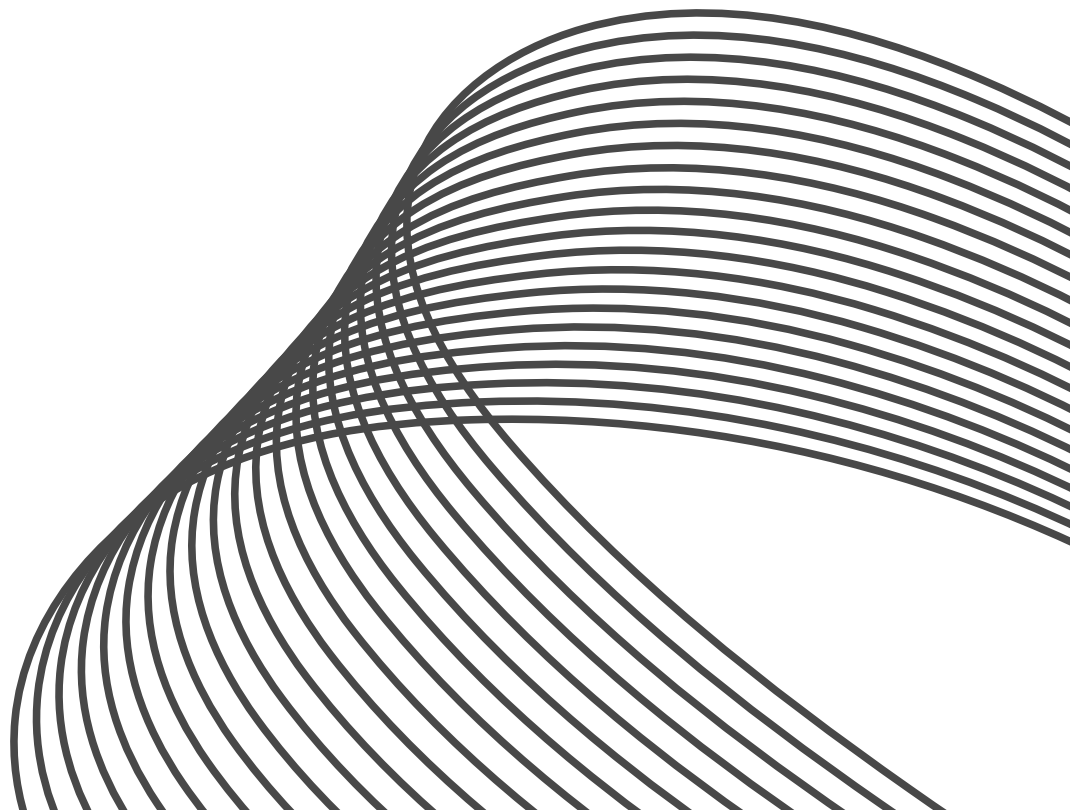


111 學年度
第2學期
東海大學應用物理學系

學生專題研究 論文集



111 學年度第 2 學期 應用物理學系

論文專題研究成果

目錄

Synthesis and Characterization of Two-dimensional silicon phosphide semiconductor thin films	1
(日)應物三 S09210001 馮鈞皓 / 指導教授：蕭錫鍊	
利用中子繞射探討 Cu 取代對 MnFe ₂ O ₄ 與 FeMn ₂ O ₄ 的磁結構影響	2
(日)應物三 S09210006 陳冠妤 / 指導教授：李其紘	
Unsupervised machine learning on classification of quantum phases	3
(日)應物三 S09210007 吳軒宇 / 指導教授：吳桂光	
Simulating the special case on quantum computer	4
(日)應物三 S09210009 林峻瑋 / 指導教授：黃靜瑜	
MIM(Metal-Insulator-Metal)Resistive Random-Access Memory using a U-shaped structure	5
(日)應物三 S09210010 陳威儒 / 指導教授：黃家逸	
Enhancement of multiferroic properties for BiFeO ₃ films with Tb substitution	6
(日)應物三 S09210017 陳柏軒 / 指導教授：王昌仁	
以 AI 偵測神經細胞影像斷點	7
(日)應物三 S09210032 劉瑋琪 / 指導教授：施奇廷	
Structure and energy storage properties of ZrO ₂ thin films with Pt underlayers	8
(日)應物三 S09210035 林韋廷 / 指導教授：王昌仁	
在銀(100)和銅(100)表面單原子台階附近在場發射的能譜中觀察到奇怪的峰	9
(日)應物三 S09210037 洪彥芮 / 指導教授：蕭錫鍊	
Kosterlitz–Thouless transition from Convolutional neural network	10
(日)應物三 S09210039 林淑敏 / 指導教授：吳桂光	
Detecting the phase transition of q-state clock model through universal model	11
(日)應物三 S09210044 吳侑恩 / 指導教授：黃靜瑜	
拼接 Expansion microscope 超大型影像	12
(日)應物三 S09210049 柳昶維 / 指導教授：施奇廷	
單一螢光奈米鑽石的螢光異向性研究	13
(日)應物三 S09210051 劉彥柏 / 指導教授：林宗欣	

To realize quantum random walk on quantum computer simulator (日)應物三 S09210052 陳柏綦 / 指導教授：黃靜瑜	14
Three-dimensional lateral wires (日)應物三 S09210055 陳威融 / 指導教授：黃家逸	15
Magnetic properties and microstructure of Co/MnN/Ta thin films with MnNx insertlayer (日)應物三 S09210056 林柏霖 / 指導教授：王昌仁	16
classification of phases using autoencoder (日)應物三 S09210061 余彥承 / 指導教授：吳桂光	17
Improvement of Photovoltaic Conversion Efficiency of Dye-sensitized Solar Cells with scattering layer (日)應物三 S09920008 岳俊豪 / 指導教授：黃家逸	18



二維磷化矽半導體薄膜合成與特性分析

Synthesis and Characterization of Two-dimensional silicon phosphide semiconductor thin films

Kwan-Ho Fung (馮鈞皓)

Department of Applied Physics, Tunghai University, Taichung, Taiwan

前言

本研究之目的是在於合成二維磷化矽 (2D SiP) 半導體薄膜，並量測其光電與電導特性。

在眾多的二維半導體材料當中，眾所皆知的二硫化鉬 (molybdenum disulfide)、二硫化鎢 (tungsten disulfide) 是目前最廣泛被使用的，雖然其具有高能隙以及高遷移率等特性，但是其裡面都含有硫化物，而硫化物與矽基板的積體電路製程是不匹配的，因此我們再思考有沒有其他更好的材料可以來避免這個問題，而從文獻探討中我們發現磷化矽這個二維半導體材料，其元素與所使用的材料最有可能與矽基板的積體電路製程相互匹配，因此我們想嘗試合成二維少層磷化矽。

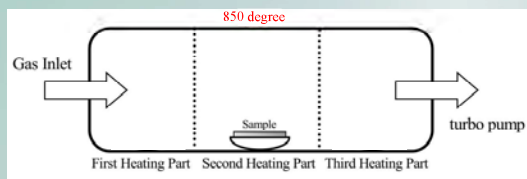
在目前所有的嘗試當中，我們可以透過 X 光繞射發現我們通入 200 sccm 的 PH_3 、5 sccm 的 SiH_4 、200 sccm 的 Ar，850°C 下，可以成功利用無觸媒化學氣相沈積法合成出具有正交晶系的磷化矽晶體，但是其從拉曼光譜與 X 光繞射皆可以看到多晶矽的成分。因此接下來會最先嘗試降低 SiH_4 的量或是提高 PH_3 的量，嘗試合成均勻的正交晶矽的磷化矽晶體。

目的

- 合成出“少層”的磷化矽薄膜
- 量測其載子遷移率 (Mobility) 與能隙 (Band Gap)

實驗系統

製程方法—化學氣相沈積法



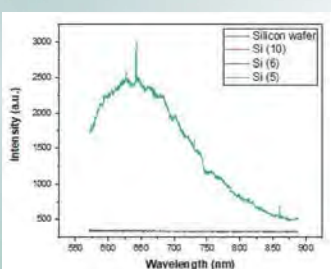
SiH_4 : 5 sccm
 PH_3 : 200 sccm
 Ar: 200 sccm

Process pressure: 50 torr
 Bass pressure < 10^{-6}

圖(一)：合成磷化矽的製程條件

結果

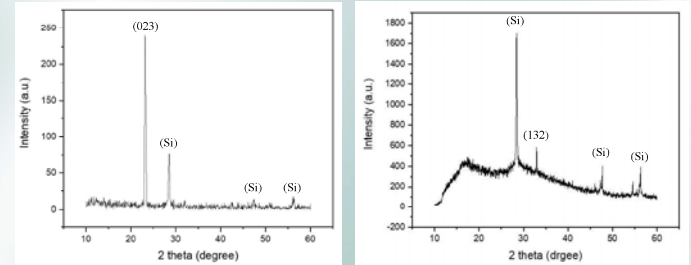
光致發光光譜圖 (532 奈米)



number	T (°C)	P (torr)	Ar (sccm)	PH_3 (sccm)	SiH_4 (sccm)
Si (5)	850	50	200	200	5
Si (6)	850	50	200	200	6
Si (10)	850	50	200	200	10

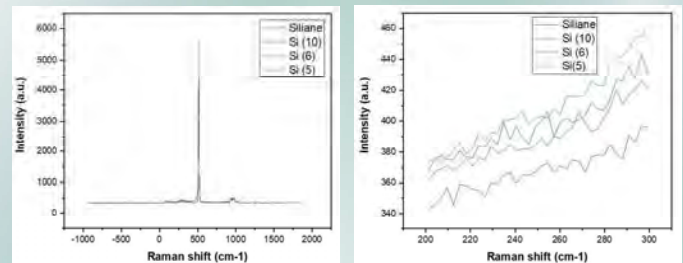
圖(二)：三種不同 SiH_4 比例的光致發光光譜圖

X光繞射圖



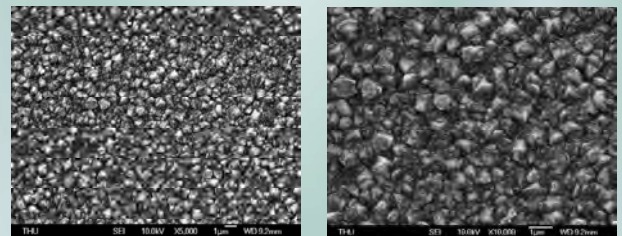
圖(三)與圖(四)： SiH_4 為 5 sccm 之低掠角與正上方的 X 光繞射圖

拉曼光譜圖



圖(五)與圖(六)：三種不同 SiH_4 比例的拉曼光譜圖

掃描式電子顯微鏡圖



圖(七)與圖(八)： SiH_4 為 5 sccm 之掃描式電子顯微鏡圖

討論與結論

- 從 XRD 測量結果顯示我們可以成功利用無觸媒化學氣相沈積法合成出具有正交晶系的磷化矽晶體。
- 但 XRD 與 Raman 皆有呈現出多晶矽的成分。
- 從光致發光光譜量測結果顯示，所合成出的樣品會發射出 500~750 奈米的螢光，其發光機制仍有待進一步探討。
- 接下來我們會嘗試合成出均勻之正交晶系的磷化矽以及少層的二維磷化矽薄膜。

參考文獻

- [1] M. Velický, P.S. Toth, **From two-dimensional materials to their heterostructures: an electrochemist's perspective**, *Applied Materials Today*, 2017, 9, 68–103.
- [2] V. Giacometti, B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, A. Kis, **Single-layer MoS_2 transistors**, *Nature Nanotechnol.* 2011, 11, 147–150.
- [3] F. Withers, T.H. Bointon, D.C. Hudson, M.F. Craciun, S. Russo, **Electron transport of WS_2 transistors in a hexagonal boron nitride dielectric environment**, *Science*, 2014, 4, 49–67

利用中子繞射探討Cu取代對FeMn₂O₄的磁結構影響

作者:陳冠妤(S09210006)

指導教師姓名:李其紘

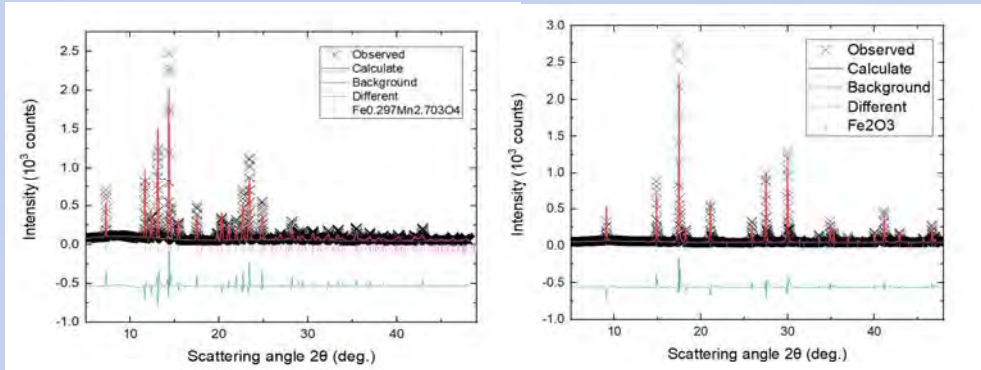
摘要

我在FeMn₂O₄與MnFe₂O₄中參雜Cu試圖改變材料的磁結構，並分別對個別樣品的價數、磁性、結構、磁矩排列…等，做進一步的分析和探討，找出是否出現有利於產生電極化的磁矩排列。並且我發現在相同化合物(Cu_xFe_{1-x}Mn₂O₄)中，成功製備出不同結構的樣品。之後將會利用散裂中子源技術將樣品送往澳洲利用中子繞射和中子散射進行分析樣品之結構。

實驗方法

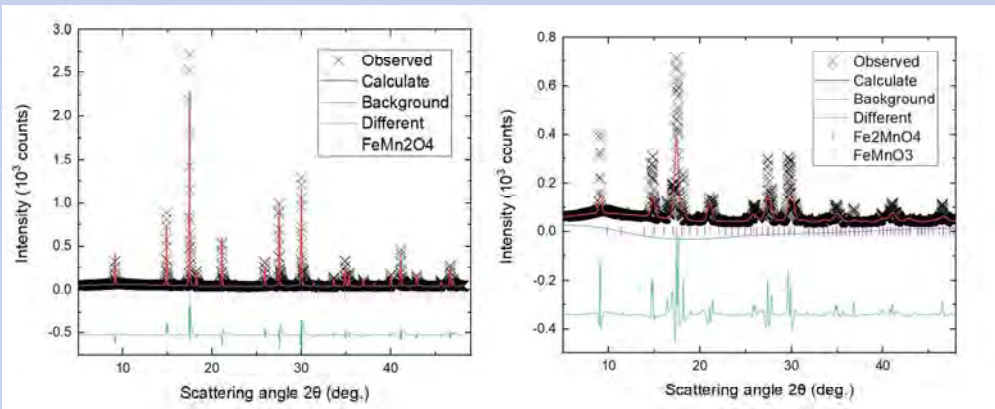
- 將CuO、Fe₂O₃、Mn₂O₃粉末照比例混合用高溫燒結法使不同化合物重新組合。
- 利用同步輻射中心的XRD觀察有無雜質。
- 並且分析個別樣品不同價數之長度及角度，來推測磁性。

