

## Молекулярно-динамическое моделирование структурных превращений в проводящем канале мемристоров на основе нестехиометрического и ионно-облученного оксидов кремния

Е.В. Окулич,<sup>1,\*</sup> В.И. Окулич,<sup>2</sup> И.К. Гайнуллин,<sup>3</sup> Д.И. Тетельбаум,<sup>1</sup> А.Н. Михайлов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского (НИФТИ)

Россия, 603022, Нижний Новгород, пр. Гагарина, д. 23, корп. 3

<sup>2</sup>Нижегородский институт управления — филиал РАНХиГС

Россия, 603950, Нижний Новгород, пр. Гагарина, д. 46

<sup>3</sup>Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,

физический факультет, кафедра физической электроники

Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

(Поступила в редакцию 22.05.2024; после доработки 05.07.2024; подписана в печать 11.07.2024)

Методом молекулярной динамики смоделированы процессы структурных изменений, происходящие за время порядка 100 нс в области филамента мемристора, сформированного в нестехиометрических оксидах кремния, в том числе подвергнутых ионной имплантации, при формировке и/или переключении. При этом изучено влияние высокой температуры, при которой находится область филамента на определенных стадиях работы мемристора. Показано, что за указанные периоды времени происходят существенные структурные перестройки, заключающиеся в образовании и распаде различных комплексов, что подтверждается расчётами радиальных функций распределения расстояний между атомами в различных комбинациях.

PACS: 02.50.Ey УДК: 004.3:004.9.

Ключевые слова: мемристор, филамент, переключение, оксид кремния, молекулярно-динамическое моделирование, ионная имплантация, дефекты, кластерообразование.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.79.2450501](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.79.2450501)

### ВВЕДЕНИЕ

Тонкопленочные структуры типа металл-оксид-металл (МОМ) играют важную роль в приборах микро- и нанoeлектроники. Исследования явлений проводимости в МОМ с тонким ( $< 100 \text{ \AA}$ ) слоем оксида начались в середине прошлого века [1]. Результатом этих исследований явилось обнаружение сильной нелинейности вольт-амперных характеристик (ВАХ), являющийся пробоя и гистерезиса, зависящего от полярности напряжения. Для объяснения этих явлений (в МОМ-структурах с изменением валентности — valence change mechanism, VCM) была выдвинута гипотеза о формировании проводящих каналов диаметром 10–100  $\text{\AA}$ , изменяющих свой вид (структуру, примесный/дефектный состав) при изменении величины и знака напряжения. Соответствующие МОМ вслед за [2, 3] получили название мемристоров — сопротивлений, способных запомнить свое состояние — с высокой или низкой проводимостью, а каналы, по которым в основном протекает ток, — название филаментов [3].

Детальные исследования мемристивных эффектов развернулись после работы [4], когда было обнаружено мемристивное поведение диэлектриков в кроссбар-структурах и оценены возможности его

использования для создания на их основе класса приборов, совмещающих функции вычислений и памяти.

В настоящее время на основе мемристоров созданы процессорные вычислительные системы и устройства искусственного интеллекта (нейросети) [5]. Выполнено большое количество исследований механизмов работы мемристоров на основе различных материалов. Для оксидов металлов, таких как  $\text{HfO}_x$ ,  $\text{ZrO}_x$ ,  $\text{TiO}_x$ , сложилось устойчивое мнение о роли вакансий кислорода, входящих в состав филаментов, и о том, что в процессах переключения филаменты часто разрушаются, а затем восстанавливаются при смене полярности подаваемого напряжения. Это происходит вследствие миграции кислородных вакансий (фактически миграции ионов кислорода) [6, 7].

Что касается мемристоров на основе оксидов кремния, механизм их работы исследован в меньшей степени [8, 9]. Между тем такие мемристоры обладают тем достоинством, что они максимально совместимы с технологией создания с компонентами существующих мемристивных устройств, формируемых на базе кремния.

Для мемристоров на основе оксидов кремния еще не сформирован единый взгляд на механизм образования филаментов и процессов переключения. Нет единого мнения и о причинах стохастического поведения, играющего ключевую роль в проблеме разброса параметров мемристоров при по-

\* E-mail: [eokulich@nifti.unn.ru](mailto:eokulich@nifti.unn.ru)

вторении циклов переключения (endurance) и от мемристора к мемристорам на чипе, а также о скорости деградации характеристик при наборе числа переключений.

По нашему мнению, одной из причин стохастического поведения и деградации могут быть структурные изменения в области филамента, происходящие в нагреваемых (за счет выделения джоулевой энергии) филаментах, поскольку температура в локальных участках филамента может превышать  $1000^\circ\text{C}$  [10, 11].

Одним из важных результатов исследований явилось обнаружение улучшения параметров мемристоров на основе  $\text{SiO}_x$  при отклонении от стехиометрии [12, 13]; наилучшие характеристики были получены для оксида  $\text{SiO}_{1.1}$  [14].

В ряде работ для улучшения характеристик мемристоров использовалась ионная имплантация, которая позволяет контролируемым образом изменять примесно-дефектный состав диэлектрика. Однако механизмы влияния ионной имплантации на параметры мемристоров слабо изучены.

