



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 62–71

Izvestiya of Saratov University. Physics, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 62–71

<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-62-71>, EDN: LNCIOR

Научная статья

УДК 537.311.322



Моделирование кинетики деградации проводимости в наноструктурированных низкоразмерных полупроводниковых слоях при длительном воздействии постоянного тока

Л. А. Кочкуров

Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю. А., Россия, 410054, г. Саратов, ул. Политехническая, д. 77

Кочкуров Леонид Алексеевич, кандидат физико-математических наук, lkochkurov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3360-8878>, AuthorID: 645071

Аннотация. Представлена дискретная сетевая модель для исследования кинетики деградации омической проводимости в низкоразмерных наноструктурированных полупроводниковых слоях (на примере нанодисперсных слоёв In_2O_3) при длительном воздействии постоянного тока. Модель объясняет экспериментально наблюдаемый переход в диэлектрическое состояние через механизм захвата подвижных носителей дефектами-ловушками, приводящий к разрушению проводящих мостиков. В основе методологии лежит трёхмерная перколяционная система на кубической решётке размером $300 \times 300 \times 15$ узлов, реализующая перколяцию по связям с логнормальным распределением проводимостей рёбер. Начальное количество непрерывных проводящих путей между электродами соответствует экспериментальным данным и определяет критическую конфигурацию системы. Динамика деградации формализована через эволюцию проводимости рёбер, зависящую от локальной плотности тока, рассчитываемой решением системы уравнений Кирхгофа для узловых потенциалов. Результаты демонстрируют количественное согласие с экспериментальной кинетикой перехода «полупроводник–диэлектрик», устанавливая корреляцию между разрушением перколяционных кластеров и макроскопической деградацией проводимости.

Ключевые слова: кинетика деградации, наноструктурированные полупроводники, перколяционная модель, захват носителей, оксид индия

Благодарности: Автор выражает особую благодарность доктору физико-математических наук, профессору Зимнякову Дмитрию Александровичу за ценные советы и замечания, высказанные в процессе написания статьи.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-22-00333, <https://rscf.ru/project/24-22-00333/>).

Для цитирования: Кочкуров Л. А. Моделирование кинетики деградации проводимости в наноструктурированных низкоразмерных полупроводниковых слоях при длительном воздействии постоянного тока // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 1. С. 62–71. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-62-71>, EDN: LNCIOR

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)

Article

Modelling of conduction degradation kinetics in nanostructured low-dimensional semiconductor layers under long-term DC exposure

L. A. Kochkurov

Yury Gagarin State Technical University of Saratov, 77 Polytechnicheskaya St., Saratov 410054, Russia

Leonid A. Kochkurov, lkochkurov@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-3360-8878>, AuthorID: 645071

Abstract. Background and Objectives: Percolation models are widely employed to analyze electrical transport in disordered systems, particularly near critical thresholds. While substantial research has focused on static percolation properties, the dynamic evolution of such networks under external stimuli, such as constant current, remains less explored. This paper addresses the kinetics of conductivity degradation in nanostructured low-dimensional semiconductor layers (exemplified by nanodispersed In_2O_3 layers) under prolonged DC exposure. A discrete three-dimensional percolation model is developed to simulate the irreversible transition from conducting to dielectric states, driven by carrier trapping at defect sites. **Materials and Methods:** The model implements bond percolation on a cubic lattice of size $300 \times 300 \times 15$ nodes, with lognormal distributed edge conductivities. The initial configuration ensures 32 continuous conducting paths between electrodes, matching experimental data. Kirchhoff's equations are solved numerically to compute node potentials and local current densities. Degradation dynamics are introduced via time-dependent edge conductance reduction, governed by carrier trapping kinetics proportional to local current density. **Results:** Simulations have revealed a two-stage degradation kinetics: an initial quasi-linear voltage increase followed by accelerated growth due to percolation path fragmentation. The model quantitatively reproduces experimental voltage-time characteristics, with deviations under



5% over most of the temporal range. The critical reduction in conducting bond density leads to catastrophic loss of connectivity, consistent with percolation threshold behavior. **Conclusion:** The results demonstrate the applicability of dynamic percolation models to describe non-equilibrium degradation processes in nanostructured semiconductors. The approach provides a foundation for predicting lifetime and reliability of devices based on dispersed semiconductor materials, relevant for sensor and transparent electronics applications. Further model refinements incorporating additional degradation mechanisms (e.g., local heating, electrochemical effects) are suggested for improved late-stage accuracy. **Keywords:** degradation kinetics, nanostructured semiconductors, percolation model, carrier trapping, indium oxide

Acknowledgments: The author expresses special thanks to Prof. Dmitry A. Zimnyakov for valuable advice and comments during the writing of the paper.

This work was supported by the Russian Science Foundation (project No. 24-22-00333, <https://rscf.ru/project/24-22-00333/>).

For citation: Kochkurov L. A. Modelling of conduction degradation kinetics in nanostructured low-dimensional semiconductor layers under long-term DC exposure. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 1, pp. 62–71 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-1-62-71>, EDN: LNCIOR

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC-BY 4.0)

Введение

Современные тенденции в микроэлектронике и оптоэлектронике демонстрируют устойчивый интерес к низкоразмерным наноструктурированным полупроводниковым системам [1–3]. Дисперсные слои на основе оксидов металлов, таких как In_2O_3 , ZnO и TiO_2 , являются важным классом материалов благодаря уникальным электронным и оптическим свойствам [4, 5]. Эти материалы широко применяются в сенсорных устройствах [6–8], прозрачной электронике [9, 10] и тонкоплёночных транзисторах [11, 12], где стабильность характеристик под длительной нагрузкой является критическим фактором надёжности.

