基于铁电场效应晶体管的随机计算概率比特

Sheng Luo*、Yihan He、Baofang Cai、Xiao Gong、Gengchiau Liang*
新加坡国立大学电气与计算机工程系，新加坡 117576

摘要：

概率比特（p-bit）是随机计算电路网络中的基本构建模块，能够生成概率可调的连续随机比特流。我们利用少畴铁电材料（FE）的随机性，首次提出了基于铁电场效应晶体管的概率比特。铁电概率比特的随机性源于热噪声诱导的晶格振动，该振动会引起偶极子涨落，且可通过外电场进行调节。我们评估了若干关键铁电参数对概率比特随机性的影响，并揭示了畴特性在其中发挥着至关重要的作用。此外，我们通过基于铁电概率比特的电路网络实现整数分解，以验证其功能，并发现其准确度取决于铁电概率比特的随机性。所提出的铁电概率比特兼具硬件成本极低和与CMOS技术兼容的优势，因此有望成为随机计算应用的理想候选方案。

引言

基于图灵机和冯·诺依曼架构的经典计算机是当今信息社会的核心。在标准二进制计算电路中，信息由确定且稳定的单元存储和处理，例如晶体管的开/关状态。然而，经典计算机无法高效解决许多计算难题，例如组合优化问题（COP）[1], 整数分解（IF）[2], 贝叶斯推断[3], 等。这些问题通常具有庞大的子集规模，而在经典单向电路中，其计算复杂度会呈指数级增长。因此，随机计算（SC）被视为克服这些技术挑战的替代方案[4] 。与传统二进制电路中确定性的“比特”相比，随机计算采用称为概率比特（p-bit）的不稳定单元[4]作为构建模块；这些单元能够在二进制状态0和1之间快速波动，从而产生连续的随机电报信号。更重要的是，与其他具有随机特性的器件不同，概率比特的行为具有可调概率，并与外部控制信号呈S形关系。概率比特的随机特性不仅能够以低于标准逻辑元件的成本实现某些算术运算[5-6], ，还提供了一种容错性较高的计算方法，可应对瞬态错误或工艺变化引起的错误[7]。因此，基于概率比特网络的随机计算已被视为一种实用的计算方案，适用于要求小尺寸、低功耗和软错误容忍度的系统 [7]。它也是图像识别[8], 、神经网络[9], 和机器学习[10]的重要解决方案。

基于不同的概率生成与调节机制，已有多种 p-bit 设计方案被提出。近年来，研究已证明，基于 CMOS 的 p-bit

可以利用全 CMOS 模块，例如线性反馈移位寄存器（LFSR）[11-12]和现场可编程门阵列（FPGA）[13], , 为随机计算应用引入伪随机比特流。尽管基于 CMOS 的 p-bit 与 CMOS 工艺节点天然兼容，但其器件密度较高（通常多达数千个晶体管），且能耗较大 [14]。相比之下，另一种基于磁隧道结（MTJ）的 p-bit 设计[2,14] 硬件成本显著更低，因为该 p-bit 采用 1T（晶体管）+1M（MTJ）或 1R（电阻器）+1M 结构。相对较低的器件密度也将能耗降至每个 p-bit 仅几飞焦[14]。此外，与基于 CMOS 的 p-bit 将伪噪声用作随机性源不同，MTJ p-bit 利用铁磁材料（FM）中由热噪声诱导的真正随机性。尽管 MTJ p-bit 具有硬件成本和功耗极低的优势，但复杂的缩放工艺以及与 CMOS 工艺节点的兼容性仍为其在大规模 p-bit 网络中的应用带来了重大挑战。

与铁磁性系统中的随机性类似，铁电材料（FE）的动态行为也具有随机性，因此有望用于概率比特设计。铁电系统中一种常见的随机特性，可从一系列脉冲 [15-20]作用下的重复开关过程中观察到。晶粒之间开关阈值的差异，会导致连续进行的每次开关过程各不相同。基于这一特性，研究人员提出了基于铁电场效应晶体管（FeFET）和铁电隧道结（FTJ）的真随机数发生器 [15] 和随机脉冲神经元 [19] 。采用蒙特卡洛方案实现的成核限制开关（NLS） [18] ，可用于模拟这一随机开关过程。然而，这一随机过程并不适用于概率比特设计，因为它不具备调节极化概率的机制。另一种随机性来源是

铁电系统中的随机性源自温度依赖效应。例如，热噪声诱发的晶格振动，是铁电动力学中成核和畴生长过程的重要机制，尤其是在缺陷和晶界附近[21-22]。这一机制有助于铁电畴克服能垒，并诱发铁电偶极子的实时随机涨落[21-30]，，这与重复开关中的随机性不同。涨落的偶极子对铁电动态特性至关重要，例如偶极反转开关[23-28,30]，、介电响应[29]，和畴运动[24,30]。晶格振动诱发的涨落偶极子可在相场模型中描述为随机布朗运动，其平均涨落位置遵循玻尔兹曼型概率分布 [24-28]。如图 1a 所示，外电场还可进一步调节平均位置。通过铁电纳米器件（如 FeFET），可将偶极子的涨落进一步转换为随机涨落电流，并且涨落范围可调。设定电压或电流阈值后，即可建立一种由外电场调节、概率可控的机制。

本工作首次提出了基于 FeFET 的随机 p 位（图 1b），利用少畴铁电材料中由热噪声引起的偶极涨落。铁电偶极的涨落范围可通过栅极偏压 V_g （图 1c）调节，并通过后处理电路模块（图 1d），在特定电压阈值 V_{th} 下将模拟涨落电流信号转换为随机二进制比特流。这使栅极偏压能够调节铁电概率比特输出相对于 V_{th} 的概率，其特征可由具有 S 形关系的概率曲线（p 曲线）（图 1e）描述。我们通过相场模型分析了若干关键铁电材料参数对随机性的影响，并揭示了畴耦合和畴数在抑制

铁电系统随机性方面的关键作用。最后，我们通过在基于铁电概率比特的可逆逻辑电路中执行整数分解（IF），验证了所提出的概率比特在随机计算应用中的功能。整数分解性能（例如准确度）体现了其对铁电概率比特随机性的依赖，也凸显了铁电概率比特设计对随机计算应用的重要性。研究发现，所提出的基于铁电的概率比特兼具硬件成本极低和兼容 CMOS 工艺节点的优点，弥补了全互补金属氧化物半导体和基于磁隧道结的概率比特的不足。

结果

铁电中的热噪声诱导的随机性

对于铁电材料的凸形自由能景观，自发极化（SP）位于全局能量极小值处，代表铁电系统弛豫到的状态。施加于铁电系统的外电场会改变系统的自由能和全局能量极小值，因此 SP 位置也会随之改变。极化转变速率（PTR）在时变朗道-金兹堡（TDGL）方程中定义为（$\frac{dp}{dt}$）（相场模型的详细信息见方法）；如图 2a 所示，当铁电系统在能量极小值处的自由能达到极小值时，PTR 为零。插图显示了两个相反方向的电场下的自由能，PTR 表明 SP 会相应地与电场方向对齐（标记为 A 和 A'）。电场可使 PTR 上移或下移，从而同时改变 SP 值和极化转变速度。在这一图景下，热噪声引起的极化偏移（图 2b 中的 $+\eta$ 和 $-\eta$ ）既可能促进，也可能阻碍铁电开关过程，导致 PTR 升高或降低（点 B 或 C）。这与实验和模拟中观察到的热噪声辅助极化反转开关现象一致 [23-

28,30]。更重要的是，η 也会使原有的 SP 位置移动至 B’ 或 C’，将极化拖向任一方向。因此，持续随机的 η 能够有效地产生实时极化涨落。为进一步说明极化涨落，将三个不同的恒定电场施加于铁电系统，从而产生不同的自由能剖面（图 2c）。在最长达1 μ秒的观测时间内提取极化的统计分布（包括 10^4 个采样点）。随着施加电场增强，整个分布也随之移动。此外，电场增强会降低全局极小值的能量（图 2c）。这使涨落范围缩小，因为铁电极化会在自发极化位置附近涨落（图 2d），从而降低铁电系统处于相反极化方向的概率。

为进一步理解铁电系统中的随机性机制，我们评估了几种关键铁电材料参数对随机性的影响。首先，在单畴假设下，评估朗道系数（α_1、α_{11} 和α_{111} ）的影响，采用两组不同的系数，分别记为 FE-1 和 FE-2（参数详见方法）。相应的自由能曲线如图 3a 所示。PTR 的斜率可近似为铁电系统极化势能的二阶导数Ψ_{pol} （$\frac{\partial^2 p}{\partial t \partial p} \propto -\frac{\partial^2 \Psi_{pol}}{\partial p^2}$），可用于估算朗道系数与涨落范围之间的关系。在热噪声引起的极化偏移η相同的情况下，PTR 斜率越陡，涨落范围越小，如图 3b 中蓝色和红色三角形所示。图 3c 进一步验证了这一点：极化的统计分布表明，与采用 FE-2 朗道系数的铁电系统相比，采用 FE-1 朗道系数的铁电系统具有相对更宽的涨落范围。自由能的二阶导数还与铁电材料中的势垒高度相关，这揭示了势垒高度与偶极涨落范围之间的关系。

评估的另一项铁电参数是畴耦合强度G_0，它是表征畴间相互作用的重要参数。为评估其对铁电随机性的影响，我们研究了一个双畴铁电系统。每个畴采用一组不同的朗道系数，分别为 FE-1 或 FE-2。在相同外场下，随着畴间相互作用变化，可观察到不同的畴壁轮廓（图 3d），这表明界面附近的自发极化（SP）变化程度随G_0 变化。更强的畴间相互作用会减小不同畴之间的极化差异。图 3e 所示的不同G_0下各畴的 PTR 可以体现这一点。每个畴的极化都围绕其自身的 SP 涨落；由于朗道系数不同，各畴的 SP 彼此分离。值得注意的是，增强G_0 会使两个畴的 SP 都向内移动，从而缩小整体变化范围。通过提取较长观测时间内1 μ秒的分布，可在图 3f 中进一步验证这一点。更强的畴间相互作用会增加两个畴的极化涨落范围的重叠，而较弱耦合铁电畴的极化则覆盖更宽的范围。

