具有栅极诱导相变的二维拓扑绝缘体场效应晶体管紧束缚器件建模

Yungyeong Park、Yosep Park、Hyeonseok Choi、Subeen Lim、Dongwook Kim 和 Yeonghun Lee，*IEEE*会员

摘要—**基于二维量子自旋霍尔绝缘体构建的拓扑绝缘体场效应晶体管（TIFET）因无耗散边缘输运可能带来的优异性能，正被视为先进逻辑晶体管。本文提出一种基于紧束缚模型和非平衡格林函数形式主义的器件建模方法，用于模拟 TIFET 的电流-电压特性。随后，我们利用器件模拟器展示沟道长度对器件性能的影响。该器件建模不仅能够直接评估 TIFET 的性能，还有助于深入了解通过拓扑相变实现的非传统开关操作。**

索引词—**拓扑绝缘体、量子自旋霍尔效应、场效应晶体管、紧束缚、非平衡格林函数形式主义。**

I. 引言

T半导体技术的持续进步推动了对新材料和器件概念的探索，例如二维场效应晶体管（FET）、隧穿场效应晶体管和负电容场效应晶体管[1], [2]。二维量子自旋霍尔效应（QSH）拓扑绝缘体[3], [4] 会发生奇异相变：通过反演对称性破缺，拓扑非平庸量子自旋霍尔相转变为平庸普通绝缘体相。不同于平庸绝缘体，二维量子自旋霍尔绝缘体具有受时间反演对称性保护、免受反向散射影响的导电边缘态，为实现低功耗器件提供了途径。通过测量不同电场下的能带结构和带隙调制，已在锗烯[5], 、Na_3Bi[6] 和黑磷[7] 中实验观测到由反演对称性破缺引起的相变。因此，可以像在传统金属氧化物半导体场效应晶体管（MOSFET）[8], [9], [10], [11], [12], [13]中那样，利用拓扑相变实现由电控栅极调制的开关操作。除了直接的栅极诱导相变之外，还提出了多种开关机制——栅极调制通过人为缺陷引起的反向散射[14] ，以及栅极诱导的额外边缘态（在碲化汞纳米带中形成导电通道）[15]。在此背景下，由二维量子自旋霍尔绝缘体构成的拓扑绝缘体场效应晶体管（TIFET）已成为一种可克服器件性能根本限制的替代器件。此外，TIFET 还可突破亚阈值摆幅的玻尔兹曼极限，即室温下的 60 mV/decade[16], [17]。

尽管归因于拓扑相变的拓扑绝缘体场效应晶体管可能为半导体技术的创新提供前所未有的机遇，但将拓扑绝缘体集成到场效应晶体管框架中仍面临重大挑战，并需要对独特的器件运行有全面的理解。正是在这里，器件建模变得至关重要，它是理解拓扑绝缘体场效应晶体管基础物理学、预测器件性能并指导实验的重要工具。本文有两个目标：第一，开发一个全面的器件模型，以涵盖非平凡沟道材料的基本器件物理学，并考虑栅介质特性和沟道长度效应——尽管已涉及器件仿真[16], [17]，这些因素此前仍被忽视；第二，利用该模型预测拓扑绝缘体场效应晶体管的性能，从而为基于拓扑绝缘体的未来器件设计与制造提供有价值的见解。

本文结构如下。在下一节中，我们详细描述基于紧束缚模型和非平衡格林函数形式[18], [19]的器件建模。随后，我们介绍如何确定材料与器件参数，并展示将该器件建模应用于以锡烯[13] 为沟道材料的拓扑绝缘体场效应晶体管，其中讨论拓扑绝缘体场效应晶体管的沟道长度依赖性。最后，我们以未来研究的潜在方向结束本文。

第一条脚注中的本段将注明您提交论文以供评审的日期。本研究获得仁川国立大学 2022 年研究资助。Y. Park、Y. Park、H. Choi、S. Lim 和 Y. Lee 均任职于仁川国立大学电子工程系，地址为仁川 22012，韩国；Y. Lee 还隶属于韩国仁川 22012 仁川国立大学工程与技术研究所（电子邮箱：y.lee@inu.ac.kr）。D. Kim 隶属于美国犹他州盐湖城 84112 犹他大学材料科学与工程系。

