利用 1T′-MoS_2 和 HZO 设计适用于低温应用的极低功耗拓扑晶体管

Yosep Park[a]，*Yungyeong Park*[b]，*Hyeonseok Choi*[b]，*Subeen Lim*[b]，以及 *Yeonghun Lee*[a,b,c*]

[a]仁川国立大学智能半导体工程系，大韩民国仁川市延寿区学院路119号，邮编22012

[b]仁川国立大学电子工程系，仁川国立大学，大韩民国仁川市延寿区学院路119号，邮编22012

[c]仁川国立大学工程与技术研究所，大韩民国仁川延寿区学院路119号，邮编22012

*电子邮箱：y.lee@inu.ac.kr

摘要：大规模量子计算需要低温电子控制器，例如控制/读出电路和路由电路。然而，当前技术面临功耗过高的问题，阻碍了大规模量子比特集成。在此，我们从理论上提出了一种功耗极低的低温拓扑晶体管，即负电容拓扑绝缘体场效应晶体管（NC-TIFET）。通过将栅场诱导的二维1T′-二硫化钼（MoS_2）拓扑沟道与铪锆氧化物（HZO）铁电栅绝缘层相结合，NC-TIFET在低漏极电压（V_D）下表现出极其陡峭的转移曲线和超高跨导。因此，NC-TIFET是降低低温电子接口功耗的理想候选器件，而低温电子接口对于大规模量子计算系统至关重要。

关键词：拓扑绝缘体、负电容、1T′-二硫化钼$_2$, HZO、陡峭斜率开关、超高跨导

研究人员一直在开发量子计算机，以解决经典计算机无法解决的复杂问题[1–3]。为了实现大规模量子计算系统，需要电子控制器（即控制/读出电路和路由电路），以尽可能减少运行量子计算系统所需的同轴电缆数量（图 1a）[4–8]。然而，随着量子比特可扩展性的提升，这些控制器面临着功耗超过传统稀释制冷机可提供的制冷功率限制这一挑战[3,9,10]。为了解决制冷功率问题，研究人员已探索 III-V族高电子迁移率晶体管（HEMT）的潜力，期望其实现低功耗和高频运行[7, 8, 11–13]。然而，HEMT 的功耗对于运行大规模

量子计算系统而言仍然过高[9,10,14]。为了突破电子控制器的功耗瓶颈，我们提出一种基于新型工作原理的超低功耗晶体管，它采用二维拓扑绝缘体（2D TIs）。二维拓扑绝缘体具有两大优势：其拓扑保护边缘态能够抑制反向散射，实现弹道输运；并且，当面外电场（E_z）打破反演对称性时，它们会从量子自旋霍尔（QSH）相转变为普通绝缘体（NI）相，发生拓扑相变[15,16]。这些二维拓扑绝缘体的特性使其可用于构建 TIFET，其特点是具有新型开关机制和较高的导通态电流。

除上述特性外，TIFET还具备一种理想特性，能够最大化铁电材料所引入的负电容运行增益。在传统场效应晶体管中，反型起始时形成的量子电容（C_{Q}）已知会在I_{D}–V_{G} 特性中引起不良滞后，从而限制负电容效应所带来的增益[17]。相比之下，在拓扑绝缘体场效应晶体管的开关过程中，仅边缘态受到调制，而拓扑绝缘体的大部分区域（即体区）中没有电荷。因此，场效应晶体管中的这种反型在TIFET工作期间并不会发生，这使我们能够充分利用负电容来放大拓扑绝缘体场效应晶体管中的电场。尽管NC-TIFET的概念框架 此前已被提出[18],，但我们的工作提供了包括电流-电压特性在内的全面分析，并在大规模量子计算机的背景下讨论了其优越性能。

在本研究中，我们结合紧束缚（TB）模型[19], $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 模型[20,21], 非平衡格林函数（NEGF）形式体系[22,23],，并通过兰道–卡拉特尼科夫（L–K）方程[24]引入负电容效应，从而从理论上提出了 NC-TIFET 的器件模型。该模型通过引入铁电材料，为实现陡峭斜率开关和最大化E_z 放大提供了理论分析。随后，将 NC-TIFET 的电压增益（A_{V}）与

传统负电容场效应晶体管（NCFET）的电压增益进行比较，并结合各自的等效电容电路和电荷调制特性，分析二者在A_V 方面的差异。最后，仿真结果表明，与典型 TIFET 相比，NC-TIFET 具有极其陡峭的陡峭斜率传输曲线。此外，该陡峭斜率传输曲线在低V_D下可产生超高跨导（g_m），从而充分发挥其在量子计算电子控制器低温应用中的潜力，例如控制、读出和路由电路。

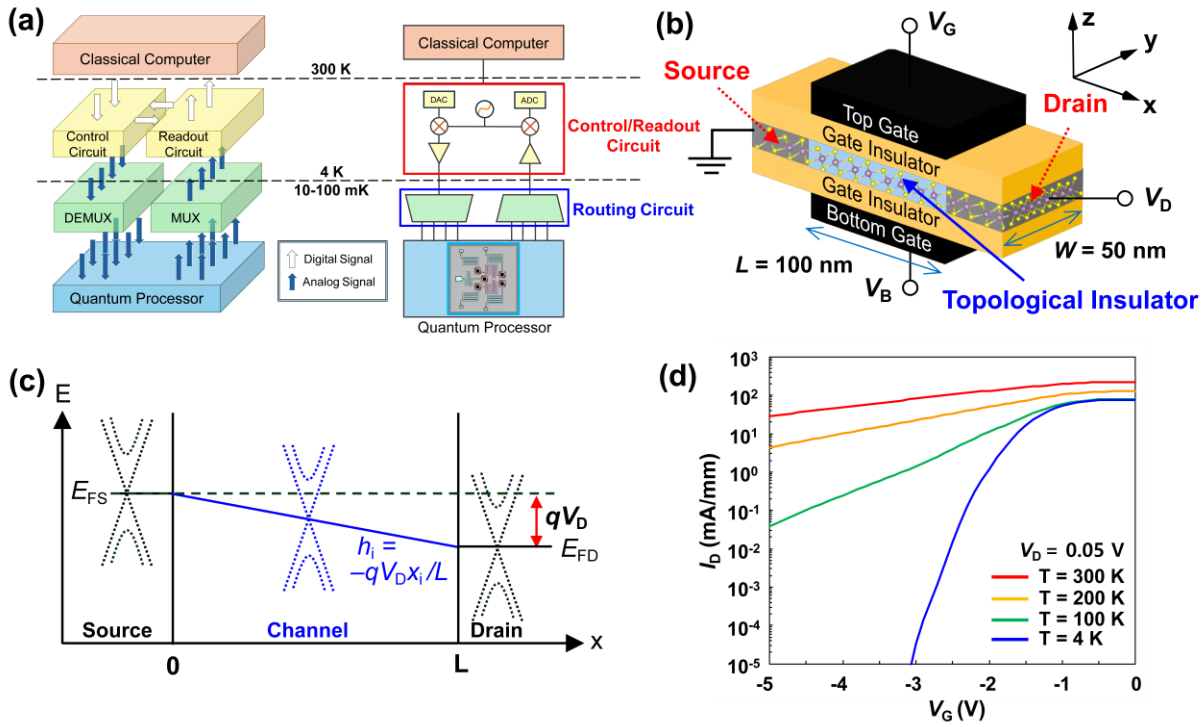

图 1. 大规模量子计算系统和 TIFET 器件的概念架构

特性。(a) 大规模量子计算架构及其不同温度阶段的示意图。量子处理器和路由电路（多路复用器/解复用器）工作于10–100 mK，控制/读出电路工作于4 K，经典计算机工作于室温（300 K）。图中标示了数字和模拟信号路径。(b) 双栅隧穿注入场效应晶体管的器件结构。

沟道由1T′-二硫化钼$_2$ 拓扑绝缘体（TI）构成。栅极绝缘体由介电层（在拓扑绝缘体场效应晶体管中）或铁电材料（在负电容拓扑绝缘体场效应晶体管中）构成。(c) 沿沟道方向的实空间能带图，以及开启态的E-k能带结构。E_{FS} 和E_{FD} 分别表示源极和漏极中的费米能级，并施加漏极电压qV_D。(d) 具有1T′-二硫化钼$_2$ 沟道的TIFET的转移特性（I_D–V_G），在固定漏极电压V_D = 0.05 V下，从T = 4 K扫描至300 K。

TIFET 由双栅结构构成，其纳米带沟道采用拓扑绝缘体（TI）制成，并集成了源极和漏极端子。TI 沟道夹在栅极绝缘体之间——TIFET 使用介电层，NC-TIFET 则使用铁电层——并由顶部（V_G）和底部（V_B）栅极控制。（图 1b） 该器件的沟道长度（L）为 100 nm，沟道宽度（W）为 50 nm；这些参数经过优化，以避免隧穿泄漏和有限尺寸效应（补充信息 5 中的图 S1）。 我们选择 1T′-二硫化钼$_2$ 作为沟道材料，因为其临界场较低（E_c）[20]，，能够实现快速拓扑相变，从而进行开关调制。TIFET 模型所用的参数详见补充信息 1 和 2。

TIFET 要实现工作，E_z （用于开启态和关闭态调制）以及V_D （用于驱动电流）至关重要。图 1c 展示了施加V_D时 TIFET 的能带图。由于施加了V_D，假设沟道电势沿沟道线性变化，从而使源极和漏极的费米能级（分别为E_{FS} 和E_{FD}）产生差异。该电势差定义为 $E_{FS} = E_{FD} + qV_D$，它驱动由量子电导决定的漏极电流。为在模型中实现这一线性电势降，我们添加格点能量项 $h_i = -^{qV}{}_{D}x_{i}L$，其中 q 为元电荷，x_I 表示从源极到漏极区域中位置为i 的格点。图 1d

展示了 TIFET 在 4 K 至 300 K 不同温度下的I_D–V_G，其中V_D = 0.05 V。得益于弹道边缘态输运，TIFET 可实现由量子电导决定的高导通态电流。在室温（300K）下，器件性能严重退化。1T′-二硫化钼$_2$（45–47 meV）的带隙较小，[20,21], 使热激发载流子形成漏电通道，绕过栅极控制，导致开关比较低，约为 10（在V_G = –5 V 时）。然而，在低温下，这种热泄漏通道受到强烈抑制。如图 1d 所示，将器件冷却至 4 K 可显著提高开关比，这表明 TIFET 不适用于室温逻辑应用，但其优异的开关性能在低温环境下得以充分发挥。

