

忆阻逾渗导电模型中的初态影响*

李智炜 刘海军[†] 徐欣

(国防科学技术大学电子科学与工程学院, 长沙 410073)

(2012年12月5日收到; 2013年1月6日收到修改稿)

逾渗网格模型是当前忆阻器件机理分析研究领域的热点之一, 但现有模型缺乏对初态设定的讨论. 本文对逾渗网格模型进行了简化, 并基于此, 通过电压激励步进的方式, 研究了不同初态对单极性忆阻开关元件中逾渗导电通道形成的影响, 分析了形成通道的动态过程以及相应的物理意义, 验证了忆阻开关元件高低阻态的阻值实际表现为高斯分布而非理想双值稳态; 而不同初态条件下, 忆阻开关元件导电通道的形状存在着不同的“树形”结构, 进而影响着其阻值的分布. 研究成果有助于进一步揭示忆阻器尚未明确的导电机理, 为今后对具体不同类型的忆阻元件的初态分析提供指导性作用.

关键词: 忆阻器, 开关元件, 逾渗模型, 初态分析

PACS: 64.60.ah, 85.35.-p, 89.20.Ff, 84.37.+q

DOI: 10.7498/aps.62.096401

1 引言

随着微纳电子技术的发展, 人们发现一些有着形如金属/绝缘层/金属 (MIM) 结构的器件在外加激励下, 呈现出高、低两种稳态电阻值相互更替的现象^[1-3]. 这类物理器件的电压电流本构关系拥有典型的紧捏滞回特性, 故被称为忆阻开关元件, 其属于广义上拥有忆阻行为的实际器件^[4]. 它尺寸小、结构简单、能与 CMOS 工艺相容、便于堆栈, 在新一代超高密度存储器件^[5]、混沌模拟电路^[6]以及神经元量子计算^[7]等领域受到广泛关注.

单极性忆阻开关如图 1 所示, 其属于典型的高、低阻值变化较大的一类忆阻开关元件, 它在相同极性的电压下拥有两个稳态阻值. 但忆阻开关元件为何能有电阻双稳态特性的物理机理尚为达成一致结论, 主流的多种物理理论包括: 电/热化学迁移^[8,9]、导电细丝的形成与消失^[10,11]、界面态电子俘获^[12,13]等模型.

为摆脱单纯一个方面物理机理的束缚, 力求更精确、直观地描述忆阻器件各方面的特征现象, Lee 等人提出一种定量分析的逾渗模型^[14-16], 并分析了局部导电通道形成的现象, 但缺乏对模型中

初态设定的讨论; Prodromakis 等^[17]则进一步利用该逾渗模型去解释惠普实验室的离子迁移模型^[5], 并讨论了稳态时候导电通道的个数和路径形状等方面对开关阻值比的影响, 但他们同样没有讨论模型中初态因素可能产生的影响, 而且也没有像 Lee 等那样利用模型对导电通道的形成过程进行描述. 但事实上, 忆阻开关元件阻值分布、开启 (set) 电压等方面属性会受缺陷态比率、界面微结构和掺杂浓度等因素的影响^[3,18-21], 并且文献^[22]还指出可以通过控制初态氧空缺位的浓度提高忆阻器开关特性的性能.

据此, 本文通过建立一个简化的逾渗网格模型, 对不同初态下的单极性忆阻开关元件进行了动态模拟仿真, 直观地描述了导电通道形成的动态过程. 同时, 还研究了初态对导电通道形成产生的影响, 对一些目前已提出的理论模型和有关的现象进行了有力解释.

2 逾渗网格简化模型构建

如图 2 所示, 把整个忆阻器等效为二维 $M \times N$ 大小的逾渗电路网络, 该网络分为顶端电极、底端电极以及二者之间的活性层. 网格中两个焦点的

* 国家自然科学基金 (批准号: 61171017) 和国防科学技术大学硕士研究生创新基金 (批准号: S120402) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: liuhaijun@nudt.edu.cn

连线称为一个键, 每个键又被视为一个非线性可变电阻. 该模型是具有物理意义的, 因为实际物理器件自身的物理化学属性如原子价键、晶格结构等决定着每个键的预设阻值及其阻值的变化规律等特征 [14–17,23–28].