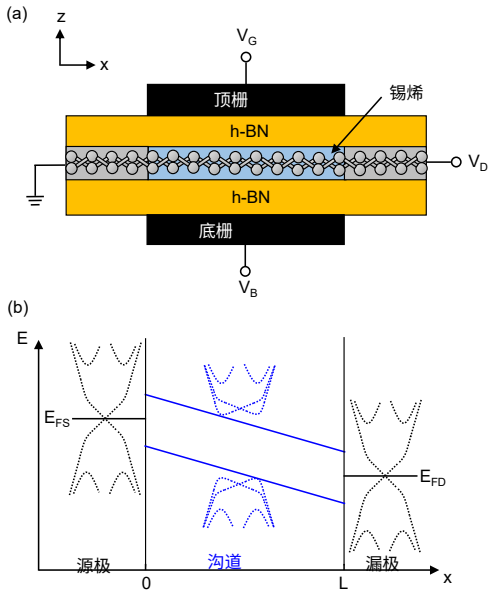

图 1 器件几何结构和能带图。(a) 双栅器件结构的侧视图。源极、沟道和漏极材料均为锯齿形锡烯纳米带，栅极介电层为六方氮化硼（六方氮化硼）。(b) 关态下沿沟道方向的实空间示意性能带图（实线），叠加了 E-k 空间中的能带结构（虚线）。E-k 能带结构假设沿$\boldsymbol{x}$方向存在周期性原子势，且外部势梯度可忽略。

II. 紧束缚器件建模

我们实现了一个器件模拟器，以研究基于紧束缚模型和非平衡格林函数形式体系的拓扑绝缘体场效应晶体管的电流-电压特性[18], [19]，并使用 Kwant（一个用于数值量子输运计算的 Python 软件包）[20]。图 1(a) 展示了拓扑绝缘体场效应晶体管所采用的双栅器件结构。顶栅和底栅分别由顶栅电压 V_{G} 和底栅电压 V_{B} 偏置。顶栅和底栅需要施加不同的电压，以打破二维量子自旋霍尔绝缘体的反演对称性。如图 1(b) 所示，假定沟道势分布沿源极和漏极之间的沟道线性变化。源极费米能级 E_{FS} 与漏极费米能级 E_{FD} 之差由 $E_{\mathrm{FS}} = E_{\mathrm{FD}} + eV_{\mathrm{D}}$ 给出，其中 e 为元电荷，V_{D} 为漏极电压。沟道势能随后表示为 $eV_{\mathrm{D}}x/L$，其中 L 为沟道长度。

为用紧束缚模型表示锡烯的能带结构，我们采用描述六角晶格量子自旋霍尔绝缘体的 Kane-Mele 模型[3], [4]:

$$H = -t\sum_{\langle i,j\rangle\alpha} c_{i\alpha}^{\dagger}c_{j\alpha} + i\lambda_{\mathrm{so}}\sum_{\langle\langle i,j\rangle\rangle\alpha\beta} \nu_{ij}c_{i\alpha}^{\dagger}s_{\alpha\beta}^{z}c_{j\beta} + \lambda_{\mathrm{v}}\sum_{i\alpha}\epsilon_i c_{i\alpha}^{\dagger}c_{i\alpha} + i\lambda_{\mathrm{R}}\sum_{\langle i,j\rangle\alpha\beta} c_{i\alpha}^{\dagger}\left(\mathrm{s}_{\alpha\beta}\times\hat{\mathrm{d}}_{ij}\right)_z c_{j\beta}, \quad (1)$$

