

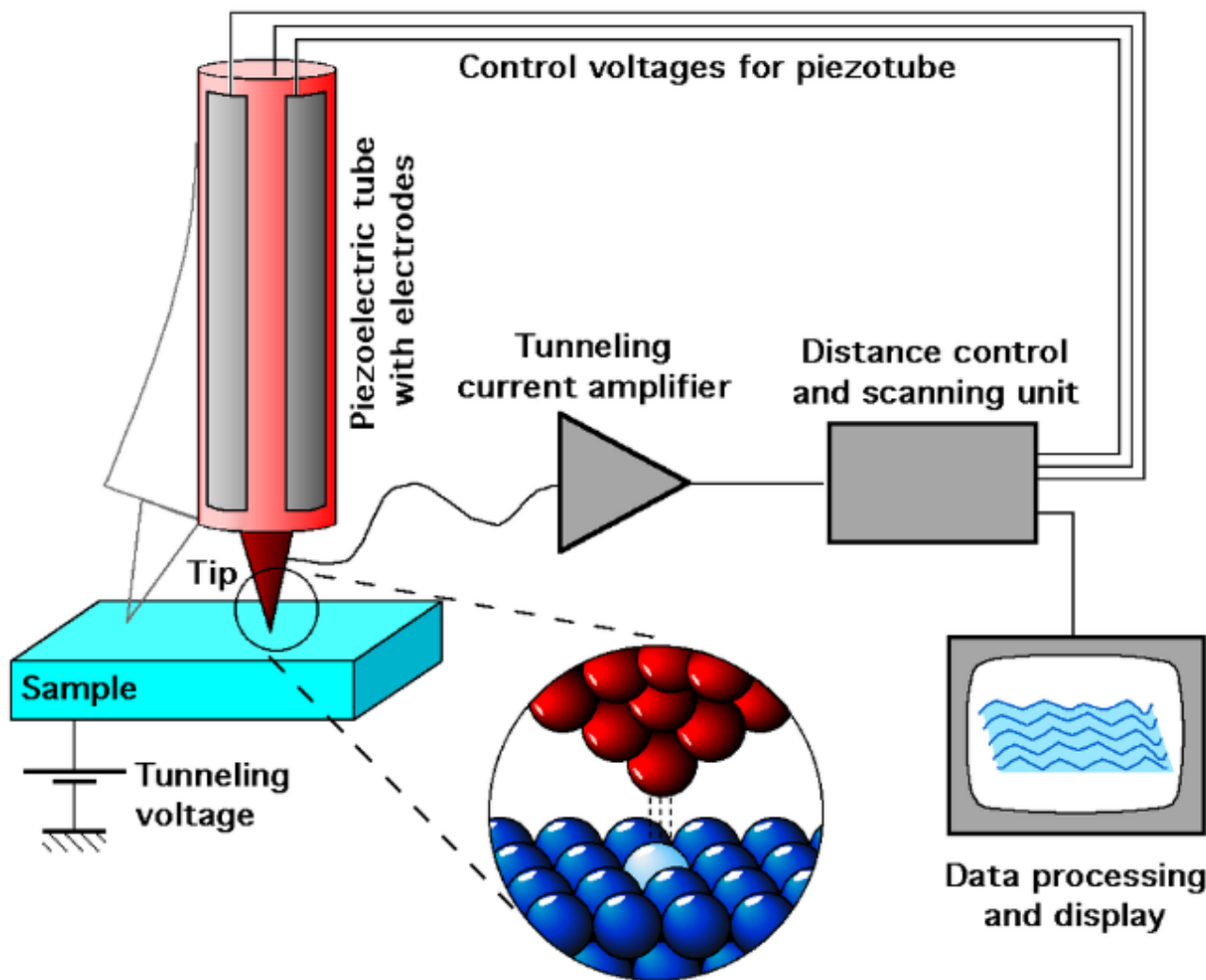
# Isoenergy

扫描隧道显微镜散射解金属等能面。

提示：如果你无法渲染其中的公式，请阅读 [README.pdf](#)，两者内容相同。

## 大作业简介

探索晶体材料的新奇电子结构是凝聚态物理学的重要课题之一。扫描隧道显微学（Scanning tunneling microscopy, STM）与隧道谱学（Scanning tunneling spectroscopy, STS）能够直接测量材料表面原子晶格结构与能态密度（Density of states, DOS）。该测量方法对于探究材料表面态（Surface state）或石墨烯等层状材料的准二维电子结构则更加具有优势。