多畴 FeFET 概率位中的随机性

通过阐明铁电系统中热噪声诱导随机极化涨落的机制，可以进一步评估基于铁电场效应晶体管的概率比特的随机性（铁电场效应晶体管的器件建模方案见方法）。为模拟多畴铁电系统，假设多畴系统中的朗道系数和黏滞系数服从高斯分布，原始参数为均值，偏差最高为 σ 20% [31]。此举旨在模拟含有掺杂、晶界、异质结等因素的铁电系统，而非采用铁电系统中的均匀参数 [32-33]。图 4a 展示了 FeFET 概率位的电流-电压特性示例，其中铁电系统由 12 个畴组成。由于

铁电系统中的随机性，观测时间较长（最长可达几 μs）时，在恒定栅极偏压下，每个采样栅极偏压处的输出漏极电流 I_d 都会发生涨落。首先对 FeFET 进行初始化V_{init} （见图 4a 插图）。随后向系统施加不同的栅极偏压（V_{g1}、V_{g2}.....），并在观测时间内保持恒定。图 4a 中随机铁电场效应晶体管的电流-电压特性（蓝色点线）记录了观测时间内的所有输出电流，显示电流涨落幅度最高可达两个数量级。青色虚线表示同一 FeFET 在无热噪声条件下正向/反向扫描得到的电流-电压曲线。在栅极偏压相对较大时（~3 V），由于铁电系统已完全翻转，电流涨落范围减小，偶极涨落可能引起轻微的电容变化。因此，两条电流-电压曲线的输出电流趋于相近。图 4b 放大展示了各采样栅极偏压下电流统计分布的视图。铁电系统中的随机性使 FeFET 的电流分布“展宽”，且涨落范围随栅极偏压而变化。图 4c 中的 p 曲线说明了如何调节栅极偏压，以改变铁电概率位的输出超过固定电压阈值 V_{th} 的概率；该阈值由图 1c 中的反相器设定。不考虑热噪声时，FeFET 的漏极电流在给定栅极偏压下是确定的，其输出电压 V_{out} （定义见图 1c）在 p 曲线上表现为阶跃函数：低于 V_{th} 时为 0，高于 V_{th} 时为 1（图 4c 中的黑色虚线）。相比之下，电流-电压特性中由热噪声引起的展宽会使 p 曲线出现斜率。温度还可以进一步调节其陡峭程度，因为温度升高会增强晶格振动和概率比特的随机性（分别显示为 150 K 和 300 K）。为进一步说明如何提取采样栅极偏压下的概率，图 4d 展示了 A、B、C 三点处的输出电压 V_{out}。铁电系统中的随机性使漏极电流有一定概率超过 V_{th}。该概率定义为 $p = \frac{N_{(Vout>Vth)}}{N_{total}}$，其中 $N_{(Vout>Vth)}$ 为总

p-bit 输出高于阈值的时间帧数，N_{total} 是总采样时间。由于电流的涨落范围可通过栅极偏压进行偏移，因此展示了高于阈值的不同时间帧占比。工作窗口内不同采样电压对应的 p 曲线可用 S 形关系拟合，如图 4c 中的蓝色和紫色实线所示。

由于铁电系统的随机性对 p-bit 的概率特性至关重要，因此进一步从多个方面评估铁电场效应晶体管的随机性：畴耦合、朗道系数的变化以及铁电畴的数量。在四畴系统中实现不同的畴耦合强度（G_0），以研究其影响（图 5a）；结果表明，随着 G_0 增大，电流波动范围受到抑制。这源于图 3f 所述的极化涨落范围缩窄机制，该机制抑制了铁电电容的涨落。图 5b 所示的相应 p 曲线表明，随着畴间相互作用增强，曲线斜率变陡（随机性降低）。此外，还评估了朗道系数具有不同偏差的铁电系统的影响，其中 σ 增至 40% 和 60% （图 5c ）。随着畴间差异增大，可以观察到电流波动范围扩大。偏差增大使得具有更宽极化涨落范围的畴能够纳入系统，从而增强输出电流的整体随机性，这反映在相应铁电场效应晶体管的 p 曲线中（图 5d）。

此外，还评估了具有不同畴数的 FeFET 概率位的随机性（图6a）。朗道系数和黏滞系数 μ 均服从高斯分布，并具有 20% 的偏差，以反映参数的畴间差异。随着畴数从单畴（1D）增加到 12 畴（12D），电流涨落范围从 1D 中的 ~5 个数量级缩小至 12D FeFET 中的约一个数量级。畴

数增加可抑制整体偶极涨落，这是由于畴数增加增强了畴间相互作用，从而使电流涨落范围缩窄。不同畴数的铁电概率位之间的随机性差异会导致不同的概率特性，尤其是 p 曲线的斜率。为比较斜率，在 10^{-4} μA/μm 处采用相同的等效电流阈值提取 p 曲线，并进一步平移曲线，以确保图6b中输出电流在 0 V 时的概率为 50%。p 曲线的斜率由 FeFET 的随机性决定；随着畴数从 1D 增至 12D，输出电流的涨落范围减小，斜率随之增大。

可逆逻辑电路中的 FeFET 概率位

通过整数分解验证所提出的铁电概率位的随机计算功能，并构建由可逆与门（IAND）和全加器（FA）组成的可逆逻辑电路[2,34]。提取栅极电压调节下 FeFET 概率位的概率曲线，以表征概率位在电路仿真中的随机行为。首先通过 HSPICE 中的 Verilog-A 对整个电路进行建模，可逆逻辑门的连接方式如图 7a 所示。图 7(b) 展示了 IAND 连接的一个示例，它是一个无源电阻网络，遵循将正确解映射至全局能量极小值的连接规则（电路建模详情见方法）。IAND 的实时运算演示见补充说明 1。为执行整数分解，对用于分解数字 6 的 2 位×2位无符号可逆逻辑电路进行建模，其解的概率如图 7c 所示。端子 A 和 B 是分解的输出信号，随机计算网络的概率特性会产生持续波动的结果，对应于 IF 网络中的多个局部能量

极小值（补充材料图 S1）。通过统计运行时间内（最长5 μ秒）每个解出现的次数，进一步计算各解的概率。两个正确解（2×3 和3×2）的概率高于其他解，这与电路连接所配置的全局能量极小值相符。

为进一步研究铁电场效应晶体管的随机性对 IF 性能的影响，我们在 MATLAB 中建立了一个 6 位×6位 IF 电路模型，用于处理更大的待因式分解数字。该模型实现了图 6b 中由不同 p 曲线表征的概率比特。对于数字 3233 的因式分解，正确结果为 53 和 61；10^9 个周期内正确解的概率汇总于图 7d。值得注意的是，随着 p 曲线斜率增大（即铁电概率比特的随机性减弱），IL 网络的准确度会提高。p 曲线更陡的斜率有助于系统演化至能量极小值，因此系统停留在正确解（全局能量极小值）中的时间占比也随之增加。然而，进一步降低概率比特的随机性会导致准确度下降，因为 IL 网络逃离局部能量极小值（错误解）的概率会降低。这也扩大了两个正确解之间的概率差异（4、8 和 12D 情况下的柱状图）。因此，为了优化随机计算应用的性能，需要对概率比特的随机性进行适当设计和调整，而其随机性与铁电材料参数及畴动力学有关。还可采用其他电路级优化方法，例如模拟退火[35],，以提高 IF 的准确度。

讨论

铁电系统中朗道系数、畴间相互作用强度和畴数的畴间差异，被发现对铁电概率比特的随机性起着关键作用。在

图6a中，代表概率比特随机性的电流涨落范围从4–5个数量级降至不到一个数量级（从1D FeFET到12D FeFET）。值得注意的是，电流涨落范围受到抑制后，在实际应用中，热噪声诱导的概率行为可能难以与其他相互竞争的随机过程及背景噪声区分开来。因此，所提出的 FeFET 概率位能否实现，取决于对其随机性进行恰当设计。近期 HZO [36] 和二维铁电体 [37-39]的微型化，为利用畴数减少的优势来增强铁电系统的随机性提供了独特机遇。掺杂和缺陷工程等多种材料工程方法可用于增大铁电参数的畴间差异，从而扩大极化的涨落范围。

此外，值得注意的是，与此前的 p-bit 设计相比，本文提出的铁电概率位具有独特优势（如表1所示）。基于铁电和基于铁磁体的概率比特均利用热噪声诱导的随机性，且器件密度相近，因此与全互补金属氧化物半导体方案相比，可显著降低所需面积和能耗。对于基于铁磁体的概率比特，磁隧道结原本是双端器件，需要连接额外模块才能实现概率比特功能。基于自旋转移力矩（STT）的磁隧道结需要额外的场效应晶体管作为概率比特的控制端子 [14], ，而基于自旋轨道力矩（SOT）的磁隧道结[2] 则需要额外的重金属层来分隔读写路径。与基于铁磁体的概率比特所需的额外模块和电路设计相比，天然具有三端结构的铁电场效应晶体管只需一个电阻器即可实现电流-电压转换。铁电层在铁电场效应晶体管和基于互补金属氧化物半导体的电路中的成熟集成，也有助于铁电概率位扩展至随机计算应用中的大规模概率比特网络，相较之下，基于铁磁体的方案则不具备这一优势。

总之，我们提出了一种基于随机铁电场效应晶体管的新型 p-bit 设计，其随机性源自热噪声诱导的极化涨落。我们研究了铁电偶极子随机性的产生机制，并揭示了对铁电概率比特随机性起关键作用的铁电层畴特性，包括畴数、畴间差异以及铁电系统中的畴间相互作用。为验证铁电概率比特的功能，我们基于铁电概率比特可逆逻辑电路进行了整数分解。研究还发现，整数分解的准确度取决于铁电概率比特的随机性。所提出的铁电概率比特兼具极低的硬件成本和与 CMOS 工艺节点的兼容性，因此有望成为随机计算应用中的理想候选方案。