其中，$c_{i\alpha}^{\dagger}$（$c_{i\alpha}$）是格点 i处自旋为 $\alpha\in\{\uparrow,\downarrow\}$的二次量子化产生（湮灭）算符。式（1）中的第一项是从格点 j 到 i 的最近邻跃迁项，其跃迁强度为 t。第二项是自旋轨道耦合（SOC）项，由强度为 λ_{so}的次近邻跃迁描述；若次近邻跃迁相对于正 z轴沿逆时针（顺时针）方向，则 $\nu_{ij}=+1$（-1）。这里，$s_{\alpha\beta}^{z}$ 是格点 i 和 j处自旋分别为 α 和 β 的泡利矩阵 s^{z} 的矩阵元。第三项是交错势项，它会破坏反演对称性，其中子晶格 A（B）对应 $\epsilon_i=+1$（-1）。由两个不同栅极电压产生的垂直电场 E_z 会导致反演对称性破缺，这意味着强度 λ_{v} 可能与 E_z成正比，即 $\lambda_{\mathrm{v}}=\alpha_{\mathrm{v}}eE_z$，其中 α_{v}[16]是材料特定参数。最后一项是 Rashba 项，其中 $\mathrm{s}_{\alpha\beta}$ 是格点 i 和 j处自旋分别为 α 和 β 的泡利矢量 s 的矩阵元；$\hat{\mathrm{d}}_{ij}$ 是从格点 j 到 i 的最近邻键单位矢量，$\hat{\mathrm{d}}_{ij}=\mathrm{d}ij/|\mathrm{d}_{ij}|$。由于 Rashba 项也是面外电场 E_z 导致反演对称性破缺的另一来源，其强度 λ_{R} 同样表示为 $\lambda_{\mathrm{R}}=\alpha_{\mathrm{R}}eE_z$，其中 α_{R}[16]是材料特定参数。对于器件仿真，还需进一步考虑两点：（1）添加现场能项 $\sum \mathrm{h}_{i\alpha}\ {}_{i}c_{i\alpha}^{\dagger}c_{i\alpha}$，其中 $\mathrm{h}_i=eV_{\mathrm{D}}x_i/L$，以描述沿沟道线性变化的势；$x_i$ 是格点 i 相对于源极端的位置；（2）为源极和漏极设置 $\lambda_{\mathrm{v}}=\lambda_{\mathrm{R}}=0$，使它们保持在量子自旋霍尔效应相，而沟道则经历拓扑相变。图 1(b)所示的示意性能带结构代表关态下源极、沟道和漏极的不同相，此时源极、沟道和漏极分别呈现量子自旋霍尔相、平庸相和量子自旋霍尔相。

给定哈密顿量，非平衡格林函数方法[18], [19] 使我们能够处理量子输运现象，以模拟器件运行。根据朗道尔-比特克公式[21], ，流经源极和漏极引线的漏极电流为

$$I_{\mathrm{D}} = \frac{e}{2\pi\hbar}\int T(E)[f_{\mathrm{S}}(E) - f_{\mathrm{D}}(E)]dE, \quad (2)$$

其中E是能量，$\hbar$ 是约化普朗克常数，$f_{\mathrm{S}}(E)$ 和 $f_{\mathrm{D}}(E)$ 分别是源极和漏极处的费米-狄拉克分布函数。透射系数根据非平衡格林函数形式体系计算为 $T(E) = \mathrm{Tr}\left[\Gamma_{\mathrm{S}}(E)G^{\mathrm{R}}(E)\Gamma_{\mathrm{D}}(E)G^{\mathrm{R}\dagger}(E)\right]$。其中，$G^{\mathrm{R}}$ 是推迟格林函数，而 $\Gamma_{\mathrm{S}}(E) = i\left[\Sigma_{\mathrm{S}}(E) - \Sigma_{\mathrm{S}}^{\dagger}(E)\right]$ 和 $\Gamma_{\mathrm{D}}(E) = i\left[\Sigma_{\mathrm{D}}(E) - \Sigma_{\mathrm{D}}^{\dagger}(E)\right]$ 分别是对应于源极和漏极引线的展宽矩阵。推迟格林函数为

$$G^{\mathrm{R}}(E) = [EI - H - \Sigma_{\mathrm{S}}(E) - \Sigma_{\mathrm{D}}(E)]^{-1}, \quad (3)$$

其中，Σ_{S} 和 Σ_{D} 是由两条引线产生的自能，I 是单位矩阵。

为求得锡烯的紧束缚参数，我们使用材料探索开源软件包 OpenMX，基于密度泛函理论（DFT）进行第一性原理电子结构计算。我们采用 Perdew-Burke-Ernzerhof（PBE）泛函形式的广义梯度近似（GGA）、守恒范数赝势以及优化赝原子基函数。实空间网格截断能设为 220 Ry，并采用 k 点 $8\times8\times1$ 网格进行

布里渊区采样。由于量子自旋霍尔效应伴随着式（1）中所包含的自旋轨道耦合，因此我们进行了包含自旋轨道耦合的非共线自旋计算。

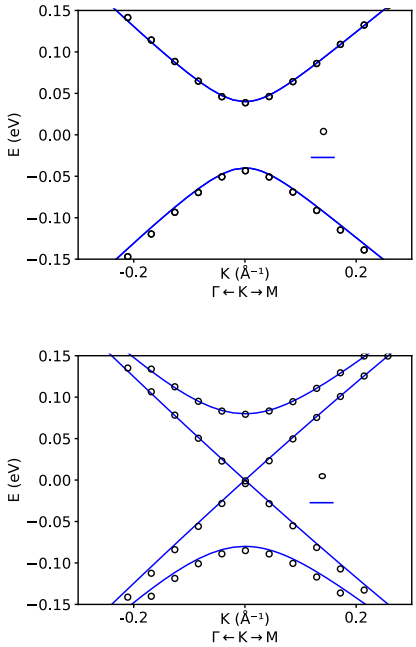

图 2 用于提取紧束缚参数的块体锡烯在 K 点附近的能带结构，分别对应 (a) $E_z = 0$ V/Å 和 (b) $E_z = 0.5$ V/Å；后者是触发带隙闭合的临界电场，图中展示的是拓扑相变发生时的情况。空心圆和实线分别表示通过密度泛函理论和紧束缚方法计算得到的能带。

