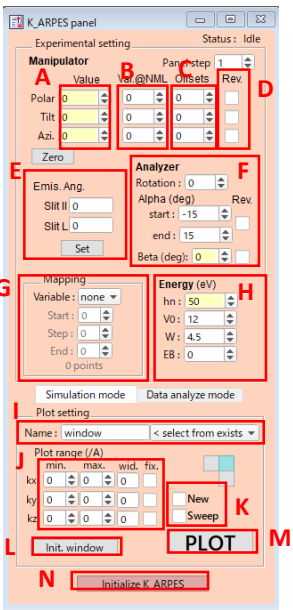
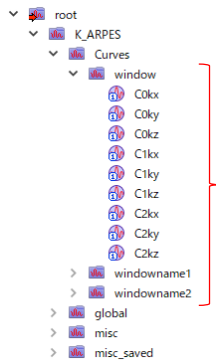


k-simulation mode



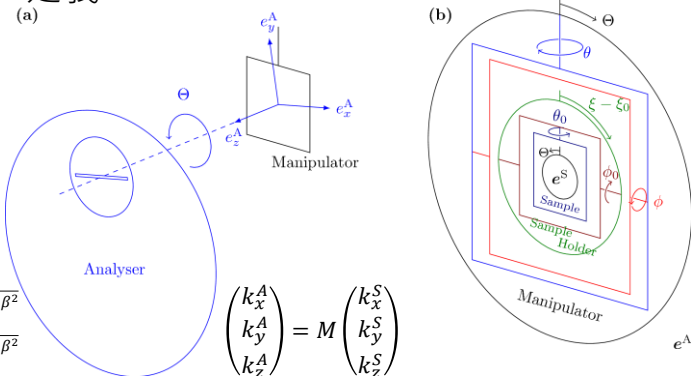
- A) 上から  $\theta, \phi, \xi$  に対応する。
- B) 上から  $\theta_0, \phi_0, \xi_0$  に対応する。
- C) 角度の定義のオフセットを表す（通常すべてゼロでよい）
- D) 装置のマニピュレータの角度方向の定義を反転させる場合チェックを入れる。
- E) 現在の条件でスリットの中央で検出される光電子の、試料表面に対する放出角度を計算している。ここに任意の角度を入力し [Set] ボタンを押すと、その放出角度の電子がスリットの中央で検出されときの  $\theta, \phi, \xi$  の値が検索される。
- F) 分析器とマニピュレータの位置関係( $\theta$ )、分析器の取り込み角度範囲( $\alpha$ )、ディフレクターの値( $\beta$ )
- G) 背景が黄色の変数を使ってマッピング測定シミュレーションが可能で、Variable でマッピング変数を指定し、パラメータを決める。
- H) エネルギー条件を入力する。
- I) 出力グラフの名前を決める。
- J) 出力グラフの範囲を変更、指定する。
- K) New にチェックを入れると、新しい  $k$ -path として出力する。Sweep にチェックを入れると、変数を変化させたときに新しい  $k$ -path として出力する。
- L) 出力グラフを初期化する。
- M)  $k$ -path を出力する。
- N) マクロ全体を初期化する。

データフォルダ構造

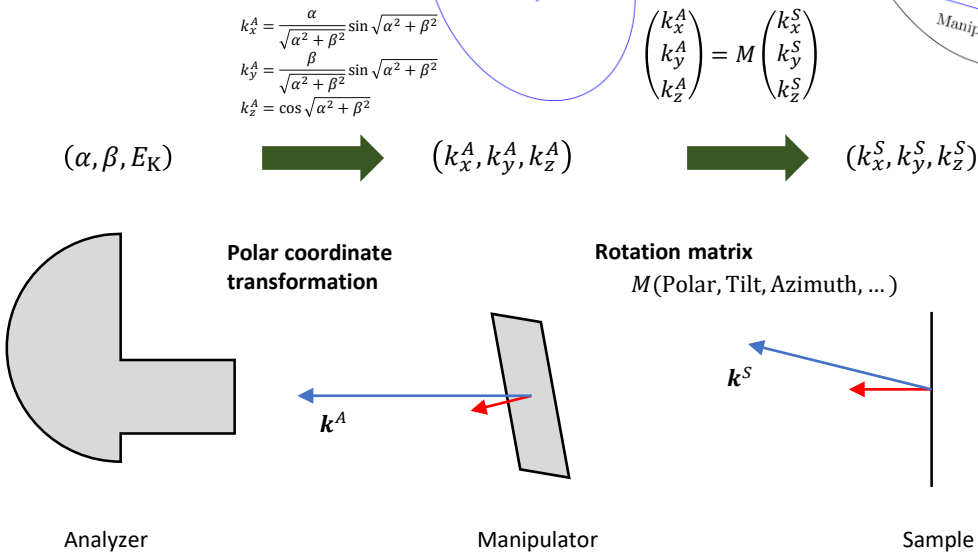


root:K\_ARPES:Curves フォルダの中に、出力グラフごとに  $k$ -path が格納されている

回転の定義



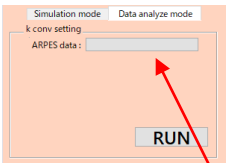
変換の全体像



# ARPESデータの波数変換の方法

k-simulation modeでの変換を利用してデータ解析を行います

1. Data analyze modeを選択する。

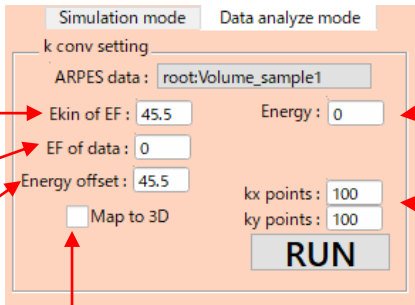


2. データブラウザ上でソースWaveを選択し、ボタンをクリックする。

フェルミ準位の電子が持つ真空中の運動エネルギー

ARPESデータのフェルミ準位のエネルギー

ARPESデータのエネルギー軸と真空中の電子の運動エネルギーのオフセット



解析するARPESデータのエネルギー(範囲)

