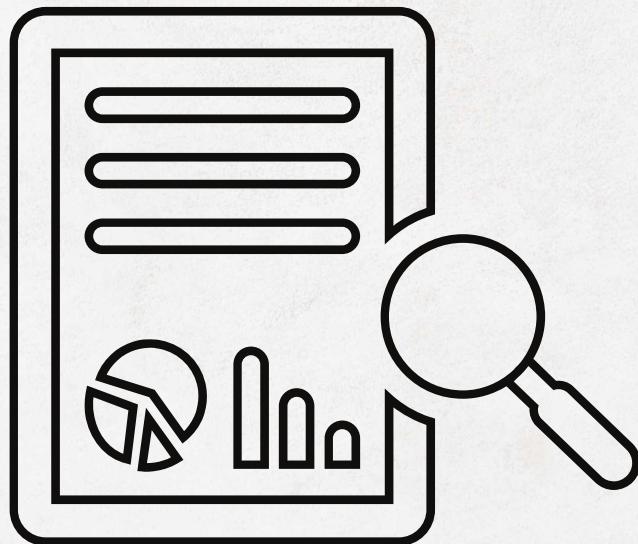


112學年度
第2學期
東海大學應用物理學系

學生專題研究 成果報告



目錄

500奈米鑽石粉末的特性研究探討 (日)應物三S10210004謝昇佑/指導教授林宗欣	4
製作核殼結構的合金奈米微粒 (日)應物三S10210005游苙仟/指導教授王昌仁	5
Supervised Machine Learning the Classical Spin Models (日)應物三S10210006趙淨/指導教授吳桂光	6
Electrical behavior and energy storage property improvement of BaTiO ₃ films with ZrO ₂ underlayer (日)應物三S10210008林憲誠/指導教授王昌仁	7
Structural evolution, electrical and magnetic properties of Bi _{1-x} Eu _x FeO ₃ polycrystalline films (日)應物三S10210013項讓苙/指導教授王昌仁	8
Automatic Brain Imaging Region Segmentation Algorithm (日)應物三S10210019陳蒨筠/指導教授施奇廷	9
The Relationship Between Phase Shift, Gray Level Variation (日)應物三S10210021劉子菲/指導教授林宗欣	10
微波對螢光奈米鑽石的影響 (日)應物三S10210022魏翊倫/指導教授林宗欣	11
1000奈米的鑽石粉末的特性研究 (日)應物三S10210023蔡宇皓/指導教授林宗欣	12
平帶系統中RKKY交互作用的特性 (日)應物三S10210026羅岳德/指導教授楊明峰	13
Bell-type不等式之IBMQ操作 (日)應物三S10210027廖駿道/指導教授黃靜瑜	14
Determination of phase transition of the q-state clock and generalized XY model by Hamming distance (日)應物三S10210028李宗翰/指導教授吳桂光	15
矽奈米線紙之奈米線/奈米線介面影響場效電晶體電性之研究 (日)應物三S10210034王耀群/指導教授蕭錫鍊	16

To transform classical data to quantum state (日)應物三S10210035陳沛芸/指導教授黃靜瑜	17
Study of Self-Supervised Ensemble Learning in Phase Transition Classification (日)應物三S10210036李彧/指導教授吳桂光	18
奈米鑽石的物理特性探討 (日)應物三S10210041何冠邑/指導教授林宗欣	19
奈米磁性流體製備之研究 (日)應物三S10210042黃文彥/指導教授王昌仁	20
Use Tree Models to predict the relationship of variety and coffee cupper points (日)應物三S10210043邱振銓/指導教授吳桂光	21
Enhancement of exchange bias of FeMn/NiFe thin films (日)應物三S10210046江哲熙/指導教授王昌仁	22
Plasma-assisted Synthesis and Characterizations of Layered Silicon Phosphide Thin Films (日)應物三S10210048黃柏璋/指導教授蕭錫鍊	23
Qsikt模擬time independent的波函數在位能井中的量子穿遂效應之探討 (日)應物三S10210050蔡東鴻/指導教授黃靜瑜	24
透過線上量子電腦實驗MERMIN-PERES 魔方遊戲 (日)應物三S10210054羅鵬菘/指導教授黃靜瑜	25
無觸媒電漿輔助合成六方氮化硼作為量子位元應用之研究 (日)應物三S10210055趙昌嗣/指導教授蕭錫鍊	26
兩階段晶種層水熱法合成氧化鋅n-i-p奈米柱薄膜白光二極體之研究 (日)應物三S10210058林子庭/指導教授蕭錫鍊	27
Polymer photodetectors with TiO ₂ nanowalls. (日)應物三S10210011容婷妤/指導教授黃家逸	
Resistive Memory Devices with High-aspect-ratio Structures (日)應物三S10210044陳昱汎/指導教授黃家逸	
THREE DIMENTIONAL LATERAL WIRES (日)應物三S10210047李怡君/指導教授黃家逸	

Study of surface contact angles of silver nanowalls
(日)應物三S10210049朱芷彤/指導教授黃家逸

500奈米鑽石粉末的特性研究探討

作者:謝昇佑(S10210004)

指導教授:林宗欣

摘要

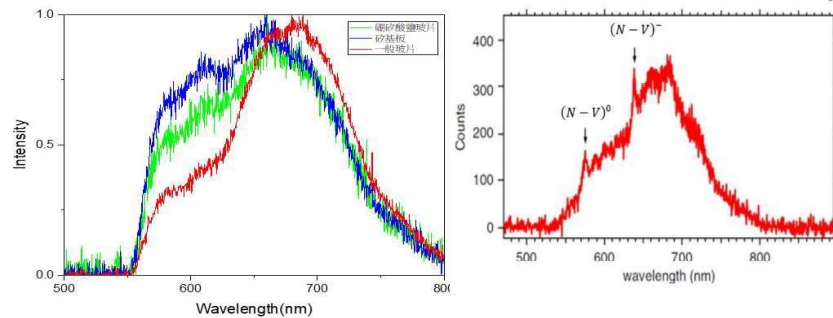
本實驗研究的重點是以兩種不同的雷射光分別對500nm的奈米鑽石進行激發，得到個別不同的光譜波長，還有量測樣品的lifetime，以及觀察樣品外觀的不同和利用拉曼光譜比較不同顆粒大小的奈米鑽石結構，以此來探討特性的差異。

樣品外觀



500nm的奈米鑽石粉末外觀顏色是較淺代表表層的石墨層較少，跟不同顆粒大小的樣品顏色有些許不同。

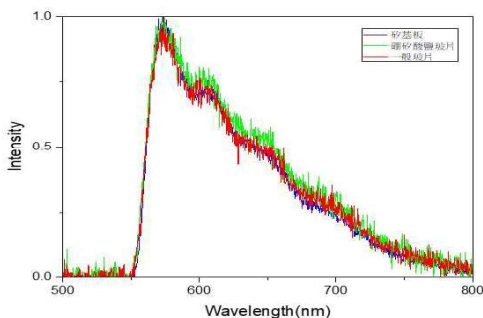
532nm雷射光激發下的光譜圖



(圖一)

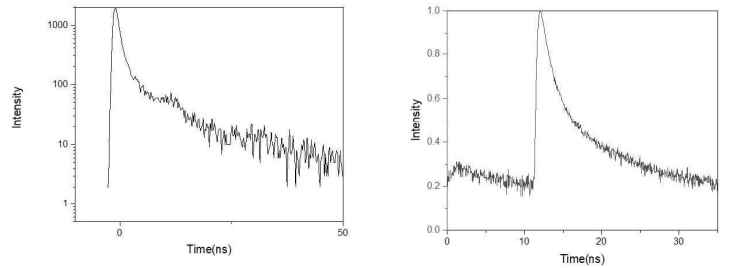
我使用三種底板量測是避免雷射沒有打在NV-center而是打在玻片形成玻片光，所以進行三種比較，當532nm雷射激發到NV-center波峰強度最強的位置會落在650nm-700nm之間，由(圖一)可得知最高峰位置主要為氮-空缺 $(N - V)^-$ 。

430nm雷射光激發下的光譜圖



我使用三種底板量測是避免雷射沒有打在NV-center而是打在玻片形成玻片光，所以進行三種比較，當430nm雷射激發到NV-center波峰強度最強的位置會落在550nm-600nm之間，由(圖一)可得知最高峰位置主要為氮-空缺 $(N - V)^0$ 。

奈米鑽石粉末lifetime測量圖



532nm雷射光激發

430nm雷射光激發

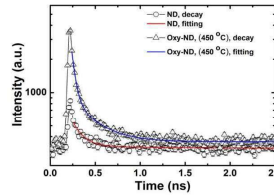
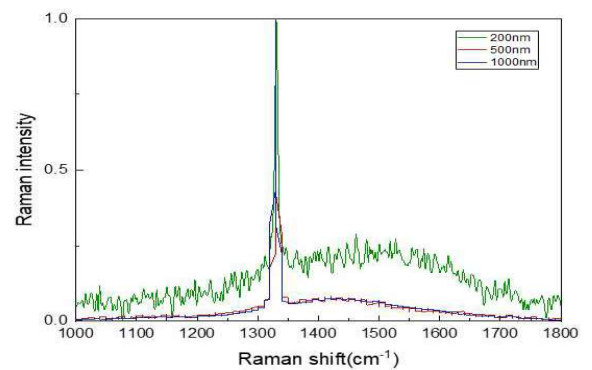


FIG. 4. Luminiscent life time spectra with fitting for 100nm sized NDs and oxidative treatment at 450 °C.

透過lifetime測量圖得知在研究時雷射光都有準確打在奈米鑽石NV-center上面進行激發，實驗結果與(圖二)接近，因為使用的是奈米鑽石打到的NV-center沒有很多，而有些打到非NV的空缺上所以生命週期較短。

(圖二)

拉曼光譜圖



G band位置會落在 $1550\text{cm}^{-1} \sim 1600\text{cm}^{-1}$ 之間。

D band位置會落在 $1300\text{cm}^{-1} \sim 1350\text{cm}^{-1}$ 之間。

結論

由雷射光激發下的光譜圖可以得知532nm雷射激發下會獲得的光子數比430nm雷射激發下的還要多出許多，其原因可能是激發到的NV-center占比較多。

由lifetime測量圖，與文獻的衰減曲線進行比較，可以從中了解電子從激發態掉至基態的時間。

由拉曼光譜圖可以得知不同顆粒大小奈米鑽石的拉曼光譜在 SP^3 混成軌域在 1332cm^{-1} 處表現出尖峰，鑽石峰孤立，拉曼吸收截面大，因此該峰可以做為奈米鑽石位置的指標⁴

摘要

核殼結構的微粒具有顯著的優點，如提升強度、穩定性和光學特性，並保護核心材料免於降解。通過選擇不同的殼層材料，可以調整微粒的各種特性，實現表面修飾和多功能化。本實驗旨在製作具核殼結構的奈米微粒，通過鍍膜技術包裹易氧化的金屬(如稀土類合金)，以克服氧化問題。本實驗以銀包覆金作為先導的實驗，先使用液體中雷射剝度法(Lase Ablation in Liquid method; LAL)製作出核奈米微粒(Au)，再使用銀鏡反應在金微粒上鍍銀，以形成核殼結構的奈米微粒。藉由樣品的吸收光譜量測與TEM分析我們可初步評估我們的實驗結果。



簡介

本計畫目標為製作具核-殼結構的奈米微粒，其目的為藉鍍膜技術將銀包裹住易氧化的金屬(如稀土合金)，以克服稀土合金易氧化的問題。目前，我們將先製作Au@Ag核殼結構的奈米微粒。因金相較稀土金屬元素來說，性質更穩定也不易氧化，是個很好的測試材料，未來會將核心材料改為稀土金屬奈米微粒。而殼層的銀，雖然其抗氧化性不如金和白金，但其成本相對較低，而且銀微粒的鍍膜至成也相對成熟。這種核-殼結構的合金優勢在於能有機會保持微粒的原有物理特性(如磁性)，同時有效防止氧化，讓我們有機會研究這些易氧化合金的物理性質。

實驗過程及結果

a. 製做作為核的金奈米微粒

首先我們先使用脈衝紅外線雷射(雷射功率20W、雷射波長1064nm)，於蒸餾水中照射金塊材獲得奈米金微粒。脈衝雷射具有很高的瞬間功率能將金屬表面瞬間蒸發，因液體的冷卻效果使得蒸發的金屬蒸氣瞬間冷卻而無法進一步生長而形成奈米微粒。濺出的材料則可直接分散於液體中收集起來。此工作液體可以根據需要作選擇，如純水、酒精以及丙酮等等。此法我們稱為液體中雷射剝度法(Lase Ablation in Liquid method; LAL) [1]。製作的金微粒將作為後面製作核-殼的核。此法制得的金微粒呈現酒紅色(見圖一)平均尺寸通常小於20 nm(因其可以長期懸浮)。

b. 製作Au@Ag核-殼結構

我們嘗試以奈米金微粒作為核心，利用阿拉伯糖將硝酸銀的銀離子還原在金微粒表面。表格一為參考配方。



圖一、奈米金微粒

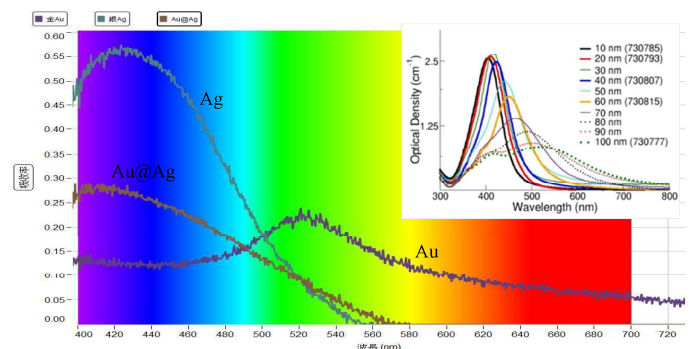
表格一、參考配方

0.001M	0.001M	1M
硝酸銀	氨水	阿拉伯糖
1ml	2ml	1ml
純水	金奈米微粒	加熱
1ml	1ml	✓

c. 吸收光譜分析

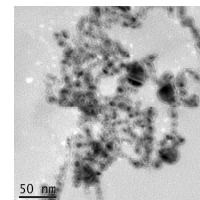
我們制得的樣品：奈米銀微粒(呈黃色)、奈米金微粒(紫紅色)以及Au@Ag奈米微粒(呈黃色)。使用光譜儀進行吸收光光譜量測。

圖二為吸收光譜結果，金微粒的光譜在530nm附近有一個明顯的峰值，銀微粒的峰值落在420nm附近、Au@Ag微粒則未觀察到奈米金的峰值，且在藍光附近的光譜有往短波長分布的傾向這可能反映了有很薄的銀膜附著在金微粒之上。

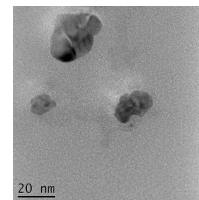


圖二、銀微粒、金微粒及Au@Ag微粒光譜圖；小圖為文獻中不同尺寸奈米銀微粒的吸收光譜圖[2]。

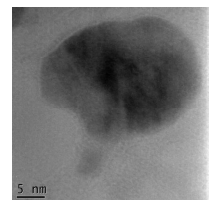
圖三(a)-(c)為Au@Ag之TEM照片。隱約可看見有核-殼結構出現，尺寸約在20-30nm附近。



圖三(a)



圖三(b)



圖三(c)

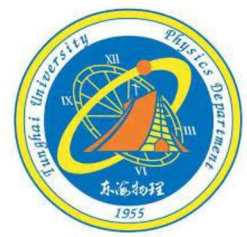
未來實驗

- (1) 目前尚未製作出理想的核殼結構尚須嘗試不同的制程參數如反應物的濃度、加熱與否等製作參數來獲得理想核殼結構。
- (2) 在掌握可製作Au@Ag核-殼結構後我們將利用LAL法於丙酮(或酒精)中製作La、Ce、Tb等奈米微粒作為核殼結構的核，並將銀鍍於其上。期望可以克服稀土元素易氧化的問題，可以進一步穩定地來研究稀土奈米微粒的磁性，光學特性等性質。

參考資料

- [1] 利用瞬時過程製作奈米微粒之研究(單郁翔 2019 東海大學應用物理系碩士論文)
- [2] Silver Nanoparticles: Optical Properties (<https://nanocomposix.com/pages/silver-nanoparticles-optical-properties>)

Supervised Machine Learning the Classical Spin Models



Ching Chao, Kwai-Kong Ng
Department of Applied Physics, Tunghai University, Taichung, Taiwan

簡介

透過監督式機器學習的方法，探討捲積神經網路(CNN)應用在二維 Ising 及 q-state clock 模型的表現和限制。從給定的自旋組態中，分類其對應的系統溫度，以及預測系統能量和磁化強度，結果發現經適當調整網路架構後，預測磁化強度、能量的結果皆相當接近實際值。並進一步的探討神經網路中的權重(W)辨別二維 Ising 模型的相變特徵。

研究方法

1. 使用標準 Monte-Carlo simulations 生成不同溫度的自旋組態樣本，溫度範圍從 $T = 0.05, 0.1, 0.15, \dots, 4$ 共 80 個，每個溫度有 1000 筆自旋組態樣本。
2. 建立 CNN 模型、讀取自旋組態的數據。
3. 模型一: 使用分類模型讓機器學習辨別不同自旋組態對應的溫度，並繪製混淆矩陣討論分類結果。
4. 模型二: 使用迴歸模型預測不同溫度的能量 E 和磁化強度 m 與實際值進行比較。
5. 模型三: 繪製權重矩陣分量圖 W_l^m 觀察相變特徵。這裡 l 代表該權重所連接的"輸出"神經元的索引； m 代表該權重所連接的"輸入"神經元的索引。

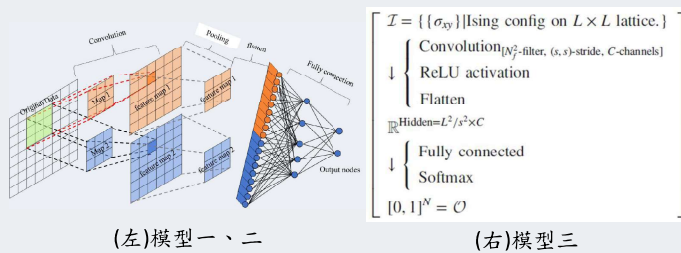
$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)$$

H 是系統的哈密頓量 (描述系統總能量的函數)； J 表示相互作用強度； $\langle i,j \rangle$ 表示相鄰自旋之間的求和。

$$|m| = \sqrt{\left(\frac{1}{n} \sum_i \sin \theta_i\right)^2 + \left(\frac{1}{n} \sum_i \cos \theta_i\right)^2} ; E = \langle H \rangle$$

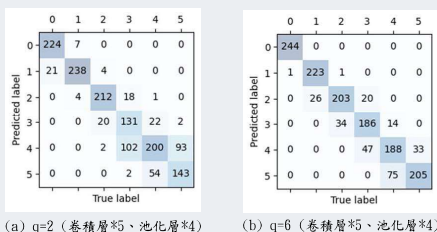
其中 $\theta_n = n(2\pi/q)$, $n = 0, 1, 2, \dots, q-1$, q 代表一個自旋所有可能的狀態數。

CNN 模型示意圖



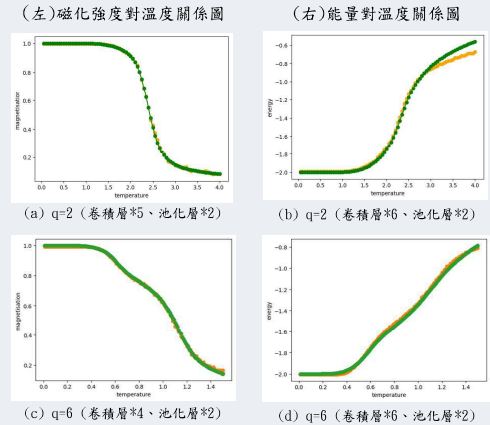
結果

模型一:



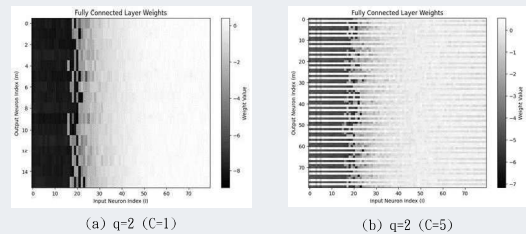
圖一、為溫度分類的混淆矩陣。水平軸表示真實值、縱軸表示預測值，數值表示樣本數，分類的項目為 $T = 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2, 1.4$ 共 6 個。透過輸入自旋組態，由機器學習預測溫度，分類出不同類別的情形。

模型二:



圖二、為透過輸入自旋組態，輸出為由機器學習預測的磁化強度及能量。水平軸為溫度；垂直軸為磁化強度(左)、能量(右)。綠色表示真實值、橘色表示預測值。

模型三:



圖三、分別為不同 channel 數量的權重矩陣分量圖 W_l^m 。水平軸為 80 個溫度類別 ($T = 0.05, 0.1, 0.15, \dots, 4$)；垂直軸為隱藏層的數目 m ；顏色代表權重值。