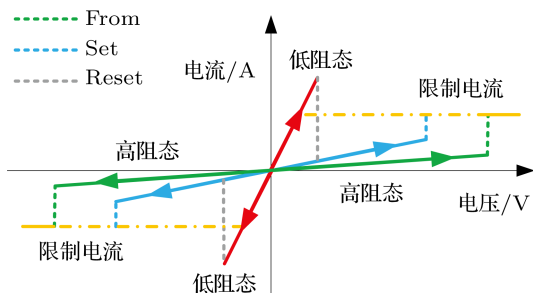


图1 单极性忆阻开关器件电压电流关系图

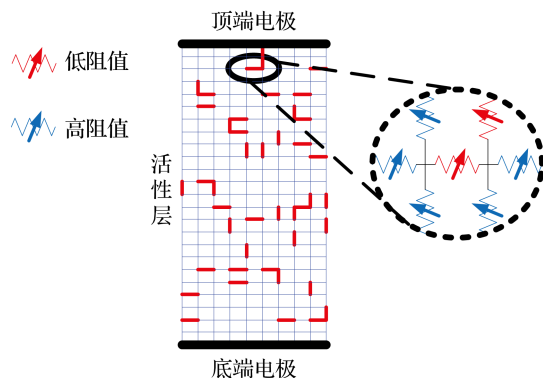


图2 忆阻器 25 × 10 逾渗网络模型图例

假设每个键仅有高阻态 r_h 和低阻态 r_l 两种稳态阻值 [14,15], 分别用蓝色和红色表示, 且 $r_h \gg r_l$. 为了对模型中逾渗导电通道形成与断开进行仿真, 本文将每个键高低阻态的相互转换分为两个阶段, 具体如下:

在单极性忆阻开关元件关状态向开状态变化时, 即启动 (form) 或设置 (set) 阶段, 仅考虑键由高阻态 r_h 向低阻态 r_l 变化的情况, 变化条件为: 处于高阻态键两端的电压差大于设定阈值电压 v_{on} , 该过程是通过限制电流来判断是否结束, 即判断逾渗导电通道是否形成.

在单极性忆阻开关元件开状态向关状态变化时, 即重置 (reset) 阶段, 仅考虑键由低阻态 r_l 向高阻态 r_h 变化的情况, 变化条件为: 处于低阻态的键两端的电压差大于设定阈值电压 v_{off} , $v_{on} \gg v_{off}$.

该简化模型简洁地避免了仿真中, 当阈值电压 v_{off} 和 v_{on} 设定不合理时, 键的高低阻态相互转变导致其获得的分压始终介于两个阈值之间, 进而出现

死循环始终达不到稳定态的情况. 而且, 这种分阶段的处理, 也提升了模型数据仿真的收敛性, 提高了时间效率.

当在忆阻器电极两端施加电压激励时, 利用基尔霍夫电流定律 (Kirchoff's current law, KCL) 列出每个节点的电流平衡方程, 得到一组对角占优的五对角方程, 进而求解出电路网络中电压分布和电流分布. 在导电通道逐步形成的过程中, 越来越多的键从高阻态变为低阻态, 一些低阻态键相互联接在一起, 构成一些独立的集团并逐步扩张; 当其中一个或者几个联通顶端电极 (TE) 和底端电极 (BE) 时, 也就形成了一个具有良导电性的逾渗通道. 该通道极大地减小了整个电路网络的戴维南等效电阻值, 也即忆阻开关器件的电阻值. 这种通道形成的现象不限于某个工作机理的影响, 因此, 该模型具有很强的灵活性, 可被用于仿真和分析不同的导电机理的工作过程.

3 初态分析

参考文献 [14–17], 我们对 50×20 大小的逾渗网络模型进行电路模拟仿真, 其中 $r_h = 1 \text{ k}\Omega$, $r_l = 1 \Omega$, $v_{on} = 0.1 \text{ V}$, $v_{off} = 2 \times 10^{-3} \text{ V}$. 主要研究在逐步递增的扫描电压激励下, 初始渗透率以及初始渗透分布对逾渗导电通道形成产生的影响. 这里, 渗透率定义为逾渗网络模型中处于低阻态的导电键所占的比例, 对应于实际器件中的物理意义为平均掺杂比率 [18]; 逾渗分布定义为处于低阻态的导电键在模型中的分布情况, 对应于实际器件中的物理意义为活性层的掺杂分布 [19,20], 也即加电下的内部电流通道的分布状况 [14–17,21].

