

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

Fakulta elektrotechniky  
a komunikačních technologií

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Brno, 2021

Bc. Jan Dubský



# VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

## FAKULTA ELEKTROTECHNIKY A KOMUNIKAČNÍCH TECHNOLOGIÍ

FACULTY OF ELECTRICAL ENGINEERING AND COMMUNICATION

## ÚSTAV MIKROELEKTRONIKY

DEPARTMENT OF MICROELECTRONICS

# NÍZKOENERGETICKÁ EXCITACE V ORIENTOVANÉM GRAFITU POMOCÍ THZ MAGNETOOPTICKÉ SPEKTROSKOPIE

LOW ENERGY EXCITATIONS IN ORIENTED GRAPHITE BY THZ MAGNETO-OPTICAL SPECTROSCOPY

## DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

## AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. Jan Dubský

## VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

prof. Ing. Radimír Vrba, CSc.

BRNO 2021



# Diplomová práce

magisterský navazující studijní program **Mikroelektronika**

Ústav mikroelektroniky

**Student:** Bc. Jan Dubský

**ID:** 195659

**Ročník:** 2

**Akademický rok:** 2020/21

**NÁZEV TÉMATU:**

## Nízkoenergetická excitace v orientovaném grafitu pomocí THz magnetooptické spektroskopie

**POKYNY PRO VYPRACOVÁNÍ:**

Nastudujte a zpracujte literární rešerši, která bude sloužit jako teoretický základ pro popsání energetických pásů v grafitu.

Popište funkci vysokofrekvenčního elektronově-paramagneticky-rezonančního spektrometru (HFEP) a diskutujte možnosti jeho využití pro pozorování nízkoenergetických přechodů elektronů v grafitu.

Navrhněte a připravte měření pomocí spektrometru HFEP na vzorku grafitu pro jeho různé orientace v magnetickém poli.

Zpracujte a analyzujte HFEP měření pro popis vlastností elektronového přenosu v grafitu a proveďte porovnání s tradičními experimenty.

**DOPORUČENÁ LITERATURA:**

Podle pokynů vedoucího práce

**Termín zadání:** 8.2.2021

**Termín odevzdání:** 25.5.2021

**Vedoucí práce:** prof. Ing. Radimír Vrba, CSc.

**Konzultant:** Ing. Matuš Šedivý, Mgr. Jorge Andres Navarro Giraldo

**doc. Ing. Lukáš Fucik, Ph.D.**  
předseda rady studijního programu

**UPOZORNĚNÍ:**

Autor diplomové práce nesmí při vytváření diplomové práce porušit autorská práva třetích osob, zejména nesmí zasahovat nedovoleným způsobem do cizích autorských práv osobnostních a musí si být plně vědom následků porušení ustanovení § 11 a následujících autorského zákona č. 121/2000 Sb., včetně možných trestněprávních důsledků vyplývajících z ustanovení části druhé, hlavy VI. díl 4 Trestního zákoníku č.40/2009 Sb.

## **Abstrakt**

Tato diplomová práce se zabývá modelováním elektronických vlastností krystalu grafitu, které jsou měřitelné za užití spektrometru určeného pro vysokofrekvenční elektronově paramagnetickou rezonanci (anglicky high frequency electron paramagnetic resonance, zkráceně HFEPR) nacházejícího se v laboratořích CEITEC VUT. Jedná se zejména o pásovou strukturu grafitu a jeho Landauovy hladiny. V teoretické části práce jsou popsány stěžejní jevy a souvislosti z kvantové mechaniky a definice významných pojmů z fyziky pevných látek, s jejichž pomocí je možné popsat krystalickou strukturu grafitu a jeho elektronické vlastnosti. Dále je v práci popsán HFEPR spektrometr a jeho funkční princip. V praktické části se nacházejí numerické modely pásové struktury grafitu, modely jeho Landauových hladin a popis přípravy vzorku grafitu pro měření. Na konci praktické části je analýza výsledků měření, konkrétně cyklotronové rezonance a Shubnikových-de Haasových oscilací, díky níž je možné určit fyzikální parametry vzorku, jako např. efektivní hmotnost nosičů náboje a fundamentální frekvenci.

## **Klíčová slova**

EPR, elektronová paramagnetická rezonance, spektroskopie, grafit, HFEPR spektrometr, cyklotronová rezonance, Shubnikov-de Haasovy oscilace

## **Abstract**

This master's thesis deals with the modelling of electronic properties of graphite crystal, which are measurable using a spectrometer based on high frequency electron paramagnetic resonance (HFEPR for short) located in laboratories of CEITEC BUT. This is especially the band structure of graphite and its Landau levels. The theoretical part of the thesis describes key effects and connections from quantum mechanics and definitions of important terms from solid state physics, which are used to describe the crystalline structure of graphite and its electronic properties. Furthermore, the project describes the HFEPR spectrometer and its functional principle. In the practical part of the thesis, there are numerical models of the band structure of graphite and of its Landau levels and description of the preparation of a graphite sample for measurement. At the end of the practical part there is the analysis of measurements results, namely the cyclotron resonance and Shubnikov-de Haas oscillations, thanks to which it is possible to determine physical parameters of the sample, such as effective mass of charge carriers and fundamental frequency.