結論

- 模型一: 目前大致可以辨別出對應的溫度，但還是有少數被分類錯誤，往後會再繼續研究適合的參數來達到更佳的分類結果。
- 模型二: 適當調整網路架構後，預測磁化強度、能量的結果皆相當接近實際值。而過多的卷積層和池化層會使預測的結果變得不精準。
- 模型三: 權重 W_l^m 在低溫有序態和高溫無序態有明顯差異，但權重改變邊界與系統相變點不一致，原因目前還不了解，有待進一步探討。

參考文獻

- Burak Civitcioglu, Rudolf A. Romer and Andreas Honecker, Machine Learning the Square-Lattice Ising Model, J. Phys., Conf. Ser. 2207 012058 (2022)
- Akinori Tanaka and Akio Tomiya, Detection of Phase Transition via Convolutional Neural Networks, J. Phys. Soc. Jpn. 86 063001 URL (2017)

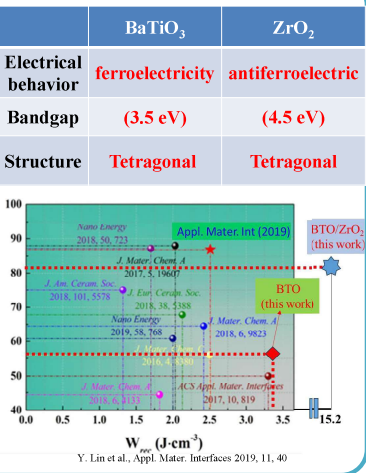
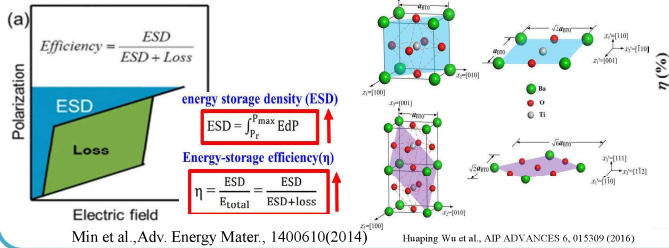
X.C. Lin (林憲誠)¹, C.R. Wang (王昌仁)¹, H.W. Chang (張晃暉)²

¹Department of Applied Physics, Tunghai University, Taichung, Taiwan

²Department of Physics, National Chung Cheng University, Chia-Yi, Taiwan

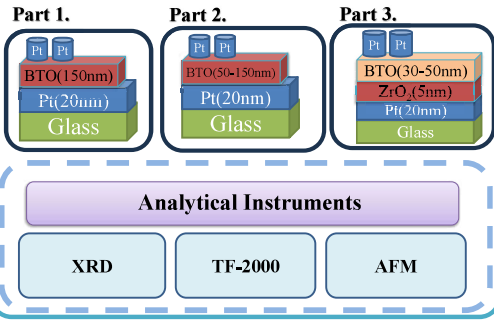
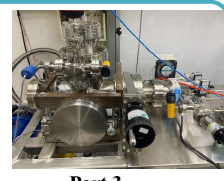
Introduction

- BaTiO₃ (BTO) exhibits **high ferroelectric polarization**.
- ZrO₂ has **good dielectric properties** and **high breakdown electric field**.
- Most current studies have extensively studied on the energy storage density (ESD) characteristics of **heterostructure films** based on BTO, there are relatively few studies on sputtered BTO/ZrO₂ films.
- Combining electric behavior of these two materials might achieve a **high polarization** and **low electric coercive field** at the same time, and thus **large ESD** and **high efficiency**.
- In this work, electric behavior and energy storage properties of sputtered BTO/ZrO₂ films are studied.



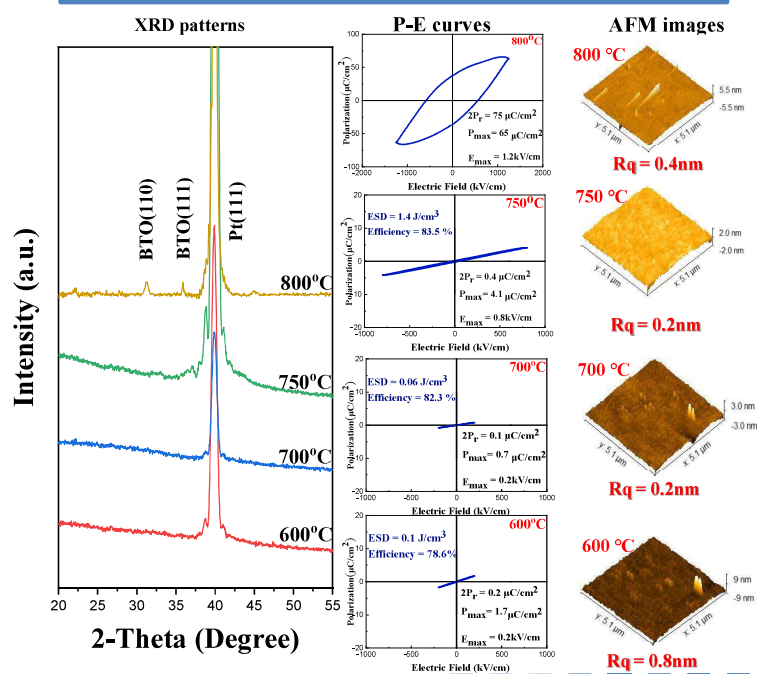
Experiment

- RF magnetron sputtering
- Temperature : 600-800 °C

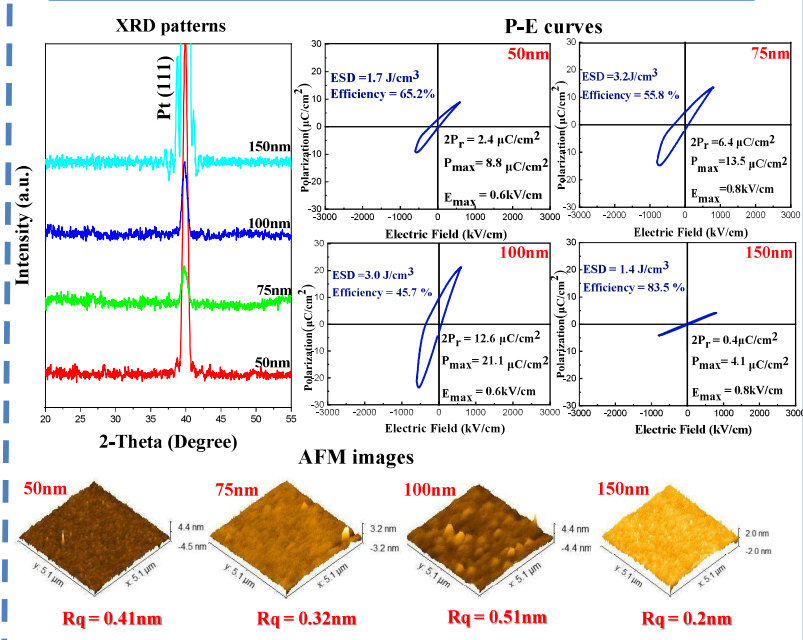


Results and discussion

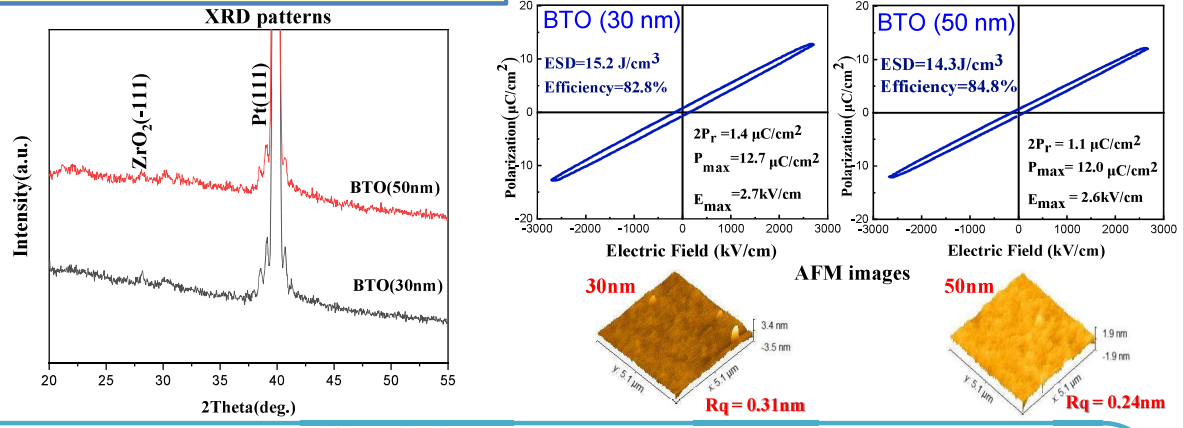
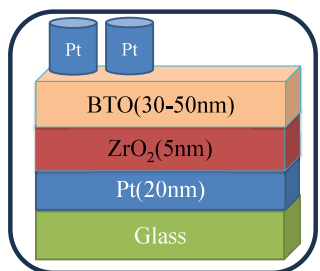
1. Structure and Electric behaviors of BTO films at 600-800°C



2. Structure and Electric behaviors of BTO films (50-150nm) prepared at 750°C



3. BaTiO₃ on 5-nm-thick ZrO₂ underlayer with various BTO thicknesses at 750 °C



Conclusions

- In this work, **BaTiO₃ thin films on 5-nm-thick ZrO₂ underlayer** show a **typical paraelectric behavior** with **high polarization** and **large breakdown field**, therefore contributes to **the improve ESD**.
- In this work, high ESD properties of **ESD~ 15.2 J/cm³** and **Efficiency~ 82.8%** is attained for the sputtered BTO/ZrO₂ film.
- A **paraelectric behavior with high polarization** might be resulted from BTO nanocrystals embedded in the amorphous matrix.
- The introduction of ZrO₂ underlayer is helpful to **increase the breakdown field** of BTO thin film, possibly due to higher dielectric properties.
- The results of this work show that **the ESD performance of BTO thin films can be optimized** by **the introduction of ZrO₂ underlayer** and **tuning the sputtering parameters**.
- Further study on microstructure analysis is ongoing.

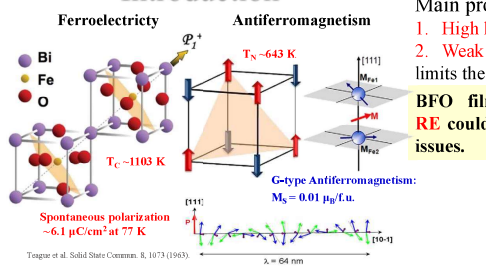
Structural evolution, electrical and magnetic properties of $\text{Bi}_{1-x}\text{Eu}_x\text{FeO}_3$ polycrystalline films

H.Y. Hsiang(項誌斌)¹, C.R. Wang(王昌仁)¹, H.W. Chang(張晃暉)²

¹ Department of Applied Physics, Tunghai University, Taichung, Taiwan

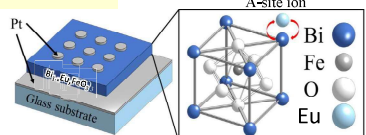
² Department of Physics, National Chung Cheng University, ChiaYi, Taiwan

Introduction



Main problems in BFO:
1. High leakage current
2. Weak ferromagnetism limits the applications.

BFO films doped with RE could meet the above issues.



Rare report on Eu-doped BFO (BEFO) films is available. Proper ionic radius for Eu might help BEFO increase polarization. Therefore, multiferric properties of $\text{Bi}_{1-x}\text{Eu}_x\text{FeO}_3$ films are studied.

Experiment

Target preparation
850°C for 12hr
 $\text{Bi}_2\text{O}_3 + \text{Fe}_2\text{O}_3 + \text{Eu}_2\text{O}_3$

BEFO film deposition
• Pulsed Laser Deposition (PLD)
• Laser wavelength : 355nm
• Background pressure : 5×10^{-6} Torr
• Formation temperature : 375-450 °C
• Working Pressure : 30 mTorr (O_2)

Structure: Pt (20 nm) / $\text{Bi}_{1-x}\text{Eu}_x\text{FeO}_3$ (300 nm) / Pt (20 nm) / Glass

Characterization: AFM (Roughness), TF2000 (Ferroelectric properties), XRD (Structures, Internal stress)

Results and Discussion

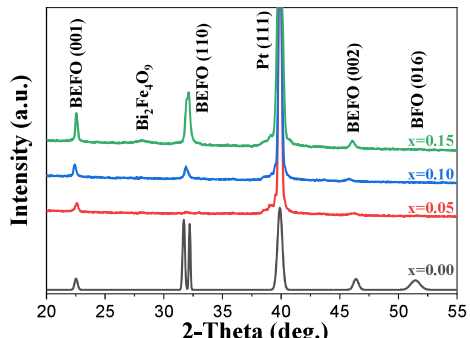


Fig. 1. XRD patterns of $\text{Bi}_{1-x}\text{Eu}_x\text{FeO}_3$ ($x=0-0.15$) film at 425 °C.

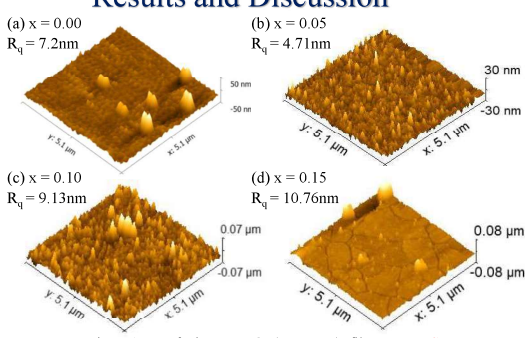


Fig. 2. AFM of $\text{Bi}_{1-x}\text{Eu}_x\text{FeO}_3$ ($x=0-0.15$) film at 425 °C. (a) $x=0.00$ (b) $x=0.05$ (c) $x=0.10$ (d) $x=0.15$

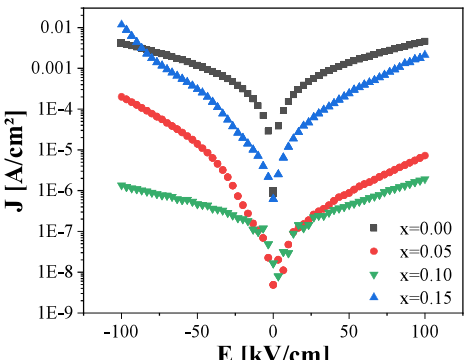


Fig. 3. J-E loop of $\text{Bi}_{1-x}\text{Eu}_x\text{FeO}_3$ ($x=0-0.15$) film at 425 °C.

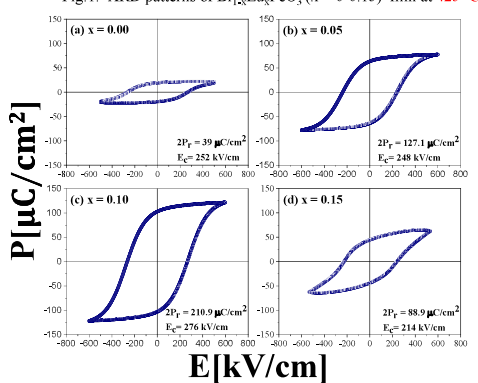


Fig. 5. P-E loop of $\text{Bi}_{1-x}\text{Eu}_x\text{FeO}_3$ ($x=0-0.15$) film at 425 °C.

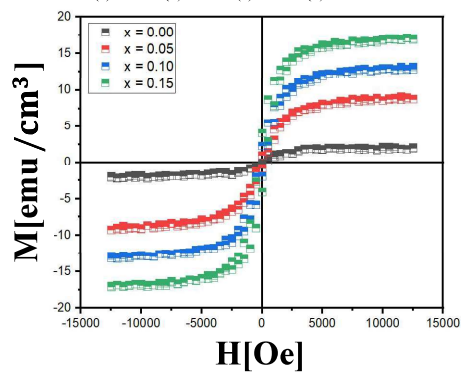


Fig. 6. M-H curve of $\text{Bi}_{1-x}\text{Eu}_x\text{FeO}_3$ ($x=0-0.15$) at 425 °C.

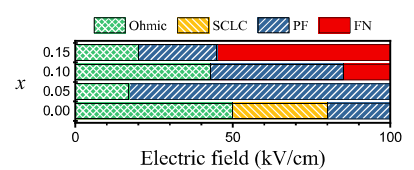


Fig. 4. Leakage mechanism of $\text{Bi}_{1-x}\text{Eu}_x\text{FeO}_3$ ($x=0-0.15$) film at 425 °C.

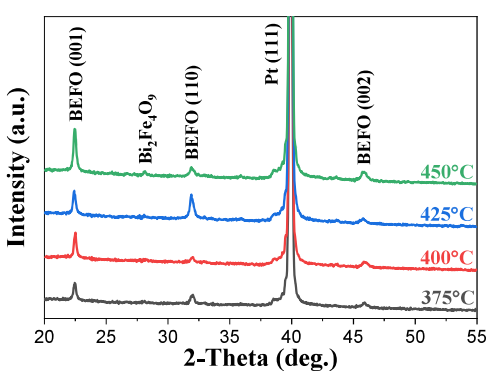


Fig. 7. XRD patterns of $\text{Bi}_{0.90}\text{Eu}_{0.10}\text{FeO}_3$ film at 375 °C-450 °C.

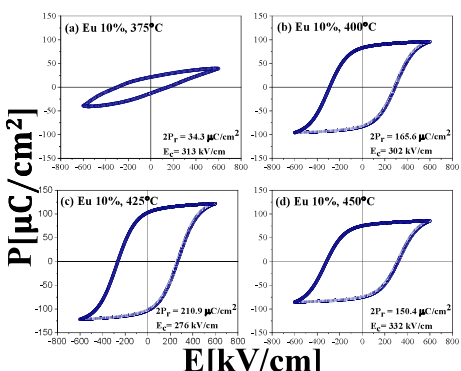


Fig. 8. P-E loop of $\text{Bi}_{0.90}\text{Eu}_{0.10}\text{FeO}_3$ film at 375 °C-450 °C.

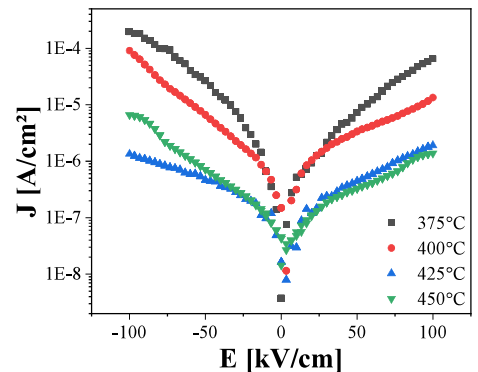


Fig. 9. J-E loop of $\text{Bi}_{0.90}\text{Eu}_{0.10}\text{FeO}_3$ film.

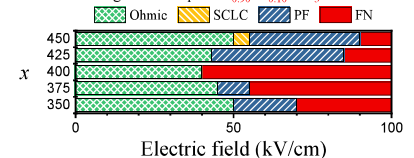
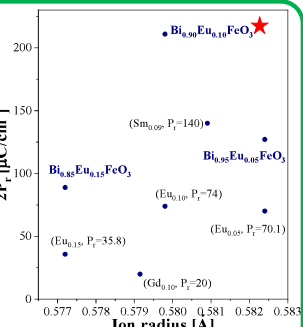


Fig. 10. Leakage mechanism of $\text{Bi}_{0.90}\text{Eu}_{0.10}\text{FeO}_3$ film.

Comparison

Table. Multiferric properties of developed BRFO.

Composition	Method	$2P_r$ ($\mu\text{C}/\text{cm}^2$)	E_c (kV/cm)	M_s (emu/cm^3)	Ref.
$\text{Bi}_{0.95}\text{Eu}_{0.05}\text{FeO}_3$	PLD	127.1	248	7.6	In this work
$\text{Bi}_{0.90}\text{Eu}_{0.10}\text{FeO}_3$	PLD	210.9	276	12.8	In this work
$\text{Bi}_{0.85}\text{Eu}_{0.15}\text{FeO}_3$	PLD	88.9	241	15.8	In this work
$\text{Bi}_{0.95}\text{Eu}_{0.05}\text{FeO}_3$	PLD	70.1	300.0	2.3	[1]
$\text{Bi}_{0.90}\text{Eu}_{0.10}\text{FeO}_3$	PLD	74.0	250.0	3.5	[1]
$\text{Bi}_{0.85}\text{Eu}_{0.15}\text{FeO}_3$	PLD	35.8	265.0	1.4	[1]
$\text{Bi}_{0.91}\text{Sm}_{0.09}\text{FeO}_3$	Sol-Gel	140.0	670.0	7.3	[2]
$\text{Bi}_{0.90}\text{Gd}_{0.10}\text{FeO}_3$	Sol-Gel	20.0	96.0	5.3	[3]



[1] Zhonggang Hu et al., Journal of the American Ceramic Society (2010).
[2] Xue Xu et al., Ceramics International, 0275-8482 (2013).
[3] H.C. Chen et al., Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 381, 137-130 (2015).