3.1 初始渗透率的影响

我们首先研究初始状态处于低阻态的导电键所占的比例对导电通道形成时平均渗透率、促成导电通道形成的电压以及导电通道形成时的阻抗的影响. 这里统一设定限制电流 $I_{comp} = 0.01 \text{ A}$, 初态分布为所有网格键随机均匀分布. 图 3 为忆阻器 50×20 逾渗网络模型中初始渗透率的影响. 通过图 3(b) 和 (c) 可以直观地看出, 低阻态的导电键所占的比例越高, 促成导电通道形成的电压越低, 导电通道形成时的平均阻抗也越小. 这是由于初始逾渗率越高, 相应处于高阻态 r_h 导电键的个数就越少, 使它们平均分配到的电压也越大, 很容易就超过 v_{off} 成为逾渗通道分支一员. 该现象与实验 [18] 中观测到掺杂氧浓度大小的变化对阻值的影响结

果一致,且最新文献 [22] 发现可以在制备的过程中通过控制加氧压强控制相应的氧空缺位的浓度,进而提高开关性能.

从图 3(a) 中可以看出,模型中导电通道形成时最终的逾渗率先下降后上升,与初态中渗透率的大

小并无单调关系.这是因为在模型中逾渗率较小或较大时,最终通道成型的形状均是密集型,如图 4(b) 所示.逾渗率较小时,通道形成时的逾渗密集程度与初始逾渗率成反比;而逾渗率较大时,通道形成时的逾渗密集程度与初始逾渗率成正比.

