кислорода. Кроме этого, рассмотрено влияние этих процессов на электрофизические свойства мемристора.

Модель тепло- и массопереноса с учетом процессов генерации и рекомбинации пар ион–вакансия кислорода

Система уравнений предложенной модели мемристора содержит нестационарные уравнения непрерывности для кислородных вакансий и ионов, нестационарное уравнение теплопроводности и стационарное уравнение непрерывности электрического тока.

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

$$\frac{\partial N_{ox}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{ox} \frac{\partial N_{ox}}{\partial z} + N_{ox} V_{Eox} \right) + G(N) - R(N, N_{ox}), \quad (2)$$

$$\frac{d}{dz} (\sigma E) = 0, \quad (3)$$

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\lambda(N) \frac{\partial T}{\partial z} \right) + J \cdot E. \quad (4)$$

В уравнении (1) по сравнению с [Larentis et al., 2012; Kim et al., 2013; Basnet et al., 2020; Pahinkar et al., 2020; Parit et al., 2021] введена скорость рекомбинации пар ион–вакансия $R(N, N_{ox})$ [Chernov et al., 2017], а для скорости их генерации $G(N)$ взято более точное выражение из [Chernov et al., 2017]; введено уравнение непрерывности концентрации ионов кислорода (2) [Chernov et al., 2017], необходимое для определения скорости рекомбинации пар; более точные коэффициенты диффузии D и D_{ox} , а также выражения для скорости дрейфа V_E и V_{Eox} вакансий и ионов заимствованы из [Noman et al., 2011].

Здесь N, N_{ox} — концентрации вакансий и ионов кислорода, z — высота относительно поверхности катода, $D = \frac{1}{2} a_0^2 f_0 \exp\left(-\frac{E_{avac}}{kT}\right) \cosh\left(\frac{qEa_0}{2kT}\right)$ — коэффициент диффузии вакансий кислорода, $a_0 = N_{max}^{-1/3}$ — длина прыжка для кислорода (иона или вакансии), E — локальная напряженность электрического поля, N_{max} — максимальная концентрация кислородных вакансий и ионов, $f_0 = \frac{W_{ph}}{h}$ — частота колебаний атомов, q — модуль заряда вакансий и ионов, k — постоянная Больцмана, E_{avac} — энергия активации движения кислородных, T — локальная температура, $V_E = a_0 f_0 \exp\left(-\frac{E_{avac}}{kT}\right) \sinh\left(\frac{qEa_0}{2kT}\right) \left(1 - \frac{N}{N_{max}}\right)$ — скорость дрейфа вакансий, $G = (N_{max} - N) f_0 \exp\left[\left(-E_g + \sqrt{\frac{q^3 E}{\pi \epsilon \epsilon_0}}\right)/kT\right]$ — скорость генерации ионов и вакансий кислорода, E_g — энергетический барьер для генерации, $R = N N_{ox} V_{Eox} \sigma_{ox}$ — скорость рекомбинации пар ион–вакансия, E_r — энергетический барьер рекомбинации пары ион–вакансия, $\sigma_{ox} = \frac{q}{4\epsilon\epsilon_0 E}$ — сечение рекомбинации, $V_{Eox} = a_0 f_0 \exp\left(-\frac{E_{aox}}{kT}\right) \sinh\left(\frac{qEa_0}{2kT}\right) \left(1 - \frac{N}{N_{max}}\right)$ — скорость дрейфа ионов кислорода, E_{aox} — энергия активации движения ионов кислорода, $D_{ox} = \frac{1}{2} a_0^2 f_0 \exp\left(-\frac{E_{aox}}{kT}\right) \cosh\left(\frac{qEa_0}{2kT}\right)$ — коэффициент диффузии ионов кислорода, c — удельная теплоемкость и ρ — плотность оксида.

Уравнение (3) позволяет найти значения электрического потенциала. Для его решения используются граничные условия: $\phi|_{z=0} = 0$, $\phi|_{z=d} = u$.