Одной из ключевых проблем, ограничивающих широкое практическое применение таких систем, является нестабильность их электрофизических характеристик при длительной эксплуатации, особенно в режиме протекания постоянного тока [13–15]. Последние исследования в этой области выявили общую закономерность, заключающуюся в необратимом переходе из проводящего состояния в состояние, близкое к диэлектрическому. Подобный переход может происходить в результате длительного воздействия постоянного тока. Данное физическое явление связывается с постепенным истощением ансамбля подвижных носителей заряда вследствие их захвата глубокими ловушками [16–18]. Актуальность изучения кинетики этих процессов подчеркивается как фундаментальным интересом к физике переноса заряда в неупорядоченных дисперсных системах, так и прикладной необходимостью прогнозирования надёжности и долговечности устройств на их основе.

Уменьшение характерного размера L активного слоя резко увеличивает отношение площади поверхности к объёму ($\propto L^{-1}$), усиливая влияние поверхностных эффектов на электрофизические свойства¹. В реальных условиях поверхность полупроводника взаимодействует с окружающей средой, что приводит к образованию оксидных плёнок и адсорбции примесей (кислород, пары воды). Структурные дефекты и адсорбированные атомы формируют энергетические состояния у поверхности, выступающие в роли ловушек для носителей заряда. Захват носителей этими ловушками генерирует пространственный заряд и сильное локальное электрическое поле ($\sim 10^5$ В/см), проникающее в приповерхностный слой и существенно модифицирующее электрофизические характеристики: электропроводность, работу выхода, фотоэлектрические явления.

Преобладание ловушек определённого типа (донорных или акцепторных) определяет знак поверхностного заряда, который обычно совпадает со знаком основных носителей в объёме. Возникающий двойной заряженный слой создаёт потенциальный барьер U_s , приводящий к экспоненциальному уменьшению концентрации электронов у поверхности:

$$n_s \approx n_0 \exp\left(-\frac{U_s}{kT}\right), \quad (1)$$

где k – постоянная Больцмана, T – температура [19]. При характерных значениях $U_s \sim 0.5$ – 0.7 эВ формируется обеднённый носителями высокоомный приповерхностный слой.

В наноструктурированных системах, таких как слои наночастиц In_2O_3 [20, 21], поверхностные эффекты становятся доминирующими. Для

¹См.: Бедный Б. И. Электронные ловушки на поверхности полупроводников // Соросовский образовательный журнал. 1998. Т. 7. С. 114–121.



частиц диаметром ~ 100 нм с концентрацией электронов более 10^{19} см $^{-3}$ перераспределение носителей между объёмом и поверхностью приводит к образованию нескомпенсированного заряда и потенциального барьера, аналогичного барьеру Шоттки [22]. Это обуславливает высокую чувствительность проводимости к состоянию поверхности.

Традиционные континуальные модели (диффузии-дрейфа, транспортные) демонстрируют ограниченную применимость, так как не учитывают дискретную природу переноса заряда в дисперсных средах с прыжковым механизмом проводимости. При длине свободного пробега носителей, сопоставимой с размером структурных неоднородностей, макроскопические свойства критически зависят от статистики и эволюции конечного числа проводящих мостиков между электродами.

Перколяционные подходы предоставляют адекватный инструментарий для анализа подобных систем, позволяя явно учитывать пространственное распределение проводящих фаз, разброс локальных проводимостей и топологию межчастичных контактов. Однако многие перколяционные модели описывают систему с неизменной во времени структурой проводящей сети и не учитывают микроскопические механизмы деградации, индуцированные током.

Целью данной работы является разработка комплексной модели кинетики деградации проводимости в наноструктурированных слоях In_2O_3 , сформированных капельным методом на подложках со встречно-штыревыми электродами, при длительном воздействии постоянного тока.

1. Математическая модель кинетики деградации проводимости в наноструктурированных полупроводниковых слоях

Моделирование кинетики деградации омической проводимости в низкоразмерных дисперсных полупроводниковых слоях, подверженных длительному воздействию постоянного тока, требует адекватного учёта их структурной неоднородности и дискретной природы переноса заряда. Перенос заряда осуществляется по конечному числу дискретных проводящих путей (мостиков) между электродами, подверженных постепенной деградации под действием тока, что приводит к наблюдаемому переходу системы из проводящего в непроводящее состояние. В качестве основы для анализа процесса

деградации проводимости выбрана трёхмерная дискретная сетевая модель, реализующая подход теории перколяции.

Модель построена на трёхмерной кубической решётке размером 300 узлов по оси Y , 300 узлов по оси Z и 15 узлов по оси X . Межэлектродное расстояние в экспериментальной системе соответствует размеру по оси X . Значительные размеры в плоскости YZ (300×300 узлов) обусловлены двумя факторами: обеспечением репрезентативности моделирования статистически неоднородной дисперсной среды для корректного усреднения свойств и гарантией достижения экспериментально наблюдаемого количества проводящих путей без искусственного завышения вероятности перколяции. Electroды представлены слоями узлов при $X = 1$ и $X = 15$. На электрод ($X = 1$) подаётся напряжение V_{app} , электрод ($X = 15$) заземляется ($\phi = 0$ В), создавая электрическое поле, направленное вдоль оси X , величина которого изменяется во времени вследствие деградации.

На рис. 1 показан фрагмент перколяционной сети ($15 \times 15 \times 15$ узлов), иллюстрирующий морфологию типичного проводящего кластера (чёрный цвет), формирующего сквозной мостик между электродами. Кластер характеризуется разветвлённой топологией с критическими «узкими местами», где разрыв связи приводит к разрушению пути. Серым цветом обозначены нефункциональные элементы: изолированные связи и фрагменты кластеров («мёртвые концы», локальные петли). Визуализация подчёркивает стохастичность формирования проводящих путей.