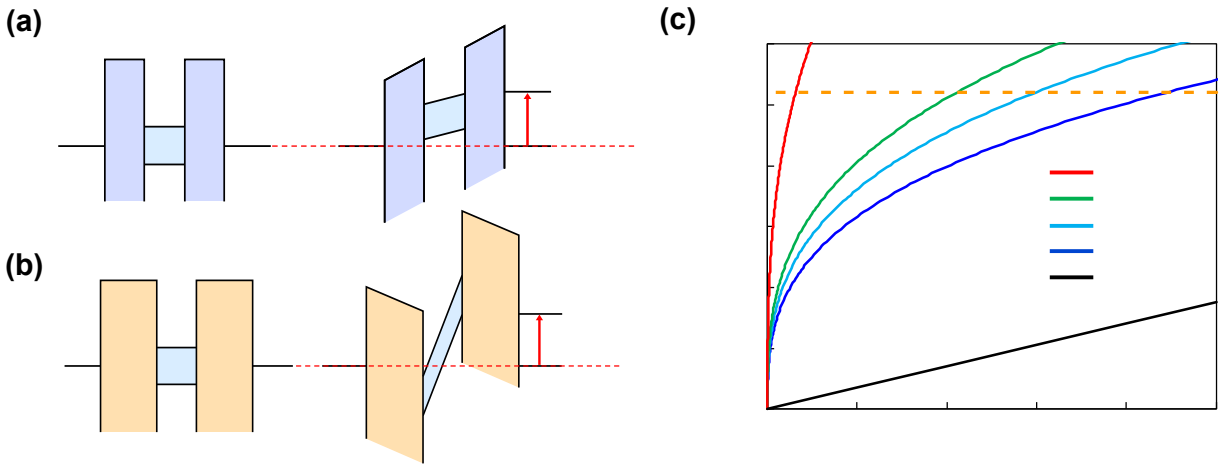

图 2. NC-TIFETs 中的电场放大机制。以下器件的能带图：(a) 一种

具有介电绝缘层的 TIFET，以及 (b) 具有铁电绝缘层的 NC-TIFET。图中分别展示了栅极偏压为零 ($q(V_G - V_B) = 0\ V$，左图) 和施加栅极偏压时 ($q(V_G - V_B) < 0\ V$)) 的状态（右图）。(c) 使用不同栅极绝缘体时，具有 1T′-二硫化钼$_2$沟道的 E_z 随 V_G 的变化：$BiFeO_3$[25], 、$BiSmO_3$[26], 、HfO_2[27], 、$HfZrO_2$[28], 和 SiO_2 （0.5 nm

厚度）。橙色虚线表示发生拓扑相变所需的E_{c} 点。

拓扑绝缘体场效应晶体管的E_z 放大机制取决于栅极绝缘体类型，如图2a-b所示。未施加栅极偏压时，拓扑绝缘体场效应晶体管保持其拓扑相，其特征是存在拓扑边缘态。相反，当对具有介电绝缘层的拓扑绝缘体场效应晶体管施加栅极偏压时，由于绝缘体上的电压降，只能获得有限的E_z 。相比之下，NC-TIFET利用铁电层的负电容效应产生内部电压放大，从而在相同的V_{G}下于沟道中感应出显著更大的E_{z} 。

描述铁电材料（E_{FE}）中极化（P）与电场的L-K方程由下式给出

$$E_{\mathrm{FE}} = 2\alpha_{\mathrm{FE}}P + 4\beta_{\mathrm{FE}}P^3. \quad (1)$$

其中，α_{FE} 和β_{FE} 为铁电材料参数。器件在分压条件下工作，即 $V_{\mathrm{G}} = V_{\mathrm{FE}}(E_Z)+ \psi_s$，其中 V_{FE} 和ψ_s 分别为铁电层两端的电压和拓扑绝缘体沟道的表面势。V_{FE} 的详细推导见补充信息4。图2c显示了不同栅极绝缘体影响下，E_z 随V_{G} 变化的关系。值得注意的是，V_{G} 这一关系使最大电场放大条件得以实现，此时铁电材料厚度为$t_{\mathrm{FE}} = 1/(2\alpha_{\mathrm{FE}}C_{\mathrm{ch}})$，其中$C_{\mathrm{ch}}$ 为沟道电容。在优化后的t_{FE}范围内，最大栅极电压条件（$V_{\mathrm{G,max}}$）计算如下

$$V_{\mathrm{G,max}} = \frac{C_{\mathrm{ch}}^2 t_{\mathrm{ch}}^3}{P_{\mathrm{r}}^2} E_z^3. \quad (2)$$

其中，t_{ch} 为沟道厚度，P_r 为铁电材料的剩余极化；在负电容拓扑绝缘体场效应晶体管条件下，P_r 等于$P_{r,max}$ 。

该方程给出了一项强有力的设计原则：较高的P_r 可显著降低器件开关所需的栅极电压。正如方程（2）所预测的，氧化铋铁[25,29] （$BiFeO_3$，BFO）具有极高的P_r，能够在极低的V_G下达到E_c 。然而，BFO面临一项关键的制造挑战：其负电容性能对t_{FE} 极为敏感，偏离最佳厚度会导致放大效应减弱或出现不希望的滞后（见补充信息中的图 S3）。因此，我们选择HZO[28] 作为栅极绝缘体。HZO是一种用于现代半导体器件的铪基介电材料，可确保其与现有制造工艺兼容[30]。关键的是，HZO兼容原子层沉积（ALD），该工艺具有出色的工程共形性、大面积均匀性和原子级厚度控制能力[31]。我们预计，采用ALD制备HZO能够优化t_{FE}，从而实现稳定、无滞后的负电容运行。本研究采用的HZO铁电参数基于室温下的数值[28]。然而，在低温下，矫顽场（　）通常会增大，这可能使最佳　和滞后窗口发生偏移。为此，我们在补充信息第7节中系统研究了　变化对　优化和滞后窗口的影响（图 S3 和 S4）。此外，补充信息中的图 S6 展示了P_r 对开关特性的影响。

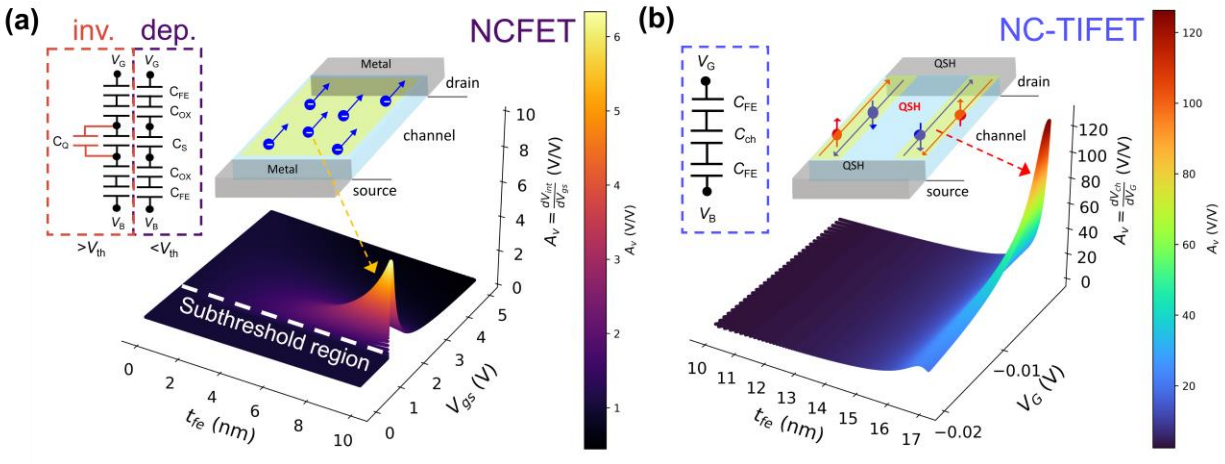

图3. 负电容场效应晶体管与 NC-TIFET 之间电压增益$\boldsymbol{A_V}$的比较。(a) 电压

具有硅沟道和HZO铁电层的负电容场效应晶体管的增益（$\boldsymbol{A_V = dV_{int}/dV_{GS}}$），随$\boldsymbol{t_{FE}}$和栅源电压（$\boldsymbol{V_{GS}}$）变化的关系图。白色虚线表示亚阈值区。(b) 具有1T′-MoS_2沟道和HZO铁电层的NC-TIFET的电压增益（$\boldsymbol{A_V = dV_{ch}/dV_G}$），随$\boldsymbol{t_{FE}}$和$\boldsymbol{V_G}$变化的关系图。每种器件的插图分别展示了等效电容电路（左上）和器件工作示意图（中央）。二维截面图中的增益随　变化的关系见补充信息中的图 S5。负电容场效应晶体管被认为是未来低功耗应用的有力候选器件，因为其能够实现低于60 mV/dec的亚阈值摆幅，这归因于铁电材料的极化响应能够放大栅极电压[30,32,33]。然而，若未能正确实现电容匹配，负电容场效应晶体管会出现严重的滞后问题[17]。滞后的主要因素是C_O；在现代超薄沟道场效应晶体管中，体电荷反型后[illegible]来尽量减小滞后，受栅堆叠中可用于促进电压增长的电荷数量有限这一因素影响，负电容引起的A_V在亚阈值区仍受到显著限制（见图3a）。相比之下，NC-TIFET仅调控

切换过程中的边缘态，从而避免在体区内产生电荷。换言之，与负电容场效应晶体管不同，NC-TIFET 的沟道行为类似于介电材料，这意味着沟道电容基本不受栅极偏压影响。这一特性形成了一个主要受铁电电容和沟道电容影响的串联电容电路（见图3b中的等效电容电路）。因此，在最佳 t_{FE} 条件下，NC-TIFET 可以实现无滞回运行，从而达到最大的 A_{V} 值。

虽然 TIFETs 由于不存在体反型而避免了 C_{Q} 瓶颈，但拓扑边缘态会在边缘引入有限的 C_{Q} 。至关重要的是，这些边缘态是受体能带拓扑保护的稳健特征。因此，与体区的反演对称性破缺相比，边缘 C_{Q} 预计可以忽略不计，而拓扑保护的边缘则确保了稳定输运。为准确模拟包含边缘态在内的静电学，必须采用严谨的二维静电模拟，将垂直电栅场下导电边缘和绝缘体区的并联几何贡献纳入考量。因此，我们认为，精确量化边缘 C_{Q} 及其对电容缩放的影响，是未来研究的一个方向。

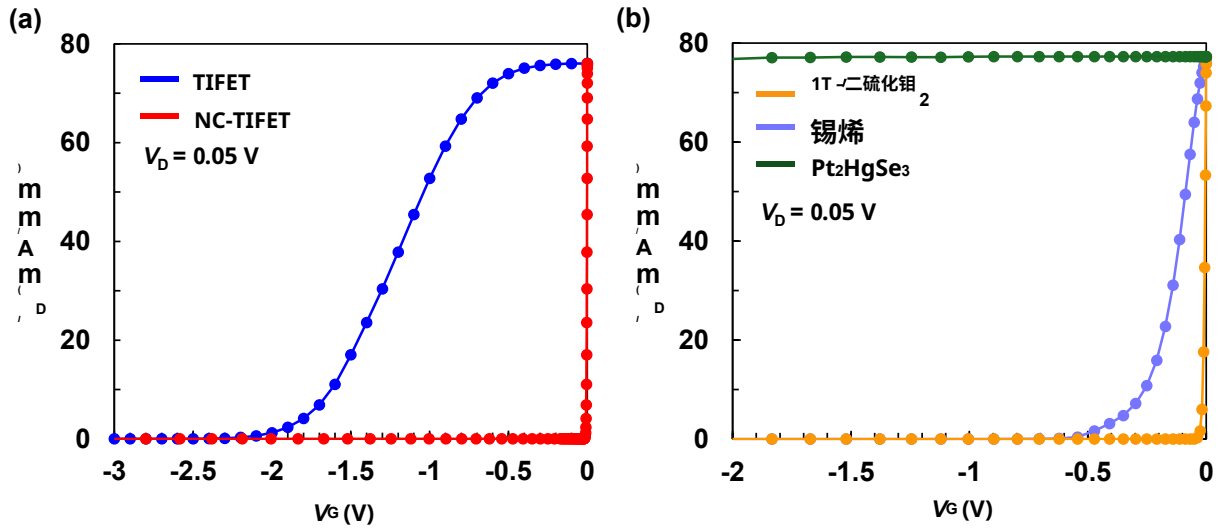

图4. 转移特性及不同拓扑沟道材料的影响。(a) 常规 TIFET（蓝色）和 NC-TIFET（红色）在$\boldsymbol{V_D = 0.05\ V}$下的转移特性对比。两种器件均采用 1T′-二硫化钼$_2$ 沟道。 (b) 使用三种不同拓扑沟道材料的 NC-TIFET 的转移特性：1T′-二硫化钼$_2$，锡烯和 Pt_2HgSe_3。所有器件的铁电栅均为 HZO。

