



# SpecTaroscoPy ver. 6.4.7

## User Manual

分子科学研究所 (Institute for Molecular Science)

中澤遼太郎 (Ryotaro Nakazawa)

[nakazawa@ims.ac.jp](mailto:nakazawa@ims.ac.jp)

- 本ツールを用いたデータを成果発表される際には、謝辞または共著としてクレジットを記載いただくと幸いです。
- なお、Deconvolution, Second derivative 解析ご利用の際は、以下の文献がクレジットになります。  
R. Nakazawa, H. Sato, and H. Yoshida, "Peak separation methods for inverse photoelectron spectra: Comparing second derivative, curve fitting, and deconvolution analyses", arXiv (2025).  
arXiv DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2509.21246>  
(現在、国際誌に投稿中)

## 初期設定

(1) Pythonのインストールしてください。

なお、Pythonはpathを通す必要があるそうです。ネットにpathの通し方の記事がいくつかあるので参考にしてください。  
Path通していない人は、AnacondaやPython公式ホームページからPythonをインストールし直すのが確実だと思います。

【中澤の使用環境】私はAnacondaでPythonをインストール・パスを通しました。  
VS codeで\*.py fileを実行しています。  
Pythonのバージョンは3.12.7 です。

(2) 必要なモジュールのインポートをします。  
試しにSpecTaroscoPy\_\*/src/main.pyを実行してみてください。

たいてい左のエラー (ModuleNotFoundError) が出ます。

PCのターミナルを開き、指示に従ってmoduleをインストールしてください。

例えば右画面の場合、winではターミナルを開いて

`pip install customtkinter`

を実行します。Moduleのインストールの仕方もネットにいくつも記事があるのでそれを参考にしてください。



```
PROBLEMS OUTPUT DEBUG CONSOLE TERMINAL PORTS Python + - [ ] [X] ... ^ X

PS C:\Users\mathe\Downloads\SpectrumAnalyzer_A1,BL7U\SpectrumAnalyzer_6_2_2> & C:/Users/mathe/AppData/Local/Microsoft/WindowsApps/python3.10.exe c:/Users/mathe/Downloads/SpectrumAnalyzer_A1,BL7U\SpectrumAnalyzer_6_2_2/src/main.py
Traceback (most recent call last):
  File "C:\Users\mathe\Downloads\SpectrumAnalyzer_A1,BL7U\SpectrumAnalyzer_6_2_2\src\launcher.py", line 1, in <module>
    import customtkinter
ModuleNotFoundError: No module named 'customtkinter'
PS C:\Users\mathe\Downloads\SpectrumAnalyzer_A1,BL7U\SpectrumAnalyzer_6_2_2> | ダウンロード
```

<

>

SpecTaroscoPy\_6\_4\_3

≡

⇅

📄

▼

📁

+

📤

🏷️

⋮

▼

🔍

フォルダ	変更日	サイズ	種類
lgor_macro	2025年6月12日 23:29	--	フォルダ
src	昨日 19:54	--	フォルダ
testdata	2025年4月16日 19:51	--	フォルダ
書類			
ReadMe.txt	昨日 19:52	8 KB	標準テキスト
PDF書類			
manual.pdf	昨日 15:00	4.2 MB	PDF書類
その他			
ARPESimage.bat	2025年6月12日 22:51	51 バイト	書類
curvature.bat	2025年4月8日 13:12	49 バイト	書類
deconvolution.bat	2025年4月8日 13:12	53 バイト	書類
fitting.bat	2025年4月8日 13:12	47 バイト	書類
luncher.bat	2025年4月8日 13:12	47 バイト	書類
second_derivative.bat	2025年4月8日 13:12	57 バイト	書類
SpecTaroscoPy.bat	2025年4月8日 13:12	44 バイト	書類

<

>

src

≡

⌵

📁

📁

📁

📁

⋮

🔍

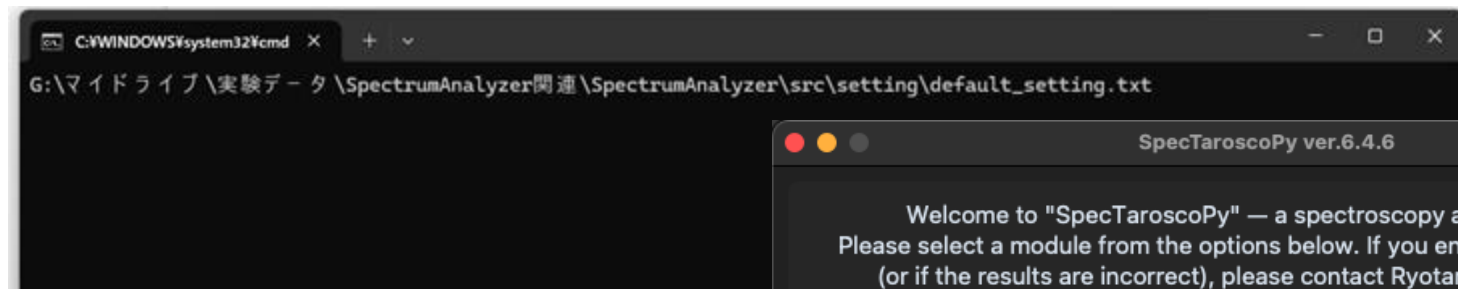
フォルダ	変更日	サイズ	種類
__pycache__	🕒 今日 15:35	--	フォルダ
archive	🕒 昨日 19:54	--	フォルダ
img	🕒 昨日 18:05	--	フォルダ
RyoPy	🕒 2025年5月2日 18:34	--	フォルダ
setting	🕒 昨日 19:52	--	フォルダ
デベロッパ			
📄 arpes_image.py	🕒 今日 14:53	155 KB	Pythonスクリプト
📄 curvature.py	🕒 一昨日 18:10	7 KB	Pythonスクリプト
📄 deconvolution.py	🕒 昨日 22:39	57 KB	Pythonスクリプト
📄 fitting.py	🕒 昨日 22:39	47 KB	Pythonスクリプト
📄 Frame.py	🕒 2025年6月12日 21:34	25 KB	Pythonスクリプト
📄 Image.py	🕒 2025年4月8日 13:12	160 バイト	Pythonスクリプト
📄 launcher.py	🕒 今日 15:50	13 KB	Pythonスクリプト
📄 main.py	🕒 昨日 22:38	231 バイト	Pythonスクリプト
📄 MBS_A1.py	🕒 昨日 22:57	47 KB	Pythonスクリプト
📄 PlotControl.py	🕒 2025年6月12日 19:58	25 KB	Pythonスクリプト
📄 second_derivative.py	🕒 昨日 22:38	50 KB	Pythonスクリプト
📄 setting.py	🕒 一昨日 19:50	9 KB	Pythonスクリプト
📄 Spectrum.py	🕒 昨日 22:38	55 KB	Pythonスクリプト

SpecTaroscoPy\_\* フォルダの SpecTaroscoPy.batを押す (Windows限定。左画面)

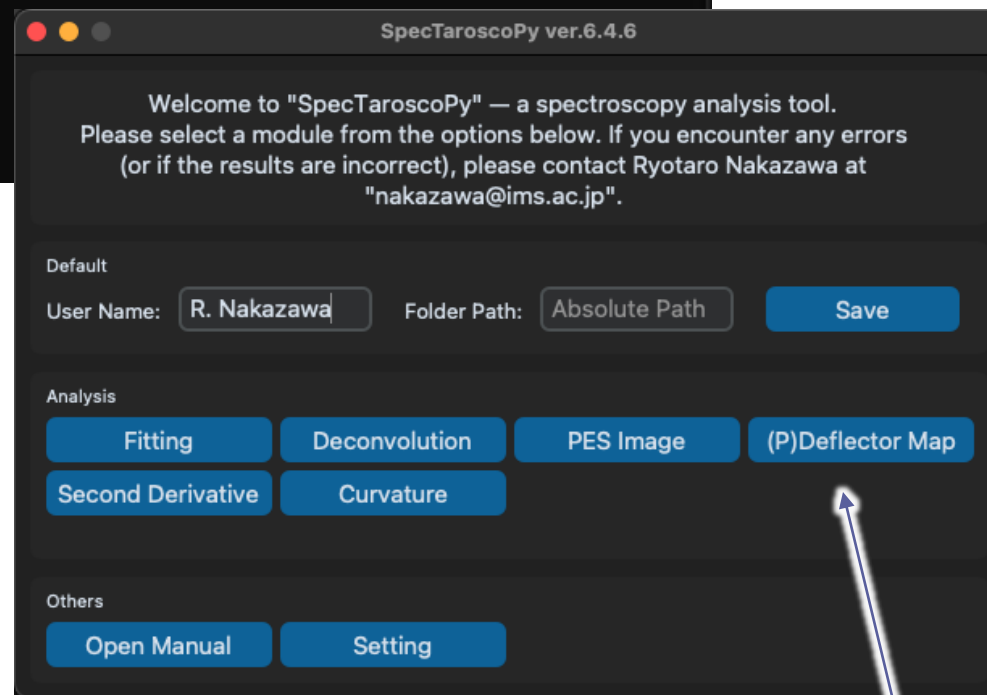
OR

SpecTaroscoPy\_\*\src\main.pyを押す (右画面)

とlauncherが立ち上がります。



bat fileからプログラムを起動した場合、ターミナルが開かれる。  
ここにプログラムのlogが表示される。  
万が一エラーを吐いた時は重要な情報。



Othersにはマニュアル(このパワーポイント)を開くボタン、設定を開くボタンがある。

Defaultは記入しておくとも便利（しなくてもよい）。

- (i) 解析者の名前、
- (ii) ファイル読み込み時の最初のフォルダのpathを指定する。(ii) は解析ファイルが入っている親フォルダを指定すると便利かも。

**Analysis**は解析ごとにボタンになっている。行いたい解析のボタンを押す。

この画面に限らず、(D)は開発中という意味。  
“(D)”を含むボタンを押しても何も起きません。

# 解析GUI画面

どの解析GUIもざっくりこんな雰囲気

**Load Data**

Open File X Data: x\_beta9\_23\_14 Y Data: x\_beta9\_23\_14 Load

File Path: /Users/ryotaro/Library/CloudStorage/GoogleDrive-nakazawa@ims.ac.jp/マイドライブ/実験データ/20241217\_organic\_conductors/A1rawdata/beta7/SpectrumAnalyzer\_PESImage/beta9\_23\_149\_27\_149\_EF\_EDCs.txt

**Fitting**

Function: Fermi-edge

X Range: X Min: Min X X Max: Max X

$$y = \frac{a_0}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \otimes \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\left(\frac{E}{2\sigma}\right)^2\right], \quad \text{FWHM} = 2.35\sigma$$

NOTE: Horizontal axis is kinetic energy.

**Coefficients** EDCs Fitting

Symbol	Initial Value	Fix	Min		Max	Fit Result
T	300	<input checked="" type="checkbox"/>		<=T<=		
EF	Fermi level	<input type="checkbox"/>		<=EF<=		
FWHM	FWHM of Instru	<input type="checkbox"/>		<=FWHM<=		
a0	Intensity	<input type="checkbox"/>		<=a0<=		
bg	0	<input checked="" type="checkbox"/>		<=bg<=		

Graph Now Do It Close Figures

**Save Data**

Save Comment: [Info] Filename Legend Name

Saved File:

Open Manual Setting

データを読み込むFrame (Load Data Frame)

解析するFrame

解析データを保存するFrame (Save Data Frame)

その他。設定を開く・manual (このfile) を開くボタン

Load Data (Fitting analysisを例に)

Load Data

Open File

X Data: ---X Legend---

Y Data: ---Y Legend---

Load

File Path:

Fitting

Function

Fermi-edge

X Range

Min X

Max X

NOTE: Horizontal axis is kinetic energy.

Coefficients

EDCs Fitting

Symbol	Initial Value	Fix	Min	Max
T	300	<input checked="" type="checkbox"/>		
EF	Fermi level	<input type="checkbox"/>		
FWHM	FWHM of Instru	<input type="checkbox"/>		

$$y = \frac{a_0}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \otimes \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\left(\frac{E}{2\sigma}\right)^2\right], \quad \text{FWHM} = 2.35\sigma$$

1

X\_Au\_ITO

Y\_Au\_ITO

Y\_Au\_ITO

2

12.69993

61.53533

59.2

3

12.61902

86.66667

62.13333

4

12.6381

71.73333

56.13333

5

12.65717

70

55.73333

6

12.67624

69.33333

55.2

7

12.69532

68.53333

56.53333

8

12.71439

69.33333

58.66667

9

12.73346

75.6

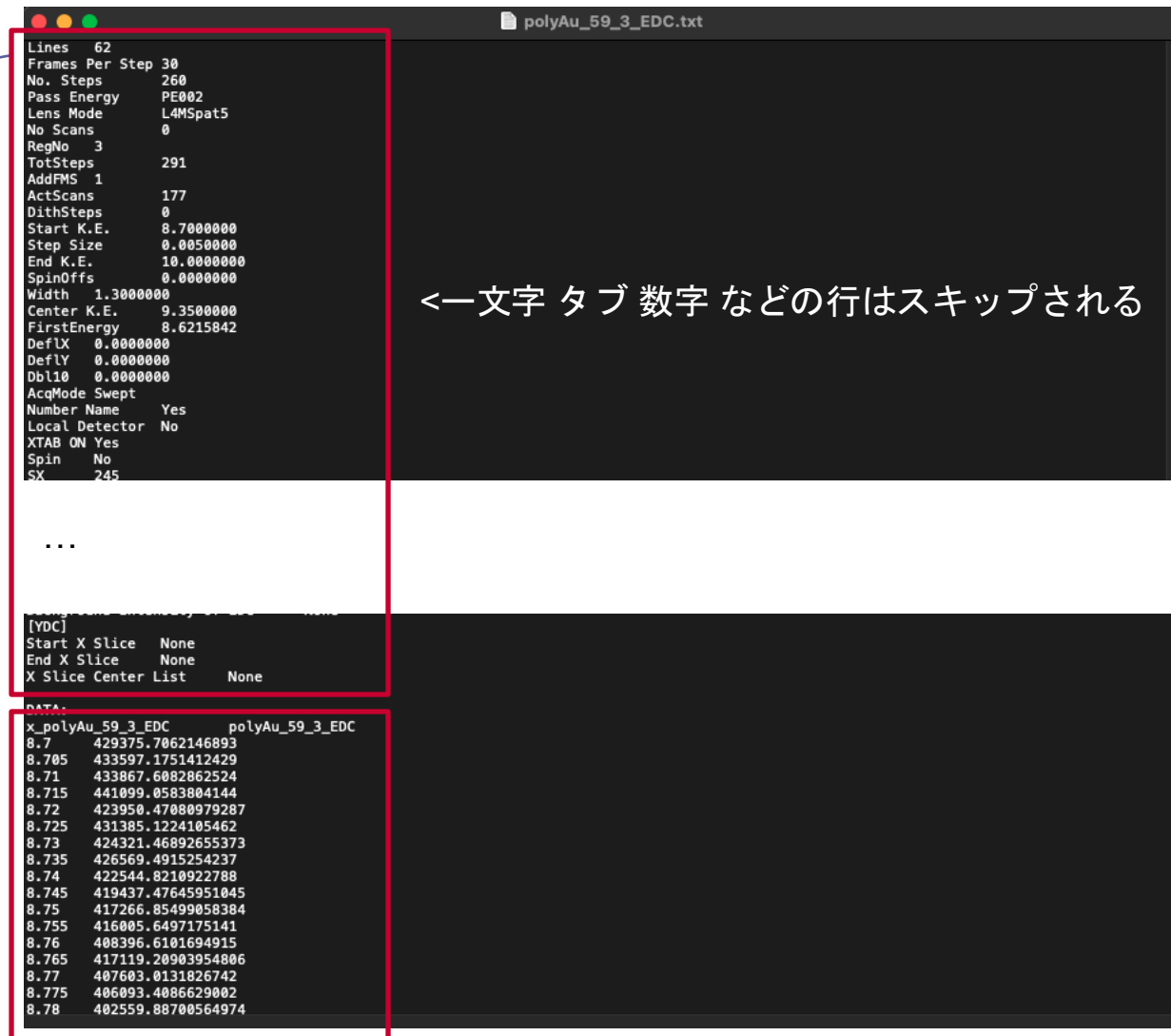
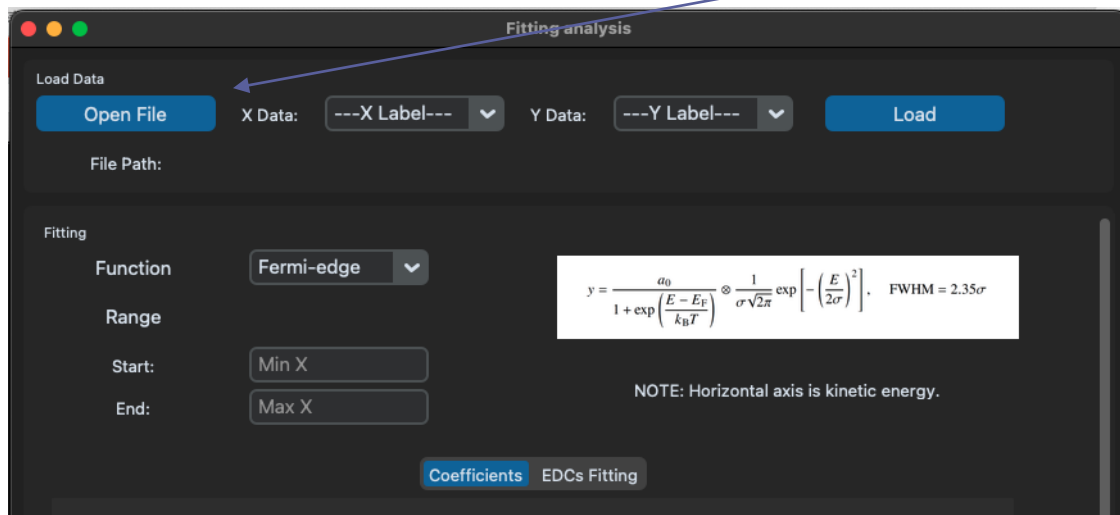
56.8

