

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` 或 `README.html`，三者内容相同。

Isoenergy

物理背景

- 扫描隧道显微学 (STM)

- 傅里叶变换隧道谱学 (FT-STs)

- 实空间与相空间的关系

- 大作业目标

数据说明

- 输入数据说明

- 输出数据要求

作业要求 (功能部分)

- Makefile

- 基本要求

 - `scatter.py`

 - `gimage.py`

 - `damping.py`

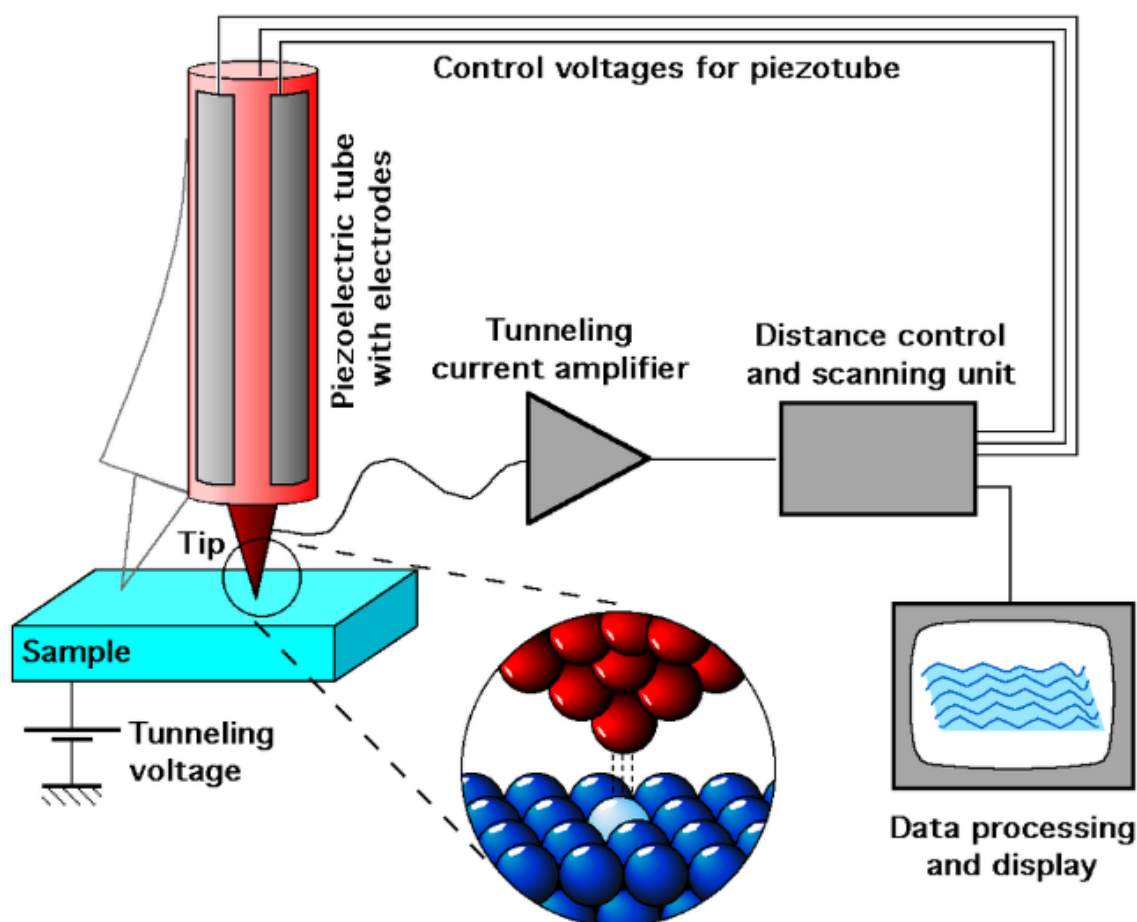
 - `dos-position/%.h5`

- 提高要求

1. 物理背景

1.1 扫描隧道显微学 (STM)