В настоящей работе методом молекулярной динамики исследованы структурные изменения в области филамента в мемристорах, сформированных на основе оксида кремния, происходящие в процессе работы, сопровождающейся высокой температурой. В частности, рассмотрены структурные перестройки в области филамента для нестехиометрического оксида кремния  $\text{SiO}_{1.7}$ , подвергнутого имплантации ионов  $\text{Si}^+$  и  $\text{Xe}^+$ . Выбор этих ионов связан с тем, что в случае оксида кремния имплантация ионов  $\text{Si}^+$  позволяет регулировать состав оксида, а облучение ионами  $\text{Xe}^+$  ранее было использовано нами для модификации параметров мемристора на основе кремния [15, 16].

## 1. МЕТОДИКА

Модельный объем оксида определялся вычислительными возможностями используемого компьютера и составлял  $60 \times 60 \times 60 \text{ \AA}^3$ . Первый этап моделирования заключался в создании структуры стехиометрического аморфного оксида  $\text{SiO}_2$  с помощью алгоритма, описанного в [17], и последующим использованием программы VMD [18]. На втором этапе для создания субстехиометрических оксидов  $\text{SiO}_x$  ( $x < 2$ ) в модельный объем вносилось соответствующее количество кислородных вакансий путем случайного (по координатам) удаления атомов кислорода.

Во всех случаях для моделированных структурных изменений, происходящих при высокой температуре, использовалась программа LAMMPS [19], в которой в качестве нулевого шага производится стандартная для такого типа расчетов процедура релаксации атомов.

Работа включала четыре варианта расчетов.

*Первый вариант* заключается в рассмотрении процессов структурных изменений, происходящих

при отжиге ( $T = 1500 \text{ K}$ ) оксида  $\text{SiO}_{1.1}$ , характеризующимся сильным отклонением от стехиометрии. Такое рассмотрение представляет интерес в связи с тем, что в тех случаях, когда мемристоры изготавливаются на базе таких оксидов, подвергнутых предварительному отжигу, указанные возможные изменения могут оказывать существенное влияние на последующее поведение структуры филаментов и, следовательно, на характеристики мемристоров.

*Второй вариант* состоит в моделировании процессов структурной перестройки в области филамента, происходящей при высокой температуре ( $1500 \text{ K}$ ) на двух стадиях его работы: перехода от состояния с низкой проводимостью в состояние с высокой проводимостью (SET) и обратно (RESET). Результаты расчета по данному варианту позволили ответить на вопрос об особенностях структурных превращений, обусловленных уходом/приходом атомов кислорода из зоны филамента за время, соответствующее подаче управляющих импульсов с частотой порядка  $10^7 \text{ Гц}$ . Моделирование «ухода» кислорода (увеличение числа вакансий), происходящего на стадии SET, проводилось периодическим случайным удалением атомов O из моделируемого объема. При этом удалялось по 100 атомов через каждые  $10^6$  шагов (0.1 нс). (Такой темп удаления по порядку величины соответствует величине подвижности атомов кислорода в оксиде при выбранной температуре [20]). Моделирование «прихода» кислорода на стадии RESET проводилось одновременным (что было обусловлено возможностями программы LAMMPS) возвратом всех удаленных атомов. (Мы полагаем, что данное упрощение не влияет на качественные характеристики моделируемого процесса.)

*В третьем варианте* расчетов моделировались структурные превращения в филаменте для оксидов  $\text{SiO}_{1.7}$ , в которые до изготовления мемристора произведена имплантация  $\text{Si}^+$  с дозой  $1 \times 10^{15} \text{ см}^{-2}$  и энергией 20 кэВ. В этом случае на первом этапе расчета с помощью программы SRIM [21] и специально созданных программ проводилось случайное удаление атомов Si и O (создание вакансий на глубине, соответствующей положению максимума распределения имплантированного кремния) и случайное внесение имплантированных, а также смещенных из узлов атомов. Затем следовала стадия «отжига» при температуре  $1500 \text{ K}$ , моделируемого с помощью программы LAMMPS.

*В четвертом варианте* расчетов моделировались процессы, что и в третьем варианте, но для области, в которой перед созданием мемристора внесены дефекты (вакансии и смещенные из узлов атомы) путем облучения ионами  $\text{Xe}^+$  с энергией 5 кэВ.

Для каждого из указанных вариантов расчета по программе LAMMPS фиксировались координаты атомов и с использованием специально созданных программ определялись структурные характеристики: радиальные функции распределения (РФР) Si-Si, Si-O, O-Si, O-O, а также количество комплексов (или кластеров) Si-Si<sub>n</sub>, Si-O<sub>n</sub>, O-Si<sub>n</sub>, O-O<sub>n</sub>

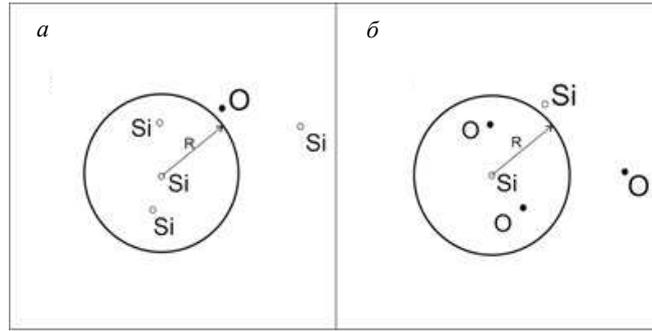


Рис. 1. *a* — Сфера с кластером Si-Si<sub>2</sub> и *б* — сфера с кластером Si-O<sub>2</sub>, радиусы *R* соответствующих сфер показаны на рисунке