Open Fileを押すと、Finder (file explorer)のポップアップが出てくる。解析したい **csv** ファイル or **txt file**を選ぶ。  
(Finderの初期ディレクトリは、LauncherのOpen folderに記入した絶対パス)

[illegible]

csvファイルの例。ある行にlegend (文字列) があり、その下に数値データがあれば良い。  
最低(x, y)の2列は必要。

## テキストfileの例



数字がタブで区切られた列が2列以上ある部分をdataとして検知・読み込む。  
data直前の行をlegendとして読み込む。



**Fitting analysis**

Load Data

Open File

X Data: x\_beta9\_23\_14 Y Data: x\_beta9\_23\_14 Load

File Path: /Users/ryotaro/Library/CloudStorage/GoogleDrive/20241217\_organic\_conductors/A1raw/beta9\_23\_149\_2

Fitting

Function: Fermi-edge

X Range

X Min: Min X X Max: Max X

Coefficients

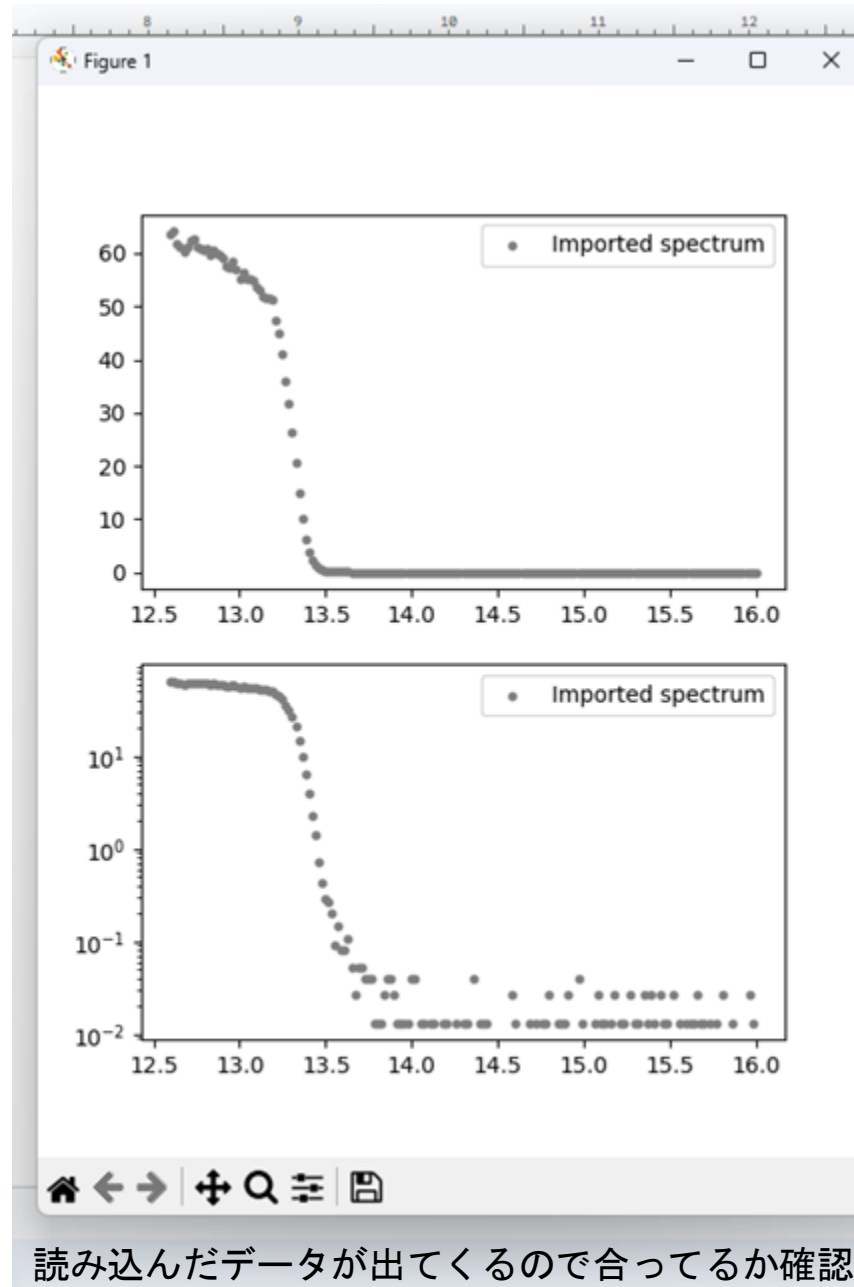
Symbol	Initial Value	Fix	Min
T	300	<input checked="" type="checkbox"/>	
EF	Fermi level	<input type="checkbox"/>	
FWHM	FWHM of Instru	<input type="checkbox"/>	
a0	Intensity	<input type="checkbox"/>	
bg	0	<input checked="" type="checkbox"/>	

2 Loadボタンを押すと選んだX, Yデータが読み込まれる

## CSV ファイル

# データの読み込みはFitting, deconvolutionで共通

データの読み込み完了



読み込んだデータが出てくるので合ってるか確認

# Fitting Analysis

データの読み込み完了画面

**Fitting analysis**

Load Data

Load File X Data: X\_Au\_ITO\_7.7 Y Data: Y\_Au\_ITO\_7.7 User: Ryotaro, NAKAZA

Loaded File: G:/マイドドライブ/test\_spectrum.csv Open

Fitting Analysis

Function: ---SELECT---

Range: ---SELECT---

Start: polylogarithm

End: Fermi-edge

Maximum energy

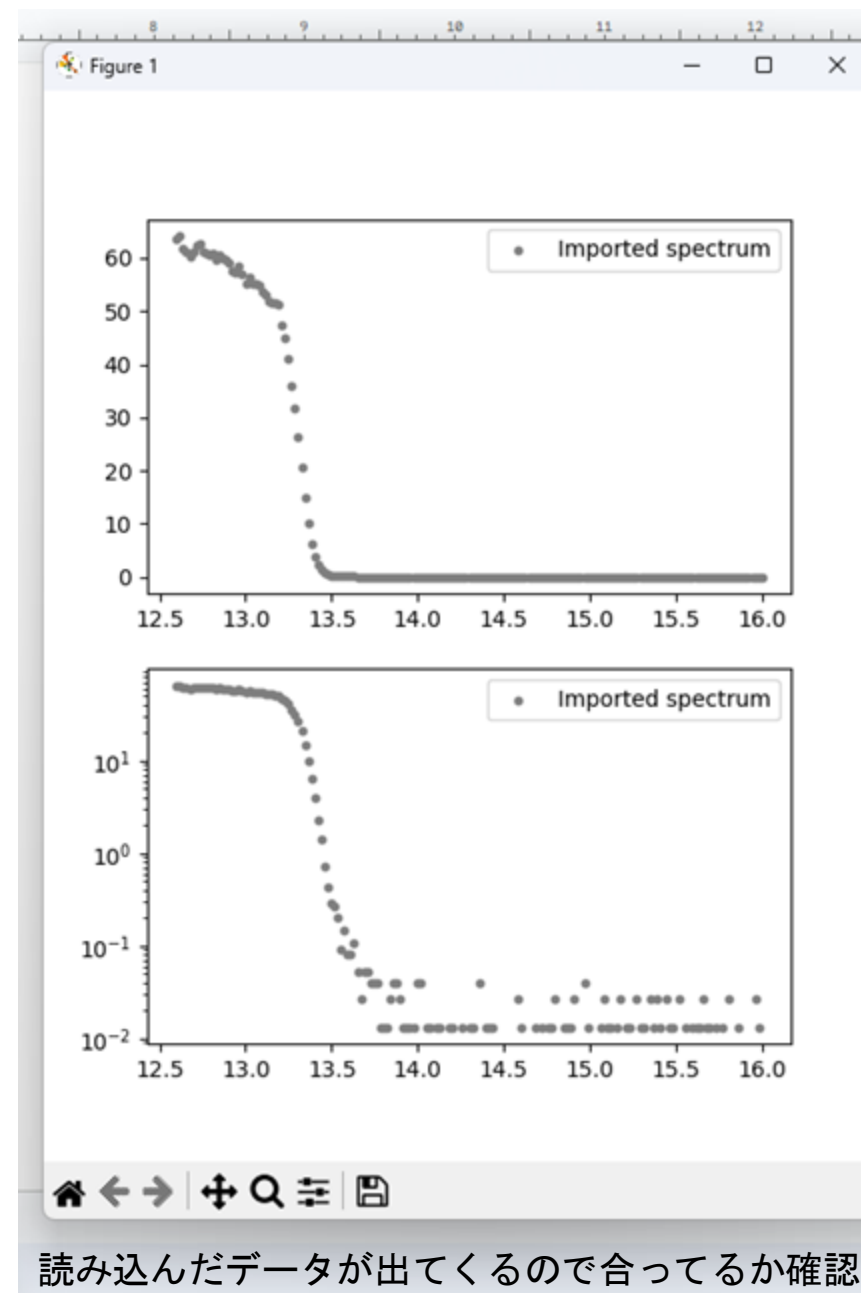
Coefficients

Save Data

Save Note: [Info] File name Label name

Saved File:

Functionのプルダウンで fitting関数を選択する



今回は“Fermi-edge”関数を使用する ① fittingの条件を考える

Load Data

Load File X Data: X\_Au\_ITO\_7.7 Y Data: Y\_Au\_ITO\_7.7 User: Ryotaro, NAKAZA

Loaded File: G:/マイドドライブ/test\_spectrum.csv Open

Fitting Analysis

Function: Fermi-edge

Range

Start: Minimum energy End: Maximum energy

$$y = \frac{a_0}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \otimes \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\left(\frac{E}{2\sigma}\right)^2\right], \quad \text{FWHM} = 2.35\sigma$$

NOTE: The energy axis corresponds to the kinetic energy of photoelectrons.

Coefficients

T: 300 EF: Fermi level FWHM: Full width at half a\_0: Intensity

Constrain?

Minimum <T< Maximum Minimum <E\_F< Maximum Minimum <FWHM< Maximum Minimum <a\_0< Maximum

Hold?

Results

Graph Now

Save Data

Save Note: [Info] File name Label name

Saved File:

fittingするx範囲

パラメータの設定  
各パラメータの意味は  
定義式で確認しよう。

② fitting条件が決まったらGraph Nowボタンを押す。

関数の定義式  
(⊗はconvolutionを示す)

初期値

範囲の束縛  
(しなくてもよい)

初期値に束縛  
(しなくてもよい)

Graph Nowを押すと、初期値をfitting関数に代入した関数が表示される  
(オレンジ)。青点線はfitting関数をfitting範囲外に拡張したときのfitting関数

Fitting analysis

Load Data

Load File X Data: X\_Au\_ITO\_7.7 Y Data: Y\_Au\_ITO\_7.7 User: Ryotaro, NAKAZA

Loaded File: G:/マイドドライブ/test\_spectrum.csv Open

Fitting Analysis

Function: Fermi-edge

$$y = \frac{a_0}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \otimes \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\left(\frac{E}{2\sigma}\right)^2\right], \quad \text{FWHM} = 2.35\sigma$$

Range

Start: 13.1 End: 13.8

NOTE: The energy axis corresponds to the kinetic energy of photoelectrons.

Coefficients	Constrain?	Hold?	Results
T: 300	Minimum <T< Maximum	<input checked="" type="checkbox"/>	
E <sub>F</sub> : 13.3	Minimum <E <sub>F</sub> < Maximum	<input type="checkbox"/>	
FWHM: 0.2	Minimum <FWHM< Maximum	<input type="checkbox"/>	
a <sub>0</sub> : 50	Minimum <a <sub>0</sub> < Maximum	<input type="checkbox"/>	

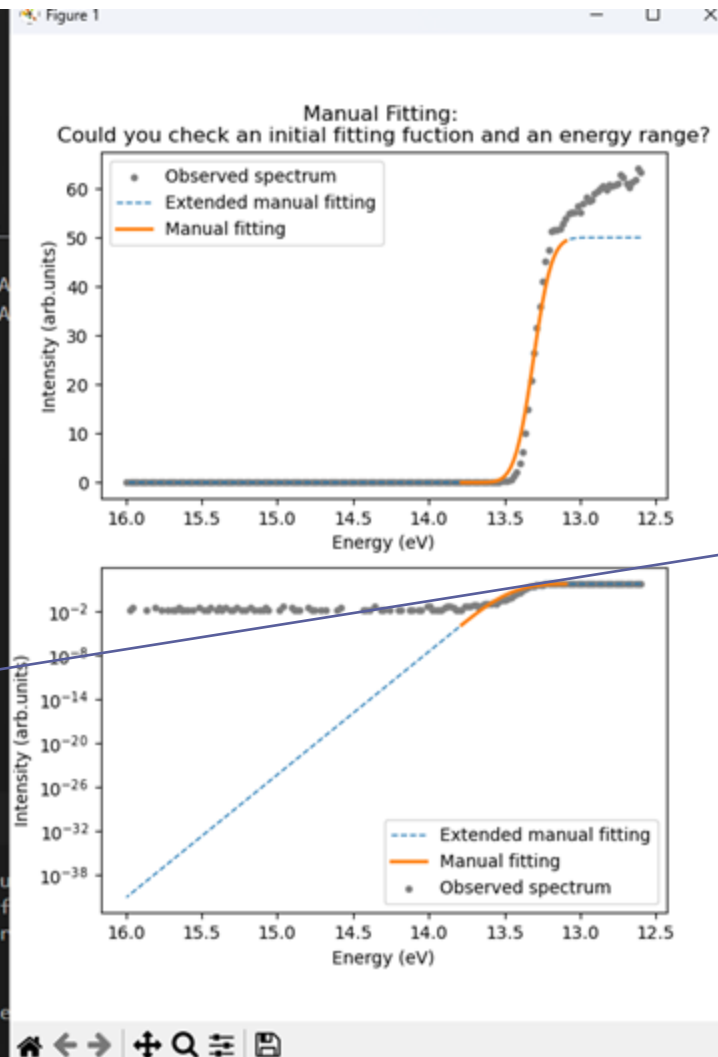
Graph Now

Do It

Save Data

Save Note: [Info] File name Label name

Saved File:



だいたい良さそうか（Fittingが収束しそうか）、fitting範囲は適切か確認する。

よければ Do It ボタンを押して Fittingを実行。

Fitting 実行

Fitting analysis

Load Data

Load File

X Data: X\_Au\_ITO\_7.7

Y Data: Y\_Au\_ITO\_7.7

User: Ryotaro, NAKAZA

Loaded File: G:\マイドライブ\test\_spectrum.csv

Open

Fitting Analysis

Function: Fermi-edge

Range

Start: 13.1

End: 13.8

$$y = \frac{a_0}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \otimes \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\left(\frac{E}{2\sigma}\right)^2\right], \quad \text{FWHM} = 2.35\sigma$$

NOTE: The energy axis corresponds to the kinetic energy of photoelectrons.