方法

随机多畴铁电系统的相场模型

铁电系统中由热噪声引起的偶极子涨落，可通过统计力学[24-27,40] 方法进行表征，以捕捉晶格振动对时变朗道-金兹堡方程（TDGL）的影响，并将方程转化为随机形式（式1）。考虑到 HZO 的对称性和取向，我们假设只有面外分量p_y 非零，而忽略其面内分量的动态变化（图1b）。此外，假设 HZO 不受应力，铁电系统中的弹性应变能密度也可忽略。因此，焓能W包括六阶以内的极化势能Ψ_{pol} 、畴耦合能Ψ_{inter}、自由空间能Ψ_{el}、外场E_{fe} 以及退极化场E_{dep} （式2）。

$$\mu\frac{\partial p(x,y,t)}{\partial t} = -\frac{\delta W}{\delta p(x,y,t)} + \nabla\cdot\frac{\partial W}{\partial \nabla p} + \mu\eta \tag{1}$$

$$W\left(\varepsilon, e, p_y, \nabla p_y\right) = \Psi_{pol}\left(p_y\right) + \Psi_{inter}\left(\nabla p_y\right) + \Psi_{el} - E_{fe}\cdot p_y - E_{dep}\cdot p_y \tag{2}$$

其中，μ 表示黏度系数，为 $1.0\times10^{1}\ \Omega\cdot m$，用于表征铁电材料的形变速度。项$^{\partial p}{}_{(x\,y\,t\ \ldots)}$表示铁电材料的极化转变速率（PTR）。式2中的各能量项Ψ_{pol}、 Ψ_{inter}、 Ψ_{el} 和$E_{dep}^{\partial t}$ 可表示为:

$$\Psi_{pol}\left(p_y\right) = \alpha_1(T)p_y(t)^2 + \alpha_{11}p_y(t)^4 + \alpha_{111}p_y(t)^6 \tag{3}$$

$$\Psi_{inter}\left(\nabla p_y\right) = \frac{G_0}{2}|\nabla p_y|^2 \tag{4}$$

$$\Psi_{el} = -\frac{\varepsilon_0}{2}E_{fe}^2 \tag{5}$$

$$E_{dep} = \frac{\lambda_1+\lambda_2}{h\varepsilon_0+(\lambda_1+\lambda_2)\varepsilon_b}p_y \tag{6}$$

其中，在式 3 中， α_1、 α_{11} 和 α_{111} 是从实验测量中提取的参数，而 α_1 关于温度 T 的一阶近似可表示为：$\alpha_1 = \alpha_0\frac{T_c-T}{T_c}$，其中 T_c 是 $450\ K$ [31]时的居里温度。在模拟中，假设整个铁电系统具有均匀温度 T，且处于室温（$300\ K$）。图 3 中采用了两组不同的朗道系数。对于 FE-1，取值为： $\alpha_0 = -4。0\times10^{8}\ mF^{-1}$，$\alpha_{11} = 3。7\times10^{9}\ m^5C^{-2}F^{-1}$，$\alpha_{111} = 1。1\times10^{9}\ m^9C^{-4}F^{-1}$ [31]。对于 FE-2，参数经过调整，使自由能曲线具有更高的能垒，取值为：$\alpha_0 = -2。4\times10^{9}\ mF^{-1}$，$\alpha_{11} = 1。3\times10^{10}\ m^5C^{-2}F^{-1}$，$\alpha_{111} = 1。1\times10^{10}\ m^9C^{-4}F^{-1}$。在均匀极化的单畴假设下，PTR 对极化的导数可根据式 1 近似为:

$$\frac{\partial^2 p(x,y,t)}{\partial t\partial p} \sim -\frac{1}{\mu}\frac{\partial^2\Psi_{pol}(p_y)}{\partial p^2} \tag{7}$$

因为其余焓能项与极化无关，且均匀极化会消除空间变化的极化所引起的能量。对于式 4 中的 Ψ_{inter} ，耦合因子 G_0 表征不同畴之间的耦合强度。此外，为了表征系统中的退极化场，假设 TiN/HZO/SiO_2 结构中 6 nm 厚 HZO 材料满足短路边界条件。有效屏蔽长度 λ_1、λ_2归一化后分别为 0.05 和 2.5 Å [31,41]。

公式 1 中的热噪声项 η 源自热噪声诱导的晶格振动，因此会导致铁电偶极子发生涨落。热噪声的相关函数可表示为公式 8 [24,40]。假设热噪声的整体分布服从高斯分布 $G_{(0,1)}$，其均值和标准差分别设为 0 和 1（公式 9）。V_{char}和 Δt 分别表示网格设置中的单位体积，以及 TDLG计算中的时间步长:

$$< \eta(r,t), \eta(r',t') >_{t,\Omega} = \frac{2kT}{\mu}\delta(t-t')\delta(r-r') \tag{8}$$

$$\eta = \sqrt{\frac{2k_BT}{\mu V_{char}\Delta t}} \times G_{(0,1)} \tag{9}$$

该建模旨在将随机噪声项解释为类似随机游走布朗运动的过程；当观测时间足够长、系统达到平衡时，其总体概率将遵循玻尔兹曼型概率分布 [24]。通过四阶龙格-库塔法，在每个离散时间步长 Δt求解各离散网格中的整体 TDLG 方程；根据图 4a 插图所示的脉冲配置，将每个网格初始化为与外加电场方向相反的自发极化状态。离散时间步长为 0.02 ns，离散体积 V_{char} 为 1.38×10^{-29} m^3, ，即 HZO 的晶胞尺寸 [42]。值得注意的是，体积和运行时间的离散化可能会

影响热噪声 [26]的作用。我们事先测试了多个体积和运行时间的离散化步长，以确保离散化配置恰当。鲁棒性测试的更多细节见补充说明2。

除了正文中讨论的参数外，黏度系数 μ 和温度 T 等其他参数，也在表征铁电体动态行为方面发挥着重要作用（见式 1）。然而，这两者要么不会影响极化涨落（黏度系数），要么在实际操作中难以控制（温度）。因此，补充说明3进一步讨论了这两个因素对铁电随机性的影响。

FeFET 概率位的器件建模

为对沟道长度为 10 nm 的随机铁电场效应晶体管的动态行为进行建模，假设每个时间步长（纳秒量级）内均处于准静态条件，因为电子载流子的响应时间远短于铁电晶体结构的形变时间 [43-44]。采用电容模型来表征 TiN/HZO/SiO_2/Si 结构的静电关系（图 1b）。其表达式为：

$$Q_{FE} = Q_{sio_2} = Q_{MOS} \tag{10}$$

$$\left(\varepsilon_0 E_{FE} + \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} P_n\right) = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{sio2}}{t_{sio2}} V_{sio2} = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{Si}}{t_{Si}} V_{MOS} \tag{11}$$

其中，Q_{FE}、 Q_{sio_2}和Q_{MOS} 分别为 HZO 层、SiO_2 层（厚度为 2 nm）和 MOS结构的电荷密度。式 10 中假设的串联电容条件可进一步展开为式 11，其中，E_{FE} 表示铁电层中的电场，P_n 表示铁电系统中建模的网格数，其求和结果按网格总数进行归一化

N。对于 SiO_2 层和 MOS结构，二者均假设为无限大的平面电容器。对于沟道电势，我们假设栅极对沟道具有理想控制能力，且源极和漏极均不会影响沟道电势 [45]。因此，V_{MOS} 可直接表示用于载流子输运计算的沟道电势。

对于载流子输运模拟，采用势垒顶端（ToB）[45] 和 Wentzel–Kramers–Brillouin（WKB）[46] 相结合的方案，对铁电场效应晶体管中的弹道电流和隧穿电流组件进行建模。相应的表达式如下：

$$I_{ToB} = \frac{q}{A}\iint \frac{d^2k}{4\pi^2}\, qv^{+}f\left(E - E_{fs}\right) - \frac{q}{A}\iint \frac{d^2k}{4\pi^2}\, qv^{-}f\left(E - E_{fd}\right) \tag{12}$$

$$T\left(E, k_y\right) = \sum_m \exp\left(-2\int_{X_S,k_y}^{X_{D,k_y}} \kappa_m\,(x)\right)dx \tag{13}$$

$$I_T = \frac{q}{2\pi h}\int T\left(E, k_y\right)\left[f\left(E - E_{fs}\right) - f\left(E - E_{fd}\right)\right]dk_y dE \tag{14}$$

其中，I_{ToB} 和 I_T 分别表示总电流中的弹道分量和隧穿分量。式 12 中的 ToB 方案详细说明了在第一布里渊区内对正向和反向载流子态的占据情况求和的过程，其中，$v^{\pm}$ 表示正向/反向传播态中的平均群速度，E_{fs}和 E_{fd} 分别表示源极和漏极的费米能级。两个电流分量均按沟道横截面积 A 归一化。对于式 13 中的 WKB 方案，将计算透射系数 $T(E, k_y)$，其中 κ_m 表示位于 x 位置的晶胞中，m 能带内电子的衰减率。随后，通过式 14 中的朗道公式计算总隧穿电流。

可逆逻辑电路建模

为展示铁电概率比特在随机计算应用中的硬件实现可行性，本文对由铁电概率比特构成的可逆逻辑电路进行了多层级仿真。具体可逆逻辑电路的电路仿真流程如下：

1）概率比特的基本特征是可调概率随外部调节信号变化而呈现的 S 形响应。典型概率比特的 S 形响应 [2] 可表示为：

$$s_i(t) = sgn\{rand(-1,1) + \tanh[I_i(t)]\} \quad (15)$$

其中，s_i 表示二值化输出状态 +1 和 -1，而 I_i 对应于概率比特的输入；在我们的设计中，则对应于铁电场效应晶体管的栅极偏压。为从铁电概率比特中获得 S 形关系，我们对随机铁电场效应晶体管实施了间隔为 0.1 V 的密集栅极偏置采样，并在 10 μs 的运行时间内提取电压超过阈值的概率（~10^5 个采样时间步长）。随后执行 S 形拟合，以获得相应铁电概率比特的概率曲线（图 1e）。提取出的 S 形曲线随后以拟合曲线或查找表的形式，实现于 Verilog-A（用于 Virtuoso 中的 HSPICE 仿真器）或 MATLAB（用于 MATLAB 电路仿真）中，以表征所建模铁电概率比特电路组件的概率行为。

2) 随后通过线性规划 [34] 求得耦合矩阵 J（表示 p-bit 之间的相互作用）和偏置矩阵 h（表示施加于 p-bit 的局部偏置），使真值表映射到网络的最低能量态。对于更大规模的可逆逻辑，例如可逆乘法器，需要根据相应的逻辑电路图，将可逆与门、可逆半加器和全加器的多个 J 矩阵与 h 矩阵组合起来。