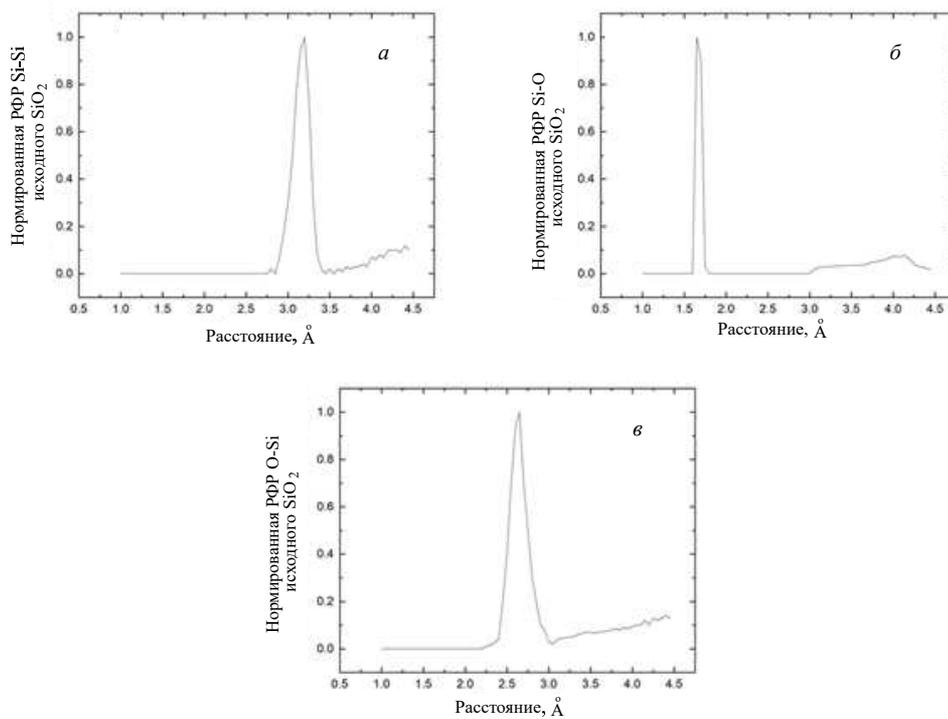


Рис. 2. Нормированные РФР Si-Si (*a*), Si-O (*б*), O-Si (*в*) для структуры SiO<sub>2</sub>

с различными числами  $n \geq 1$  атомов Si или O вокруг соответствующего центрального атома. Алгоритм расчёта на примере кластера Si-Si<sub>*n*</sub> описан ниже. Для других кластеров он был аналогичен.

Вокруг каждого атома Si моделируемого объема итеративно «строились» сферы переменного радиуса с шагом 0.05 Å и подсчитывалось число атомов Si, входящих в эту сферу. Процесс не прекращался до тех пор, пока в очередной сфере не оказывался атом O. Тогда радиус предшествующей сферы принимался за радиус кластера. А количество находящихся внутри этой сферы атомов Si (за вычетом центрального) — за число *n* в кластере (см. рис. 1).

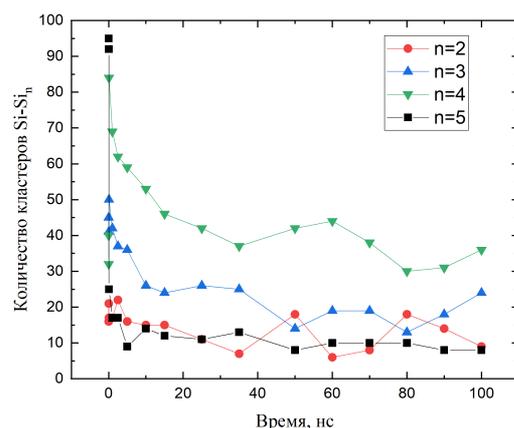
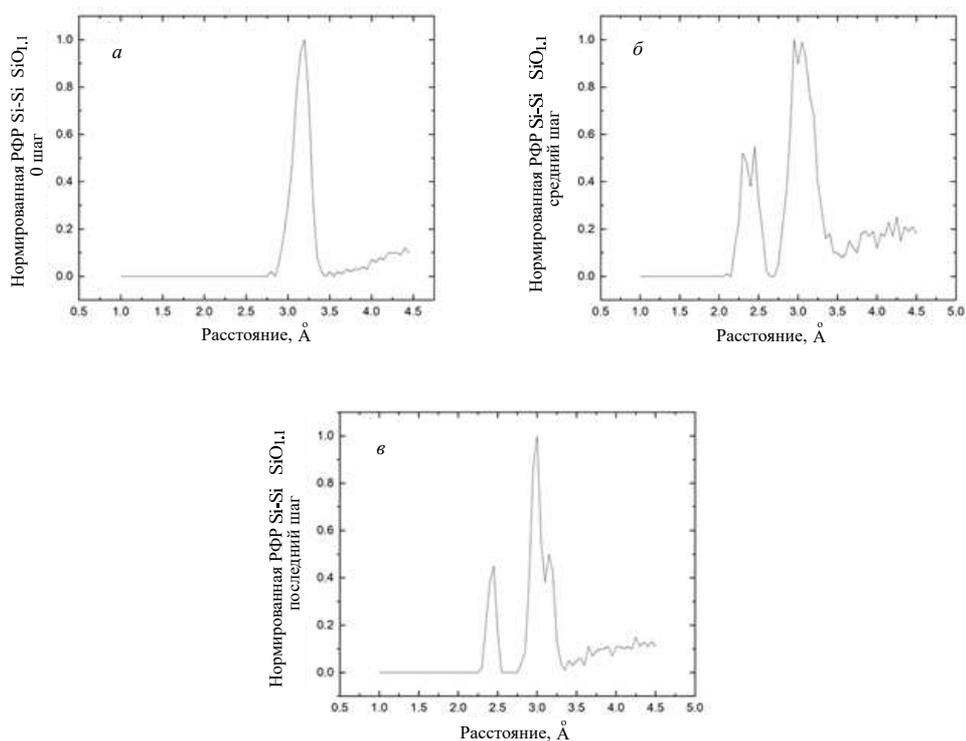
В расчётах в качестве потенциала межатомного взаимодействия использовался потенциал Терсоффа [22]. Максимальное время слежения за эволюцией структуры филамента составляло 100 нс.