Coefficients

		Constrain?	Hold?	Results
T	300	Minimum <T< Maximum	<input checked="" type="checkbox"/>	300
E_F	13.3	Minimum <E_F< Maximum	<input type="checkbox"/>	13.3
FWHM	0.2	Minimum <FWHM< Maximum	<input type="checkbox"/>	0.127
a_0	50	Minimum <a_0< Maximum	<input type="checkbox"/>	53.2

Graph Now

Do It

Save Data

Save

Note: [Info]

File name

Label name

Saved File:

Fitting結果

Figure 2

Fermi energy: 13.2929 eV,  
FWHM: 0.1267 eV,  
Intensity: 53.1616

Intensity (arb.units)

Observed spectrum  
Extended fitting func.  
Fitting func.

Energy (eV)

Intensity (arb.units)

Energy (eV)

# 【Ver. 6.2.0以降】EDCs fitting analysis①

EDCs stackなど、ひとつのfileの中に複数のYデータがあり、一度にそれらすべてを同じ関数でfittingしたいときに使用する。

The screenshot shows the 'Fitting analysis' window with the 'Coefficients' tab selected. The 'Fitting' section displays the 'Fermi-edge' function and its equation: 
$$y = \frac{a_0}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \otimes \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\left(\frac{E}{2\sigma}\right)^2\right], \text{ FWHM} = 2.35\sigma$$
 A note states: 'NOTE: Horizontal axis is kinetic energy.' Below this is a table for coefficients:

Symbol	Initial Value	Fix	Min	Max	Fit Result
T	300	<input checked="" type="checkbox"/>		<=T<=	
E_F	Fermi level	<input type="checkbox"/>		<=E_F<=	
FWHM	FWHM of Instru	<input type="checkbox"/>		<=FWHM<=	
a_0	Intensity	<input type="checkbox"/>		<=a_0<=	
bg	0	<input checked="" type="checkbox"/>		<=bg<=	

Buttons at the bottom include 'Graph Now', 'Do It', and 'Close Figures'. The 'Save Data' section at the very bottom has 'Save', 'Comment: [Info]', 'Filename', and 'Legend Name' fields, with a 'Saved File:' label below.

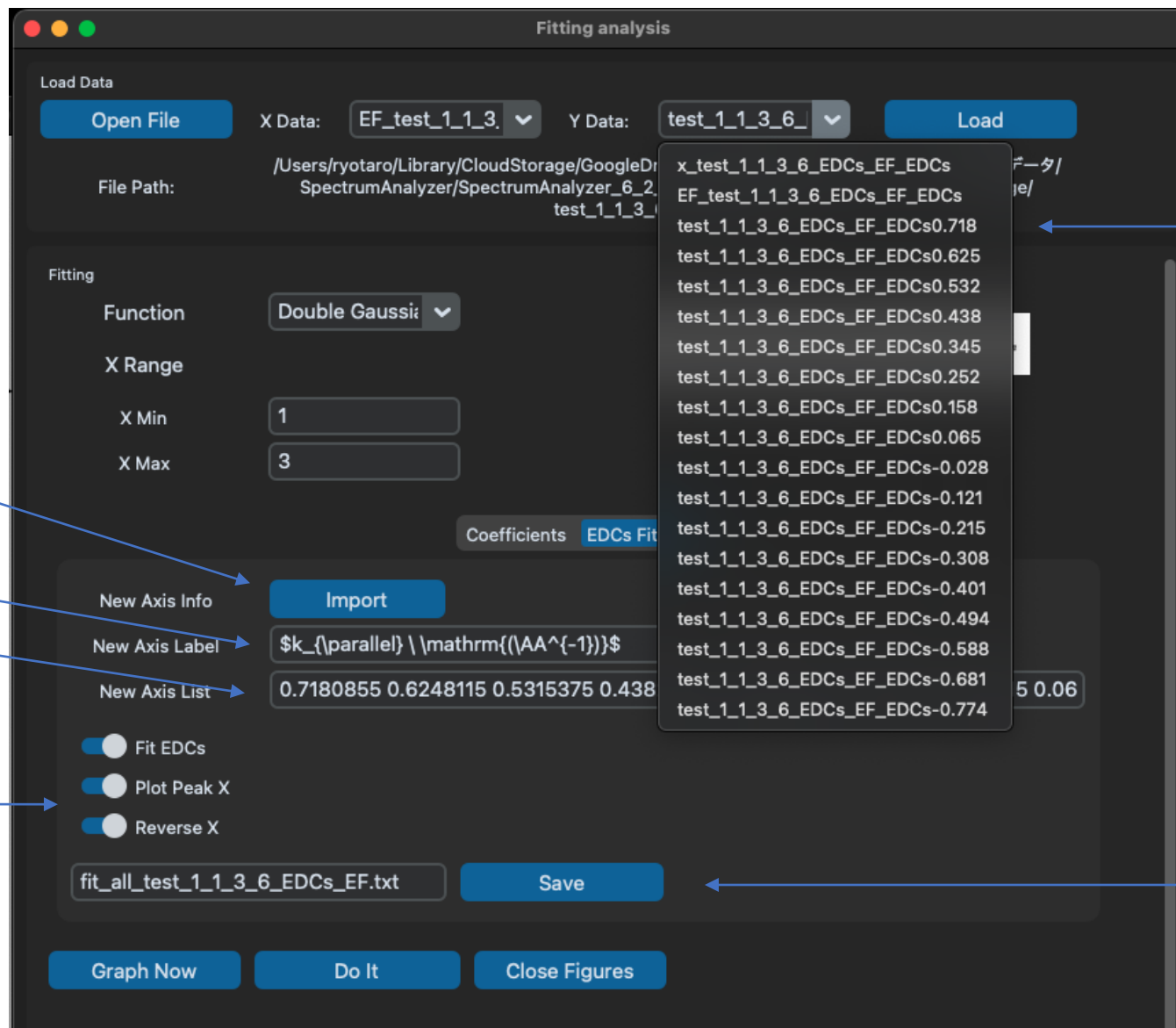
The screenshot shows the 'Fitting analysis' window with the 'EDCs Fitting' tab selected. A yellow arrow points to this tab from the 'Coefficients' tab. The 'New Axis Info' section contains an 'Import' button, a 'New Axis Label' field with 'Data Number', and a 'New Axis List' field with 'Values Separated by Spaces'. Below these are three radio buttons: 'Fit EDCs' (selected), 'Plot Peak X', and 'Reverse X'. There is also a 'Filename to Be Saved' field and a 'Save' button. The 'Graph Now', 'Do It', and 'Close Figures' buttons are at the bottom. The 'Save Data' section at the very bottom is identical to the first screenshot.

EDCs fittingを押し、画面をcoefficientsから切り替える



# EDCs fitting analysis②

GUIの説明



一番上のEDCを選択する。  
Do itを押すと、  
そこから下のLegendのYデータに  
対して順々にFittingをおこなう。

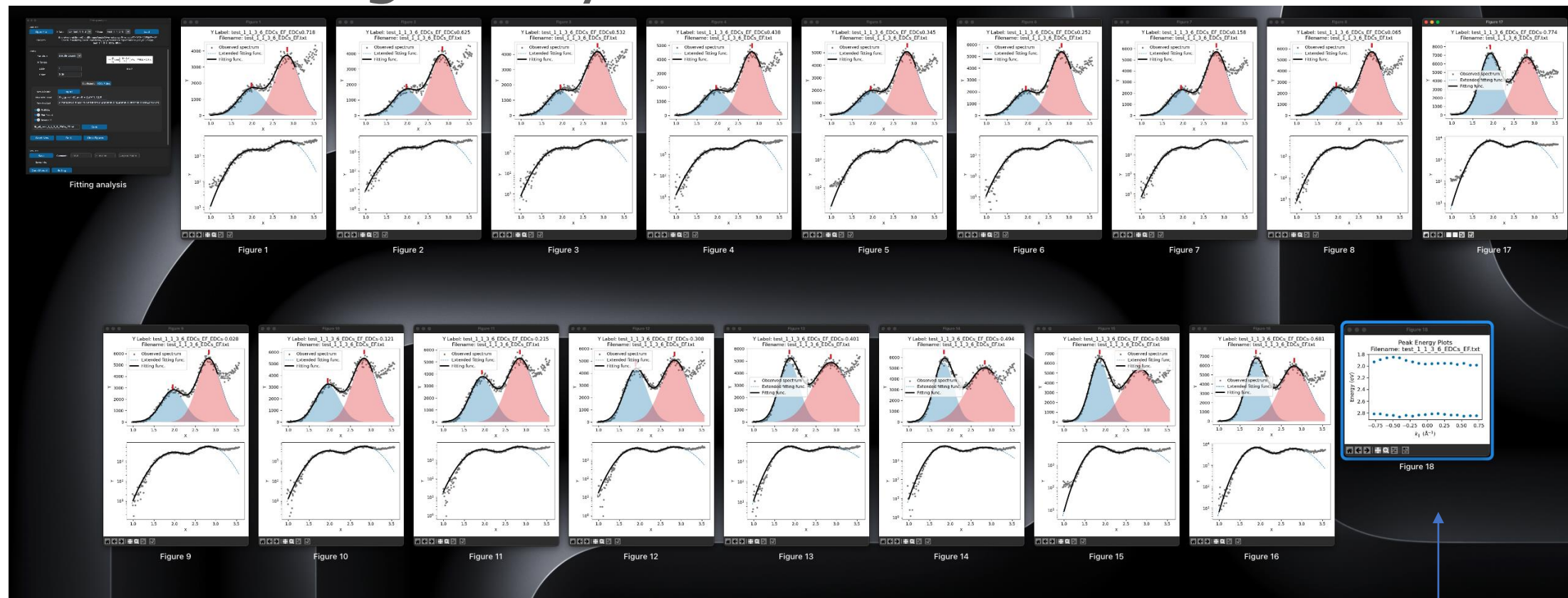
Save buttonで結果を保存。  
右のfilenameで保存される。

GUI一番下のSave Data Frame (左  
図では見切れている)の"Save"  
buttonは最後のスペクトルをfitting  
したデータだけが保存されるので  
注意。

Do Itボタンで実行

# EDCs Fitting Analysis③

出力画面



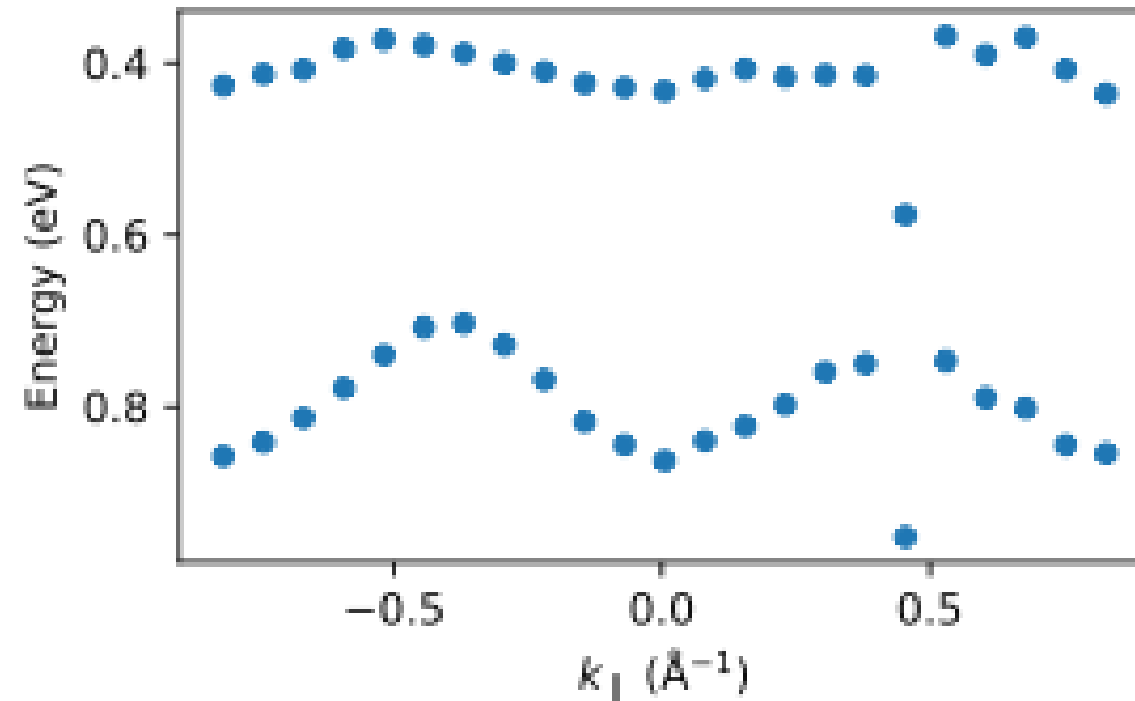
最初に選択したYデータ（前項）より下のすべてのYデータに対してfittingを行い、fitting結果がすべて表示される。  
Gaussian functionを選択したときは、得られたピークエネルギーを別グラフでプロットことも可能(\*)。  
プロットしたい場合、GUIの”Plot Peak X”スイッチをONにする。

(\*)

この連続fittingプログラムのアルゴリズムは、

- ① Load Data Frameで選択されたY Data (Combo box) に対してfittingを行い、fitting結果を保存。
- ② DataImportのLegendを一つ下に再設定してYdata読み込み。①で得たfitting paramsをinitial valuesに再設定する。  
※ Paramsの制限 (Min, Max, Fix) やFitting範囲 (X Min, X Max) の設定値は引き継ぐ。  
Y DataのComboboxのLegendが一番下に行くまで①②を繰り返す。

## 前項Figure (\*) について



横軸のlabelと数値データはGUIでImportした文字列、リストを取得している。

リストの要素数とFittingされるspectra数が一致しない場合、横軸はデータ数 (1, 2, 3, ..., n) ・ラベル名はData Numberになる。

Save data

データを保存する。Saveボタンを押す

Fitting analysis

Load Data

Load File X Data: X\_Au\_ITO\_7.7 Y Data: Y\_Au\_ITO\_7.7 User: Ryotaro, NAKAZA

Loaded File: G:/マイドドライブ/test\_spectrum.csv Open

Fitting Analysis

Function: Fermi-edge

$$y = \frac{a_0}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)} \otimes \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left[-\left(\frac{E}{2\sigma}\right)^2\right], \text{ FWHM} = 2.35\sigma$$

Range

Start: 13.1 End: 13.8

NOTE: The energy axis corresponds to the kinetic energy of photoelectrons.