Каждый узел решётки случайно назначается проводящим (вероятность p) или изолирующим ($1 - p$), формируя двухфазную среду. Однако возможность протекания тока определяется проводимостями рёбер между соседними узлами, что соответствует модели перколяции по связям (bond percolation). Этот выбор физически обоснован для наноструктурированных слоёв, где проводимость между наночастицами (узлами) обуславливается свойствами межчастичных контактов (рёбер) [23–25]. Соппротивление этих контактов является лимитирующим фактором, определяющим скорость и характер деградации. Ребро между узлами l и m получает ненулевую проводимость g_{lm} только при условии, что оба узла проводящие. Для учёта неоднородности локальных свойств структуры, проводимость

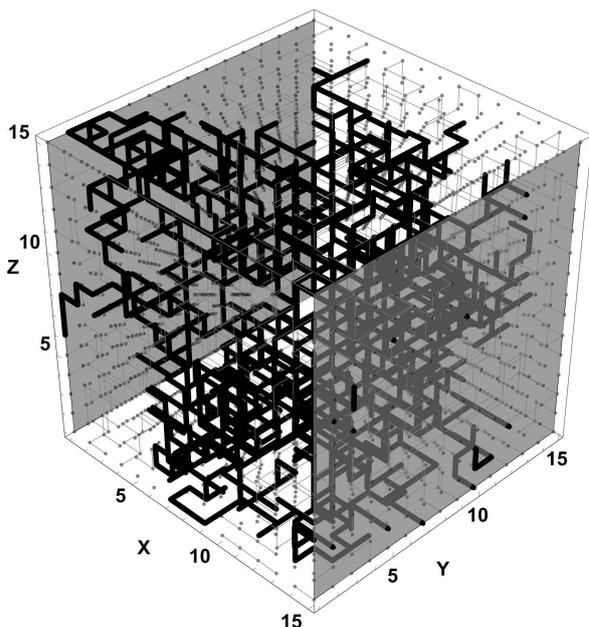


Рис. 1. Трёхмерная визуализация перколяционной сети ($15 \times 15 \times 15$ узлов): непрерывный кластер между противоположными гранями (цвет – чёрный), изолированные связи и фрагменты (цвет – серый). Вероятность проводящего узла $p = 0.27$

Fig. 1. Three-dimensional visualisation of a percolation network ($15 \times 15 \times 15$ nodes): continuous cluster between opposite edges (black), isolated connections and fragments (grey). Probability of a conducting node $p = 0.27$

каждого ребра задаётся как случайная величина, распределённая по логнормальному закону:

$$\ln(g_{lm}) \sim N(\mu_g, \sigma_g^2).$$

Логнормальное распределение адекватно описывает широкий диапазон проводимостей в дисперсных системах и гарантирует их положительную определённость. Параметры μ_g (математическое ожидание логарифма проводимости) и σ_g (стандартное отклонение) определяются совместно с другими структурными параметрами на основе экспериментальных данных для слоёв In_2O_3 , обеспечивая физическую релевантность модели.

Параметризация и верификация модели проводились на основе экспериментальных данных, полученных для наноструктурированных слоёв оксида индия (In_2O_3) [17]. Исходные образцы формировались методом осаждения водных суспензий наночастиц In_2O_3 (продукт Puraterm, CAS #1312-43-2, средний диаметр ≈ 80 нм, США) на поверхность кремниевых подложек со встречно-штыревыми системами платиновых электродов. Межэлектродный зазор составлял $l = 44.9 \pm 4.0$ мкм, ширина электродов

54.2 ± 5.2 мкм, толщина ≈ 1.6 мкм. Рабочая зона подложек имела размер 4.26×3.84 мм². После 30-минутной ультразвуковой обработки суспензии и осаждения каплей объемом 8 мкл с объемной долей частиц $\approx 2.1 \cdot 10^{-7}$ формировались ансамбли межэлектродных мостиков. Микроскопический (прибор MX51 от компании Olympus, Япония) и профилометрический (прибор Dektak 150 от компании Veeco, США) анализ показал, что мостики характеризовались средней шириной $w \approx 55$ мкм и толщиной $h \approx 108$ нм. Среднее количество мостиков в пределах рабочей зоны подложки составляло $N \approx 32$. Эксперименты по исследованию кинетики деградации проводимости проводились при пропускании постоянного тока величиной 1 нА (прибор SRS CS-580 от компании Stanford Research Systems, США). Падение напряжения $U(t)$ на образце регистрировалось с частотой дискретизации 20 Гц (прибор Agilent 34401A от компании Agilent Technologies, США) до достижения предельного значения 20 В для предотвращения пробоя. Геометрический масштаб модели ($300 \times 300 \times 15$ узлов) соответствует экспериментальной системе: расстояние между электродами (15 узлов) нормировано на межэлектродный зазор, а большая площадь YZ -плоскости обеспечивает репрезентативную статистику проводящих путей. Вероятность p назначения узла проводящим калибруется итерационно до достижения 32 непрерывных перколяционных кластеров между электродами.

Данная параметризация позволяет установить связь между модельными и экспериментальными данными, а также даёт возможность интерпретировать результаты через физические механизмы заполнения ловушек и деградацию межчастичных контактов. Универсальный характер уравнений переноса и кинетики деградации обеспечивает экстраполяцию модели на родственные материалы (например, TiO_2), демонстрирующие аналогичные переходы «полупроводник–диэлектрик». Детали экспериментальных методик приведены в соответствующем исследовании [16].