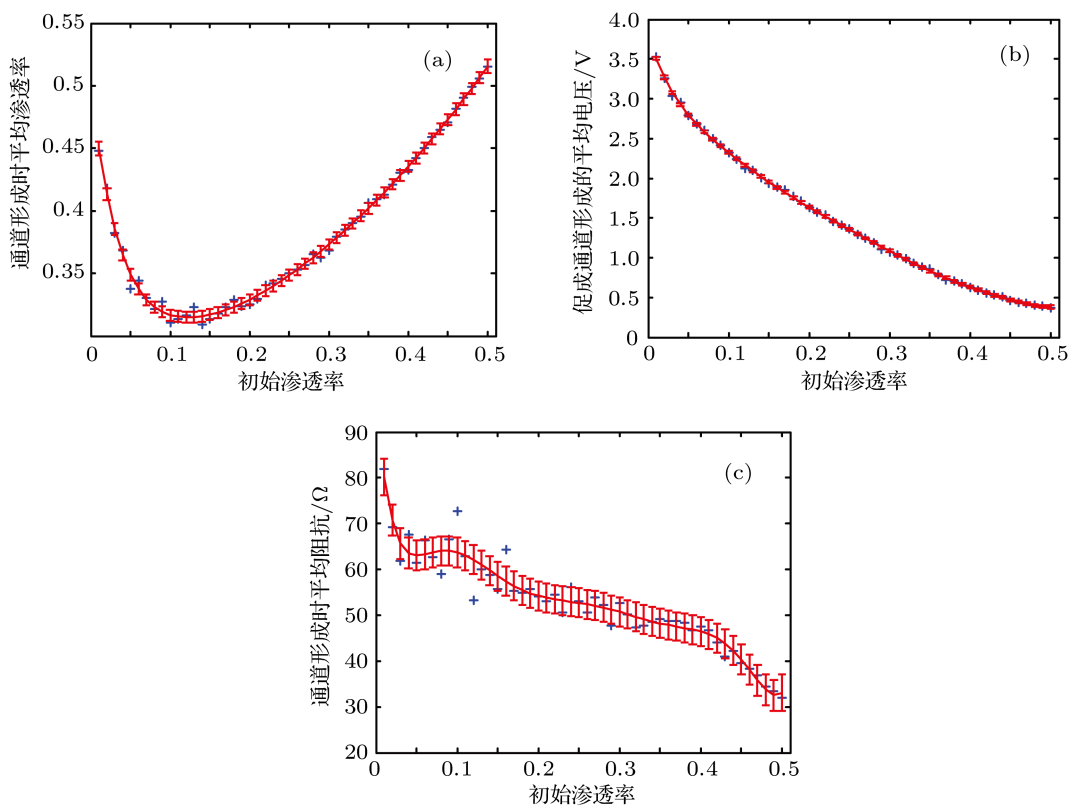


图 3 忆阻器 50×20 逾渗网格模型中初始渗透率的影响 (蓝色点为仿真点, 红色为带偏差估计的拟合曲线) (a) 初始渗透率对导电通道形成时最终的渗透率的影响; (b) 初始渗透率对促成导电通道形成的平均电压的影响; (c) 初始渗透率对导电通道形成时忆阻器平均阻抗的影响

另外,已有文献 [14,18,29] 在物理器件实测中发现忆阻器在开关状态下的阻值并非是固定的,而是呈现出近似高斯分布的现象.仿真结果图 5(b) 和 (d) 也体现出这一特性,进而在另一方面验证了该模型拟合忆阻开关元件的有效性.并能从图 3(c) 初始渗透率对导电通道形成时忆阻器平均阻抗的影响结果中发现,初始渗透率在一定范围 (本文仿真模型中为 0.05—0.16) 内通道形成时的阻值分布方差较大.说明初始渗透率在该范围的时候,通道成型的形状存在多种类型,详细讨论见 3.2 小节.

3.2 初始逾渗分布的影响

初态逾渗率为 0.062、限制电流 I_{comp} 为 0.01 A 时,在不同的初始逾渗分布情况下,单极忆阻开关元件模型内部导电通道成型的形状如图 4 所示.可以看出,在整个网格为全局随机均匀分布的初态下,

导电通道成型的形状可以分为三类:

“十字”型,如图 4(a) 所示,靠近两端的逾渗分支细长,而处于活性层中间的逾渗分支较密集,有着很宽的覆盖面;

“密集”型,如图 4(b) 所示,逾渗分支覆盖了大部分忆阻开关元件的活性层;

“闪电”型,如图 4(c) 所示,逾渗分支在电极一端比较细长,而越靠近另一端电极的分支岔口越多.

如果初始逾渗分布是电极端细丝分布,即在电极的一端有一条长细丝的逾渗分支.之后导电通道形成的过程同文献 [14] 所述,则最终成型的形状如图 4(d) 和 (e) 所示,被细分为两类分叉形式不一样的“闪电”型:一种近似“树根”,其主干下面各条分支通道盘中错节;另一种近似“三叉戟”,其主干下面分支通道的叉口十分明显.

若初始逾渗分布为电极端均匀分布情况下,则最终通道成型的形状如图 4(f) 所示,逾渗导电通道

覆盖整个网格. 而且导电通道形成的过程不同于文献 [14] 所述, 它的通道形成过程是一种跳变的过程, 即整个忆阻器的高低阻态表现为理想开关元件的双值情况.

阻抗值分布情况. 可以看出, 不论初始逾渗分布为整个网格键随机分布还是电极端细丝分布, 逾渗导电通道形成时的逾渗率和阻抗值分布均可利用高斯曲线拟合, 但它们分布的均值、方差与初态分布