Coefficients		Constrain?	Hold?	Results
T	300	Minimum <T< Maximum	<input checked="" type="checkbox"/>	300
E_F	13.3	Minimum <E_F< Maximum	<input type="checkbox"/>	13.3
FWHM	0.2	Minimum <FWHM< Maximum	<input type="checkbox"/>	0.127
a_0	50	<a_0< Maximum	<input type="checkbox"/>	53.2

Graph Now

Save Data

Save Note: [Info] メモが書けるよ Label name

Saved File: G:/マイドドライブ/results/out\_test\_spectrum\_メモが書けるよ.csv

Saveを押すと結果がresultsフォルダに保存される。保存されたファイルの絶対パスが表示される

Save Data

Save Note: [Info] メモが書けるよ Label name

Saved File: G:/マイドドライブ/results/out\_test\_spectrum\_メモが書けるよ.csv

出力ファイルにメモを書いた例。出力ファイルに”メモが書けるよ”が追記されている。

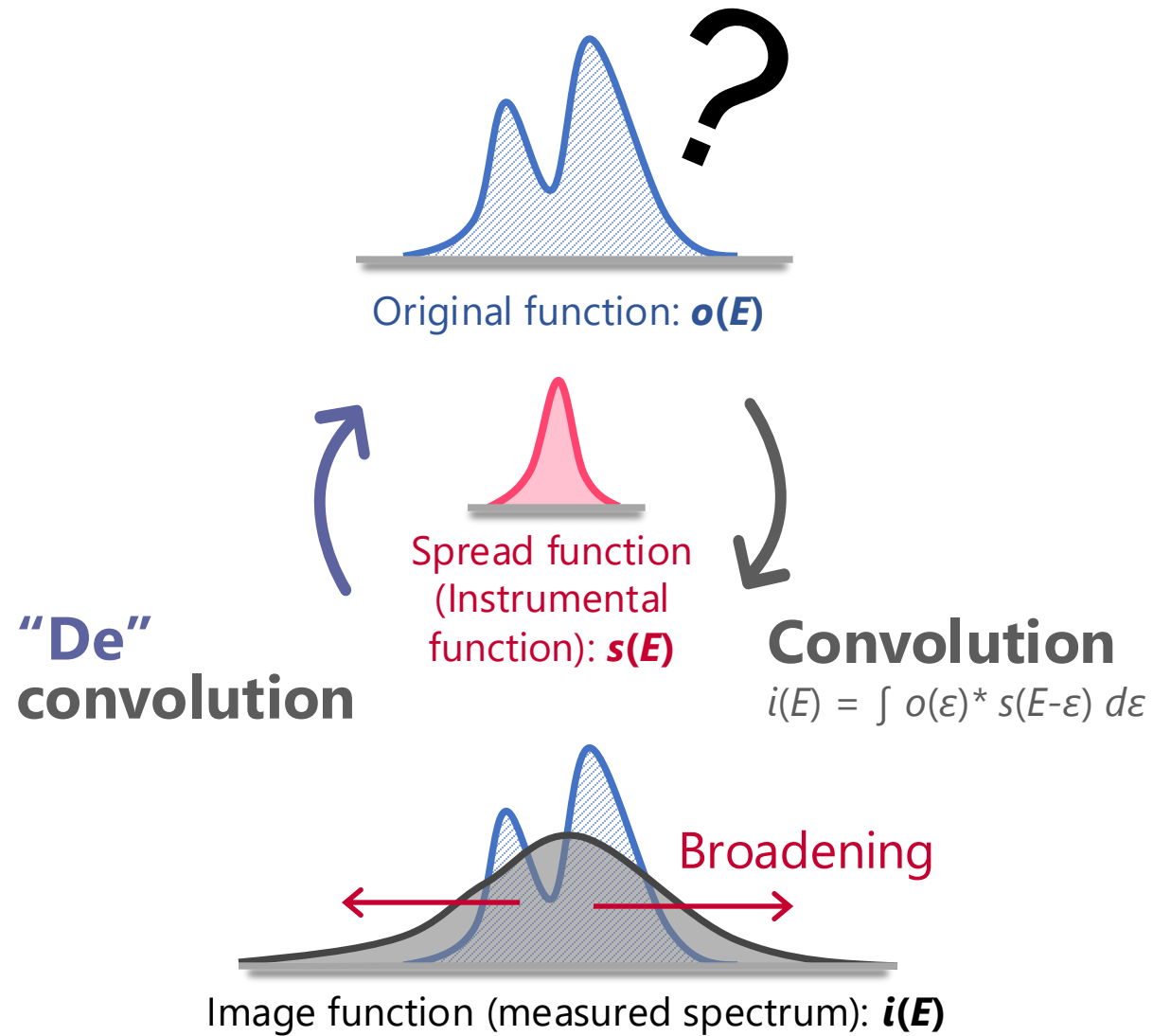
出力ファイル内のCommentに残るメモ

出力ファイルの末尾に追加?

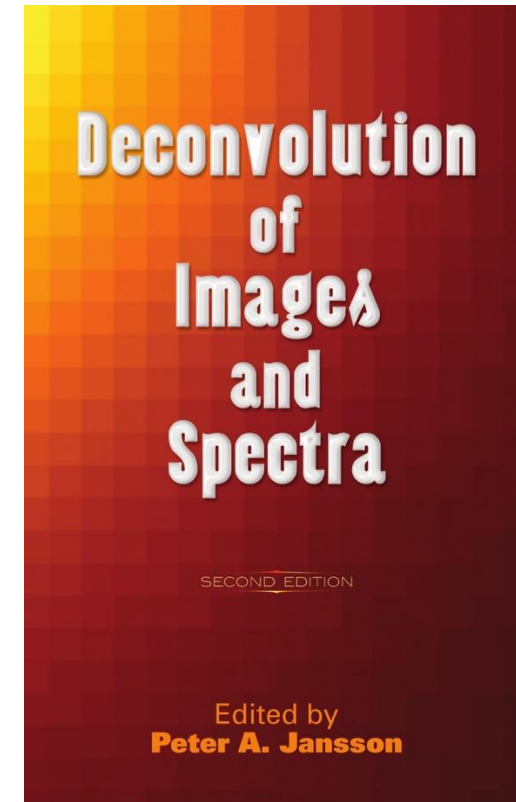
Legendの末尾に追加?

# Deconvolution Analysis for improvement of energy resolution

# Concept



## Iterative non-linear deconvolution



P. A. Jansson, *Deconvolution of Images and Spectra* (Courier Corporation, 2014).

# Deconvolution analysis 1

左画面

Deconvolution analysis

Load Data

Load File X Data: ---X Label--- Y Data: ---Y Label--- User: nakazawa

Loaded File:

Background processing

Method: None バックグラウンド処理の有無

Deconvolution Analysis

Spread function: Gaussian params: FWHM 装置関数の選択

Smoothing: Auto-/Cross-c スムージング方法の選択

Deconvolution: ---SELECT--- Deconvolutionのアルゴリズム選択

Iteration number: Iteration number Iteration numberの入力

Range (RMSE)

Start: Minimum energy Edge? ☒

End: Maximum energy Edge? ☒ 平方根二乗平均誤差の範囲指定

Save Data

Save Note: [Info] File name Label name

Saved File:

- Gaussianの場合、半値全幅を入力
- Importの場合、csvデータを選ぶ (Load Fileと同じ要領)。
- 2本の実測スペクトルからspread funcを求めたい場合も”Import”を使用する (cf. Appendix-A)

デフォルトは全範囲



# バックグラウンド処理 1

The screenshot shows the 'Deconvolution ana' software interface. The 'Preprocess' section is active, showing the 'Method' set to 'Constant BG +'. The 'BG Region' is defined by 'Min X' and 'Max X' input fields. The 'Fitting Region' is also defined by 'Min X' and 'Max X' input fields. The 'Fitting Params' section includes 'Peak Intensity', 'Center X', and 'FWHM (=2.35 sign)'. The 'Deconvolution' section shows the 'Instrumental Function' set to 'Gaussian', 'Params' set to 'FWHM', 'Smoothing' set to 'Auto-/Cross-ct', 'Deconvoluiton' set to 'Jansson's metl', and 'Params' set to '0', '10', and '0.8'. The 'Iteration Number' is set to 'Positive Integer, k'. The 'RMSE Region' is defined by 'Min X' and 'Max X' input fields, with checkboxes for 'Edge (Min X)?' and 'Edge (Max X)?'. The 'Deconvolute', 'Detect peaks', and 'Close figures' buttons are visible. Below the buttons, there is a mathematical formula for  $\hat{o}^{k+1}(x)$  and a reference to P. A. Jansson's work.

Load Data

Open File X Data: ---X Legend--- Y Data: ---Y Legend--- Load

File Path:

Preprocess

Method: Constant BG +

BG Region: Min X Max X

Fitting Region: Min X Max X ☐ Low X Side ☒ High X Side

Fitting Params: Peak Intensity Center X FWHM (=2.35 sign)

Cancel Do it Graph Now

Deconvolution

Instrumental Function: Gaussian Params: FWHM

Smoothing: Auto-/Cross-ct

Deconvoluiton: Jansson's metl Params: 0 10 0.8

Iteration Number: Positive Integer, k

RMSE Region: Min X Max X ☒ Edge (Min X)? ☒ Edge (Max X)?

Deconvolute Detect peaks Close figures

$$\hat{o}^{k+1}(x) = \hat{o}^k(x) + r[\hat{o}^k(x)][\hat{o}^k(x) - s(x) \otimes \hat{o}^k(x)]$$

$$r[\hat{o}^k(x)] = r_0 \left[ 1 - \frac{2}{b-a} \left| \hat{o}^k(x) - \frac{a+b}{2} \right| \right]$$

Reference: P. A. Jansson, Deconvolution of Images and Spectra (Courier Corporation, 2014).

Save Data

Save Comment: [Info] Filename Legend Name

Saved File:

Open Manual Setting

## Constant BG + Gaussianの場合

バックグラウンド領域を指定

Fitting領域を指定 (Low (High) X sideで置換する方を選ぶ)

Gaussainのfitting paramsの初期値

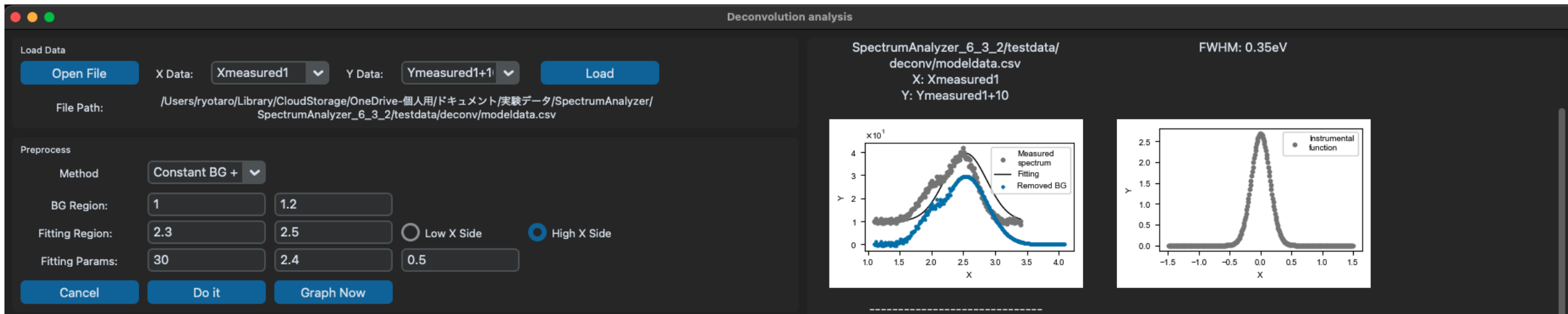
ピーク強度(Y)、ピークのエネルギー(X)、半値全幅

Graph nowで確認

Do it でgaussainでfitting → spectrum置換

CancelでGaussain置換取り消し。

# バックグラウンド処理 2



1-1.2 eVがバックグラウンド領域  
2.3-2.5 eVがfittingの領域, 高エネルギー側をfitting function (gaussain) で置換  
初期パラメータは強度 30, ピークエネルギー2.4 eV, 半値全幅0.5 eV  
でFittingを行った (Do it ボタン)。

Graph nowボタンで初期パラメータによるfitting関数のlineshape確認、  
Cancelでfittingの取り消しが出来ます。

黒線がfitting関数。  
青が置換後の関数。  
青spectrumをdeconvolutionすることになる。

# Deconvolution analysis 2

左画面

Load Data

Load File X Data: ---X Label--- Y Data: ---Y Label--- User: nakazawa

Loaded File:

Background processing

Method: None

Deconvolution Analysis

Spread function: Gaussian params: FWHM

Smoothing: Auto-/Cross-c

Deconvolution: Jansson's met params: 0 10 0.8

Iteration number: Iteration number

Range (RMSE)

Start: Minimum energy Edge? ☒

End: Maximum energy Edge? ☒

$$\hat{\delta}^{k+1}(x) = \hat{\delta}^k(x) + r[\hat{\delta}^k(x)][\hat{\delta}^k(x) - s(x) \otimes \hat{\delta}^k(x)]$$

$$r[\hat{\delta}^k(x)] = r_0 \left[ 1 - \frac{2}{b-a} \left| \hat{\delta}^k(x) - \frac{a+b}{2} \right| \right]$$

Reference: P. A. Jansson, Deconvolution of Images and Spectra (Courier Corporation, 2014).