Распределение электрического потенциала ϕ_l в узлах определяется решением системы уравнений, вытекающих из законов Кирхгофа. Для каждого внутреннего узла l применяется первый закон Кирхгофа:

$$\sum_m I_{lm} = 0, \quad (2)$$



где ток I_{lm} через связь между узлами l и m определяется законом Ома:

$$I_{lm} = g_{lm}(\Phi_l - \Phi_m). \quad (3)$$

Подстановка (3) в (2) даёт систему линейных уравнений относительно потенциалов узлов:

$$\sum_m g_{lm}(\Phi_l - \Phi_m) = 0 \quad (4)$$

с граничными условиями $\Phi = V_{\text{app}}$ при $X = 1$ и $\Phi = 0$ при $X = 15$. Полученная система уравнений является крупноразмерной (порядка $300 \times 300 \times 15 = 1350000$ уравнений) но разреженной, так как каждое уравнение связано только с ближайшими соседями узла. Удобнее всего записывать её в матричной форме $A \cdot \Phi = B$, где A – разреженная симметричная матрица, а Φ – вектор, состоящий из неизвестных потенциалов поля. Для нахождения решения использовался оператор матричного левого деления MATLAB (\backslash), который инкапсулирует выбор и выполнение наиболее подходящего численного метода (например, LU-, QR-разложения) в зависимости от характеристик матрицы A . Решение Φ вычислялось непосредственно по формуле $\Phi = A \backslash B$. Протекание постоянного тока через перколяционную сеть обеспечивает непрерывный поток электронов, доступных для захвата указанными ловушками.

В рамках анализа деградации проводимости перколяционных сетей наночастиц In_2O_3 рассматриваются два взаимосвязанных механизма: снижение концентрации носителей заряда и формирование потенциального барьера на межчастичных контактах. Выбор в модели в пользу механизма, связанного с возникновением межчастичного барьера, в качестве определяющего, основан на анализе экспериментально наблюдаемой кинетики деградации. Косвенным, но убедительным подтверждением влияния именно этого механизма служат такие особенности, как крайне низкая скорость релаксации проводимости после снятия тока, свидетельствующая о необратимости захвата носителей, и нелинейный (ускоряющийся) характер роста сопротивления, указывающий на кооперативный характер разрыва проводящих путей по мере увеличения барьеров [16–18]. Эти экспериментальные факты находят последовательное объяснение в рамках гипотезы о необратимом захвате носителей глубокими ловушками, который приводит к генерации локального пространственного заряда в области контактов между частицами и, как

следствие, к значительному увеличению высоты потенциального барьера. Следует отметить, что детальное исследование относительного вклада каждого механизма представляет собой отдельную комплексную задачу, требующую дополнительного изучения с учётом электростатических взаимодействий, кинетики захвата носителей и пространственного распределения потенциала. Указанная гипотеза позволяет перейти к построению модели кинетики деградации проводимости, основанной на динамике заполнения ловушек.

Кинетика заполнения ловушек на контакте описывается упрощённым скоростным уравнением для плотности занятых ловушек n_t , где пренебрегаем процессом термического освобождения электронов, фокусируясь на необратимом захвате под действием тока. Такое приближение оправдано в условиях комнатной температуры и рассматриваемых временных масштабов эксперимента (десятки минут), для которых вероятность термической эмиссии из глубоких ловушек с энергией активации более 0.5–0.7 эВ пренебрежимо мала. Это подтверждается экспериментально наблюдаемой крайне низкой скоростью релаксации проводимости после снятия тока [16, 17], что указывает на стабильность занятого состояния ловушек в отсутствие внешних воздействий. Отметим, что данное приближение для кинетики захвата не исключает термоэмиссионного характера переноса заряда свободными носителями через межчастичные барьеры. Этот аспект учитывается в модели отдельно. Уравнение для плотности занятых ловушек n_t запишем в виде:

$$\frac{dn_t}{dt} = \frac{j\sigma_c}{e}(N_t - n_t). \quad (5)$$

Здесь j – плотность тока через контакт, σ_c обозначает эффективное сечение захвата ловушки, N_t – полную плотность ловушек в области контакта. Уравнение отражает тот факт, что скорость захвата пропорциональна плотности тока и числу доступных (свободных) ловушек $(N_t - n_t)$. Решение этого уравнения для начального условия $n_t(0) = 0$ даёт экспоненциальный рост плотности занятых ловушек со временем:

$$n_t(t) = N_t(1 - \exp(-j\sigma_c t/e)). \quad (6)$$

Каждая занятая ловушка создает локальный отрицательный заряд в области межчастичного контакта. В свою очередь совокупность таких зарядов формирует пространственную область



с потенциалом $\Delta\phi$, пропорциональным плотности зарядов n_i :

$$\Delta\phi = \gamma n_i. \quad (7)$$

Коэффициент γ выступает параметром модели, количественно определяющим вклад плотности заряженных ловушек n_i в изменение высоты потенциального барьера $\Delta\phi$. Физически γ может определяться такими признаками, как геометрией контакта (радиус кривизны частиц, ширина зазора), диэлектрической проницаемостью среды ϵ , распределением ловушек в пространстве.

В свою очередь возникающий потенциал $\Delta\phi$ проявляется как эффективность экранирования зарядами, что выражается в создании дополнительного кулоновского барьера для электронов, локальном искривлении зонной структуры, а также увеличении эффективной работы выхода².