对于可逆逻辑电路中的每个 p-bit，计算第 i 个 p-bit 的输入 I_i 时，可以将耦合 p 位元件和局部偏置的综合影响视为：

$$I_i(t) = I_0\left[h_i(t) + \sum_j J_{ij} m_j(t)\right] \tag{16}$$

随后，J和h矩阵被转换为电子元件，即无源电阻网络。在电路运行过程中，每轮迭代都会依次更新每个p-bit，以确保可逆逻辑网络 [34] 正常运行。经过足够长的观测时间后，可以获得每个概率比特状态的统计结果，从而近似得到平衡条件下的概率。

根据铁电概率比特的表征方案和电路配置，我们仿真了由各种可逆逻辑门组成的可逆逻辑电路。首先，参照 [2], 构建了一个可逆与门，其电路结构如图 7b 所示。无源电阻网络依据J和h矩阵设计，每个电阻的阻值均为R_0 (500 $k\Omega$)的特定比例。每个节点上汇总的电流信号进一步通过阻抗为10^6 Ω的电流控制电压源（CCVS）转换为电压。CCVS的输入节点电压固定为$V_{dd}/2$（V_{dd} 为0.8 V），以确保每个铁电概率比特的电压输入符合J和h矩阵中定义的连接规则。可逆与门的实时运算过程进一步展示于补充说明 1中。基于已建立的可逆逻辑门电路模型，按照图 7a所示的逻辑门连接方式构建了2位× 2位可逆因式分解电路。对于更大数值的整数分解，我们在MATLAB中进行电路建模，以评估铁电概率比特随机性的影响。在假设电路元件和连接均为理想状态的条件下，依据铁电概率比特的表征方案，评估了不同概率曲线下可逆因式分解运算的准确度，如图 7d 所示。

数据可用性

支持本文图表及本研究其他发现的数据，可在提出合理请求后向通讯作者获取。

致谢

新加坡国立大学的本工作得到 MOE-2017- T2-2-114、MOE- 2019-T2-2-215 和 FRC-A-8000194-01-00 的资助。

作者贡献

L.G. 和 L.S. 提出了铁电概率比特项目的构想。L.S. 构思并进行了随机铁电系统的数值模拟，并与 L.G. 一起分析了数据。G.X. 和 C.B. 分别对铁电性质和 p-bit 性能基准测试作出了贡献。H.Y. 建立了基于铁电概率比特的电路模型，用于整数分解模拟。L.S. 和 L.G. 在其他所有作者的意见基础上撰写了手稿。

通讯作者通信与咨询

有关材料事宜，请联系 L.G.（电子邮件：elelg@nus.edu.sg）和 L.S.（电子邮件：elelshe@nus.edu.sg）。

利益冲突

作者声明不存在利益冲突。

参考文献

[1] Shim、Yong、Akhilesh Jaiswal 和 Kaushik Roy。《基于伊辛计算的组合优化：利用自旋霍尔效应（SHE）诱导的随机磁化反转》。《应用物理学杂志》121.19（2017年）：193902。

[2] Camsari、Kerem Yunus 等。《用于可逆逻辑的随机 p 比特》。《物理评论X》7.3（2017年）：

[3] Faria、Rafatul、Kerem Y. Camsari 和 Supriyo Datta。《利用嵌入式随机磁阻式存储器实现贝叶斯网络》。AIP Advances 8.4（2018年）：045101。

[4] Alaghi、Armin 和 John P. Hayes。《随机计算综述》。ACM嵌入式计算系统汇刊（TECS）12.2s（2013年）：1–19。

[5] Gaines, Brian R.《随机计算》。载于《1967年4月18日至20日春季联合计算机会议论文集》。1967年。

[6] Ribeiro, Sergio T.《随机脉冲机》。IEEE《电子计算机汇刊》3（1967年）：261–276。[7] Qian, W., Li, X., Riedel, M. D., Bazargan, K., & Lilja, D. J.（2010）。“一种基于随机逻辑的容错计算架构。”IEEE《计算机汇刊》60(1)：93–105。[8] Hammadou, T., Nilson, M., Bermak, A., and Ogunbona, P. 2003年。“一种具有扩展二进制随机算术功能的96 × 64 智能数字像素阵列。”载于《国际电路与系统研讨会论文集》。IV-772–IV-775。[9] Dickson, J. A., McLeod, R. D., and Card, H. C. 1993年。“具有原位学习功能的神经网络随机算术实现。”载于《国际神经网络会议论文集》。711–716。[10] Liu, Yidong, Siting Liu, Yanzhi Wang, Fabrizio Lombardi, and Jie Han.《面向机器学习应用的随机计算神经网络综述》。IEEE《神经网络与学习系统汇刊》（2020年）。[11] Pervaiz, Ahmed Zeeshan, et al.《用于可逆逻辑的随机 p 比特硬件仿真》。《科学报告》7.1（2017年）：1–13。[12] Onizawa, Naoya, et al.《可逆逻辑设计框架》。2019年第53届阿西洛马会议：信号、系统与计算机。IEEE，2019年。[13] Kaiser, Jan, and Supriyo Datta.《利用 p-bit 进行概率计算》。《应用物理快报》119.15（2021年）：150503。[14] Borders, W. A., Pervaiz, A. Z., Fukami, S., Camsari, K. Y., Ohno, H., & Datta, S.（2019）。“利用随机磁性隧道结进行整数分解。”《自然》573(7774)：390–393。[15] Mulaosmanovic, H., Mikolajick, T., & Slesazeck, S.（2017）。“基于铁电开关的随机数生成。”IEEE《电子器件快报》39(1)：135–138。[16] Tagantsev, Alexander K., Igor Stolichnov, Nava Setter, Jeffrey S. Cross, and Mineharu Tsukada.《铁电薄膜中的非 Kolmogorov-Avrami 开关动力学》。《物理评论B》66，第21期（2002年）：214109。[17] Gong, N., X. Sun, H. Jiang, K. S. Chang-Liao, Q. Xia, and T. P. Ma.《基于 HfO2 的金属-铁电体-金属（MFM）电容器的成核限制开关（NLS）模型：开关动力学与保持特性》。《应用物理快报》112，第26期（2018年）：262903。[18] Alessandri, C., Pandey, P., Abusleme, A., & Seabaugh, A.（2019）。“多晶铁电电容器中开关动力学的蒙特卡罗模拟。”《IEEE电子器件汇刊》66(8)：3527–3534。[19] Luo, J., Liu, T., Fu, Z., Wei, X., Yang, M., Chen, L., Huang, Q. and Huang, R., 2021年。“一种新型铁电场效应晶体管型自适应随机神经元，用于基于模拟退火的优化器，且硬件成本极低。”IEEE《电子器件快报》43(2)：308–311。[20] Shur, Vladimir, Evgenii Rumyantsev, and Sergei Makarov.《真实有限系统中的相变动力学：在铁电体开关中的应用》。《应用物理学杂志》84.1（1998年）：445–451。

[21] Jo, J.Y., Yang, S.M., Kim, T., Lee, H.N., Yoon, J.G., Park, S., Jo, Y., Jung, M., Noh, T.W., 2009. “外延铁电薄膜中畴壁传播的非线性动力学。”《物理评论快报》102, 045701.[22] Puchberger, S., Soprunyuk, V., Schranz, W., Tröster, A., Roleder, K., Majchrowski, A., Carpenter, M.A. and Salje, E.K.H., 2017. “众多针状畴的噪声：锆酸铅和铝酸镧中的跳跃式畴壁传播。”《APL材料》, 5(4), p.046102.[23] Sepliarsky, M., Phillpot, S.R., Streiffer, S.K., Stachiotti, M.G. and Migoni, R.L., 2001. “通过分子动力学模拟实现钙钛矿铁电体中的极化反转。”《应用物理快报》, 79(26), pp.4417-4419.[24] Indergand, R., Vidyasagar, A., Nadkarni, N., & Kochmann, D. M. (2020). “利用相场方法研究块体多晶锆钛酸铅的温度依赖铁电响应。”《力学与固体物理学杂志》, 144, 104098.[25] Nambu, Shinji, and Djuniadi A. Sagala. "铁电钙钛矿中的畴形成与弹性长程相互作用。" 《物理评论B》50.9 (1994): 5838.[26] Wen, H., Liu, J., Chen, W., Xiong, W., & Zheng, Y. (2022). “通过相场模型实现铁电体中极化动力学的热力学研究。”《物理评论B》, 106(2), 024111.[27] Akamatsu, H., Yuan, Y., Stoica, V.A., Stone, G., Yang, T., Hong, Z., Lei, S., Zhu, Y., Haislmaier, R.C., Freeland, J.W. and Chen, L.Q., 2018. “光激发的吉赫兹铁电畴动力学。”《物理评论快报》, 120(9), p.096101.[28] Liu, J., Wen, H., Chen, W. and Zheng, Y., 2021. “铁电体中极化弛豫时间特征的原子尺度研究。”《物理评论B》, 103(1), p.014308.[29] Grinberg, I., Shin, Y.H. and Rappe, A.M., 2009. “弛豫铁电体介电响应的分子动力学研究。”《物理评论快报》, 103(19), p.197601.[30] Liu, S., Grinberg, I. and Rappe, A.M., 2016. “基于第一性原理的本征铁电开关。”《自然》, 534(7607), pp.360-363.[31] Hsu, C. S., Chang, S. C., Nikonov, D. E., Young, I. A., & Naeemi, A. (2020). “采用基于物理的SPICE电路模型研究多畴铁电开关动力学的相场模拟理论。”《IEEE电子器件汇刊》, 67(7), 2952-2959.[32] M. Hoffmann et al., “多晶铁电氧化铪中的负电容直接观测,”《先进功能材料》, vol. 26, no. 47, pp. 8643–8649, Oct. 2016 [33] M. Hoffmann et al., “铁电负电容畴动力学,”《应用物理学杂志》, vol. 123, no. 18, May 2018[34] Onizawa, N., Nishino, K., Smithson, S.C., Meyer, B.H., Gross, W.J., Yamagata, H., Fujita, H. and Hanyu, T., 2020. “可逆逻辑设计框架。”《IEEE集成电路与系统计算机辅助设计汇刊》: IEEE电路与系统学会出版物, pp.312-316.