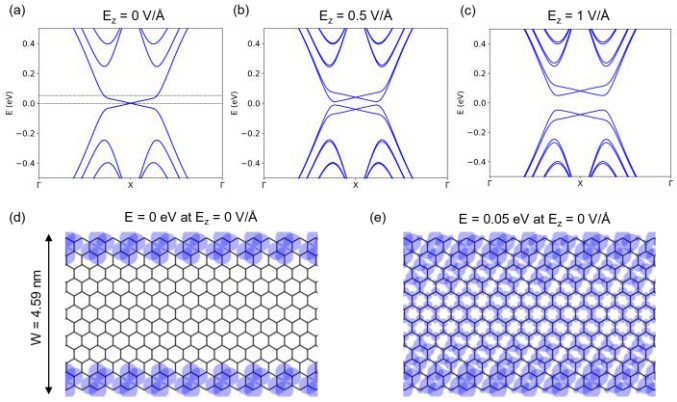

图 3 不同 E_z 下，宽度为 W 4.59 nm 的锯齿形锡烯纳米带的能带结构：(a) $E_z = 0$ V/Å，对应导通态；(b) $E_z = 0$ $E_z = .5$ 1 V/Å，处于阈值；(c) V/Å，对应关态。纳米带在 $E_z = 0$ V/Å 下的能带中的虚线表示用于计算波函数的选定能级。图中在六角晶格上描绘了对应于能量为 (d) $E = 0$ eV 和 (e) $E = 0.05$ eV 状态的波函数模方。每个格点处圆圈的大小表示模方的大小，单位为任意单位。

III. 结果与讨论

第一步是确定电子结构计算和器件仿真的参数。图 2 展示了将六角晶格块体锡烯的 TB 能带结构拟合到密度泛函理论能带结构的结果。在没有电场的情况下提取参数 t 和 λ_{so}，然后通过在临界电场下进行拟合来确定 α_v 和 α_R。所得数值如下：$t = 0.7$ eV、$\lambda_{so} = 40/(3\sqrt{3})$ meV 和 $\alpha_v =$ 0 08 $\alpha_R = 0$ α_R .

Å，以及 Å。该数值为零，与 Rashba 项对锡烯影响可忽略不计的情况相符[30]。对于器件仿真，我们还需要其他参数。在器件仿真中，单层锡烯的晶格常数为 4.68 Å，厚度 t_s 为 3.3 Å [31],，相对介电常数 ε_s 为 1.6[32]。栅极介电层采用六方氮化硼，厚度 t_i 为 3.17 Å，相对介电常数 ε_i 为 3.29[33]。此外，纳米带的宽度设为 4.59 nm，此时有限尺寸效应受到抑制，从而显现拓扑边缘态[34]。设置好几何和介电参数后，通过考虑由六方氮化硼、锡烯和六方氮化硼层构成的串联电容，确定锡烯层中的 E_z，得到 $E_z = (V_G - V_B)/(2t_i\varepsilon_s/\varepsilon_i + t_s)$。温度设为 300 K。

图 3(a) 显示，在不存在 E_z 时，量子自旋霍尔相在零能量附近的能带交叉点处呈现拓扑保护边缘态。在这一量子自旋霍尔相中，$E = 0$ eV 范围内的稳健边缘态会禁止反向散射，尽管当态偏离交叉点时，边缘态与体态之间仍会发生散射（图 3(d) 和 (e)）。如果施加较大的 E_z以打破反演对称性，就会发生拓扑相变并形成能隙（图 3(c)）。在平庸相中，尽管能隙附近仍存在自旋-动量锁定态，但由于与出现在相同能级的体态相互作用，这些态会受到反向散射。