При этом электрическая проводимость σ и энергия активации проводимости E_{AC} зависят от концентрации кислородных вакансий:

$$\sigma = \sigma_0 \exp\left(-\frac{E_{AC}}{kT}\right), \quad \sigma_0 = \frac{(\sigma_{Ta} - \sigma_{Ta_2O_5})}{N_{max}} N + \sigma_{Ta_2O_5},$$

$$E_{AC}(N) = \frac{E_{AC}^{Ta} - E_{AC}^{Ta_2O_5}}{N_{max}} N + E_{AC}^{Ta_2O_5}.$$

Для коэффициента теплопроводности λ использовалась линейная зависимость от концентрации вакансий N [Pahinkar et al., 2020]:

$$\lambda(N) = \lambda_{Ta_2O_5} + (\lambda_{TaO_x} - \lambda_{Ta_2O_5}) \frac{N}{N_m}.$$

При решении уравнений (1), (2) в качестве граничных условий выбраны непроницаемые электроды, т. е. поток вакансий и ионов кислорода в электроды равен нулю:

$$\left(D \frac{\partial N}{\partial z} - NV_E \right) \Big|_{z=0,d} = 0, \quad \left(D_{ox} \frac{\partial N_{ox}}{\partial z} + N_{ox} V_{Eox} \right) \Big|_{z=0,d} = 0. \quad (5)$$

Граничные условия для уравнения теплопроводности (4) следуют из предположения равенства температуры и тепловых потоков на контакте металл–диэлектрик (квадратные скобки означают разницу с разных сторон контакта):

$$[T]_{z=0,d} = 0; \quad \left[\lambda \frac{dT}{dz} \right]_{z=0,d} = 0. \quad (6)$$

Численное моделирование теплофизических процессов и их влияние на электрофизическкие характеристики мемристора

Вольт-амперные характеристики (ВАХ) построены для мемристора на основе оксида тантала Ta_2O_5 при следующих параметрах [Kim et al., 2013]: $a_0 = 0,05$ нм, $E_g = 1,0$ эВ, $E_{AC}^{Ta} = 0,016$ эВ. Значение величины $E_{AC}^{Ta_2O_5} = 0,08$ эВ взято из работы [Бао и др., 2023], в которой экспериментально полученный диапазон значений составляет от 0,016 до 0,34 эВ. Отметим, что при расчете в модели [Kim et al., 2013] величина $E_{AC}^{Ta_2O_5}$ изменяется в пределах от 0,016 до 0,052 эВ. Другие параметры, характерные для материала Ta_2O_5 : $\lambda_{Ta_2O_5} = 0,12$ Вт/(м·К), $\lambda_{TaO_x} = 57,5$ Вт/(м·К), $c_{Ta_2O_5} = 309$ Дж/(кг·К), $c_{TaO_x} = 144$ Дж/(кг·К), $\rho_{Ta_2O_5} = 8,2$ г/см³, $\rho_{TaO_x} = 16,6$ г/см³. Значение величины $\epsilon = 20$, используемое при расчетах, входит в диапазон допустимых значений для данного материала $\epsilon = 20\text{--}50$, приведенного в работе [Krushinin et al., 2018]. Величина $f_0 = 10^{13}$ Гц взята из работы [Zeumault et al., 2022].

Значение $E_{avac} = 0,35$ эВ, использованное в настоящей работе, значительно отличается от [Kim et al., 2013], равное $E_{avac} = 1,5$ эВ и на которое нет ссылки в литературе. Используемая величина $E_{aox} = 0,1$ эВ несколько отличается от найденного в работе [Duenas et al., 2000] значения 0,53 эВ. Оно было получено из наклона экспериментальной кривой, построенной по четырем точкам, и поэтому допускает широкий диапазон для определения значений данного параметра. Длина и радиус филамента составляют 7,5 нм и 45 нм. Для максимальной концентрации вакансий принято значение $N_{max} = 10^{22}$ см⁻³.

В работе [Kim et al., 2013] сделано предположение о наличии в мемристоре филамента цилиндрической формы длиной 7,5 нм и радиусом 5 нм. Высокопроводящую область с обедненным tantalом TaO_x можно считать электродом. Расчетная вольт-амперная характеристика подстраивалась под экспериментальную путем вариации констант элементарных процессов.