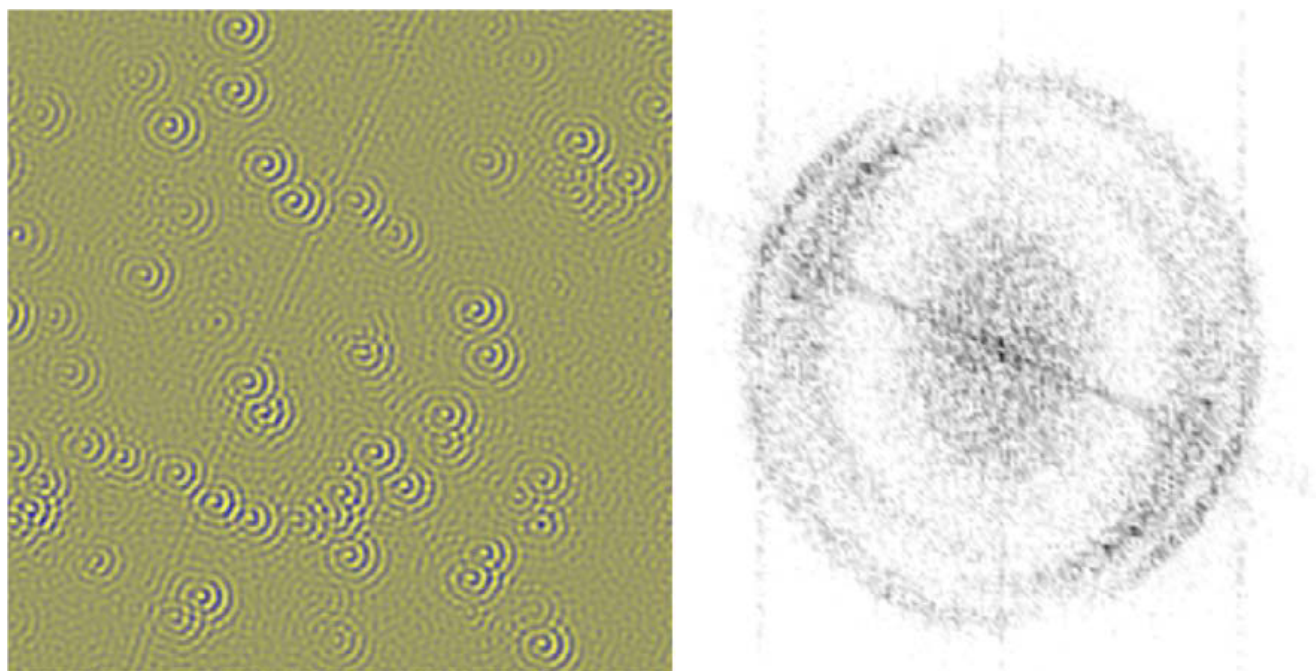


扫描隧道显微镜结构 (from Wikipedia)

通常认为扫描隧道显微镜（Scanning tunneling microscope, STM）探测到的都是实空间（Real-space）的信号，要想得到倒空间（k-space）的信息还得依赖于其它具有动量分辨能力的测量手段。

例如，角分辨光电子谱（Angle-resolved Photoemission Spectroscopy, ARPES）是一种能直接获得电子动量与能量的测量方法。人们为了同时获得时空间与动量空间的信息，发展出了傅里叶变换隧道谱学（Fourier Transform STS, FT-STs）的方法，能够从STM测到的实空间图像中获得动量空间的信息，进而得到能带结构等重要信息。那么FT-STs的基本原理是怎样的呢？我们通过STM测量样品在某个能量上各处的局域态密度（Local DOS）。当样品上有杂质时（真实材料中往往如此），该处的波函数将被散射。由于该散射过程通常是相干的，入射波与反射波将相干叠加形成驻波，对局域态密度形成调制，所形成的波纹状图案通常被称为准粒子干涉（Quasiparticle Interference, QPI）图样。

总之，动量空间中的信息通过散射过程投射到了实空间的数据中。通过对实空间图像进行傅里叶变换，我们将能得到驻波的波矢信息，进而推断出等能面（Isoenergetic Surface）的结构。



铜表面二维电子气的QPI图样及其FFT [Nat. Commun. 6, 8691 (2015)]

利用对QPI分析，人们研究了石墨烯（Graphene）[Science 317, 219–222 (2007)]，铜氧化物高温超导体（High-Tc Cuprate Superconductors）[Science 297, 1148–1151 (2002)]、铁基超导体（Fe-based Superconductors）[Nat. Commun. 7, 10565 (2016)]等新奇材料的电子结构，极大促进了人类对物质世界的认识与理解。

本大作业旨在同学们掌握通过局域态密度图（Local DOS Map）得到二维等能面结构（Isoenergetic Surface）的基本原理与相关数据处理方法。分为两个步骤进行，这里是大作业的第一步，利用假设的动量空间等能面结构，生成中心散射点（两种不同类型的杂质）附近区域的局域态密度图，即QPI图样。