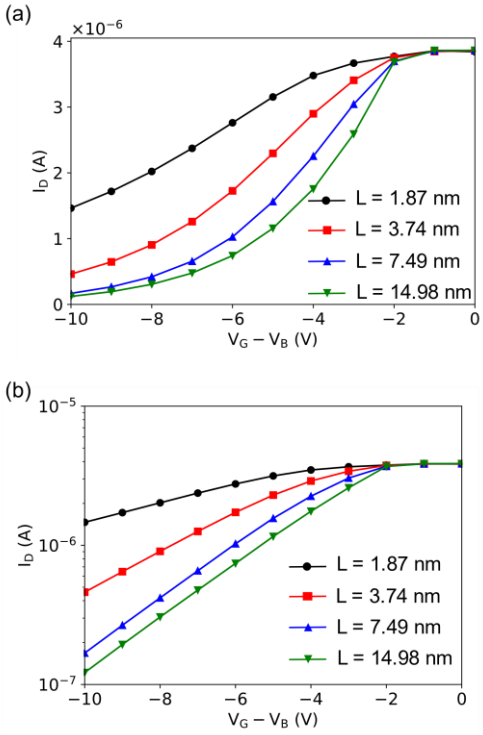

图 4 不同沟道长度在 $V_D = 0.05$ V 下的电流-电压特性：漏极电流 I_D 与 $V_G - V_B$ 的关系曲线，(a) 线性图和 (b) 半对数图，$W = 4.59$ nm。

采用这些材料和器件参数，我们对具有不同沟道长度的锡烯拓扑绝缘体场效应晶体管进行了器件仿真（图 4）。I_D-V_G 曲线呈现出较为常规的开关操作；事实上，利用成熟的逻辑半导体技术来取代金属氧化物半导体场效应晶体管，并且无需在电流-电压特性方面付出太多努力，是一种理想选择。此外，只需改变 V_B，即可直接调节拓扑绝缘体场效应晶体管的阈值电压。图 4 还显示，在 $V_G - V_B = 0$ V 时，导通态电流不受沟道长度影响。这并不意外，因为量子输运模拟假设为弹道输运；然而，对于传统金属氧化物半导体场效应晶体管而言，由于不可避免地存在杂质散射和声子散射等多种散射源，这一假设并不现实[35]。另一方面，由于自旋-动量锁定边缘态不会发生反向散射，拓扑绝缘体场效应晶体管中很可能出现弹道输运[11]。因此，这一建模所得的性能接近拓扑绝缘体场效应晶体管的实际性能。

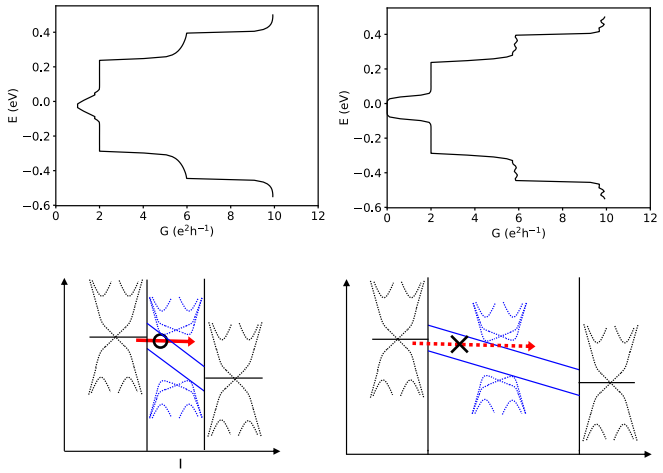

图5 关态电导随E 的变化，其中(a) $L =$ 1 87 $L =$ 14 98 $W =$ 4 59 . nm和(b) . nm，以及在V_D = 0.05 V和 $V_G - V_B = -6.4$ V下的 . nm。该栅极电压产生 $E_z = 1$ V/Å 。相应的能带图说明了(c)短沟道和(d)长沟道器件中隧穿的存在与否。

图 3(c) 显示，较大的 E_z 会使沟道中的锡烯打开带隙，发生拓扑相变，从而在平庸相（即关态）中造成载流子缺乏。考虑到进入关态的机制，预计电流不会依赖沟道长度。然而，观察到关态电流高度依赖于沟道长度。显然，对于极短沟道，关态电流这种出乎意料的长度依赖性尤为显著。这种长度依赖性使我们联想到超短沟道 MOSFET 中的隧穿漏电[35]。由于可以直接从电导中看出隧穿分量，我们绘出了本文中沟道长度最短和最长器件的关态电导随能量的变化关系（图 5(a) 和 (b)）。不同沟道长度对应的电导曲线总体形状相似。然而，对于短沟道器件，在 $E = 0$ eV 附近观察到有限电导，而长沟道器件的电导几乎为零。结合这种显著的长度依赖性，非零电导表明，对于短沟道 TIFET，关态漏电是由载流子从量子自旋霍尔源极隧穿至量子自旋霍尔漏极，并穿过拓扑平庸沟道形成的势垒所致。（图 5(c)）相比之下，对于长沟道器件，由于载流子无法穿过传统沟道中的势垒进行输运，隧穿受到抑制。（图 5(d)）