[35] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt, and M. P. Vecchi, “模拟退火优化,” 《科学》, vol. 220, no. 4598, pp. 671–680, 1983年.[36] Cheema, Suraj S., Daewoong Kwon, Nirmaan Shanker, Roberto Dos Reis, Shang-Lin Hsu, Jun Xiao, Haigang Zhang et al. "直接在硅上生长的超薄薄膜中铁电性增强。" 《自然》580, no. 7804 (2020年): 478-482.[37] Fei, Zaiyao, Wenjin Zhao, Tauno A. Palomaki, Bosong Sun, Moira K. Miller, Zhiying Zhao, Jiaqiang Yan, Xiaodong Xu, and David H. Cobden. "二维金属的铁电开关。" 《自然》560, no. 7718 (2018年): 336-339.[38] Xiao, Jun, Hanyu Zhu, Ying Wang, Wei Feng, Yunxia Hu, Arvind Dasgupta, Yimo Han et al. "具有偶极锁定的本征二维铁电性。" 《物理评论快报》120, no. 22 (2018年): 227601.[39] Yuan, Shuoguo, Xin Luo, Hung Lit Chan, Chengcheng Xiao, Yawei Dai, Maohai Xie, and Jianhua Hao. "MoTe2中从原子单层极限开始的室温铁电性。" 《自然·通讯》10, no. 1 (2019年): 1-6.[40] Nambu, S., & Sagala, D. A. (1994). “铁电钙钛矿中的畴形成与弹性长程相互作用。” 《物理评论B》, 50(9), 5838.[41] Pal, H. S., Nikonov, D. E., Kim, R., & Lundstrom, M. S. (2012). “平面MOSFET中的电子-声子散射：非平衡格林函数与蒙特卡罗方法。” arXiv预印本 arXiv:1209.4878.[42] Materlik, R., Künneth, C. and Kersch, A., 2015. “Hf1− xZrxO2中铁电性的起源：计算研究与表面能模型。” 《应用物理学杂志》, 117(13), p.134109.1− Rollo, T., Wang, H., Han, G. and Esseni, D., 2018, December. “基于模拟的负电容场效应晶体管设计研究：关态与开态视角。” 收录于2018年IEEE国际电子器件会议（IEDM）（pp. 9-5）。IEEE.[43] Yan, M.H., Wu, M.H., Huang, H.H., Chen, Y.H., Chu, Y.H., Wu, T.L., Yeh, P.C., Wang, C.Y., Lin, Y.D., Su, J.W. and Tzeng, P.J., 2020, December. “为低电压（2.5 V）、高密度和优异可靠性而设计的兼容后端工艺多金属-铁电体-金属（m-MFM）场效应晶体管。” 收录于2020年IEEE国际电子器件会议（IEDM）（pp. 4-6）。IEEE.[44] Rahman, A., Guo, J., Datta, S., & Lundstrom, M. S. (2003). “弹道纳米晶体管理论。” 《IEEE电子器件汇刊》, 50(9), 1853-1864.[45] Zhang, X., Lam, K. T., Low, K. L., Yeo, Y. C., & Liang, G. (2016). “基于全复能带结构和自洽求解原子势的纳米尺度场效应晶体管模拟。” 《IEEE电子器件汇刊》, 64(1), 58-65.

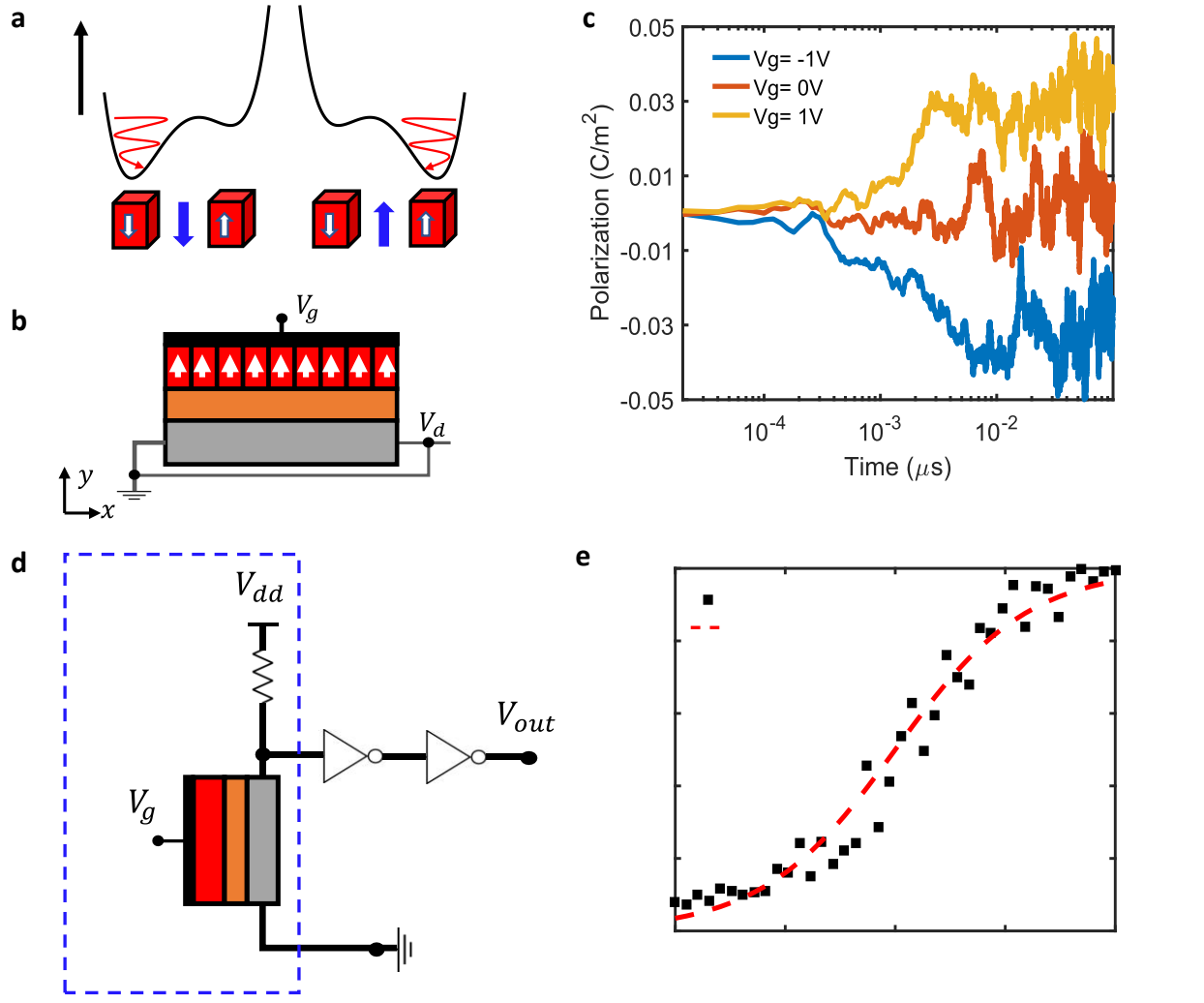

图 1 FeFET 概率位概览。a 铁电系统中由热噪声诱发的极化涨落。图中展示了铁电材料在两个相反电场下的自由能曲线。手性红色箭头表示自发极化附近波动的极化。b 多畴 FeFET 示意图，红色区域表示多畴 HZO 层。c 不同栅极偏压下的极化涨落 V_g。d 所提出的铁电概率位及后处理模块示意图。随机铁电场效应晶体管产生随机模拟漏极电流，电阻器将电流转换为电压信号。具有电压阈值 V_{th} 的反相器进一步将模拟电压信号转换为随机二进制比特流 V_{out}。e 铁电概率比特的概率曲线。黑点表示在栅极偏压控制下，V_{out} 超过 V_{th}的提取概率。红线为 S 形拟合。概率与调谐信号（此处为栅极偏压）之间的 S 形关系，是 p-bit 用于随机计算应用的关键特性。