由于 NC-TIFETs 具有优异的 A_V，因此能够实现极陡斜率的转移曲线。TIFETs 需要较大的开关电压来诱导拓扑相变，这是因为施加栅极偏压时介电材料会产生正电压降（见图 2a）。相比之下，负电容层中的负电压降以及 NC-TIFET 的无滞回运行，可使转移曲线显著变陡（图4a），并呈现出强劲的输出特性（见补充信息中的图 S7）。接下来，我们通过比较三种不同的二维拓扑绝缘体，研究沟道材料对器件性能的影响：1T′-MoS_2[20,21]，锡烯[19], 和 Pt_2HgSe_3[34,35] （图4b）。锡烯因其较小的带隙以及较大的材料特定参数而被认为是一种很有前景的二维拓扑绝缘体材料，该参数会影响 E_c[19]。然而，基于锡烯沟道材料的 NC-TIFETs 开关电压约为 0.5 V，

与传统HEMT相比，并未表现出显著的功耗优势。Pt_2HgSe_3 也被认为是一种颇具前景的二维拓扑绝缘体材料，因为其较大的带隙能够防止热泄漏。然而，Pt_2HgSe_3 具有较大的带隙（160 meV[34]）和相对较低的电场势参数（即α_V 和α_R，见补充信息中的表 S2），使器件难以在极低电压范围内关断。相比之下，1T′- 二硫化钼$_2$ 具有较小的带隙以及对E_z[21]起作用的较高材料特定参数（见补充信息中的表 S1），从而实现超低开关电压（见图 5），成为低温应用的有力候选材料。这些拓扑材料的模型参数见补充信息中的图 S2。

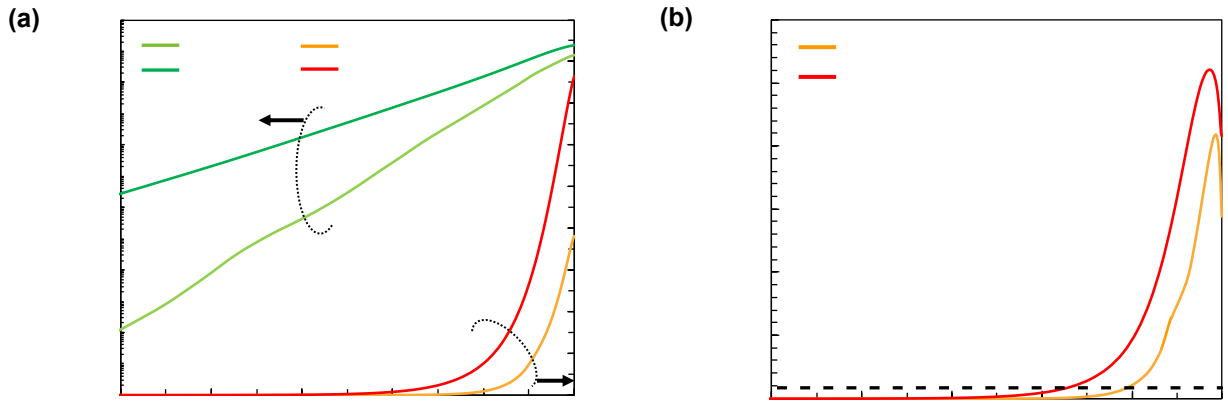

图 5. NC-TIFET 的电学特性。(a) TIFET 和 NC-TIFET 在 $V_D = 0$ 下的转移特性（I_D–V_G）。**05 V and 0. 1 V**。(b) 在 $V_D = 0$ 下的跨导特性（g_m –V_G）。**05 V and 0**。**1 V**，并与低温 HEMT[8]的实验数据进行比较。所有数据均在T = 4K 下获取。图 5 所示的所有结果中，沟道和铁电材料分别为 1T′-MoS_2 和 HZO。

因此，1T′-二硫化钼$_2$与HZO的优化组合实现了极其陡峭斜率的转移曲线。如图 5a所示，即使在较低的漏极偏置V_D = 0.05 V下，NC-TIFET也能实现低于20 mV的开关电压（定义为开关比为103）。值得注意的是，尽管工作V_D较低，NC-TIFETs的快速开关能力仍在V_D = 0.1 V下产生了约26 S/mm的极高g_m。该数值比实验记录的先进低温HEMT的g_m（0.8 S/mm）高出一个数量级以上[8]（图 5b）。需要指出的是，实验低温HEMT数据反映了寄生效应和非理想因素——例如界面陷阱和栅漏电——这些因素不可避免地会降低g_m，而我们的模型捕捉的是本征性能极限。然而，即使考虑这些外部因素，超低开关电压与高跨导的结合仍使NC-TIFET成为低温电子接口的有力候选方案，包括低噪声放大器（LNAs）和模数转换器（ADCs）。

尽管采用密度泛函理论（DFT）推导参数建模的负电容拓扑绝缘体场效应晶体管表现出卓越性能，但需要注意的是，这代表一种理想化情况。因此，为了推动此类技术的发展，必须在结构、器件和接触层面确定并解决若干基本问题。首先，在结构层面，应探索堆叠工程。虽然我们的单层铁电设计展现出出色的开关性能，但集成多层堆叠已成为一种有望提高开态电流并降低栅电容的策略。其次，为验证器件在放大器等模拟应用中的潜力，必须对其高频（射频）特性和噪声特性进行全面分析。为此，必须将拓扑绝缘体场效应晶体管中的寄生电容效应纳入考量，因此准确计算渡越频率（f_T）、功耗（P_{DC}）和噪声指示因子至关重要。尤其是，传统噪声

对于高电子迁移率晶体管等基于电荷的器件，其指示因子（即 $\sqrt{I_{\mathrm{D}}}g_{\mathrm{m}}^{-1}$ 因子[8,36]）可能不适用于基于自旋流的拓扑边缘态，这是由其自身特性所决定的。因此，可能需要建立一种新型噪声模型，将独特的基于自旋的输运以及真实的杂质散射机制（包括边缘态中的磁性杂质）纳入其中[37,38]。第三， 对于低噪声放大器或数模转换器/模数转换器等实际电路应用，实现互补的p型特性至关重要。尽管目前尚未对p型拓扑绝缘体场效应晶体管进行真实建模，但我们认为，理论上可通过反转双栅偏置配置（即互换顶栅和底栅电压的作用）实现p型工作。这种反转无需物理掺杂即可实现p型调制。然而，仍需进一步研究，以充分阐明p型拓扑绝缘体场效应晶体管的工作机制，并为CMOS架构开发具体的集成方案。最后，值得讨论源极/漏极（S/D）接触的实际实现。虽然我们的理论模型假设接触理想，即S/D区域与同一拓扑沟道集成，但物理界面对于有效利用拓扑边缘态至关重要。我们提出两种可行方案：（1）相工程，采用1T-1T′异质结构，如近期的1T-2H异相研究所示[39,41],，其中金属相1T可有效降低R_{C} 并提高器件电流[40,41]。（2）一维（1D）边缘接触，这被认为是降低接触电阻的关键方案[42,43]。此外，我们纳入有限R_{C} 的解析模型（补充信息10）证实，负电容增益依然稳健，即使在真实接触条件下也能保持陡峭的开关特性（图S8）。因此，克服这些多层面问题对于充分发挥负电容拓扑绝缘体场效应晶体管作为面向大规模量子计算系统的高性能低温器件的潜力至关重要。总之，我们从理论上 证明，负电容拓扑绝缘体场效应晶体管架构克服了这一基本

负电容场效应晶体管的量子电容瓶颈，从而充分利用负电容效应，实现卓越的开关性能。因此，我们的器件展现出卓越的开关特性，包括低于 20 mV 的开关电压（在 $V_D = 0.05\ V$）以及高达 26 S/mm 的超高跨导（在 V_D = 0.1 V），使 NC-TIFET 成为大规模量子计算低温电子接口的关键技术，可用于低噪声放大器和模数转换器等。然而，尽管实验上已观测到栅极可调的 1T′-二硫化钼$_2$ [44]，，要将这些理论优势转化为现实应用，仍需解决 1T′-二硫化钼$_2$ 相[45,46,47,48]的亚稳态问题。未来的工作必须着力于稳健的制备策略，例如表面钝化[49,50]，、对边缘态中磁性杂质的控制[37,38]，以及缺陷工程[50]，以使 1T′相不受负电容诱导的强内部电场影响而保持稳定，并确保可靠运行。因此，为 1T′-二硫化钼$_2$ 建立稳定的制备工艺，仍是实现适用于大规模低温量子计算系统的高性能负电容拓扑绝缘体场效应晶体管的关键里程碑。

相关内容

补充信息

补充信息可免费获取，网址为

https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.nanolett.5c06182.

器件参数、NC-TIFETs中的建模方法、1T′-MoS_2, Pt_2HgSe_3, 和锡烯的密度泛函理论参数、用于对NC-TIFETs建模的兰道–卡拉特尼科夫方程、NC-TIFET沟道长度和宽度的优化、密度泛函理论的模型参数拟合、低温环境下NC-TIFETs中铁电层厚度（t_{FE}）的优化、不同铁电材料对NC-TIFETs的影响、NC-TIFETs的输出特性，以及结合接触电阻的TIFET漏极电流方程公式（PDF）

作者信息

通讯作者

Yeonghun Lee - 智能半导体工程系，仁川国立大学，大韩民国仁川市延寿区学院路119号，邮编22012；电子工程系，仁川国立大学，仁川国立大学，大韩民国仁川市延寿区学院路119号，邮编22012；工程与技术研究所，仁川国立大学，大韩民国仁川市延寿区学院路119号，邮编22012；orcid.org/0000-0002-6058-1316；电子邮箱：y.lee@inu.ac.kr

作者

Yosep Park - 仁川国立大学智能半导体工程系，韩国大韩民国仁川市延寿区学院路119号，邮编22012；orcid.org/0009-0003-0123-8942**Yungyeong Park** - 仁川国立大学电子工程系，仁川国立大学，韩国大韩民国仁川市延寿区学院路119号，邮编22012；orcid.org/0009-0008-6621-4796

Hyeonseok Choi - 仁川国立大学电子工程系，仁川国立大学，韩国大韩民国仁川市延寿区学院路119号，邮编22012；orcid.org/0009-0006-1523-5605

Subeen Lim - 仁川国立大学电子工程系，仁川国立大学，韩国仁川延寿区学院路119号，邮编22012；orcid.org/0009-0002-1957-2677

完整联系方式请见：

https://pubs.acs.org/10.1021/acs.nanolett.5c06182

作者贡献

Y.L.负责指导项目。Yo.P.、Yu.P.、H.C.和S.L.进行了理论计算和数据分析。Yo.P.、Yu.P.和Y.L.撰写了手稿。所有作者均讨论了研究结果、阅读了手稿并同意其内容。

注释

作者声明存在以下竞争性经济利益：Yo.P.、Yu.P. 和 Y.L. 持有两项与本文所述技术相关的韩国专利（使用相变沟道材料的场效应晶体管；以及包括量子晶体管的量子计算装置和系统）。