Deconvolute

Detect peaks

Save Data

Save Note: [Info] File name Label name

Saved File:

Deconvolutionのアルゴリズムを選択する。

パラメータがある場合、Comb boxの横にparamsが出てくるので入力する。  
下に原理式が出現し、パラメータの意味がわかる。

“Deconvolute”, “Detect peaks”ボタンが出現。  
Deconvolute でdeconvolution実行。  
Detect peaksはdeconvoluted spectraのピークエネルギーを調べる

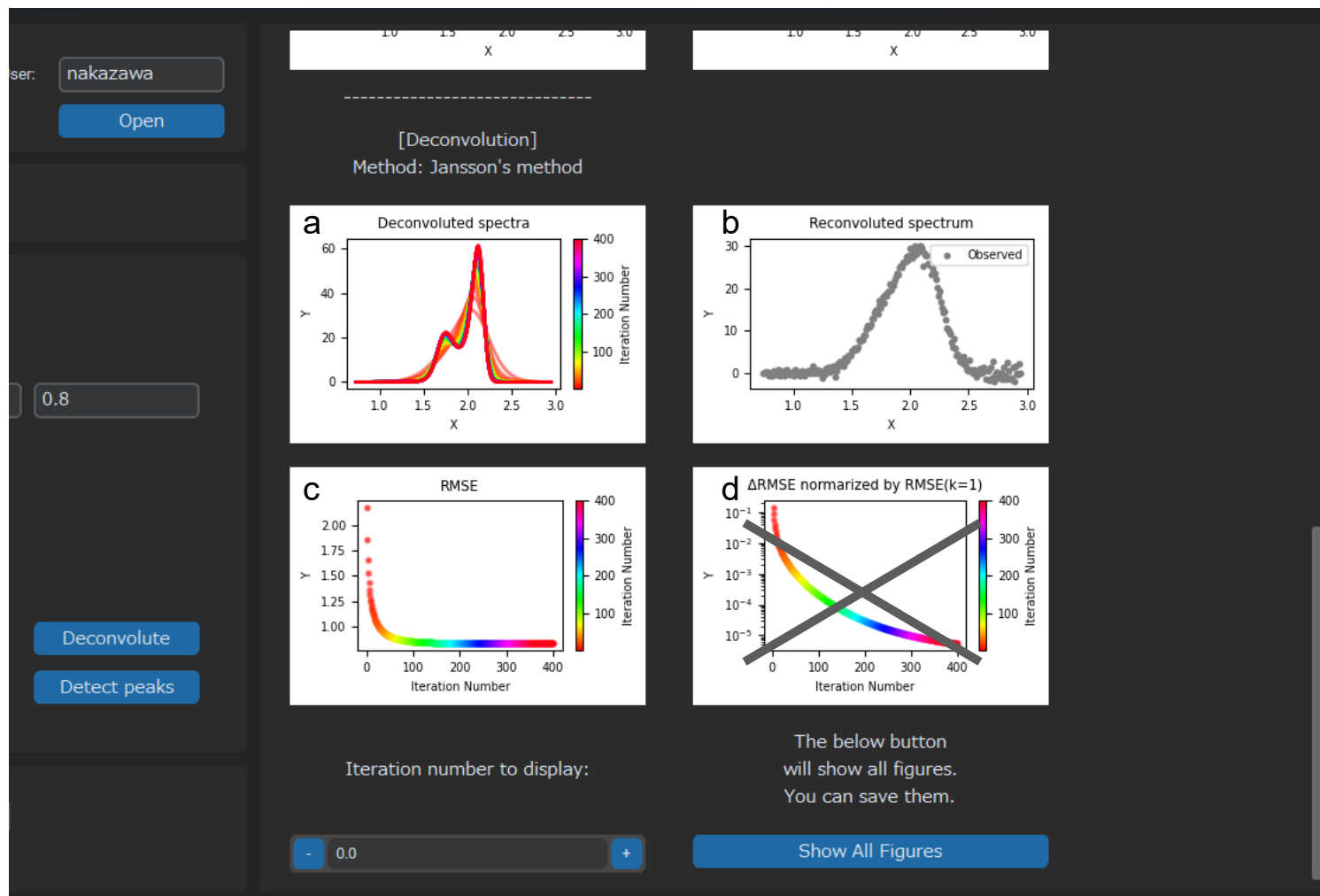
Ver 6.\*.\*でClose Figuresボタンを追加しました。  
出力した図をすべて消すことができます。

# Plot of results 1

Deconvolutionを行うと結果が右画面に表示される。装置関数や入力データが正しいか確認しよう。

左画面

右画面



プロット画面を下にスクロールすると

[Deconvolution] の欄がある。

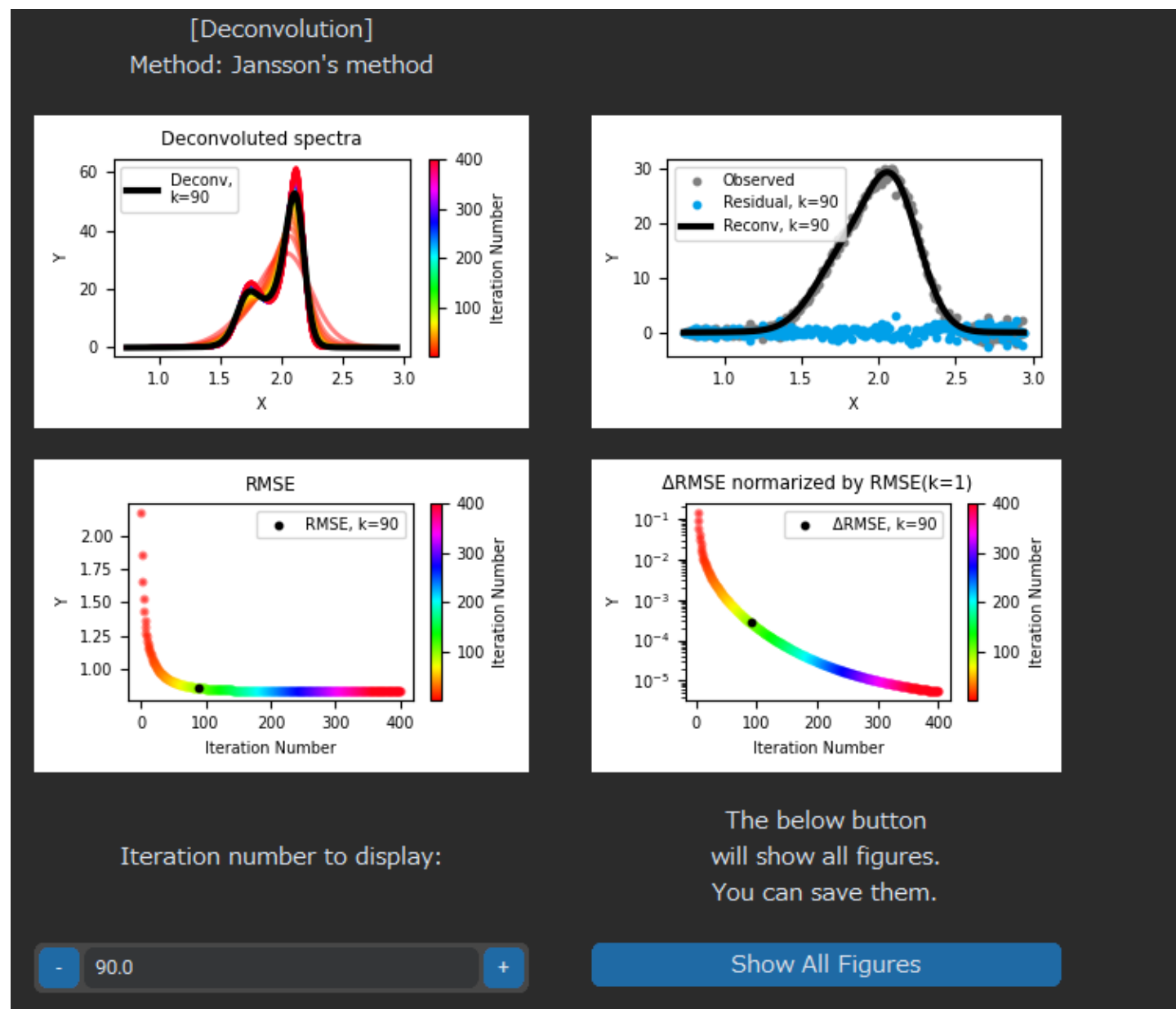
左上から時計回りに

- Deconvolution spectra  
(iteration number,  $k$ , をレインボーで表現)
- Observed spectrum [と Reconvoluted spectrum(次  
頁)]
- 平方根平均二乗誤差 RMSE [observed spectrumと  
reconvoluted spectrumで計算。図bのRasual(次の  
ページ)の各点を二乗して平均した値。]
- RMSE@ $k$ とRMSE@ $k+1$ の差。  
~~縦軸はRMSE@1で規格化されている。~~  
~~Iteration numberを増やしたとき、deconvoluted  
spectrumがどれだけoriginal spectrumに近づいたか  
を示す。Iteration numberの打ち切りを決める目安  
に使う。~~

# Plot of results 2

右画面

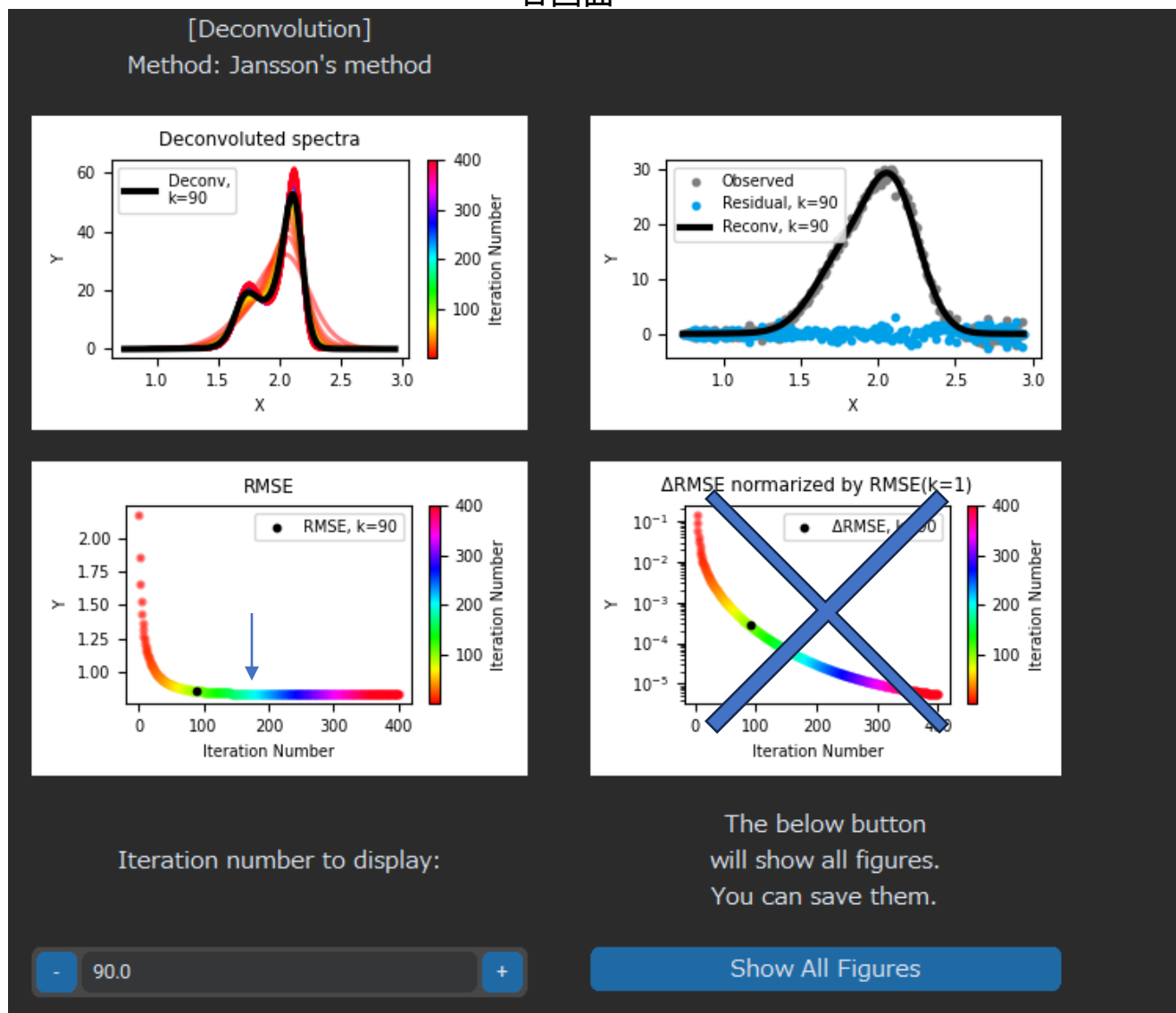
Iteration numberを入力して左右の“+”, “-”を押すと、  
そのiteration numberのときの結果が黒で表示される。  
→ 現在はスライダー



Show All Figures  
グラフが出力されるのでjpegで保存可能。

# Termination of iteration number

右画面



2024.05.27記載

$\Delta$ RMSEが $10e-4$ 程度になったiteration numberで deconvolutionを打ち切ればよい。

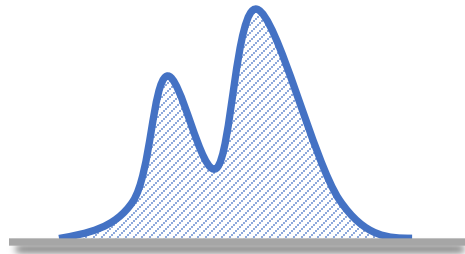
左図の場合  $k \sim 130$ で打ち切れば良いだろう。

2025.01.04記載

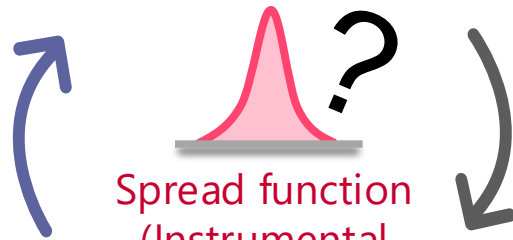
RMSEが一定値に落ち着いたくらいでiterationを打ち切ると良さそう。左図の場合は200手前くらい。

Deconvolution analysis  
for calculation of spread function

# Concept



Original function:  $o(E)$



Spread function  
(Instrumental  
function):  $s(E)$

**Convolution**

$$i(E) = \int o(\varepsilon) * s(E-\varepsilon) d\varepsilon$$

**“De”  
convolution**

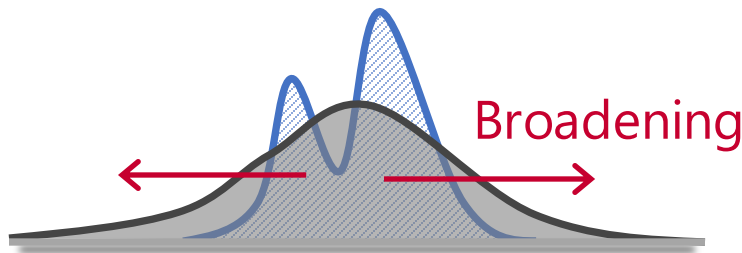


Image function (measured spectrum):  $i(E)$

2本のスペクトルを使用し、  
Spread functionを求める。



# How to use the Deconvolution for instrumental function?

Deconvolution analysis

Load Data

Load File X Data: X\_low\_energy Y Data: Y\_low\_energy User: nakazawa

Loaded File: G:/マイドドライブ/実験データ/spectrumanalyzer\_testdata/deconv/deconv\_f or\_calc\_s/modeldata.csv Open

Background processing

Method: None

Deconvolution Analysis

Spread function: Import Load File X\_high\_energy Y\_high\_energy Open

Smoothing: Auto-/Cross-c

Deconvolution: Gold's ratio m

Iteration number: 100

Range (RMSE)

Start: Minimum energy Edge? ☒

End: Maximum energy Edge? ☒

$$\hat{o}^{k+1}(x) = \hat{o}^k(x) \cdot i(x) / [s(x) \otimes \hat{o}^k(x)]$$

Reference: P. A. Jansson, Deconvolution of Images and Spectra (Courier Corporation, 2014).