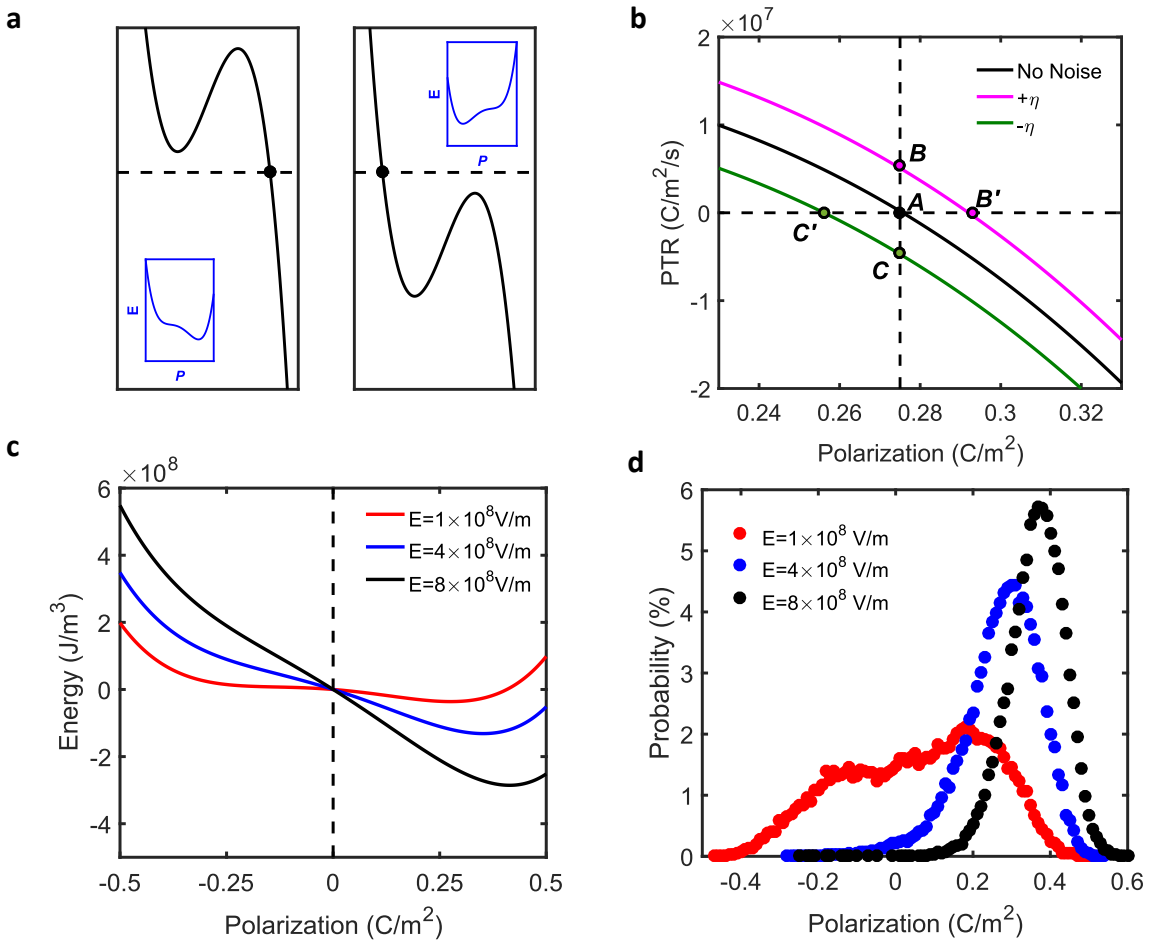

图 2 铁电系统中的随机性机制。a 铁电系统在相反电场下的极化转变速率（PTR）。插图为相应的极化（P）-能量（E）曲线。A 点和 *A'* 表示自发极化位置。b 热噪声对铁电系统的影响：热噪声诱导的晶格振动 $\pm\eta$ 会随机促进或阻碍极化切换速度（从 A 切换到 B 或 C）。*B'* 和 *C'* 表示热噪声导致偏移后的自发极化位置。c 不同电场下的自由能曲线。外加电场增强会降低自发极化的能量。d 在不同电场下、观测时间最长达 1 μs（包含 10^4 个采样点）时的极化分布统计数据，电场条件如 c 所示。

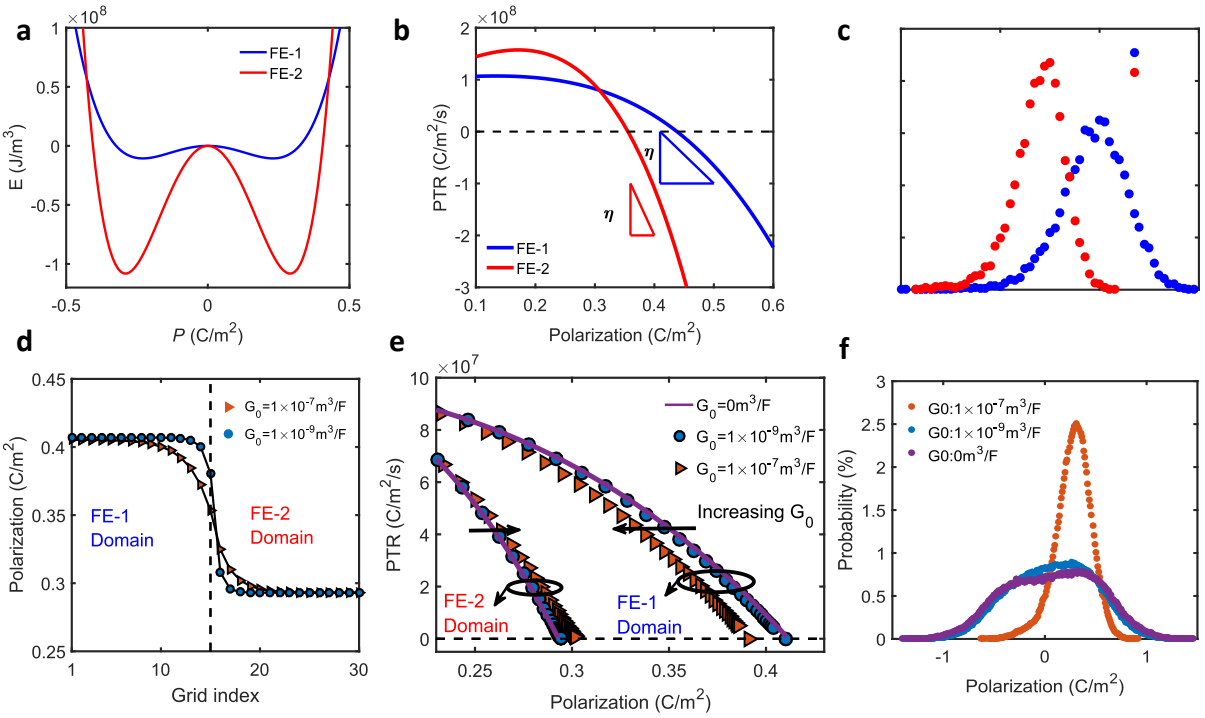

图 3 铁电参数对随机性的影响。a 两组不同朗道系数（FE-1 和 FE-2）对应的自由能剖面。b 在电场为 $8 \times 10^8\ V/m$ 时，具有 FE-1 和 FE-2 朗道系数的单畴系统的 PTR。红色和蓝色三角形表示，在相同热噪声因子 η 下，PTR 斜率的陡峭程度会影响极化的范围（三角形底边所示）。c FE-1 和 FE-2 单畴系统的统计极化分布。d 在电场 $8 \times 10^8\ V/m$ 下，畴间相互作用参数 G_0 不同时双畴系统的极化曲线。各畴采用 FE-1 或 FE-2 朗道系数，黑色虚线标示边界。e 畴间相互作用 G_0 不同时双畴铁电系统的 PTR。f 畴间相互作用强度不同时的统计极化分布。波动范围的缩小对应于 e 中不同畴之间 SP 变化的减小。

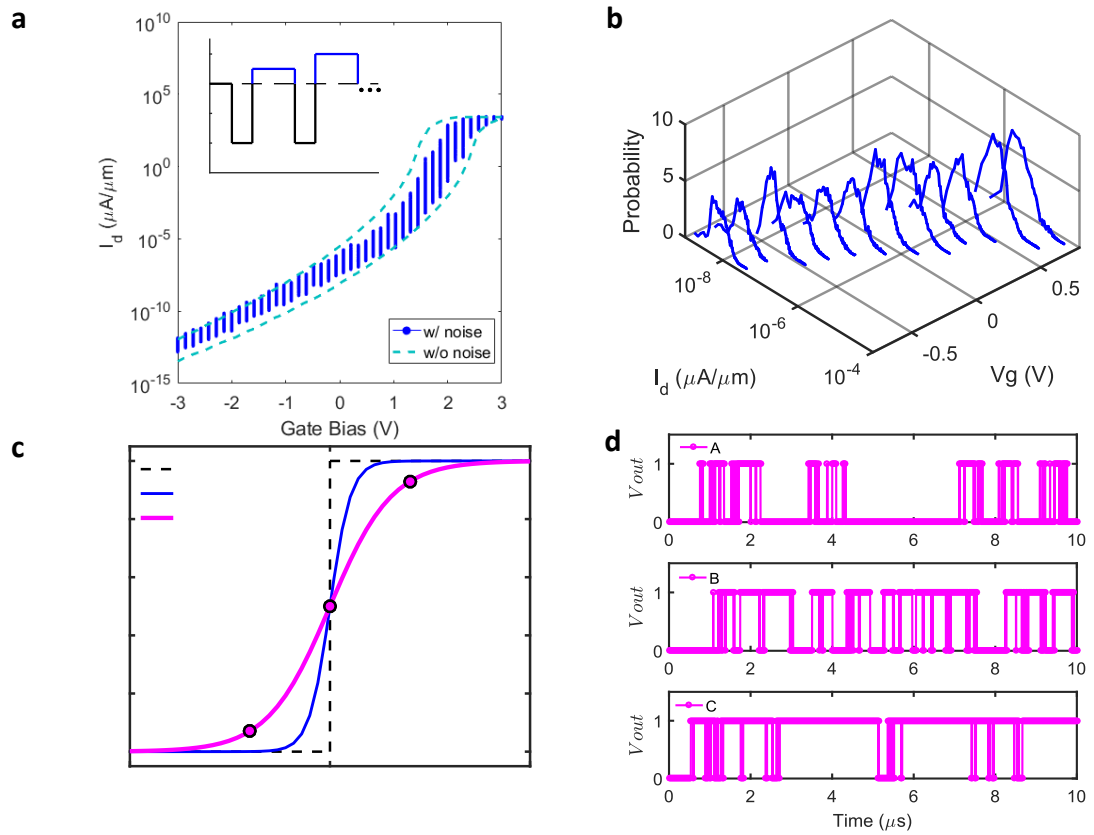

图 4 铁电概率比特的输出信号及概率曲线的提取。a 观测时间为10 μs时，包含 12 个畴的铁电系统中 FeFET 的电流-电压特性。蓝色实线和青色虚线分别表示有和没有热噪声影响时的 FeFET。插图：栅极偏压 V_g的配置。每次施加栅极偏压之前，先通过 V_{init} 初始化系统，以确保每个畴都从相同的极化状态开始。随后对系统施加不同的栅极偏压（V_{g1}、V_{g2} .....），并在观测时间内保持恒定。b a 中栅极偏压范围为 -1 至 1 V 时电流分布的放大图。在每个栅极偏压下，输出电流 I_d的波动具有不同的概率。c 随机性不同的 p-bit 拟合概率曲线。采用 150 K 和 300 K 的温度 T 来调节热噪声的影响，并假设系统内温度均匀。A、B 和 C 是用于说明概率提取过程的三个采样点。d 展示了栅极偏压分别处于 A、B 和 C 点时，p-bit 超过电压阈值的不同时间占比；总采样时间最长为10 μs。V_{out} 以 V_{dd}/2 归一化。