Для термоэмиссионного механизма зависимость локальной плотности тока j принимает вид

$$\begin{aligned} j &= j_0 \exp\left(-\frac{e(\phi_b + \Delta\phi)}{k_B T}\right) = \\ &= j_0 \exp\left(-\frac{e\phi_b}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{e\gamma n_i}{k_B T}\right). \end{aligned} \quad (8)$$

Термоэмиссионный механизм в формуле (8) описывает перенос электронов через потенциальный барьер на межчастичном контакте, формирующем ребро перколяционной сети, и определяет локальную проводимость этого ребра. Таким образом, в модели термоэмиссия отвечает за механизм электронного транспорта между частицами, что фундаментально отличается от процесса термического освобождения электронов из ловушек, которым в рамках принятых допущений мы пренебрегаем. На макроскопическом уровне, в рамках теории перколяции, статическая проводимость σ_{dc} всей сети определяется проводимостью бесконечного перколяционного кластера и вблизи порога перколяции p_c (доли проводящих связей) подчиняется степенному закону: $\sigma_{dc} \propto (p - p_c)^{\mu_p}$ [26]³, где μ_p – критический индекс проводимости. Каждая связь в сети (межчастичный контакт) характеризуется своей эффективной проводимостью g_i , зависящей от локального барьера. По мере накопления заряда на ловушках в области контакта, локальный барьер $\Delta\phi_i$ возрастает, что приводит к уменьшению g_i . При превышении $\Delta\phi_i$ некоторого критического значения $\Delta\phi_{crit}$, вклад данной

связи в общую проводимость сети становится пренебрежимо малым, то есть связь эффективно «разрывается». Таким образом, процесс захвата электронов током вызывает уменьшение доли p эффективно проводящих связей в сети: $p(t, j) = p_0 - a n_i(t, j)$, где p_0 – исходная доля проводящих связей, a – коэффициент, связывающий среднюю по сети плотность заряженных ловушек с долей разорванных связей, а $n_i(t, j)$ – средняя плотность занятых ловушек, растущая со временем под действием тока.

Подстановка выражения для $p(t, j)$ в закон перколяции дает модель для деградации полной проводимости системы:

$$\sigma_{dc}(t) \propto [p_0 - a N_i (1 - \exp(-\sigma_c j t)) - p_c]^{\mu_p}. \quad (9)$$

Поскольку выражение в квадратных скобках монотонно уменьшается со временем при постоянной плотности тока j , проводимость $\sigma_{dc}(t)$ также монотонно снижается. Начальная скорость деградации прямо пропорциональна плотности тока j и полной плотности ловушек N_i . На больших временах $t \gg (\sigma_c j)^{-1}$ плотность занятых ловушек приближается к насыщению $n_i \approx N_i$, а проводимость асимптотически стремится к значению, определяемому выражением $[p_0 - a N_i - p_c]^{\mu_p}$. Критичность системы проявляется в том, что если $p_0 - a N_i \leq p_c$, то при насыщении ловушек проводимость падает до нуля. Представленная модель, основанная на кинетике необратимого захвата электронов ловушками на межчастичных контактах под действием постоянного тока, объясняет наблюдаемое снижение проводимости перколяционных нанокластеров In_2O_3 . Она количественно связывает скорость и степень деградации с плотностью тока, временем воздействия и фундаментальными параметрами материала – плотностью и сечением захвата ловушек, а также перколяционными характеристиками сети. Управление плотностью поверхностных ловушек через синтез и обработку поверхности наночастиц In_2O_3 составляет основу стратегии повышения устойчивости таких систем к деградации под током.

2. Математическое обоснование перехода к упрощенной модели деградации проводимости

Покажем, что при выполнении определенных условий может быть осуществлен переход к упрощенной модели деградации проводимости.

²См.: Левинштейн М. Б., Симин Г. С. Барьеры (От кристалла до интегральной схемы). М.: Наука, 1987. 320 с. (Библиотечка «Квант». Вып. 65).

³См. также: Эфрос А. Л. Физика и геометрия беспорядка. М.: Наука, 1982. 176 с. (Библиотечка «Квант». Вып. 19).



Исходная модель деградации (5), учитывающая насыщение вследствие конечной плотности ловушек, описывается системой уравнений для единичного контакта. Кинетика заполнения ловушек определяется дифференциальным уравнением:

$$\frac{df_i}{dt} = \kappa j(1 - f_i), \quad (10)$$

где $f_i = n_i/N_i$ представляет безразмерную долю занятых ловушек ($0 \leq f_i \leq 1$), $\kappa = \sigma_c/e$ является эффективной константой скорости захвата, характеризующей вероятность захвата электрона на единицу плотности тока. Решение этого уравнения при начальном условии $f_i(0) = 0$ дается выражением:

$$f_i(t) = 1 - e^{-\kappa jt}. \quad (11)$$

Учитывая, что в рамках термоэмиссионного механизма локальная проводимость пропорциональна плотности тока ($\sigma \propto j$), и принимая во внимание уравнение (8), можно записать:

$$\sigma(t) = \sigma_0 \exp(-\beta f_i), \quad (12)$$

где σ_0 – начальная проводимость, а $\beta = e\gamma N_i/k_B T$ – параметр, характеризующий чувствительность проводимости к заполнению ловушек. Подстановка решения для $f_i(t)$ дает точное выражение для эволюции проводимости:

$$\sigma(t) = \sigma_0 \exp[-\beta(1 - e^{-\kappa jt})]. \quad (13)$$

Для перехода к упрощенной модели рассмотрим начальную стадию процесса деградации, когда выполнено условие $\kappa jt \ll 1$. Физически это означает, что время наблюдения существенно меньше характерного времени насыщения $\tau_{\text{sat}} = (\kappa j)^{-1} = e/\sigma_c j$, и доля заполненных ловушек мала $f_i \ll 1$. Применим разложение экспоненты в ряд Тейлора, ограничиваясь линейными членами:

$$e^{-\kappa jt} \approx 1 - \kappa jt. \quad (14)$$

Тогда выражение для $f_i(t)$ упрощается до:

$$f_i(t) \approx 1 - (1 - \kappa jt) = \kappa jt. \quad (15)$$

Подстановка этого приближения в формулу для проводимости дает:

$$\sigma(t) \approx \exp(-\alpha jt), \quad (16)$$

где параметр $\alpha = \beta\kappa = \frac{\gamma N_i \sigma_c}{k_B T}$ характеризует скорость деградации проводимости с течением времени.