致谢

本研究获得韩国国家研究基金会（NRF）资助，资助经费由

韩国政府（MSIT）提供（编号：2022R1F1A1073068）。

参考资料

(1) Arute, F.; Arya, K.; Babbush, R.; Bacon, D.; Bardin, J. C.; Barends, R.; Biswas, R.; Boixo, S.; Brandao, F. G. S. L.; Buell, D. A.; Burkett, B.; Chen, Y.; Chen, Z.; Chiaro, B.; Collins, R.; Courtney, W.; Dunsworth, A.; Farhi, E.; Foxen, B.; Fowler, A.; Gidney, C.; Giustina, M.; Graff, R.; Guerin, K.; Habegger, S.; Harrigan, M. P.; Hartmann, M. J.; Ho, A.; Hoffmann, M.; Huang, T.; Humble, T. S.; Isakov, S. V.; Jeffrey, E.; Jiang, Z.; Kafri, D.; Kechedzhi, K.; Kelly, J.; Klimov, P. V.; Knysh, S.; Korotkov, A.; Kostritsa, F.; Landhuis, D.; Lindmark, M.; Lucero, E.; Lyakh, D.; Mandrà, S.; McClean, J. R.; McEwen, M.; Megrant, A.; Mi, X.; Michielsen, K.; Mohseni, M.; Mutus, J.; Naaman, O.; Neeley, M.; Neill, C.; Niu, M. Y.; Ostby, E.; Petukhov, A.; Platt, J. C.; Quintana, C.; Rieffel, E. G.; Roushan, P.; Rubin, N. C.; Sank, D.; Satzinger, K. J.; Smelyanskiy, V.; Sung, K. J.; Trevithick, M. D.; Vainsencher, A.; Villalonga, B.; White, T.; Yao, Z. J.; Yeh, P.; Zalcman, A.; Neven, H.; Martinis, J. M. 利用可编程超导处理器实现量子霸权。《自然》 **2019年**，*574*（7779），505–510。https://doi.org/10.1038/s41586-019-1666-5。(2) Kim, Y.; Eddins, A.; Anand, S.; Wei, K. X.; van den Berg, E.; Rosenblatt, S.; Nayfeh, H.; Wu, Y.; Zaletel, M.; Temme, K.; Kandala, A. 量子计算实用性的证据

在容错之前。《自然》 **2023年**，*618*（7965），500–505。https://doi.org/10.1038/s41586-023-06096-3。(3) Ferraris, A.; Cha, E.; Mueller, P.; Moselund, K.; Zota, C. B. 利用高电子迁移率晶体管进行低温量子计算机控制信号生成。《*Commun Eng*》 **2024年**，*3*（1），1–7。https://doi.org/10.1038/s44172-024-00293-2。(4) Charbon, E.; Sebastiano, F.; Vladimirescu, A.; Homulle, H.; Visser, S.; Song, L.; Incandela, R. M. 面向量子计算的低温互补金属氧化物半导体。载于*2016*年*IEEE*国际电子器件会议（*IEDM*）；2016年；第13.5.1-13.5.4页。https://doi.org/10.1109/IEDM.2016.7838410。(5) Sebastiano, F.; van Dijk, J. P. G.; Hart, P. A. ‘t; Patra, B.; van Staveren, J.; Xue, X.; Almudever, C. G.; Scappucci, G.; Veldhorst, M.; Vandersypen, L. M. K.; Vladimirescu, A.; Pellerano, S.; Babaie, M.; Charbon, E. 面向大规模量子计算机的低温互补金属氧化物半导体接口。载于*2020*年*IEEE*国际电子器件会议（*IEDM*）；2020年；第25.2.1-25.2.4页。https://doi.org/10.1109/IEDM13553.2020.9372075。(6) Pauka, S. J.; Das, K.; Kalra, R.; Moini, A.; Yang, Y.; Trainer, M.; Bousquet, A.; Cantaloube, C.; Dick, N.; Gardner, G. C.; Manfra, M. J.; Reilly, D. J. 一种用于为多个量子比特生成控制信号的低温CMOS芯片。《*Nat Electron*》 **2021年**，*4*（1），64–70。https://doi.org/10.1038/s41928-020-00528-y。(7) Jeong, J.; Kim, S. K.; Kim, J.; Lee, J.; Kim, J. P.; Kim, B. H.; Suh, Y.-J.; Geum, D.-M.; Park, S.-Y.; Kim, S. 面向大规模量子计算的可三维堆叠的低温InGaAs HEMT直流与射频多路复用器/解复用器。载于*2022*年国际电子器件会议（*IEDM*）；2022年；第4.5.1-4.5.4页。https://doi.org/10.1109/IEDM45625.2022.10019363。(8) Jeong, J.; Kim, S. K.; Suh, Y.-J.; Lee, J.; Choi, J.; Kim, J. P.; Kim, B. H.; Park, J.; Shim, J.; Rheem, N.; Lee, C. J.; Jo, Y.; Geum, D.-M.; Park, S.-Y.; Kim, J.; Kim, S. 面向大规模量子计算平台、集成于硅上的低温III-V族与铌电子器件。《*Nat Commun*》 **2024年**，*15*（1），10809。https://doi.org/10.1038/s41467-024-55077-1。(9) Agashiwala, K.; Pal, A.; Cui, H.; Chavan, T.; Cao, W.; Banerjee, K. 借助低温二维CMOS推进高性能大规模量子计算。载于*2023*年国际电子器件会议（*IEDM*）；2023年；第1–4页。https://doi.org/10.1109/IEDM45741.2023.10413702。(10) Ferraris, A.; Cha, E.; Mueller, P.; Morf, T.; Prathapan, M.; Sousa, M.; Han, H.-C.; Enz, C.; Zota, C. B. 用于量子信号路由的低温InGaAs HEMT开关。载于*2022*年国际电子器件会议（*IEDM*）；2022年；第4.6.1-4.6.4页。https://doi.org/10.1109/IEDM45625.2022.10019536。(11) Jeong, J.; Kwang Kim, S.; Kim, J.; Geum, D.-M.; Lee, J.; Park, S.-Y.; Kim, S. 面向异构与单片三维集成高可扩展量子计算系统的可三维堆叠低温InGaAs高电子迁移率晶体管。载于*2022*年*IEEE*超大规模集成电路技术与电路研讨会（*VLSI Technology and Circuits*）；2022年；第328–329页。https://doi.org/10.1109/VLSITechnologyandCir46769.2022.9830449。(12) Cha, E.; Wadefalk, N.; Moschetti, G.; Pourkabirian, A.; Stenarson, J.; Grahn, J. 用于亚毫瓦低温低噪声放大器的磷化铟高电子迁移率晶体管。《*IEEE*电子器件快报》 **2020年**，*41* 7 1005 1008 10 1109 2020 3000071 ( ), – . https://doi.org/ . /LED. . . (13) Yoo, J.-H.; Jeon, Y.-S.; Son, S.-W.; Lee, I.-G.; Jo, H.-B.; Choi, S.-M.; Yu, M.-S.; Park, W.-S.; Kim, H.-J.; Lee, H.-J.; Son, S.-P.; Kim, SK.; Yun, J.; Shim, J.-P.; Jang, H.; Lee, K.; Jeong, Y.; Kim, T.; Shin, C.-S.; Kim, T.-W.; Lee, J.-H.; Seo, K.-S.; Yang, K.; Kim, D.-H. 兼容单电源的低温In0.8Ga0.2As量子阱高电子迁移率晶体管，具有

量子计算应用中高频与低噪声性能的纪录性结合。在 *2024*年*IEEE*超大规模集成电路技术与电路研讨会（超大规模集成电路技术与电路）；2024年；第1–2页。 https://doi.org/10.1109/VLSITechnologyandCir46783.2024.10631365。 (14) Reilly, D. J. 量子计算机控制接口扩展所面临的挑战。在 *2019*年*IEEE*国际电子器件会议（*IEDM*）；2019年；第31.7.1-31.7.6页。https://doi.org/10.1109/IEDM19573.2019.8993497。 (15) Kane, C. L.; Mele, E. J. 石墨烯中的量子自旋霍尔效应。《物理评论快报》 **2005年**，*95*（22），226801。 https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.226801。 (16) Kane, C. L.; Mele, E. J. Z_2 拓扑序与量子自旋霍尔效应。《物理评论快报》 **2005年**，*95*（14），146802。 https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.95.146802。 (17) Cao, W.; Banerjee, K. 负电容场效应晶体管是陡坡逻辑开关吗? 《自然·通讯》 **2020年**，*11*（1），196。 https://doi.org/10.1038/s41467-019-13797-9。 (18) Fuhrer, M. S.; Edmonds, M. T.; Culcer, D.; Nadeem, M.; Wang, X.; Medhekar, N.; Yin, Y.; Cole, J. H. 负电容拓扑量子场效应晶体管的方案。在 *2021*年*IEEE*国际电子器件会议（*IEDM*）；2021年；第38.2.1- 38.2.4页。 https://doi.org/10.1109/IEDM19574.2021.9720587。 (19) Park, Y., Park, H., Choi, S., Li m, D., Kim, Y. & Lee, Y. 具有栅极诱导相变的二维拓扑绝缘体场效应晶体管的紧束缚器件建模。IEEE《电子器件汇刊》71，5739–5743（2024年）。 Https://Doi.Org/10.1109/Ted.2024.3427091。 (20) Qian, X.; Liu, J.; Fu, L.; Li, J. 二维过渡金属二硫属化物中的量子自旋霍尔效应。《科学》 **2014年**，*346*（6215），1344–1347。 https://doi.org/10.1126/science.1256815。 (21) Das, B.; Sen, D.; Mahapatra, S. 受限1T'过渡金属二硫属化物中的可调量子自旋霍尔态。*Sci Rep* **2020年**，*10*（1），6670。 https://doi.org/10.1038/s41598-020-63450-5。 (22) Keldysh, L. V. 非平衡过程的图示技术。在 *Leonid V Keldysh*文选；世界科学出版社，2023年；第47–55页。 https://doi.org/10.1142/9789811279461_0007。 (23) Datta, S. 电阻：原子尺度视角。纳米技术 **2004 年**，*15*（7），S433。https://doi.org/10.1088/0957-4484/15/7/051。 (24) L. D, L.; I. M., K. 二级相变点附近的声波反常吸收。《苏联科学院院报》 **1954**，*96*（469），25。 (25) Zhang, J. X.; He, Q.; Trassin, M.; Luo, W.; Yi, D.; Rossell, M. D.; Yu, P.; You, L.; Wang, C. H.; Kuo, C. Y.; Heron, J. T.; Hu, Z.; Zeches, R. J.; Lin, H. J.; Tanaka, A.; Chen, C. T.; Tjeng, L. H.; Chu, Y.-H.; Ramesh, R. 类四方 ${\mathrm{BiFeO}}_{3}$ 中巨大铁电极化的微观起源。《物理评论快报》 **2011**，*107*（14），147602。 https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.147602。 (26) Yang, Q.; Hu, J.; Fang, Y.-W.; Jia, Y.; Yang, R.; Deng, S.; Lu, Y.; Dieguez, O.; Fan, L.; Zheng, D.; Zhang, X.; Dong, Y.; Luo, Z.; Wang, Z.; Wang, H.; Sui, M.; Xing, X.; Chen, J.; Tian, J.; Zhang, L. 层状氧化铋的铁电性可降至1纳米。《科学》 **2023**，*379*（6638），1218–1224。 https://doi.org/10.1126/science.abm5134。 (27) Schenk, T.; Fancher, C. M.; Park, M. H.; Richter, C.; Künneth, C.; Kersch, A.; Jones, J. L.; Mikolajick, T.; Schroeder, U. La:HfO2中大剩余极化的起源。