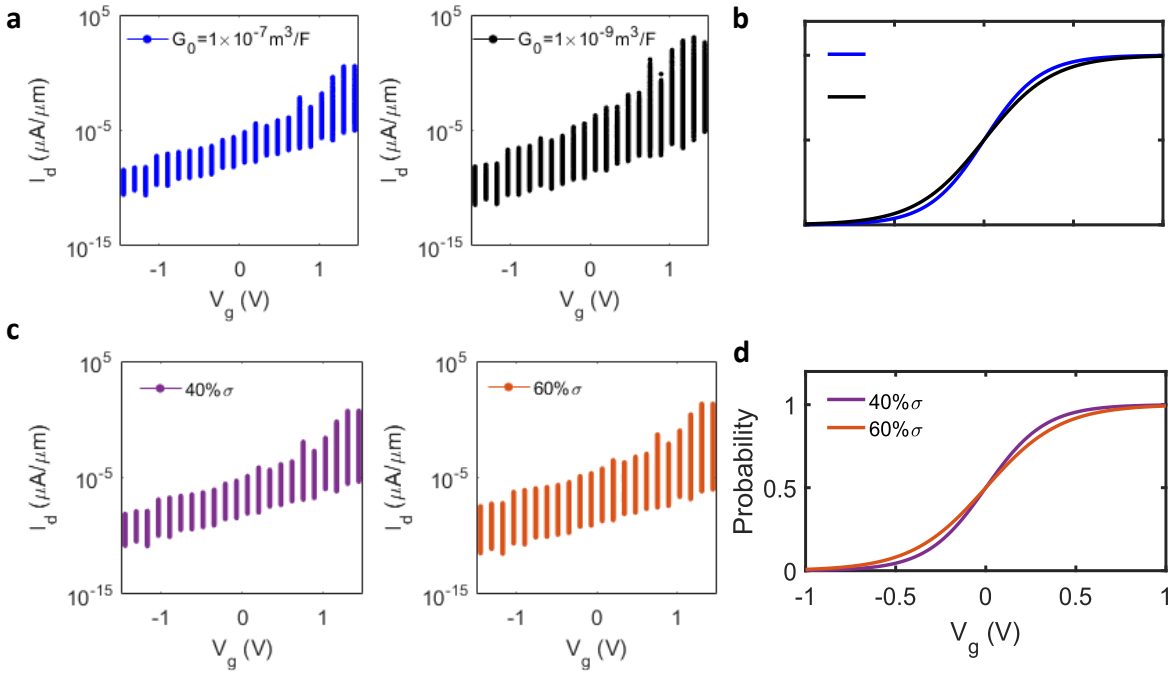

图 5 **铁电系统的多畴特性对 p**-比特随机性的影响。a、b 由四个畴组成、畴耦合强度不同的铁电场效应晶体管的电流-电压特性和概率曲线。c、d 由四个畴组成的铁电场效应晶体管的电流-电压特性和概率曲线，其中各畴的朗道系数和黏滞系数的高斯分布变化百分比不同。

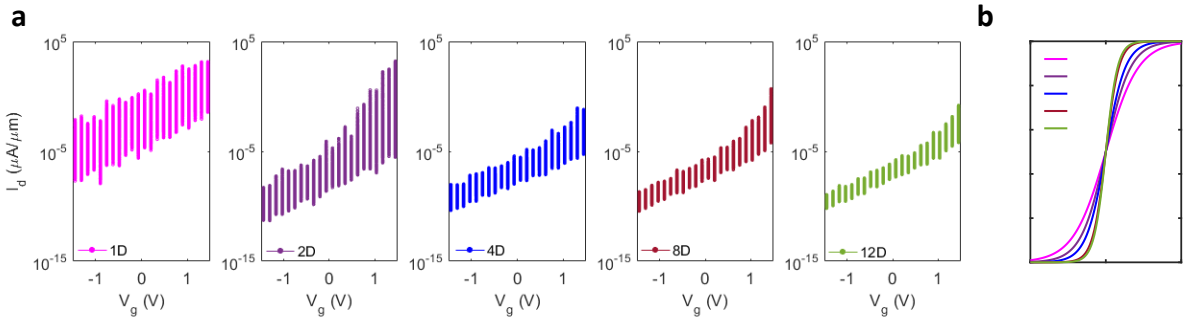

图 6 P-**比特的随机性与铁电系统中的畴数量**。a 由不同数量畴（从单畴到十二畴）构成的铁电场效应晶体管的电流-电压特性。朗道系数和黏滞系数在不同畴之间服从 20% σ 高斯分布。假设所有情况下的畴间相互作用均匀 $G_0 = 1 \times 10^{-7} m^3 F^{-1}$ 。b 从铁电系统中不同畴数量的铁电场效应晶体管相应的电流-电压特性中提取的 p 曲线。

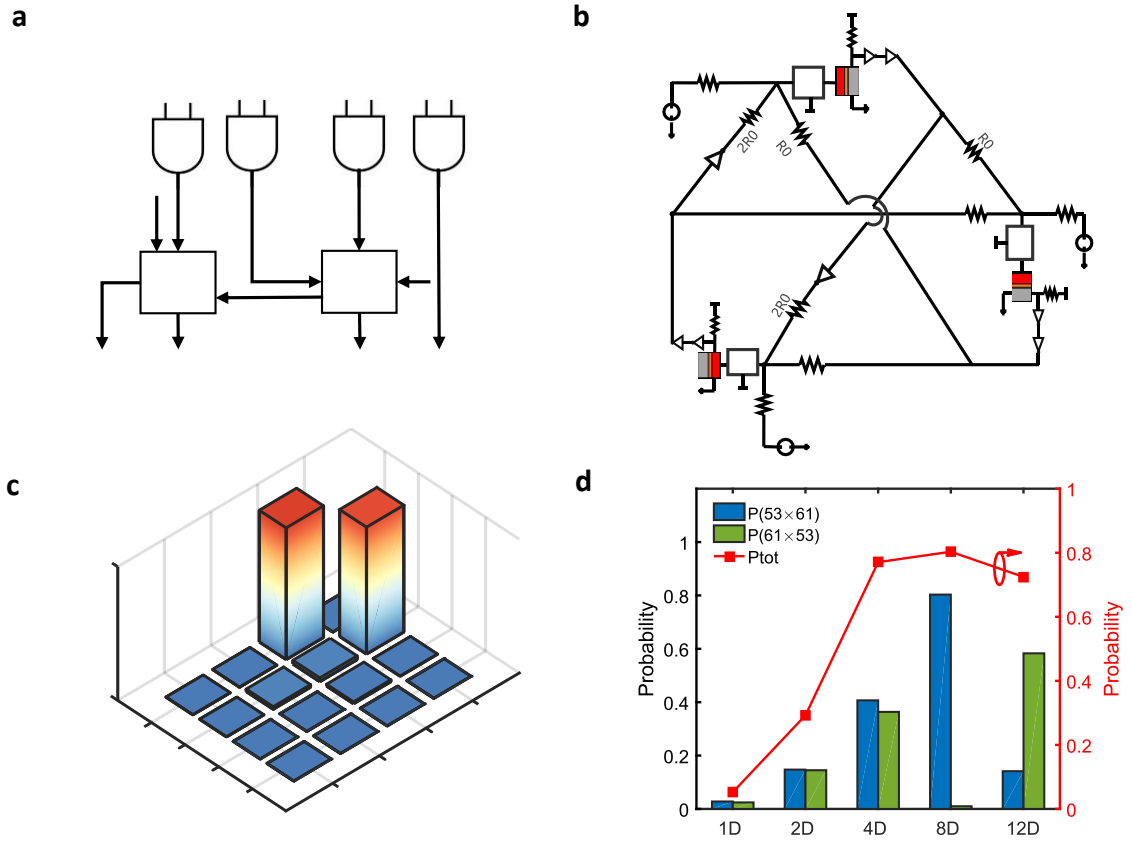

图 7 基于铁电概率比特的可逆逻辑网络中的整数分解。a 用于 2 位 × 2位整数分解的可逆逻辑门连接。可逆逻辑门包括可逆与门和全加器。A 和 B 是可逆因式分解运算中的两个输出端。b 由铁电概率比特构成的可逆与门电路设计示例。电流控制电压源（电流控制电压源）将按比例求和的电流信号转换为电压信号。V_{dd} 和 R_0 分别为 0.8 V 和 500 kΩ。c 可逆因式分解运算中所有解出现的概率。正确解 2×3 和 3×2具有最高概率。d 用图 6b 中不同 p 曲线表征的 p-bit 对 3233 进行可逆因式分解运算的概率柱状图/折线图。柱状图显示不同 p 曲线下每个正确解的概率。红色折线图表示获得正确解的综合概率。

表 **1** | p-bit 设计比较

Type	概率比特 组件	随机性的源极 随机性	**CMOS** 兼容性	器件密度
完全 CMOS	LSFR+查找表 [3]	伪随机数生成器	Yes	~ 几千个 （场效应晶体管）
	FPGA [13]	伪随机数生成器	Yes	~ 几千 （场效应晶体管）
FM	双端 磁隧道结 [14]	热噪声	复杂	3 （1M+1场效应晶体管+1R）
	三端 磁隧道结 [2]	热噪声	复杂	2 (1M+1R)
FE	铁电场效应晶体管 (本工作)	热噪声	Yes	2 (1铁电场效应晶体管+1R)

注：M 表示磁隧道结，R 表示电阻器。

补充信息

用于随机计算的基于铁电场效应晶体管的概率比特

补充说明 1. 基于可逆逻辑电路的整数分解实时操作

基于图 7 中设计的由铁电概率比特构成的电路网络，通过 Verilog-A 在 HSPICE 中执行整数分解（IF）。如图 7a 所示，用于执行 IF 的可逆逻辑电路由可逆与门（IAND）和全加器组成。IAND 执行反向与门运算，原始输出端 C 钳位为 0，而 A 和 B 是 IAND 的输出端。图 S1a 展示了 IAND 可逆逻辑网络的仿真结果，输出结果持续在不同解之间波动。图 S1b 中的真值表列出了 IAND 的所有解，每个解都通过电路设计建模为可逆逻辑电路网络中的能量极小值。图 S1c 展示了所有解的概率，其中三个正确解具有最高概率（总概率高达 ~93%）。正确解之间概率不同，是因为仿真系统的观测时间较短，而映射到可逆逻辑网络中的每个正确解具有相同的能级。观测时间足够长时，正确解的概率应当相同。

此外，2位乘2位整数因子分解运算的输出信号如图 S1d 所示，其中 A 和 B 是对 6 进行因式分解的输出结果。与可逆与门的结果类似，可以观察到输出信号持续波动；所有解的概率如图 7c 所示。