實驗結果



Cu_{0.5}Fe_{0.5}Mn₂O₄_1100°C

Cu_{0.5}Fe_{0.5}Mn₂O₄_1400°C



Cu_{0.25}Fe_{0.75}Mn₂O₄_1100°C

Cu_{0.25}Fe_{0.75}Mn₂O₄_1300°C

Sample	Sintering temperature	Space group	
		Fd-3m	I4 ₁ /amd
Cu _{0.5} Fe _{0.5} Mn ₂ O ₄	1100°C		100%
Cu _{0.5} Fe _{0.5} Mn ₂ O ₄	1400°C	100%	
Cu _{0.25} Fe _{0.75} Mn ₂ O ₄	1100°C		100%
Cu _{0.25} Fe _{0.75} Mn ₂ O ₄	1300°C	92%	8%

表一

Space group	Bond	Bond length(Å)	Bond	Bond angle (deg.)
I4 ₁ /amd _[1]	O_Mn ³⁺	1.93	Mn ³⁺ _O_Mn ³⁺	96.3
	O_Mn ²⁺	2.02	Mn ²⁺ _O_Mn ³⁺	119.7
Fd-3m _[2]	O_Mn ³⁺	2.03	Cu ²⁺ _O_Mn ³⁺	120.5
	O_Mn ²⁺	2.03	Fe ³⁺ _O_Mn ²⁺	120.5

表二

- 我將化合物(Cu_xFe_{1-x}Mn₂O₄)改變Cu參雜的比例分別，以不同溫度燒結，透過同步輻射中心的XRD量測，得到了在相同化合物中，卻產生了兩個不同結構的結果，因此我認為溫度可能就是影響結構的主因。

- 在表一的兩組數據裡，可以發現當溫度較高時，整體結構偏向面心立方的Fd-3m結構；而當溫度偏低時，整體偏向體心四方的I4₁/amd結構。其中，在另一組合中我減少了Cu的參雜，其中在Cu_{0.25}Fe_{0.75}Mn₂O₄ 1300°C的樣品中，有可能是反應時間較少，導致於反應不完全，還有I4₁/amd的殘留，我之後將會持續於此樣品的研究。

- 在表二裡，我透過資料庫比對了在不同結構中，不同價數的Mn離子間的長度、角度。之後將會利用中子散射技術量測不同結構間的磁性，希望透過Cu的參雜發現利於產生電極化的磁矩排列。

未來規劃

量測不同價數的鍵結，長度、角度對磁性的關係

- 藉由X光吸收光譜(XANES)，量測鍵結的價數。[3]
- 利用中子繞射觀察不同鍵結的磁結構。
- 透過中子散射確認鍵長、角度。[4]

參考文獻

- [1] V. Baron ,et al.,Am. Mineral.83, 786-793 (1998)
- [2] Antic B.,et al.,J. Phys. Chem. B 108, 12646-12651 (2004).
- [3] Antonio Bianconi ,et al. , Appl. Surf. Sci. 6 (3-4): 392-418
- [4]王進威,et al.Physics Bimonthly 2021-04-20



Unsupervised machine learning on classification of quantum phases

Hsuan-Yu Wu¹, Kwai-Kong Ng¹

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

Abstract

Recently, an algorithm [1] has been developed to apply video compression methods to the imaginary time direction of data generated by quantum Monte Carlo (QMC) simulations, followed by quantum phase classification tasks performed by a convolutional neural network (CNN). This method was originally used for supervised learning. The present study further extends the method to unsupervised learning, attempting to distinguish different quantum phases of unknown ground state phases of quantum systems and identify corresponding quantum phase transition parameters. This method can also be applied to some thermal phase transitions to determine the critical temperatures for different phases.

Method

- Consider training data with a window boundary. If the data belongs to the same phase, it cannot be distinguished, otherwise, it can be distinguished.

unsupervised learning

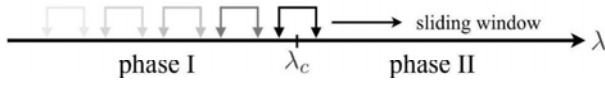


Fig1. Illustration of the operation process[2]

- The method of extracting data involves applying video compression to the imaginary time direction of data generated by quantum Monte Carlo (QMC) simulations and then using a convolutional neural network (CNN) to perform classification.

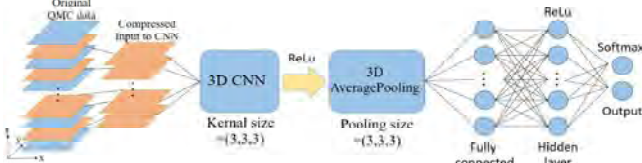


Fig2. The number of kernels is 32, the number of hidden layer neurons is 512, the loss function is binary cross-entropy, the optimizer used is Adam, and L2 regularization with a parameter of 0.08 is added.

- We use an extended hard-core boson Hamiltonian on a triangular lattice, as shown below.

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} (b_i^\dagger b_j + \text{H.c.}) + V \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \mu \sum_i n_i,$$

Results

- Quantum transition**

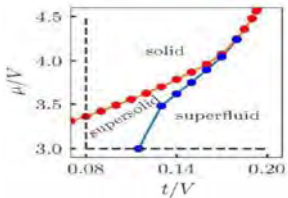


Fig3. Distribution of solid, supersolid, and superfluid states at T=0.01 in Quantum transition.[1]

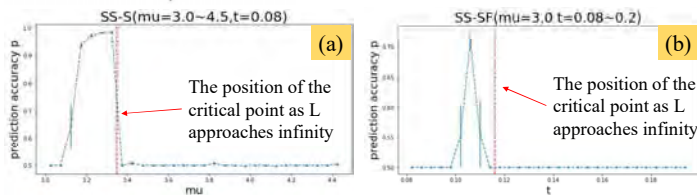


Fig4. Quantum transitions from (a) supersolid to solid and (b) supersolid to superfluid at L=18, with intervals of 0.05 and 0.004, respectively.

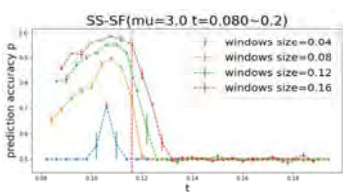


Fig 5. The variations in the results of window sizes in the results of Figure 4 (b).

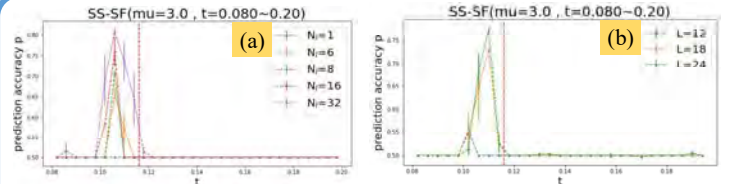


Fig 6. The variations in the results of (a) imaginary time layer N_t , and (b) lattice size L in the results of Figure 4 (b).

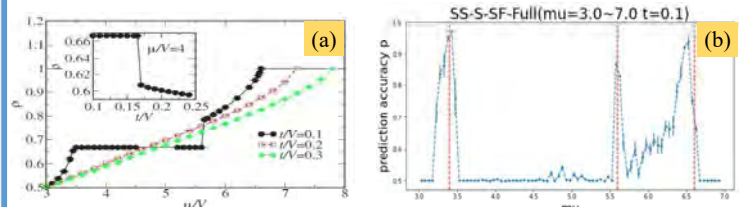


Fig 7. (a) The density of hard-core bosons graph along multiple phase transition paths[3], (b) where our model predicts the results. Here, $L=18$ with an interval of 0.1.

- Thermal transition**

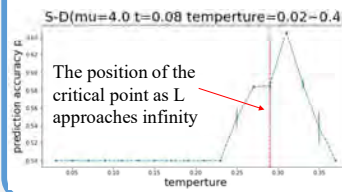


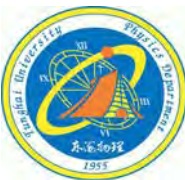
Fig 8. The thermal transition of solid at $L=18$, with intervals of 0.02.

Conclusion

- Without the need to pre-inform relevant state information, our method has been proven to be able to roughly capture the location of the critical point of quantum transition.
- By introducing imaginary time, our model can better capture the characteristics of the critical point.
- By changing the window size, we can better determine the approximate range of the critical point based on the width of the peak.
- In the future, it may be attempted to use extrapolation methods to search for the critical point as L approaches infinity.

References

- Physical Review B **99**, 121104(R) (2019)
- D.-R. Tan and F.-J. Jiang, arXiv:1707.00663v1
- PRL **95**, 127205 (2005)
- Physical Review B **102**, 224434 (2020)



Simulating variational wave functions on quantum circuit



C.W. Lin(林峻瑋)¹, C.Y. Huang(黃靜瑜)¹, C.T. Chan(詹傳宗)¹

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

Introduction

針對兩個Hermitian矩陣A與B，計算 $e^{-iA \otimes B}$ ，最簡單的做法先將 $A \otimes B$ 對角化，再拆解為特徵向量與特徵值矩陣的乘積。我們希望將 $e^{-iA \otimes B}$ 拆解成由許多不同的邏輯閘組成，並在量子線路上實現

$$A := \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\varphi} \\ \sin\theta e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \quad A = U_A \Lambda_A U_A^\dagger$$

展開後的形式 $W(\vec{\theta}) := e^{-iA \otimes B} = (U_A \otimes U_B)(e^{-i\Lambda_A \otimes \Lambda_B})(U_A^\dagger \otimes U_B^\dagger)$ 作用於初態 $|\Omega\rangle$ ，可以對應於變分波函數(variational wave functions)

$$W(\vec{\theta})|\Omega\rangle = |\varphi(\vec{\theta})\rangle, \text{ 其中 } \vec{\theta} = (\theta_A, \varphi_A, \theta_B, \varphi_B) \text{ 即為變分參數。}$$

A的特徵值矩陣為 Λ_A 特徵向量矩陣為 U_A

$$\Lambda_A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad U_A = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2)e^{i\varphi_1} & -i\sin(\theta/2)e^{-i\varphi_2} \\ -i\sin(\theta/2)e^{i\varphi_2} & \cos(\theta/2)e^{-i\varphi_1} \end{pmatrix}$$

運用旋轉矩陣 R_x 與 R_z

$$R_x(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -i\sin(\theta/2) \\ i\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \quad R_z(\theta) = \begin{pmatrix} e^{-i(\theta/2)} & 0 \\ 0 & e^{i(\theta/2)} \end{pmatrix}$$

特徵向量矩陣 U_A 可以拆解成旋轉矩陣的組合

$$U_A = R_z(\varphi_2 - \varphi_1)R_x(\theta)R_z(-\varphi_2 - \varphi_1)$$

$$U_A^\dagger = R_z^\dagger(-\varphi_2 - \varphi_1)R_x^\dagger(\theta)R_z^\dagger(\varphi_2 - \varphi_1)$$

$$e^{-i(\Lambda_A \otimes \Lambda_B)} = (\text{CNOT})(I \otimes R_z)(\text{CNOT})$$

選定角度

$$\theta = \pi/2 \quad \varphi_1 = -2\pi/3 \quad \varphi_2 = -\pi/3$$

設計量子線路



由此可以得知針對特殊矩陣，可以拆解為不同的旋轉矩陣組合，並對應於量子電路上中的邏輯閘設計。

A Concrete Example

以下考慮實際的例子：氫分子的Hamiltonian

$$H = g_0 I + g_1 Z_0 + g_2 Z_1 + g_3 Z_0 Z_1 + g_4 Y_0 Y_1 + g_5 X_0 X_1 =: \sum_Y g_Y H_Y$$

$$\text{猜測變分波函數: } |\varphi(\theta)\rangle := W(\theta)|\Omega\rangle := e^{-i\theta X_0 Y_1}|0,1\rangle$$

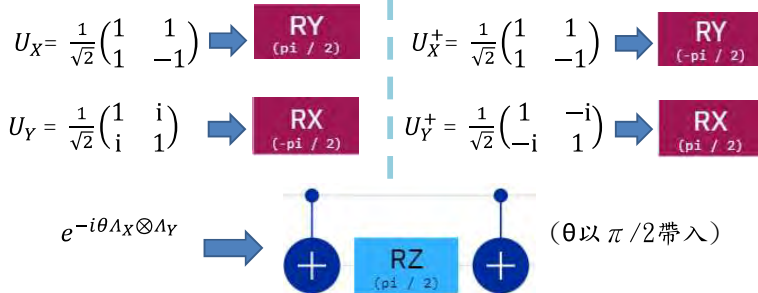
可以透過計算期望值得到能量 $E(\theta) = \sum_Y g_Y \langle \varphi(\theta) | H_Y | \varphi(\theta) \rangle$

Conclusions

- 量子模擬：將特定的Hermitian矩陣A和B的張量積進行展開，並在量子電路中實現，可以用於模擬量子系統的演化。這對於研究量子化學、量子材料等領域中的複雜量子系統是有幫助的。
- 量子計算：展開 $e^{A \otimes B}$ 並將其表示為由不同的邏輯閘組成的量子電路，可以用於執行特定的量子計算。此種表示法對於量子演算法、量子機器學習等領域中的計算有應用價值。
- 量子閘的組成和結構：將矩陣透過不同的邏輯閘組合，可以幫助研究量子閘的組成和結構。能有效開發更有效的量子閘、設計量子電路以及優化量子計算性能。

Experiment

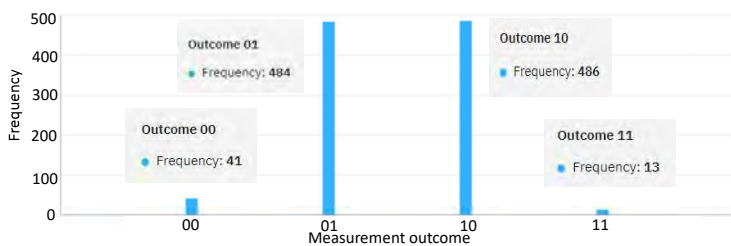
由先前經驗得知，對於 $e^{-i\theta X_0 Y_1}$ ，目前已知可以展開成 $(U_X \otimes U_Y)(e^{-i\theta \Lambda_X \otimes \Lambda_Y})(U_X^\dagger \otimes U_Y^\dagger)$ ，經由計算驗證後可以得知