图 5 显示了逾渗导电通道形成时的逾渗率和

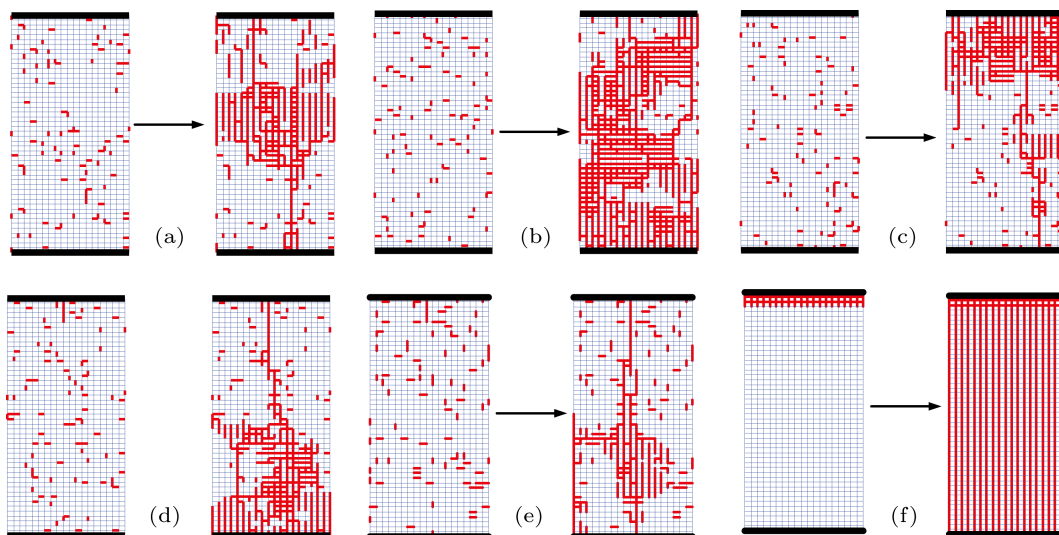


图 4 忆阻器 50×20 逾渗网格模型中初始逾渗分布对导电通道成型的形状的影响 (蓝色为高阻值导电键, 红色为低阻值导电键) (a)–(c) 全局随机均匀分布下, 导电通道成型的三类形状; (d), (e) 电极端细丝分布下, 导电通道成型的两类形状; (f) 电极端均匀分布下, 导电通道成型的形状