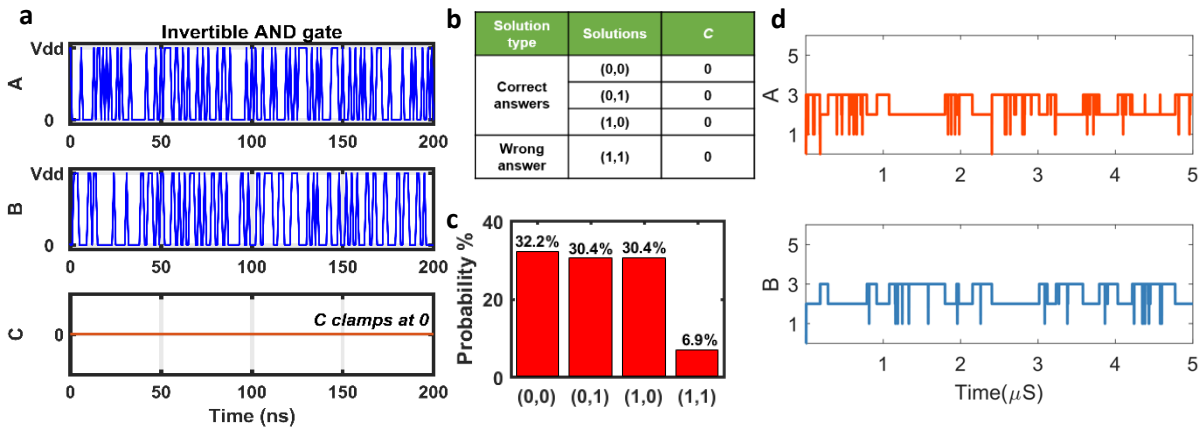

图 S1 可逆与门和 2位乘2位整数因子分解的实时输出。a 实时输出结果

输出端子为 A 和 B、将 C 钳位至 0 的可逆与门。b 将 C 钳位至零时可逆与门的真值表。c 在 200 ns 的观测时间内，将 C 钳位至 0 时所有解的概率。d 在 5 μs 的观测时间内，输入钳位至 6 时 2位乘2位整数因子分解的实时输出结果。

补充说明2. TDGL 中操作时间和系统体积的离散化

求解 TDGL 时，需要对体积和时间进行离散化。离散化体积通常设置为晶胞尺寸 [1], ，以近似热噪声诱导的晶格振动尺度，例如声子分析中的尺度。图 S2a 展示了不同的体积离散化方式。V_0 是本研究采用的 HZO 原始晶胞尺寸，为 1.38×10^{-28} m^3。数值模拟中，大于/小于 V_0 的体积分别代表较疏/较密的网格。值得注意的是，进一步减小网格尺寸意味着晶格振动会被高估，因为这会产生范围越来越大的涨落，这与相场模型中多项研究的结果一致 [1-4]。

对于时间离散化，TDGL 的数值解需要足够小的时间步长，以确保解的收敛性。图 S2b 进一步展示了时间步长对偶极子涨落的影响。尽管时间步长相差数个数量级，但整体极化涨落范围仍然相近，这表明随机性对热噪声中的时间步长具有鲁棒性。

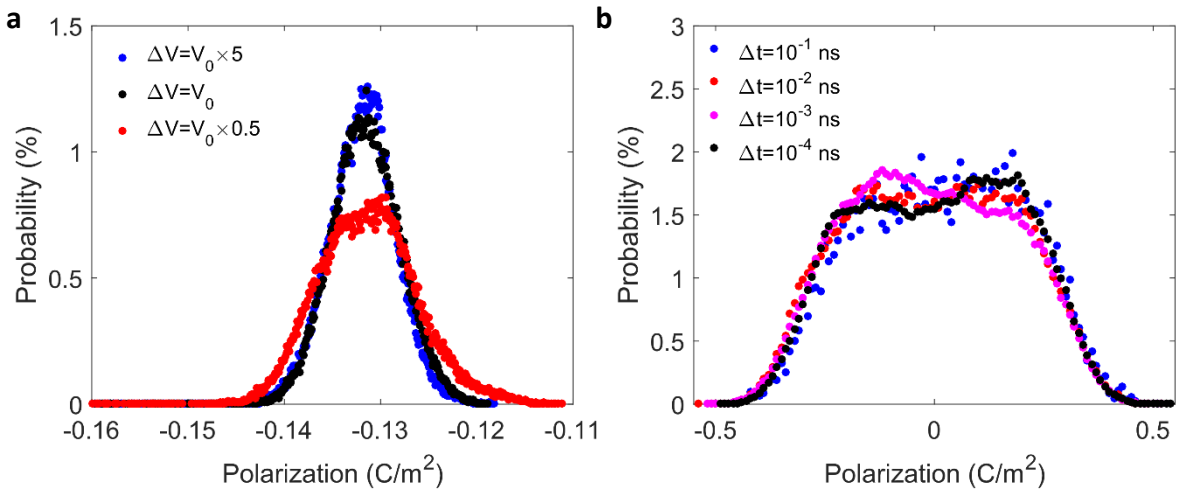

图 S2 时间和体积离散化下的极化分布。a 不同的体积

在 TDGL 中实现离散化。V_0 是 HZO 的晶胞体积。b 不同步长下的极化分布。

补充说明3. 温度和黏滞系数对铁电随机性的影响

黏滞系数 μ 和温度 T 都直接参与铁电动力学。热噪声与环境温度有关；在模拟中，假设整个铁电系统的环境温度均匀。此外，由于温度与晶格振动的幅度相关，因此它直接表征铁电系统的随机性。图 S3a 展示了不同温度下的极化动力学，温度范围为 100 至 300 K。温度升高会扩大偶极涨落的范围，图 S3b 进一步展示了这一点。随着温度降低，极化的统计分布变窄。值得注意的是，涨落中心位于原始自发极化位置附近。温度只会调节涨落范围，不会像外加电场那样使涨落中心发生偏移。

对于黏滞系数 μ，在相场模型中引入该参数，用于表征铁电材料的形变速度。图 S3c 展示了不同 μ 下的极化转变速率（PTR）。随着 μ 增大，在极化相同的情况下，PTR 降低，这与实验中观察到的较慢开关速度相对应 [1]。值得注意的是，在不同 μ 下，自发极化并未发生偏移（红点标出）。尽管黏滞系数不会直接影响偶极子涨落，但它仍可能影响铁电场效应晶体管的概率比特的电容，如图 S3d 所示。磁滞回线的斜率代表铁电系统的电容，而黏滞系数可能导致不同极化状态之间的电容变化各不相同。

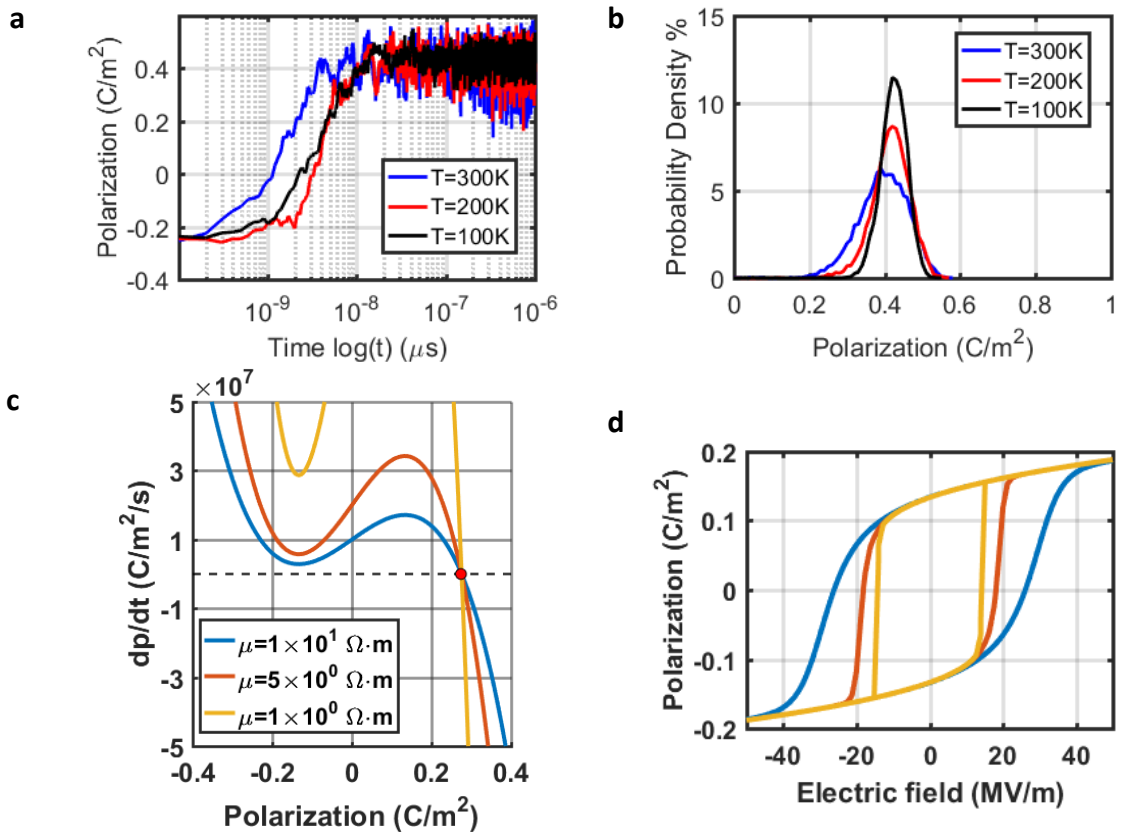

图 S3 温度和黏滞系数对铁电随机性的影响。a 动态

不同温度下的极化涨落。b 不同温度下极化的分布，观测时间为 1 μs。c 不同黏滞系数下单畴铁电体的极化转变速率。d 不同黏滞系数下的磁滞回线，展示了极化-电场关系中不同的斜率（电容）。

参考文献

[1] Indergand, R.、Vidyasagar, A.、Nadkarni, N. 和 Kochmann, D. M.（2020年）。相场研究块体多晶锆钛酸铅温度依赖的铁电响应的方法。《力学与固体物理学杂志》，144，104098。

[2] Nambu, Shinji, 和 Djuniadi A. Sagala. “铁电钙钛矿中的畴形成和弹性长程相互作用。”《物理评论B》50.9（1994年）：5838。[3] Wen, H., Liu, J., Chen, W., Xiong, W., & Zheng, Y.（2022年）。基于相场模型实现的铁电体极化动力学热力学。《物理评论B》，106(2)，024111。[4] Akamatsu, H., Yuan, Y., Stoica, V.A., Stone, G., Yang, T., Hong, Z., Lei, S., Zhu, Y., Haislmaier, R.C., Freeland, J.W. 和 Chen, L.Q.，2018年。光激发的吉赫兹铁电畴动力学。《物理评论快报》，120(9)，p.096101。