Для проверки корректности построенной исходной структуры аморфного SiO<sub>2</sub> рассчитанные для неё РФР Si-Si, Si-O, O-Si, O-O (рис. 2) сравнивались с экспериментальными, полученными в [23], и оказались в хорошем согласии с ними.

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

### 2.1. Структурные изменения в области филамента на начальной стадии отжига оксида SiO<sub>1.1</sub>

На рис. 3–7 показано, каким образом изменяется структура оксида SiO<sub>1.1</sub>, смоделированная путём случайного удаления атомов кислорода, на начальном этапе высокотемпературного отжига (первый вариант моделирования).


 Рис. 3. Изменение количества кластеров Si-Si<sub>n</sub> от времени отжига SiO<sub>1.1</sub>

 Рис. 4. Зависимость нормированной РФР для пар Si-Si от времени отжига оксида со структурой SiO<sub>1.1</sub>

Из рисунков видно, что еще до начала отжига ( $t = 0$  с) в оксиде присутствуют компактные образования атомов различного состава, что обусловлено стохастическим распределением введенных при формовке оксида вакансий. Число «крупных» ( $n = 4, 5$ ) скоплений типа Si-Si<sub>n</sub> в первые же наносекунды резко падает, а затем за времена порядка 100 нс изменяется более медленно, испытывая флуктуации. Количество кластеров Si-O<sub>4</sub> (рис. 5, а) — структурных единиц (тетраэдров) сетки аморфного стехиометрического оксида SiO<sub>2</sub> — наоборот, резко растет на начальной стадии и затем

только флуктуирует в течение моделируемого промежутка времени. Тенденцию к стабилизации количества испытывают и кластеры O-Si<sub>2</sub> (рис. 5, б). Такой характер перестройки свидетельствует о частичном протекании процессов расслоения оксида на фазы SiO<sub>2</sub> и Si. Интересно, что эти процессы при температуре 1500 К протекают уже на самом раннем этапе отжига и, возможно, приводят к образованию филаментов уже до создания мемристоров, не требующих формовки. Представляет интерес явление раздвоения максимума РФР Si-Si (см. рис. 4). Обращает на себя внимание также

