

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)

扫描隧道显微镜

傅里叶变换隧道谱学 (FT-STS)

固体物理中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

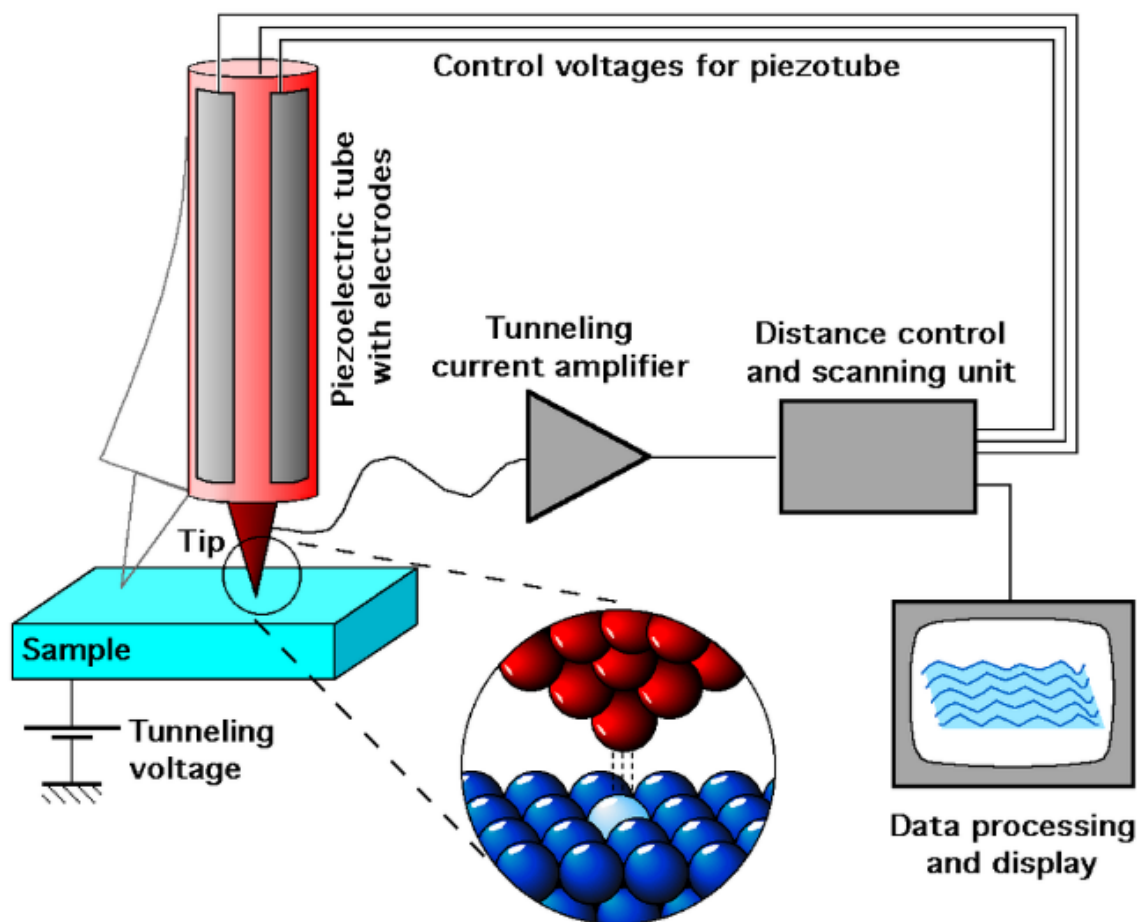
探索晶体材料的新奇电子结构是凝聚态物理学的重要课题之一。

1.1 扫描隧道显微学 (STM)

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。

1.2 扫描隧道显微镜

扫描隧道显微镜利用量子隧穿效应，对探针和表面之间的隧穿电流大小的探测，可以观察表面上单原子级别的起伏。



扫描隧道显微镜结构 (from Wikipedia)