Conclusions

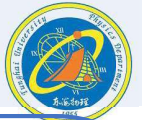
- Multiferric properties and leakage behavior of $\text{Bi}_{1-x}\text{Eu}_x\text{FeO}_3$ films are studied.
- The improved ferroelectricity with $2P_r = 210.9 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ is observed in $\text{Bi}_{0.90}\text{Eu}_{0.10}\text{FeO}_3$ films prepared at 425 °C.
- The roughness is decreased and the leakage are decreased due to Eu substitution within range of $x = 0.05 - 0.15$.
- M-H curves shows that the magnetic properties are enhanced as increasing x , which is attributed to the magnetic moment of Eu^{3+} and also the suppressed spiral spin structure.
- BEFO film could have good ferroelectric properties in this work due to proper Eu substitution and low leakage current due to good crystallinity and flat interface.
- This work suggest the improved multiferric properties of $\text{Bi}_{0.90}\text{Eu}_{0.10}\text{FeO}_3$ films has potential for magnetoelectric applications.

Department of Applied physics, Tunghai University, Taichung, Taiwan

Automatic Brain Imaging Region Segmentation Algorithm



Chen, Chian-Yun (陳禔筠), Shih, Chi-Tin (施奇廷)

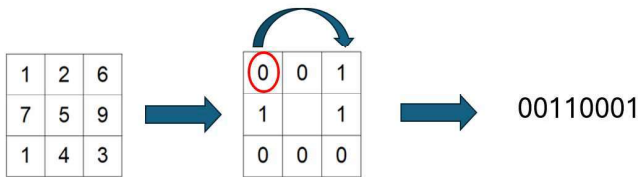


Abstract

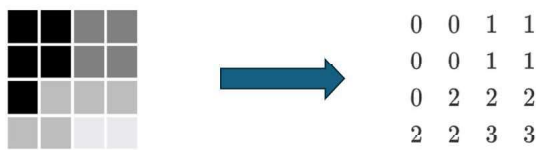
This project aims to develop an automatic feature labeling program for large-scale rodent brain X-ray images. It will use image processing and AI techniques, including Local Binary Patterns (LBP), Gray-Level Co-occurrence Matrix (GLCM), and Convolutional Autoencoder (CAE). Hierarchical clustering and modularity will classify the extracted image features, enabling accurate labeling of prominent features. This will provide researchers with efficient and accurate X-ray brain image analysis.

Introduction

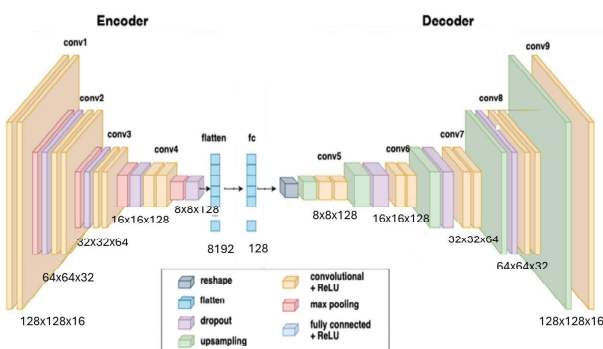
LBP (Local Binary Patterns) is a texture descriptor in image analysis. It compares each pixel to its neighbors, assigning a binary code based on whether neighboring pixel intensities are greater or less than the central pixel's intensity. These codes represent the image's texture.



GLCM (Gray-Level Co-occurrence Matrix) is a statistical method for describing image texture by calculating the frequency of pixel pairs with specific values and spatial relationships. It captures texture features like contrast, homogeneity, and entropy.

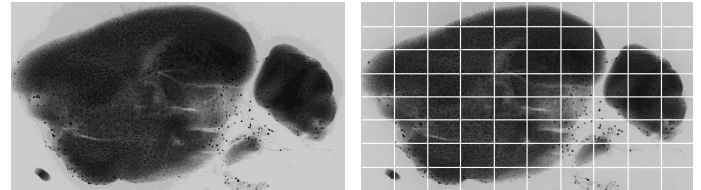


CAE (Convolutional Autoencoder): A type of neural network for unsupervised learning that compresses input data via an encoder and reconstructs it via a decoder. It reduces data dimensionality and extracts features, useful in tasks like image denoising, compression, and feature extraction. In this context, CAE extracts deep features from rodent brain X-ray images for analysis and classification.

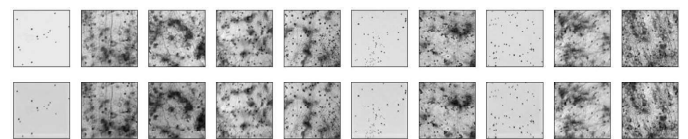


Method

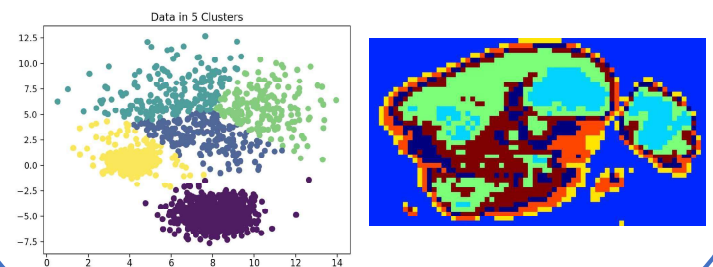
First, image segmentation techniques are used to divide the input rodent brain X-ray images into multiple small blocks at different scales. This step ensures that each small region captures key features in the image adequately, serving as the basis for subsequent analysis and processing.



Next, in-depth feature analysis is conducted on each segmented block. This includes feature extraction techniques such as LBP, GLCM, CAE, as mentioned earlier. Through these methods, the texture characteristics of each small region can be accurately described, and these features are further aggregated into feature vectors. These vectors contain essential information about the characteristics of image regions to facilitate the subsequent classification process.



During the classification phase, clustering methods such as K-means, hierarchical clustering, and modularity are utilized to classify the feature vectors. Finally, the classified results are mapped back to the original X-ray images, and labels are applied at corresponding locations.



Expected Results

The algorithm developed in this project aims to provide intuitive, consistent, reliable, and stable classification results for two-dimensional rodent brain X-ray images. The final results will be displayed as maps overlaid on the original images, highlighting local features for easy interpretation. After developing the algorithm, discussions with biologists will ensure the image-based results align with the biological significance of brain regions. This study is expected to greatly improve the speed and accuracy of large-scale brain image analysis, benefiting both neuroscience research and broader applications.

摘要

本次專題實驗將深入探討相位與灰階值變化及偏振與液晶的關係。利用雷射光源為波長632.8 nm 的紅光氦氖雷射空間光调制器SLM调制雷射偏振，觀察雷射偏振角度對光功率的變化，並分析“Phase shift vs Gray level”的曲線過程。

實驗儀器架構

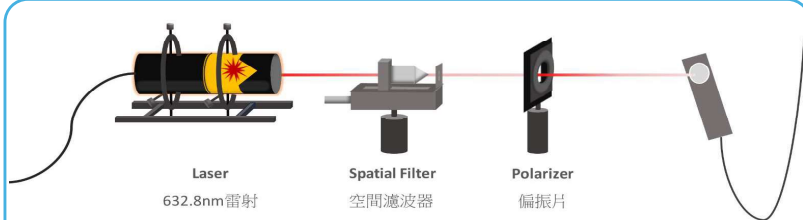


Fig.1 Experimental Setup Before Testing

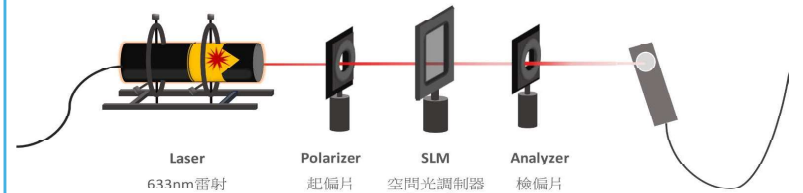


Fig.2 Experimental set up

在實驗開始前，運用光學系統，(雷射、擴束系統、偏振片、空間濾波器和檢偏片)通過觀察光波變化，熟悉平行光設置及元件調整，並推算SLM的基本參數，如光功率變化與偏振片的關係及配向角度(如Fig.1)。將SLM放入系統中(如Fig.2)，研究未給予和給予電訊號的SLM對光的影響，固定雷射偏振角度。紀錄數據後用Origin製圖。SLM可调制光振幅和相位，內部結構如液晶顯示器，由格狀像素矩陣組成。施加電壓時，液晶像素偏轉，改變折射率以调制光。在未給電訊號時，SLM結構影響光的表現，如繞射角度、效率和偏振態變化，可推算出SLM的像素大小、開口率和配向角度等參數。

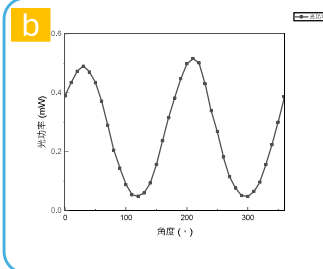


Fig.4 (b) shows the laser passing through the SLM when it's powered on.

灰階值與偏振的關係

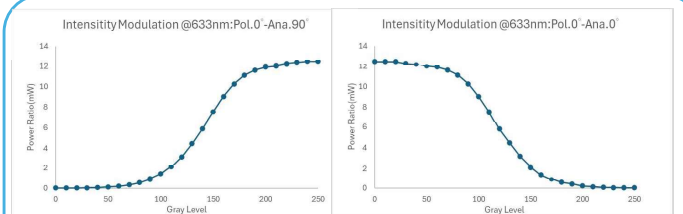


Fig.5 intensity modulation

瞭解偏振通過液晶特性後，調整起偏片為0°檢偏片為90°用LC2012程式中的功能，調整灰階值在0-255間跟著雷射偏振角去改變，同時架設透鏡依其焦距、物距推算出影像位置及大小並在成像處放置屏幕。此時角度為平行或垂直液晶配向角。將偏振片與檢偏片調整為角度分別夾+45(-45)度及-45(45)度偏振與檢偏夾90度，並視系統雷射光偏振方向，來挑選其正負值以得到較佳的光功率調整軟體中光亮度變化並嘗試調控B.C.值，觀察其影響如Fig.3為範例。

雷射偏振狀態與方向

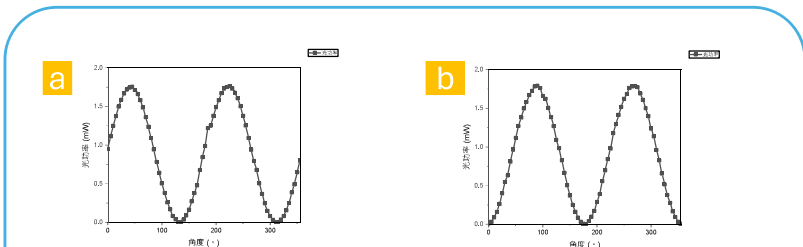


Fig.3 Experimental Setup Before Testing

當雷射未通過空間光调制器(SLM)時，其偏振狀態為線性偏振狀態。(Fig.3.a)在雷射角度為45度時，起偏器設置為0度，檢偏片設置為90度。(Fig.3.b)在雷射角度為90度時，起偏器設置為0度，檢偏片設置為90度。

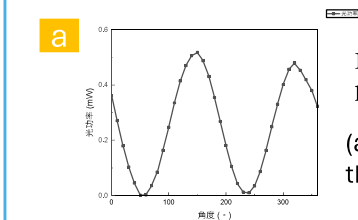


Fig.4 polarization state of the laser after passing through the SLM

(a) shows the laser passing through the SLM when it's not powered on

亮度與對比分別影響灰階值

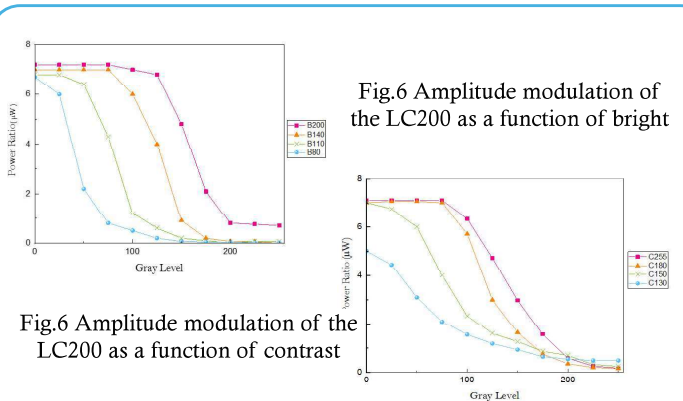


Fig.6 Amplitude modulation of the LC200 as a function of contrast

分別調整Gray Level中的亮度與對比值的參數，去觀察灰階值及光功率的變化，調整灰階圖像的亮度和對比度會改變像素值分佈，影響圖像的明暗程度和對比度。增加亮度使圖像更明亮，增加對比度增強明暗差異。這些調整也影響光功率分佈，改變圖像的整體外觀。

微波對螢光奈米鑽石的影響

作者：魏翊倫

指導老師：林宗欣

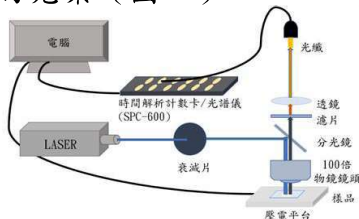
東海大學應用物理學系

摘要

本次研究的微波對奈米螢光鑽石的影響需要從樣品的製備開始，是要能夠做出單分子的樣品，但是礙於時間關係我們沒辦法確定我們所製作的樣品為我們所需，所以我們使用樣品的原料來測量不同波長的雷射光所激發的生命週期 (lifetime) 和光激發螢光 (Photoluminescence) 光譜，來和文獻做對比。

儀器架構

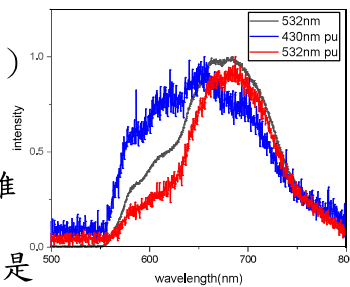
本實驗架構為使用430nm和532nm的脈衝雷射打入共焦式顯微鏡，並由雪崩式二極體 (APD) 收集光強度進入時間解析技術卡或是直接進入光譜儀作數據的蒐集 (圖一)。



圖一

光譜圖

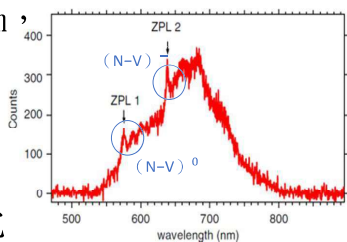
我們使用430nm和532nm波長的雷射激發樣品所蒐集到的光譜圖和文獻上的光譜圖做比較 (圖四)。可以看出532nm雷射所得到的光譜圖基本上與文獻上的相同，430nm雷射雖然在圖形上和文獻上的並沒有那麼吻合，但那也只是430nm的雷射激發較多的 $(N-V)^0$ 所以整體光譜圖會較偏左，波長還是在螢光內米鑽石的範圍內。



圖四

螢光奈米鑽石在光譜上的特性

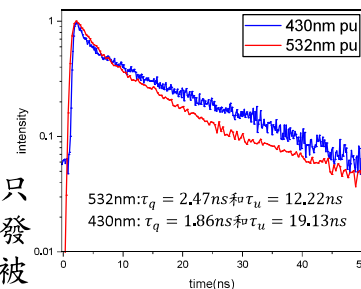
螢光奈米鑽石發出螢光是因為鑽石裡含有缺陷與雜質，而氮-空缺 (nitrogen-vacancy, $N-V$) 就是其中一種 [1]。氮-空缺激發出的螢光光譜位於575nm到750nm，我們可以看到兩個峰值為位於575nm不帶電的 $(N-V)^0$ 和另一個位於637nm帶負電的 $(N-V)^-$ 。為本次研究所探討螢光奈米鑽石中的負氮空缺中心激發出的螢光。



圖二

Lifetime測量

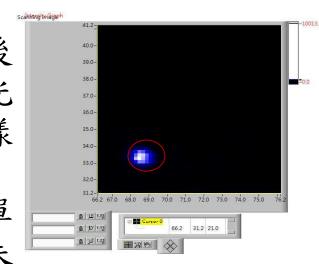
實驗中我們利用兩種波長的脈衝雷射激發樣品，所得到的 Lifetime 與文獻中所得到的生命週期分相仿，只是在不同波長的雷射激發下 $(N-V)^0$ 和 $(N-V)^-$ 被激發的數量不同，才會有些許差異。圖五



圖五

結論

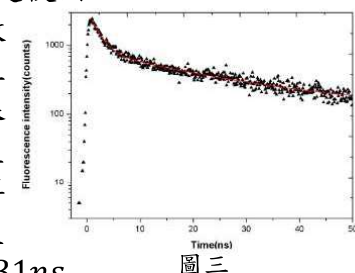
經過光譜圖和 Lifetime 與實驗所得到的數據做比較後，我們確定使用的樣品為螢光奈米鑽石。我們也有利用此樣品掃描出為鑽石的亮點 (圖六)，但目前還沒找出單分子的鑽石來加微波觀察，未來也會往這部份進一步研究。



圖六

螢光生命週期 (Lifetime)

螢光生命週期 [2] 是使用脈衝雷射將一群光子激發到亞穩態，亞穩態上的光子隨著時間回到基態的時間就為螢光的生命週期。文獻上數據得到螢光奈米鑽石兩個生命週期分別為 $\tau_q = 1.931ns$ 和 $\tau_u = 22.795ns$ 。



圖三

參考文獻

- [1] F.Treussart, V.Jacques, E.Wuu, T.Gacoin, B.Grangier, J.-F.Rocha, "Photoluminescence of single colour defects in 50 nm diamond nanocrystals," Physica B, p. 926~929, 14 2006.
- [2] 陳論鉉，計算螢光奈米鑽石在石墨外殼影響下的負電氮-空缺中心數目, p. 45-46,。

1000奈米的鑽石粉末的特性研究

學生姓名:蔡宇皓 指導教授:林宗欣

東海大學應用物理系三年級

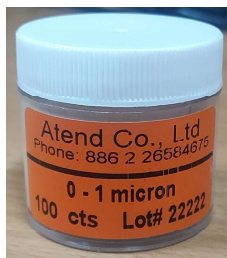
本次實驗藉由操作共焦式顯微鏡去測量奈米鑽石(ND)粉末置於不同基板下的光譜、lifetime及比較不同大小ND之間的拉曼光譜，最後從實驗結果去探討相關特性並和文獻進行比較。

本次研究採用的樣品

此樣品是大小為1000nm的ND粉末，相較於其他大小的鑽石粉末，它的外觀顏色相對較淺。而會有此差異來自於ND外層的碳包覆的多寡。



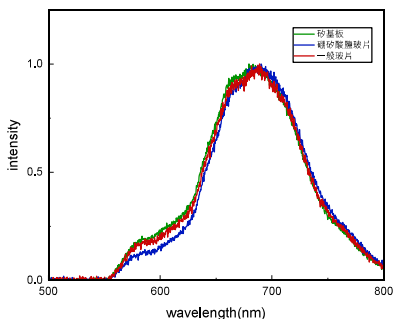
樣品規格



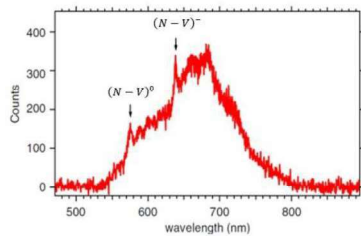
樣品外觀

532nm雷射光譜比較圖

為了避免雷射因打到基板使基板發光導致測量到基板的光譜，所以我把三種同樣品但不同基板的數據去進行比較。由左圖觀察可知，使用532nm雷射打在樣品上時，在680nm處會出現最大強度。再由右圖可知(N-V)⁰位置落在575nm處；(N-V)⁻位置落在637nm處，之後將兩張圖比較後能看到1000nm的ND的(N-V)⁻強度比(N-V)⁰高，代表在532nm雷射激發下(N-V)⁻發光數量較多。



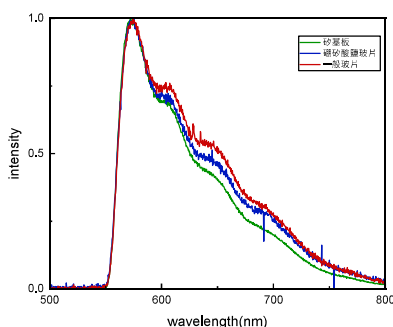
不同基板的ND光譜圖1



文獻[1]光譜圖

430nm雷射光譜比較圖

如同532nm雷射光，為了避免因打到基板使基板發光導致測量到基板的光譜，所以我同樣把三種同樣品但不同基板的數據去進行比較。由下圖觀察可知，使用430nm雷射打在樣品上時，在570nm處會出現最大強度且同時也是(N-V)⁰的位置，也可觀察到1000nm的ND的(N-V)⁰強度比(N-V)⁻更高，代表在430nm雷射激發下(N-V)⁰發光數量更多。



不同基板的ND光譜圖2

不同大小的ND的拉曼光譜比較圖

在拉曼光譜中，會有兩個明顯的特徵峰值，也就是G band和D band。G band位置在1585cm⁻¹處，而從右圖可觀察出200nm的G band強度比500nm和1000nm的ND的強度還要高；D band在1330cm⁻¹處，此時200nm和1000nm的ND的強度相近，而500nm的ND的強度最低。

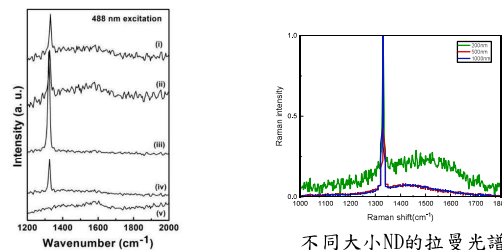


FIG. 2. Raman spectra for (i) 100 nm sized NDs, oxidative treatments at (ii) 450 °C, (iii) 550 °C, (iv) 650 °C, (v) 750 °C.