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。

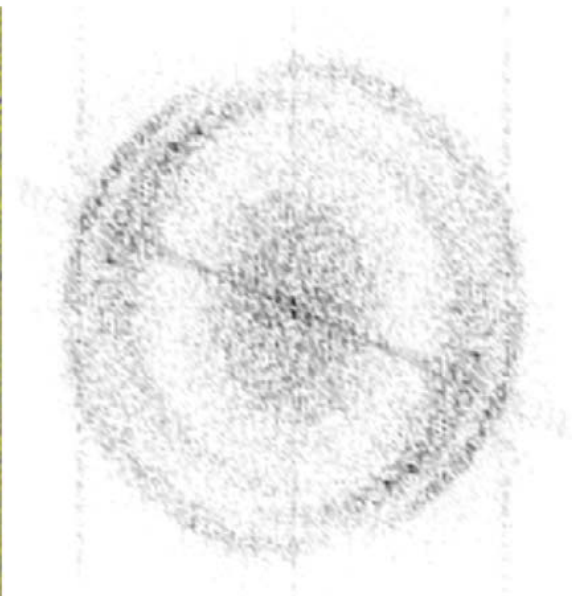
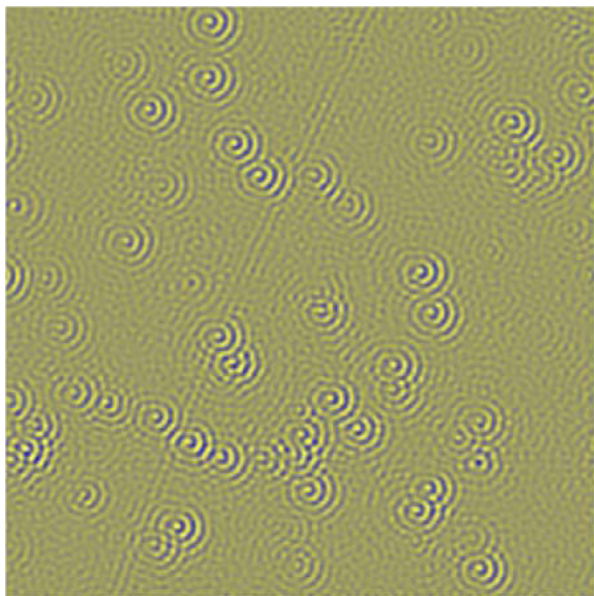
那么, 我们有没有可能同时获得实空间与动量空间的信息呢? 或者说, 我们有没有可能从实空间的图像中找出动量空间的信息呢?

1.2 傅里叶变换隧道谱学 (FT-STs)

我们知道实空间与动量空间之间存在傅里叶变换的关系, 因此可以尝试使用傅里叶变换的手段从STM 测到的实空间图像中获得动量空间的信息, 进而对能带结构进行进一步深入的研究。这类方法被称作傅里叶变换隧道谱学 (Fourier Transform STS, FT-STs)。

的方法, 能够那么 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能态密度 (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, 对局域能态密度形成调制, 所形成的波纹状图案通常被称为准粒子干涉 (Quasiparticle Interference, QPI) 图样。

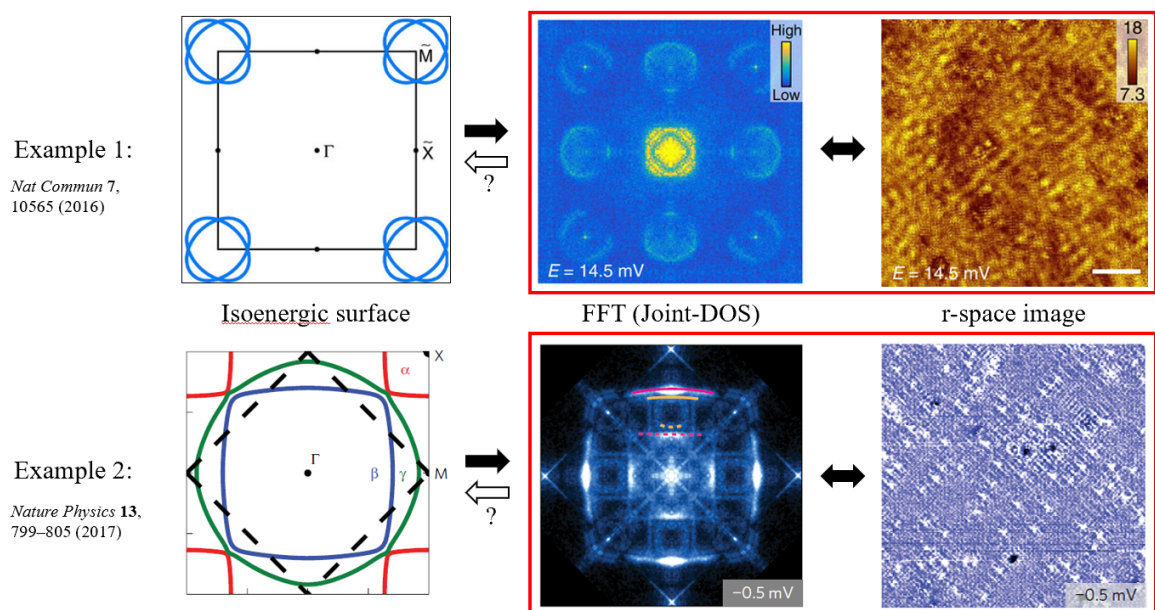
总之, 动量空间中的信息通过散射过程投射到了实空间的数据中。通过对实空间图像进行傅里叶变换, 我们将能得到驻波的波矢信息, 进而推断出等能面 (Isoenergetic Surface) 的结构。