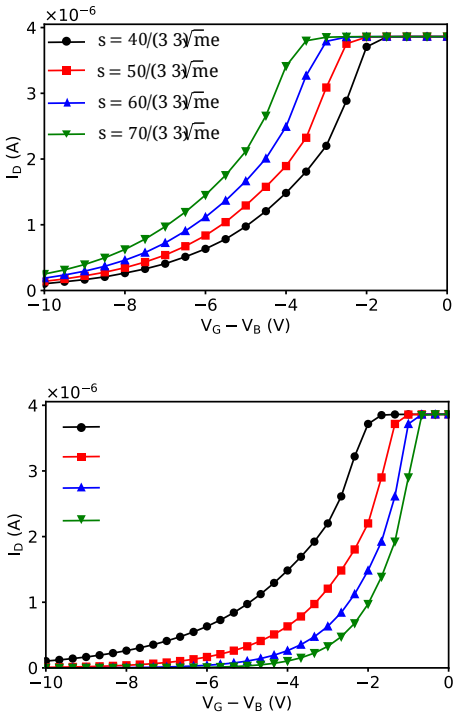

图6 电流-电压特性，漏极电流I_D 与$V_G - V_B$的关系，针对不同的(a) λ_{so} 强度和(b) α_v 强度，$W = 4.59$ nm和$L = 28.08$ nm，电压为 $V_D = 0.05$ V。

为了通过缩小图4所示的宽电压扫描范围来改善开关操作，我们在改变紧束缚参数的条件下进行了器件仿真。图6给出了不同λ_{so} 和α_v下的I_D-V_G 曲线，同时将其余锡烯参数和器件参数保持在各自的固定值。在图6(a)中，随着自旋轨道耦合强度降低，器件在更小的栅极电压下发生开关。这是因为较小的自旋轨道耦合会减小量子自旋霍尔相的带隙，从而降低相变所需的栅极电压。此外，图6(b)表明，相变所需栅极电压的降低伴随着较大的α_v。这是因为当施加垂直电场时，增大的交错势（$\lambda_v = \alpha_v e E_z$）会打破自旋-谷简并并迅速减小能隙，从而导致自旋极化

无能隙相以及相变，最终呈现出这一趋势。这为拓扑绝缘体场效应晶体管的低电压运行和性能优化提供了潜在途径。

基于拓扑绝缘体场效应晶体管建模的结果，还可以进一步展开讨论。仅依赖从体能带结构中提取的紧束缚参数，不太可能完全再现二维拓扑绝缘体的边缘特性

。有必要从微观层面分析拓扑绝缘体场效应晶体管的边缘输运，并考虑各种边缘特性，例如边缘弛豫、钝化以及纳米带的类型（如扶手椅型和锯齿型）。此外，考虑到使用原子级薄栅极介电层时，为切换器件所需的栅极电压扫描范围很大，可达约 10 V，锡烯不太可能成为拓扑绝缘体场效应晶体管的合适沟道材料。当然，这并不意味着所有拓扑绝缘体场效应晶体管都不实用。存在多种参数各异的二维拓扑绝缘体[36]，它们或可解决这一问题，并进一步改善拓扑绝缘体场效应晶体管。例如，通过调控 Rashba 项[11],，1T'-MoS_2 会在 $E_z = 00.142$ V/Å 处发生拓扑相变，其临界电场远小于锡烯，因此有望使器件以陡峭斜率运行。

IV. 结论

我们采用紧束缚模型和非平衡格林函数形式体系对拓扑绝缘体场效应晶体管进行了器件建模。为此，我们详细介绍了从数学形式体系到参数提取的完整流程。此外，对不同沟道长度器件的仿真结果表明，与超短沟道金属氧化物半导体场效应晶体管类似，沟道必须足够长，才能减少关态漏电流中的隧穿分量。采用不同材料参数进行的仿真结果显示，提升拓扑绝缘体场效应晶体管性能有望取得进展。尽管如此，显然仍需进一步研究，才能实现陡峭斜率、低功耗的器件。器件建模使我们得以研究奇异的拓扑相变如何影响器件运行，也可扩展至对拓扑绝缘体场效应晶体管其他引人关注特性的研究，包括几何效应、结工程、对沟道的非均匀栅极控制等。归根结底，这项工作将有助于从根本上理解拓扑物理与半导体器件工程之间的相互作用。