文獻[2]拉曼光譜

430nm雷射lifetime比較圖

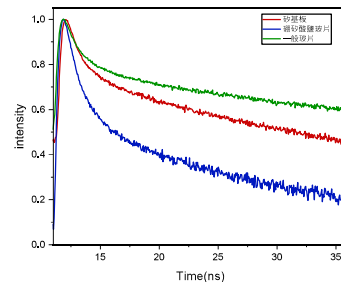
由下圖可觀察出放在三種基板下的1000nmND的lifetime變化趨勢十分接近，同時也能從圖中看到奈米鑽石的短壽命特性，此特性也會受到發光中心和奈米鑽石缺陷的影響。

矽基板: $t_1=0.851\text{ns}$; $t_2=9.066\text{ns}$

矽酸鹽玻璃片: $t_1=0.789\text{ns}$;

$t_2=8.359\text{ns}$

一般玻璃片: $t_1=0.736\text{ns}$; $t_2=8.104\text{ns}$



不同基板的ND lifetime圖

結論

- 532nm雷射激發光譜: peak在680nm處，(N-V)⁰較強
- 430nm雷射激發光譜: peak在575nm處，(N-V)⁻較強
- 拉曼光譜: 200nm的G band較高；三種樣品的D band的比例接近
- ND的lifetime，受到ND缺陷的影響。

參考文獻

- [1] 陳論鉉碩士論文
- [2] Tailoring of structure, surface, and luminescence properties of nanodiamonds using rapid oxidative treatment J. Mona, E. Perevedentseva, A. Karmenyan, H.-M. Liou, T.-Y. Kang, and C.-L. Cheng
- [3] Optical properties and luminescence mechanism of oxidized free-standing porous silicon films J. Appl. Phys. 86, 2066 (1999); 10.1063/1.371010

平帶系統中RKKY交互作用的特性

羅岳德

東海大學應用物理系:楊明峰教授

摘要

近年來具有平帶 (flat band) 的電子系統是凝聚態物理研究的前沿課題。由於平帶的能量不隨動量改變，電子有著極大的態密度，因此擁有平帶的系統通常會表現出有趣的強關聯現象。由於磁摻雜的電子系統是未來自旋電子元件的潛在應用候選者，因此瞭解兩個磁性雜質之間由傳導電子所導致的RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) 交互作用是一個重要的課題。在此研究中，我們將以數值方法來探討一維鑽石 (diamond) 晶格的平帶系統在半填滿的情況下RKKY交互作用的特殊性質。這個研究對於平帶所導致的磁性具有重要的參考價值。

前言

RKKY交互作用是指在一個金屬或半金屬中，兩個磁性雜質之間會經由傳導電子的自旋極化而產生的間接交換作用。當能譜中存在平帶，RKKY交互作用會表現出基於非簡併微擾理論的傳統RKKY近似無法捕捉到的特殊特徵。在此研究中，我們將利用數值對角化的方法探討平帶系統中的RKKY效應，包含磁性雜質與平帶系統各種不同的耦合方式，以及平帶和色散帶之間是否存在能隙等因素分別會造成怎樣的影響？我們以鑽石晶格作為主要研究對象，並分別考慮第1個雜質和第2個雜質的座標分別位於AA、AB、BB子晶格的三種情況。

研究方法

① 系統的Hamiltonian為:

$$H = H_{tb} + H_{ex} \quad (1)$$

$$H_{tb} = \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} c_i^\dagger c_j \quad (2)$$

$$H_{ex} = \sum_m J_m \vec{S}_m \cdot \vec{S}_m' \quad (3)$$

其中 H_{tb} 是緊束縛模型的Hamiltonian, H_{ex} 是雜質自旋與傳導電子自旋的交換作用, i 為晶格點, j 為 i 最鄰近的晶格點, t_{ij} 為晶格躍遷係數, J_m 為雜質 m 的自旋與傳導電子自旋的耦合係數, \vec{S}_m 為雜質 m 的自旋方向, \vec{S}_m' 為在雜質 m 位置的傳導電子的自旋向量, 其中 $\vec{S}_m = \frac{1}{2} c_m^\dagger \vec{\sigma} c_m$, $\vec{\sigma}$ 為Pauli矩陣。令耦合係數 $J_1 = J_2 = J$ 。

② 在具有自旋空間均向性的情況下，磁性雜質對系統能量的修正應為:

$$H_{RKKY} = J_{RKKY}(\Delta r) \vec{S}_m \cdot \vec{S}_m' \quad (4)$$

其中 \vec{S}_m, \vec{S}_m' 分別為雜質 m 和 m' 的自旋方向, $J_{RKKY}(\Delta r)$ 是位於 m, m' 兩個雜質自旋間的交換積分, 其中 $\Delta r = \vec{r}_m - \vec{r}_m'$, 而 \vec{r}_m, \vec{r}_m' 分別為雜質 m 和 m' 的位置。

由方程式(4)可得出 $J_{RKKY}(\Delta r)$ 與RKKY能量 E_{RKKY} 之間的關係:

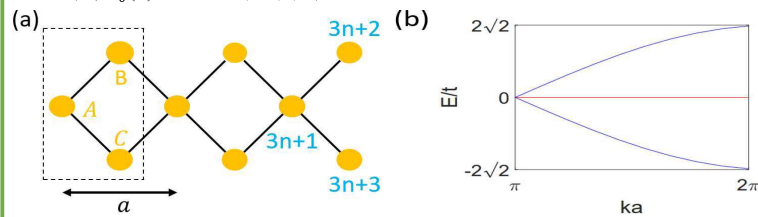
$$E_{RKKY} = E_{++} - E_{+-} = 2J_{RKKY}(\Delta r) \quad (5)$$

其中 E_{++} 表示兩個雜質自旋都向上的系統基態能量, 而 E_{+-} 表示一個雜質自旋向上、但另一個雜質自旋向下的系統基態能量, 且 E_{++} 和 E_{+-} 的雜質位置是一樣的。

③ 根據圖一(a), 鑽石晶格的Hamiltonian由下式給出:

$$H_{dia} = t \sum_n (c_{n,A}^\dagger c_{n,B} + c_{n,A}^\dagger c_{n,C} + c_{n+1,A}^\dagger c_{n,B} + c_{n+1,A}^\dagger c_{n,C}) + H.C \quad (6)$$

其中 t 為晶格躍遷係數。將 H_{dia} 矩陣對角化後, 會得到兩個色散帶 $E_{\pm}(k) = \pm 2\sqrt{2}t \cos \frac{ka}{2}$ 和一個平帶 $E_0(k) = 0$; 如圖一(b)所示。



圖一: 鑽石晶格。(a) 單位晶胞(虛線矩形)由標記為 A、B、C 的三個格點(橘色點)所組成。最鄰近格點經由強度為 t 的躍遷項(黑線)所連接。(b) 色散帶(藍色)與平帶(紅色)。

④ 當引入雜質後, 需重新定義晶格點 A、B、C 的位置分別為 $3n+1, 3n+2, 3n+3$, 其中 $n = 0, 1, \dots, L-1$, 而 L 為晶胞個數。根據以上的討論即可列出Hamiltonian矩陣, 且雜質的作用出現在對角線元素 $H(i, i) = \pm \frac{1}{2}$ 。 H_{++}, H_{+-} 分別代表狀態一、 $\sigma=\uparrow$ 和 $\sigma=\downarrow$ 的Hamiltonian矩陣; H_{-+}, H_{--} 分別代表狀態二、 $\sigma=\uparrow$ 和 $\sigma=\downarrow$ 的Hamiltonian矩陣。

⑤ 狀態一: H_{++}, H_{+-} 分別做數值對角化, 將其中最小的一半個特徵值加起來, 就會是系統的基態能量 E_{++} 。
狀態二: H_{-+}, H_{--} 分別做數值對角化, 將其中最小的一半個特徵值加起來, 就會是系統的基態能量 E_{+-} 。

⑥ 再由方程式(5)即可得出 J_{RKKY} 。

結果與討論

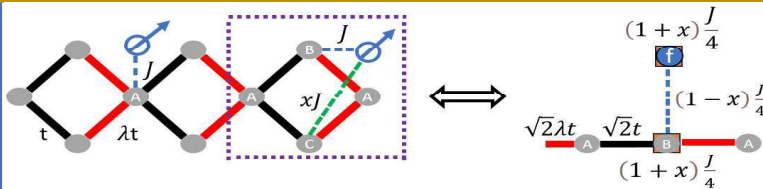
以下我們考慮修改後的鑽石晶格模型, 其中包括交替改變的躍遷係數以及格點 B、C 同時與磁性雜質耦合的情況。參見圖二。利用么正變換:

$$d_{n,A}^\dagger = c_{n,A}^\dagger \quad (7)$$

$$d_{n,B}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{n,B}^\dagger + c_{n,C}^\dagger) \quad (8)$$

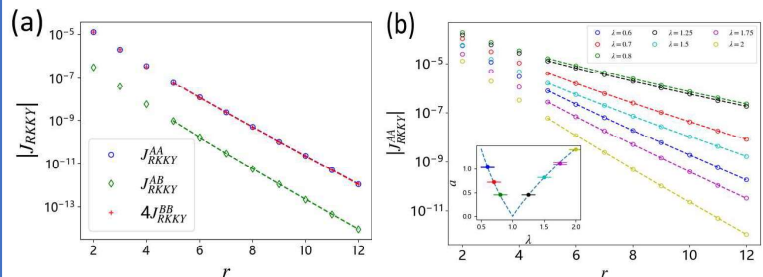
$$f_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{n,B}^\dagger - c_{n,C}^\dagger) \quad (9)$$

其中 f_n^\dagger 為在格點 n 的平帶產生算符, 我們可將模型轉變為一維直鏈與局域平帶態互相耦合的問題, 如圖二紫色虛線矩形部分轉變為右圖所示。



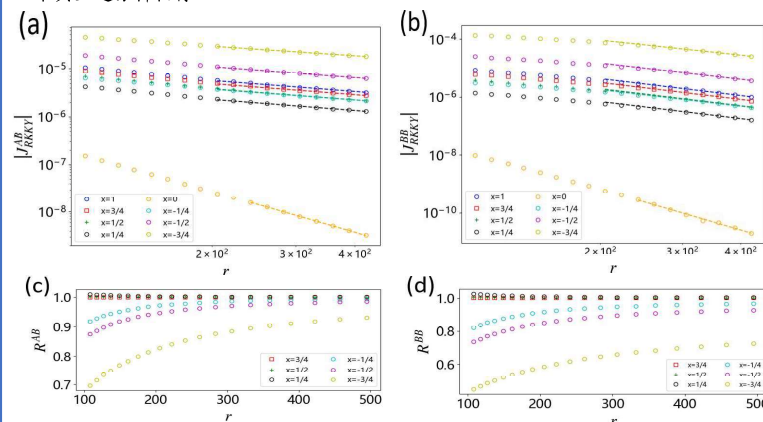
圖二: 修改後的鑽石晶格。單位晶胞內的格點 A 與 B、C 由強度為 t 的躍遷項(黑線)所連接, 而格點 B、C 與最鄰近晶胞的格點 A 由強度為 λt 的躍遷項(紅線)所連接。格點 A、B 由強度為 J 的耦合項(藍虛線)與磁性雜質耦合, 格點 C 則由強度為 xJ 的耦合項(綠虛線)與磁性雜質耦合, 且磁性雜質同時與格點 B、C 耦合。以下討論都令 $J_1 = J_2 = 0.2t$ 。

① 磁性雜質不與格點 C 耦合的情況 ($x=0$)。當 $\lambda \neq 1$ 時, 由於存在能隙, 因此與局域平帶態的耦合項可忽略不計, 且可用傳統微擾理論來理解。我們發現 $|J_{RKKY}|$ 會隨雜質間距 r 呈指數衰減 ($|J_{RKKY}| \propto e^{-ar}$), 參見圖三。由於格點 B 的耦合係數為格點 A 的 $\frac{1}{2}$, 因此 $|J_{RKKY}^{BB}| = (\frac{1}{2})^2 |J_{RKKY}^{AA}|$ 。此外, 衰減係數 a 與微擾理論所預測的結果: $a = \frac{2|1-\lambda|}{\sqrt{\lambda}}$ 十分相符。



圖三: (a) $x=0, \lambda=2$, 長度 $L=501$ 時, 三種子晶格配對的 $|J_{RKKY}|$ 與雜質間距 r 的關係圖。虛線為由 $\ln|J_{RKKY}| = c - ar - b \ln r$ 擬合而成。其中 $4|J_{RKKY}^{BB}| = |J_{RKKY}^{AA}|$, 與微擾理論相符。(b) 不同 λ 值 ($\lambda \neq 1$) 的 $|J_{RKKY}|$ 隨著 r 衰減的程度, 子圖為衰減係數 a 與 λ 的關係與誤差, 藍色虛線為 $a = \frac{2|1-\lambda|}{\sqrt{\lambda}}$ 的函數曲線。

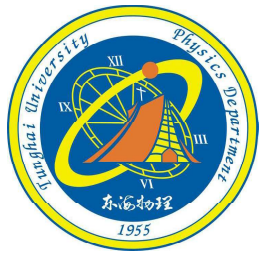
② 對於無能隙 ($\lambda=1$) 的情況, 經由調整與格點 C 的耦合強度 ($x \neq 0$), 局域平帶態與色散帶的耦合亦隨之改變(參見圖二)。當 $x=0$ 時, 由於在費米面的等效能 V 趨近於零, 使得當 r 很大時, $J_{RKKY}^{AB} \propto \frac{1}{r^3}$, 而 $J_{RKKY}^{BB} \propto \frac{1}{r^5}$ 。當 $x \neq 0$ 時, 費米面的等效能約為常數且正比於 $z = \frac{2x}{1+x}$, 因此當 r 很大時, $J_{RKKY}^{AB} \propto \frac{z}{r}$, 而 $J_{RKKY}^{BB} \propto \frac{z^2}{r}$ 。數值計算的結果與上述分析相符。



圖四: (a)、(b) 分別為 $\lambda=1$, 長度 $L=2001$ 時, 不同 x 值的 $|J_{RKKY}^{AB}|, |J_{RKKY}^{BB}|$ 與雜質間距 r 的關係圖。虛線為由 $\ln|J_{RKKY}| = c - b \ln r$ 擬合而成。(c)、(d) 分別為 R^{AB}, R^{BB} 與 r 的關係圖, 其中 $R^{AB} = \frac{J_{RKKY}^{AB}|_{x \neq 0}}{J_{RKKY}^{AB}|_{x=1}}$, $R^{BB} = \frac{J_{RKKY}^{BB}|_{x \neq 0}}{J_{RKKY}^{BB}|_{x=1}}$ 。

結論

我們發現, 能隙存在與否以及磁性雜質的耦合方式, 的確會對RKKY交互作用產生實質的影響。當平帶和色散帶之間存在能隙時, 局域平帶態沒有貢獻, 而 J_{RKKY} 呈指數衰減, 且衰減的程度與能隙大小有關。當磁性雜質同時與格點 B、C 耦合時, J_{RKKY} 將回到傳統的 $\frac{1}{r}$ 結果, 但其大小會與格點 C 與 B 的耦合項比例大小有關。



Bell-type不等式之IBMQ操作



應用物理系 S10210027 廖駿道
指導老師:黃靜瑜

Introduction

量子糾纏態為兩個以上的量子粒子，可能因為某些原因而產生關連，使得彼此的行為互相影響。

隱變量(Hidden variable)只能被直接觀測到，但是輸出結果存在影響的一種東西。

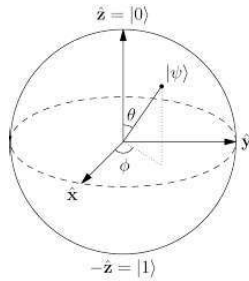
Bell-type不等式可以證明量子糾纏之間是否為隱變量之作用，以下會以IBMQ操作證明。

Fundamental

Q-bit:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

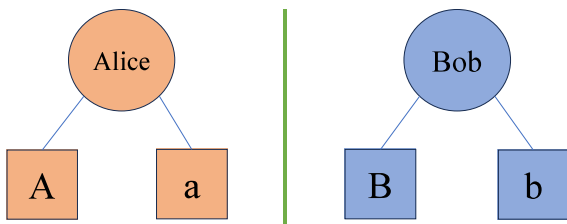
$$= \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle$$



邏輯閘(Gate):

量子閘是可以改變量子位元狀態的矩陣，可以用改變機率幅，或者是創造糾纏態等。

CHSH inequality



$$A, a, B, b = \text{either } +1 \text{ or } -1$$

$$(A-a, A+a) = (0, \pm 2) \text{ or } (\pm 2, 0)$$

$$(A-a)B + (A+a)b = +2 \text{ or } -2$$

期望值:

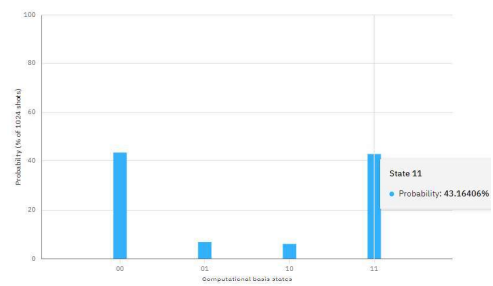
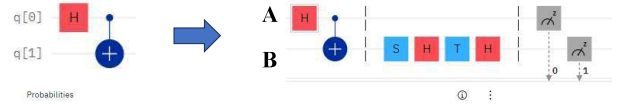
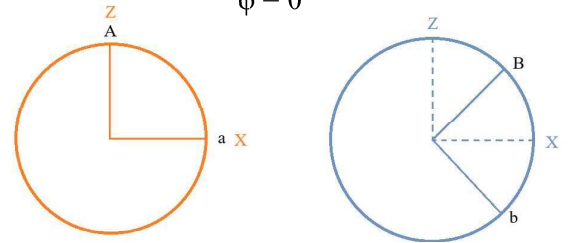
$$|\langle AB \rangle - \langle aB \rangle + \langle Ab \rangle + \langle ab \rangle| \leq 2$$

若不等式成立，就代表量子糾纏的現象其實是有隱變量影響而導致的結果。

Experiment on IBMQ

定 A, a, B, b 為任意四方向

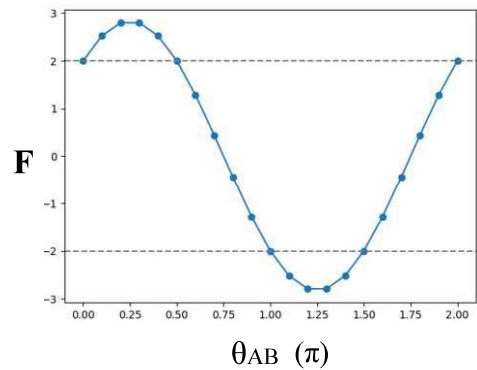
$$\phi = 0$$



$$\langle AB \rangle = P(00) - P(10) - P(01) + P(11)$$

代入

$$|\langle AB \rangle - \langle aB \rangle + \langle Ab \rangle + \langle ab \rangle| = F$$



Conclusion

這證明了在2個Qbit態下，量子糾纏的現象並沒有隱變量隱響。

IBMQ 量子電腦提供了更多利用量子力學去做運算的可能性。

Reference

Analysis of the Bell-type inequalities on the IBMs open-access quantum computer (Dated: June 18, 2020)
Testing Scalable Bell Inequalities for Quantum Graph States on IBM Quantum Devices

Determination of phase transition of the q-state clock and generalized XY model by Hamming distance



指導教授: 吳桂光
姓名: 李宗翰

摘要

隨著機器學習技術的不斷成熟，我們已經能夠利用機器學習來區分不同相之間的差異，並從中找出臨界溫度。然而，這些方法大多需要先驗知識，因此在沒有先驗知識的情況下進行計算會變得十分困難。

我參考了文獻[1]的方法，利用Hamming distances的分佈機率，再經過數據擬合。希望能夠找出一種不需先驗知識，也不依賴特定物理量的方法。這種方法只需使用資料集中的自旋配置，就能判斷不同 q 值的clock model，以及 $q = 2$ 時Generalized xy model的相變臨界溫度。

文獻回顧

clock model的Hamiltonian可以寫成：

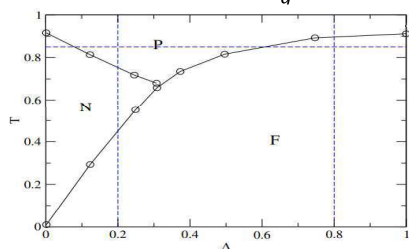
$$H_{clock} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)$$

在位置 i 的自旋可以用 $\theta_i = \frac{2\pi n_i}{q}$ 來表示，其中 $n_i = 0, 1, 2, \dots, q-1$ 。clock model在 $q < 5$ 的時候為Ising-like相變只會發生一次相變。而當 $q \geq 5$ 之後會出現BKT相變，系統內部會隨著溫度的提升出現兩次相變。

Generalized xy(GXY) model的Hamiltonian為：

$$H_{GXY} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \{ \Delta \cos(\theta_i - \theta_j) + (1 - \Delta) \cos[q(\theta_i - \theta_j)] \}$$