Deconvolute

Detect peaks

Save Data

Save Note: [Info] File name Label name

Saved File:

実測スペクトル (エネルギー分解能が悪い方) を読み込む

Spread function を"import"にし、  
エネルギー分解能が良い方のスペクトル or Original  
spectrumを読み込む。

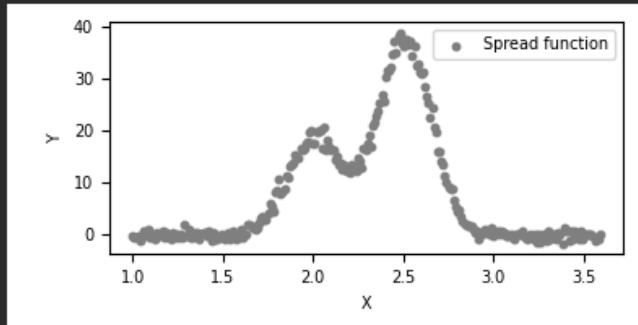
Jansson's method・Gold's ratio method両方で動作確認  
済み (次ページの検証を参照)

# Test

[Spread function]

PATH:

G:/マイドライブ/実験データ/spectr  
umanalyzer\_testdata/deconv/deco  
nv\_for\_calc\_s/modeldata.csv  
X: X\_high\_energy\_resolution  
Y: Y\_high\_energy\_resolution



⊗

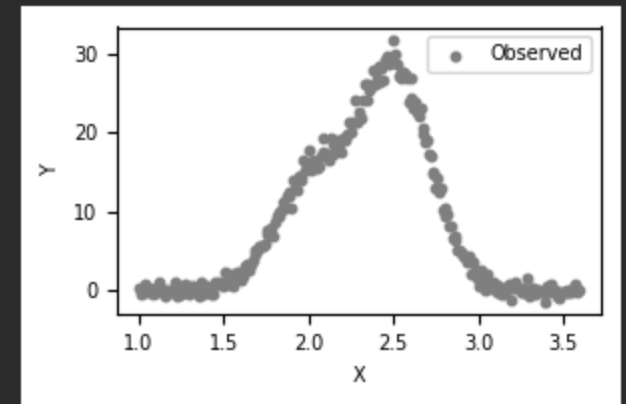
FWHM~0.35 eVの装置関数  
(Gaussian)

=

[Load Data]

PATH:

G:/マイドライブ/実験データ/spectr  
umanalyzer\_testdata/deconv/deco  
nv\_for\_calc\_s/modeldata.csv  
X: X\_low\_energy\_resolution  
Y: Y\_low\_energy\_resolution



分解能が良いスペクトル

FWHM~0.35 eVのGaussian function 2つの線形結合

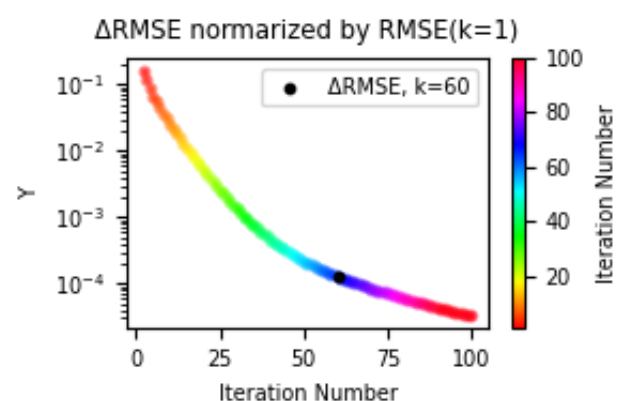
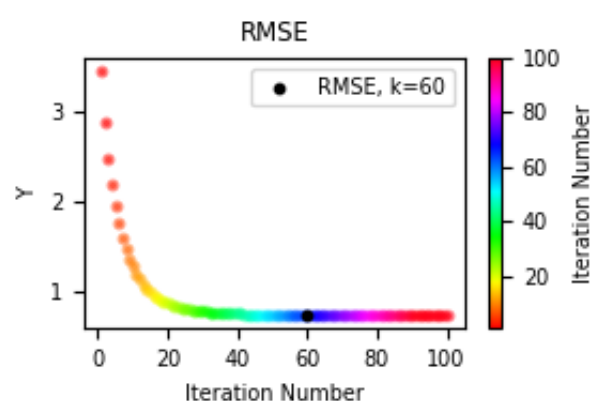
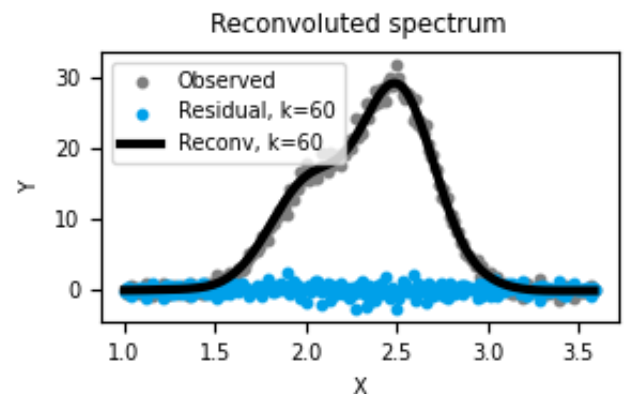
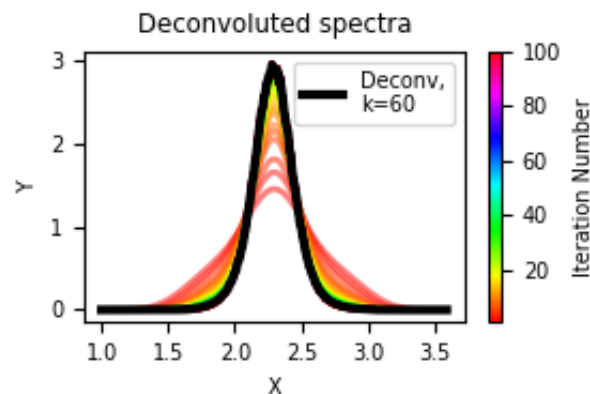
分解能が悪いスペクトル

FWHM=0.49 eVのGaussian function 2つの線形結合

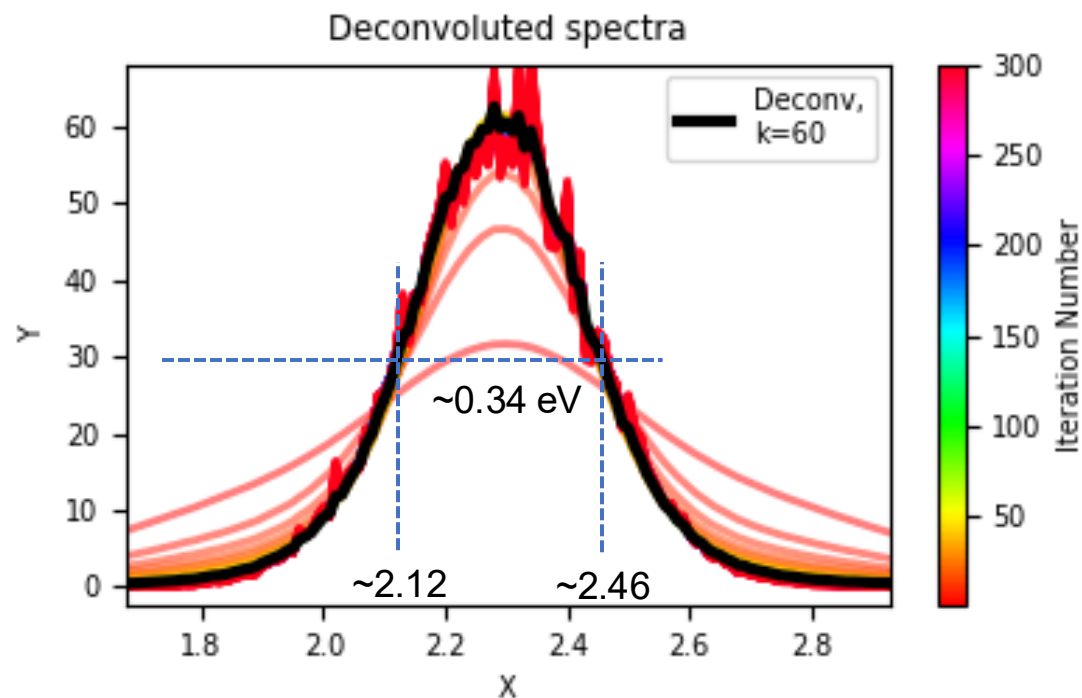
左のスペクトルが、装置関数 (or 散乱関数)  $s(x)$  によるブロードニングを受けて、右のスペクトルになったとして、 $s(x)$ をdeconvolutionで求められるかチェックした。

# Result

[Deconvolution]  
Method: Gold's ratio method



Gold's ratio methodでiteration number=60のときの  
Spread function (dRMSE=10e-4のとき)



装置関数0.35 eVにほぼ一致→ OK!  
横軸・縦軸の絶対値に意味はないので注意。

troubleshooting

# Csvファイルを開けない

```
PermissionError: [Errno 13] Permission denied: 'G:\\マイドライブ\\実験データ\\spectrumanalyzer_testdata\\fitting\\menzel2022fitting'  
PS G:\\マイドライブ\\実験データ\\SpectrumAnalyzer関連\\SpectrumAnalyzer2.4\\src> □
```

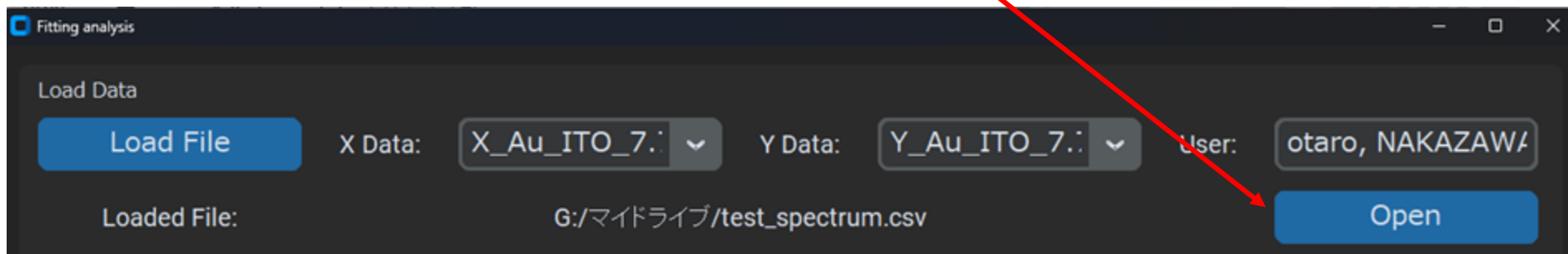
PermissionErrorが出ている場合、csvファイルが開かれています。csvファイルが開かれているとpythonからアクセスできないようです。csvファイルを閉じてください。

# 1. Fitting analysisにて”Graph Now”を押しても何も起こらない

```
問題 出力 デバッグ コンソール ターミナル ポート Python + - [ ] [X] ... ^ X

File "C:\Users\ryota\AppData\Local\anaconda3\lib\site-packages\customtkinter\windows\widgets\ctk_button.py", line 554, in _clicked
    self._command()
File "g:\マイドライブ\実験データ\SpectrumAnalyzer関連\SpectrumAnalyzer\src\fitting.py", line 368, in graph_now_button_callback
    spectrum.fit_spectrum_manually(self.fitting_func,
File "g:\マイドライブ\実験データ\SpectrumAnalyzer関連\SpectrumAnalyzer\src\TwoDSpectrum.py", line 156, in fit_spectrum_manually
    x_fitting = self.x_observed[rps.get_idx_of_the_nearest(self.x_observed, x_fitting_min): rps.get_idx_of_the_nearest(self.x_observed, x_fitting_max)]
AttributeError: 'TwoDSpectrum' object has no attribute 'x_observed'
```

x\_observedがないよ と言われたら、Openの押し忘れ（解析したいスペクトルのパスを通しただけで、x, yデータを読み込んでいない）



Openを押して、入力スペクトルがポップアップで出てきたらオッケー

## 2. Deconvolution analysisにて、 “Deconvolute”ボタンを押しても何も起こらない

```
Exception in Tkinter callback
Traceback (most recent call last):
  File "C:\Users\ryota\AppData\Local\anaconda3\lib\tkinter\__init__.py", line 1921, in __call__
    return self.func(*args)
  File "C:\Users\ryota\AppData\Local\anaconda3\lib\site-packages\customtkinter\windows\widgets\ctk_button.py", line 554, in _clicked
    self._command()
  File "g:\マイドライブ\実験データ\SpectrumAnalyzer関連\SpectrumAnalyzer2.2\src\deconvolution.py", line 742, in deconvolute_button_callback
    spectrum.deconvolute_spectrum(spectrum.x_bg, spectrum.i_ac, spectrum.s_cc, int(self.deconv_iteration_textbox.get()), x_rmse_min, x_rmse_max,
ValueError: invalid literal for int() with base 10: ''
```

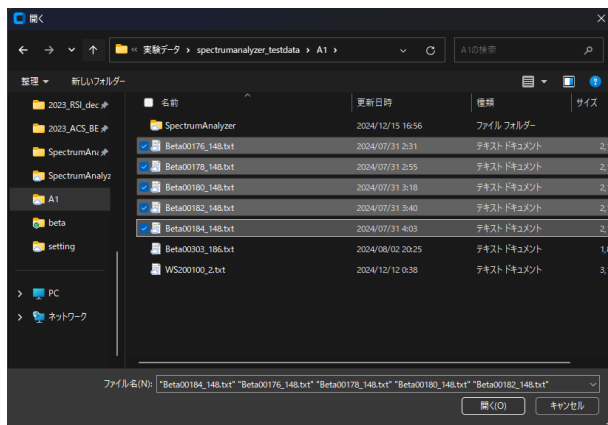
Iteration numberを記入していない、など。必要なパラメータを記入せよ。

# ARPES image 解析

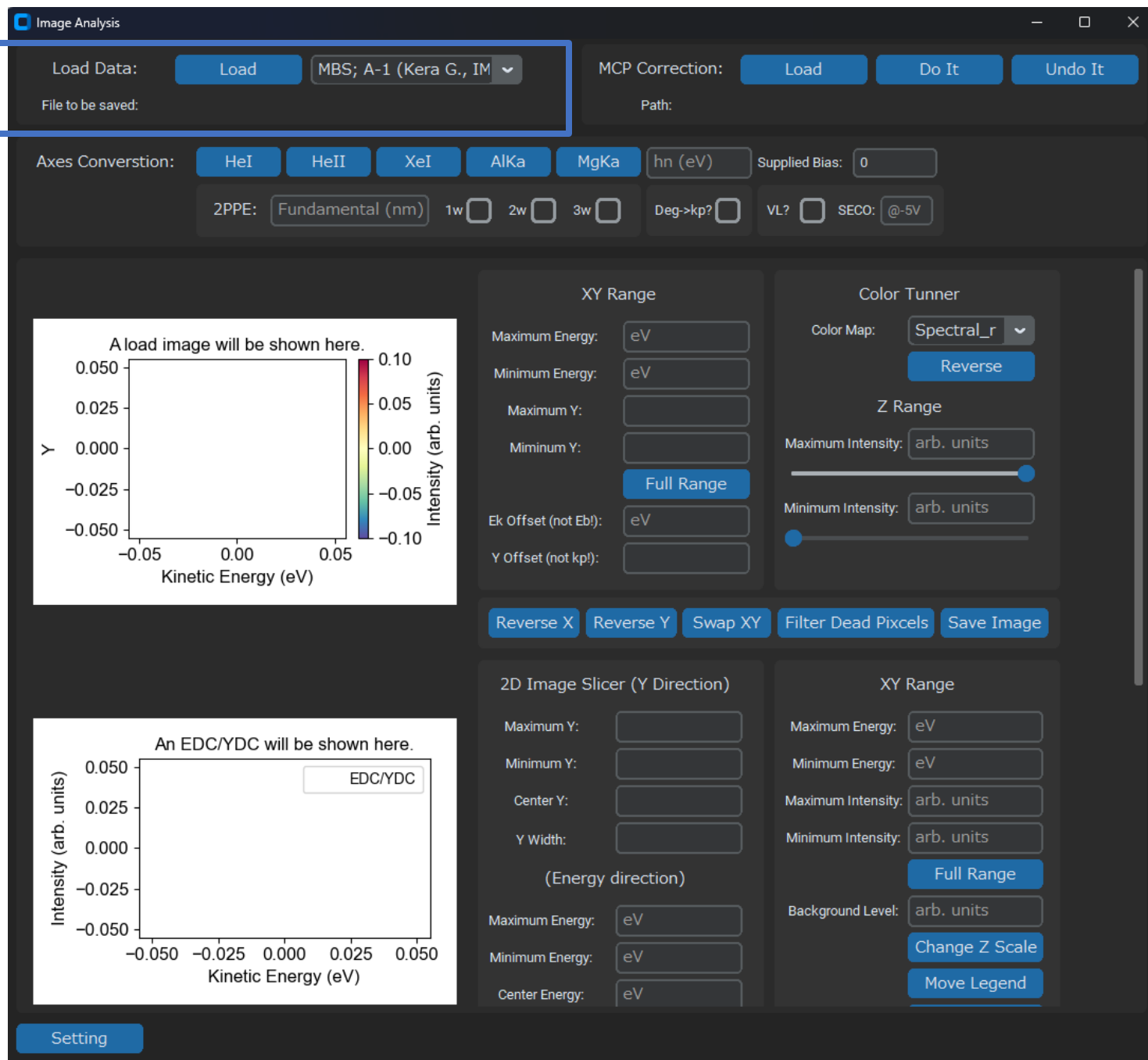


# Data読み込み

使用した装置を指定してデータを読む。  
このボタンを押すとfile explorerが出てくるので  
装置から出力された生ファイルを読み込む。  
複数のファイルを読み込むと、(測定条件が同じなら)それらの  
データを平均化したデータが出力される。