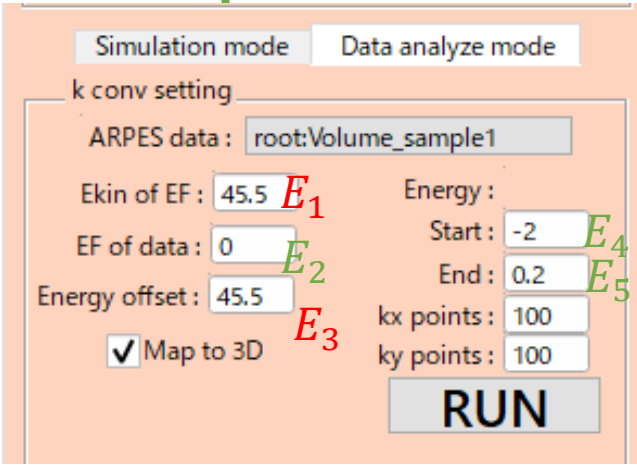
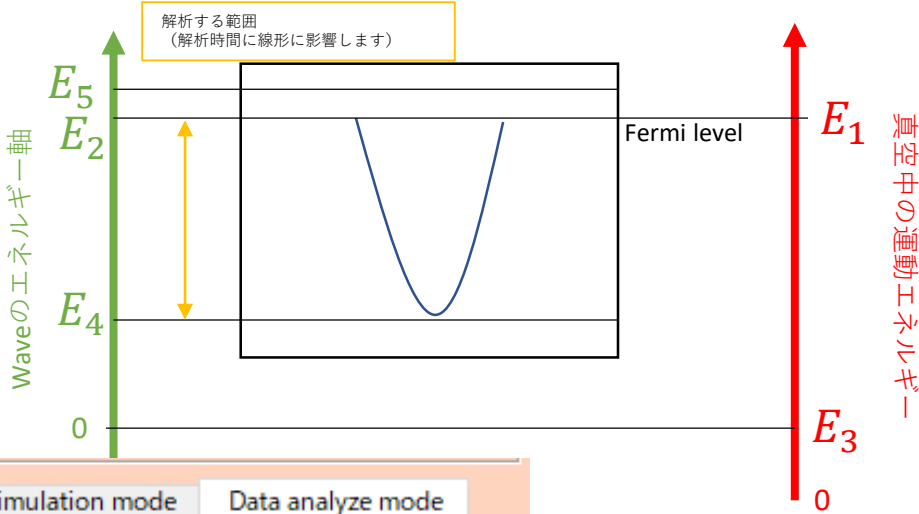
出力するwaveのデータサイズ

チェックを入れると3D waveとして出力する (時間がかかります)

3. エラーが無ければRUNボタンを押す。

## ★エネルギー軸の定義について

ARPESの解析には、Fermi準位の電子が真空中でもっている運動エネルギーの情報が必要です。



# ユーザー用Function

パネルへの変数入力を自動化し、その条件での波数を出力する関数が用意されています。

入力パラメータのリストとなる1次元wave(名前は自由。ここではinputwave)を準備します。

```
inputwave[0] = alpha (deg)
inputwave[1] = beta (deg)

inputwave[2] = analyser rotation (deg)
inputwave[3] = polar (deg)
inputwave[4] = tilt (deg)
inputwave[5] = azimuth (deg)

inputwave[6] = polar ofs (deg)
inputwave[7] = tilt ofs (deg)
inputwave[8] = azimuth ofs (deg)

inputwave[9] = alpha reverse ; ON : -1 , OFF = 1
inputwave[10] = beta reverse ; ON : -1 , OFF = 1
inputwave[11] = polar reverse ; ON : -1 , OFF = 1
inputwave[12] = tilt reverse ; ON : -1 , OFF = 1
inputwave[13] = azimuth reverse ; ON : -1 , OFF = 1

inputwave[14] = Anlular notation ; Polar-ang : 0 , Tilt-ang : 1

inputwave[15] = Photon energy (eV)
inputwave[16] = Inner potential (eV)
inputwave[17] = Work function (eV)
inputwave[18] = Binding energy (eV)
```

- InputwaveにNaNを入力するとその変数は無視されて、元からパネルに表示されていた値で計算されます。
- $\alpha$ の入力は必須です。
- kdim=0のときkxの値を、kdim=1のときはkyの値を、kdim=2のときkzの値を返します。

使用例)

```
Function example()
  string ws="inputwave"

  variable kx,ky,kz
  kx=K_a2k(ws,0)
  ky=K_a2k(ws,1)
  kz=K_a2k(ws,2)
  print kx,ky,kz

End
```