На рис. 1 приведены экспериментальная [Kim et al., 2013] и полученные с помощью представленной теплофизической модели кривые вольт-амперной характеристики при переключении в высокопроводящее состояние мемристора без и при учете процессов генерации и рекомбинации кислородных вакансий и ионов. Подстройка расчетных кривых к экспериментальной также производилась путем незначительной вариации констант, полученных экспериментально в определенном диапазоне значений.

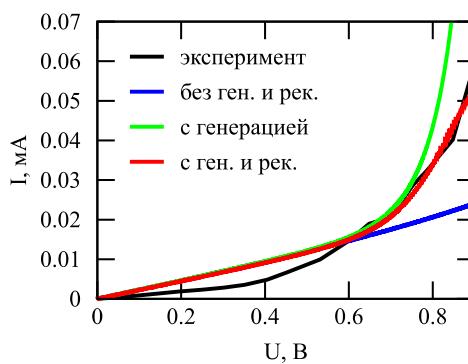


Рис. 1. Влияние процессов генерации и рекомбинации кислородных вакансий и ионов на ВАХ мемристора

Fig. 1. The influence of the processes of oxygen vacancies and ions generation and recombination on the memristor I-V curve

Лучшее совпадение с экспериментальной ВАХ показывают расчеты с учетом процессов генерации и рекомбинации кислородных вакансий и ионов. Среднеквадратичное отклонение расчетной ВАХ от экспериментальной кривой при этом составляет 2,57 мкА. Без учета этих процессов это отклонение значительно возрастает: 26,8 мкА в случае только перераспределения и 16,6 мкА с учетом только генерации вакансий.

На рис. 2а приведены профили температуры по толщине пленки, рассчитанные без учета и с учетом процессов генерации и рекомбинации. Рис. 2б показывает изменение профиля температуры с учетом всех процессов во времени при соответствующем рис. 1 изменении напряжения на мемристоре.

Исключение процессов генерации и рекомбинации приводит только к перераспределению имеющихся вакансий и ионов кислорода без увеличения их суммарного количества.

Общее малое количество вакансий соответствует низкому электронному току и более высокому нагреву. Добавление генерации приводит к резкому увеличению электронного тока и некоторому уменьшению нагрева. Рекомбинация незначительно снижает концентрацию вакансий и, соответственно, электронный ток, что проявляется в более низкой

температуре. Более высокая температура в случае перераспределения вакансий обусловлена изменением параметров в уравнении теплопроводности. При большем количестве вакансий значительно увеличивается теплопроводность и плотность обедненного оксида, что приводит к более пологому распределению температуры по толщине пленки.

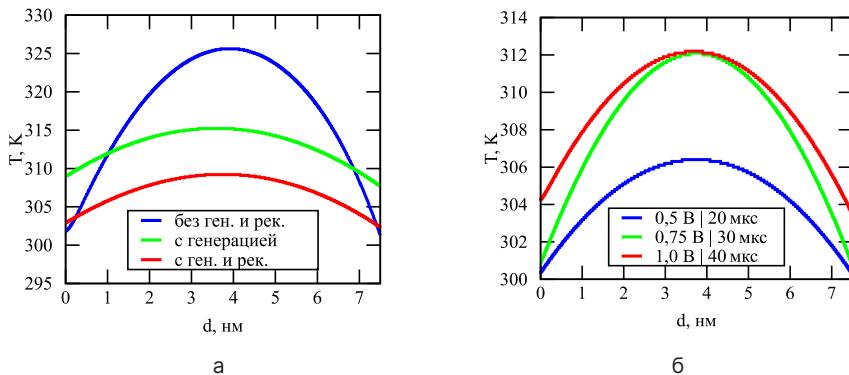


Рис. 2. Профили температуры по толщине пленки без и при учете процессов генерации и рекомбинации (а), изменение температурного поля во времени при моделировании ВАХ (б)

Fig. 2. Temperature profiles along the film thickness without and within the processes of generation and recombination (a), the change in the temperature field over time during the simulation of the I-V curve (b)