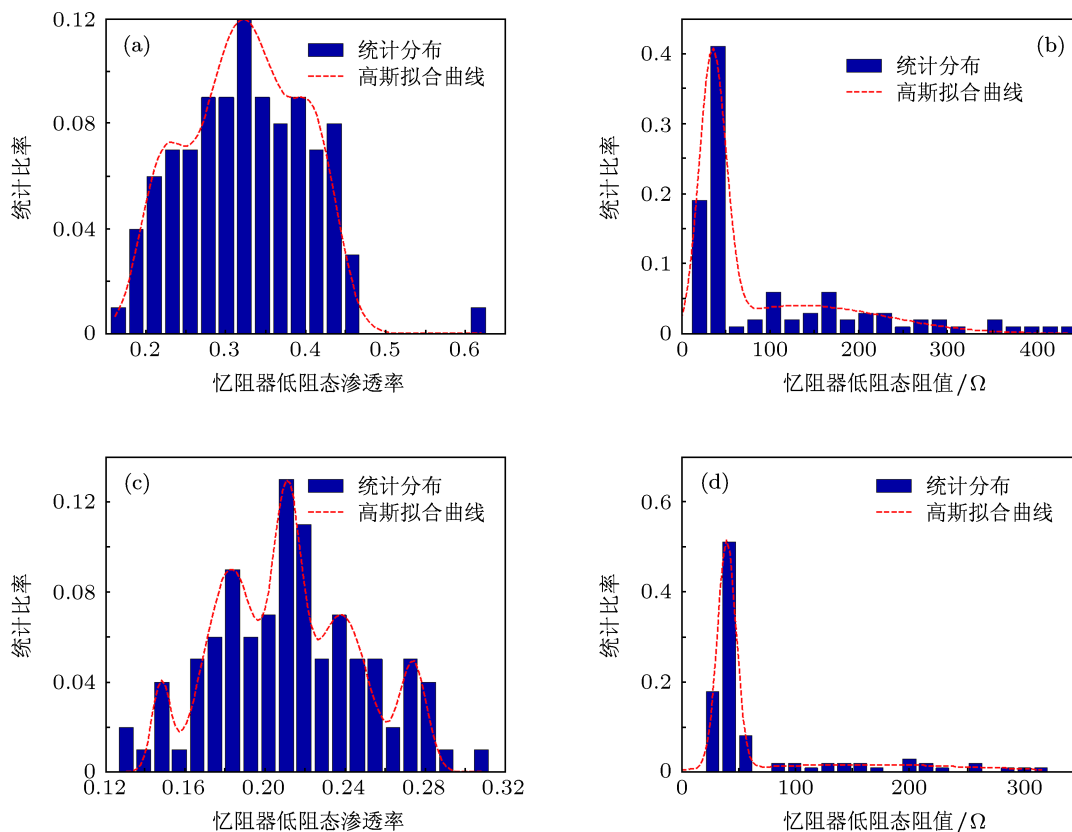


图 5 忆阻器 50×20 逾渗网格模型中初始逾渗分布的影响 (蓝色为仿真统计分布柱状图, 红色为概率分布拟合曲线) (a) 全局随机均匀分布对导电通道形成时最终的渗透率的影响; (b) 全局随机均匀分布对导电通道形成时忆阻器平均阻抗的影响; (c) 电极端细丝分布对导电通道形成时最终的渗透率的影响; (d) 电极端细丝分布对导电通道形成时忆阻器平均阻抗的影响

有关. 在初始逾渗分布为整个网格键随机分布下, 导电通道形成时逾渗率主要集中在 0.32 附近; 在电极端细丝分布情况下, 导电通道形成时逾渗率主要集中在 0.21 附近, 要小于前者; 而且前者分布的方差要比后者大. 同时, 在初始逾渗分布为整个网格键随机分布下, 导电通道形成时的电阻分布和初始逾渗分布为电极端细丝分布下的电阻分布也都主要集中在 40—50 Ω , 但后者趋向正态分布的程度的要优于前者, 即后者的分布方差小于前者.

综上所述可以发现, 初态中初始逾渗率和逾渗分布两个因素对忆阻开关元件阻值的分布、最终导电通道形成的形状以及此时的逾渗率大小等方面起重要影响.

4 结论

本文对逾渗网格模型进行了简化, 并利用该模

型, 通过电压激励步进的方式, 研究了不同初态对单极性忆阻开关元件中逾渗导电通道形成的影响, 分析了形成通道的动态过程以及相应的物理意义, 进一步验证了逾渗网格模型能更好地描述忆阻开关元件各方面特性, 尤其是:

1. 实际忆阻开关元件高低阻态的阻值表现为高斯分布而非理想双值稳态, 其均值与方差与初始掺杂浓度、掺杂分布等初态信息有关.

2. 在不同初态条件下, 忆阻开关元件导电通道的形状存在着各式各样的“树形”结构.

3. 导电通道不同类型的“树形”结构会影响忆阻开关元件开、关状态时的阻值分布.

这些特性分析将有助于进一步通过原子显微镜对不同材料的忆阻开关元件进行观察, 进而揭示尚未明确的导电机理, 同时也为通过控制材料相关参数制备更具优异特性的忆阻开关元件提供了新的思路.