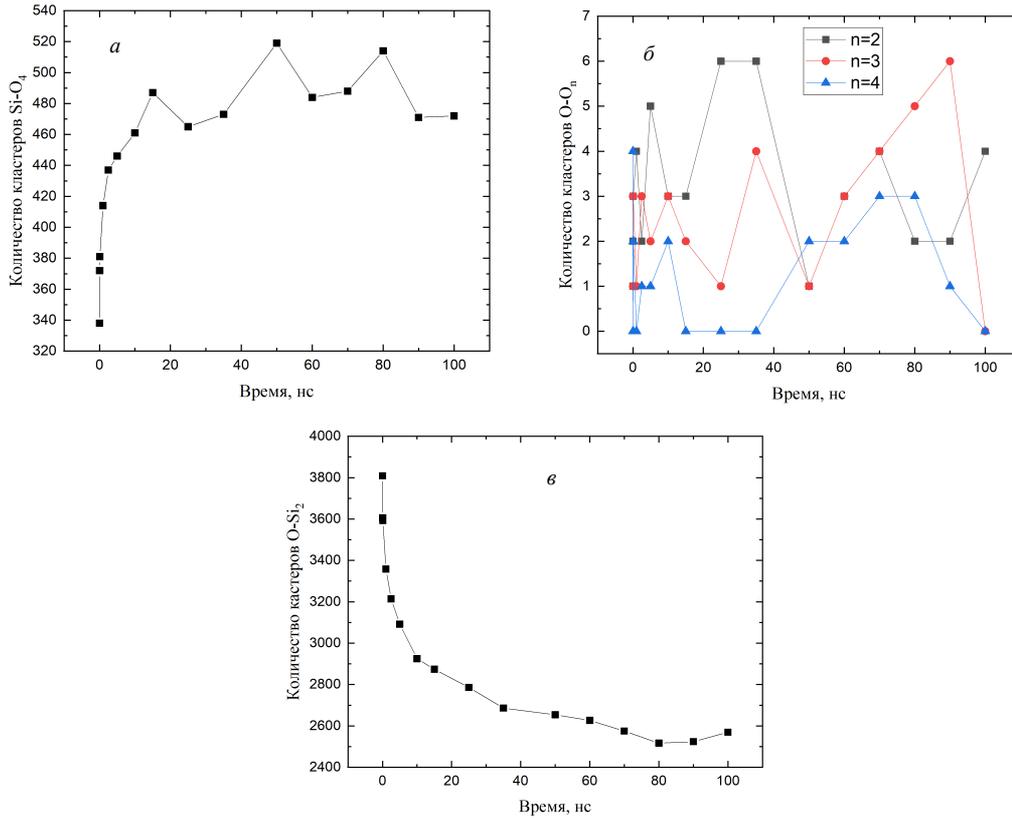


Рис. 5. *а* — Изменение количества кластеров Si–O<sub>4</sub> от времени отжига SiO<sub>1.1</sub>; *б* — изменение количества кластеров O–O<sub>*n*</sub> от времени отжига SiO<sub>1.1</sub>; *в* — изменение количества кластеров O–Si<sub>2</sub> от времени отжига SiO<sub>1.1</sub>

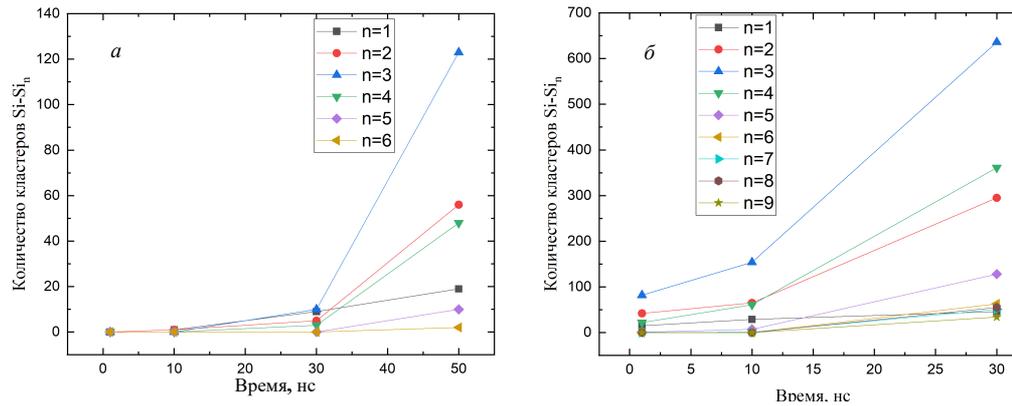


Рис. 6. *а* — Изменение количества кластеров Si–Si<sub>*n*</sub> от времени при уходе атомов кислорода из оксида SiO<sub>2</sub>; *б* — изменение количества кластеров Si–Si<sub>*n*</sub> от времени при уходе атомов кислорода из оксида SiO<sub>1.1</sub>

сильная флуктуация количества скоплений O–O<sub>*n*</sub> (рис. 5, *б*). Анализ их конфигураций показал, что они представляют собой совокупность атомов кислорода, не связанных между собой кремниевыми мостиками и расположенных по периферии пор различного размера. Эти скопления возможно являются резервуарами кислородных вакансий.

Наблюдаемые закономерности можно трактовать как начальный процесс разделения фаз с–Si и а–SiO<sub>2</sub> в области филамента. Данный вывод согласуется с результатами расчетов и эксперимен-

тальными данными [24, 25], в которых обнаружен эффект разделения таких фаз в нестехиометрическом оксиде кремния в интервале 900–1200°C за время порядка нескольких секунд.

### 2.2. Изменение структуры в области филамента при миграции атомов кислорода

Результаты моделированию структурных изменений при «уходе» кислорода (поставки кислородных вакансий) из области филамента и его приходе для

двух стехиометрий оксида (второй вариант моделирования) —  $\text{SiO}_2$  и  $\text{SiO}_{1.1}$  представлены на рис. 6, 7, где показаны изменения во времени количества различных кластеров типа  $\text{Si-Si}_n$ .

Из рис. 6, а, б видно, что кинетические изменения числа кластеров в случае ухода для обоих оксидов качественно идентичны и свидетельствует о быстром процессе образования кремниевых кластеров, особенно состоящих из четырех атомов (структурная единица чистого кремния). Эти кластеры, по-видимому, можно рассматривать как зародыши нановключений кремния, формирующихся на стадии SET, которые могут оказывать существенное влияние на сопротивление филамента в низкоомном состоянии.

Приход атомов кислорода на стадии RESET приводит к быстрому снижению числа кластеров  $\text{Si-Si}_n$ , как показано на рис. 7. (Более быстрые процессы изменения структуры, по сравнению со случаем «ухода», возможно, частично обусловлены тем, что все атомы кислорода возвращались одновременно.) Это огрубляет модель процесса, но результаты качественно демонстрирует обеднение области филамента комплексами  $\text{Si-Si}_n$ , что должно влиять на сопротивление филамента в высокоомном состоянии.