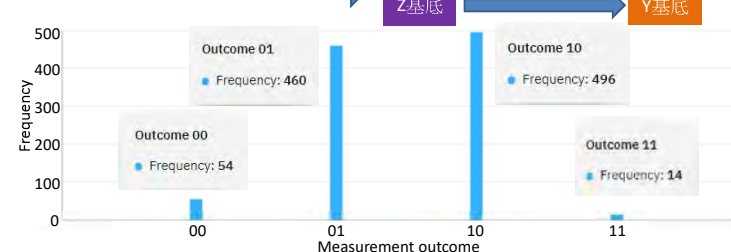
設計量子線路



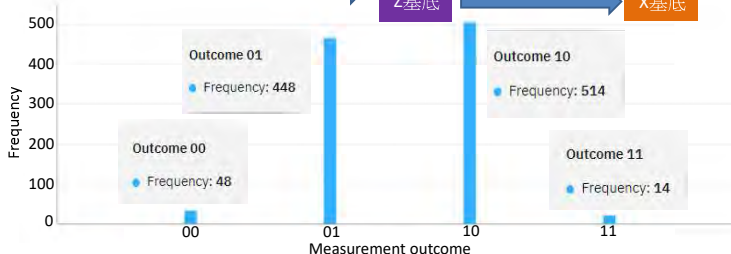
$Z_0, Z_1, Z_0 Z_1$ 測量結果的機率分布



$Y_0 Y_1$ 測量結果的機率分布



$X_0 X_1$ 測量結果的機率分布



$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= g_0 \langle I \rangle + g_1 \langle Z_0 \rangle + g_2 \langle Z_1 \rangle + g_3 \langle Z_0 Z_1 \rangle + g_4 \langle Y_0 Y_1 \rangle + g_5 \langle X_0 X_1 \rangle \\ &= -0.4804 + 0.010151367 - 0.011037304 - 0.51525 \\ &\quad - 0.0789140625 - 0.07998046875 = \mathbf{-1.15543046825} \end{aligned}$$

References

- O'Malley, Peter JJ, et al. "Scalable quantum simulation of molecular energies." Physical Review X 6.3 (2016): 031007
- Variational Quantum Eigensolver (VQE) Example <https://joshuagoings.com/2020/08/20/VQE/#a-first-attempt-at-a-quantum-circuit>

利用U型結構製作MIM電阻式記憶體



作者:陳威儒(S09210010)

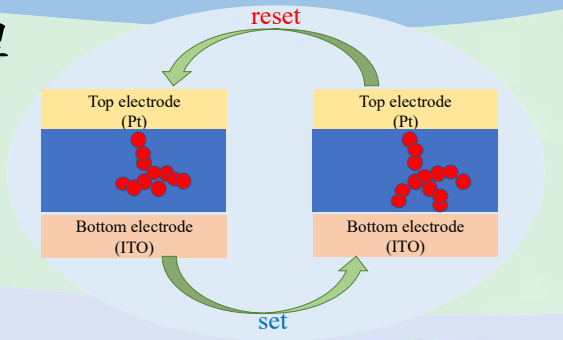
指導教師姓名:黃家逸*

S09210010@thu.edu.tw, *chiayihuang@thu.edu.tw

摘要

電阻式記憶體具有讀寫快速、低耗能、結構簡單、資料儲存時間長、重複操作可靠度佳與成本便宜等優勢，本實驗將使用黃光顯影的技術製造出U型結構，根據MIM結構的金屬-絕緣體-金屬結構，運用燈絲效應，由介電層的高阻態和低阻態之間的相互轉換，最後製作MIM電阻式記憶體。

原理

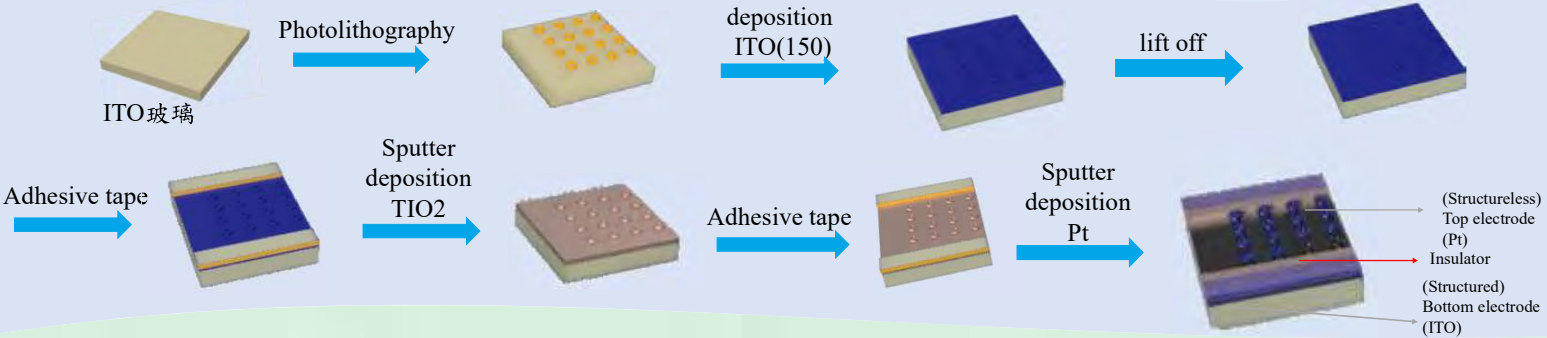


製程

Sputter deposition ITO(150)

Adhesive tape

結果

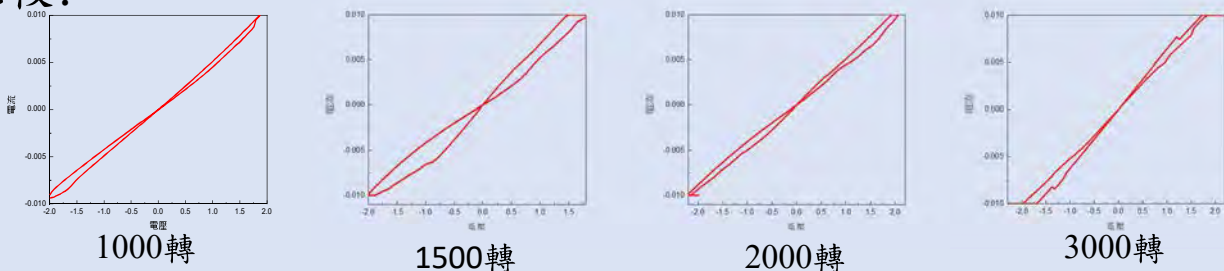


SEM圖:

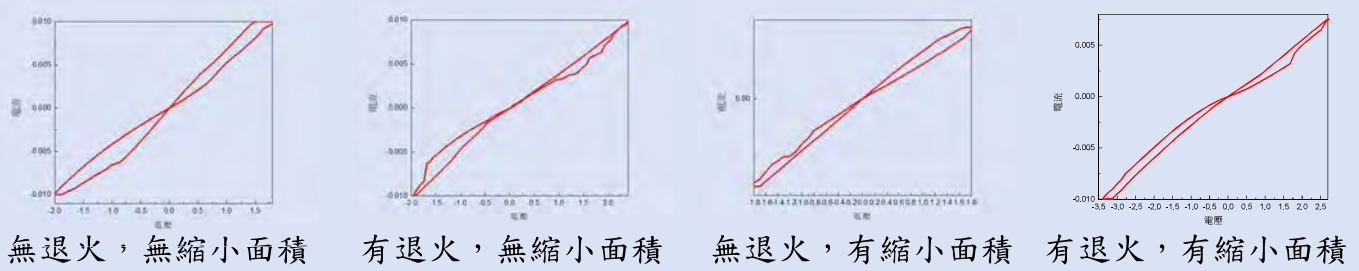


轉速比較:

I-V Curve 量測

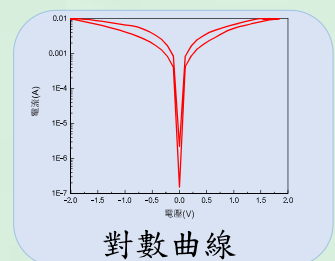


退火250度、縮小白金面積:



結論

末轉速為1500的樣品擁有較好的磁滯曲線，樣品經退火、以及完成樣品後縮減白金範圍，可讓I-V量測到的電壓範圍較廣，但是如果將退火完成後的樣品再縮減白金範圍，I-V量測到的電壓範圍不會更廣。





Enhancement of multiferroic properties for BiFeO₃ films with Tb substitution

P.H. Chen (陳柏軒)¹, T.K. Lin (林庭楷)², C.R. Wang (王昌仁)¹, H.W. Chang (張晃暉)^{3*}

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

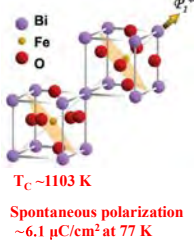
² Institute of Manufacturing Technology and Department of Mechanical Engineering, National Taipei University of Technology, Taipei, Taiwan

³ Department of Physics, National Chung Cheng University, Chia Yi, Taiwan

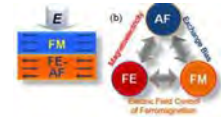
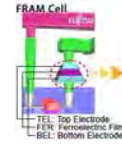
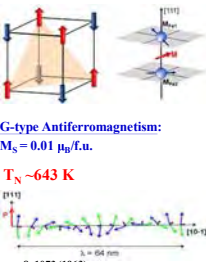


BiFeO₃ : Fundamentals

Ferroelectricity



Antiferromagnetism



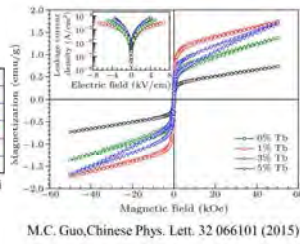
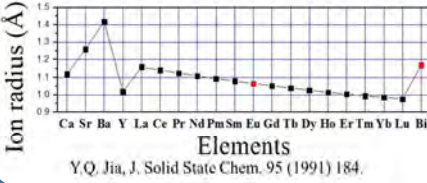
Teague et al. Solid State Commun. 8, 1073 (1963).

M. Bibes, et al. Nat. Mater. 6, 296 (2007).

Tb:

Ion radius : $\text{Bi}^{3+} > \text{Tb}^{3+}$

High magnetic moment ($9.75 \mu_B$)



Motivation and purposes

- We expect that substitution of Tb^{3+} ion with high magnetic moment could reduce the leakage and improve multiferroic properties.
- $\text{Bi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ (BTFO, $x = 0, 0.05, 0.10, \text{ and } 0.15$) thin films were prepared by pulsed laser deposition (PLD).
- In this work, a systematic investigation of the structural evolution, surface morphology, microstructure, leakage mechanisms, and ferroelectric and magnetic properties of BTFO films is reported.

Experiment

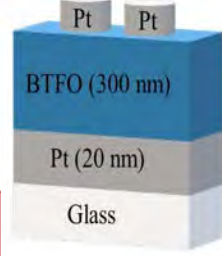
- Pulsed Laser Deposition (PLD)
- $\text{Bi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.00, 0.05, 0.10$ and 0.15)
- Background pressure : 5×10^{-6} Torr
- Formation temperature : $350\text{--}500$ °C
- Working Pressure : 30 mTorr (O_2)

XRD Structures

TF2000 Ferroelectric properties

VSM Magnetic properties

AFM/SEM Sample surface



Results and Discussion

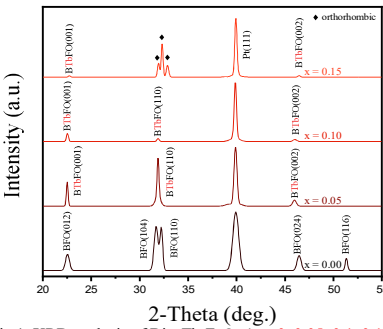


Fig.1. XRD analysis of $\text{Bi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0, 0.05, 0.1, 0.15$) films

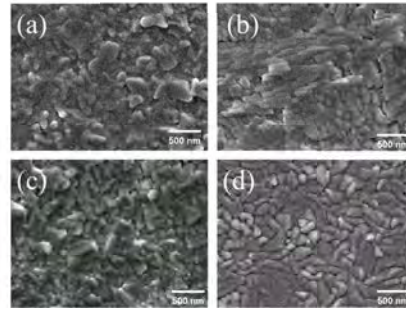


Fig.2. SEM images of $\text{Bi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ films, $x =$ (a) 0.00, (b) 0.05, (c) 0.10, and (d) 0.15.

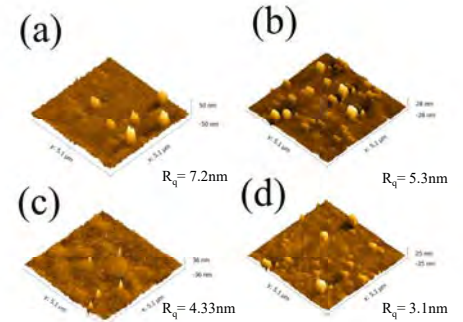


Fig.3. AFM images of $\text{Bi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ films, $x =$ (a) 0.00, (b) 0.05, (c) 0.10, and (d) 0.15.

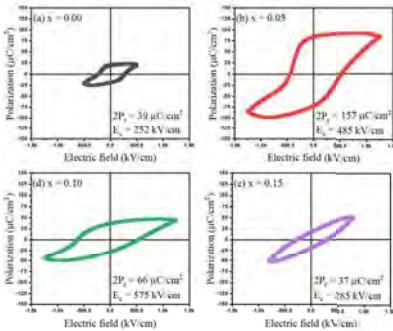


Fig.4. P-E Curve and of $\text{Bi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.00 - 0.15$) films

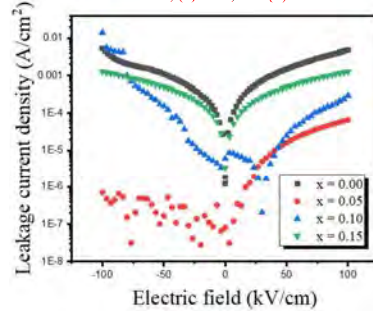


Fig.5. J-E Curve of $\text{Bi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.00 - 0.15$) films

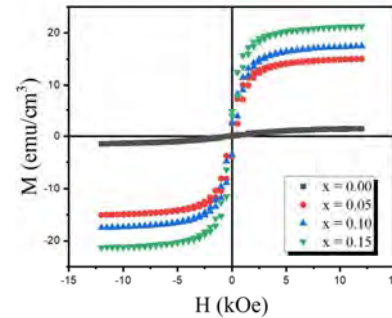


Fig.6. M-H curves of $\text{Bi}_{1-x}\text{Tb}_x\text{FeO}_3$ ($x = 0.00 - 0.15$) films

x	M_r (emu/cm ³)
0.00	2
0.05	15
0.10	17
0.15	21

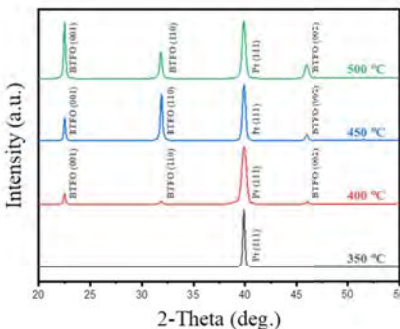


Fig.7. XRD patterns of $\text{Bi}_{0.95}\text{Tb}_{0.05}\text{FeO}_3$ films at various T_s .