File to be saved には保存されるデータの基本形が表示される。  
MBS-A1の生データは  
名前+測定番号 (5桁)+\_+region番号+.txt  
である。  
(例1) 単一ファイル Sample0001\_12 を読み込んだ場合  
出力ファイル: Sample\_1\_12  
(例2) 複数ファイル Sample00001\_3, Sample00002\_101,  
Sample000010\_14を読み込んだ場合  
出力ファイルSample\_1\_3\_10\_14  
(FileName最小測定番号\_最小測定番号のときのregion番号\_  
最大測定番号\_最大即位番号のときのregion番号)



# データ読み込み後

Entry BoxはEnterキーで実行される

積算されたARPES image

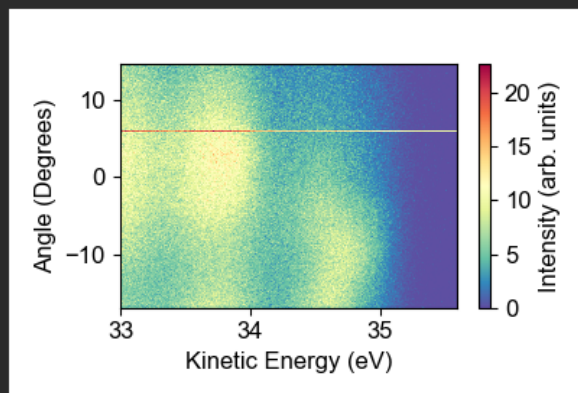
ARPEs Image Analysis

Load Data:  MBS; A-1 (Kera G., IM)

File to be saved: Beta\_176\_148\_184\_148.txt Path:

Axes Conversion:       Supplied Bias:

2PPE:  ☐ 1w ☐ 2w ☐ 3w ☐ Deg->kp? ☐ VL? ☐ SECO:



XY Range

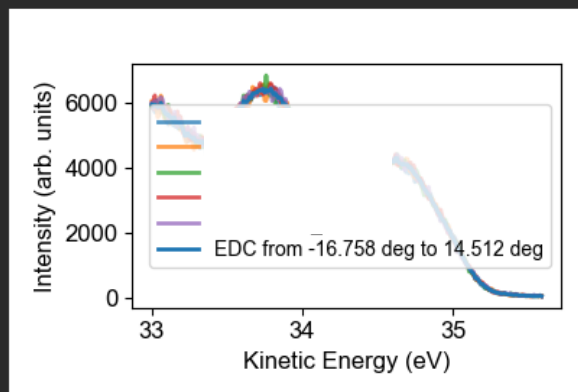
Maximum Energy:   
Minimum Energy:   
Maximum Y:   
Minimum Y:   
  
Ek Offset (not Eb!):   
Y Offset (not kp!):

Color Tunner

Color Map:    
Z Range  
Maximum Intensity:   
Minimum Intensity:

- XYレンジ調整frame。Offsetもかけられる。
- Zレンジ、色調整frame
- XY軸入れかえボタン
- Save File button
- Filter Dead Pixelsは準備中

積算されたEDCとそれぞれのファイルのEDC (データ読み込み時のfigureはY方向全積分したEDCカーブ)



2D Image Slicer (Y Direction)

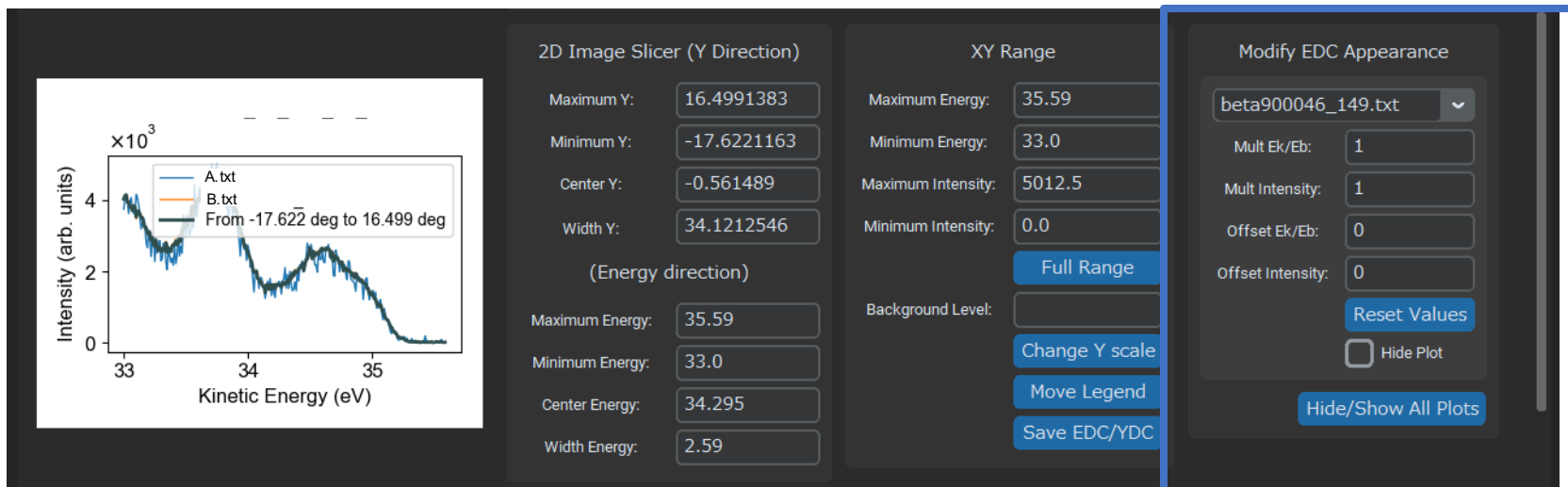
Maximum Y:   
Minimum Y:   
Center Y:   
Y Width:   
(Energy direction)  
Maximum Energy:   
Minimum Energy:   
Center Energy:

XY Range

Maximum Energy:   
Minimum Energy:   
Maximum Intensity:   
Minimum Intensity:   
  
Background Level:

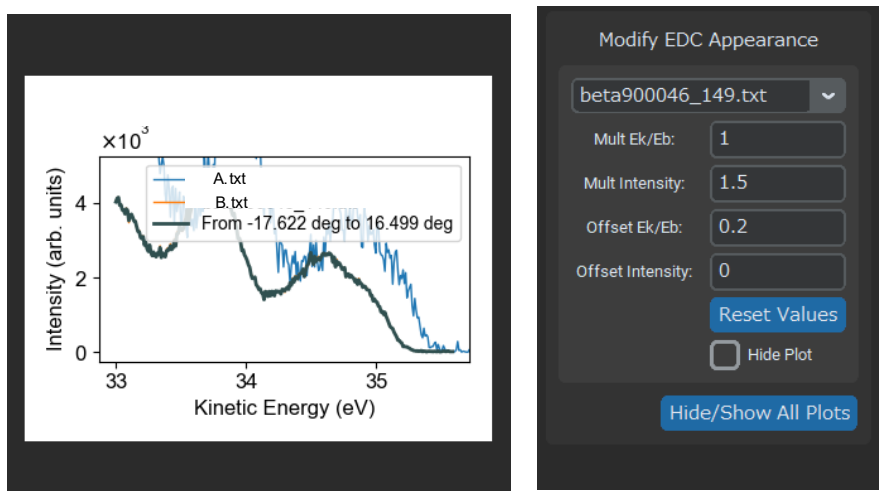
- EDC/YDC作成Frame (切り出すXorY範囲を決める)
- Plot表示するXY領域の調整Frame。Full Range ButtonはXY全領域を自動調整
- 入力した定数バックグラウンドを差し引くentry box
- Y軸: linear $\leftrightarrow$ log 変更ボタン
- 凡例表示/非表示 button
- Save File button

# データ読み込み後 (EDCのviewer機能)

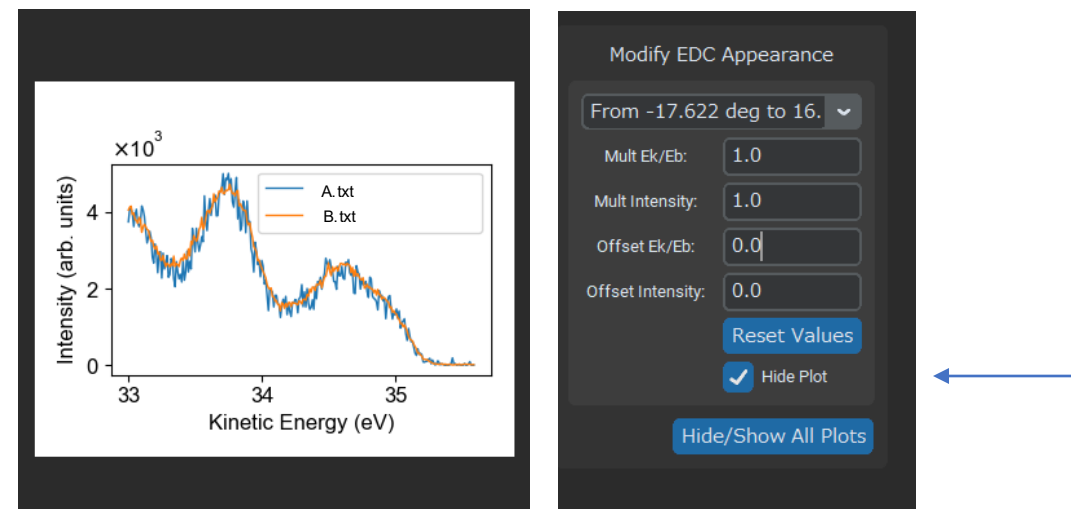


ここでEDCカーブのオフセットや定数倍、  
プロットの表示/非表示が出来る。  
あくまでもviewerとしての機能であり、  
**save data**には影響しない。  
“Integrate X Modified Data”ボタンは  
現在作成中。

(例1) A.txt : Xを+0.2 , Yを1.5倍



(例2) 平均EDCを非表示



# MCP補正

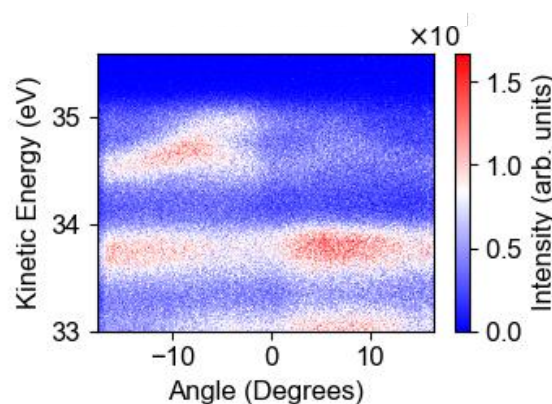
1. MCP補正用データ (分散がない領域でangle resolution modeの測定データ) を読み込む。  
Y(Angle) distribution curveが表示されるので正しいか確認 (Energy方向に全積分することでpixel感度を反映した関数が生成される)。
2. Do It ボタンで前項でLoadしたDataにMCP補正がかかる (前項Load Dataの強度/MCP補正angle distribution curveが行われる)。
3. MCP補正を解除するときはUndo Itボタンを押す。

MCP補正/補正解除はY scaleが生データの時だけ実行できる。Y scaleが波数変換しているとMCP補正できない。

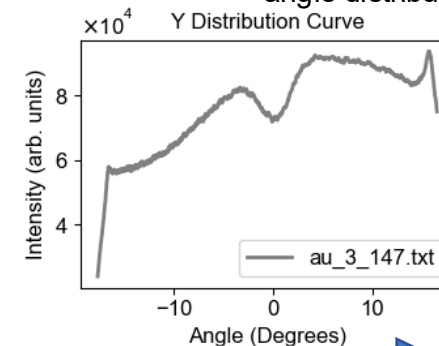
もしすでにAngleをInverse wave vector (kp) に変換してしまったときは、deg->kpのoffにしてEb変換を行い (Y scaleをkp->degに直す)、MCP補正を行う。  
その後deg->kp をonにして、再度deg->kp変換を行えばよい。



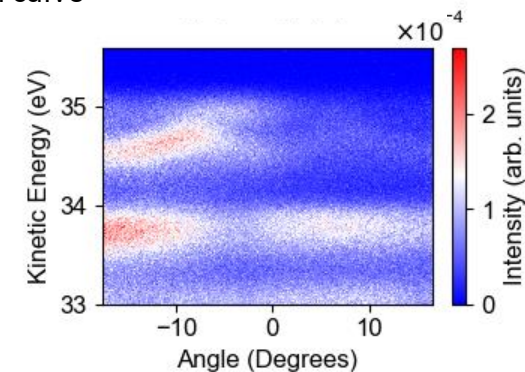
MCP補正関数 Poly Auの3dバンドあたりのangle distribution curve



MCP ムラで0 deg付近の強度が低い



Image/MCP補正関数



0 deg付近のムラがなくなる

# 軸の変換1

- HeI, HeII, XeI, AlKa, MgKaボタンはdefault値を参照してEk→Eb変換を行う。
- フェルミ準位の運動エネルギーはsrc\\setting\\ARPES\_image\_setting.txtに記載されている基準値(次頁参照)を参照している。画面下部のSettingボタンで値を更新できる。
- “hn (eV)” Entry box は励起光エネルギー。ここに任意の値を入力してもよい。Setting記載の基準値との差分をとってフェルミ準位の運動エネルギーを計算し、Ek→Eb変換する。Enter keyで実行される。詳細は次頁参照。
- “Ek@EF” はフェルミ準位の運動エネルギー。こちらにフェルミ準位の値を入力してEb変換してもよい。Enter keyで実行できる。
- 初期値0。試料に電圧を印加している場合はSupplied Biasに電圧 (V)を入力。引火していない場合は0と入力。
- 2PPEは作成中...
- “Deg->kp” にチェック入れると角度を波数に変換してくれる。
- VL?にチェックを入れると真空準位基準Ebに変換する。SECOの値が必要。なお、VL基準Ebに関しては動作チェックはしていない。
- 生データのX/Y軸をoffsetしてからEk->Eb, Deg->kp変換したい場合は、下のOffset valueを先にかけから軸変換すること。

Image Analysis

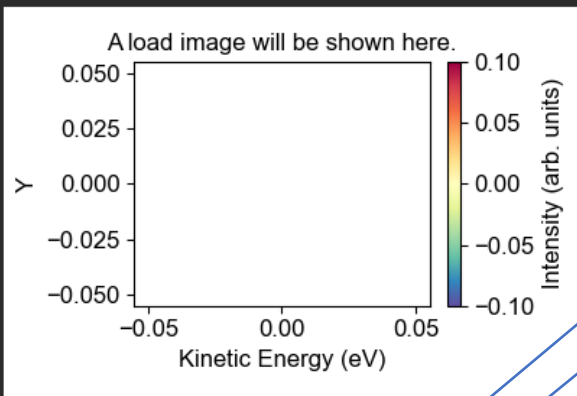
Load Data:  MBS; A-1 (Kera G., IM) MCP Correction:

File to be saved: Path:

Axes Conversion:      hn (eV) Supplied Bias:

2PPE: Fundamental (nm) 1w ☐ 2w ☐ 3w ☐ Deg->kp? ☐ VL? ☐ SECO: @-5V

A load image will be shown here.