Заключение

Составлена физико-математическая модель металлооксидного мемристора, содержащая более полное описание процессов тепло- и массопереноса в оксиде переходного металла наряду с переносом зарядов в электрическом поле. По сравнению с известной моделью [Larentis et al., 2012; Kim et al., 2013; Liu et al., 2014; Brivio et al., 2019; Umnyagin et al., 2019; Basnet et al., 2020; Pahinkar et al., 2020; Zhang et al., 2020; Lin et al., 2021; Parit et al., 2021; Zhang et al., 2022; Gooran-Shoorakchaly et al., 2025; Li et al., 2025; Zhu et al., 2025] в предложенной модели изменены формулы коэффициента диффузии, скорости дрейфа вакансий и скорости генерации пар, связанные с температурой и электрическим полем.

Решена теплофизическая задача об изменении температурного поля, полученного в условиях джоулева нагрева оксида металла электронным током, при учете процессов генерации и рекомбинации вакансий и ионов кислорода.

Показано, что вольт-амперная характеристика мемристора в значительной степени зависит от процессов генерации и рекомбинации ионов и вакансий кислорода. Эти процессы определяют распределение концентраций вакансий и ионов кислорода, что приводит к изменению электрического поля, увеличению плотности электрического тока и, как следствие, к изменению величины джоулева источника тепла. В результате учета этих процессов кривая при переключении мемристора в высокопроводящее

состояние обладает наименьшим среднеквадратичным отклонением от экспериментальной кривой. Пренебрежение хотя бы одним из эффектов приводит к значительному росту среднеквадратичного отклонения.

В результате численного расчета на основе предложенной развитой теплофизической модели мемристора показано, что при учете процессов генерации и рекомбинации кислородных вакансий и ионов существенно изменяется величина профиля температуры по толщине пленки и во времени при моделировании вольт-амперной характеристики мемристора.

Полученные результаты численного расчета с помощью предложенной теплофизической модели мемристора отличаются от соответствующих результатов известной модели. Кроме отличия в диаметре филамента не совпадает и расчетная температура, которая достигается в результате джоулевого нагрева оксида металла электронным током. Второй параметр сравнивать некорректно, поскольку в настоящей работе представлена одномерная модель, в которой невозможно учесть перераспределение тепла в оксидной пленке поперек протекающего тока электронов от одного электрода к другому. Несовпадение диаметров филамента и расчетной температуры также связано с тем, что в настоящей более полной теплофизической модели помимо учета влияния охлаждения мемристора из-за процесса рекомбинации пар вакансия–ион внесены изменения в формулы коэффициента диффузии, скорости дрейфа вакансий и скорости генерации пар, связанные с температурой и электрическим полем.

Влияние процессов генерации и рекомбинации вакансий и ионов на вольт-амперную важно учитывать при выборе материалов мемристоров для обеспечения требуемых параметров при проектировании электронных устройств.

Список источников

- Bao K., Meng J., Jonathan D., Poplawsky J. D., Skowronski M. 2023. Electrical conductivity of TaO_x as function of composition and temperature // Journal of Non-Crystalline Solids. Vol. 617. No. 1. Article 122495. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2023.122495>
- 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. No. 15. Pp. 5092–5101. <https://doi.org/10.1039/c9tc06736a>
- Brivio S., Frascaroli J., Covi E., Spiga S. 2019. Stimulated ionic telegraph noise in filamentary memristive devices // Scientific Reports. Vol. 9. No. 1. Article 6310. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-41497-3>
- Chernov A. A., Islamov D. R., Piknik 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. <https://doi.org/10.1149/07532.0095>
- Duenas S., Castan H., Barbolla J., Kola R. R., Sullivan P. A. 2000. Electrical characteristics of anodic tantalum pentoxide thin films under thermal stress // Microelectronics reliability. Vol. 40. No. 4–5. Pp. 659–662. [https://doi.org/10.1016/S0026-2714\(99\)00310-8](https://doi.org/10.1016/S0026-2714(99)00310-8)