Δ 表示純XY模型的相對權重。其中兩個項目的互相競爭，導致該模型在 $\theta \rightarrow \theta + \frac{2\pi}{q}$ 下保持不變。



● 左圖為文獻[2]中 $q = 2$ 時GXY model的相圖。隨 Δ 的變化，會由三個相，變為兩個相。

研究方法

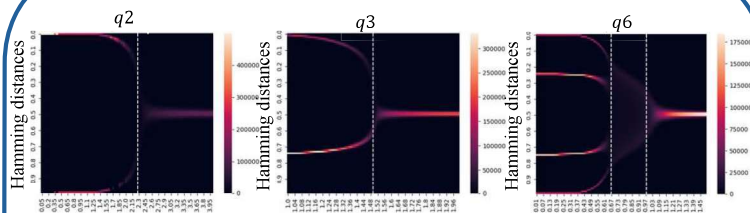
兩個自旋配置 $\vec{\sigma}$ 和 $\vec{\sigma}'$ 之間的歸一化Hamming distances定義：

$$D_p = \frac{1}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\frac{1}{2} - \frac{\cos[p(\theta_i - \theta_j)]}{2} \right)$$

Ising model中 $p = 1$, GXY model $p = 1$ or 2 。由這個公式得出的 D ，滿足相同的配置 $D = 0$ ，兩個完全相反的配置之間 $D = 1$ 。對於完全不相關的資料集，會以 $D = \frac{1}{2}$ 為中心呈高斯分佈。

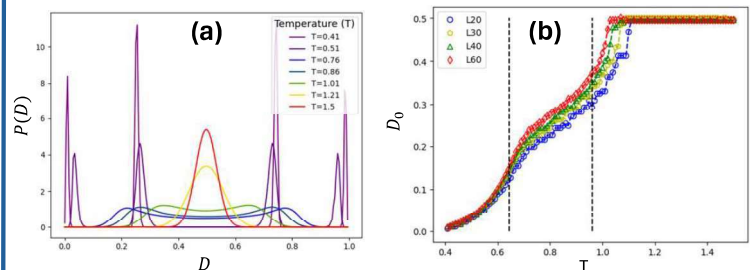
接著我利用histogram函式將Hamming distances分為100個區域，計算出每個區域內的分佈數量，將其除以總數得出該數值的Hamming distances對應的分佈機率 $P(D)$ 。並將不同溫度的 $P(D)$ 分布進行擬和(擬和的範圍 $P(D) \in [0, 0.5]$)。接著將每個不同溫度所對應的第一個峰值 D_0 作圖，從峰值的變化判斷相變點。

現有結果



Clock model L60、 $q = 2, 3, 6$ 時，Hamming distances隨溫度的heatmap，圖中的白色虛線代表真實的相變溫度。

six-state clock model

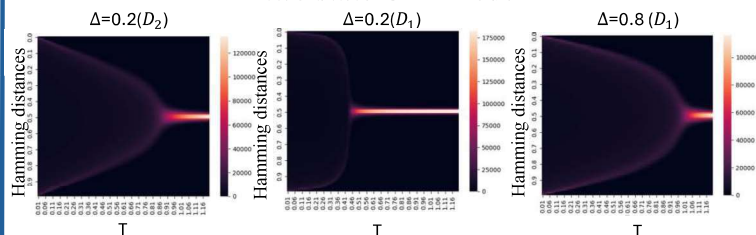


(a) 幾種不同溫度的Hamming distances分布機率
(b) 不同系統尺寸第一個Hamming distances分布峰值 D_0 與溫度關係

	$q=2$	$q=3$	$q=6$
T_{c1}	2.2749	1.4842	0.6429
T_{c2}			0.9410

(c) 用Finite-size extrapolation得到 $q = 2, 3, 6$ 的相變溫度

two-state GXY model



GXY model $q = 2, L40, \Delta = 0.2, 0.8$ 時的Hamming distances隨溫度的heatmap。其中 $\Delta > 0.33$ 後，GXY model會由三個相，變為兩個相，此時我們只考慮 θ 的圖形。

結論

- 利用Hamming distances的分佈機率，可以判斷出clock model以及GXY model的相變點。
- 不須先驗知識，只需使用自旋配置的資料。

參考文獻

[1] Wen-Yu Su, Feng Hu, Chen Cheng, and Nvsen Ma Phys. Rev. B 108, 134422 – Published 17 October 2023
[2] Kwai-Kong Ng and Min-Fong Yang Phys. Rev. B 108, 214428 – Published 21 December 2023

Yao-Qun Wang (王耀群), Hsi-Lien Hsiao (蕭錫鍊)

Department of Applied Physics, Tungshai University, Taichung 407, Taiwan

摘要

可撓性材料是一種能夠彎曲、摺疊而不損壞其功能的材料，這些材料的發展在現代科技中展現出巨大的潛力和廣泛的應用前景。例如：柔性傳感器和電子皮膚可以用來監測患者的生命體徵，如心率、體溫和血壓，提供持續的健康監控。

矽奈米線紙作為可撓性材料之一，擁有可以彎曲與拉伸的能力[1]，是由矽奈米線 (Silicon Nanowires, SiNWs) 沉積堆疊形成的紙狀纖維結構。由於矽奈米線本身長度的限制(約80微米)，超過矽奈米線長度的裝置需要依靠奈米線與奈米線互相接觸而傳遞電流。矽奈米線在接觸到大氣中的氧氣後會在自身單晶矽線狀結構外圍形成氧化層，當矽奈米線堆疊時，奈米線/奈米線介面會被氧化層阻擋，從而降低了矽奈米線紙的導電性能。

考慮到作為矽奈米線紙的可撓性基板多為有機材料所製，其不耐高溫的限制會增加矽奈米線紙在製備上的難度。本實驗目的旨在處於相度較低的溫度下，以石英玻璃爐管對矽奈米線紙退火改善奈米線/奈米線介面晶體結構，方能提高矽奈米線紙作為半導體材料的導電性能。

文獻回顧

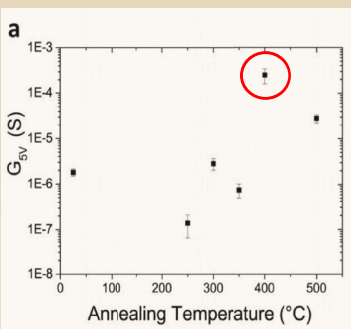


Fig.1 快速熱退火(1 min)熔接奈米線提升導電度，以400°C表現最佳[2]

Ternon C.等人，對矽奈米線紙以快速熱退火(Rapid Thermal Annealing, RTA)在400°C退火。一般來說，要使非晶矽退火通常需要高達550°C以上的溫度方能減少材料內部的應力、改善晶面品質。此篇文獻在400°C的低溫條件下以一分鐘快速退火，並得到提升電導率的結果，為我們低溫石英玻璃爐管退火提供依據。

結果與討論

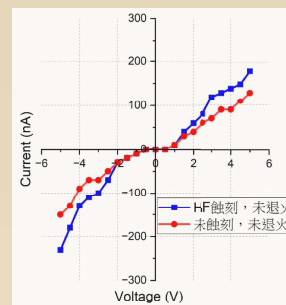


Fig.4 矽奈米線紙以HF蝕刻氧化層之I-V電性圖

條件	400度退火	450度退火	450度退火 (大氣流)
升溫速率	20°C/min	20°C/min	20°C/min
到目標溫度時間	19 mins	22 mins	22 mins
退火溫度	400°C	450°C	450°C
退火時間	10 mins	10 mins	10 mins
通入氣體	10 sccm Ar	10 sccm Ar	200 sccm N ₂ 200 sccm H ₂
調至壓力	17 torr	17 torr	3.4 torr

Tab.1 矽奈米線紙退火條件

Fig.4 中展現了矽奈米線紙經HF蝕刻後(藍線)，與未蝕刻(紅線)的差別，可見經HF蝕刻後電流有所提升，說明當奈米線/奈米線介面的氧化層確實可以被HF蝕刻，並且可以使奈米線連接得更好。

研究方法

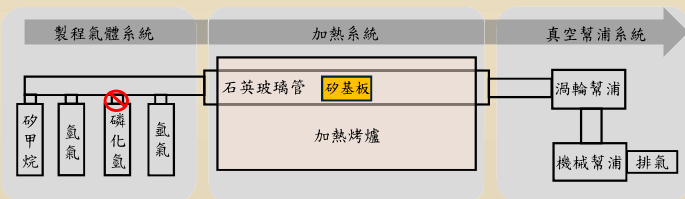


Fig.2 LPCVD製備本質矽奈米線示意圖

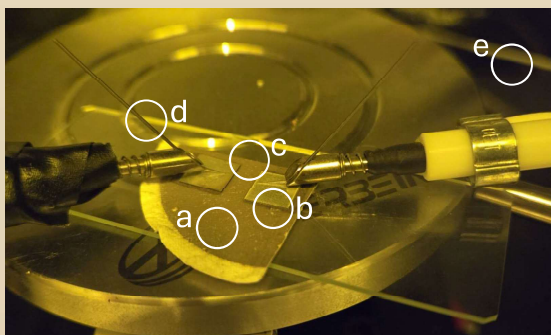


Fig.3 矽奈米線紙製備測量電性示意圖。(a) 退火後矽奈米線紙、(b) 金電極(下)與鋁片接觸電極(上)、(c) 限制電極距離(3.5 mm)、(d) 測量探針、(e) 測量暗箱，避免光電流干擾

Fig.2 說明本次矽奈米線製備的裝置為LPCVD，透過後方的真空幫浦系統將石英管抽至低壓；左方的製程氣體系統則供給氣體至加熱系統成長矽奈米線。由於本次實驗僅研究改善矽奈米線的介面特性，故製備本質矽奈米線半導體，不進行載子摻雜。

在矽奈米線製備成矽奈米線紙後，需要透過下列步驟完成退火以及I-V電性量測：1. 將矽奈米線紙以HF蒸氣蝕刻氧化層。2. 趁HF尚未揮發前放入石英玻璃爐管退火。3. 退火後再以HF蝕刻氧化層。4. 以鋁箔覆蓋並蒸鍍等距離黃金薄膜電極。5. 以鋁箔覆蓋黃金薄膜電極作為探針接觸電極，並I-V電性量測，如Fig.3。

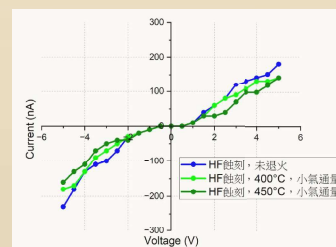


Fig.5 矽奈米線紙以400°C、450°C退火

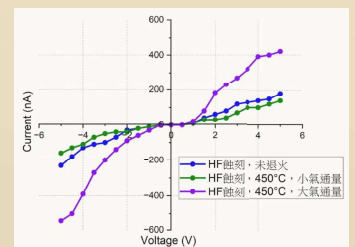


Fig.6 矽奈米線紙以450°C大氣流退火

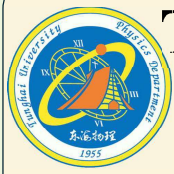
Fig.5 中展現了矽奈米線紙以小氣流(10 sccm Ar)、經過400°C退火後其電流甚至略微低於未退火，450°C退火的電流也比400°C退火略低。Fig.6 將氣流條件改成大氣流(200 sccm N₂、H₂)退火後其電流展現了兩倍的增長。推測，當石英管內加熱時，其HF抗氧化層應該在達到製成溫度前就揮發完畢，使得氧化層得以增長，所以450°C之電流甚至小於400°C；當氣流量足大時，則可以將管內的氧氣帶離，使氧化層不易形成並提升電導率。

結果與討論

- 矽奈米線紙在450°C退火可以使導電度上升，此溫度足以使部分矽原子晶體重構，但效果可能有限(最高測量電導率 2×10^{-6} (S/cm))
- HF去除氧化層可以使矽奈米線更有機會直接接觸。但隨著退火溫度上升，待HF揮發後氧化層又會重新形成，可能出現更高溫度氧化層更多的形況，使得石英玻璃管無法有效達成退火

參考文獻

1. B.C. Zhang, A.H. Wang, A.Y. Zhao, B.F. Li, X.M. Ou, B.Q. Sunb and X.H. Zhang, " Large-scale assembly of highly sensitive Si-based flexible strain sensors for human motion monitoring ", Nanoscale, 8(4), 2123-8, (2016)
2. Ternon C, Serre P, Lebrun JM, Brouzet V, Legallais M, et al. Low Temperature Processing to Form Oxidation Insensitive Electrical Contact at Silicon Nanowire/Nanowire Junctions. Advanced Electronic Materials 2015



To transform classical data to quantum state

Pei-Yun Chen¹, Ching-Yu Huang¹

¹Department of Applied Physics, Tunghai University, Taichung, Taiwan



Abstract

本研究目的為探討古典數據轉換成量子態的方法，以及如何輸入到量子電腦的量子線路上來進行運算。我們將一組 $N=2^n$ 個數字的數據變成量子態的機率振幅，即有 n 個量子位元，使用Singular value decomposition，將矩陣分解接著和Schmidt decomposition結合，並求出量子態相位的角度，輸入到量子線路上。最後目的希望設計一套自動轉換數據及分解量子態的程式碼，使我們能夠將數據的轉換自動化，這樣在未來使用量子電腦進行運算及分析上會更加便利。

Introduction

1. Singular value decomposition:

- 將一個矩陣分解成三個矩陣相乘的形式
- $A = U\Sigma V^+$
 - $A \in M_{m \times n}$
 - $U \in M_{m \times m}$ 、 $V^+ \in M_{n \times n}$ ，為Unitary matrix
 - $\Sigma \in M_{m \times n}$ ，為Diagonal matrix，對角元素從左上至右下分別為 σ_{11} 、 $\sigma_{22} \dots \sigma_{mm}$ 且 $\sigma_{11} > \sigma_{22} > \dots > \sigma_{mm} > 0$

2. Schmidt decomposition定義:

$$|X\rangle = \sum_{i=1}^N \lambda_i |\alpha_i\rangle \otimes |\beta_i\rangle$$

3. 結合

$$|X\rangle = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N A |e_i\rangle \otimes |f_j\rangle$$

$$|\alpha_i\rangle = U|e_i\rangle \quad |\beta_i\rangle = V^+|f_j\rangle$$

$|e_i\rangle$ 與 $|f_j\rangle$ 為正交歸一的基底

4. 求出角度

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

5. 量子線路上實現

$$U \quad (\pi/2, \pi/2, \pi/2)$$



Example1

4個數字:

$$X = \{1, -2, 3, -4\}$$

- 將數據轉為量子態後，歸一化

$$|X\rangle = \frac{1}{\sqrt{30}}|00\rangle + \frac{-2}{\sqrt{30}}|10\rangle + \frac{3}{\sqrt{30}}|01\rangle + \frac{-4}{\sqrt{30}}|11\rangle$$

- SVD結合Schmidt decomposition

$$|X\rangle = \sum_{i=1}^2 \lambda_i |\alpha_i\rangle \otimes |\beta_i\rangle$$

$$\lambda_1 = 0.997 \quad \lambda_2 = 0.066$$

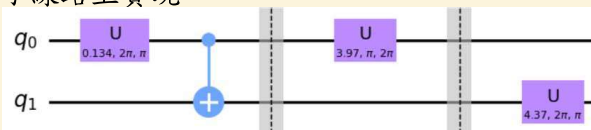
$$|\alpha_1\rangle = -0.404|0\rangle - 0.914|1\rangle$$

$$|\alpha_2\rangle = -0.914|0\rangle + 0.404|1\rangle$$

$$|\beta_1\rangle = -0.576|0\rangle + 0.817|1\rangle$$

$$|\beta_2\rangle = 0.817|0\rangle + 0.576|1\rangle$$

- 量子線路上實現



Example2

16個數字:

$$X = \{3\sqrt{3}, -\sqrt{3}, -9, 3, -2\sqrt{3}, -6\sqrt{3}, 6, 18, -3\sqrt{3}, \sqrt{3}, -3, 1, 2\sqrt{3}, 6\sqrt{3}, 2, 6\}$$

- 將數據轉為量子態後，歸一化

$$|X\rangle =$$

$$\frac{3\sqrt{3}}{20\sqrt{2}}|0000\rangle - \frac{\sqrt{3}}{20\sqrt{2}}|1000\rangle - \frac{9}{20\sqrt{2}}|0100\rangle + \frac{3}{20\sqrt{2}}|1100\rangle$$

$$- \frac{2\sqrt{3}}{20\sqrt{2}}|0010\rangle - \frac{6\sqrt{3}}{20\sqrt{2}}|1010\rangle + \frac{6}{20\sqrt{2}}|0110\rangle + \frac{18}{20\sqrt{2}}|1110\rangle$$

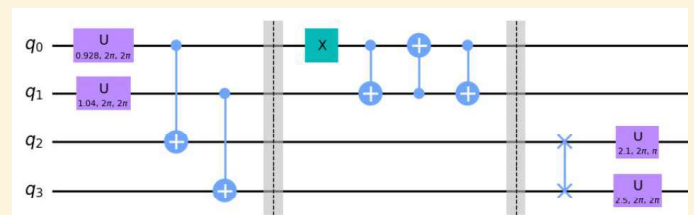
$$- \frac{3\sqrt{3}}{20\sqrt{2}}|0001\rangle + \frac{\sqrt{3}}{20\sqrt{2}}|1001\rangle - \frac{3}{20\sqrt{2}}|0101\rangle + \frac{1}{20\sqrt{2}}|1101\rangle$$

$$+ \frac{2\sqrt{3}}{20\sqrt{2}}|0011\rangle + \frac{6\sqrt{3}}{20\sqrt{2}}|1011\rangle + \frac{2}{20\sqrt{2}}|0111\rangle + \frac{6}{20\sqrt{2}}|1111\rangle$$

- SVD結合Schmidt decomposition

$$|X\rangle = \sum_{i=1}^4 \lambda_i |\alpha_i\rangle \otimes |\beta_i\rangle$$

- 量子線路上實現



Conclusion

1. 使用 Singular value decomposition 及 Schmidt decomposition，即可將量子態分解。
2. 在量子線路上，使用U Gate以及Controlled-Not，即可實現我們所需要的量子態；而若是更多的數據，再使用Controlled-U即可。
3. 在有更多數據後，寫出自動轉換數據的程式碼，便可以將古典數據輸入到量子電腦上，以利我們使用量子電腦做計算。

References

- [1] G. Kumar, *Encoding classical data into quantum data*. 10.13140/RG.2.2.28237.46563. (2020)
- [2] Bergholm V, Vartiainen JJ, Möttönen M, Salomaa MM. *Quantum circuits with uniformly controlled one-qubit gates* - art. no. 052330. Phys Rev A 2005, 71(5).



Study of Self-Supervised Ensemble Learning in Phase Transition Classification

Yu Lee¹, Kwai-Kong Ng¹

¹Department of Applied physics, Tunghai University, Taichung 40704, Taiwan



摘要

最近，開發了一種[1]Self-supervised ensemble learning (SSEL)機器學習的方法來透過分析相變的波動特性來確定相變的類型。此方法利用全連接神經網路 (Fully Connected Neural Network) 作為模型架構進行訓練，並以原位自旋配置作為輸入特徵，透過使用SSEL方法分析模型輸出的波動來檢測相變點，並用來探索其在各模型的相變識別的適用性，我這裡以Clock model來呈現他的方法。

研究方法

資料預處理

- 選用q-state clock model ; $H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$.
- 模型尺寸單邊晶格數為L，總晶格數為 $n = L^2$.
- $s_i \in \{0, 1, \dots, q-1\}$ 這裡的q代表所有可能的自旋狀態，單個自旋配置為 $s = \{s_1, s_2, \dots, s_{L \times L}\}$ ，自旋配置的集合 $S = \{s\}$.
- 移除自旋的簡併。
- $\theta_n = \frac{2n\pi}{q}$ ， $n = 0, 1, \dots, q-1$ ，這裡的q代表所有可能的自旋狀態，所以 $(s_i^x, s_i^y) = (\cos\theta_n, \sin\theta_n)$ ， $s = \{s_1, s_2, \dots, s_{L \times L}\} \equiv \{s_1^x, s_1^y, \dots, s_{L \times L}^x, s_{L \times L}^y\}$ ，所以總晶格數變為 $n = 2 \times L^2$.
- Monte Carlo Wolff algorithm .