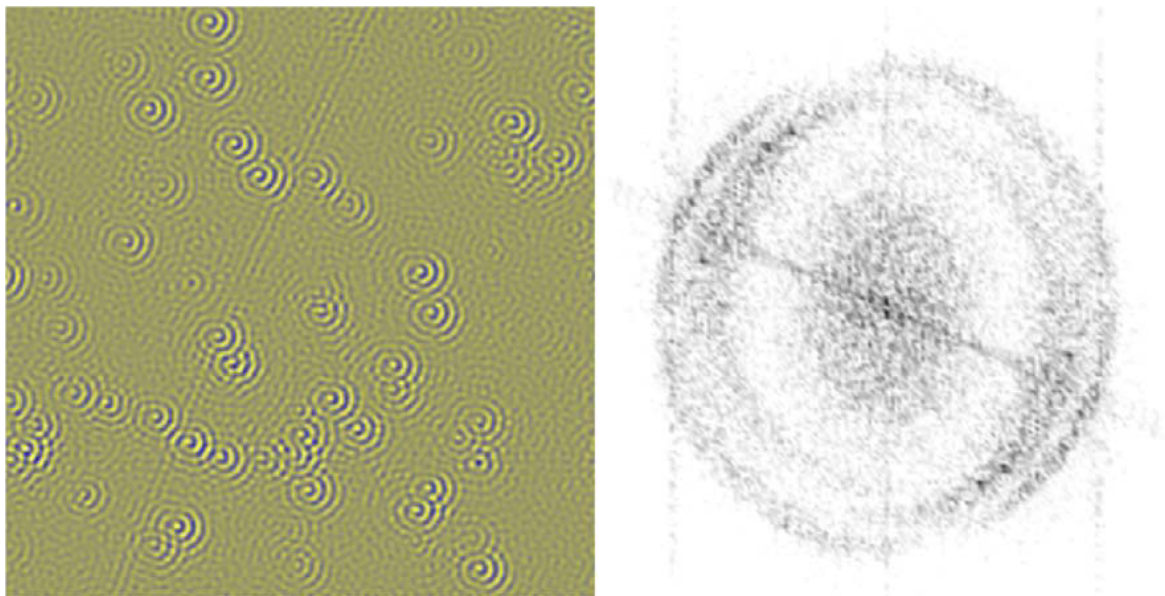
通常认为扫描隧道显微镜 (Scanning tunneling microscope, STM) 探测到的都是实空间 (Real-space) 的信号, 要想得到倒空间 (k-space) 的信息还得依赖于其它具有动量分辨能力的测量手段。例如, 角分辨光电子谱 (Angle-resolved Photoemission Spectroscopy, ARPES) 是一种能直接获得电子动量与能量的测量方法。

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?

1.3 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,

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。



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。

1.4 固体物理中实空间与相空间的关系

布洛赫定理告诉我们，周期性势场作用下，薛定谔方程的解将呈现布洛赫波的形式

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u(\vec{r})$$

其中 $u(\vec{r})$ 是周期函数，满足 $u(\vec{r}) = u\left(\vec{r} + \vec{R}_n\right)$

由于周期性势场中的布洛赫波具有周期函数的性质，我们可以用类似于时域中的周期信号的处理方法，对实空间做二维傅里叶变换，得到k空间。具体而言，k空间是一个以傅里叶变换后得到的倒格矢为基矢的离散的格点空间。粒子在倒空间上的某点上意味着它处于某一能量本征态，进而每一点都有确定的能量测量值。

由诺特定理，每一种连续对称性对应一个守恒量。由于真空有空间不变性，这导致了真空中的动量守恒。然而，固体中晶格的出现打破了一部分空间不变性，把连续对称变成了有限周期对称。这时，粒子动量在周期场调制下不再守恒，但仍然有一个东西“准守恒”，那就是准动量。

类比对一维粒子位形空间的波函数进行傅里叶变换时，选择的基函数是 $\exp(ikx)$ ，动量本征态，这里的k就代表动量。

在有晶格周期的固体物理中进行傅里叶变换时，选择的基函数是 $\exp(ikx)u_k(x)$ ，这里的k不再是严格意义上的动量，称为**准动量**。

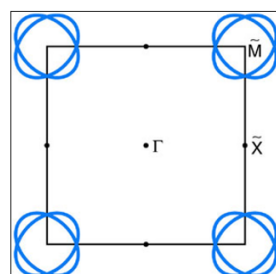
等能面：晶体中电子的准经典运动主要取决于E-k关系，为了表示实际晶体的复杂的能带结构，常常使用**等能面**来反映E-k关系，所谓等能面是指由k空间的能量相同的各点构成的曲面。

在示意图中我们可以看到：

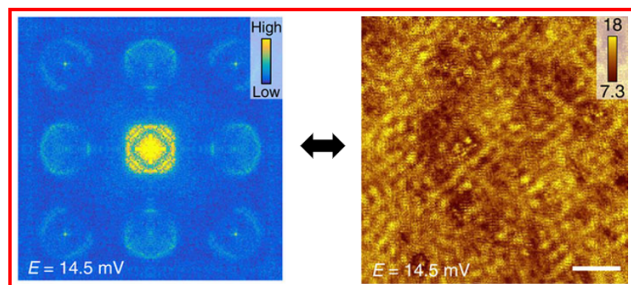
- 第三列为扫描电镜得到的真实实验结果（实空间）
- 第二列为真实实验结果经过二维傅里叶变换FFT之后的图像
- 第一列为我们的目标：干净的等能面结构