- Gooran-Shoorakchaly A., Sharif S. S., Banad Y. M. 2025. Investigating the effect of electrical and thermal transport properties on oxide-based memristors performance and reliability // Scientific Reports. Vol. 15. No. 1. Pp. 1–13. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-02909-9>
- Kim S., Kim S.-J., Kim K. M., Lee S. R., Chang M., Cho E., Kim Y.-B., Kim C. J., Chung U. I., Yoo In-K. 2013. Physical electro-thermal model of resistive switching in bi-layered resistance-change memory // Scientific Reports. Vol. 3. No. 1. Article 1680. <https://doi.org/10.1038/srep01680>
- Kruchinin V. N., Volodin V. A., Perevalov T. V., Gerasimova A. K., Aliev V. Sh., Gritsenko V. A. 2018. Optical properties of nonstoichiometric tantalum oxide taox ($x < 5/2$) according to spectral-ellipsometry and Raman-scattering data // Optics and Spectroscopy. Vol. 124. No. 6. Pp. 808–813. <https://doi.org/10.1134/S0030400X18060140>
- Larentis S., Nardi F., Balatti S., David C. Gilmer D. C., Ielmini D. 2012. Resistive switching by voltage-driven ion migration in bipolar RRAM — part II: modeling // IEEE Transactions on electron devices. Vol. 59. No. 9. Pp. 2468–2475. <https://doi.org/10.1109/TED.2012.2202320>
- Li R., Bai Y., Skowronski M. 2025. Parametric study of “filament and gap” models of resistive switching in TaO_x -based devices // Journal of Applied Physics. Vol. 137. No. 11. Article 114501. <https://doi.org/10.1063/5.0246985>
- Lin J., Liu H., Wang S., Zhang S. 2021. Modeling and simulation of hafnium oxide RRAM based on oxygen vacancy conduction // Crystals. Vol. 11. No. 12. Article 1462. <https://doi.org/10.3390/cryst11121462>
- Liu X., Nandi S. K., Venkatachalam D. K., Li S., Belay K., Elliman R. G. 2014. Finite element modeling of resistive switching in Nb_2O_5 -based memory device // 2014 Conference on Optoelectronic and Microelectronic Materials & Devices (December 14–17, Perth, WA, Australia). Pp. 280–282. <https://doi.org/10.1109/COMMAD.2014.7038711>
- 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. No. 4. Pp. 877–883. <https://doi.org/10.1007/s00339-011-6270-y>
- Pahinkar D. G., Basnet P., West M. P., Zivasatienraj B., Weidtnbach A., Doolittle W. A., Vogel E. M., Graham S. 2020. Experimental and computational analysis of thermal environment in the operation of HfO_2 memristors // AIP Advances. Vol. 10. No. 3. Article 035127. <https://doi.org/10.1063/1.5141347>
- Parit A. K., Yadav M. S., Gupta A. K., Mikhaylov A., Rawat B. 2021. Design and modeling of niobium oxide-tantalum oxide based self-selective memristor for large-scale crossbar memory // Chaos, Solitons and Fractals. Vol. 145. Article 110818. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2021.110818>
- Umnyagin G. M., Degtyarov V. E., Obolenskiy S. V. 2019. Numerical simulation of the current–voltage characteristics of bilayer resistive memory based on non-stoichiometric metal oxides // Semiconductors. Vol. 53. Pp. 1246–1248. <https://doi.org/10.1134/S1063782619090252>
- Zeumault A., Alam S., Omar Faruk M., Aziz A. 2022. Memristor compact model with oxygen vacancy concentrations as state variables // Journal of Applied Physics. Vol. 131. No. 12. Article 124502. <https://doi.org/10.1063/5.0087038>

- Zhang K., Ren Y., Ganesh P., Cao Y. 2022. Effect of electrode and oxide properties on the filament kinetics during electroforming in metal-oxide-based memories // *npj Computational Materials*. Vol. 8. No. 1. Article 76. <https://doi.org/10.1038/s41524-022-00770-2>
- Zhang K., Wang J., Huang Y., Chen L. Q., Ganesh P., Cao Y. 2020. High-throughput phase-field simulations and machine learning of resistive switching in resistive random-access memory // *npj Computational Materials*. Vol. 6. No. 1. Article 198. <https://doi.org/10.1038/s41524-020-00455-8>
- Zhu Y., Zhang J., Sun X., Zhao Y., Zhu Y., Wang S., Wu J., Xu Z., Wu Z., Dai Y. 2025. Effect of filament regimes in the resistive switching behavior of oxide-based complementary memristor // *Journal of Computational Electronics*. Vol. 24. No. 2. Pp. 1–10. <https://doi.org/10.1007/s10825-025-02306-5>