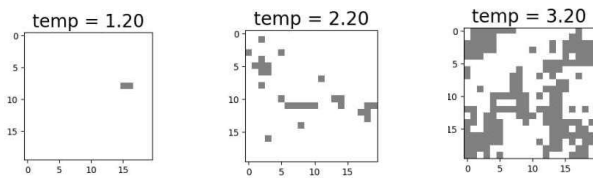


Fig.1 q=2 clock model L=20(白色spin up, 灰色spin down)

模型架構

- 每個子模型架構利用了模型集成的方法，通過創建50個具有相同結構的子模型，每個子模型都是使用Fully Connected Neural Network架構，由三個隱藏層和一個輸出層組成。每一個隱藏層都使用SeLU作為激活函數，而輸出層則使用ReLU作為激活函數，通過訓練神經網路，利用自旋配置作為輸入特徵來預測系統的溫度，我們採用了均方誤差 (MSE) 損失函數來最小化神經網路輸出的平均值與實際溫度之間的誤差，從而建立了自旋配置和溫度之間的關係，以提高預測的準確性和泛化能力。整個模型使用Adam優化器和均方誤差MSE損失函數進行訓練。

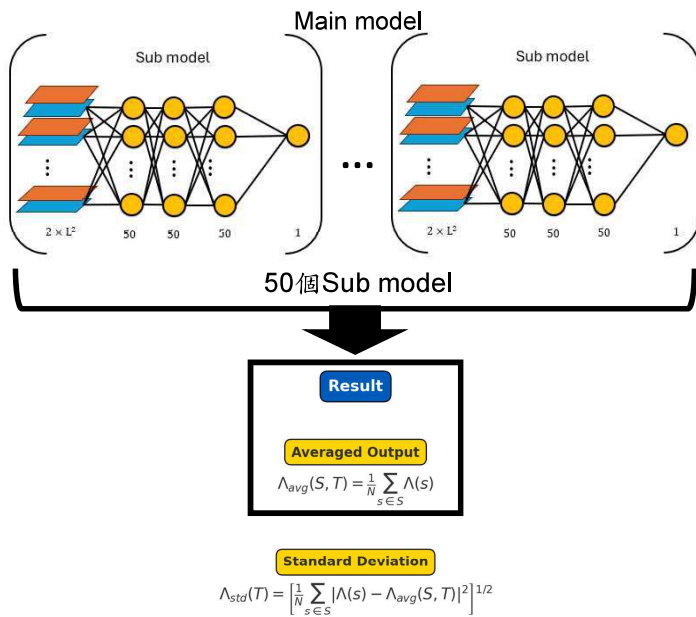


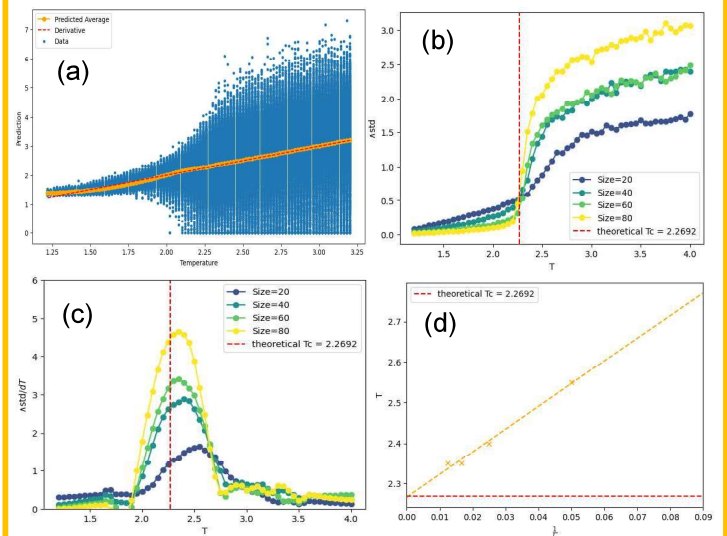
Fig.2 Main model 是由50個Sub model組成

參考文獻

- [1] Chi-Ting Ho and Daw-Wei Wang, Self-supervised ensemble learning: A universal method for phase transition classification of many-body systems, *Phys. Rev. Research* **5**, 043090 (2023)

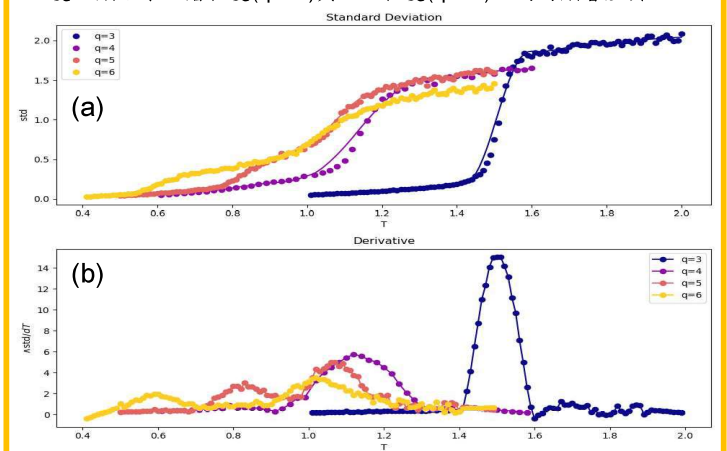
q=2 clock model L=20、40、60、80 結果

- 圖(a)中SSEL模型對於給定溫度和自旋配置的個別輸出 $\Lambda(s)$ 。由於損失函數的約束，它們的平均值 Λ_{avg} 必須等於溫度(紅色虛線)。
- 模型輸出的計算標準差 Λ_{std} ，並分別繪製了q=2對應於L=20、40、60、80的擬合的結果，紅色虛線是理論的臨界溫度。
- Λ_{std} 的溫度導數有一個顯著的峰值，幾乎固定在接近 T_c 的同一點，並分別繪製了q=2對應於L=20、40、60、80的 Λ_{std} 的溫度導數的擬合結果。
- 圖(d)展示對應於圖(c)中峰值位置的臨界溫度的有限尺寸縮放外推。



在L=40, q=3、4、5、6 clock model 結果

- 圖(a)分別繪製了L=40的q=3、4、5、6 clock model的計算 Λ_{std} 及其擬合的結果。
- 從圖(b)中可以發現，在q=3和4的 Λ_{std} 的溫度導數只有一個顯著的峰值，但從q=5和6可以觀察到明顯的雙峰結構，表明存在兩個BKT相變。顯示了二階相變($q \leq 4$)與BKT相變($q > 4$)之間的顯著差異。



結論

- SSEL方法通過神經網路輸出的波動特性來識別相變點，並且能夠在不同的訓練階段保持穩定的性能。
- 透過q-state clock model在不同的q值下，從 Λ_{std} 的溫度導數中峰值位置可以觀察到的q=5和6的雙峰結構表明存在兩個BKT相變。顯示了二階相變($q \leq 4$)與BKT相變($q > 4$)之間的顯著差異。
- 未來會嘗試將模型改為CNN架構，可以更有效地提取資料中的局部特徵，增強模型對於數據的處理能力。

奈米鑽石的物理特性探討

何冠邑 林宗欣

東海大學應用物理系

摘要

本研究利用共焦式顯微鏡量測200nm的奈米鑽石在不同波長的激發下的激發光譜波長，以及拉曼光譜，並與不同顆粒大小的奈米鑽石做比較，以此來探討它其中的結構差異與物理特性差異。

樣品外觀分析

由鑽石粉末的外觀可看出顏色較黑(圖二)，代表鑽石粉末表面的石墨殼較多(sp²碳結構)[4]，也跟不同顆粒大小的樣品有明顯差異。



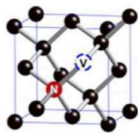
圖一



圖二

奈米鑽石晶體結構

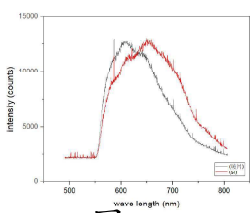
奈米鑽石的發光機制為兩個碳原子分別被氮和空缺取代，形成氮-空缺中心[3]，又稱NV(圖三)



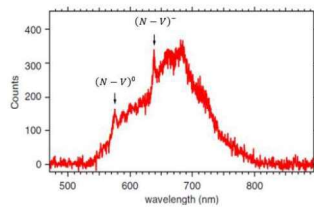
圖三

532nm雷射光之激發光譜分析

其激發光譜(圖四)強度最強落在678nm區間，而波長678nm主要為氮-空缺(N-V)⁻[1]之激發光(圖五)，在532nm的激發下，(N-V)⁻激發出較多的光子。



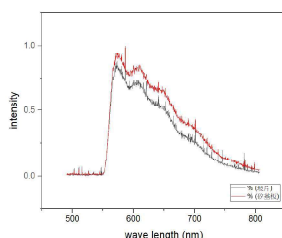
圖四



圖五

430nm雷射光之激發光譜分析

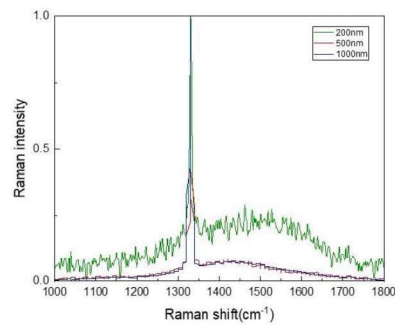
激發光光譜(圖六)在波長576nm的佔比較高，主要是由(N-V)⁰[1]缺陷之電子躍遷而來(圖五)，則代表(N-V)⁰的激發光強度大於(N-V)⁻。



圖六

拉曼光譜分析與比較

因鑽石的典型拉曼光譜在sp³混成軌域在1332cm⁻¹處出現尖峰，而1437cm⁻¹來自ND表面上存在的石墨結構(sp²碳)。由於sp²碳的拉曼截面較大[4]，即使僅存在一小部分石墨結構，寬峰也是可見的，也應證了200nm鑽石粉末會看起來偏黑的原因。



圖七

結論

藉由光譜圖可以得知樣品中的(N-V)⁻的占比相較於(N-V)⁰要高出許多，而從拉曼光譜可以看出200nm鑽石粉末表面存在許多石墨結構(sp²碳)，而導致了1400cm⁻¹到1600cm⁻¹的寬峰，

參考文獻

[1] Treussart, F. et al. Photoluminescence of single colour defects in 50 nm diamond nanocrystals. *Physica B* 376, 926-929, doi:10.1016/j.physb.2005.12.232 (2006).

[2] Tailoring of structure, surface, and luminescence properties of nanodiamonds using rapid oxidative treatment (2013)

[3] 張煥正(民104)。螢光奈米鑽石。自然科學簡訊第二十七卷第四期 150~153

[4] Direct and in vitro observation of growth hormone receptor molecules in A549 human lung epithelial cells by nanodiamond labeling (2007)

姓名: 黃文彥 指導教授: 王昌仁 教授

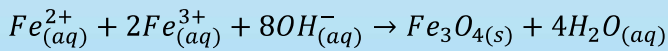
Abstract

奈米磁性流體可以透過施加外部磁場來調節其傳熱和流動特性而引起廣泛關注。在醫學上磁流體可以用來製造奈米藥物傳輸系統，通過磁場控制藥物的釋放和定位，提升藥物療效並減少副作用。再者由於「奈米磁流體」的創新概念具有相對較大的總表面積不僅提高了傳熱的能力，且透過減輕顆粒沉降現象提高了懸浮液的穩定性。奈米懸浮液相對於毫米或是微米尺寸具有更好的長期穩定性。

本實驗利用共沉澱法來製作出四氧化三鐵，使用 $FeCl_3$ 、 $FeCl_2$ 為原料，透過滴入強鹼($NaOH$)，使 Fe^{2+} 與 Fe^{3+} 共沉澱去形成 Fe_3O_4 。常見的氧化鐵有 FeO (藍灰色)， Fe_2O_3 (紅色)與 Fe_3O_4 (黑色)。只有四氧化三鐵具有磁性，因此可利用磁場將 Fe_3O_4 從沉澱物分離出來。透過XRD的量測可以發現主要產物為 Fe_3O_4 ，藉由XRD繞射峰的寬度可以估計合成出微粒尺寸約為8nm。

Method

1. 化學共沉澱法製備 Fe_3O_4 ^[1]

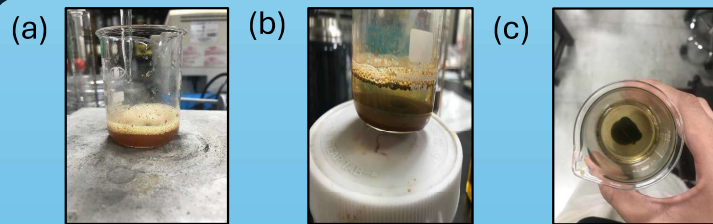


- 依2:1的比例將 $FeCl_3(aq)$ 、 $FeCl_2(aq)$ 混和。
- 將 $NaOH(aq)$ 利用滴定方式緩慢加入混和液中。
- 利用磁性轉子將滴入的 $NaOH(aq)$ 攪拌均勻，讓生成的微粒尺寸可較均勻。
- 添加界面活性劑(油酸)^[2]，防止奈米磁性顆粒團聚。
- 透過磁性分離法將可能產生的副產物沖洗掉。
- 透過隔水加熱將水分蒸乾，取得奈米磁性顆粒。

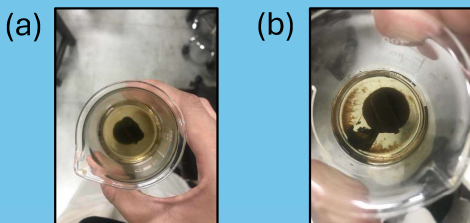
$FeCl_3(0.1M)$	$FeCl_2(0.1M)$	油酸(0.1M)
4ml	2ml	2ml
	$NaOH(M)$	轉速(rpm)
Sample_2	2	200
Sample_3	4	200
Sample_4	4	400

表一、實驗操作變因為氫氧化鈉濃度與攪拌轉速

Results

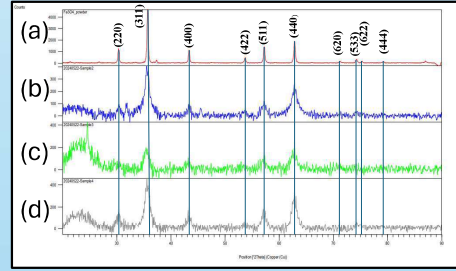


圖一、不同氫氧化鈉濃度結果比較圖 (a)0.1M (b)2M (c)4M



圖二、相同氫氧化鈉濃度(4M)下不同轉速結果比較 (a)200rpm (b)400rpm

圖一(a)使用較低濃度的氫氧化鈉去進行滴定，其生成的顏色為橘色，由於 $Fe_3O_4(s)$ 本身為黑色，所以並沒有 $Fe_3O_4(s)$ 生成，到了製備後期透過移動磁鐵可看見沉澱物些微的移動，說明有少量的 $Fe_3O_4(s)$ 形成。圖一(b)、(c)顯示隨著氫氧化鈉濃度的增加，明顯生成黑色 $Fe_3O_4(s)$ 生成。推斷共沉澱法需要在PH值夠高的環境下才會形成。



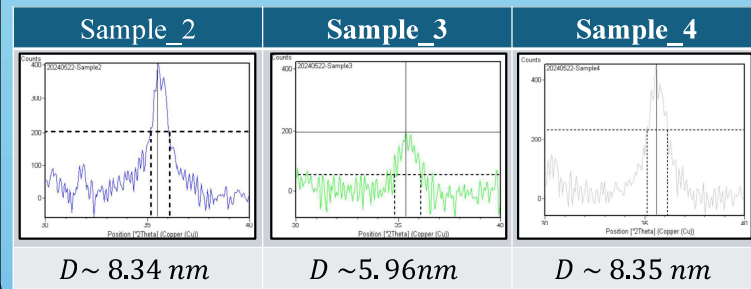
圖三、 Fe_3O_4 之XRD繞射圖(a)商用 Fe_3O_4 (b) Sample_2 (c) Sample_3 (d) Sample_4

圖三為各 Fe_3O_4 樣品之XRD繞射圖，對比資料庫後可發現， Fe_3O_4 主要的繞射峰都有出現。但仍有少數繞射峰與 Fe_3O_4 繞射圖不匹配，因此製作過程仍然有少數的雜質沒有被我們分離掉。

可以明顯看出微粒的XRD繞射圖中繞射峰皆有寬化的現象，顯示尺寸比商用的粉末小，一般商用的粉末通常為微米等級，為了進一步估計樣品的尺寸，我們使用(311)繞射峰藉由謝樂公式：

$$D = \frac{K\lambda}{\beta \cos \theta}$$

D: 晶粒尺寸 K: 形狀因子，通常取0.9 β : 半高寬 θ : 布拉格角



Conclusion

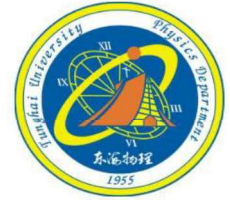
- 我們透過XRD繞射圖可以大致確定我們製備出 Fe_3O_4 ，不過由於 Fe_2O_3 的繞射圖非常相似，我們主要透過顏色及磁性去區分 Fe_3O_4 及 Fe_2O_3 。
- 根據XRD繞射圖的線寬變化，可以推估製備出的微粒為奈米等級，不過受限於公式太過粗糙，且XRD繞射圖需要進一步優化，因此如需得知確切尺寸需透過TEM去進行觀測來確認微粒的尺寸。

References

- Oscar Oehlsen, Sussy I. Cervantes-Ramirez, Pabel Cervantes-Aviles*, and Illya A. Medina-Velo*: Current Status and Future Perspectives. *ACS Omega* 2022, 7, 4, 3134–3150, Publication, January 21, 2022
- Mohd Imran¹, Akhalkur Rahman Ansari², Aabid Hussain Shaik³, Abdulaziz⁴, Shahir Hussain⁵, Afzal Khan⁶ and Mohammed Rehan Chandan⁷: Ferrofluid synthesis using oleic acid coated Fe_3O_4 nanoparticles dispersed in mineral oil for heat transfer applications; Mohd Imran *et al* 2018 *Mater. Res. Express* 5 036108
- M.A. Khairul, Elham Doroodchi, Reza Azizian, Behdad Moghtaderi, Advanced applications of tunable ferrofluids in energy systems and energy harvesters: A critical review, ISSN 0196-8904



Use Tree Models to predict the relationship of variety and coffee cupper points



Zhen-Quanq QIU¹, and Kwai-Kong Ng¹

¹Department of Applied Physics, Tunghai University, Taichung 40704, Taiwan

簡介

在咖啡品質品鑑中，咖啡的杯測分數將很大程度的影響價格。本次研究計畫希望利用機器學習，處理大量由咖啡品質協會(Coffee Quality Institute, CQI)所提供之，三大咖啡產區之綜合咖啡杯測分數。並利用回歸樹模型，預測不同變因對於咖啡杯測分數之影響。以找出影響咖啡價格的最主要因素

資料型態

這次所處理的資料，總共包含1311rows * 8 columns，其中包含了字串以及整數等，而資料中含有一些缺失值以及一些會影響數據擬合效果，不重要的資料。所以我們先利用pandas內建的資料處理方式，先刪除不需要的特徵欄位，接著利用該項特徵中，出現次數最多的類別，取代欄位中的缺失值。

接著使用咖啡的物種、原產地、種植地區、品種以及處理法的資料，來找出與咖啡杯測分數之間相關性。因此，我們要將這些以字串表示的類別，用特殊編碼方式，將資料以0跟1進行初步定義。

Species	Country.of.Origin	Region	Species_Arabica	Country.of.Origin_Brazil	Country.of.Origin_Burundi
Arabica	Ethiopia	guji-hambela	1	0	0
Arabica	Ethiopia	guji-hambela	1	0	0
Arabica	Guatemala	NaN	1	0	0
Arabica	Ethiopia	oromia	1	0	0
Arabica	Ethiopia	guji-hambela	1	0	0
...
Arabica	Mexico	juchique de ferrer	1	0	0
Arabica	Haiti	department d'artibonite	1	0	0
Arabica	Nicaragua	jalapa	1	0	0
Arabica	Guatemala	nuevo oriente	1	0	0
Arabica	Honduras	comayagua	1	0	0

(轉換前)

(轉換後)

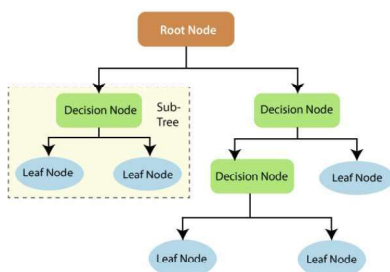
研究方法

資料處理方式

- 選擇適當變因，將不需要的欄位清除
- 將含有Nan的整數資料以平均數的方式填入
- 將影響咖啡杯測分數的各式特徵視覺化
- 使用one-hot-encoding的方式將字串轉為編碼

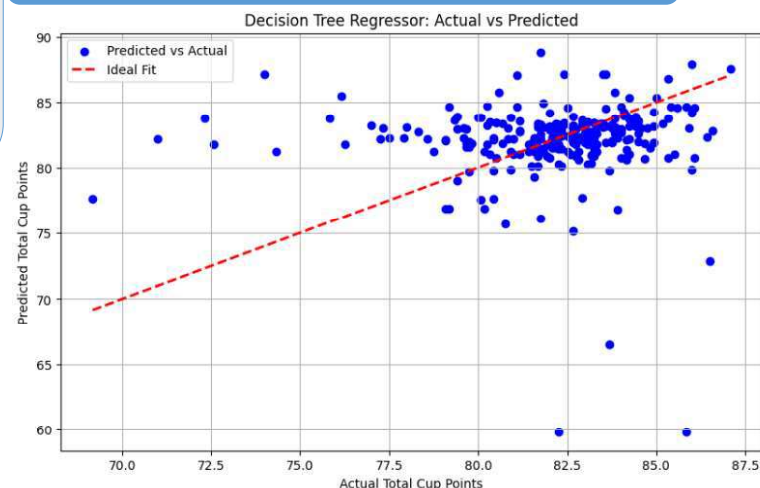
回歸樹(Regression Tree)原理運作

在使用回歸樹分析中，我們會將資料進行分割成特徵與結果。並使用部分特徵資料，作為回歸樹的節點，最後再將測試資料應用在回歸樹上，以評估其效能。透過這樣的方式，能夠處理非線性關係之數據資料，但由於模型較為簡易，可能造成較大誤差。因此可適當調整枝幹內的節點，或是使用集成方法：「隨機樹森林」，以改善其性能。



註：藍色區域代表騎用的預測結果，而綠色框代表我們所使用的變因，使其成為分類問題的其中一個項目，也就是樹的節點。

線性回歸預測



Mean Squared Error: 14.631385646877703
R² Score: -1.3404043188560024

參考文獻

[1] Przybył, K.; Gawrysiak-Witulska, M.; Bielska, P.; Rusinek, R.; Gancarz, M.; Dobrzański, B., Jr.; Siger, A. Application of Machine Learning to Assess the Quality of Food Products—Case Study: Coffee Bean. Appl. Sci. 2023, 13, 10786. <https://doi.org/10.3390/app131910786>

[2] [2] Devan Anjelito, ML: Coffee Quality Regression, <https://www.kaggle.com/code/devananjelito/ml-coffee-qualityregression/notebook>

結論

由均方根數值與R平方值可判斷出，利用此樹模型做擬合或是不是最理想的模型，而在數據處理與選擇上，也看出這些特徵值對於咖啡杯測分數並無太大關聯性。因此未來將嘗試不同機器學習模型，並且嘗試不同資料處理方式，預期能將準確率在更提升

C.H. Chiang (江考熙)¹, H.W. Chang², C.R. Wang¹, Lance Horng³

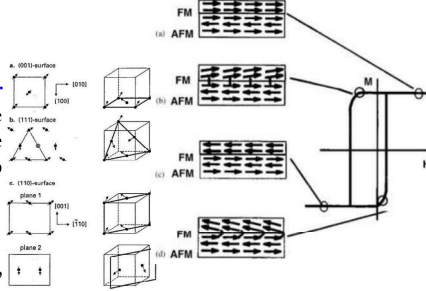
¹ Department of Applied Physics, Tunghai University, Taichung, 407 Taiwan

² Department of Physics, National Chung Cheng University, Chia-Yi, 621 Taiwan

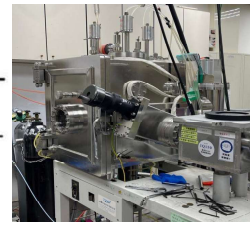
³ Department of Physics, National Changhua University of Education, Changhua, 500 Taiwan

Introduction

- Exchange bias (EB) system for application in spintronic devices is essential.
- $\text{Ni}_{0.48}\text{Fe}_{0.12}\text{Cr}_{0.4}$ underlayer has similar lattice constant to NiFe, and therefore might help for the crystallinity of NiFe and FeMn, which is a critical factor to enhance exchange bias.
- Effects of both AFM layer and underlayer on magnetic properties are studied.
- In order to obtain high exchange bias, NiFeCr and FeMn are optimized.