## 数据说明

100份不同的等能面附近的态密度分布，存在 `dos-momentum` 中。每份数据是一个 `HDF5` 文件，文件中 `/isoE` 是一个 `(201, 201)` 的二维数组，数字代表电子在倒空间中的态密度。其中倒空间的单位为任意值，态密度的归一常数也是任意值：在本问题中，只有相对强度有明确的物理意义。

## 输出路径

`dos-position` 代表普通散射中心的实空间，`dos-position/m` 代表磁性散射中心的实空间，`dos-position/damp` 代表衰减的普通散射中心的实空间，`dos-position/m/damp` 代表衰减的磁性散射中心的实空间。

将以上的路径中 `dos-position` 替换成 `STM`，则对应相应输出数据的可视化图。

输入数据的可视化图在 `p_momentum` 目录中。

## 作业要求（功能部分）

### Makefile

本次作业提供了 Makefile，最终助教也将使用 Makefile 进行测试。需要注意，你在编写所有程序文件时，都应该使用 `make` 给程序传入的参数（来自 `sys.argv`），而非硬编码下面提到的任何文件名或文件编号等信息；否则，你可能无法通过测试。

在本目录中运行 `make -n` 即可看到实际运行的命令，这或许能帮助你开发。

### 基本要求

作业功能部分（占80分）的基础要求分成以下几个部分，完成各个任务即可拿到相应分数。

任务（程序名）	分数
scatter.py	40
gimage.py	20
damping.py	20

#### scatter.py

读取 `dos-momentum/%.h5`，输出 `dos-position/%.h5`，其中 % 代表从 0000 到 0099 的字符串。以 `dos-momentum/0023.h5` 程序的调用形式为：

```
1 | python3 scatter.py 0 dos-momentum/0023.h5 dos-position/0023.h5
```

其中第一个参数 0 代表普通散射中心模式，即入射波和出射波在散射中心没有相位差。如果第一个参数是 1，代表磁性散射中心模式，即入射波和出射波在散射中心有  $\pi$  的相位差。

设倒空间的态密度为  $f(\mathbf{k})$ ，当散射中心在实空间原点时，实空间的态密度为：

$$D(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{k}_1 f(\mathbf{k}_1) \left| \int d\mathbf{k}_2 f(\mathbf{k}_2) (e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}}) \right|^2 \quad (1)$$

如果散射中心有磁性，即 `sys.argv[1]==1` 时，需要给出射波添加一个  $\pi$  的相位：

$$D(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{k}_1 f(\mathbf{k}_1) \left| \int d\mathbf{k}_2 f(\mathbf{k}_2) (e^{-i\mathbf{k}_1 \mathbf{r}} + e^{-i(\mathbf{k}_2 \mathbf{r} + \pi)}) \right|^2 \quad (2)$$

#### gimage.py

读取实空间（当 `sys.argv[1]==1`）或倒空间（当 `sys.argv[1]==0`）的二维态密度数组，画出可以表征二维标量场的图形。以 `dos-momentum/0023.h5` 为例，程序的调用形式为：

```
1 | python3 gimage.py 0 dos-momentum/0023.h5 p_momentum/0023.png
```

注意标注横纵坐标的标签、图的标题。

提示：备选之一为 `matplotlib.pyplot.imshow`。

### damping.py

对理想条件下的散射态密度依距离衰减：

$$D^*(\mathbf{r}) = D(\mathbf{r})e^{-|\mathbf{r}|/L} \quad (3)$$

其中  $L = 20$  为衰减长度，定为 20 个实空间像素单位。程序的调用形式为：

```
1 | python3 damping.py dos-position/0023.h5 dos-position/damp/0023.h5
```

### dos-position/%.h5

`dos-position` 各级目录下的 `.h5` 文件中，都使用名为 `/QPI` 的 `(201,201)` 二维数组来存储实空间的 QPI 图样。

## 提高要求

提高要求为加分项，至多可加 20 分。你可以自由发挥，可选项为：

- 生成散射点不在图像中心的 QPI 图样。这能为后续作业提供更为丰富的数据集。
- 生成存在多个散射点的 QPI 图样。在真实材料体系中，杂质点的分布通常是随机且相对密集的，即在所测到的局域态密度图内包含数十个散射中心。生成 QPI 图样时注意要保证入射波与出射波在每一个散射点满足相位要求。
- 为不同散射过程指定不同散射概率。即对于一组  $(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$ ，其发生概率  $P$  依赖于  $\mathbf{k}_1$  和  $\mathbf{k}_2$ 。而在基本要求中，我们认为不同散射过程是等概率的。可以采用的形式如：

$$P(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2}{|\mathbf{k}_1| |\mathbf{k}_2|} \right) \quad (4)$$

或者用矩阵形式进行任意指定。

如果你实现了任何提高要求，请在实验报告中详细说明你的工作，这将作为评分的依据。

## 作业要求（非功能部分）

非功能部分的要求详见大作业公告，此部分占 20 分。