《Advanced Electronic Materials》2019年，5（12），1900303。https://doi.org/10.1002/aelm.201900303。 (28) Zacharaki, C.; Tsipas, P.; Chaitoglou, S.; Fragkos, S.; Axiotis, M.; Lagoyiannis, A.; Negrea, R.; Pintilie, L.; Dimoulas, A. 通过等离子体辅助原子氧沉积在锗衬底上生长的铁电 Hf1-xZrxO2中的超大剩余极化。《Applied Physics Letters》2019年，114（11），112901。https://doi.org/10.1063/1.5090036。 (29) You, L.; Abdelsamie, A.; Zhou, Y.; Chang, L.; Lim, Z. S.; Wang, J. 重新审视垂直 BiFeO3 电容器的铁电光伏性质：综合研究。《ACS应用材料与界面》2023年，15（9），12070–12077。https://doi.org/10.1021/acsami.2c23023。 (30) Jung, M.; Kim, H.-B.; Park, Y.; Park, J.; Lee, H.; Oh, S.; Kim, K. K.; Ahn, J.-H.; Lee, Y.; Na, J.; Suh, D. 采用合成单层 MoS2的高性能负电容场效应晶体管。《ACS Nano》2025年，19（18），17503–17513。https://doi.org/10.1021/acsnano.4c18973。 (31) Trinh, N. L.; Gu, B.; Yang, K.; Nguyen, C. T.; Lee, B.; Kim, H.-M.; Kim, H.; Kang, Y.; Park, M. H.; Lee, H.-B.-R. 通过理解分子层面的化学物理反应，实现铁电 HfxZryOz 薄膜的原子级化学计量比控制。《ACS Nano》2025年，19 3 3562 3578 10 1021 4 13595 ( )，– 。https://doi.org/ . /acsnano. c 。 (32) You, W.-X.; Su, P. 具有绝缘体上半导体和双栅结构的二维负电容场效应晶体管之间的本征差异。IEEE《电子器件汇刊》2018年，65（10），4196–4201。https://doi.org/10.1109/TED.2018.2866125。 (33) Park, Y.; Lee, H.; Lee, Y. 使用非晶氧化物半导体的陷阱增强型陡坡负电容场效应晶体管。《ACS应用电子材料》2025年，7（12），5705–5711。https://doi.org/10.1021/acsaelm.5c00767。 (34) Bafekry, A.; Stampfl, C.; Nguyen, C.; Ghergherehchi, M.; Mortazavi, B. 动态稳定层状矿物 Pt2HgSe3（Jacutingaite）的可调电子性质。《物理化学化学物理》2020年，22（42），24471–24479。https://doi.org/10.1039/D0CP04388E。 (35) Kandrai, K.; Vancsó, P.; Kukucska, G.; Koltai, J.; Baranka, G.; Á kos Hoffmann; Á ron Pekker; Kamarás, K.; Horváth, Z. E.; Vymazalová, A.; Tapasztó, L.; Nemes-Incze, P. 层状矿物 Jacutingaite中大带隙量子自旋霍尔态的特征。《Nano Letters》2020年，20（7），5207–5213。https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.0c01499。 (36) Pospieszalski, M. W. 采用低温场效应晶体管和异质结场效应晶体管实现的超低噪声放大：1970—2004年。《IEEE Microwave Magazine》2005年，6（3），62–75。https://doi.org/10.1109/MMW.2005.1511915。 (37) Jelver, L. 单层过渡金属二硫属化物 <math Xmlns="http://Www.W3.Org/1998/Math/MathML"><mrow><mn>1</mn><msup><mi>T</Mi><mo>′</Mo></Msup></Mrow></Math> 边缘的时间反演对称性自发破缺。《物理评论B》2019年，99（15）。https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.155420。 (38) Jäck, B.; Xie, Y.; Bernevig, B. A.; Yazdani, A. 拓扑边缘态中由磁性诱导的反向散射观测。《Proceedings of the National Academy of Sciences》2020年，117（28），16214–16218。https://doi.org/10.1073/pnas.2005071117。 (39) Wang, S.; Zhang, D.; Li, B.; Zhang, C.; Du, Z.; Yin, H.; Bi, X.; Yang, S. 用于增强析氢反应的超稳定面内1T–2H MoS2异质结构。《Advanced Energy Materials》2018年，8（25），1801345。https://doi.org/10.1002/aenm.201801345。

(40) Kappera, R.; Voiry, D.; Yalcin, S. E.; Branch, B.; Gupta, G.; Mohite, A. D.; Chhowalla, M. 面向超薄 MoS_2 晶体管的相工程低电阻接触。《自然·材料》**2014年**，*13*（12），1128–1134。https://doi.org/10.1038/nmat4080。（41）Lin, Y.; Lee, H.; Kang, J.; Wang, Z.; Haasch, R. T.; Chyczewski, S. T.; Liu, Z.; Chuang, H.-C.; Zheng, J.-F.; Zhu, W. 用于低电阻接触的一步合成面内 1T'-2H 异相 MoTe2。《先进功能材料》 不适用（不适用），e11589。https://doi.org/10.1002/adfm.202511589。（42）Wang, L.; Meric, I.; Huang, P. Y.; Gao, Q.; Gao, Y.; Tran, H.; Taniguchi, T.; Watanabe, K.; Campos, L. M.; Muller, D. A.; Guo, J.; Kim, P.; Hone, J.; Shepard, K. L.; Dean, C. R. 二维材料的一维电接触。《科学》2013年，342（6158），614–617。https://doi.org/10.1126/science.1244358（43）Lee, Y.; Hwang, J.; Zhang, F.; Cho, K. 弹道约瑟夫森结中金属-石墨烯边缘接触的第一性原理研究。《物理评论·材料》2019年，3（6），064801。https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.3.064801。（44）Xu, H.; Han, D.; Bao, Y.; Cheng, F.; Ding, Z.; Tan, S. J. R.; Loh, K. P. 1T′相 MoS2 纳米晶体中带隙开启的观测。《纳米快报》 **2018年**，*18*（8），5085–5090。https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.8b01953。（45）Liu, L.; Wu, J.; Wu, L.; Ye, M.; Liu, X.; Wang, Q.; Hou, S.; Lu, P.; Sun, L.; Zheng, J.; Xing, L.; Gu, L.; Jiang, X.; Xie, L.; Jiao, L. 1T′ MoS2 单层和异相双层的相选择性合成。《自然·材料》 **2018年**，*17*（12），1108–1114。https://doi.org/10.1038/s41563-018-0187-1。（46）Li, Z.; Zhai, L.; Zhang, Q.; Zhai, W.; Li, P.; Chen, B.; Chen, C.; Yao, Y.; Ge, Y.; Yang, H.; Qiao, P.; Kang, J.; Shi, Z.; Zhang, A.; Wang, H.; Liang, J.; Liu, J.; Guan, Z.; Liao, L.; Neacșu, V. A.; Ma, C.; Chen, Y.; Zhu, Y.; Lee, C.-S.; Ma, L.; Du, Y.; Gu, L.; Li, J.-F.; Tian, Z.-Q.; Ding, F.; Zhang, H. 稳定在 4H-Au 纳米线上、用于超灵敏表面增强拉曼散射检测的 1T′-过渡金属二硫属化物单层。《自然·材料》 **2024年**，*23*（10），1355–1362。https://doi.org/10.1038/s41563-024-01860-w。（47）Matsuyama, K.; Chen, L.; Aso, K.; Kanahashi, K.; Nagashio, K.; Oshima, Y.; Kiriya, D. 通过有机包覆实现 1T′-MoS2 的相工程。《美国化学会志》 **2025年**，*147*（20），16729–16734。https://doi.org/10.1021/jacs.5c02099。（48）Deylgat, E.; Tiwari, S.; Vandenberghe, W. G.; Sorée, B. 钝化对二维拓扑绝缘体狄拉克锥的影响。《应用物理学杂志》 **2022年**，*131*（23），235101。https://doi.org/10.1063/5.0094246。（49）Stepina, N. P.; Ishchenko, D. V.; Golyashov, V. A.; Bazhenov, A. O.; Goldyreva, E. S.; Akhundov, I. O.; Tarasov, A. S.; Kokh, K. A.; Tereshchenko, O. E. BiySb2–yTe3–xSex 三维拓扑绝缘体的外延生长：物理气相沉积与分子束外延。《晶体生长与设计》 **2022年**，*22*（12），7255–7263。https://doi.org/10.1021/acs.cgd.2c00906。（50）Yan, H.; Liu, L.; Loh, L.; Chhowalla, M.; Wang, Y. 基于二维过渡金属二硫属化物半导体的晶体管栅介质。*APL* 电子器件 **2025年**，*1*（3），031501。https://doi.org/10.1063/5.0275690。

《……》的补充信息

“设计超低功耗拓扑采用 1T′–二硫化钼$_2$ 和 HZO 的晶体管，适用于低温应用》

Yosep Park[1], Yungyeong Park[2], Hyeonseok Choi[2], Subeen Lim[2], 和 Yeonghun Lee[1,2,3]

[1]仁川国立大学智能半导体工程系，大韩民国仁川 22012。

[2]仁川国立大学电子工程系，大韩民国仁川 22012。

[3]工程与技术研究所，仁川国立大学，仁川22012，大韩民国。

电子邮箱：y.lee@inu.ac.kr

目录

补充信息 1. 器件参数

第 1-1 节）TIFET 参数

第 1-2 节）负电容拓扑绝缘体场效应晶体管中的铁电材料参数

补充信息 2. 负电容拓扑绝缘体场效应晶体管的建模方法

第 2-1 节）基于哈密顿量的连续体（$\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$）模型（1T′-二硫化钼$_2$）

第 2-2 节）基于哈密顿量的 Kane–Mele 模型（Pt_2HgSe_3, 锡烯）

补充　信息 3. 1T′-二硫化钼$_2$，　$\mathbf{Pt_2HgSe_3}$，以及锡烯的密度泛函理论参数

补充信息 4. 用于模拟负电容拓扑绝缘体场效应晶体管的朗道–卡拉特尼科夫（L–K）方程

补充　信息 5. 负电容拓扑绝缘体场效应晶体管沟道长度和宽度的优化

补充信息 6. 密度泛函理论的模型参数拟合

补充信息 7. 低温环境下 NC-TIFET 中铁电层厚度（t_{FE}）的优化

补充信息 8. 不同铁电材料对 NC-TIFET 的影响。

补充信息 9. NC-TIFET 的输出特性

补充信息 10. TIFET漏极电流方程与接触电阻结合的公式。

补充信息 1. 器件参数

TIFET（NC-TIFET）模型基于 Park 等人的研究[1]。第 1-1 节和第 1-2 节中给出的器件参数直接从我们的器件结构中提取。

第1-1节）TIFET参数

符号	参数	数值
E_{C}	临界电场点	1.3 V/Å
E_{g}	沟道材料带隙	43 meV
δ_{p}	最低导带结构能量	- 0.445 电子伏特
δ_{d}	最高导带结构能量[2]	- 0.132 电子伏特
m_x^d/m_0	x方向价带有效质量[2]	0.92
m_x^p/m_0	x方向导带有效质量[2]	0.29
m_y^d/m_0	y方向价带有效质量[2]	2.32
m_y^p/m_0	y方向导带有效质量[2]	0.48
v_1	x方向速度[2]	0.23×10^5 米每秒
v_2	y方向速度[2]	3.383×10^5 米每秒
α	材料特定电学参数[2]	0.21 eÅ
t_{ch}	1T′–二硫化钼$_2$ 厚度	0.5063 nm
EOT	等效氧化层厚度	0.5 nm
ε_{r}	1T′-二硫化钼$_2$的相对介电常数	2.4547