Experiment



HV-sputtering system

NiFeCr(5nm)	NiFeCr(nm)
FeMn(20nm)	FeMn(20nm)
NiFe(5nm)	NiFe(5nm)
NiFeCr(20nm)	Ta(20nm)
Glass	Glass

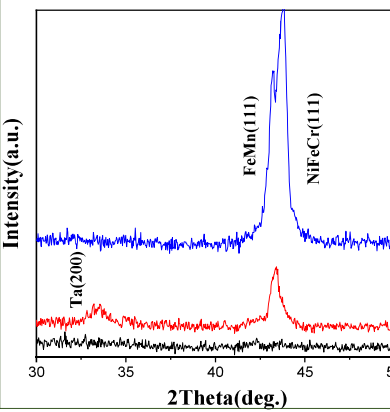
Background pressure <math>< 5 \times 10^{-7}</math> mTorr

Crystal structures by XRD

The surface morphology of the sample by AFM

Magnetic properties by AGM

XRD patterns of NiFeCr/FeMn/NiFe films with different underlayer



underlayer	FWHM	2θ (degree)	Grain size (FeMn)
Ta	0.80119	43.36715	10.09nm
NiFeCr	0.74968	43.17477	10.79nm

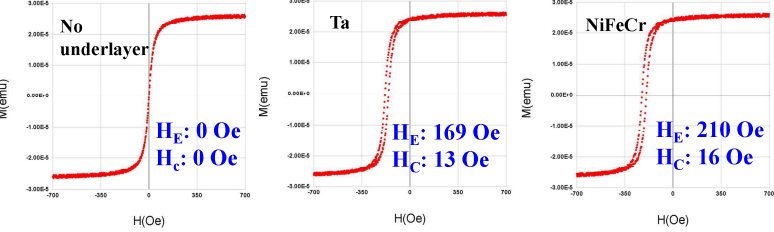
$$T = \frac{K\lambda}{B \cos \theta_B}$$

T = crystallite thickness
λ (X-ray wavelength, Å)
K (shape factor) ~ 0.9
B, θ_B in radians

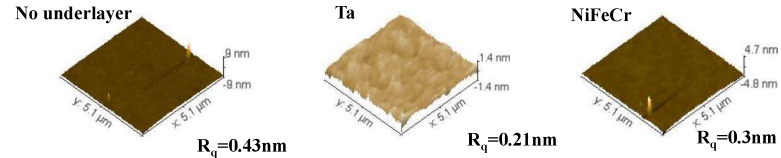
Scherrer formula

Results and discussion

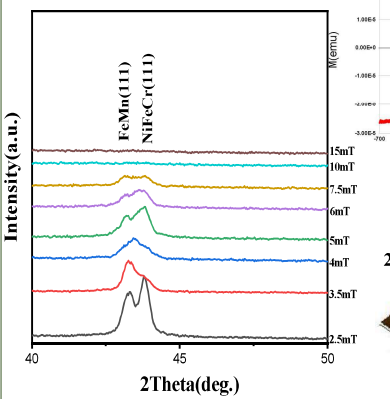
M-H curves of NiFeCr/FeMn/NiFe films with different underlayer



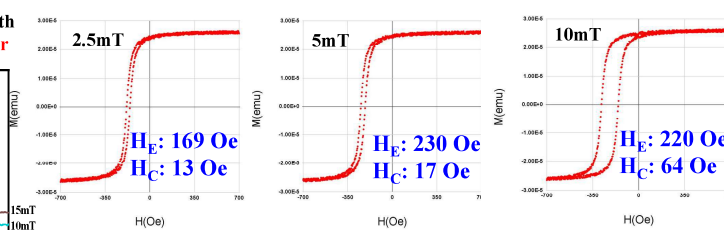
AFM images of NiFeCr/FeMn/NiFe films with different underlayer



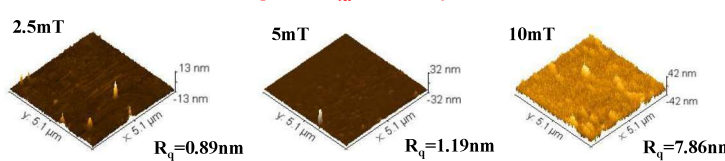
XRD patterns of NiFeCr/FeMn/NiFe/NiFeCr films with various deposition P_{Ar} of underlayer



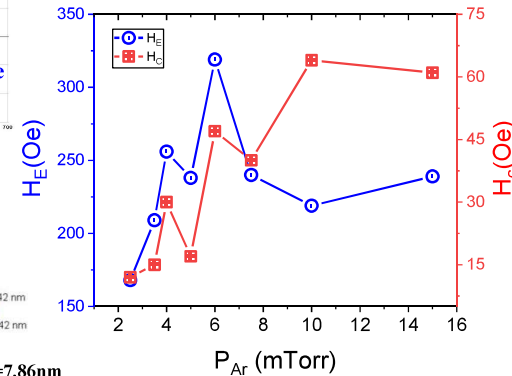
M-H curves of NiFeCr/FeMn/NiFe/NiFeCr films with various deposition P_{Ar} of underlayers



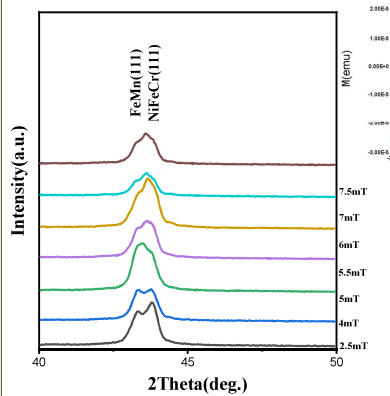
AFM images of NiFeCr/FeMn/NiFe/NiFeCr films with various deposition P_{Ar} of underlayers.



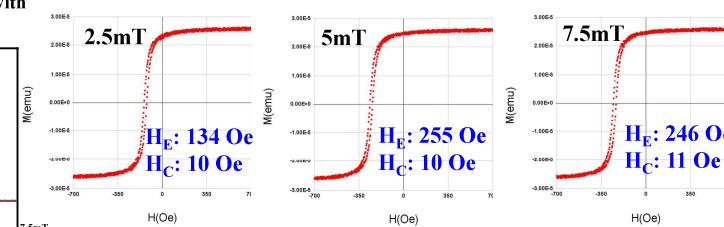
Dependence of exchange bias (H_E) and coercivity (H_C) for NiFeCr/FeMn/NiFe/NiFeCr films with various deposition P_{Ar} of NiFeCr.



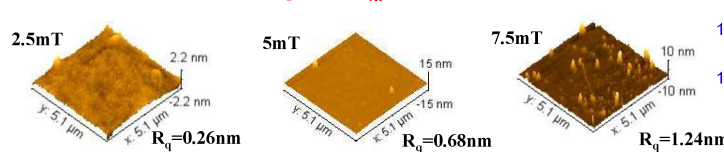
XRD patterns of NiFeCr/FeMn/NiFe/NiFeCr films with various deposition P_{Ar} of FeMn



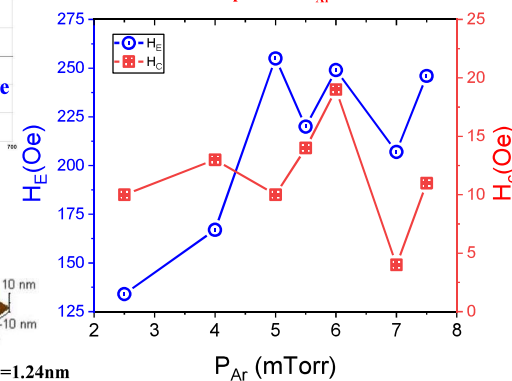
M-H curves of NiFeCr/FeMn/NiFe/NiFeCr films with various deposition P_{Ar} of FeMn



AFM images of NiFeCr/FeMn/NiFe/NiFeCr films with various deposition P_{Ar} of FeMn



Dependence of exchange bias (H_E) and coercivity (H_C) for NiFeCr/FeMn/NiFe/NiFeCr films with various deposition P_{Ar} of FeMn



Conclusions

- Both Ta and NiFeCr underlayers are found to promote crystallinity for NiFe and FeMn, and reduce interfacial roughness, therefore strengthen F/AF coupling and enhance the exchange bias.
- Due to the similar lattice constant to NiFe, NiFeCr underlayer could be helpful in the growth of NiFe(111) and FeMn(111) and therefore higher exchange bias is attained as compared to FeMn/NiFe on Ta underlayer.
- Proper the working pressure to grow FeMn could promote the crystallinity of FeMn and therefore further improve the exchange bias.
- The results of this work provide the important information to get FeMn/NiFe bilayer with high exchange bias.

Introduction

Currently, silicon-based integrated circuits faces a major obstacle in the miniaturization of transistors due to the physical limits of the materials. It's challenging to further reduce the channel length and thickness of transistors. Continuing this shrinking would present several challenges, such as poor gate control, increased leakage current, and degradation of carrier mobility. However, two-dimensional (2D) semiconductor materials offer an alternative solution. 2D materials possess layered structure, with layers bonded by Van der Waals force, making it no dangling bonds at the interfaces. This feature helps maintain carrier mobility during the miniaturization of transistor. Moreover, the atomic-scale thickness enhances the gate control.

Silicon phosphide (SiP/o-SiP) exhibits a layered structure in orthorhombic system with excellent carrier mobility. On top of that, Si and P are commonly used in the silicon semiconductor process, ensuring that SiP will not face the problem with process integration or compatibility in future application. On the other hand, the fabricating or applications of SiP mostly need catalysts and transfer, which affect the quality and size of the thin films. In this study, we used chemical vapor deposition without using catalysts and transfer steps to synthesis large-area and high-quality layered SiP thin films, providing a promise synthesis method for the future application of SiP.

Methods

Thermal chemical vapor deposition:

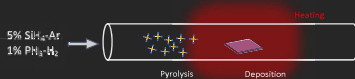


Fig.1 Schematic diagram of thermal CVD.

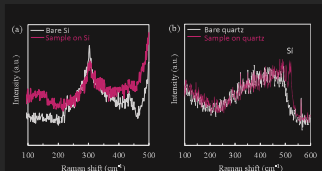


Fig.2 Raman spectra of (a) sample on silicon wafer and (b) sample on quartz glass. * labels the peak of Si (520 cm⁻¹).

- The majority of sample consists primarily of Si
- Ran out of PH₃

Plasma-assisted chemical vapor deposition:

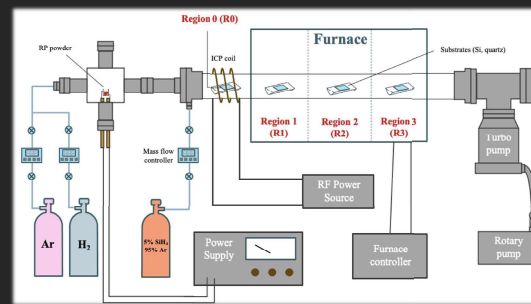


Fig.3 Schematic diagram of experimental setup.

- Plasma-enhanced chemical vapor deposition (PECVD)
- Inductively coupled plasma (ICP) with RF power source
- Precursors: Red phosphorus (RP) vapor & SiH₄

Step by step:

- Experimental setup
- Evaporation of RP
- Deposition of Si:P thin films
- Post annealing

Results and discussion

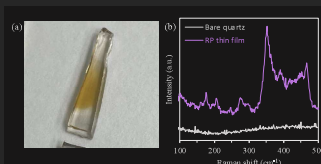


Fig.4 (a) Photograph of quartz glass after red phosphorus thin film deposition above the crucible and (b) Raman spectra which corresponded with Raman spectrum in ref. 5.

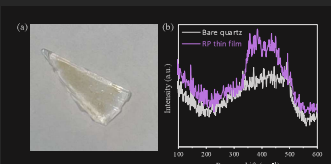


Fig.5 Photograph of quartz glass after red phosphorus thin film deposition at RO and (b) Raman spectra.

Table. 1 Parameters of Si:P thin film deposition.

RP	5% SiH ₄ -Ar	Ar	Pressure	RF power	Position	Substrates
100 mg	4 sccm	200 sccm	6.4×10 ⁻¹ Torr	40 W	RO, R1	Si, quartz

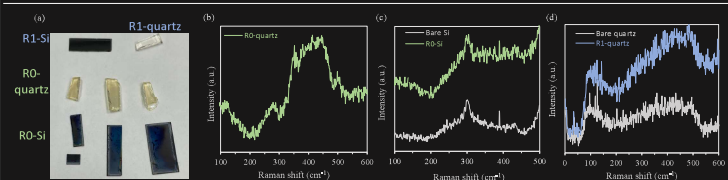


Fig.6 (a) Photograph of Si:P thin film growth on silicon substrate and quartz at different position and Raman spectra of (b) RO-quartz (c) RO-Si (d) R1-quartz.

Table. 2 The parameters of post annealing.

Temperature	Time	N ₂	Pressure
1000 °C	10 min	200 sccm	Atmospheric pressure

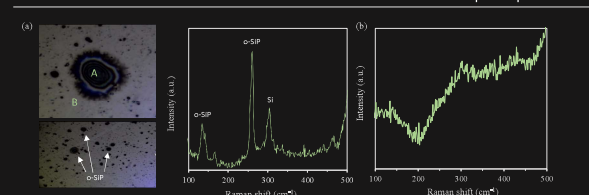


Fig.7 (a) OM image of sample after post annealing. Raman spectrum of (b) area A and (c) area B.

Summary

- Our homemade RP effusion cell could be used to supply RP vapor.
- We successfully deposited Si:P thin film by using RP vapor and SiH₄ in PECVD system.
- Layered o-SiP was obtained after post annealing, and it seemed like some concentric circle.

Reference

- Y. Liu, X. D. Duan, H. J. Shin, S. Park, Y. Huang, and X. F. Duan, Nature 591 (7848), 43 (2021).
- C. L. Li, S. P. Wang, X. X. Zhang, N. Jia, T. T. Yu, M. Zhu, D. Liu, and X. T. Tao, CrystEngComm. 19 (46), 6986 (2017).
- Wen, Z., Wang, Y., Chen, Z. et al., MRS Advances 5, 1653–1660 (2020).
- Sar, H., Gao, J. & Yang, X., Sci. Rep. 11, 6372 (2021).
- A. Impellizzeri, A. A. Vorfolomeeva, N. V. Surovtsev, A. V. Okotrub, C. P. Ewels, and D. V. Rybkovskiy, Phys. Chem. Chem. Phys. 23 (31), 16611 (2021).
- S. Geiskopf, A. Valdenaire, M. Stoffel, X. Devaux, E. André, C. Carteret, A. Bouché, M. Vergnat, and H. Rinnert, J. Phys. Chem. C 125 (5), 3235 (2021).

Qisikt模擬time independent的波函數在位能井中的量子穿隧效應之探討



指導教授: 黃靜瑜教授
東海大學應用物理系 S10210050 蔡東鴻

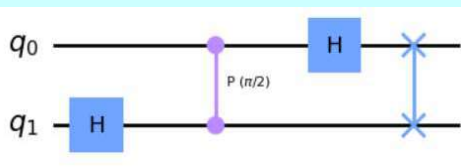
Foreword:

本次研究是為了探索波函數 ψ_0 在 $e^{-iH\Delta t}$ 作用下粒子在位能井中隨著時間的變化，在這項研究中我們將運用Qsikt來模擬波函數在經過時間演化後的變化，利用Qsikt中不同的量子邏輯閘來實現 $e^{-iH\Delta t}$ ($H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}$, \hat{V} 為位能)並利用此哈密頓算符來製造double-well Potential此時會產生量子穿隧效應，藉由模擬出的量子穿隧效应在波函數概率分佈中的表現，來探討量子穿隧效應背後的機制。

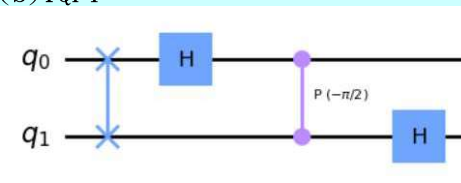
Research methods

1. 我們能將hamiltonian operator $e^{-iH\Delta t}$ 拆解成爲 $e^{-i\hat{K}\Delta t}$ 乘上 $e^{-i\hat{V}\Delta t}$ 這兩項分別是動能部分與位能部分其中的 K 可以寫成 $\frac{\hat{p}^2}{2m}$ (m 設爲 $\frac{1}{2}$)那麼若想要讓此算幅作用在空間的波函數 $\psi_0(x, t)$ 就必須將空間的波函數 $\psi_0(x, t)$ 做用Quantum Fourier Transform變成 $\psi_0(p_j, t)$ 。
2. 我們將其帶入 $e^{-i\frac{\hat{p}^2}{2m}\Delta t}$ 中然後再將其通過IQFT將其變回空間的波函數，此時我們就能將空間的波函數作用在位能的算幅上($e^{-i\hat{V}\Delta t}$)，以此我們再去測量此波函數隨時間變化之機率，通過以上述思路我們可以設計出下列的量子線路：

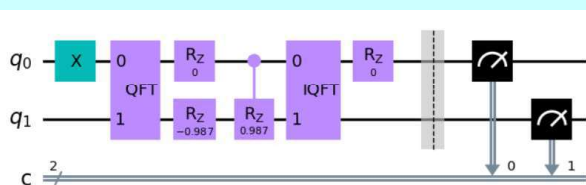
(a) QFT



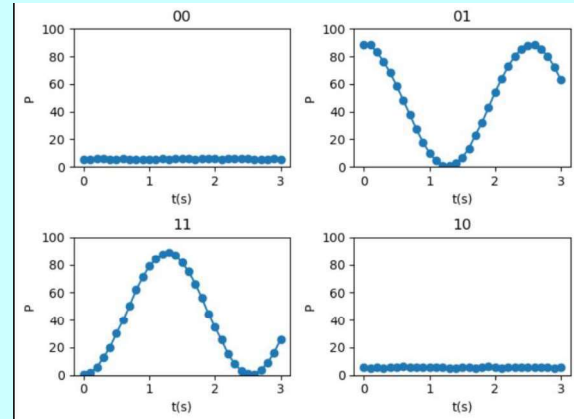
(b) IQFT



(c) 全部線路



RESULTS



上圖經過時間演化的波函數分別在 $|00\rangle$ 、 $|01\rangle$ 、 $|11\rangle$ 、 $|10\rangle$ 的機率隨著時間變化，由於我們關於位能算幅會在 $|00\rangle$ 與 $|10\rangle$ 形成位能井使得這此兩種狀態的機率趨近於0，那我們再看到 $|01\rangle$ 和 $|11\rangle$ 的機率變化，我們發現在狀態 $|11\rangle$ 處的機率隨著時間慢慢增加的同時 $|01\rangle$ 也在減少，這實際上就是量子穿隧效應，我們可以觀察到粒子由狀態 $|01\rangle$ 穿過位能屏障跑到狀態 $|11\rangle$ ，現象的周期大約為2.8。

CONCLUSIONS

本研究的結果表明，通過Qisikt模擬量子系統的時間演化和量子隧穿效應是可行且有效的。未來的研究可以進一步拓展到更多維度的量子系統和不同類型的位能井結構，從而深入理解量子穿隧效應的更多細節。

References

1. Sornborger, A. T. "Quantum Simulation of Tunneling in Small Systems". Sci. Rep. : 597 (2012).
2. Simulation of quantum tunnelling on the IBM quantum computers. Author: Berta Martinez Pamiás.
3. Feng, G. et al. Experimental simulation of quantum tunneling in small systems. Sci. Rep. 3: 2232 (2013).