## **Keywords**

EPR, electron paramagnetic resonance, spectroscopy, graphite, HFEPR spectrometer, cyclotron resonance, Shubnikov-de Haas oscillations

## **Bibliografická citace:**

DUBSKÝ, Jan. *Nízkoenergetická excitace v orientovaném grafitu pomocí THz magnetooptické spektroskopie* [online]. Brno, 2021 [cit. 2021-05-25]. Dostupné z: <https://www.vutbr.cz/studenti/zav-prace/detail/134642>. Diplomová práce. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, Ústav mikroelektroniky. Vedoucí práce Radimír Vrba.

# Prohlášení autora o původnosti díla

**Jméno a příjmení studenta:** *Jan Dubský*

**VUT ID studenta:** *195659*

**Typ práce:** *Diplomová práce*

**Akademický rok:** *2020/21*

**Téma závěrečné práce:** *Nízkoenergetická excitace v orientovaném grafitu pomocí THz magnetooptické spektroskopie*

Prohlašuji, že svou závěrečnou práci jsem vypracoval samostatně pod vedením vedoucí/ho závěrečné práce a s použitím odborné literatury a dalších informačních zdrojů, které jsou všechny citovány v práci a uvedeny v seznamu literatury na konci práce.

Jako autor uvedené závěrečné práce dále prohlašuji, že v souvislosti s vytvořením této závěrečné práce jsem neporušil autorská práva třetích osob, zejména jsem nezasáhl nedovoleným způsobem do cizích autorských práv osobnostních a jsem si plně vědom následků porušení ustanovení § 11 a následujících autorského zákona č. 121/2000 Sb., včetně možných trestněprávních důsledků vyplývajících z ustanovení části druhé, hlavy VI. díl 4 Trestního zákoníku č. 40/2009 Sb.

V Brně dne: 25. května 2021

.....  
podpis autora

## **Poděkování**

Děkuji Ing. Matúši Šedivému, Mgr. Jorgemu Navarrovi za metodickou, pedagogickou a odbornou pomoc a za poskytnutí mnoha konzultací a přednášek. Dále bych rád poděkoval prof. Ing. Radimíru Vrbovi, CSc., Ing. Petru Neugebauerovi, Ph.D. a všem členům vědecké skupiny MOTeS za jejich odbornou pomoc a množství cenných rad při vypracovávání mé diplomové práce.

V Brně dne: 25. května 2021

.....

podpis autora

# Obsah

Seznam obrázků .....	7
Úvod.....	11
1. Teoretická část .....	13
1.1 Kvantová mechanika .....	13
1.1.1 Schrödingerova rovnice .....	13
1.1.2 Řešení kvantového harmonického oscilátoru .....	14
1.2 Fyzika pevných látek.....	15
1.2.1 Krystalová mřížka.....	15
1.2.2 Primitivní buňka .....	17
1.2.3 Krystalová struktura grafitu .....	18
1.2.4 Reciproká mřížka .....	19
1.2.5 Brillouinova zóna.....	20
1.2.6 Blochův teorém.....	21
1.2.7 Pásová struktura .....	22
1.2.8 Hustota stavů.....	23
1.2.9 Fermiho energie a Fermiho plocha .....	24
1.3 Elektronově-paramagneticko-rezonanční spektroskopie .....	25
1.3.1 HFEPR spektrometr .....	26
1.3.2 Spektroskopie na úrovni Landauových hladin.....	29
1.3.3 Shubnikovy-de Haasovy oscilace .....	31
1.4 Slonczewskiho-Weissův-McClureův model .....	33
1.4.1 SWM model bez přítomnosti magnetického pole.....	33
1.4.2 SWM model v magnetickém poli .....	34
2. Praktická část .....	36
2.1 Simulace elektronických vlastností grafitu .....	36
2.1.1 Simulace pásové struktury .....	36
2.1.2 Simulace Landauových hladin.....	39
2.2 Příprava vzorků grafitu pro měření .....	40
2.3 Analýza výsledků měření .....	42
2.3.1 Analýza cyklotronové rezonance.....	44
2.3.2 Analýza Shubnikových–de Haasových oscilací .....	55