Хорошее согласие с экспериментальными данными в нашем случае объясняется тем, что наблюдения проводились в области параметров, где условия применимости приближения выполняются. Для экстраполяции результатов за пределы начальной стадии деградации или при существенно больших плотностях тока рекомендуется использовать полную модель с насыщением, обеспечивающую более широкую физическую адекватность.

3. Полученные результаты и их сравнение с экспериментальными данными

Анализ зависимости количества непрерывных проводящих путей между электродами от доли проводящих узлов p в перколяционной сети необходим для установления связи между микроструктурными изменениями в наноструктурированном слое и макроскопическими электротранспортными свойствами. Данная зависимость (рис. 2) количественно характеризует процесс фрагментации проводящей фазы при прогрессирующей деградации, моделируемой снижением p .

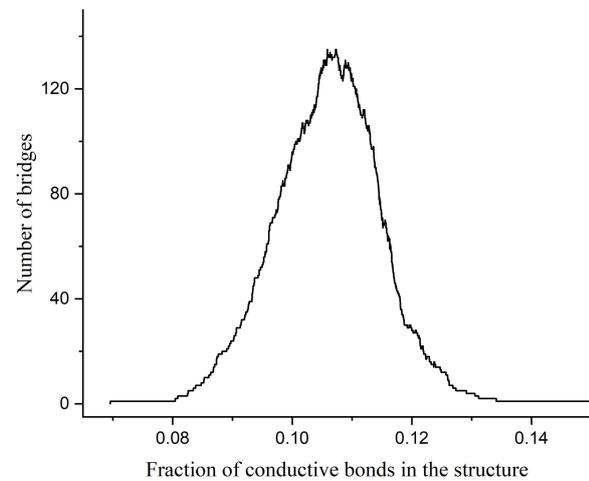


Рис. 2. Эволюция числа проводящих мостиков при уменьшении относительной плотности связей в трехмерной решетке размером $300 \times 300 \times 15$

Fig.2. Evolution of the number of bridges as the relative bond density decreases in a three-dimensional lattice of size $300 \times 300 \times 15$

При исходном значении $p \approx 0.159$ система содержит единый проводящий кластер, соединяющий электроды, что соответствует монолитному состоянию проводящей фазы. Уменьшение p до значений порядка 0.135–0.125 сопровождается увеличением количества мостиков до 15–16, что свидетельствует о фрагментации исходного кластера на параллельные проводящие пути.

Максимальное количество мостиков наблюдается в диапазоне $p \approx 0.105-0.11$. Дальнейшее снижение p ниже 0.125 приводит к резкому уменьшению количества мостиков вплоть до их полного исчезновения при $p \leq 0.08$.

Увеличение количества мостиков при уменьшении p является следствием топологической перестройки перколяционного кластера. В начальном состоянии ($p \approx 0.159$) проводящая фаза образует единый разветвленный кластер с избыточными связями. Удаление части узлов (снижение p) первоначально разрушает периферийные элементы кластера («мёртвые концы» и избыточные связи), не затрагивая основные сквозные пути. При достижении критических значений p происходит разделение единого кластера на несколько независимых проводящих путей из-за разрыва узлов, соединяющих крупные субкластеры. Последующее уменьшение p ниже значения, соответствующего максимальной фрагментации, приводит к тому, что скорость разрушения существующих независимых путей начинает преобладать над скоростью их образования за счет фрагментации более крупных кластеров. Это объясняется тем, что общее количество проводящих связей в системе становится недостаточным для поддержания сложной разветвленной структуры, способной к эффективной перестройке. В результате наблюдается монотонное снижение количества проводящих мостиков. Полное исчезновение мостиков при $p \leq 0.08$ соответствует достижению перколяционного порога, когда система теряет сквозную проводимость.

Полученная зависимость объясняет нелинейный характер деградации проводимости в экспериментальных системах. Наличие множества параллельных мостиков в диапазоне $p \approx 0.105-0.11$ обеспечивает устойчивость системы к локальным разрывам связей, тогда как крутой спад количества путей при $p < 0.105$ соответствует фазе катастрофического снижения проводимости перед переходом в диэлектрическое состояние.

Для анализа кинетики изменения ансамбля подвижных носителей заряда в наноструктурированных слоях In_2O_3 при деградации омической проводимости под действием постоянного тока регистрировалось падение напряжения на структуре.

На рис. 3 представлены экспериментальная и модельная зависимости падения напряжения

$U(t)$. Обе кривые демонстрируют схожую двухстадийную кинетику. На начальном участке (I, 0–400 с) наблюдается квазилинейный рост напряжения со средней скоростью ≈ 0.025 В/с. Данный режим соответствует постепенному обеднению ансамбля подвижных носителей вследствие захвата на ловушки.