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。

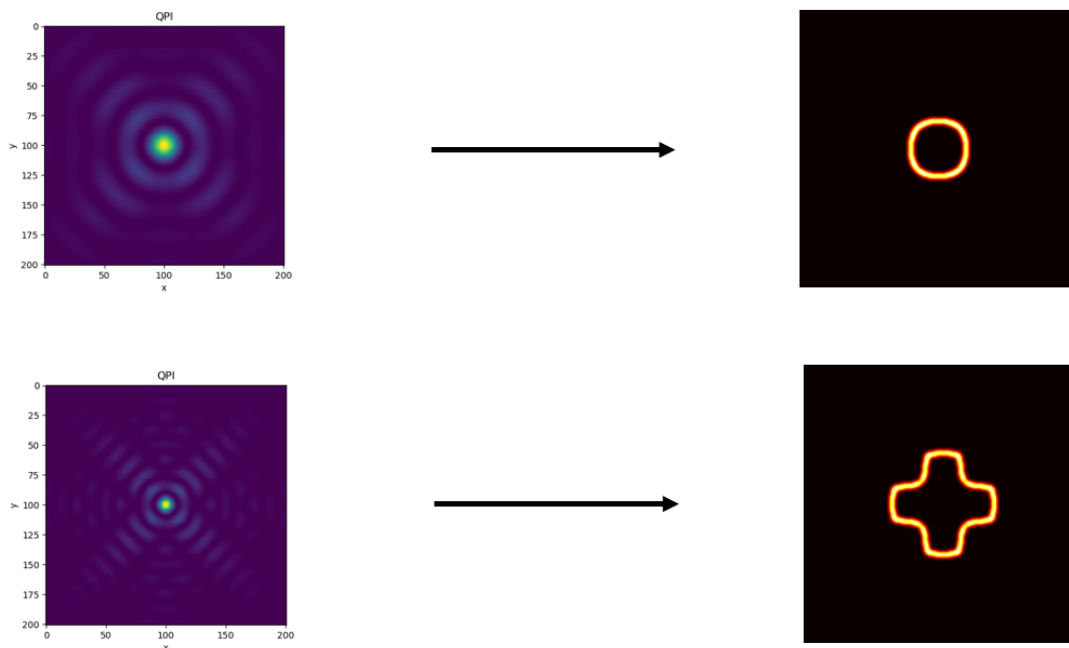
1.3 实空间与相空间的关系



1.4 大作业目标

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。具体的分为两个阶段进行：

- 大作业第一阶段（simulation）：即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。
- 大作业第二阶段（data mining）：第一阶段的逆过程，即通过给定的QPI图样数据反推动量空间等能面结构。



2. 数据说明

2.1 输入数据说明

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。

2.2 输出数据要求

`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。

3. 作业要求（功能部分）

3.1 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。

3.2 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）	功能	分数
scatter.py	从动量空间生成实空间	50
gimage.py	实空间/倒空间可视化	25
damping.py	生成考虑距离衰减的实空间	25

以下是三个文件具体的输入输出格式要求。

3.2.1 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 π 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：

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

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 π 的相位：

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

3.2.2 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`。

3.2.3 damping.py

对理想条件下的散射态密度依距离衰减：

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

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
```

3.2.4 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。

3.3 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：

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

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。