参考文献

[1] S. Salahuddin、K. Ni 和 S. Datta，“电子学中超尺度缩放的时代”，*Nature Electronics*，第 1 卷，第 8 期，第 442–450 页，2018 年 8 月，doi: 10.1038/s41928-018-0117-x。[2] S. Das 等，“面向未来集成电路的二维材料晶体管”，*Nat Electron*，第 4 卷，第 11 期，第 786–799 页，2021 年 11 月，doi: 10.1038/s41928-021-00670-1。[3] C. L. Kane 和 E. J. Mele，“Z 2 拓扑序与量子自旋霍尔效应”，《物理评论快报》，第 95 卷，第 14 期，第 146802 页，2005 年 9 月，doi：10.1103/PhysRevLett.95.146802。[4] C. L. Kane 和 E. J. Mele，“石墨烯中的量子自旋霍尔效应”，《物理评论快报》，第 95 卷，第 22 期，第 226801 页，2005 年 11 月，doi：10.1103/PhysRevLett.95.226801。[5] P. Bampoulis 等，“锗烯中的量子自旋霍尔态与拓扑相变”，《物理评论快报》，第 130 卷，第 19 期，第 196401 页，2023 年 5 月，doi: 10.1103/PhysRevLett.130.196401。[6] J. L. Collins 等，“电场调控超薄 Na3Bi 中的拓扑相变”，*Nature*，第 564 卷，第 7736 期，第 390–394 页，2018 年 12 月，doi：10.1038/s41586-018-0788-5。[7] J. Kim 等，“黑磷中可调带隙与各向异性狄拉克半金属态的观测”，《科学》，第 349 卷，第 6249 期，第 723–726 页，2015 年 8 月，doi：10.1126/science.aaa6486。[8] L. A. Wray，“拓扑晶体管”，*Nature Phys*，第 8 卷，第 10 期，第 705–706 页，2012 年 10 月，doi: 10.1038/nphys2410。