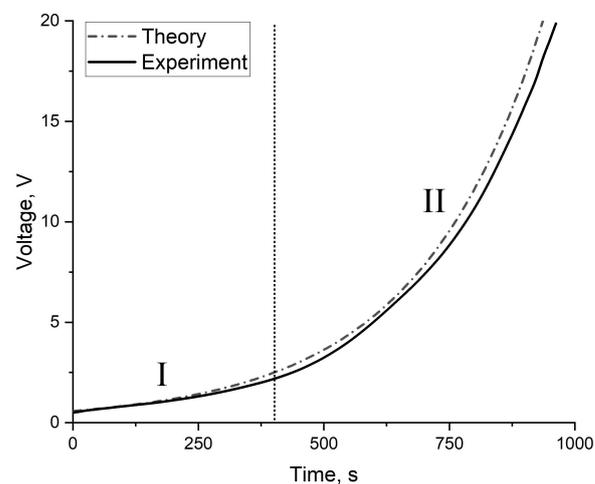


Рис. 3. Сравнение теоретического и экспериментального результатов эволюции зависимости напряжения на контактах $U(t)$ для исследуемого образца In_2O_3

Fig.3. Comparison of theoretical and experimental results of the evolution of the voltage dependence on contacts $U(t)$ for the studied sample In_2O_3

При $t > 400$ с (участок II) наблюдается нелинейное ускорение роста напряжения, достигающее максимальной скорости ≈ 0.045 В/с при $t \approx 900$ с. Эта стадия соответствует критической фрагментации проводящих путей при приближении к перколяционному порогу. Экспоненциальный характер роста на участке II обусловлен кооперативным характером разрушения перколяционной сети: разрыв отдельных связей увеличивает плотность тока на оставшихся путях, ускоряя их деградацию.

Модельная кривая качественно воспроизводит экспериментальные данные с максимальным отклонением $\leq 5\%$ на всем временном интервале. Наибольшее расхождение $\approx 4.7\%$ наблюдается в переходной области между стадиями I и II ($t \approx 350-450$ с). Наблюдаемое увеличение расхождения между моделью и экспериментом на поздних стадиях деградации может быть объяснено несколькими факторами. Во-первых, модель предполагает равномерность деградации, зависящей только от локального тока в связи. В реальной системе наночастиц In_2O_3 могут существовать дополнительные механизмы деградации, такие как термические эффекты из-за



локального нагрева в областях с высокой плотностью тока, или электрохимические процессы, активирующиеся при сравнительно высоких напряжениях. Эти факторы не учтены в текущей версии модели и могут приводить к ускоренному росту сопротивления в эксперименте. Во-вторых, предположение о постоянной величине α в законе деградации может быть упрощением; показатель α сам может зависеть от локальных условий (температуры, степени деградации материала связи). В-третьих, модель использует идеализированную кубическую решетку, в то время как реальная морфология стохастических мостиков из наночастиц характеризуется большей нерегулярностью, флуктуациями в контактном сопротивлении между частицами и возможным наличием кластеров сложной формы, влияющих на распределение токов.

Заключение

Разработанная дискретная перколяционная модель, основанная на расчете распределения токов в решетке и электростимулированной деградации связей, успешно воспроизводит качественную картину кинетики деградации напряжения в стохастических структурах из наночастиц In_2O_3 на подложках с встречно-штыревыми электродами. Модель демонстрирует хорошее количественное согласие с экспериментом на начальных и средних стадиях процесса. Наблюдаемое усиление расхождения на поздних стадиях деградации указывает на необходимость уточнения модели путем включения дополнительных физических механизмов разрушения, актуальных для реальных наноматериалов, таких как окисление или локальный перегрев. Полученные результаты подтверждают адекватность перколяционного подхода для описания электропроводности и ее деградации в системах со стохастической наноструктурой и предоставляют основу для прогнозирования долговечности подобных устройств. Дальнейшая работа будет направлена на усовершенствование модели с учетом выявленных факторов для достижения более точного количественного соответствия на всех этапах деградационного процесса.

Список литературы / References

1. Singh S., Das S., Ray S. K. Progress in group-IV semiconductor nanowires based photonic devices. *App. Phys. A*, 2023, vol. 129, art. 216. <https://doi.org/10.1007/s00339-023-06483-7>
2. Sohail M. T., Wang M., Shareef M., Yan P. A review of ultrafast photonics enabled by metal-based nanomaterials: Fabrication, integration, applications and future perspective. *Infrared Phys. Technol.*, 2024, vol. 137, art. 105127. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2024.105127>
3. Chao J., Wang G., Qiu P., Sun H., Wang Y., Duan X., Zhang J., Lyu Y., Ahmad I., Fu B. Optical properties and applications of metal nanomaterials in ultrafast photonics: A review. *J. Mater. Sci.*, 2024, vol. 59, iss. 29, pp. 13433–13461. <https://doi.org/10.1007/s10853-024-09993-8>
4. Raha S., Ahmaruzzaman M. ZnO nanostructured materials and their potential applications: Progress, challenges and perspectives. *Nanoscale Advances*, 2022, vol. 4, iss. 8, pp. 1868–1925. <https://doi.org/10.1039/D1NA00880C>
5. Noreen S., Tahir M. B., Hussain A., Nawaz T., Rehman J. U., Dahshan A., Alrobei H. Emerging 2D-Nanostructured materials for electrochemical and sensing Application-A review. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2022, vol. 47, iss. 2, pp. 1371–1389. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2021.10.044>
6. Ansari A., Ahmed S., Siddiqui M. A., Khan A., Tailor S., Kumar P., Negi D. S. PEDOT: PSS, TiO_2 nanoparticles and carbon quantum dot composites as ultraviolet sensors. *ACS Applied Nano Materials*, 2024, vol. 7, iss. 8, pp. 9789–9799. <https://doi.org/10.1021/acsnm.4c01897>
7. Ren X., Xu Z., Liu D., Li Y., Zhang Z., Tang Z. Conductometric NO_2 gas sensors based on MOF-derived porous ZnO nanoparticles. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 2022, vol. 357, art. 131384. <https://doi.org/10.1016/j.snb.2022.131384>
8. de Lima B. S., Komorizono A. A., Ndiaye A. L., Bernardi M. I. B., Brunet J., Mastelaro V. R. Tuning the gas sensing properties of rGO with In_2O_3 nanoparticles. *Surfaces*, 2022, vol. 5, iss. 1, pp. 127–142. <https://doi.org/10.3390/surfaces5010006>
9. Kumar N., Patel M., Nguyen T. T., Kim S., Kim J. Effect of TiO_2 layer thickness of TiO_2/NiO transparent photovoltaics. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 2021, vol. 29, iss. 8, pp. 943–952. <https://doi.org/10.1002/pip.3419>
10. Tran M. H., Bae J. S., Hur J. Self-powered, transparent, flexible and solar-blind deep-UV detector based on surface-modified TiO_2 nanoparticles. *Applied Surface Science*, 2022, vol. 604, art. 154528. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.154528>
11. Ge S., Sang D., Zou L., Yao Y., Zhou C., Fu H., Wang C. A review on the progress of optoelectronic devices based on TiO_2 thin films and nanomaterials. *Nanomaterials*, 2023, vol. 13, iss. 7, art. 1141. <https://doi.org/10.3390/nano13071141>
12. Sun S., Zhang M., Bian J., Xu T., Su J. $\text{In}_2\text{O}_3/\text{ZnO}$ heterojunction thin film transistor for high recognition accuracy neuromorphic computing and optoelectronic artificial synapses. *Nanotechnology*, 2024, vol. 35, no. 36, art. 365602. <https://doi.org/10.1088/1361-6528/ad5685>