3. Závěr .....	64
Literatura.....	66
Seznam symbolů, konstant a zkratk .....	73
Seznam příloh .....	76

# SEZNAM OBRÁZKŮ

Obrázek 1 – Různé typy centrovaných Bravaisových mřížek [17].	16
Obrázek 2 – Krystalová struktura grafitu [19].	17
Obrázek 3 – Různé typy Wigner-Seitzových primitivních buněk [21].	18
Obrázek 4 – Brillouinova zóna v struktuře grafitu [32].	21
Obrázek 5 – Model pásové struktury grafitu [37].	23
Obrázek 6 – Fermiho plocha v Brillouinově zóně grafitu [6].	25
Obrázek 7 – HFEPР spektrometr.	27
Obrázek 8 – Quasi-optická sestava HFEPР spektrometru.	28
Obrázek 9 – Schéma fungování rotačního držáku vzorku [50].	29
Obrázek 10 – Landauovy válce uvnitř Fermiho povrchu [52].	31
Obrázek 11 – Výsledek měření vzorku přírodního grafitu.	33
Obrázek 12 – Pásová struktura grafitu podél osy $k_z$ .	37
Obrázek 13 – Pásová struktura grafitu v bodu K.	38
Obrázek 14 – Pásová struktura grafitu v bodu H.	38
Obrázek 15 – Landauovy hladiny grafitu mezi body K-H při $B = 0$ a $B = 5$ T.	40
Obrázek 16 – Vysoce uspořádaný pyrolytický grafit.	40
Obrázek 17 – Vzorek HOPG pro měření.	41
Obrázek 18 – Přírodní grafit.	41
Obrázek 19 – Vzorek přírodního grafitu pro měření.	42
Obrázek 20 – Výsledek měření vzorku HOPG.	43
Obrázek 21 – Výsledek měření vzorku přírodního grafitu.	44
Obrázek 22 – Simulace pro Fermiho energii o hodnotě -21 a -28 meV.	46
Obrázek 23 – Harmonické oscilace cyklotronové rezonance.	47
Obrázek 24 – Závislost vrcholů cykl. rezonance na $E_F$ od -20 do -28,5 meV.	48
Obrázek 25 – Závislost tvaru vrcholu cykl. rezonance na parametru $\Gamma$ .	49
Obrázek 26 – Překrytí dat získaných měřením a simulací.	50
Obrázek 27 – Závislost pozice vrcholů cykl. rezonance na kosinu úhlu a převrácené hodnotě magnetického pole.	51
Obrázek 28 – Obdržený signál pro rotaci vzorku o $0,7^\circ$ a $44^\circ$ .	52
Obrázek 29 – Úhlová závislost pozice vrcholů cykl. rezonance.	53

Obrázek 30 – Závislost pozice vrcholů cykl. rezonance na kolmé složce magnetického pole. ....	53
Obrázek 31 – Srovnání dat získaných z měření pro různé úhly v závislosti na $B \perp$ .	54
Obrázek 32 – Proložení naměřených dat simulací. ....	55
Obrázek 33 – Srovnání optické konduktivity pro různé teploty. ....	56
Obrázek 34 – Srovnání derivace optické konduktivity pro různé teploty. ....	57
Obrázek 35 – Vývoj Shubnikových-de Haasových oscilací s teplotou. ....	58
Obrázek 36 – Data pro analýzu Shubnikových-de Haasových oscilací. ....	60
Obrázek 37 – Numerická integrace Shubnikových-de Haasových oscilací. ....	60
Obrázek 38 – Výsledek Fourierovy transformace. ....	61

# ÚVOD

V laboratořích CEITEC VUT byl vědeckou skupinou MOTeS (z anglického Magneto-Optical and THz Spectroscopy, česky Magneto-Optická a Terahertzová spektroskopie) vedenou doc. Petrem Neugebauerem, vytvořen špičkový vysokofrekvenční elektronově paramagneticky rezonanční spektrometr (HFEP R spektrometr) jehož předností je schopnost velmi rychlých skenů v terahertzové frekvenční oblasti. Toto zařízení umožňuje zkoumat magnetické vlastnosti vzorků s možností nastavení široké škály parametrů, jako je například intenzita magnetického pole (od -16 do 16 T), teplota (od 1,8 do 320 K) či frekvence mikrovlnného záření (od 80 do 1100 GHz) [1]. Takovým vzorkem může být například grafit, kterému je v současné době věnována velká pozornost zejména z důvodu podobnosti jeho struktury se strukturou grafenu, který byl v relativně nedávné době experimentálně vytvořen a stojí dnes v čele vědeckého zájmu [2].