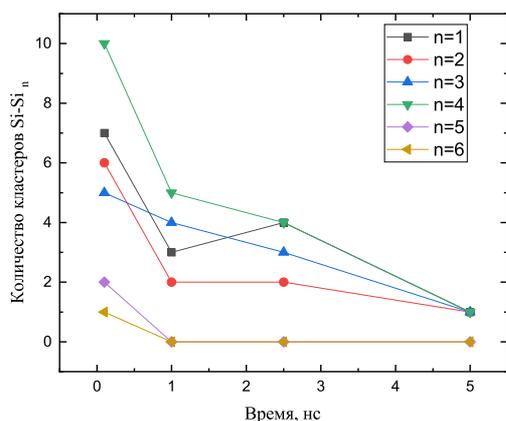


Рис. 7. Изменение числа кластеров  $\text{Si-Si}_n$  от времени отжига структуры  $\text{SiO}_2$  с приходом атомов кислорода

### 2.3. Структурные изменения в области филамента мемристора, сформированного на основе облученного $\text{Si}^+$ оксида $\text{SiO}_{1.7}$

На рис. 8 показан результат изменения со временем количества кластеров в моделируемом объеме филамента в мемристоре, сформированном на базе оксида  $\text{SiO}_{1.7}$  (третий вариант моделирования), который был подвергнут облучению ионами  $\text{Si}^+$  с энергией 20 кэВ и дозой  $10^{15} \text{ см}^{-2}$ . (Предполагается, что после облучения до формовки филамента структурное состояние оксида сохраняется, его из-

менение происходит во время работы мемристора, когда в области филамента имеет место джоулев нагрев).

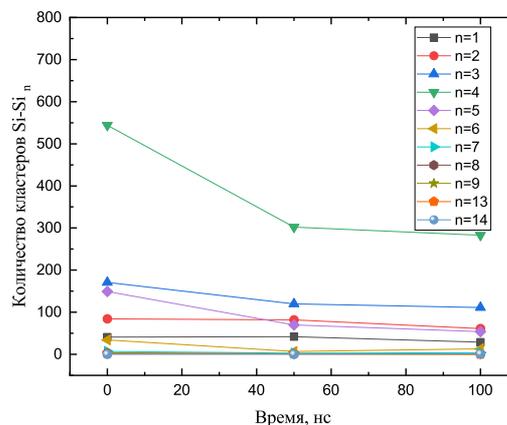


Рис. 8. Изменение числа кластеров  $\text{Si-Si}_n$  от времени постимплантационного отжига структуры  $\text{SiO}_{1.7}$

Как видно на рис. 8, уже к началу отжига, т.е. в момент  $t = 0$  с, в модельном объеме присутствуют кластеры  $\text{Si-Si}_n$ , образование которых в рамках используемого алгоритма происходит в результате релаксации, являющейся началом процедуры в программе LAMMPS. По мере отжига количество кластером с относительно малым  $n \leq 5$  снижается, но наблюдается тенденция к стабилизации за рассматриваемый промежуток времени.

Обращает на себя внимание, что, как и для предыдущих вариантов расчета, перестройка происходит за очень короткое время. Из данных по РФР (рис. 9) следует, что к концу данного промежутка времени наблюдается остаточное количество атомов  $\text{Si}$ , находящихся друг от друга на малых расстояниях. Это обстоятельство связано с неотожжёнными радиационными дефектами.

### 2.4. Структурные изменения в филаменте мемристора, сформированного на основе облученного ионами $\text{Xe}^+$ оксида $\text{SiO}_{1.7}$

Ранее [15] нами было выполнено молекулярно-динамическое моделирование процессов структурной перестройки в области филамента для оксида  $\text{SiO}_{1.2}$ , происходящей за счет избыточного содержания кислородных вакансий в таком оксиде, при температурах 300 и 900 К, с целью интерпретации особенностей характеристик мемристора, наблюдаемых в случае облучения оксида ионами  $\text{Xe}^+$ . В настоящей работе выполнено более близкое к реальной ситуации моделирование (четвертый вариант), учитывающее наличие в области каскадов смещения, создаваемых облучением, как вакансий, так и смещенных атомов. Рассчитывались кривые

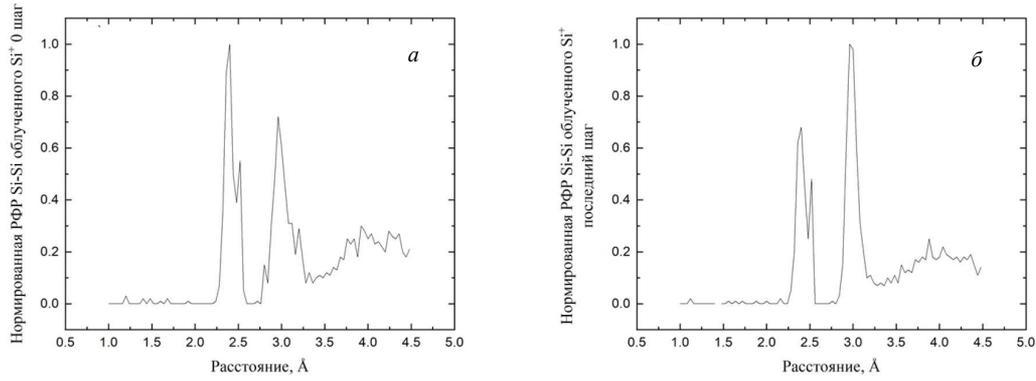


Рис. 9. Нормированные РФР Si-Si для структуры  $\text{SiO}_{1.7}$  в начале (а) и в конце (б) отжига после облучения ионами кремния