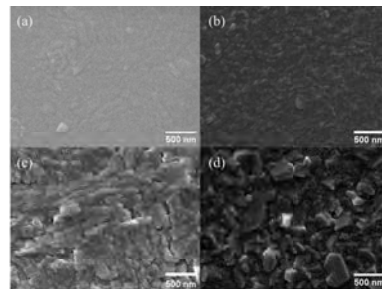


Fig.8. SEM images of $\text{Bi}_{0.95}\text{Tb}_{0.05}\text{FeO}_3$ films: $T_s =$ (a) 350 °C, (b) 400 °C, (c) 450 °C, (d) 500 °C.

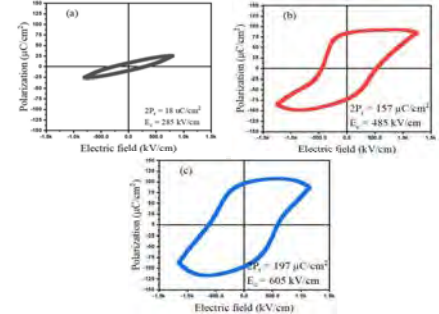


Fig.9. P-E curves of $\text{Bi}_{0.95}\text{Tb}_{0.05}\text{FeO}_3$ films: $T_s =$ (a) 400 °C, (b) 450 °C, (c) 500 °C

Conclusions

- $\text{Bi}_{0.95}\text{Tb}_{0.05}\text{FeO}_3$ thin film exhibits optimum electrical properties ($2P_r = 197 \mu\text{C}/\text{cm}^2$) at 400°C, superior to other international groups. Improved ferroelectric properties with increased remanent polarization, possibly due to suppressed leakage current resulting from the suppressed oxygen vacancy and the flattened interface, were observed for BTFO films with $x = 0.05$.
- Magnetic properties are enhanced due to Tb substitution, which might be related to higher magnetic moment of Tb^{3+} ion and suppressed spiral magnetic configuration.
- This work suggests that Tb-substituted BFO thin films on a Pt electrode buffered glass substrate at low deposition temperature may be a useful multiferroic material for applications.



以AI偵測神經細胞影像斷點

劉瑋琪

指導教授: 施奇廷 教授。
應用物理學系, 東海大學, 台灣。

摘要

為了重建大腦神經元連接網路, 第一步需要先取得單一神經元影像, 本實驗室開發之NeuroRetriever(NR)演算法可以將果蠅大腦原始影像(Raw image)自動在短時間內大量的切割出單一神經元。然而若原始影像一開始就存在斷點, 也就是說遇到周圍立體畫素亮度皆為零的區域, NR碰到斷點便會停止追蹤, 因而切割出不完整的神經元。

而本研究希望能改善此情形, 訓練AI能夠學習判斷神經元斷點的位置, 進而將斷點的影像亮度補上, 使得NR演算法遇到斷點也能切割出完整的神經元。

文獻介紹

NeuroRetriever

- 簡稱為NR演算法, 是由東海大學施奇廷教授開發出來, 可從充滿雜訊的原始果蠅神經影像(Raw image)中, 切割出乾淨單一神經元的全自動神經影像處理演算法。

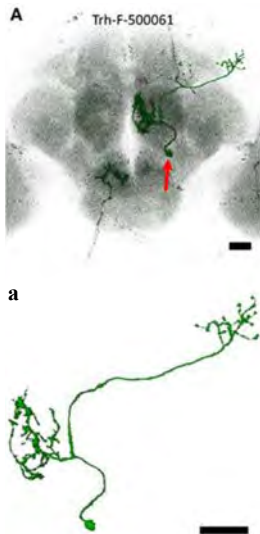


Fig.1 (A) 充滿雜訊的原始果蠅大腦神經影像 (a) NR演算法所切割出的乾淨單一神經元。
Chi-Tin Shih et al., "NeuroRetriever: Automatic Neuron Segmentation for Connectome Assembly", Front. Syst. Neurosci., Vol 15, page 5, (2021).

- 在NR發明以前, 切割單一神經元都是以人工的方式進行, 相當的耗時。

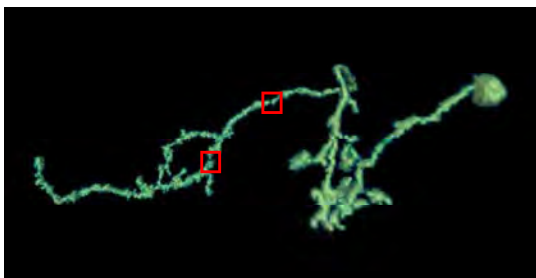


Fig.2 神經元影像上存在體素亮度接近零的影像不連續區(斷點)。

- 當人工進行神經元切割時, 切割者如果遇到神經元影像上體素亮度接近零的影像不連續區(斷點), 但附近有切割者認為是相連的神經元時, 在切割者的腦中便會自動將斷點補上體素亮度, 使得大腦判斷此為單一神經元影像並將其圈出為一個完整的神經元[2]。

卷積神經網路(CNN)

- 一種深度的機器學習, 利用統計與機率的理論讓電腦歸納出答案, 在影像辨識上有過人的功效[2]。

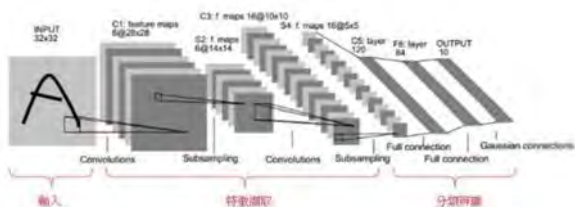


Fig.3 CNN神經網路。

周顯哲, 《使用卷積神經網路辨識果蠅神經影像上的斷點》, page 22, (2020)。

研究方法

Source Field code & Codelet

- 將神經元細胞本體(soma)的座標做為起點(體素編碼為1)進行編碼, 與編號1相接的體素則被編碼為2, 以此類推, 直到神經影像上所有的體素都被編碼完成, 這些編碼稱為Source Field code (簡稱為SF code)。
- 定義每三個SF code 為一組Codelet。

製造人工斷點

- 隨機的挑選Codelet, 並將在單一神經元影像中Codelet所對應到的位置上之體素影像亮度歸零, 製造出人工斷點。

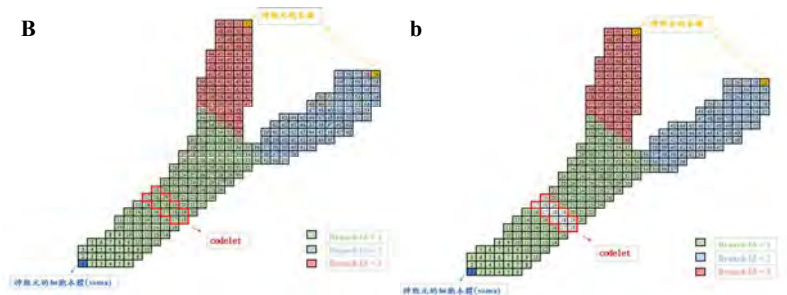


Fig.4 神經元示意圖。(B) 依序將神經進行Source field code編碼, 每三個SF code 為一組Codelet。(b) 隨機挑選Codelet, 並將Codelet對應到位置之體素影像亮度歸零。

標記訓練資料

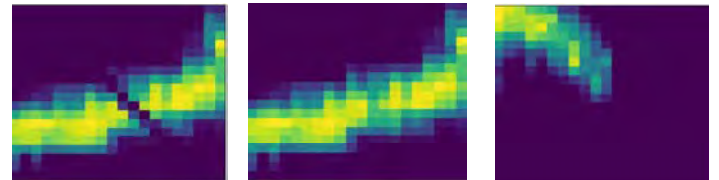


Fig.5 左圖為斷點之局部影像, 標記為「0」; 中間的圖為未斷點之局部影像, 標記為「1」; 右圖為未端點之局部影像, 標記為「2」。

CNN訓練

- 利用CNN來辨識果蠅神經影像中的斷點, 並給予相同數量標記好的斷點與非斷點訓練資料, 訓練CNN學習判斷斷點, 訓練好後, 再將其應用於未標記的神經元上。

預期結果

- 使CNN在辨認斷點與非斷點時, 有高度準確率, 達到AI自動偵測神經元細胞影像斷點的目標。

未來工作

- 利用AI達到自動偵測神經元細胞影像斷點後, 希望將其補上體素影像亮度, 使得NR演算法不會因影像亮度接近零而中斷、能夠順利的分割出單一完整的神經元, 以利用後續神經元上的研究。

參考文獻

- Chi-Tin Shih et al., "NeuroRetriever: Automatic Neuron Segmentation for Connectome Assembly", Front. Syst. Neurosci., Vol 15, (2021).
- 周顯哲, 《使用卷積神經網路辨識果蠅神經影像上的斷點》, (2020)。

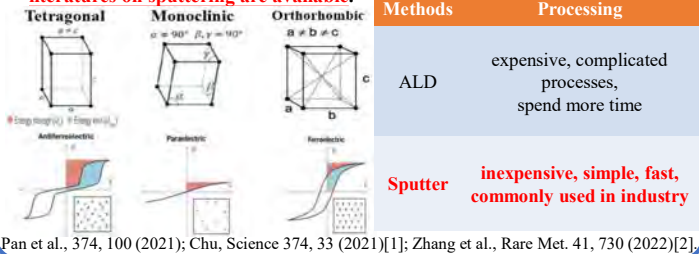
Structure and energy storage properties of ZrO₂ thin films with Pt underlayers on the glass substrates

W.T. Lin(林韋廷)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

- The **antiferroelectric** Zr-substituted HfO₂ (HZO) films show attractive energy storage properties.
- The much **higher power density** and **longer life** make electrostatic capacitors more appropriate for **energy storage applications**.
- HfO₂ and ZrO₂ exhibit **high breakdown field, eco-friendly, and good performance at low thickness**.
- Most efforts on ZrO₂ and HfO₂ prepared by ALD are made, but **rare literatures on sputtering are available**.

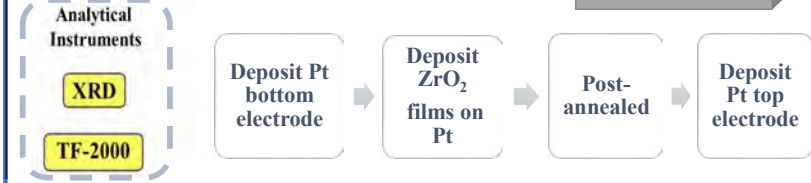
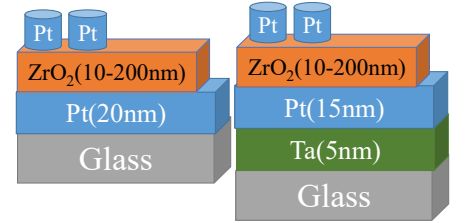


Pan et al., 374, 100 (2021); Chu, Science 374, 33 (2021)[1]; Zhang et al., Rare Met. 41, 730 (2022)[2]

Experiment

➤ **RF magnetron sputtering**
 Work power : 80-130 W
 Work pressure : 3-70 mT

➤ **Post-annealed treatment**
 Temperature :300-700 °C
 Time :10 min



Structure and Electric behaviors of ZrO₂ films (60nm) on Pt underlayers post annealed at various temperatures:

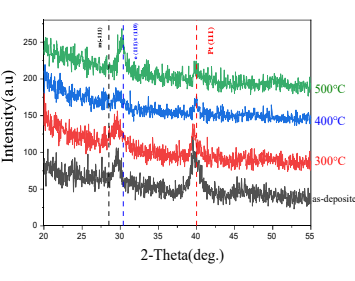


Fig. 1. GIXRD patterns of ZrO₂ films post-annealed 300-500 °C

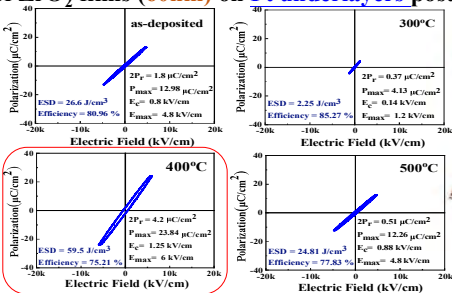


Fig. 2. P-E curves of ZrO₂ films post-annealed 300-500 °C.

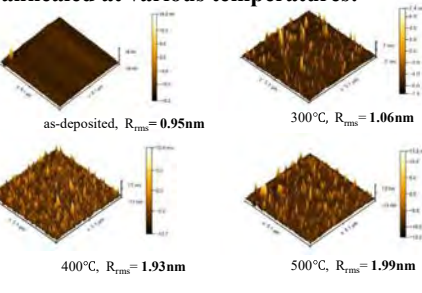


Fig. 3. AFM images of ZrO₂ films post-annealed 300-500 °C.

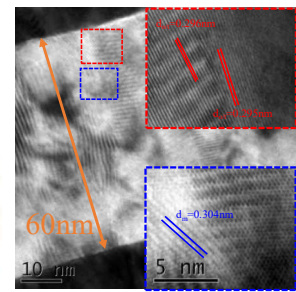


Fig. 4. TEM results of ZrO₂ films post-annealed 400 °C.

Structure of ZrO₂ films with various work pressure and power directly on glass substrates post annealed at various temperatures:

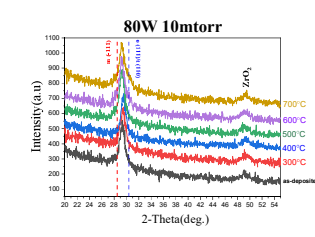


Fig. 5. GIXRD patterns of ZrO₂ films papered by sputter at 80 W and 10 mT and post-annealed at 300-700 °C.

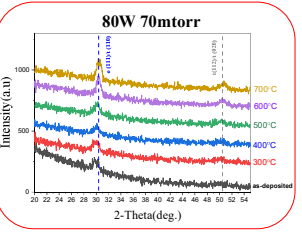


Fig. 6. GIXRD patterns of ZrO₂ films papered by sputter at 80 W and 70 mT post-annealed at 300-700 °C.

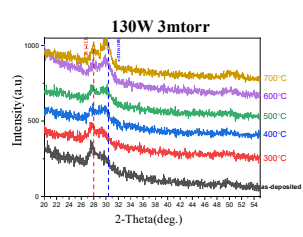


Fig. 7. GIXRD patterns of ZrO₂ films papered by sputter at 130 W and 3 mT and post-annealed at 300-700 °C.

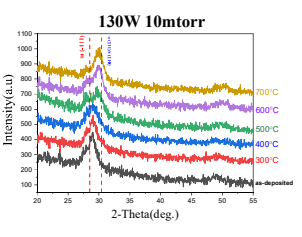


Fig. 8. GIXRD patterns of ZrO₂ films papered by sputter at 130 W and 10 mT post-annealed at 300-700 °C.