ε_{ox}	氧化物的相对介电常数	3.9

表 S1. 1T′-MoS_2 沟道的 TIFET 参数计算结果汇总。介电材料为 SiO_2。m_0 是电子的静止质量。

符号	参数	数值
E_C	临界电场点	0.7（0.93）V/Å
E_g	沟道材料带隙	62.1 (143.3) meV
a	晶格常数	0.467 (0.75) nm
t	跃迁	0.7 (0.2) 电子伏特
λ_{SO}	自旋轨道耦合参数	$35/(3\sqrt{3})$ ($77.5/(3\sqrt{3})$) 毫电子伏特
α_V	交错势参数	5×10^{-12} (7×10^{-12}) 电子伏特
α_R	拉什巴参数	0（2×10^{-12}）电子伏特
t_{ch}	锡烯厚度	0.3229（0.5191）纳米
EOT	等效氧化层厚度	0.5 纳米
ε_r	沟道相对介电常数	1.324 (6.048)
ε_{ox}	氧化物相对介电常数	3.9

表 S2. 锡烯 TIFET 沟道材料参数计算结果汇总。参数适用于 Pt_2HgSe_3 以括号标示。介电材料为 SiO_2。

第 1-2 节）NC-TIFET 表中的铁电材料参数

符号	参数	值
α_{FE}	铁电材料参数[3]	-6.8×10^8 mF^{-1}

β_{FE}		$2.87 \times 10^{9}\ \mathrm{m^5F^{-1}C^{-2}}$
$T_{\mathrm{FE_OPT}}$	优化铁电层厚度	17.135 nm
P_r	剩余极化[3]	34.4 μC/cm²
E_{CO}	矫顽场[3]	1.8 MV/cm

表 S3. NC-TIFET 中 $HfZrO_2$ （HZO）铁电材料参数计算结果汇总。使电压放大最大化的优化铁电层厚度为 $T_{\mathrm{FE\ OPT}} =-1/2\alpha_{\mathrm{FE}}C_{\mathrm{ch}}$，其中 α_{FE} 为铁电材料参数，C_{ch} 为沟道电容（采用 1T′-MoS_2 的电容值）。$T_{\mathrm{FE_OPT}}$ 同时包含顶层和底层。请注意，上述铁电参数（P_r 、 E_{CO} ）是通过在 1 kHz 频率下进行的极化-电场滞回测量提取的。

补充信息 2. NC-TIFET 中的建模方法

第 2-1 节）基于连续体哈密顿量的模型 （1T′-MoS_2）

为研究采用 1T′-MoS_2 沟道的 TIFET 的特性，我们采用了连续体 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 哈密顿量以及 Das 等人推导的参数[2]。在本研究中，我们更新了参数 α 和 δ_{p} ，以便在精确考虑沿z方向施加的电场下电荷再分布的同时，再现电场诱导的拓扑相变（E_z）。我们使用 Kwant Python软件包[4]实现了 $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 模型。

第 2-2 节）基于哈密顿量的 Kane–Mele 模型（Pt_2HgSe_3, 锡烯）

我们使用 Kwant Python 软件包[4]实现了 Kane-Mele 紧束缚模型。有关 Pt_2HgSe_3 和锡烯的哈密顿量及参数详情， 请参阅 Park 等人[1]。尽管 Park 等人的研究并未计算 Pt_2HgSe_3 , 但我们研究中使用的参数类型和提取方法与其工作中所述一致[1]。

补充信息 3. 二硫化钼的密度泛函理论参数 1T′-二硫化钼$_2$， Pt_2HgSe_3， 和锡烯

拓扑绝缘体场效应晶体管模型中使用的所有沟道材料，均通过基于密度泛函理论（DFT）[5,6] 的第一性原理计算进行研究。计算采用基于赝原子轨道（PAO）的软件包 OpenMX[7,8] ，实空间网格截断能为 220 Ry；以及基于平面波（PW）的软件包 VASP[9–13]，平面波截断能为 500 电子伏特。对于两种软件，交换-相关泛函均采用 Perdew、Burke 和 Ernzerhof（PBE）[14]提出的广义梯度近似（GGA）。两种软件的自洽场（SCF）循环收敛标准均设为 10^{-6} 电子伏特。为分别对体区和纳米带计算中的第一布里渊区进行采样，使用了 9×9×1 和 9×1×1 网格。所有计算均考虑了非共线自旋纹理和自旋轨道耦合效应。为消除单层材料之间的虚假相互作用，在体区和纳米带计算中均沿 z 方向加入了超过 15 Å 的真空层。进行原子位置弛豫时，OpenMX 和 VASP 的力收敛容差分别设为 0.015 eV/Å 和 0.01 eV/Å。在保持晶胞形状固定的同时，对体相晶胞的原子位置和晶胞体积进行了优化。

补充信息4. 采用朗道–卡拉特尼科夫（L–K）方程对 NC-TIFETs 进行建模

根据文献[16–18]提出的方法，NC-TIFET 结构中铁电层两端的电压降采用朗道—卡拉特尼科夫（L-K）方程[15], 进行建模,

$$V_{\mathrm{FE}} = t_{\mathrm{FE}}E_{\mathrm{FE}} = 2\alpha_{\mathrm{FE}}t_{\mathrm{FE}}P + 4\beta_{\mathrm{FE}}t_{\mathrm{FE}}P^3, \tag{4}$$

其中，V_{FE} 为铁电层两端的电压降，E_{FE} 为铁电材料内部的电场，P 为铁电材料的极化，α_{FE} 和 β_{FE} 为铁电材料参数，t_{FE} 为铁电材料厚度（包括顶层和底部层）。α_{FE}、β_{FE} 和 t_{FE} 的数值见支持信息表3。

极化<style id='1'>P，可近似表示为电荷$Q \approx P$，其中$Q = \psi_s C_{ch}$、$\psi_s = E_{ch}t_{ch}$为沟道表面势，C_{ch} 为沟道电容，E_{ch} 为沟道电场，t_{ch} 为沟道厚度。

根据铁电层与拓扑绝缘体（TI）的串联连接（参见正文图3c中的 NC-TIFET 小信号模型），栅极电压可表示为

$$V_{\mathrm{G}} = V_{\mathrm{FE}} + \psi_s = (t_{\mathrm{ch}} + 2\alpha_{\mathrm{FE}}t_{\mathrm{FE}}t_{\mathrm{ch}}C_{\mathrm{ch}})E_{\mathrm{ch}} + 4\beta_{\mathrm{FE}}t_{\mathrm{FE}}(C_{\mathrm{ch}}t_{\mathrm{ch}}E_{\mathrm{ch}})^3, \tag{5}$$

对方程（5）关于 E_{ch} 在 V_{G} 处求导（即 $dV_{\mathrm{G}}/dE_{\mathrm{ch}}$ 在 $E_{\mathrm{ch}} = 0$ 处），可得到最优的 $t_{\mathrm{FE}} = 1/(2\alpha_{\mathrm{FE}}C_{\mathrm{ch}})$，此时达到最大电场条件。为满足 t_{FE}，计算得出此最大栅极电压条件（$V_{\mathrm{G,\ max}}$）为

$$V_{\mathrm{G,max}} = \frac{C_{\mathrm{ch}}^2 t_{\mathrm{ch}}^3}{P_{\mathrm{r}}^2}E_z^3. \tag{6}$$

其中，P_{r} 是铁电材料的剩余极化，在 NC-TIFETs 条件下，P_{r} 等于$P_{\mathrm{r,\ max}}$。

此外，根据公式（4），当E_{FE}为零时，可以推导出P_{r}，表示为

$$E_{\mathrm{FE}} = 2\alpha_{\mathrm{FE}}P + 4\beta_{\mathrm{FE}}P^3 = 0, \tag{7}$$

将其实现为 P 的表达式后，可得到以下 P_{r} is。

$$P_r = \sqrt{-\frac{\alpha_{\mathrm{FE}}}{2\beta_{\mathrm{FE}}}}. \tag{8}$$

补充 信息 5. NC-TIFET 沟道长度和宽度的优化

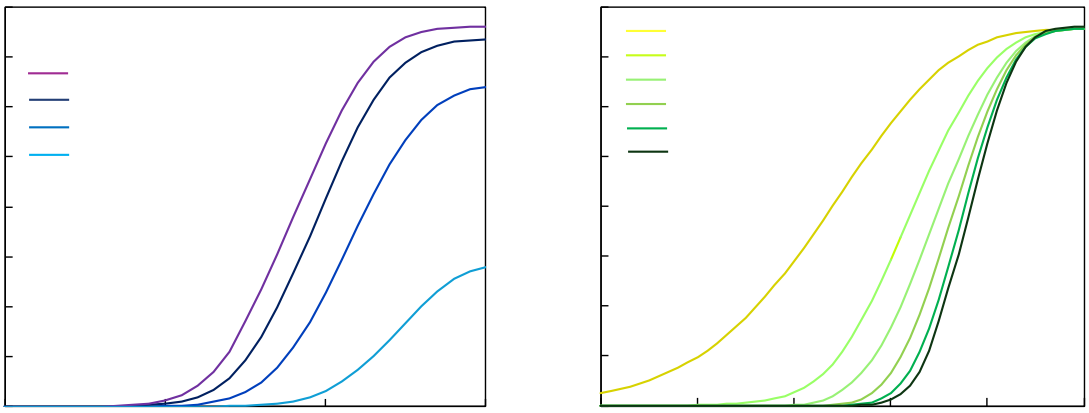

图 S1。 沟道宽度和沟道长度调制对 TIFETs 的影响。

(a) 在 V_D =0.05V 固定条件下，沟道宽度从 20 nm 到 50 nm 变化时的转移特性。(b) 沟道长度从 10 nm 到 100 nm 变化时的转移特性。图 S1 显示，沟道宽度不足会因有限尺寸效应[19,20]而破坏独特的拓扑边缘态。然而，随着宽度增加，这种效应会受到抑制；当宽度达到 50 nm 时，器件特性趋于稳定，从而允许拓扑边缘态存在。此外，沟道过短可能会导致显著的隧穿泄漏[1]。因此，对于拓扑绝缘体场效应晶体管，W = 50 nm 和L = 100 nm 时的转移特性最佳。

.