References

- Bao, K., Meng, J., Jonathan, D., Poplawsky, J. D., & Skowronski M. (2023). Electrical conductivity of TaO_x as function of composition and temperature. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 617(1), art. 122495. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2023.122495>
- 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*, 8(15), 5092–5101. <https://doi.org/10.1039/c9tc06736a>
- Brivio, S., Frascaroli, J., Covi, E., & Spiga, S. (2019). Stimulated ionic telegraph noise in filamentary memristive devices. *Scientific Reports*, 9(1), art. 6310. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-41497-3>
- Chernov, A. A., Islamov, D. R., Piknik, A. A., Perevalov, T. V., & Gritsenko, V. A. (2017). Three-dimensional non-linear complex model of dynamic memristor switching. *ECS Transactions*, 75(32), 95–104. <https://doi.org/10.1149/07532.0095>
- Duenas, S., Castan, H., Barbolla, J., Kola, R. R., & Sullivan, P. A. (2000). Electrical characteristics of anodic tantalum pentoxide thin films under thermal stress. *Microelectronics reliability*, 40(4–5), 659–662. [https://doi.org/10.1016/S0026-2714\(99\)00310-8](https://doi.org/10.1016/S0026-2714(99)00310-8)
- Gooran-Shoorakchaly, A., Sharif, S. S., & Banad, Y. M. (2025). Investigating the effect of electrical and thermal transport properties on oxide-based memristors performance and reliability. *Scientific Reports*, 15(1), 1–13. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-02909-9>
- Kim, S., Kim, S.-J., Kim, K. M., Lee, S. R., Chang, M., Cho, E., Kim, Y.-B., Kim, C. J., Chung, U. I., Yoo, In-K. (2013). Physical electro-thermal model of resistive switching in bi-layered resistance-change memory. *Scientific Reports*, 3(1), art. 1680. <https://doi.org/10.1038/srep01680>
- Kruchinin, V. N., Volodin, V. A., Perevalov, T. V., Gerasimova, A. K., Aliev, V. Sh., & Gritsenko, V. A. (2018). Optical properties of nonstoichiometric tantalum oxide tao_x ($x < 5/2$) according to spectral-ellipsometry and Raman-scattering data. *Optics and Spectroscopy*, 124(6), 808–813. <https://doi.org/10.1134/S0030400X18060140>
- Larentis, S., Nardi, F., Balatti, S., David, C., Gilmer, D. C., Ielmini, D. (2012). Resistive switching by voltage-driven ion migration in bipolar RRAM — part II: modeling. *IEEE Transactions on electron devices*, 59(9), 2468–2475. <https://doi.org/10.1109/TED.2012.2202320>