Phase composition of ZrO₂ films

60 nm/400 °C	m	o/t
80W 10mT	57%	43%
80W 70mT	3.4%	96.6%
130W 3mT	71.4%	28.6%
130W 10mT	75.6%	24.4%

XRD patterns of ZrO₂ films(50nm) on Pt / Pt/Ta underlayer / glass substrates:

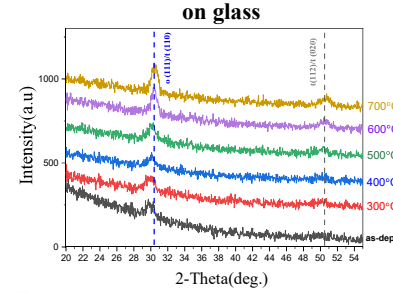


Fig. 9. XRD patterns of ZrO₂ films directly on glass post-annealed at 300-700 °C

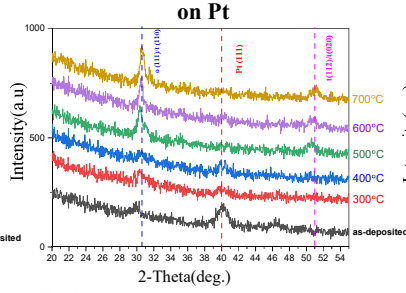


Fig. 10. XRD patterns of ZrO₂ films on Pt underlayer post-annealed at 300-700 °C

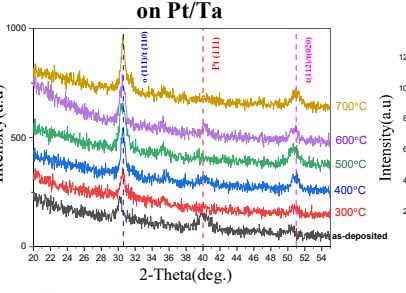


Fig. 11. XRD patterns of ZrO₂ films directly on Pt/Ta underlayer post-annealed at 300-700 °C.

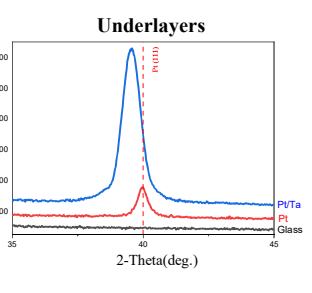


Fig. 12. Normal XRD patterns of underlayers

Conclusions

- ZrO₂ thin films with m, o, and t phases show a typical paraelectric behavior with high polarization, where paraelectric behavior leads to high efficiency, and large polarization contributes to high ESD.
- Most importantly, the highest of ESD up to ~59.5 J/cm³ and Efficiency up to ~75.21% attained for ZrO₂ films post annealed at 400 °C in this study, is larger than those reported by D. Das et al (ESD ~55 J/cm³, Efficiency ~ 57%), Park et al. (ESD ~46 J/cm³, Efficiency ~ 51%), Wang et al. (ESD ~75.4 J/cm³, Efficiency ~ 88%), Haiyan et al. (ESD ~87.6 J/cm³, Efficiency ~ 68.6%) (D. Das et al. IEEE ELECTRON DEVICE LETTERS, 42, (2021) 331.[3] ; [Park et al. Adv. Energy Mater. 2014, 4, 14006][4]; [Wang et al. Appl. Phys. Lett. 120, 023904 (2022)][5]; [Haiyan et al. Adv. Sci. 2023, 2300][6]
- The results of this work show that the ESD performance of ZrO₂ thin films can be optimized by changing the sputtering parameters and post-annealing conditions.
- Compared with only Pt underlayer, using Ta as the bottom film will make the Pt underlayer with better crystallinity and flatter surface, and it might be beneficial for the crystallinity and energy storage properties of ZrO₂, which is ongoing work.

material	Film thickness(nm)	methods	ESD (J cm ³)	Efficiency (%)	Ref.
HZO	7.1	ALD	55	57	[3]
HZO	9.2	ALD	46	51	[4]
ZrO ₂	470	sputter	75.4	88	[5]
HZO/Al ₂ O ₃ /HZO	16	ALD	87.6	68.6	[6]
ZrO ₂	60	sputter	59.5	75.21	this work



研究銀(100)和銅(100)表面單原子台階附近電偶極層對場發射共振能譜的影響

¹Yen-Jui Hung (洪彥芮), ²Shin-Ming Lu (呂欣明), ²Wei-Bin Su (蘇維彬) and ¹Hsi-Lien. Hsiao (蕭錫鍊)

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

²Institute of Physics, Academia Sinica, Nankang, Taipei 11529, Taiwan

摘要

本實驗利用穿隧掃描能譜術觀察在Ag (100)、Cu (100) 表面在台階附近場發射共振 (FER) 的變化。我們發現在下平台靠近台階處能量是最低的，接近台階上平台能量是最高的。經由FER在三角型位能井的分析。我們得到了三角形位能井的電壓 E_{int} ，根據我們最近的研究其代表在電場下的公函數； E_{int} 最高值與最低值分別對應到台階與上、下平台的交會處。我們認為這個現象是在台階側邊的電荷所造成的，我們觀察到Ag (100) 在台階處有小峰的結構出現，這個現象我們推測是由於Ag (100)、Cu (100) 台階兩側電偶極的差異造成的。

目的

利用STM間隙中的不均勻電場使金屬表面的電偶極層產生不均勻的分佈，進而在金屬表面產生局域位能井，研究位能井中量子捕捉，再從線寬探究金屬表面的電偶極層。

實驗方法

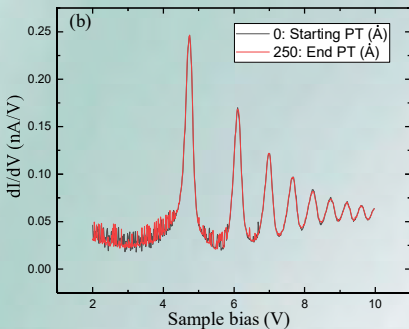
- 使用離子槍濺鍍轟擊 Ag(100)、Cu(100) 表面，然後在 600 °C 退火，進行數個循環。
- STM 在 5K 和超高真空中，以 PtIr 探針掃描樣品，並使用數值方法對 Z-V 能譜進行微分產生 dZ/dV 能譜。
- 使用鎖相放大器將頻率為 1001 Hz 的 30 meV 電壓調製到樣品偏壓中，會對穿隧電流產生一調變的訊號。

結果與討論

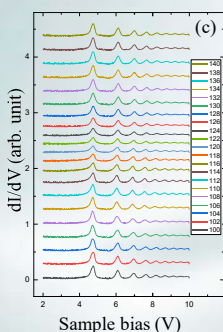
Cu (100)



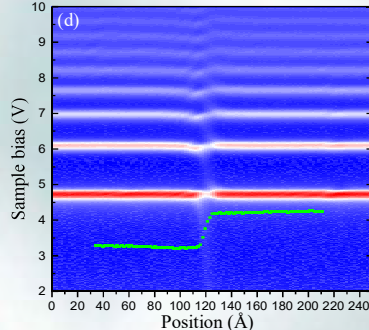
圖a. Cu (100) 表面單原子台階附近以2V、定電流 (500 pA) STM影像圖。圖中的虛線代表後續量測的起點與終點，從台階下方以250Å的範圍每2Å取一點取得其能譜至台階上方。



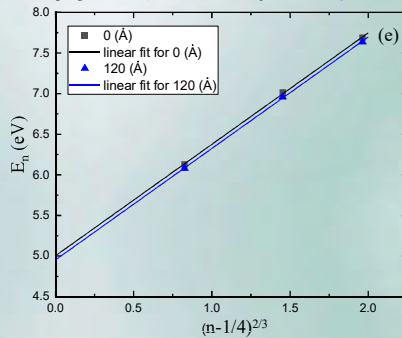
圖b. 掃描Cu (100) 表面單原子台階起點處與終點處的能譜圖。透過在起點處與終點處兩者能譜相同，可得知探針針形在掃描過程中沒有形變，且兩處表面的電子結構是相同。



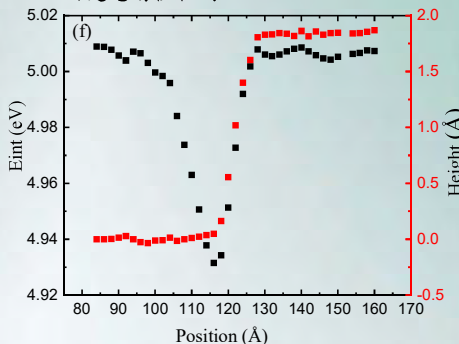
圖c. 台階附近距離起點處100 Å -140 Å的能譜圖；台階與下、上平台的交點分別距離能譜起點116Å、124Å。



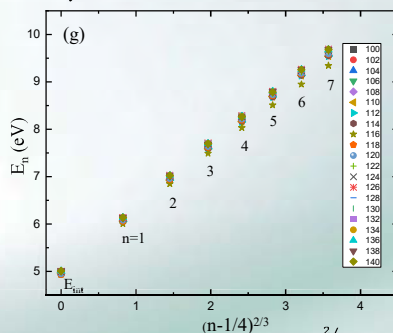
圖d. dI/dV lock-in 二維能譜圖，亦為位置與樣品電壓函數圖；上方白色區域為FER共振態，下方藍色插圖為掃描台階線剖面圖。在台階下平台靠近台階處，FER能量逐漸降至最低，跨越台階至上平台階，FER能量逐漸上升。此時能量略高於起始點能量，隨上平台處遠離台階，恢復至起始點能量。



圖e. 起點處與終點處的 FER1、2、3 能量值與 $(n-\frac{1}{4})^{2/3}$ 擬合圖，其呈現良好的線性關係，且兩處電場值相同。

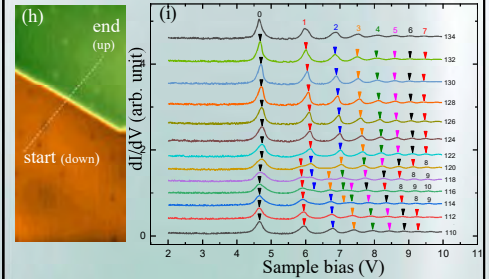


圖f. 位置與電壓 E_{int} 、高度的關係圖。在100Å (起點處) 和140Å處 E_{int} 分別5.0eV 和5.01eV，在下台階起點處116 Å有最低值 E_{int} 為4.93eV。



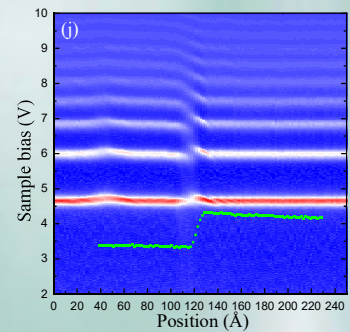
圖g. 為 (b) 能譜之 E_{int} 和電場 $(n-\frac{1}{4})^{2/3}$ 關係圖。 E_{int} 和電場可以由FER1、2、3 與 $(n-\frac{1}{4})^{2/3}$ 線性擬合得出，其為電場下的功函數。

Ag (100)



圖h. Ag (100) 表面單原子台階附近以2V、定電流 (1 nA) STM影像圖。圖中的虛線代表後續量測的起點與終點，從台階下方以250Å的範圍每2Å取一點取得其能譜至台階上方。

圖i. 台階附近距離起點110 Å -134 Å的能譜。我們發現在台階上距離起點114Å到120Å，在FER1-3之間有些小峰，這是在Cu (100) 上沒有觀察到的現象。Cu (100) 與 Ag (100) 的表面電子結構接近，認為小峰差異是兩者在形成台階幾何結構不同。



圖j. dI/dV lock-in 二維能譜圖，下方插圖顯示位置與樣品電壓函數圖，下方插圖顯示距離掃描起點處30Å至200Å經過台階之線剖面圖，台階與上、下平台交點分別在距離掃描起點處108Å、120Å。從下平台接近台階時，每個FER值先降低；接近台階上平台時，FER能量為最大值；接著隨著遠離上平台，FER能量值降低，其值與下平台幾乎相同。

結論

在Cu (100) 和Ag (100) 上觀察台階附近的能譜，透過dI/dV lock-in 二維能譜，我們發現在台階下平台靠近台階處，FER能量都會逐漸降至最低點；跨越台階至上平台階，FER能量值逐漸上升；在台階至上平台階交界處，FER能量值上升至最高點；在上平台處逐漸遠離台階時，恢復至與下平台起始點相同的能量。我們認為是因為電子從台階上平台側邊逸出至下平台。我們觀察在Ag (100) 能譜圖FER1-3之間有小峰的出現，這是與Cu (100) 不同的。雖然Cu (100) 與Ag (100) 的表面電子結構接近，我們認為小峰的差異是因兩者台階形成時的原子排列是不同的。接下來我們會透過原子級解析度影像的掃描、建構模型以及透過DFT的理論計算來解釋我們的所觀察到的物理現象。

Self-supervised learning on q-state clock model

Shu-Min Lin , Kwai-Kong Ng

Department of Applied Physics, Tunghai University, Taichung, Taiwan

為了尋找 q-state clock model 中的Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT)相變，從q=2的Ising model著手，構建Convolutional neural network(CNN)，以分類的方法預測spin configurations所對應之溫度。目前結果直至11類時model的準確度可以超過50%。

■ 介紹

- Self-supervised learning在訓練模型時會賦予資料label進行訓練。
- 以機器學習的方法，尋找q-state clock model 中的Berezinskii–Kosterlitz–Thouless (BKT)相變。
- q-state clock model模型主要是用以描述自旋組態的模型，不同的q值代表允許幾種不同方向的spin。
- BKT相變為q-state clock model 當q 值 ≥ 5 的時候才會出現的一種相變。

■ 研究方法

- (1)數據預處理(2)建立模型(3)訓練模型(4)評估模型準確度(5)進行預測
- 以機器學習的方法構建CNN模型。
- 以spin configurations為特徵。
- 溫度label以one hot encoding做數據預處理，此方法會賦予類別一向量，向量元素中只有一位為1其餘皆為0，多少個類別決定向量元素個數：

```
[[1. 0. 0. ... 0. 0. 0.]  
 [1. 0. 0. ... 0. 0. 0.]  
 [1. 0. 0. ... 0. 0. 0.]  
 ...  
 [0. 0. 0. ... 0. 0. 1.]  
 [0. 0. 0. ... 0. 0. 1.]  
 [0. 0. 0. ... 0. 0. 1.]]
```

Fig.1 One-hot encoding 示意圖

- 進行預測時，藉由BKT相變在臨界溫度時，出現某些異常特性來找尋臨界溫度。
- 以q-state clock model，q=2，溫度0.05~4(K)每0.05劃分一個溫度共80個溫度，每個溫度1000筆資料，共80000筆的資料訓練model，並以分類方式尋找相變臨界溫度。