- [1] Yang J J, Inoue I H, Mikolajick T, Hwang C S 2012 *MRS Bulletin* **37** 131
- [2] Sawa A 2008 *Materials Today* **11** 28
- [3] Jia L N, Huang A P, Zheng X H, Xiao Z S, Wang M 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 217306 (in Chinese) [贾林楠, 黄安平, 郑晓虎, 肖志松, 王玫 2012 物理学报 **61** 217306]
- [4] Chua L O 2011 *J. Appl. Phys. A* **102** 765
- [5] Strukov D B, Snider G S, Stewart D R, Williams R S 2008 *Nature* **453** 80
- [6] Bao B C, Hu W, Xu J P, Liu Z, Zou L 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 120502 (in Chinese) [包伯成, 胡文, 许建平, 刘中, 邹凌 2011 物理学报 **60** 120502]
- [7] Pershin Y V, Ventra M Di 2012 *Proceedings of the IEEE* **100** 2071
- [8] Strukov D B, Alibart F, Williams R S 2012 *Appl. Phys. A* 106
- [9] Fursina A, Sofin R, Shvets I, Natelson D 2009 *Phys. Rev. B* **79** 24
- [10] Kwon D H, Kim K M, Jang J H, Jeon J M, Lee M H, Kim G H, Li X S, Park G S, Lee B, Han S, Kim M, Hwang C S 2010 *Nature Nanotech* **5** 148
- [11] Yang Y C, Gao P, Gaba S, Chang T, Pan X Q, Lu W 2012 *Nat. Commun.* **3** 732
- [12] Kim K M, Choi B J, Lee M H, Kim G H, Song S J, Seok J Y, Yoon J H, Han S, Hwang C S 2011 *Nanotechnology* **22** 254010
- [13] Yang J J, Strachan J P, Miao F, Zhang M X, Pickett M D, Yi W, Ohlberg D, Medeiros-Ribeiro G, Williams R S 2011 *Appl. Phys. A* **102** 785
- [14] Chae S C, Lee J S, Kim S, Lee S B, Chang S H, Liu C, Kahng B, Shin H, Kim D W, Jung C U, Seo S, Lee M J, Noh T W 2008 *Adv. Mater.* **20** 1154
- [15] Liu C, Chae S C, Lee J S, Chang S H, Lee S B, Kim D W, Jung C U, Seo S, Ahn S E, Kahng B, Noh T W 2009 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **42** 015506
- [16] Lee S B, Lee J S, Chang S H, Yoo H K, Kang B S, Kahng B, Lee M J, Kim C J, Noh T W 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 033502
- [17] Shihong M W, Prodromakis T, Salaoru I, Toumazou C, ArXiv: 1206.2746v1 [cond-mat]
- [18] Miao F, Yi W, Goldfarb I, Yang J, Zhang M X, Pickett M D, Strachan J P, Medeiros-Ribeiro G, Williams R S 2012 *ACS Nano*. **6** 2312
- [19] Strukov D B, Snider G S, Stewart D R, Williams R S 2008 *Nature* **453** 80
- [20] Peng H Y, Li Y F, Lin W N, Wang Y Z, Gao X Y, Wu T 2012 *Sci. Rep.* **2** 442
- [21] Inoue I H, Yasuda S, Akinaga H, Takagi H, ArXiv: 0702564v1 [cond-mat]
- [22] Xu Z T, Jin K J, Gu L, Jin Y L, Ge C, Wang C, Guo H Z, Lu H B, Zhao R Q, Yang G Z 2012 *Small*. **8** 1279
- [23] Guo X, Silva S R P, Ishii T 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 042105
- [24] Zezelj M, Stankovi'c I 2012 ArXiv: 1206.0939v2 [cond-mat]
- [25] Niemeyer L, Pietronero L, Wiesmann H J 1984 *Phys. Rev. Lett.* **52** 1033
- [26] Li J, Ray B, Alam M A, Ostling M 2012 *Phys. Rev. E* **85** 021109
- [27] Rozen J, Lopez R, Haglund R F, Feldman L C 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 081902
- [28] Cheianov V V, Fal'ko V I, Altshuler B L, Aleiner I L 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 176801
- [29] Zhu X J, Su W J, Liu Y W, Hu B L, Pan L, Lu W, Zhang J D, Li R W 2012 *Adv. Mater.* **24** 3941

Effects of pristine state on conductive percolation model of memristor*

Li Zhi-Wei Liu Hai-Jun[†] Xu Xin

(Department of Circuit and Systems, School of Electronic Science and Engineering, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

(Received 5 December 2012; revised manuscript received 6 January 2013)

Abstract

Due to its fitting the resistive switching behavior of memristor well, the percolation network model has recently attracted attention in the memristive mechanism field. However, the current 2D percolation network model lacks the pristine states analysis. In this paper, the original model is simplified to study the effects of pristine state on the forming process of conductive percolation channel with the increase of applied voltage. Intuitively, such a percolation network model not only demonstrates the dynamic process of local conducting channels formed in the physical meaning, which verifies that the resistance distribution of the memristor switching is not ideally bistable but can be fitted by Gauss curve; also it contributes to deciphering the unknown conductive mechanisms of memristor with the various types of percolation channel.

Keywords: memristor, resistive switching, percolation model, pristine state analysis

PACS: 64.60.ah, 85.35.-p, 89.20.Ff, 84.37.+q

DOI: 10.7498/aps.62.096401

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61171017), and the Graduate Student Innovation Fund of NUDT (Grant No. S120402).

[†] Corresponding author. E-mail: liuhaijun@nudt.edu.cn