[9] M. Ezawa，“硅烯纳米带中的量子化电导与场效应拓扑量子晶体管”，应用物理快报，第102卷，第17期，第172103页，2013年4月，doi: 10.1063/1.4803010。[10] J. Liu、T. H. Hsieh、P. Wei、W. Duan、J. Moodera和L. Fu，“二维拓扑晶体绝缘体中具有电可调带隙的自旋过滤边缘态”，《自然·材料》，第13卷，第2期，第178–183页，2014年2月，doi: 10.1038/nmat3828。[11] X. Qian、J. Liu、L. Fu和J. Li，“二维过渡金属二硫属化物中的量子自旋霍尔效应”，《科学》，第346卷，第6215期，第1344–1347页，2014年12月，doi: 10.1126/science.1256815。[12] Q. Liu、X. Zhang、L. B. Abdalla、A. Fazzio和A. Zunger，“通过电场将普通绝缘体转变为拓扑绝缘体及其在黑磷烯中的应用”，《纳米快报》，第15卷，第2期，第1222–1228页，2015年2月，doi: 10.1021/nl5043769。[13] A. Molle、J. Goldberger、M. Houssa、Y. Xu、S.-C. Zhang和D. Akinwande，“起伏二维烯片”，《自然·材料》，第16卷，第2期，第163–169页，2017年2月，doi: 10.1038/nmat4802。[14] W. G. Vandenberghe和M. V. Fischetti，“不完美二维拓扑绝缘体场效应晶体管”，《自然·通讯》，第8卷，第1期，第14184页，2017年1月，doi: 10.1038/ncomms14184。[15] H.-H. Fu、J.-H. Gao和K.-L. Yao，“碲化汞纳米带中的拓扑场效应量子晶体管”，《纳米技术》，第25卷，第22期，第225201页，2014年6月，doi: 10.1088/0957-4484/25/22/225201。[16] M. Nadeem、I. Di Bernardo、X. Wang、M. S. Fuhrer和D. Culcer，“借助拓扑量子场效应克服晶体管中的玻尔兹曼暴政”，《纳米快报》，第21卷，第7期，第3155–3161页，2021年4月，doi: 10.1021/acs.nanolett.1c00378。[17] S. Banerjee、K. Jana、A. Basak、M. S. Fuhrer、D. Culcer和B. Muralidharan，“通过反铁磁交换实现稳健的亚热电子拓扑晶体管效应”，《物理评论·应用》，第18卷，第5期，第054088页，2022年11月，doi: 10.1103/PhysRevApplied.18.054088。[18] L. V. Keldysh，“非平衡过程的图示技术”，《苏联物理学—实验与理论物理学杂志》，第20卷，第1018页，1965年。[19] S. Datta，“电阻：原子尺度视角”，《纳米技术》，第15卷，第7期，第S433–S451页，2004年7月，doi: 10.1088/0957- 4484/15/7/051。[20] C. W. Groth、M. Wimmer、A. R. Akhmerov和X. Waintal，“Kwant：量子输运软件包”，《新物理学杂志》，第16卷，第6期，第063065页，2014年6月，doi: 10.1088/1367-2630/16/6/063065。[21] R. Landauer，“金属导电中局域散射体引起的电流与电场的空间变化”，《IBM研究与开发杂志》，第1卷，第3期，第223–231页，1957年7月，doi: 10.1147/rd.13.0223。[22] P. Hohenberg和W. Kohn，“非均匀电子气”，《物理评论》，第136卷，第3B期，第B864–B871页，1964年11月，doi: 10.1103/PhysRev.136.B864。[23] W. Kohn和L. J. Sham，“包含交换与关联效应的自洽方程”，《物理评论》，第140卷，第4A期，第A1133–A1138页，1965年11月，doi: 10.1103/PhysRev.140.A1133。[24] T. Ozaki，“面向大规模电子结构的变分优化原子轨道”，物理评论B，第67卷，第15期，第155108页，2003年4月，doi: 10.1103/PhysRevB.67.155108。[25] T. Ozaki和H. Kino，“从氢到氪的数值原子基组轨道”，物理评论B，第69卷，第19期，第195113页，2004年5月，doi: 10.1103/PhysRevB.69.195113。[26] T. Ozaki和H. Kino，“第一性原理线性组合原子轨道方法的高效投影算符展开”，物理评论B，第72卷，第4期，第045121页，2005年7月，doi: 10.1103/PhysRevB.72.045121。[27] K. Lejaeghere等，“固体密度泛函理论计算的可重复性”，《科学》，第351卷，第6280期，第aad3000页，2016年3月，doi: 10.1126/science.aad3000。[28] J. P. Perdew、K. Burke和M. Ernzerhof，“广义梯度近似的简化”，《物理评论快报》，第77卷，第18期，第3865–3868页，1996年10月，doi: 10.1103/PhysRevLett.77.3865。[29] I. Morrison、D. M. Bylander和L. Kleinman，“非局域厄米范德堡范数守恒赝势”，物理评论B，第47卷，第11期，第6728–6731页，1993年3月，doi: 10.1103/PhysRevB.47.6728。[30] K. Jana和B. Muralidharan，“利用单层二维烯实现稳健的全电学拓扑谷过滤”，npj 2D Mater Appl，第6卷，第1期，第19页，2022年3月，doi: 10.1038/s41699-022-00291-y。[31] S. S axena、R. P. Chaudhary和S. Shukla，“锡烯：原子级厚度的二维六方锡悬空层”，《科学报告》，第6卷，第1期，第31073页，2016年8月，doi: 10.1038/srep31073。[32] R. John和B. Merlin，“石墨烯、硅烯、锗烯和锡烯从红外到远紫外的光学性质——第一性原理研究”，

固体物理与化学杂志，第110卷，第307–315页，2017年11月，doi: 10.1016/j.jpcs.2017.06.026。[33] A. Laturia、M. L. Van de Put和W. G. Vandenberghe，“六方氮化硼与过渡金属二硫属化物的介电性质：从单层到块体”，*npj*二维材料与应用，第2卷，第1期，第6页，2018年12月，doi: 10.1038/s41699-018-0050-x。[34] C.-H. Chung、D.-H. Lee和S.-P. Chao，“锯齿型纳米带上的Kane-Mele哈伯德模型：拓扑边缘态的稳定性与量子相变”，物理评论*B*，第90卷，第3期，第035116页，2014年7月，doi: 10.1103/PhysRevB.90.035116。[35] 施敏、K. K. Ng和Y. Li，半导体器件物理学，第四版。美国新泽西州霍博肯：威立，2021年。[36] M. S. Lodge、S. A. Yang、S. Mukherjee和B. Weber，“原子级薄量子自旋霍尔绝缘体”，先进材料，第33卷，第22期，第2008029页，2021年6月，doi: 10.1002/adma.202008029。