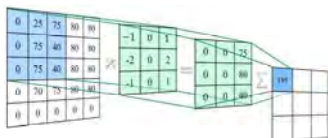


Fig.2 kernel特徵擷取示意圖

■ 結果與討論

- 結構為兩層的2D CNN model，參數kernel數分別為128、64；kernel size 3x3；pooling size 2x2；L=20。
- 將溫度等分5類，模型的validation accuracy 到達80%。
- 將溫度等分11類，模型的validation accuracy 到達60%。
- validation accuracy突然到達震盪平均後準確度便不隨訓練次數增加而增加。

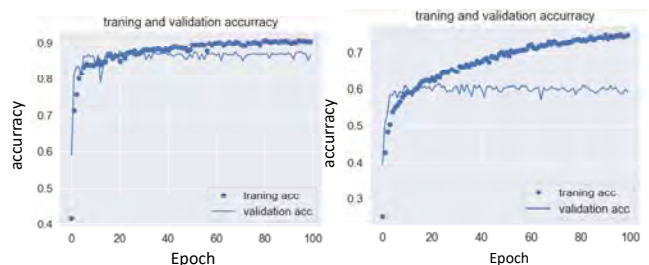


Fig.3 5個分類溫度之model的accuracy

Fig.4 11個分類溫度之model的accuracy

■ 未來的方向

- 將訓練後的模型進行預測。
- 目前只涉及q-state clock model 當q=2時的Ising model，未來會嘗試q為其他值的狀況。
- 嘗試優化模型準確度。
- 分類方法其侷限性在於只能得到某些特定值的溫度所以接下來將嘗試regression方法來實現能夠預測任意溫度的model。

■ References

[1] New J. Phys. 24 (2022) 043040



Detecting the phase transition of q-state clock model through universal model

Yu-En Wu¹, Ching-Yu Huang¹, and Kwai-Kong Ng¹,

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



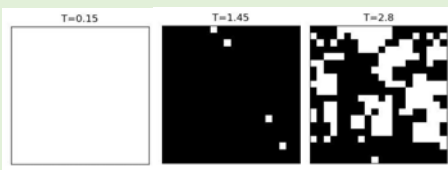
簡介

- 非監督式學習的自動編碼器結構學習自旋晶格系統
- 預訓練通用模型來降維分析不同晶格系統
- 通過自旋組態的切割與預訓練模型，能夠使用同一預訓練模型，推廣分析不同 q-state clock model 與不同維度之自旋晶格系統

研究方法

自旋晶格(Square lattice)系統與資料模擬

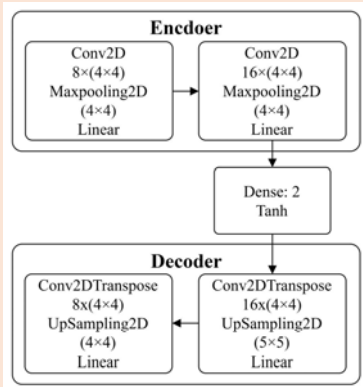
- q-state clock model $H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)$
- $\theta_i = \frac{2\pi k}{q}$ with $k = 1, 2, \dots, q-2, q-1$
- Monte Carlo Wolff algorithm



圖一、L=20 two-state clock model (白色：spin down、黑色：spin up)

自動編碼器

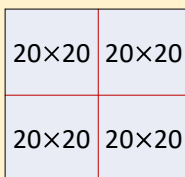
- Python 套件: Tensorflow, numpy, matplotlib...
- 使用 L=20 two-state clock model 進行預訓練



圖二、自動編碼器架構設計

分析晶格系統的資料處理

- 使用預訓練的 Encoder 模型進行降維
- $q > 2$ ：將自旋晶格中的方向數字標準化到 0~1 之間
- $L > 20$ ：將自旋組態切割成 $(\frac{L}{20})^2$ 個自旋組態降維
- 例如：L=40 可以切割成 4 個 L=20 的自旋組態

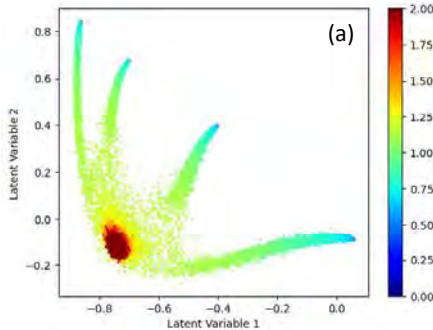


參考文獻

- [1] S. Acevedo, M. Arlego, and C. A. Lamas, Phys. Rev. B 103, 134422 (2021)
- [2] Constantia Alexandrou, Andreas Athenodorou, Charalambos Chrysostomou, and Srijit Paul, Eur. Phys. J. B 93: 226 (2020)
- [3] Guanrong Li, Kwok Ho Pai, and Zheng-Cheng Gu, Phys. Rev. Research 4, 023159 (2022)

Four-state clock model 結果

- Four-state 有兩種狀態：有序態和無序態
- 使用此方法找到臨界溫度約為 $T_C \approx 1.12$



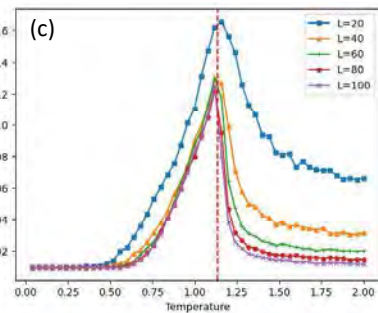
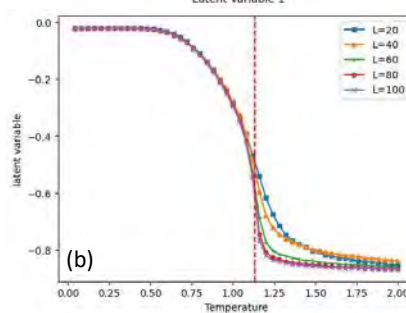
圖三、Four-state

(a) 在 L = 60 下的潛在變數座標分布

(b) 單一潛在變數

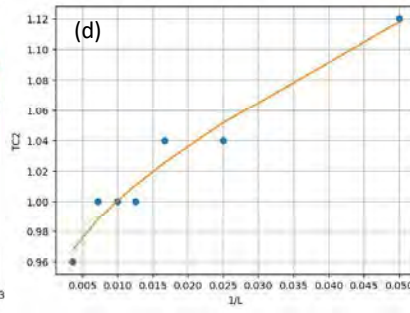
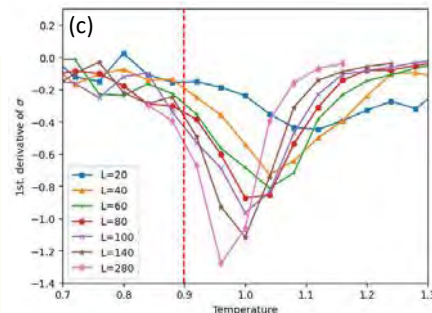
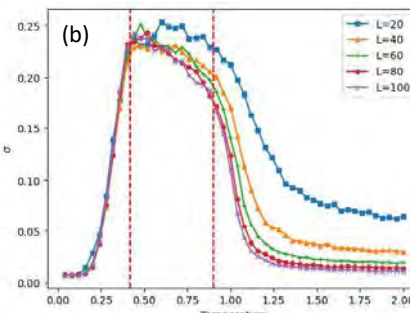
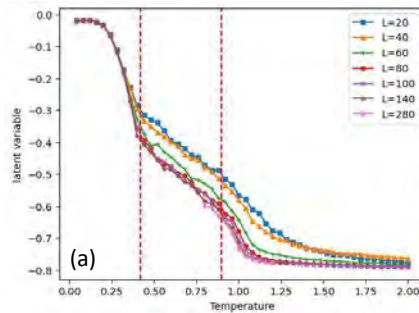
(c) 單一潛在變數標準差

(紅虛線的溫度為理論臨界溫度 1.1345)



Eight-state clock model 結果

- Eight-state 有三種狀態：有序態、拓樸態、無序態。



圖四、Eight-state (紅虛線為[3]的數值解 $T_{C1} \approx 0.423$ 、 $T_{C2} \approx 0.899$)

(a) 單一潛在變數 (b) 單一潛在變數標準差 ($T_{C1} \approx 0.40$) (c) 標準差之一階導數

(d) 擬合熱力學極限 $T_{BKT}(L) = T_{BKT} + a \frac{T_{BKT}}{(\log(L)+c)^2} \cdot T_{BKT} \approx 0.8876$

結論

- 非監督式學習可以找到自旋晶格系統的特徵
- 透過預訓練模型，能用來分析不同 state clock model 的自旋組態晶格相變狀態，大幅減少資料處理時間
- 切割自旋組態進行降維，使方法不受晶格大小、q-state 與維度限制

Stitching Expansion Microscope image

Chang-Wei Leou, Chi-Tin Shih

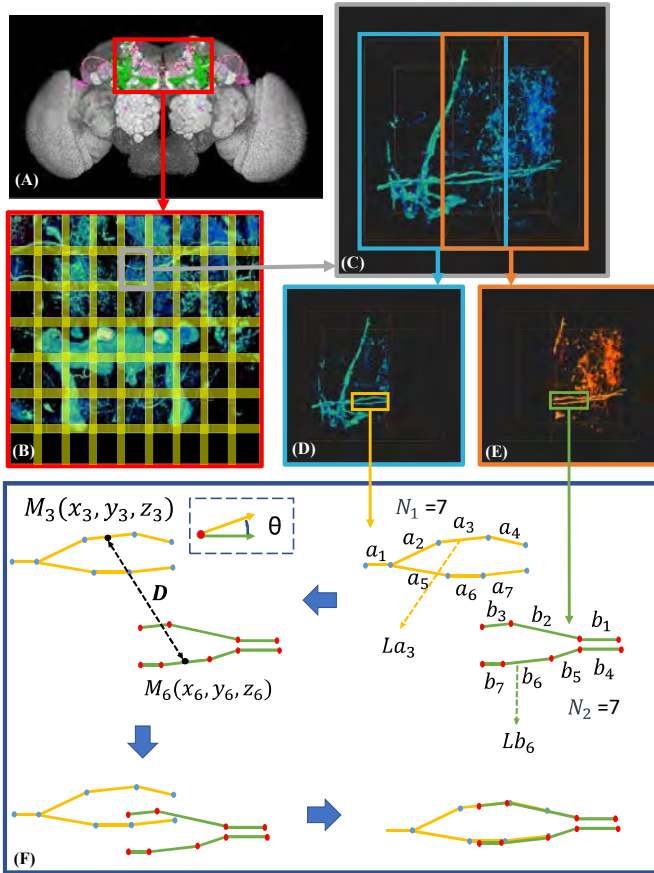
Department of Applied physics, Tunghai University, Taichung, Taiwan

Abstract

In this study, I aim to develop an algorithm for reconstructing *Drosophila* brain expansion microscope images composed of hundreds to thousands of 3D images. By leveraging the overlapping regions between the images, I utilize a FAST-based approach to extract the structural information. Subsequently, a similarity table will be constructed by calculating the similarity using a given function. Finally, the best alignment positions will be determined based on the similarity table.

Introduction

- Due to optical microscopes resolution limit (about 300 nm), which is insufficient for resolving synaptic connections in the *Drosophila* brain (about 10 nm). Expansion microscopy is employed to uniformly expand the *Drosophila* brain by approximately 10-fold to achieve higher resolution imaging.
- However, as the entire expanded brain cannot be captured in a single shot, multiple images are taken (figure B). Specifically, intentional overlapping regions are captured to facilitate the subsequent stitching and reconstruction of the complete *Drosophila* brain image.



(A) is a complete *Drosophila* brain. (B) represents the expansion microscope image of the red rectangular region in (A). The yellow lines in the image indicate the overlapping areas between the adjacent blocks. (C) is one of the images from (B). (D) & (E) are (C) divided along the x-axis. (F) represents the extracted skeleton information after applying the FAST algorithm to (D) and (E). La_3 & Lb_6 are the length of linesegment a_3 , b_6 . M_3 & M_6 are the middle point of a_3 , b_6 .

Method

1. In order to prove the concept, we divide an expansion microscope image (figure C) into two parts along the x-axis, with an overlapping region (figure D & E). We then apply the FAST^[1] algorithm to both images to extract structural information (figure F).

2. After obtaining the structural information, calculate the midpoint and vector for each linesegment (figure F). Then, utilize the similarity function S to calculate the similarity between each line segment.

$$S = \frac{\langle l \rangle}{D} + |\cos \theta|$$

$$\langle l \rangle = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^{N_1} \frac{La_i}{N_1} + \sum_{j=1}^{N_2} \frac{Lb_j}{N_2} \right)$$

$$D = \sqrt{(x' - x)^2 + (y' - y)^2 + (z' - z)^2}$$

3. Generate a table where first row represents the left segment and first column represents the right segment. Then, identify the highest S in each row and calculate the sum of these values, resulting in an energy that represents the degree of proximity between the two segments at that particular position.

	b_1	b_2	...	b_{N_2}
a_1	S_{11}	S_{12}	...	$S_{N_2 1}$
a_2	S_{21}	S_{22}	...	$S_{N_2 2}$
\vdots	\vdots	\vdots		\vdots
a_{N_1}	$S_{N_1 1}$	$S_{N_1 2}$...	$S_{N_1 N_2}$

4. Move two segments closer to each other (figure F) and repeat steps 2 to 3.
5. By repeat above steps, could obtain the best position for each segment (figure F).

Future work

- Find a way which can have higher efficiency to get the highest similarity values in each row of the table and complete stitching.