补充信息 6. 密度泛函理论的模型参数拟合

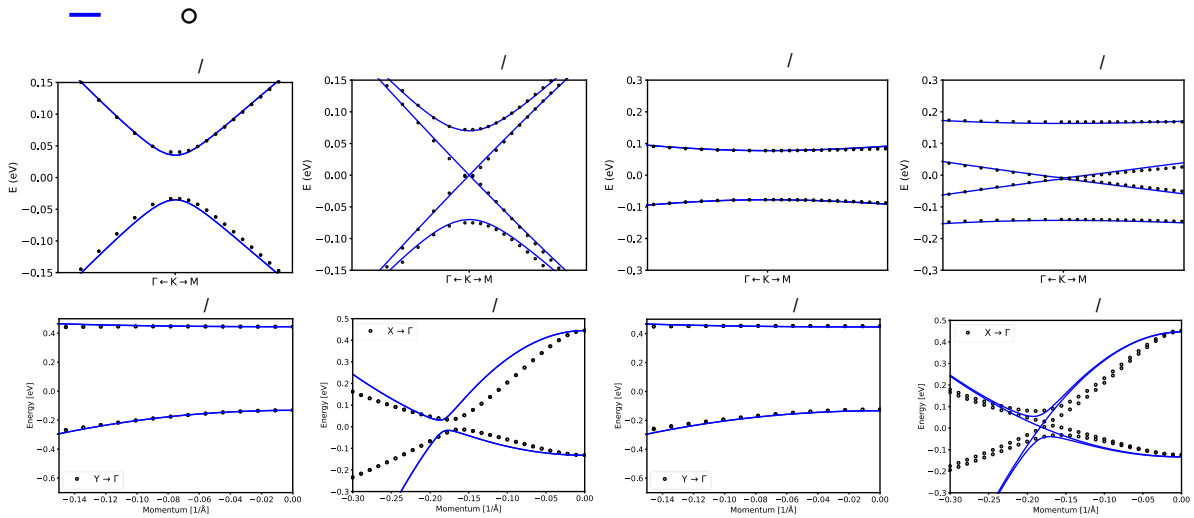

图 S2. 多种拓扑沟道材料的参数提取。

(a-d) 使用紧束缚（TB）模型计算了 (a,b) 锡烯和 (c,d) Pt_2HgSe_3 的体能带结构。针对不同临界电场下 K 点附近的密度泛函理论（DFT）计算结果（空心圆），拟合了 TB 模型（实线）。(e-h) 使用 **k**· **p** 哈密顿量计算的 1T′-二硫化钼$_2$, 体能带结构。沿 X–Γ 和 Y–Γ 高对称路径，**k**· **p** 模型（实线）拟合了 DFT 计算结果（空心圆）。模型参数是在开启态（E_z = 0 V/Å）及各自的临界点（E_z =0.7 V/Å、0.93 V/Å 和 1.3 V/Å）下提取的。

补充信息 7. 低温环境下 NC-TIFET 中铁电层厚度（t_{FE}）的优化

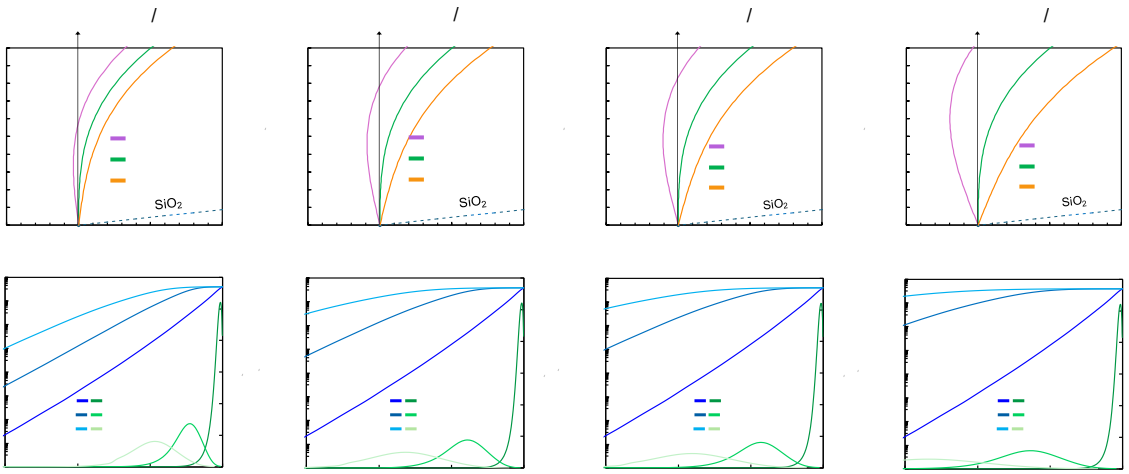

图 S3. 不同矫顽场（E_{co}）条件下，t_{FE} 变化对负电容拓扑绝缘体场效应晶体管的影响。

(a-d) E_Z 随 V_G 变化的关系，分别对应 E_{co} = 1的不同 t_{FE} 值、1.8、2 和 3 MV/cm。虚线表示栅介质厚度为 0.5 nm 的 SiO_2 栅极 TIFET 的 E_Z 。(e-h) 在 V_D = 0.1 V 下，相应器件特性随 t_{FE} 变化的关系。左侧为对数尺度的转移特性，右侧显示线性尺度的跨导特性。

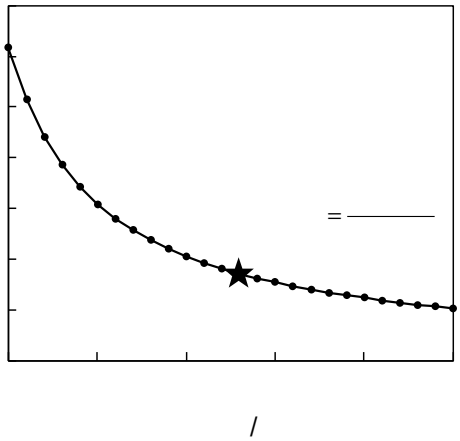

图 S4. 优化铁电层厚度（$t_{\mathrm{FE_OPT}}$）随矫顽场（E_{co}）的变化关系。剩余极化（P_r）固定为 HZO 的数值 34.4 μC/cm²。星号表示我们 NC-TIFET 仿真所用的参数（$E_{\mathrm{co}} = 1.8$ MV/cm）。

负电容拓扑绝缘体场效应晶体管中的优化铁电层厚度 $t_{\mathrm{FE_OPT}} = 1/2\alpha_{\mathrm{FE}}C_{\mathrm{ch}}$ 至关重要，因为它决定了铁电层内电场的放大。如图 S3(a- d)所示，若厚度超过最佳范围，则可能导致滞后。反之，若厚度低于最佳范围，则无法获得足够的负电容（NC）效应。如图 S3(e-h)所示，这些电场放大特性直接影响负电容拓扑绝缘体场效应晶体管开关特性的陡峭程度。此外，该图还说明了器件特性（$I_{\mathrm{D}} - V_{\mathrm{G}}$ 和 g_m）如何随 E_c 变化，并强调在低温下需要更薄的铁电层，以保持无滞后的陡峭开关性能。

在低温环境下，铁电层的矫顽场（E_{co}）已知会比室温时更高[21,22]。如图 S3 和 S4 所示，在 HZO P_r 固定时，增加E_{co} 会使铁电系数 $\alpha_{FE}|$ 的绝对值增大，因为$\alpha_{FE}| \propto E_{\mathrm{co}}/P_r$。因此，随着温度降低，实现最大电压增益且不产生滞后所需的最佳厚度（$t_{\mathrm{FE_OPT}} = 1/(2|\alpha_{FE}|C_{ch})$）会减小。因此，随着$E_{\mathrm{co}}$ 增大，器件性能对铁电层厚度变化变得更加敏感。

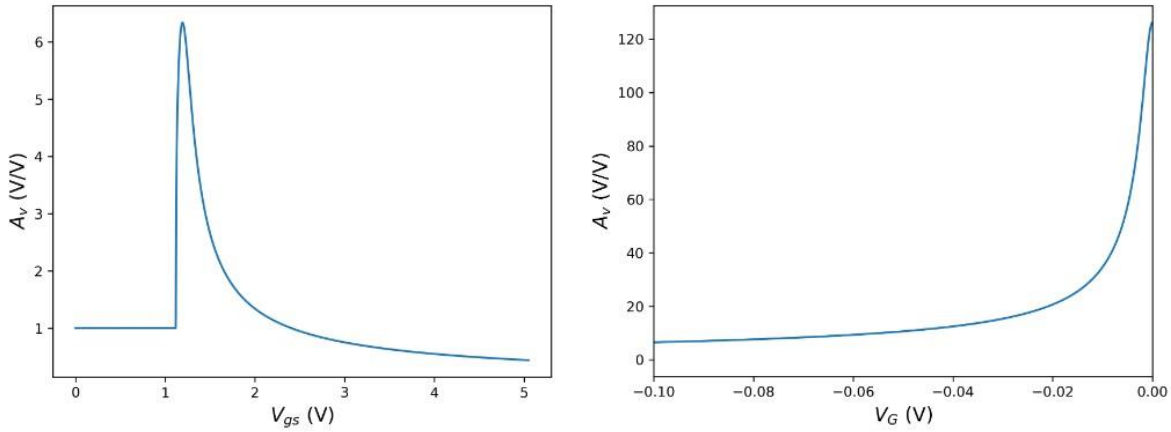

图 S5. 手稿中图 3 的二维截面图（　与　）。(a) 左图为负电容场效应晶体管，(b) 右图为

Su补充信息 8. NC-TIFET 中铁电材料的差异 **s.**

	/

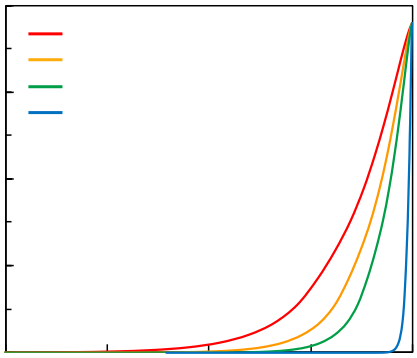

图 S6。剩余极化对开关特性的影响。(a) 不同铁电材料的剩余极化（P_r）比较：$HfZrO_2$ (HZO)[3], HfO_2[23], $BiSmO_3$[24],和 $BiFeO_3$ (BFO)[25]。(b) 采用不同铁电材料的负电容拓扑绝缘体场效应晶体管的转移特性。所有模拟均采用 1T′-MoS_2 作为沟道材料。请注意，所有铁电参数均为室温下的参数。

较大的 P_r 会带来更高的放大率，从而使转移特性的斜率更陡。在所研究的材料中，$BiFeO_3$ (BFO)表现出最陡峭的开关行为，因此是极具潜力的超低功耗应用候选材料。

补充信息 9. 负电容拓扑绝缘体场效应晶体管的输出特性

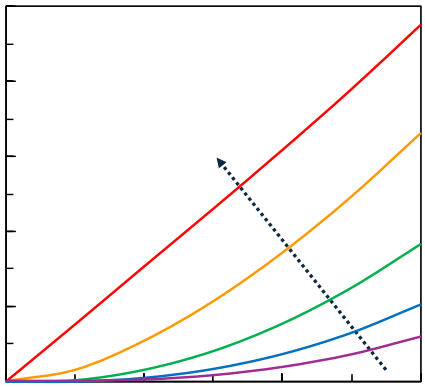

图 S7。不同 V_G 下负电容拓扑绝缘体场效应晶体管的输出特性。铁电材料为 HZO 沟道材料为 1T′-二硫化钼$_2$。

补充信息 10. TIFET漏极电流方程与接触电阻结合的公式。

在本研究中，TIFET 被建模为双端器件，其漏极电流（I_{D}）由两个主要电阻分量的串联组合决定：源极和漏极处的接触电阻（R_{C}）以及本征沟道电阻（R_{CH}）。器件的总电阻（R_{tot}）为这两个分量之和（即 $R_{\mathrm{tot}} = 2R_{\mathrm{C}} + R_{\mathrm{CH}}$）[26]。因此，TIFET 的总电阻被建模为 $R_{\mathrm{tot}} = 2R_{\mathrm{C}} + R_{\mathrm{CH}} = 2R_{\mathrm{C}} + 1/G_0$，其中 $G_0 = 2\mathrm{e}^2/\mathrm{h}$ 为量子电导。此外，为了纳入由 R_{C} 引起的电压降，本征电源电压（V_{D}'）计算为 $V_{\mathrm{D}}' = V_{\mathrm{D}} - 2R_{\mathrm{C}}I_{\mathrm{D}}$[27]，其中 V_{D} 为电源电压。

根据欧姆定律，I_{D} 是V_{D}' 除以R_{tot}：

$$I_{\mathrm{D}}' = \frac{V_{\mathrm{D}}'}{R_{\mathrm{tot}}} = \frac{V_{\mathrm{D}} - 2R_{\mathrm{C}}I_{\mathrm{D}}}{2R_{\mathrm{C}} + 1/G_0} \tag{9}$$

为求解 I_{D}，将方程（9）表示为方程（10）：

$$I_{\mathrm{D}}' = \frac{V_{\mathrm{D}}}{4R_C + 1/G_0} \tag{10}$$

对于 TIFET 中的栅极相关输运，沟道电导 $\mathrm{G}(V_{\mathrm{G}}) = I_{\mathrm{D}}(V_{\mathrm{G}})/V_{\mathrm{D}}$ 是栅极偏压的函数，此时考虑接触电阻的漏极电流表达式由方程（11）给出：

$$I_{\mathrm{D}}'' = \frac{V_{\mathrm{D}}}{4R_C + \dfrac{1}{\mathrm{G}(V_{\mathrm{G}})}} \tag{11}$$

该　使用公式（11）计算的转移特性如图所示　　S8.