透過線上量子電腦實驗 MERMIN-PERES 魔方遊戲



作者：羅鵬菘(S10210054)，指導老師：黃靜瑜
東海大學應用物理系

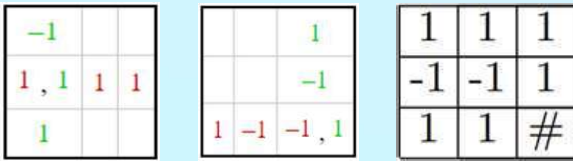
摘要

此研究的內容是使用線上量子電腦測量Mermin-Peres魔方遊戲[1]。首先，介紹 Mermin-Peres魔方遊戲的傳統玩法，在傳統古典方式進行遊戲時，玩家在遊戲開始前所做的決策能夠使其勝率達到最高89%；接著，我們引入了量子特性，探討如何透過量子方法進行 Mermin-Peres魔方遊戲，並證明利用量子特性可以獲得100%的勝率。在這個過程中，我們發現使用量子特性所得出的結果確實超越了傳統方式的表現。這不僅豐富了我們對 Mermin-Peres遊戲的理解，同時也呈現了量子方法在遊戲理論中的潛在優勢。為了克服實驗建構的高成本以及預算的有限性，我們選擇了使用線上的量子電腦進行實驗測試。這不僅有效地降低了實驗成本，還確保了在有限預算內能夠進行系統性且有深度的研究，這一策略為此研究的成功執行提供了實用的解決方案。

Mermin-Peres魔方

傳統魔方介紹：

遊戲有三名參與者，其中兩位玩家：通常稱為 Alice 與 Bob，第三位作為裁判。
遊戲規則：玩家可以在被指定的行、列中填入 +1 或 -1 的值，Alice 被分配填寫的格子為列，並且要求每一列的乘積為 +1；而 Bob 被分配填寫的格子為行，並且要求每一行的乘積為 -1。遊戲開始時，禁止玩家之間的交流。裁判先隨機選擇一列要求 Alice 填寫，之後再隨機選擇一行要求 Bob 填寫，在玩家符合遊戲規則時，且 Alice 與 Bob 相交的那一格是相同的值，判定玩家獲勝。左圖為玩家勝利的情況，中間圖為玩家失敗的情況，右圖為遊戲開始前討論出的一組勝率最高的策略。



量子Mermin-Peres魔方介紹：

遊戲規則的基本框架與傳統方式相似，但在實踐上有顯著差異。不同於傳統遊戲中填入 +1 或 -1 的方式，玩家使用測量量子的自旋所獲得的值填入魔方。例如，在 z 軸上測量到量子的自旋向上結果為 +1，自旋向下為 -1。玩家在進行遊戲時需要運用先前準備好的糾纏量子對，以不同方式進行測量，以確保其結果符合遊戲的特定規則。左邊三張圖為泡利矩陣，右圖為Mermin-Peres魔方。

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$I \otimes Z$	$Z \otimes I$	$Z \otimes Z$
$X \otimes I$	$I \otimes X$	$X \otimes X$
$-X \otimes Z$	$-Z \otimes X$	$Y \otimes Y$

研究方法及實驗結果

研究方法

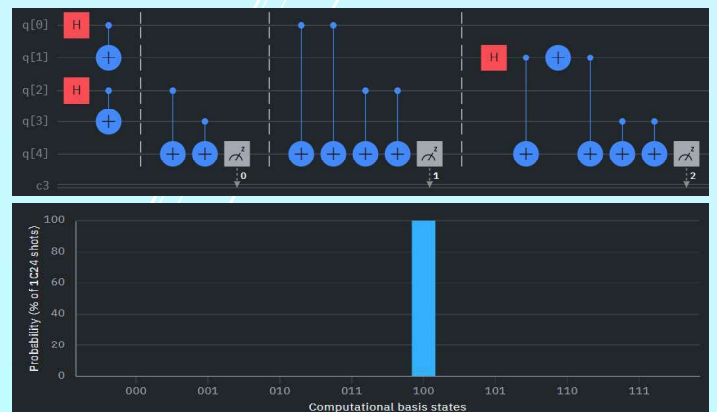
1. 驗證Mermin-Peres魔方中每一行和列相乘是否符合遊戲要求，可以將泡利矩陣以張量積展開，以不同順序相乘驗證結果。
2. 設計Mermin-Peres魔方的量子線路：在 IBMQ 中，粒子的測量是朝向 Z 方向進行的，即在自然基底上進行的測量。若朝向其他方向進行測量，則需要對量子進行不同的操作，以使其能夠在我們所希望的方向上被成功測量。因此，只需找到相應的轉換矩陣便可實現此目的。

$$P_{e \rightarrow b} |\alpha\rangle_b = |\alpha\rangle_e \quad |\alpha\rangle_b = P^{-1} |\alpha\rangle_e$$

3. 在柵欄分隔的第一區塊中，我們創建了一對糾纏態，其中 q_0 和 q_1 分別代表 Alice 和 Bob 的第一顆糾纏粒子，而 q_2 和 q_3 分別代表 Alice 和 Bob 的第二顆糾纏粒子。
第二區塊用於測量兩位玩家的值是否相同，若相同則輸出為 0，不同則為 1。
第三個區塊用於測量 Alice 該列的值乘積是否為 +1，對應的輸出為 0。
第四個區塊用於測量 Bob 該行的值乘積是否為 -1，對應的輸出為 1。

實驗結果

上圖為第一列、第一行的Mermin-Peres魔方量子線路設計圖，下圖為理論的幾率圖。



根據實驗結果，使用量子特性並以特定方式測量魔方，確實實現了超越古典遊戲的勝率。然而，找到此遊戲的實際應用仍然是個待進一步研究的重要問題。

參考文獻：

- [1] A. Dikme, N. Reichel, A. Laghaout, and G. Björk, Measuring the Mermin-Peres magic square using an online quantum computer (2020), arXiv: 2009.10751 [quant-ph].
- [2] Jia-Min Xu, Yi-Zheng Zhen, Yu-Xiang Yang, Zi-Mo Cheng, Zhi-Cheng Ren, Kai Chen, Xi-Lin Wang, Hui-Tian Wang Experimental Demonstration of Quantum Pseudo telepathy. arXiv:2206.12042 [quant-ph].
- [3] Supplemental Material for the measurement basis of Alice and Bob's quantum strategies, the experimental measurement scheme, and the minimal detection efficiency to close the loophole.
- [4] <https://www.gregegan.net/SCIENCE/MPMS/MPMS.html>

摘要

本研究透過電漿增強化學氣相沉積法並使用乙硼烷(B₂H₆)、氮氣(N₂)作為原料，嘗試在矽晶圓上直接合成高品質、晶圓等級的二維六方氮化硼(h-BN)，並嘗試透過改變製程參數製造出均勻、可控制密度的自旋缺陷(spín-defect)來充當量子位元(qubit)，為量子電腦商業化的實現提供一種可行的方法。

簡介

- 鑽石內的NV center作為一種spín-defect是實現量子電腦的方法之一，由於人工鑽石較小、難以控制缺陷密度等問題，使大規模應用受阻礙。
- h-BN內的VB⁻ spín-defect已被證實能在室溫下作為量子位元[1]，這提供了另一種大規模實現量子電腦的可行方法。
- 以往h-BN的合成需觸媒催化合成[2]，這導致難以維持其品質。加上需轉移至適當基板上才能使用，這將嚴重限制商業上的應用。
- 如何在非觸媒基板上直接合成晶圓等級的高品質h-BN薄膜，及可控制密度的量子位元，對於實現高位元量子電腦是目前極需突破的關鍵

研究方法

- 控制沉積速率來成長超薄h-BN
- 利用氮氣去除未形成六方晶格的鍵結

研究目的

- 成長超薄h-BN於矽晶圓上
- 透過改變製程參數，製造並控制VB⁻的形成

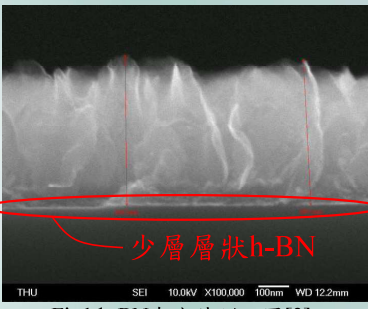


Fig1.h-BN奈米層剖面圖[3]

結果與討論

Table1.首次成長出h-BN與降低電漿V_{bias}後的實驗參數

	製程壓力	電極距離	B ₂ H ₆	電漿功率	Ar	N ₂	製程溫度
B50N50A20Pr0.5T500Po120d4	0.5torr	4cm	50sccm	150W	20sccm	50sccm	500°C
B10N30A50Pr0.5T600Po120d3	0.5torr	3cm	10sccm	120W	50sccm	30sccm	600°C

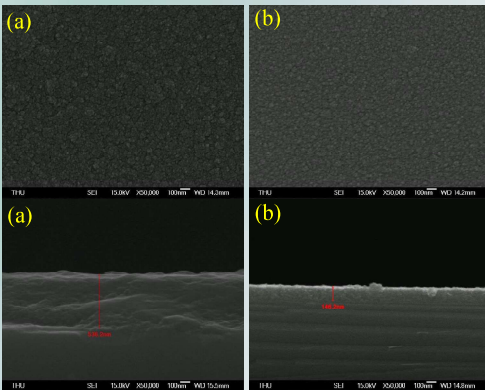


Fig2.(a)B50N50A20P0.5T500W120d4與(b)B10N30A50P0.5T600W120d3之SEM50000x俯視圖

Fig3.(a)B50N50A20P0.5T500W120d4與(b)B10N30A50P0.5T600W120d3之SEM50000x剖面圖

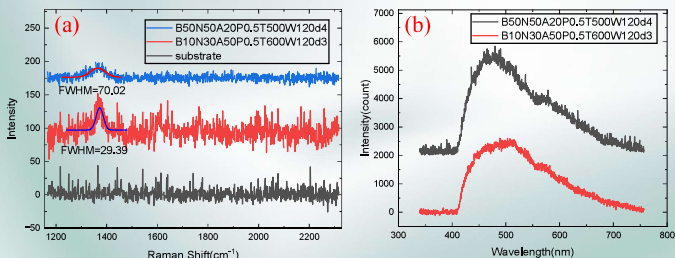


Fig4. B50N50A20P0.5T500W120d4與B10N30A50P0.5T600W120d3之(a)拉曼光譜圖，與(b)光致發光光譜圖

Table 2.以製程壓力為實驗變因之實驗參數表

	製程壓力	電極距離	B ₂ H ₆	電漿功率	Ar	N ₂	製程溫度
B10N30A50Pr0.3T600Po120d3	0.3torr	3cm	10sccm	120W	50sccm	30sccm	600°C
B10N30A50Pr0.5T600Po120d3	0.5torr	3cm	10sccm	120W	50sccm	30sccm	600°C
B10N30A50Pr0.7T600Po120d3	0.7torr	3cm	10sccm	120W	50sccm	30sccm	600°C

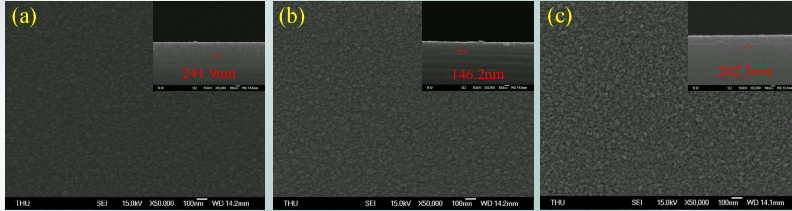


Fig5.製程壓力分別為(a)0.3 torr, (b)0.5 torr, (c)0.7 torr之50000x SEM俯視圖

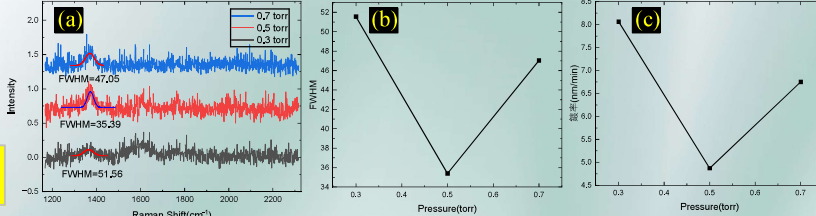


Fig6.製程壓力分別為0.3 torr, 0.5 torr, 0.7 torr之(a)拉曼光譜圖、(b)半峰全寬隨製程壓力變化關係圖、(c)鍍率隨製程壓力變化關係圖

Table 3.以電極距離為實驗變因之實驗參數表

	製程壓力	電極距離	B ₂ H ₆	電漿功率	Ar	N ₂	製程溫度
B10N30A50Pr0.5T600Po120d1	0.5torr	1cm	10sccm	120W	50sccm	30sccm	600°C
B10N30A50Pr0.5T600Po120d3	0.5torr	3cm	10sccm	120W	50sccm	30sccm	600°C
B10N30A50Pr0.5T600Po120d5	0.5torr	5cm	10sccm	120W	50sccm	30sccm	600°C

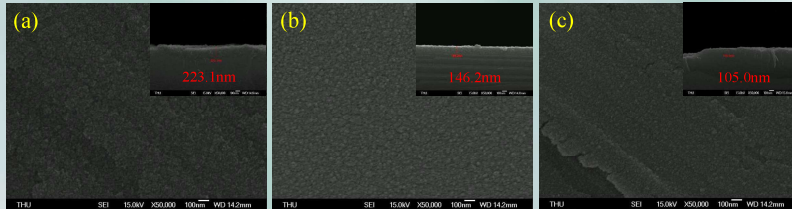


Fig7.電極距離分別為(a)1 cm, (b)3 cm, (c)5 cm之50000x SEM俯視圖

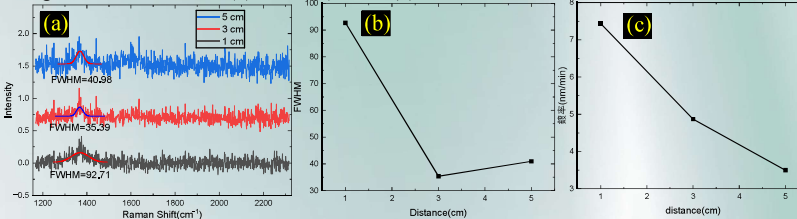


Fig7.電極距離分別為1 cm, 3 cm, 5 cm之(a)拉曼光譜圖、(b)FWHM隨電極距離變化之關係圖、(c)鍍率隨電極距離變化之關係圖

總結

1. 拉曼光譜量測到的薄膜確實有h-BN的訊號
2. 隨著製程壓力下降，合成出的BN會開始出現wurtzite的相
3. 降低合成速度可提高h-BN的品質
4. 355nm激發的光致發光光普並未觀測到VB⁻的形成

參考文獻

- [1] Rizzato R, et al. Extending the coherence of spin defects in hBN enables advanced qubit control and quantum sensing. *Nat Commun* 2023, 14(1).
- [2] Yamamoto M, et al. Low-Temperature Direct Synthesis of Multilayered h-BN without Catalysts by Inductively Coupled Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition. *Acs Omega* 2023, 8(6): 5497-5505.
- [3] Chia-Chi Wang, Hsi-Lien Hsiao. *Synthesis of C/BN nanosheet*. 2012.



兩階段晶種層水熱法合成氧化鋅n-i-p奈米柱薄膜白光二極體之研究

Zi-Ting Lin (林子庭)

Department of Applied Physics, Tunghai University, Taichung, Taiwan

Introduction

隨著科技的進展，由於照明、顯示器...等的需求變多所以對其發光效率的需求增加。而氧化鋅具有寬能隙(~3.37eV)、高激子束縛能(~60meV)、成本低、可以輕易地控制摻雜濃度來改變載子遷移率...等優點使其成為熱門的發光材料，常被用於LED、太陽能電池、感測器...等。

- 目前氧化鋅主要製程方法有射頻磁控濺鍍法、金屬有機化學氣象沉積法...等。這些方法需要在真空環境內製程。
- 水熱法可在低溫(< 100°C)常壓下成長，材料只需要簡單化學溶液，不僅製程簡單、基板自由、成本低廉、溶液無毒、可大面積製作、能藉由改變溶液的酸鹼值、溫度、濃度改變氧化鋅的生長。
- 利用水熱法生長奈米柱為類似薄膜的形式，由於低溫生長，故表面產生缺陷。其缺陷發光結合氧化鋅的能隙發光來發出白光。

本研究使用水熱法在低溫(< 100°C)、成本低的情況下可在不同的基板上大面積製作白光二極體。由於晶種層為水熱法生長氧化鋅奈米柱的重要因素，晶種層的品質決定在上面成長的奈米柱方向、密度和直徑。利用旋轉塗佈的方式製作出第一階段晶種層，再藉由水熱法長出n型氧化鋅奈米柱當作第二階段晶種層來改變晶種層的品質，使在此晶種層上生長的氧化鋅奈米柱間的縫隙小且連續而形成類似薄膜的樣子。其中透過調變旋轉塗佈的轉速、烘烤溫度、生長溶液的濃度來提升晶種層的厚度、品質，以作為連續生長良好的 n、i、p 結構之氧化鋅奈米柱的基礎。

Method

第一階段晶種層製備

常用來製作品種層的方法有磁控濺鍍法和溶膠凝膠旋轉塗層法，由於本研究目的為在低溫、低成本下製作，故不選擇在真空中製程，而使用溶膠凝膠旋轉塗層法具有成長速率高、加工簡單、成本低...等優點。

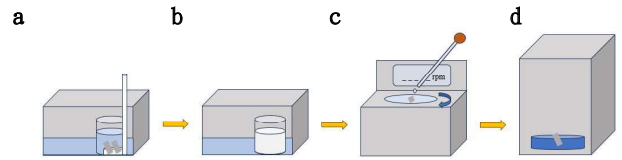


Figure 1. (a)起音波震盪清洗基板 (b)醋酸鋅+正丙醇均勻混和 (c)將混和溶液滴到基板上並旋轉塗佈 (d)放入烤箱以烘烤

第二階段晶種層製備

由於旋轉塗佈法在低溫中製程，故表面產生缺陷形成標面覆蓋率差的問題。上面成長的奈米柱分層不明確且高機率從空隙中生長，使電子電洞無法順利複合造成短路現象。因此，再用水熱法長出n型氧化鋅奈米柱當作第二階段晶種層時，其中添加檸檬酸離子來抑制奈米柱[0002]方向的成長製作薄膜。

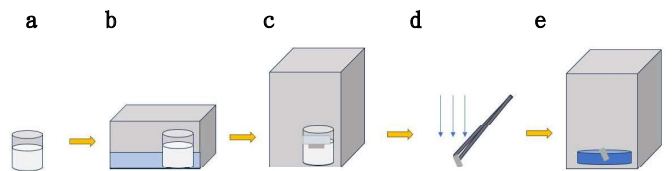


Figure 2. (a)等莫耳濃度的硝酸鋅水溶液+HMTA水溶液 (b)加入檸檬酸並用超聲波均勻混和溶液 (c)將基板黏於玻璃上倒置放入成長溶液並放入烤箱成長 (d)用甲醇大量沖洗表面上殘存的生長溶液 (e)將樣品表面上的甲醇烤乾

References

- [1] Chang, Seung-Bo, Hyun Uk Chae, and Hyun-Seok Kim. "Structural, optical, electrical and morphological properties of different concentration sol-gel ZnO seeds and consanguineous ZnO nanostructured growth dependence on seeds." *Journal of Alloys and Compounds* 729 (2017): 571-582.
- [2] Chen, Ying-I. Synthesis of P-N junction ZnO nanorods by using hydrothermal method. Department of Applied Physics, Tunghai University (2022)
- [3] Chen, Cheng-Yuan. Hydrothermal synthesis and characterizations of ZnO nanorods thin film p-i-n diode. Department of Applied Physics, Tunghai University (2023)

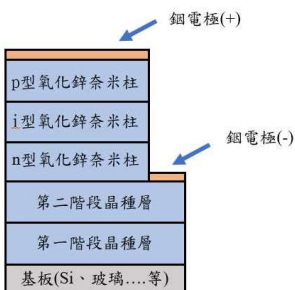


Figure 3. 白光二極體示意圖

在兩階段的晶種層上依序生長n-i-p的氧化鋅奈米柱結構，透過摻雜Ga並退火形成n型的氧化鋅奈米柱、摻雜Li並退火形成p型的氧化鋅奈米柱。