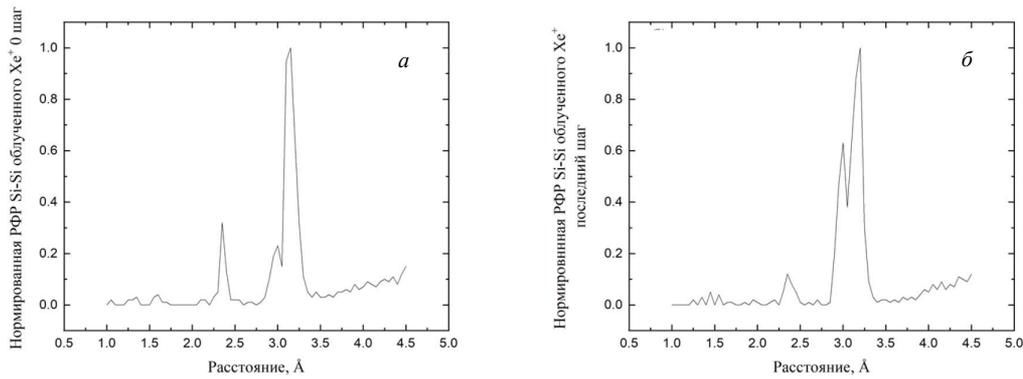


Рис. 10. Нормированные РФР Si-Si структуры  $\text{SiO}_{1.7}$  в начале (а) и конце (б) отжига после облучения ионами ксенона

РФР и формирования комплексов при температуре 1500 К в области каскадов смещения (которые, по нашему предположению, служили стартовыми позициями формирования филаментов).

Как видно из рис. 10 и 11, отжиг не приводит к радикальным изменениям структуры, как в рассмотренных выше случаях: изменяется картина РФР, меньше образуется крупных кластеров и их число в меньшей степени изменяется со временем. По-видимому, это свидетельствует в пользу того, что экспериментально [15] наблюдались меньшие разбросы от цикла к циклу. Тот факт, что в облученных образцах высокоомное состояние характеризовалось меньшими токами [15], скорее всего, обусловлен меньшим средним диаметром филаментов, «прорастающих» из каскадов смещения. Это обеспечивает более полную их окисление на стадии возврата атомов кислорода в процессе RESET. Следует отметить, что факт повышения сопротивления в состоянии RESET в свете данной гипотезы может служить косвенным подтверждением того, что при наличии облучения  $\text{Xe}^+$  филаменты преимущественно формируются в местах локализации каскадов смещения.

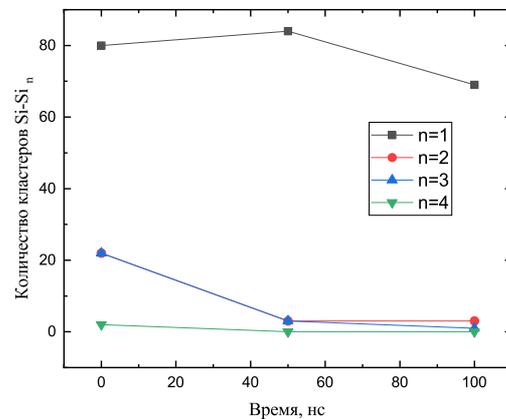


Рис. 11. Изменение числа кластеров  $1\text{Si-Si}_n$  от времени отжига структуры  $\text{SiO}_{1.7}$  после облучения ионами ксенона

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты выполненных расчетов показали, что в условиях работы мемристоров на основе  $\text{SiO}_x$ , при которых температура в области филамента может

превышать  $> 1000$  К, происходят процессы образования и распада кластеров различных конфигураций, причем характерные времена протекания этих процессов составляют единицы или десятки наносекунд. Влияние различных кластеров на протекание тока по филаментам требует отдельного рассмотрения, как и задача об их влиянии на вольт-амперные характеристики в циклах переключения и на эволюцию ВАХ при многократном повторении циклов с учетом стохастической природы процессов, происходящих при работе мемристивных структур. Это влияние зависит от количества филаментов в мемристоре (следовательно, от его площади), а также от длительности подаваемых на него импульсов напряжения и величины ограничения тока. Корректное моделирование процессов протекания тока при его работе требует отдельного рассмотрения с учётом структурных перестроек на стадиях SET и RESET, в том числе в случаях приме-

нения ионной имплантации. Стохастический характер перестроек может приводить к постепенному накоплению отрицательных, с точки зрения работы мемристора, изменений и деградации его характеристик. Использование ионной имплантации позволяет в определенной степени управлять процессами перестроек и тем самым способствовать улучшению характеристик прибора. Молекулярно-динамическое моделирование процессов в филаментах для различных вариантов используемой технологии дает возможность оптимизировать технологические режимы.

Настоящая работа выполнена в рамках государственного задания по созданию новых лабораторий для электронной промышленности (№ FSWR-2022-0009).

Авторы благодарят за помощь и дельные комментарии О. Н. Горшкова.