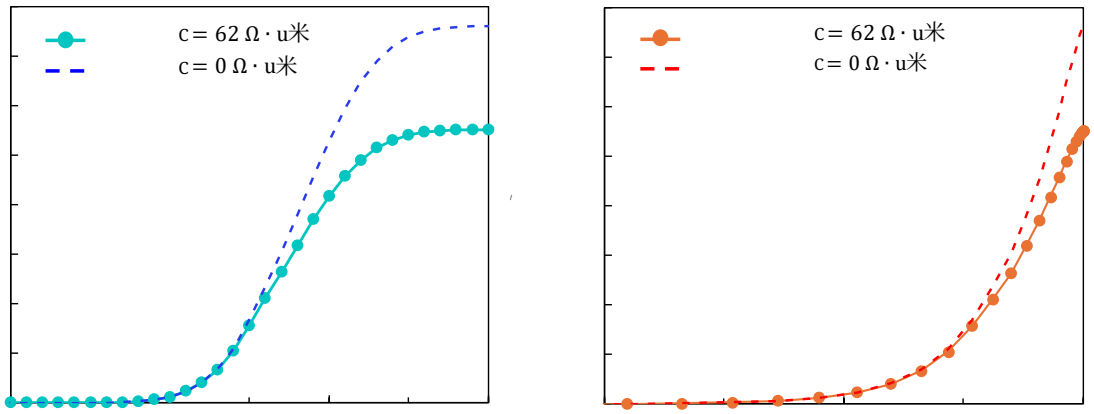

图 S8. 接触电阻的影响　接触电阻（R_C）对 (a) TIFET 和 (b　　)

在 V_D = 0.05 V 下的 NC-TIFET。虚线表示不考虑接触电阻的理想情况（R_C = 0 Ω·μm），实线带符号则表示采用优化接触电阻 R_C = 62 Ω·μm 的实际情况，据报道该数值适用于 R_C InSe 接触[27]。请注意，TIFET 采用 SiO_2 介电层和 1T′-二硫化钼$_2$ 沟道，而 NC-TIFET 则采用 HZO 铁电层和 1T′-二硫化钼$_2$ 沟道。

请注意，接触电阻（R_c = 62 Ω·μm）取自欧姆接触的实验演示[25]。在低温下，热离子发射受到抑制，因此这一欧姆接触假设对于将接触电阻降至最低至关重要。定量而言，对于模拟器件宽度为 W　50nm 的器件，总串联接触电阻估算为 2 c　2.48 kΩ。该值明显小于一维螺旋边缘态的量子化电阻（　h—　12.9 kΩ）。

由本征拓扑边缘通道而非接触主导，从而保留了所提出的 NC-TIFET 工作所必需的弹道输

如图 S8(a) 所示，对于标准 TIFET，加入 R_C 会导致导通电流明显下降。然而，对于 NC-TIFET，如图 S8(b) 所示，即使考虑实际的 $R_C = 62\ \Omega{\cdot}\mu m$，负电容效应仍能有效保持陡峭的开关斜率。尽管与理想情况相比，导通电流略有降低，但电压增益和开关能力仍然稳健，证实了该器件在高性能应用中的潜力。

参考资料

(1) Park, Y., Park, H., Choi, S., Lim, D., Kim, Y. & Lee, Y. 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。IEEE Trans. Electron Devices 71, 5739–5743（2024年）。Https://Doi.Org/10.1109/Ted.2024.3427091. (2) Das, B.; Sen, D.; Mahapatra, S. 受限1T'过渡金属二硫属化物中的可调量子自旋霍尔态。《科学报告》 **2020年**, *10* (1), 6670. https://doi.org/10.1038/s41598-020- 63450-5. (3) Zacharaki, C.; Tsipas, P.; Chaitoglou, S.; Fragkos, S.; Axiotis, M.; Lagoyiannis, A.; Negrea, R.; Pintilie, L.; Dimoulas, A. 采用等离子体辅助原子氧沉积法在锗衬底上生长的铁电 Hf1-xZrxO2中极大的剩余极化。《应用物理快报》 **2019 年** , *114* (11), 112901. https://doi.org/10.1063/1.5090036. (4) Groth, C. W.; Wimmer, M.; Akhmerov, A. R.; Waintal, X. Kwant：量子输运软件包。*New J. Phys.* **2014年**, *16* (6), 063065. https://doi.org/10.1088/1367- 2630/16/6/063065. (5) Kohn, W.; Sham, L. J. 包含交换与关联效应的自洽方程。《物理评论》 **1965年**, *140* (4A), A1133–A1138. https://doi.org/10.1103/PhysRev.140.A1133. (6) Hohenberg, P.; Kohn, W. 非均匀电子气。《物理评论》 **1964年**, *136* (3B), B864– B871. https://doi.org/10.1103/PhysRev.136.B864. (7) Ozaki, T. 用于大规模电子结构计算的变分优化原子轨道。《物理评论*B*》 **2003年**, *67* (15), 155108. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.67.155108. (8) Ozaki, T.; Kino, H. 从H到Kr的数值原子基组轨道。《物理评论*B*》 **2004年**, *69* (19), 195113. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.195113. (9) Kresse, G.; Hafner, J. 用于第一行元素和过渡元素的范数守恒及超软赝势。*J. Phys.: Condens. Matter* **1994年**, *6* (40), 8245–8257. https://doi.org/10.1088/0953-8984/6/40/015. (10) Kresse, G.; Furthmüller, J. 使用平面波基组高效计算金属与半导体的从头算总能量。《计算材料科学》 **1996年**, *6* 1 15 50 10 1016 0927 0256 96 00008 0 ( ), – . https://doi.org/ . / - ( ) - . (11) Kresse, G.; Furthmüller, J. 使用平面波基组进行高效迭代方案的从头算总能量计算。《物理评论*B*》 **1996年**, *54* (16), 11169–11186. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169.

(12) Kresse, G.; Hafner, J. 从头算液态金属分子动力学。《物理评论*B*》 **1993**, *47* 1 558 561 10 1103 47 558 ( ), – . https://doi.org/ . /PhysRevB. . . (13) Kresse, G.; Joubert, D. 从超软赝势到投影缀加波方法。《物理评论*B*》 **1999年**, *59* (3), 1758–1775. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758. (14) Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. 简明广义梯度近似。《物理评论快报》 **1996年**, *77* (18), 3865–3868. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865. (15) Landau, L. D.; Khalatnikov, I. M. 关于二级相变点附近的声波反常吸收。载于《苏联科学院院报》; 1954; Vol. 96, p 25. (16) Park, Y.; Lee, H.; Lee, Y. 使用非晶氧化物半导体的陷阱增强型陡坡负电容场效应晶体管。《*ACS*应用电子材料》 **2025年**, *7* (12), 5705–5711. https://doi.org/10.1021/acsaelm.5c00767. (17) You, W.-X.; Su, P. 绝缘体上半导体结构与双栅结构二维负电容场效应晶体管之间的本征差异。*IEEE*《电子器件汇刊》 **2018年**, *65* (10), 4196–4201. https://doi.org/10.1109/TED.2018.2866125. (18) Fuhrer, M. S.; Edmonds, M. T.; Culcer, D.; Nadeem, M.; Wang, X.; Medhekar, N.; Yin, Y.; Cole, J. H. 负电容拓扑量子场效应晶体管的设计方案。载于*2021*年*IEEE*国际电子器件会议（*IEDM*）; 2021; p 38.2.1-38.2.4. https://doi.org/10.1109/IEDM19574.2021.9720587. (19) Nadeem, M.; Zhang, C.; Culcer, D.; Hamilton, A. R.; Fuhrer, M. S.; Wang, X. 通过有限尺寸效应优化受限二维烯纳米带中的拓扑开关。《应用物理评论》 **2022年**, *9* (1), 011411. https://doi.org/10.1063/5.0076625. (20) Pournaghavi, N.; Sadhukhan, B.; Delin, A. 夹在二维磁性层之间的拓扑绝缘体中的自旋输运性质。《科学报告》 **2025年**, *15* 1 2255 10 1038 41598 024 80694 7 ( ), . https://doi.org/ . /s - - - . (21) Bohuslavskyi, H.; Grigoras, K.; Ribeiro, M.; Prunnila, M.; Majumdar, S. 用于模拟存储器和存内计算应用的铁电性Hf0.5Zr0.5O2，工作温度可低至深低温。Advanced Electronic Materials 2024, 10 (7), 2300879. https://doi.org/10.1002/aelm.202300879. (22) Ram, M. K.; Wernersson, L.-E. 带氧化铝中间层的HZO的低温铁电性。IEEE Transactions on Electron Devices 2026, 73 (1), 652–658. https://doi.org/10.1109/TED.2025.3629590. (23) Schenk, T.; Fancher, C. M.; Park, M. H.; Richter, C.; Künneth, C.; Kersch, A.; Jones, J. L.; Mikolajick, T.; Schroeder, U. 关于La:HfO2中大剩余极化的起源。《*Advanced Electronic Materials*》 **2019年**, *5* (12), 1900303. https://doi.org/10.1002/aelm.201900303. (24) Yang, Q.; Hu, J.; Fang, Y.-W.; Jia, Y.; Yang, R.; Deng, S.; Lu, Y.; Dieguez, O.; Fan, L.; Zheng, D.; Zhang, X.; Dong, Y.; Luo, Z.; Wang, Z.; Wang, H.; Sui, M.; Xing, X.; Chen, J.; Tian, J.; Zhang, L. 层状氧化铋中的铁电性可持续至1纳米厚度。《科学》 **2023**, *379* (6638), 1218–1224. https://doi.org/10.1126/science.abm5134. (25) Zhang, J. X.; He, Q.; Trassin, M.; Luo, W.; Yi, D.; Rossell, M. D.; Yu, P.; You, L.; Wang, C. H.; Kuo, C. Y.; Heron, J. T.; Hu, Z.; Zeches, R. J.; Lin, H. J.; Tanaka, A.; Chen, C. T.; Tjeng, L. H.; Chu, Y.-H.; Ramesh, R. 类四方相$ {\mathrm{BiFeO}}_{3}$中巨大铁电极化的微观起源。《物理评论快报》 **2011**, *107* (14), 147602. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.147602. (26) Shen, P.-C.; Su, C.; Lin, Y.; Chou, A.-S.; Cheng, C.-C.; Park, J.-H.; Chiu, M.-H.; Lu, A.- Y.; Tang, H.-L.; Tavakoli, M. M.; Pitner, G.; Ji, X.; Cai, Z.; Mao, N.; Wang, J.; Tung, V.; Li,

J.; Bokor, J.; Zettl, A.; Wu, C.-I.; Palacios, T.; Li, L.-J.; Kong, J. 半金属与单层半导体之间的超低接触电阻。《自然》 *Nature* **2021**, *593* (7858), 211–217. https://doi.org/10.1038/s41586-021-03472-9. (27) Jiang, J.; Xu, L.; Qiu, C.; Peng, L.-M. 弹道二维 InSe 晶体管。*Nature* **2023**, *616* (7957), 470–475. https://doi.org/10.1038/s41586-023-05819-w.