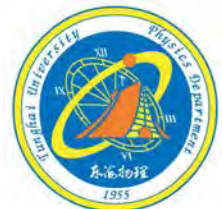
Reference

1. Chi-Tin Shih *et al*, *Front. Syst. Neurosci*, Vol 15
2. FEI CHEN *et al*, *Science*, Vol 347, pp.543-548



單一螢光奈米鑽石的螢光異向性研究

劉彥柏 林宗欣
東海大學應用物理學系



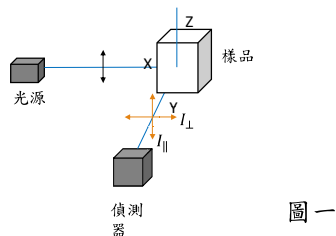
摘要

本研究利用共焦式螢光顯微鏡量測35nm單一螢光奈米鑽石的螢光異向性，瞭解其結構中氮-空
缺中心(N-V center)指向分布。首先使用Python對N-V center模型進行空間中指向模擬，得出螢光異向
性值的分布情況。最後，再與實驗結果做比較。

螢光異向性(Fluorescence anisotropy)

螢光結構中，吸收耦極和輻射耦極具有特定的
指向，造成了螢光異向性的產生。當一具有偏振的
激發光打入樣品時(圖一)，樣品所產生的螢光會具
有和激發光平行，和激發光垂直的螢光，此時可將
前述分別定義為 I_{\parallel} 、 I_{\perp} [1]。

螢光異向性值定義為 $r = \frac{I_{\parallel} - I_{\perp}}{I_{\parallel} + 2I_{\perp}}$



圖一

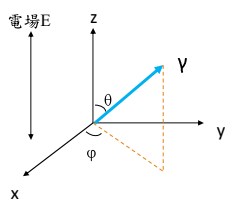
螢光異向性計算

當一平行z軸的激發光，激發耦極 γ 時(圖二)， I_{\parallel}
和 I_{\perp} 可寫成:

$$\text{Dipole } \gamma = (\sin\theta\cos\phi, \sin\theta\sin\phi, \cos\theta)$$

$$I_{\parallel} = |E \cdot \gamma|^2 * |Y_{\parallel}|^2$$

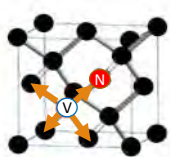
$$I_{\perp} = |E \cdot \gamma|^2 * |Y_{\perp}|^2$$



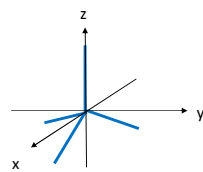
圖二

螢光奈米鑽石晶體結構

螢光奈米鑽石的發光機制為兩個碳原子分別被
氮和空缺所取代，形成氮-空缺中心[2]。由於鑽石晶
體結構為四面體，而氮所取代的位置可能為4個指向
(圖三)，依此建立N-V center模型(圖四)。



圖三



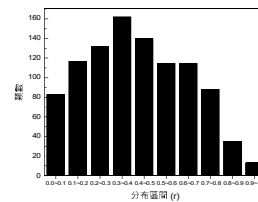
圖四

單一螢光奈米鑽石的螢光異向性計算

單一螢光奈米鑽石中，N-V center的數量至少大
於10個，此時我們假設四個方向出現機率相同，且
為了模擬自然情況下的指向分布，我們採用z-x-z軸
方式旋轉，最後利用平均方式計算r值。

Python 模擬計算

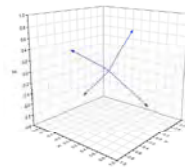
N-V center模型投擲1000次，螢光異向性的分布圖
(圖五)，圖中可以得到單一螢光奈米鑽石的r值分布
為0~1，且最大數量分布位於r=0.3~0.4。



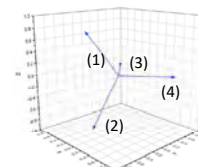
圖五

螢光異向性圖像化

r趨近於0時，N-V center模型在空間中指向分布
(圖六)，由於四個指向所貢獻 I_{\parallel} 、 I_{\perp} 相同，所以其值
接近零。r趨近於1時，N-V center模型在空間中指向
分布(圖七)，由於指向(3)(4)被激發機率很低，而指
向(1)(2)和z軸夾小角度 I_{\parallel} 貢獻較多 I_{\perp} 貢獻較少。



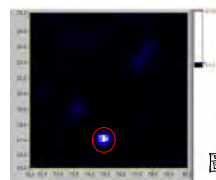
圖六



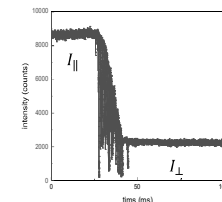
圖七

35nm螢光奈米鑽石(FND)螢光異向性測量

實驗中我們先掃描螢光奈米鑽石樣品找出奈米鑽
石位置(圖八紅框處)，接著我們會針對該點進行螢光
異向性測量。測量方法為轉動螢光偏振片，且取最大
值為 I_{\parallel} 最小值為 I_{\perp} (圖九)。其所對應的 $r = 0.490$ 。



圖八



圖九

結論

透過軟體模擬，瞭解螢光異向性r值的分布狀況，
且由結果分布圖得知，單一螢光奈米鑽石r值為0~1分
布，最大分布位置於r=0.3~0.4。實驗目前已量測出
單一螢光奈米鑽石的螢光異向性。

參考文獻

- [1] Joseph R. Lakowicz (2006). "Principles of Fluorescence Spectroscopy" pp.353~358.
- [2]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。



To realize quantum random walk on quantum computer simulator

BoChen-Chen, JingYu-Huang

Department of Applied Physics, TungHai University, Tauchung, Taiwan



Abstract

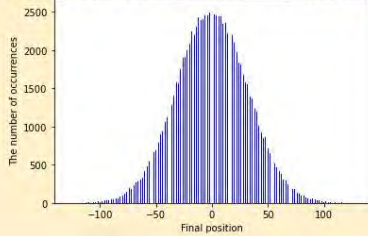
上學期的研究主要是使用古典電腦去模擬Classical Random Walk 以及Quantum Random Walk。本學期的研究主要是利用Python中的Qiskit套件，去設計量子電路，透過研究論文，將論文中的Quantum Random Walk 在量子電腦上實現，並將結果和上學期使用古典電腦模擬的結果去做比較。

Introduction

● Classical Random Walk

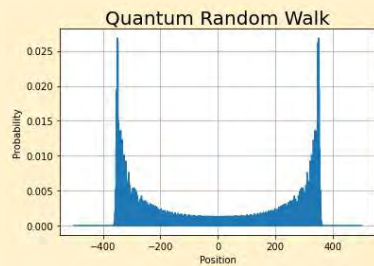
一維的Classical Random Walk，假設初始位置為原點，投擲一枚硬幣，若是硬幣為正，則向右移動一步，反之則向左，連續投擲n次 將有 2^n 種結果。若是重複多次，則最終得到的位置vs.出現次數分佈圖，將呈現高斯分佈。

Simulate the coin toss (Samples: 100000, Steps: 1000)



● Quantum Random walk

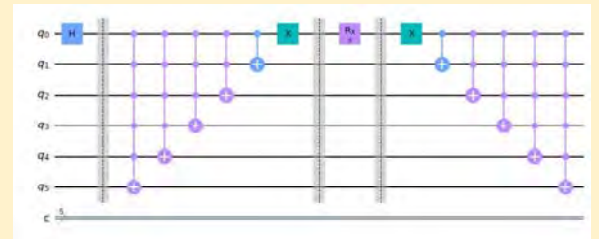
在Quantum Random Walk 裡，隨著使用的 Quantum coin 的Initial State改變，獲得的結果會有所不同。論文中所使用的 Quantum Coin 的Initial State為 $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + i|1\rangle)$ ，以下是其模擬圖，其結果為 雙峰圖形。



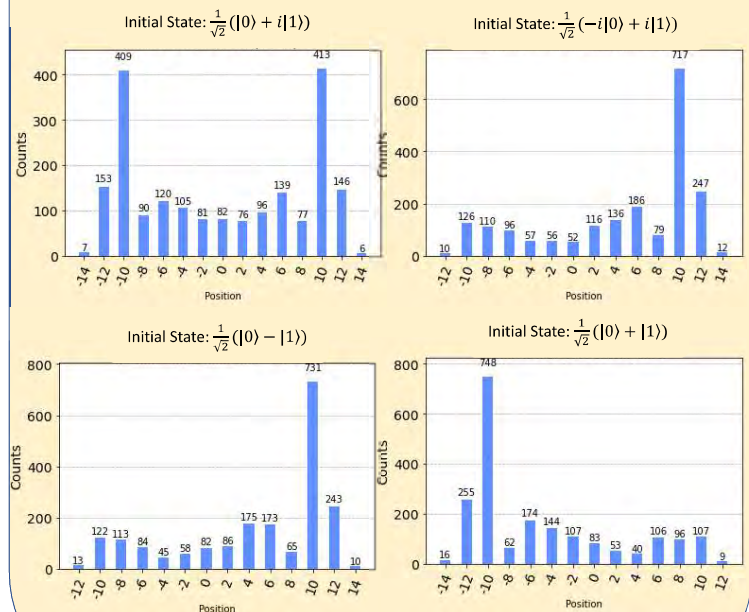
Implement on Quantum Computer

● 設計量子電路

One Step:



● 不同Initial State 下的結果 (16 steps, shots=2000):



Application

1. 搜索算法：如在未排序的數據中尋找特定項目
2. 圖論問題：如某些特殊圖結構，在短時間內找到最優解
3. 量子模擬：如模擬量子系統的動力學演化，透過在Quantum Random Walk 引入特定演化算子可以模擬複雜的量子系統，如分子行為或量子相變

Reference

- [1] Quantum random walks - an introductory overview
- [2] Implementation of quantum walks on IBM quantum computers

three-dimensional lateral wires

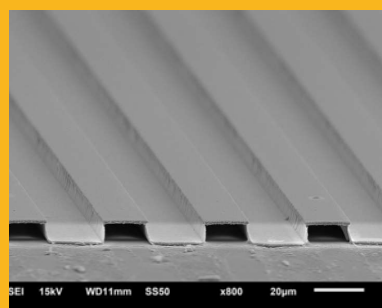
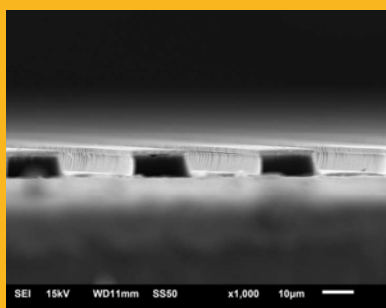
姓名: 陳威融 指導教授: 黃家逸

摘要

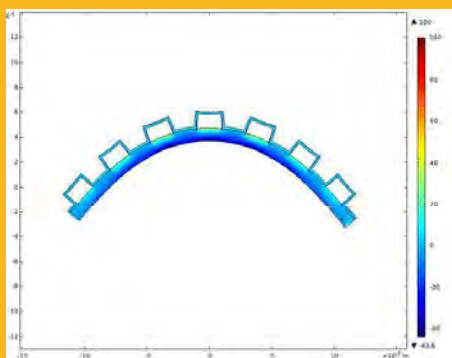
可撓式技術已經被廣泛利用在各種領域上，現階段較大的問題是可撓式基板彎曲久了平面導線可能脫離基板甚至斷裂，進而影響產品的性能和品質。因此我們嘗試開始製作三維導線，使產品在多次彎折下也能維持一定的性能，並同時延長其壽命。

數據

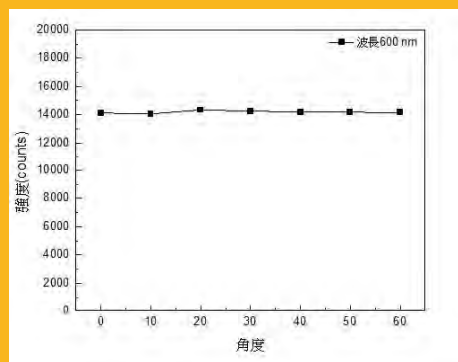
結構：



應變模擬：



應變(%)



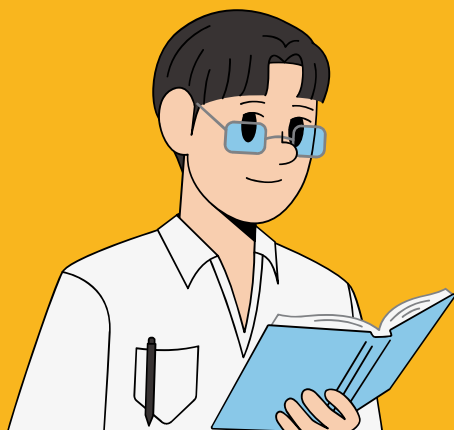
將導線外接LED晶粒，以光纖量測LED晶粒光譜，取波長600 nm的光進行分析。觀察不同彎折角度下，光強度(counts)的變化

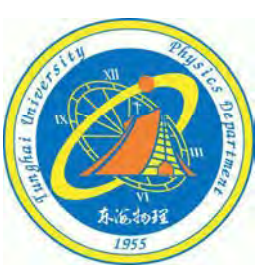
結論

與正常的平面導線不同，增加一個維度的三維導線有矩形掏空部分，使其有空間承受應變增加導線的可撓性和壽命。

參考資料

Yiming Liu¹, Yeshou Xu², Raudel Avila³, Chao Liu¹, Zhaoqian Xie^{6,1,4}, Lidai Wang^{6,1,5} and Xinge Yu⁶, Nanotechnology, 30.41 (2019): 414001





Magnetic properties and microstructure of Co/MnN/Ta thin films with MnN_x insertlayer



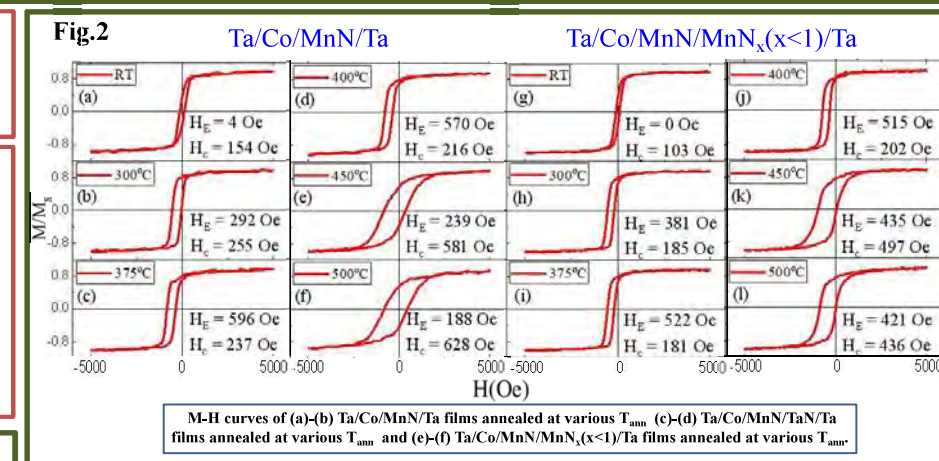
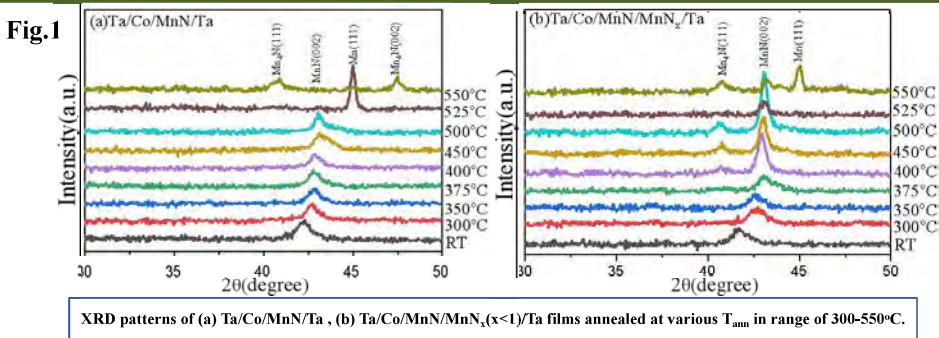
P.L. Lin¹, C.Y. Hung¹, H.W. Chang^{2*}, C.R. Wang¹, Lance Horng³

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

Results and discussion

Introduction

- For practical exchange-bias (EB) system, the main requirements for AF layer are **large magnetocrystalline anisotropy constant (K_{AF})**, **high Neel temperature (T_N)**, **good corrosion resistance**, **ease of manufacturing**, **environmental safety** and **low price**.
- MnN** with high Neel temperature (**660 K**) satisfies for the above requirements.
- Large EB field (H_E) with high interfacial coupling energy (J_{int}) of 0.24-0.41 mJ/m² could be attained for MnN-based EB system, such as MnN/CoFeB and MnN/CoFe.
- N diffusion out of MnN layer during annealing process could damage EB and exhibit poor thermal stability.
- In order to improve thermal stability of EB due to N diffusion out of MnN, the insertion of a MnN_x layer sputtered under N pressure gradient atmosphere under MnN is adopted in this work.
- Magnetic properties, structure, surface morphology, and microstructure are studied.