- [1] Yang, J., Pickett, M., Li, X. et al. // *Nature Nanotech.* **3**. 429 (2008).
- [2] Chua L. // *IEEE Trans. Circuit Theory.* **18**. 507 (1971).
- [3] Дирнлей Дж., Стоунхэм А., Морган Д. // *УФН.* **112**, № 1. 83 (1974).
- [4] Waser R., Aono M. // *Nature Materials.* **6**. 833 (2007).
- [5] Михайлов А.Н., Грязнов Е.Г., Лукоянов В.И. и др. // *Физмат.* **1**, № 1. 42 (2023).
- [6] Guseinov D.V., Tetelbaum D.I., Mikhaylov A.N. et al. // *Int. J. of Nanotech.* **14** (7/8), 604 (2017).
- [7] Рыльков В.В., Емельянов А.В., Николаев С.Н. и др. // *ЖЭТФ.* **158**, № 1(7). 164 (2020).
- [8] Mehonic A., Sebastian A., Rajendran B. et al. // *Adv. Intell. Syst.* **2**. 2000085 (2020).
- [9] Ичѣткин Д.В., Ширяев М.Е., Новиков Д.В. и др. // *Письма в ЖТФ.* **49**, № 20. 39 (2023).
- [10] Rahinkar D.G., Basnet Pr., West M. et al. // *AIP Advances.* **10**. 035127. (2020).
- [11] Ma Ya., Li D., Herzog A.A. et al. // *ACS Appl. Mater. Interfaces.* **10**, № 27. 23187. (2018).
- [12] Wang Y., Qian X., Chen K. et al. // *Appl. Phys. Lett.* **102**. 042103. (2013).
- [13] Мигантьев Е.А., Неизвестный И.Г., Усенков С.В. и др. // *Физика и техника полупроводников.* **48**, вып. 7. 917 (2014).
- [14] Gismatulin A. A., Voronkovskii V.A., Kamaev G.N. et al. // *Nanotechnology.* **31**. 505704. (2020).
- [15] Окулич Е.В., Окулич В.И., Тетельбаум Д.И. // *Письма в ЖТФ.* **46**, вып. 1. 24 (2020). (Okulich E.V., Okulich V.I., Tetelbaum D.I. // *TPL.* **46**. 19 (2020)).
- [16] Okulich E.V., Okulich V.I., Tetelbaum D.I., Mikhaylov A.N. // *Materials Lett.* **310**. 131494 (2022).
- [17] Cruz-Chu E.R., Aksimentiev A., Schulten K. // *J. of Phys. Chem. B.* **110**. 21497 (2006).
- [18] <https://tcbg.illinois.edu/Research/vmd/>
- [19] <https://www.lammps.org/>
- [20] Александров О.В., Дусь А.И. // *ФТП.* **42**, № 11. 1400 (2008).
- [21] <http://srim.org/>
- [22] Munetoh S., Motooka T., Moriguchi K., Shintani A. // *Comput. Mater. Sci.* **39**. 334 (2007).
- [23] Nagasima N. // *J. of Appl. Phys.* **43**. 3378 (1972).
- [24] Krasnikov G.Ya., Zaitsev N.A., Matyushkin I.V., Korobov S.V. // *Russian Microelectronics.* **44**, N 3. 109 (2015).
- [25] Неизвестный И.Г., Володин В.А., Камаев Г.Н. и др. // *Автометрия.* **52**, № 5. 84 (2016).

## Molecular Dynamics Simulation of Structural Transformations in the Conducting Channel of Memristors Based on Non-stoichiometric and Ion-Irradiated Silicon Oxides

E.V. Okulich<sup>1,a</sup>, V.I. Okulich<sup>2</sup>, I.K. Gainullin<sup>3</sup>, D.I. Tetelbaum<sup>1</sup>, A.N. Mikhaylov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Lobachevsky University, Nizhny Novgorod, 603022, Russia

<sup>2</sup>Nizhny Novgorod Institute of Management – branch of RANEPА, Nizhny Novgorod, 603950, Russia

<sup>3</sup>Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia

E-mail: <sup>a</sup>[eokulich@nifti.unn.ru](mailto:eokulich@nifti.unn.ru)

Using the molecular dynamics method, the processes of structural changes occurring over a period of approximately 100 ns in the filament region of a memristor, formed in non-stoichiometric silicon oxides, including those subjected to ion implantation, during forming and/or switching, were simulated. The influence of high temperature, at which the filament region is located during certain stages of the memristor's operation,

was also studied. It was shown that significant structural rearrangements occur over the specified time periods, consisting in the formation and disintegration of various complexes, which is confirmed by the calculations of radial distribution functions of distances between atoms in various combinations.

PACS: 02.50.Ey

*Keywords:* memristor, filament, switching, silicon oxide, molecular dynamics simulation, ion implantation, defects, cluster formation.

*Received 22 May 2024.*

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2024. **79**, No. 5. Pp. .

#### Сведения об авторах

1. Окулич Евгения Викторовна — мл. науч. сотрудник; e-mail: [eokulich@nifti.unn.ru](mailto:eokulich@nifti.unn.ru).
2. Окулич Виктор Иванович — канд. физ.-мат. наук, доцент; e-mail: [victorokuliich@mail.ru](mailto:victorokuliich@mail.ru).
3. Гайнуллин Иван Камилевич — доктор физ.-мат. наук, доцент; e-mail: [ivan.gainullin@physics.msu.ru](mailto:ivan.gainullin@physics.msu.ru).
4. Тетельбаум Давид Исаакович — доктор физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник, профессор; e-mail: [tetelbaum@phys.unn.ru](mailto:tetelbaum@phys.unn.ru).
5. Михайлов Алексей Николаевич — канд. физ.-мат. наук, зав. лаб.; e-mail: [mian@nifti.unn.ru](mailto:mian@nifti.unn.ru).