XY Range

Maximum Energy:  Minimum Energy:

Maximum Y:  Minimum Y:

Ek Offset (not Eb!):  Y Offset (not kpl!):

Color Tuner

Color Map:

Z Range

Maximum Intensity:  Minimum Intensity:

2D Image Slicer (Y Direction)

Maximum Y:  Minimum Y:  Center Y:  Y Width:

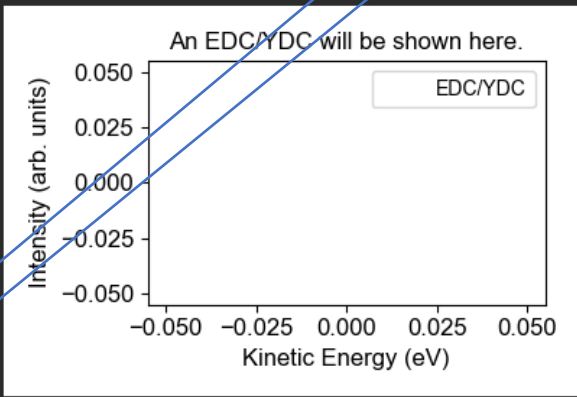
(Energy direction)

Maximum Energy:  Minimum Energy:  Center Energy:

Maximum Intensity:  Minimum Intensity:

Background Level:

An EDC/YDC will be shown here.

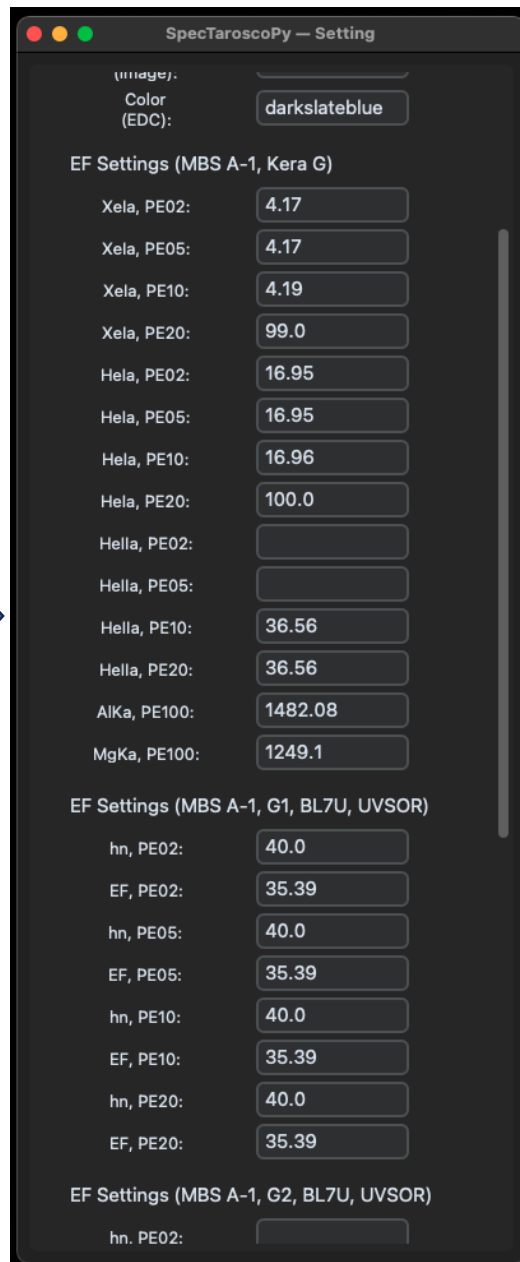
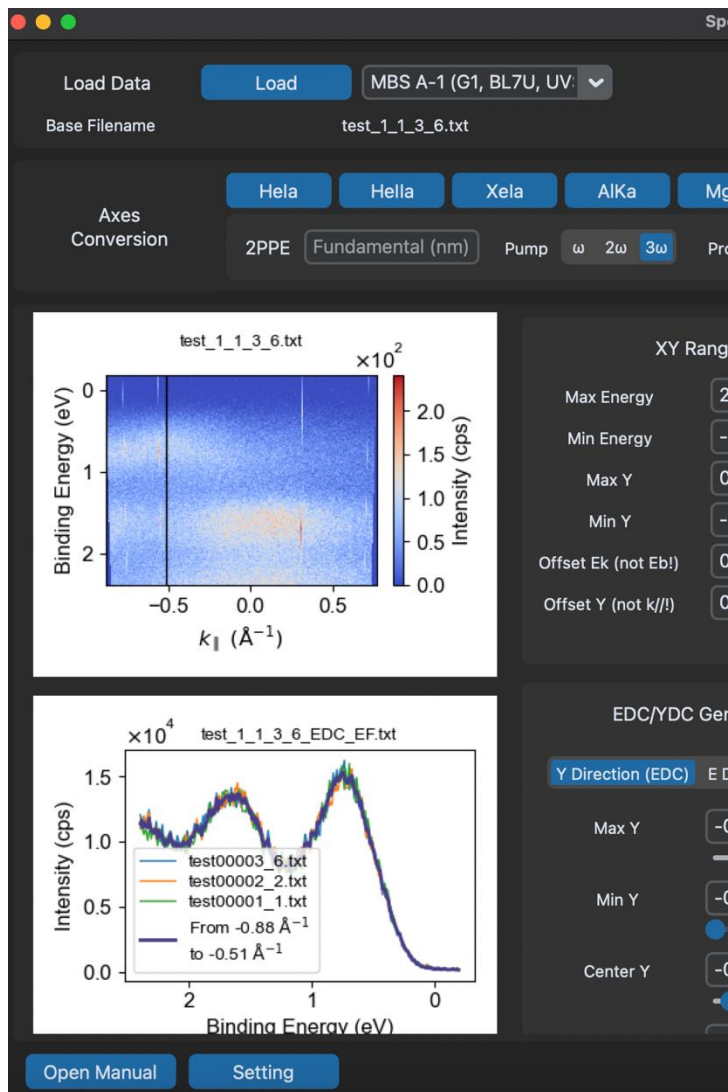


Setting



# 軸の変換2

## フェルミ準位の運動エネルギー



この値をフェルミ準位の運動エネルギーとして参照している。

① Kera Gの場合、光源・Pass Energy (PE) ごとにフェルミ準位を設定する。

② UVSOR 7Uの場合、Grating (G1, G3)・PE ごとに、基準となる PhotonEnergy (hn) とフェルミ準位の運動エネルギー (EF) を設定する (全ページの基準値のこと)。

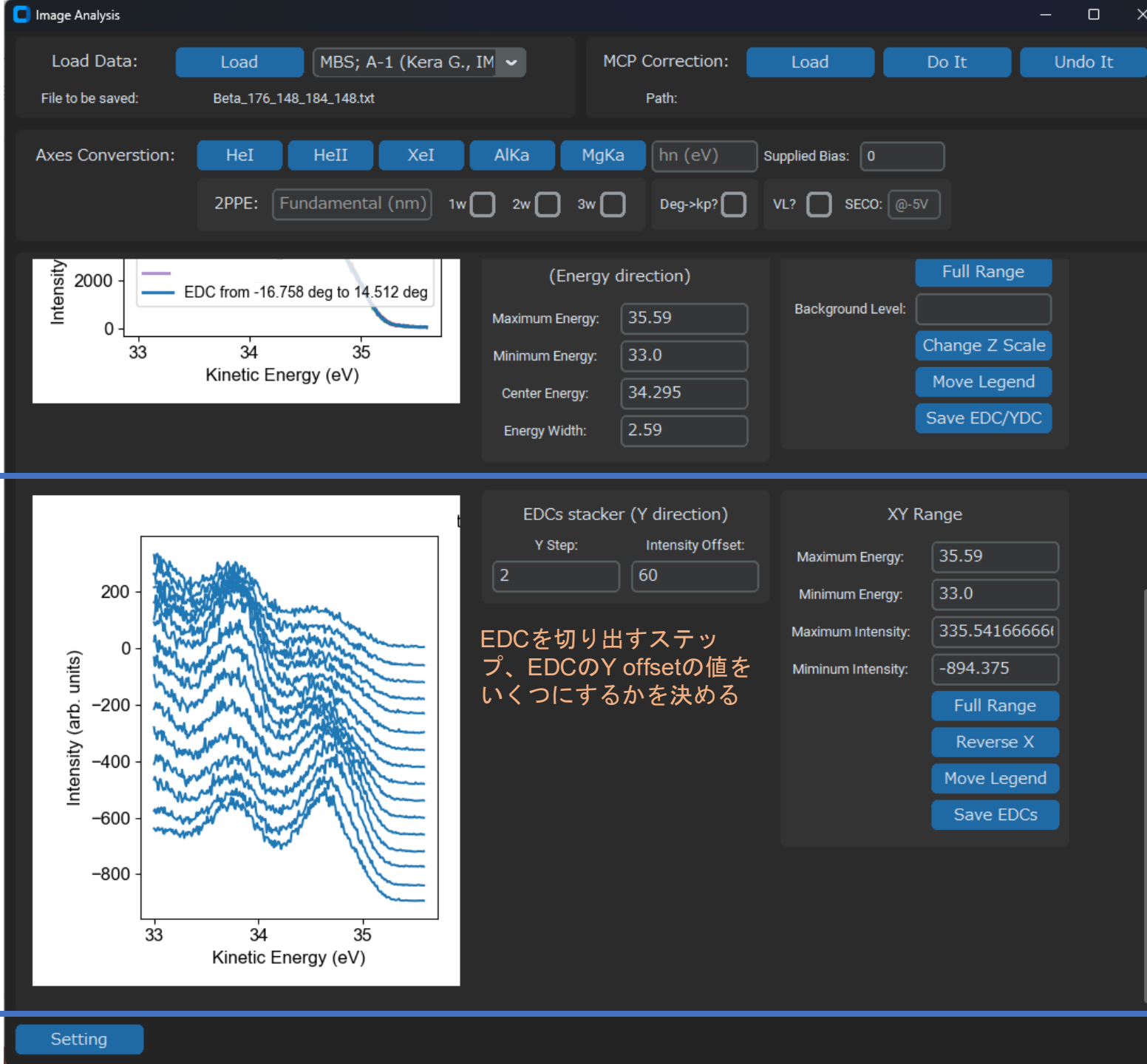
例) 左の基準値を使用した場合、  
G1, PE = 10 eV, hn = 30 eVの測定のフェルミ準位は  
 $35.39 + (30 - 40) = 25.39$  eV となる。

③ 基準値を入力したら、画面下部のSaveボタンを押す。  
"SpecTaroscoPy - Setting", "SpecTaroscoPy - PESimage" を再起動する。

# EDCs Stacking

Entry BoxはEnter  
キーで実行される

EDCs stacking



スクロールバーを下げる  
とEDCs stackingのフレー  
ムが出てくる

- EDC/YDC作成Frame (切り出す範囲を決められる)
- XYレンジ調整Frame
- Y軸linear $\leftrightarrow$ log変更ボタン
- 凡例位置調整button
- Save File button

# Second Derivative/Curvature Analysis (1Dのみ)

## データの読み込みFrame

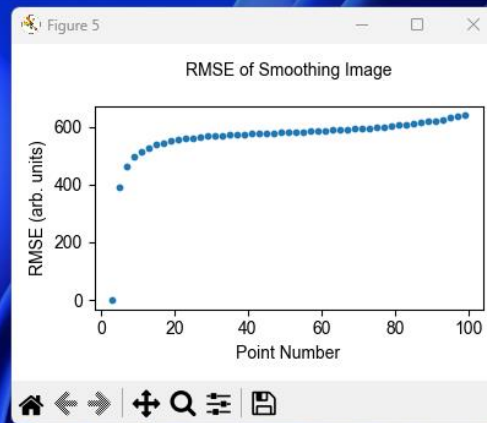
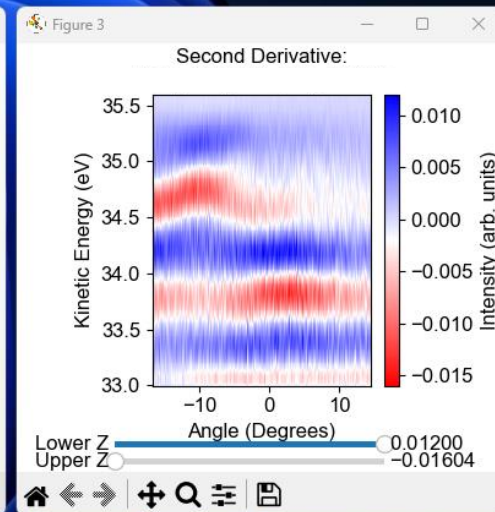
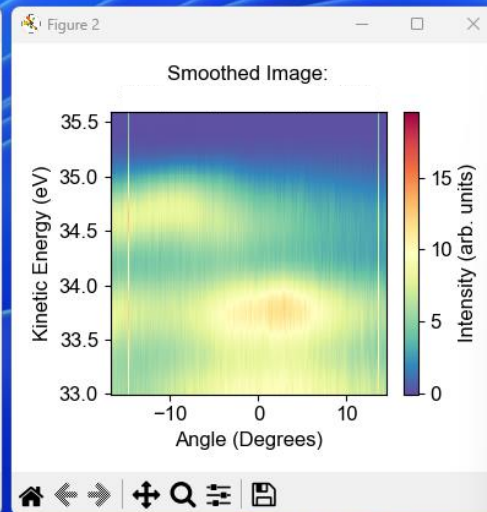
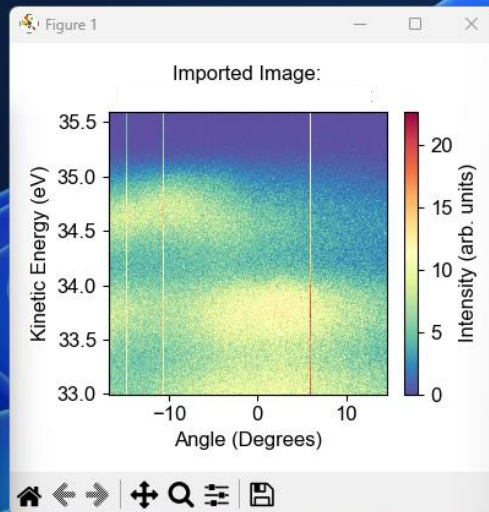
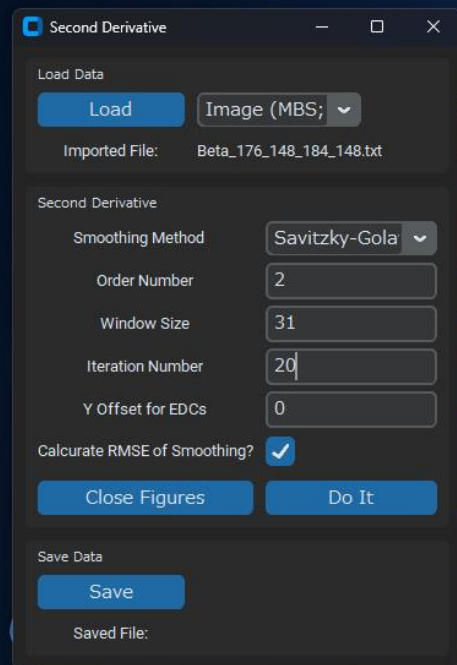
Loadボタンを押してデータを選択する。  
データ形式はMBS-A1のtxtデータか  
SpectrumAnalyzerで作成したtxtデータ。  
データの表示はImage or EDCs  
stackingのどちらか。

## 二次微分解析Frame

Smoothing方法とスムージングパラ  
メータを入力する。  
Y offsetsは二次微分スペクトルを  
stacking表示するときのY offset  
value。

RMSEチェックボックスはスムー  
ジング前後の平方根平均二乗誤差の  
window size依存性を計算する。  
ImageでSG法のと時のみ有効  
(20241216現在)。

Do Itで実行。Close Figuresで  
表示されたFiguresをすべて閉じる。  
Peak Detect buttonは二次微分縦並  
びスペクトルのとき、peakを自動検  
出する機能。



カラースケール調整スライダー