Example 1:

Nat Commun 7, 10565 (2016)



Isoenergetic surface

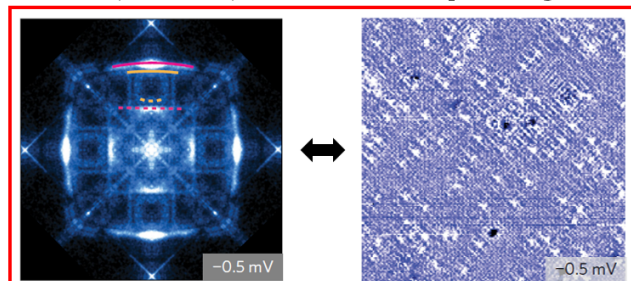
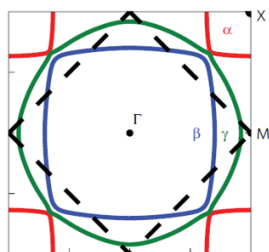


FFT (Joint-DOS)

r-space image

Example 2:

Nature Physics 13, 799–805 (2017)



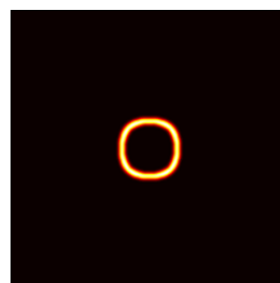
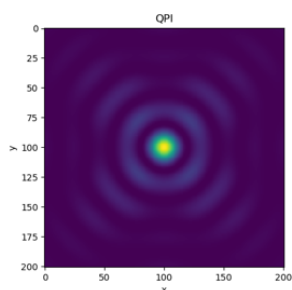
1.5 大作业目标

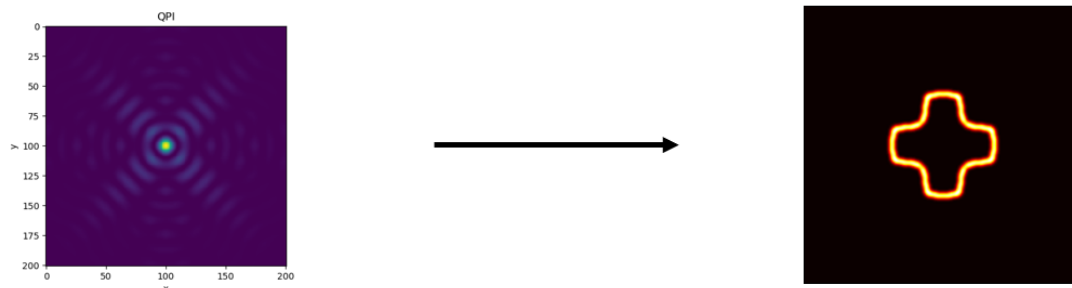
总结上面提到的固体物理背景，动量空间中的信息通过散射过程投射到了实空间的数据中。因此，通过对实空间图像进行傅里叶变换，我们将能得到驻波的波矢信息，进而推断出等能面（Isoenergetic Surface）的结构。

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。

由于作业的评分一致性要求，我们不采用真实QPI数据上的结果作为评分依据，而以模拟的方式进行两个阶段的模拟任务：

- 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。
 - 这一阶段的目的是让大家熟悉物理背景，了解数据的格式，通过模拟知道QPI数据理论上的生成机制
- 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。
 - 这一阶段的目标是真正从（模拟的）QPI图样数据中找到等能面结构，以给定的模拟数据作为评分标准，如果结果较好可以进一步在真实的QPI实验数据中应用。





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
<code>scatter.py</code>	从动量空间生成实空间	50
<code>gimage.py</code>	实空间/倒空间可视化	25
<code>damping.py</code>	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 (k 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:

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

如果有多个散射点, 态密度为多个散射点的叠加:

$$\begin{aligned} D &= D(\mathbf{r}_1) + D(\mathbf{r}_2) \\ &= \int d\mathbf{k}_{11} f_1(\mathbf{k}_{11}) \left| \int d\mathbf{k}_{12} f_1(\mathbf{k}_{12}) (e^{-i\mathbf{k}_{11} \mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{k}_{12} \mathbf{r}}) \right|^2 \\ &\quad + \int d\mathbf{k}_{21} f_1(\mathbf{k}_{21}) \left| \int d\mathbf{k}_{22} f_1(\mathbf{k}_{22}) (e^{-i\mathbf{k}_{21} \mathbf{r}} + e^{-i\mathbf{k}_{22} \mathbf{r}}) \right|^2 \end{aligned}$$

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。