- Li, R., Bai, Y., & Skowronski, M. (2025). Parametric study of “filament and gap” models of resistive switching in TaOx-based devices. *Journal of Applied Physics*, 137(11), art. 114501. <https://doi.org/10.1063/5.0246985>
- Lin, J., Liu, H., Wang, S., & Zhang, S. (2021). Modeling and simulation of hafnium oxide RRAM based on oxygen vacancy conduction. *Crystals*, 11(12), art. 1462. <https://doi.org/10.3390/cryst11121462>
- Liu, X., Nandi, S. K., Venkatachalam, D. K., Li, S., Belay, K., & Elliman, R. G. (December 14–17, 2014). *Finite element modeling of resistive switching in Nb₂O₅-based memory device*. 2014 Conference on Optoelectronic and Microelectronic Materials & Devices, Perth, WA, Australia, pp. 280–282. <https://doi.org/10.1109/COMMAD.2014.7038711>
- 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*, 102(4), 877–883. <https://doi.org/10.1007/s00339-011-6270-y>
- Pahinkar, D. G., Basnet, P., West, M. P., Zivasatienraj, B., Weidtnbach, A., Doolittle, W. A., Vogel, E. M., & Graham S. (2020). Experimental and computational analysis of thermal environment in the operation of HfO₂ memristors. *AIP Advances*, 10(3), art. 035127. <https://doi.org/10.1063/1.5141347>
- Parit, A. K., Yadav, M. S., Gupta, A. K., Mikhaylov, A., & Rawat, B. (2021). Design and modeling of niobium oxide-tantalum oxide based self-selective memristor for large-scale crossbar memory. *Chaos, Solitons and Fractals*, 145, art. 110818. <https://doi.org/10.1016/j.chaos.2021.110818>
- Umnyagin, G. M., Degtyarov, V. E., & Obolenskiy, S. V. (2019). Numerical simulation of the current–voltage characteristics of bilayer resistive memory based on non-stoichiometric metal oxides. *Semiconductors*, 53, 1246–1248. <https://doi.org/10.1134/S1063782619090252>
- Zeumault, A., Alam, S., Omar Faruk, M., Aziz, A. (2022). Memristor compact model with oxygen vacancy concentrations as state variables. *Journal of Applied Physics*, 131(12), art. 124502. <https://doi.org/10.1063/5.0087038>
- Zhang, K., Ren, Y., Ganesh, P., & Cao, Y. (2022). Effect of electrode and oxide properties on the filament kinetics during electroforming in metal-oxide-based memories. *npj Computational Materials*, 8(1), art. 76. <https://doi.org/10.1038/s41524-022-00770-2>
- Zhang, K., Wang, J., Huang, Y., Chen, L. Q., Ganesh, P., & Cao, Y. (2020). High-throughput phase-field simulations and machine learning of resistive switching in resistive random-access memory. *npj Computational Materials*, 6(1), art. 198. <https://doi.org/10.1038/s41524-020-00455-8>
- Zhu, Y., Zhang, J., Sun, X., Zhao, Y., Zhu, Y., Wang, S., Wu, J., Xu, Z., Wu, Z., & Dai, Y. (2025). Effect of filament regimes in the resistive switching behavior of oxide-based complementary memristor. *Journal of Computational Electronics*, 24(2), 1–10. <https://doi.org/10.1007/s10825-025-02306-5>

Информация об авторах

Бауржан Хайруллович Габдулин, аспирант, кафедра прикладной и технической физики, Школа естественных наук; младший научный сотрудник, лаборатория мемристорных материалов, Центр природовдохновленного инжиниринга, Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия
b.k.gabdulin@utmn.ru, <https://orcid.org/0009-0000-2586-7469>

Александр Николаевич Бусыгин, кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра прикладной и технической физики, Школа естественных наук; старший научный сотрудник, лаборатория мемристорных материалов, Центр природовдохновленного инжиниринга, Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия
a.n.busygin@utmn.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3439-8067>

Сергей Юрьевич Удовиченко, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры прикладной и технической физики, Школа естественных наук; научный руководитель, лаборатория мемристорных материалов, Центр природовдохновленного инжиниринга, Тюменский государственный университет, Тюмень, Россия
udotgu@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-3583-7081>

Information about the authors

Baurzhan Kh. Gabdulin, Postgraduate Student, Department of Applied and Technical Physics, School of Natural Sciences; Junior Scientific Researcher, Memristive Materials Laboratory, Center for Nature-Inspired Engineering, University of Tyumen, Tyumen, Russia
b.k.gabdulin@utmn.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3439-8067>

Alexander N. Busygin, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor, Department of Applied and Technical Physics, School of Natural Sciences; Senior Scientific Researcher, Memristive Materials Laboratory, Center for Nature-Inspired Engineering, University of Tyumen, Tyumen, Russia
a.n.busygin@utmn.ru, <https://orcid.org/0000-0002-3439-8067>

Sergey Yu. Udovichenko, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Professor of the Department of Applied and Technical Physics, School of Natural Sciences; Scientific Director, Center for Nature-Inspired Engineering, University of Tyumen, Tyumen, Russia
udotgu@mail.ru; <https://orcid.org/0000-0003-3583-7081>