13. Coetzee D., Venkataraman M., Militky J., Petru M. Influence of nanoparticles on thermal and electrical conductivity of composites. *Polymers*, 2020, vol. 12, iss. 4, art. 742. <https://doi.org/10.3390/polym12040742>
14. Khelifa H., Beroual A., Vagnon E. Effect of conducting and semiconducting nanoparticles on the AC breakdown voltage and electrostatic charging tendency of synthetic ester. *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, 2023, vol. 30, iss. 4, pp. 1414–1421. <https://doi.org/10.1109/TDEI.2023.3261825>
15. Lund P. D., Hashmi G., Ma Y., Patakangas J., Jing Y. Degradation and stability of nanostructured energy devices. *Microelectronic Engineering*, 2014, vol. 126, pp. 49–53. <https://doi.org/10.1016/j.mee.2014.05.002>
16. Zimnyakov D., Volchkov S., Vasilkov M., Plugin I., Varezhnikov A., Gorshkov N., Ushakov A., Tokarev A., Tsy-pin D., Vereshagin D. Semiconductor-to-insulator transition in inter-electrode bridge-like ensembles of anatase nanoparticles under a long-term action of the direct current. *Nanomaterials*, 2023, vol. 13, iss. 9, pp. 1490–1506. <https://doi.org/10.3390/nano13091490>
17. Kochkurov L. A., Volchkov S. S., Vasilkov M. Y., Plugin I. A., Klimova A. A., Zimnyakov D. A. Degradation of conductivity of low-dimensional nanostructured semiconductor layers under long-term dc current flow. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2024, vol. 24, iss. 1, pp. 41–51 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2024-24-1-41-51>, EDN: AUQNBD
18. Kochkurov L. A., Tsy-pin D. V., Volchkov S. S., Zimnyakov D. A. Specific features of charge transfer fluctuations in disperse structures based on anatase nanoparticles near the percolation threshold. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2024, vol. 24, iss. 3, pp. 262–270 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2024-24-3-262-270>, EDN: RHDYLS
19. Sze S. M., Li Y., Ng K. K. *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, Inc., 2021. 944 p. (Russ. ed: Moscow, Mir, 1984, vol. 1. 455 p.)
20. Chatratin I., Sabino F. P., Reunchan P., Limpijumnong S., Varley J. B., Van de Walle C. G., Janotti A. Role of point defects in the electrical and optical properties of In₂O₃. *Phys. Rev. Mater.*, 2019, vol. 3, iss. 7, art. 074604. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.3.074604>
21. Kozhushner M. A., Lidskii B. V., Oleynik I. I., Posvyanskii V. S., Trakhtenberg L. I. Inhomogeneous charge distribution in semiconductor nanoparticles. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2015, vol. 119, iss. 28, pp. 16286–16292. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b01410>
22. Malagu C., Guidi V., Stefancich M., Carotta M. C., Martinelli G. Model for Schottky barrier and surface states in nanostructured n-type semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 2002, vol. 91, iss. 2, pp. 808–814. <https://doi.org/10.1063/1.1425434>
23. Šuvakov M., Tadić B. Modeling collective charge transport in nanoparticle assemblies. *Journal of Physics Condensed Matter*, 2010, vol. 22, iss. 16, art. 163201. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/22/16/163201>
24. Cho I., Song Y., Cheong S., Kim Y., Cho, J. Layer-by-layer assembled oxide nanoparticle electrodes with high transparency, electrical conductivity and electrochemical activity by reducing organic linker-induced oxygen vacancies. *Small*, 2020, vol. 16, iss. 8, art. 1906768. <https://doi.org/10.1002/sml.201906768>
25. Spencer M. P., Alsaati A. A., Park J. E., Nogueira Branco R. B., Marconnet A., Yamamoto N. Tuning interparticle contacts and transport properties of Maghemite–Thermoset nanocomposites by applying oscillating magnetic fields. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2022, vol. 14, iss. 14, pp. 16601–16610. <https://doi.org/10.1021/acsami.2c00331>
26. Shklovskii B. I., Efros A. L. *Electronic properties of doped semiconductors*. Springer Series in Solid-State Sciences, vol. 45. Berlin, Springer, 1984. xii+388 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-02403-4> (Russ. ed: Moscow, Nauka, 1979. P. 126–128, 133–139, 159–165).

Поступила в редакцию 11.09.2025; одобрена после рецензирования 07.10.2025; принята к публикации 10.10.2025; опубликована 31.03.2026

The article was submitted 11.09.2025; approved after reviewing 07.10.2025; accepted for publication 10.10.2025; published 31.03.2026