Crystal structures by XRD

The thickness and surface morphology of the sample by AFM

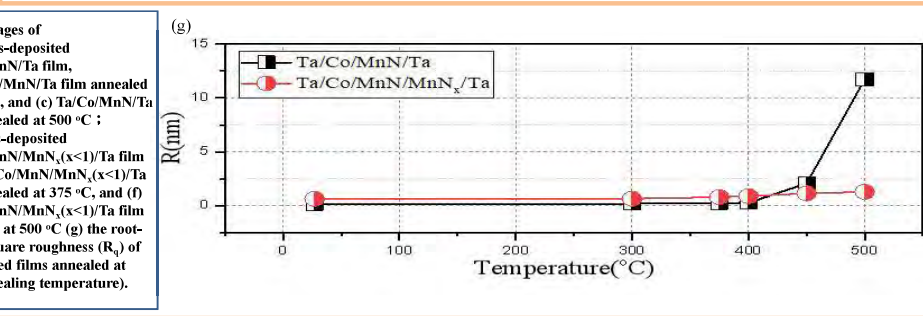
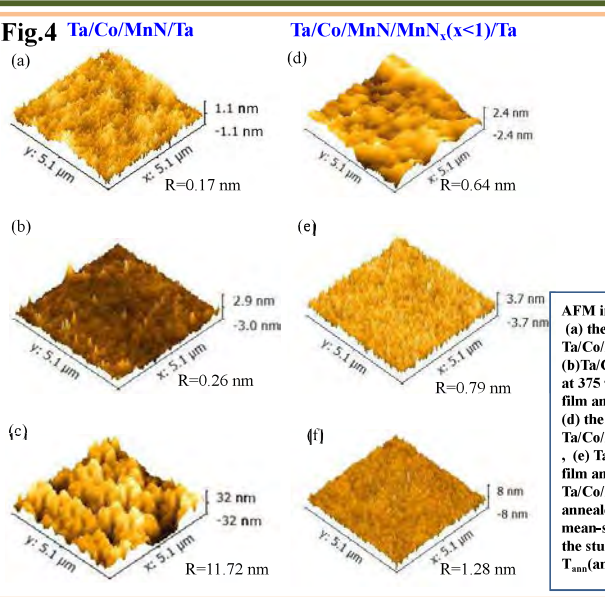
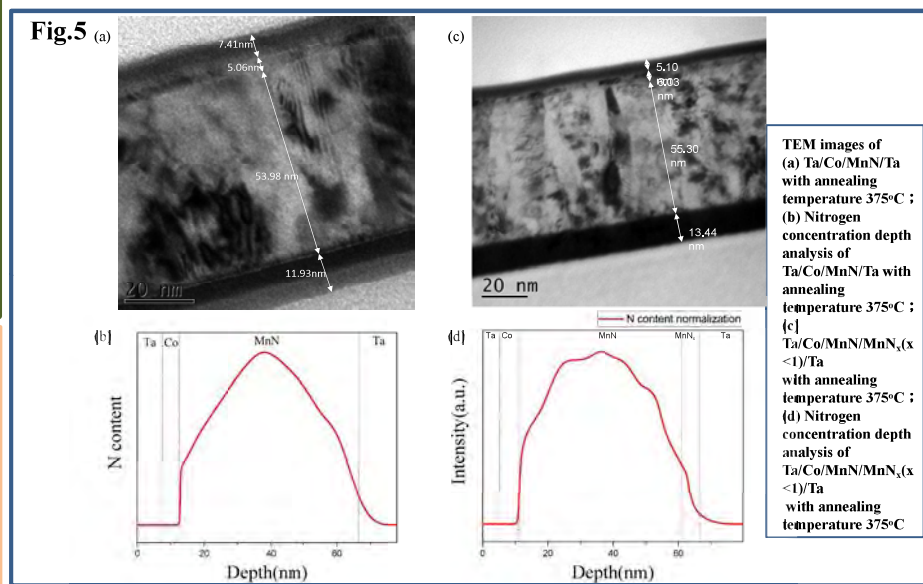
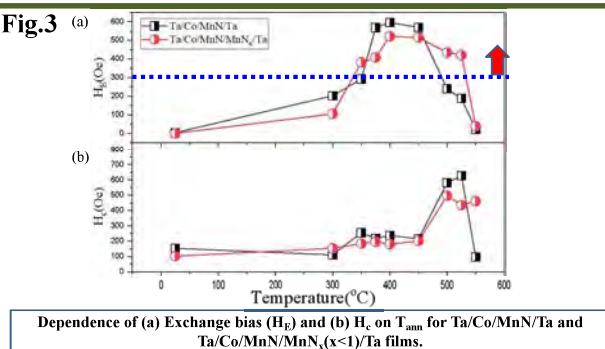
Magnetic properties by AGM

Experiment

HV-sputtering system

The films are annealing at various temperatures, then cooled to RT at H=2.0 kOe.

Ta(5 nm)
Co(5 nm)
MnN(50 nm)
Ta(50 nm)
Glass
Argon
Nitrogen
Ta(5 nm)
Co(5 nm)
MnN(50 nm)
MnN(x<1)(5 nm)
Ta(10 nm)
Glass



Conclusions

- Thermal stability of exchange biased Co/MnN films are improve by introducing 5-nm-thick MnN_x film.**
- The insertion of the MnN_x layer can delay the diffusion of N from MnN, leading to the maintenance of high H_E even at higher temperature of 525 °C.**
- Mn_xN phase formed by the MnN_x layer during proper annealing can also keep the interface flat (AFM) and the MnN phase annealed at higher temperature (XRD and TEM).**
- This study show that the MnN_x nitrogen gradient layer inserted between Ta and MnN layers can delay the decomposition of MnN about 100 °C, and improve the thermal stability of the Co/MnN exchange bias system.**

Classification of phases using autoencoder

余彥承
東海大學應用物理系 三年級
指導教授：吳桂光



東海大學
TUNGSHAI UNIVERSITY

簡介

我們試著使用基於CNN的自編碼器(autoencoder)，探討是否可以學習Generalized XY model的不同phases的特徵。經過驗證過後，在 $\Delta < 0.4$ 的條件下，基於CNN的autoencoder只能夠找出ferromagnetic phase跟nematic phase之間的phase transition，而在 $\Delta \geq 0.4$ 的條件下，可以學習到ferromagnetic phase跟disordered phase間的phase transition。我們初步判斷，可能是因為低溫的兩個相之間的phase transition與低溫到高溫之間的phase transition是屬不同種類的，才會導致autoencoder無法同時學習到它們的特徵。

模型配置

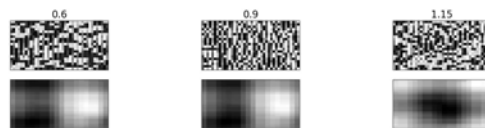
Generalized XY model跟一般經典的XY model的差別在於，在後項加入項列耦合，並用參數 Δ 來調整兩者的比例，讓模型呈現兩個模型的競爭，其Hamiltonian為

$$H = -\sum[\Delta \cos(\theta_i - \theta_j) + (1 - \Delta) \cos(q\theta_i - q\theta_j)]$$

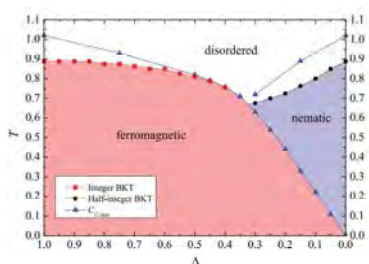
我們將原本的自旋方向換成自旋在兩個軸上的分量，也就是其cos及sin值，能更精確地描述自旋的方向，故 $L=20 \times 20$ 的模型會變為 $L=20 \times 40$ 。

輸入與輸出

將輸入資料與輸出資料可視化後的結果，標籤上標示溫度，上面一排為輸入資料，下面一排為輸出資料。



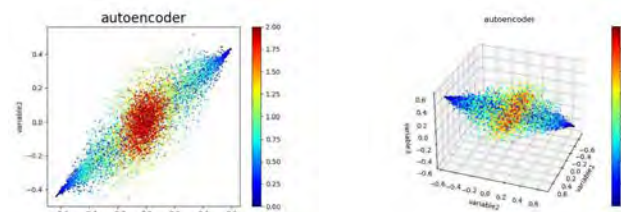
相圖



- 左圖為Ref.[3]得出的GXY model相圖，隨著 Δ 的改變，從低溫到高溫的條件下，會從三個相，變為兩個相。可以看到從三相變為兩相的界線，約為 $\Delta=0.33$ 。
- 根據Ref.[3]的描述，低溫下ferromagnetic-nematic的transition為Ising-like，但高溫下nematic-disordered或ferromagnetic-disordered的transition為BKT transition。

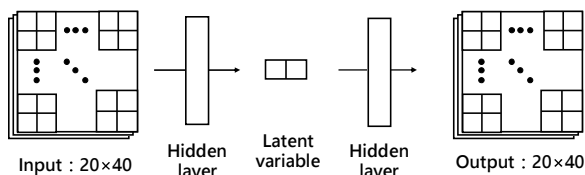
特徵參數作圖

- 左圖為兩個特徵參數作圖的二維分布圖，可以看到高溫下的模型會集中在中間的區域，而低溫則會集中分佈在左下及右上兩邊。
- 右圖為三個特徵參數的三維分布圖，同樣也可看到高溫及低溫會分開集中在不同區域。



CNN自編碼器

我們採用基於CNN的自編碼器，經過hidden layer壓縮維度後，將原本的數據壓縮成2維或3維的latent variable，再經過一次hidden layer後，還原成原本維度的數據。並經過損失函數計算損失值，更新模型的權重，我們採用均方誤差(mean square error)當作損失函數。



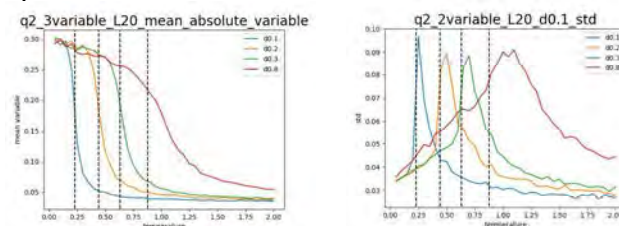
結論

從本次的方法可以看出，基於CNN的自編碼器可以學習低溫之間，ferromagnetic phase和nematic phase之間transition的特徵，但卻不能學習高溫下nematic phase和disordered phase之間的特徵。我們初步判斷可能是因為兩個之間的transition是屬於不同種類的的原因，低溫下的transition是屬於Ising-like的transition，但高溫的transition是屬於BKT的transition。

但是同樣的結論下，卻不能解釋為何在 $\Delta \geq 0.4$ 下，可以學習到高溫disordered phase與低溫ferromagnetic phase間的phase transition，因為按照Ref.[3]的描述，這之間的phase transition也屬於BKT transition，關於這部分還需要後續的討論，也不排除程式計算錯誤的問題。

平均值與標準差

- 左圖為將特徵參數做平均後跟溫度的比較圖，可以看到接近phase transition的地方，會有數據崩潰的情形。
- 右圖則是平均值的標準差與溫度的比較，在接近transition point的標準差，會有一個峰值。



參考文獻

- [1] Sebastian J. Wetzel Phys. Rev. E 96, 022140 – Published 18 August 2017
- [2] Jieli Wang, Wanzhou Zhang, Tian Hua, and Tzu-Chieh Wei Phys. Rev. Research 3, 013074 – Published 22 January 2021
- [3] David M. Hübscher and Stefan Wessel Phys. Rev. E 87, 062112 – Published 10 June 2013

Improvement of Photovoltaic Conversion Efficiency of Dye-sensitized Solar Cells with Scattering Layer

Jiun How Yueh (岳俊豪), Chia-Yi Huang* (黄家逸)
 Department of Applied Physics, Tunghai University, Taichung 407, Taiwan
 albertyueh@gmail.com, *chiayihuang@thu.edu.tw



Abstract

Nowadays, fossil fuels are decreasing, so green energy has become an important issue. In the field of green energy, dye-sensitive solar cells have the advantages of low cost and simple production compared to other solar cells. In this experiment, grid structure of TiO_2 is made by using photolithography and sputtered film, and more dyes were adsorbed by increasing the surface area of the photoelectrode, thereby improving the photoelectric conversion efficiency.

DSSC Method

DSSC working step:

- (1) Dyes excite electrons when exposed to sunlight
- (2) Electron inject into TiO_2 conduction band
- (3) Electrons through the external circuit to the counter electrode
- (4) Return to the ground state via redox electrons

Scattering layer Method

Reference from: **Review on the effect of compact layers and light scattering layers on the enhancement of dye-sensitized solar cells**

Proccession

Result

Fig1. SEM of grid structure with non- TiCl_4 treatment

Fig2. SEM of plane with non- TiCl_4 treatment

Fig3. SEM of plane with TiCl_4 treatment

Fig4. Transmittance spectrum of TiO_2 layer

TiO_2 layer	V_{OC} (mV)	I_{SC} (mA)	J (mA/cm^2)	FF	PCE (%)
Dense layer	675	0.37	9.28	0.73	4.61
Grid structure	675	0.72	18.02	0.7	8.573
Grid structure and TiCl_4 treatment	662.5	0.31	10.32	0.7204	4.923
Plane with scattering layer	600	0.39	9.75	0.7384	4.321

Fig5. J - V curves of DSSCs in different structure of TiO_2

Fig6. XRD patterns of DSSC with TiCl_4 treatment and annealing 500°C

Table 1. Photovoltaic conversion efficiency(PCE) performance of DSSCs based on structure of TiO_2 layer

Conclusions

Using grid structure can increase the surface area. It makes TiO_2 paste absorb more dye. The Scattering layer can capture the light in the TiO_2 layer that will make more J_{SC} , than using the TiCl_4 treatment can optimize the TiO_2 paste. Therefore, the TiO_2 particles can gather together. It reduce the electron recombination and enhance the V_{OC} . Finally, the photovoltaic conversion efficiency of DSSC will improve.