Grafit v dnešní době nachází velké uplatnění v elektrotechnickém průmyslu například v solárních článcích, elektrodách a bateriích [3]. Současně byl v nedávné době obnoven vědecký zájem o grafit z důvodu objevu jeho nové topologické struktury ve tvaru romboedru [4]. V rámci této práce však bude zkoumán již dříve známý grafit tvořený střídajícími se A-B vrstvami grafitu. Z tohoto důvodu je důležité, aby byly dobře popsány zejména elektronické vlastnosti této látky. Dle technických parametrů HFEP R spektrometru nacházejícího se v laboratořích CEITEC VUT je možné pozorovat cyklotronovou rezonanci a Shubnikovy-de Haasovy oscilace. Na základě analýzy měření cyklotronové rezonance je možné určit hladinu Fermiho energie, efektivní hmotnost nosičů náboje a parametr rozšíření. Dále lze sledovat vliv změny orientace magnetického pole na vzorek a na základě výsledku určit, o jaký systém se v případě grafitu jedná. Z analýzy Shubnikových-de Haasových oscilací je opět možné určit efektivní hmotnost nosičů náboje, a navíc fundamentální frekvenci.

Dnes již existují matematické modely, které popisují, jak by měl vypadat Fermiho povrch v rámci krystalu grafitu [5] [6]. V této struktuře se však nacházejí oblasti ležící v blízkosti Lifshitzových přechodů, které doposud byly obtížně měřitelné jinými tradičními metodami. HFEP R spektrometr však toto měření umožňuje [5].

Blízkost Fermiho energie k Lifshitzovým přechodům se v měření projevuje cyklotronovou rezonancí. Shubnikovy-de Haasovy oscilace jsou zase způsobeny kvantizací Landauových hladin. V kombinaci s numerickými modely pro určení pásové struktury grafitu a Landauových hladin grafitu je tedy možné srovnání naměřených dat s těmito modely, což umožní popis fyzikálních vlastností vzorku [7].

# 1. TEORETICKÁ ČÁST

## 1.1 Kvantová mechanika

Kvantová mechanika je rozsáhlá oblast moderní fyziky, která popisuje jevy na atomární a subatomární úrovni. Pro popis elektronických vlastností grafitu, zkoumaných v této práci, je zásadní pochopení základních principů a pojmů v rámci kvantové mechaniky. Nejvýznamnějším poznatkem je, že kvantově mechanický systém je možné kompletně popsat vlnovou funkcí, jejíž časový vývoj je popsán Schrödingerovou rovnicí. Tato vlnová funkce zároveň umožňuje výpočet pravděpodobnosti nalezení částice v daném objemu a čase. Elektron jakožto fermion v systému krystalu grafitu lze popsat právě takovou vlnovou funkcí, kterou lze získat řešením Schrödingerovy rovnice, čímž se zabývá kapitola 1.1.1 [8] [9].

### 1.1.1 Schrödingerova rovnice

Schrödingerova rovnice je základní rovnicí nerelativistické kvantové mechaniky, která umožňuje popsat pohyb částice a diskrétní stavy atomu. Jedná se tedy o kvantově mechanický ekvivalent Newtonových pohybových rovnic z klasické fyziky. Znalostí výchozího stavu systému (a tedy odpovídající vlnové funkce systému) lze vypočítat stav systému pro jakýkoliv nadcházející čas. Její základní, časově závislý tvar je popsán následující rovnicí [10] [11]:

$$\hat{E}\Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1.1)$$

kde operátor  $\hat{E}$  a Hamiltonův operátor  $\hat{H}$  popisují veškerou energii systému a  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  představuje vlnovou funkci.

Operátor energie  $\hat{E}$  je dále možné rozepsat na následující tvar:

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (1.2)$$

kde  $i$  představuje imaginární jednotku,  $\hbar$  představuje redukovanou Planckovu konstantu a  $\partial/\partial t$  představuje diferenciální operátor času.

Hamiltonův operátor  $\hat{H}$  je naopak možné napsat v následujícím tvaru:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}, t), \quad (1.3)$$

kde  $m$  představuje hmotnost částice,  $\Delta$  představuje Laplaceův operátor a dohromady tvoří kinetickou složku energie částice a  $U(\mathbf{r}, t)$  označuje potenciální složku energie částice [11].

Pro potenciální energie, které nejsou závislé na čase, postačuje vyřešit časově nezávislý neboli stacionární tvar Schrödingerovy rovnice, který se obdrží separací proměnných:

$$\hat{H}\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}), \quad (1.4)$$

kde  $E$  představuje separační konstantu odpovídající energii systému a  $\varphi(\mathbf{r})$  představuje prostorovou složku následující vlnové funkce:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r})e^{\frac{-iEt}{\hbar}}. \quad (1.5)$$

Z rovnice (1.4) vyplývá, že vlastní hodnoty Hamiltonova operátoru popisují možné energetické hladiny systému [10].

Vzhledem k tomu, že řešením Schrödingerovy rovnice je možné získat vlnovou funkci částice  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , je zároveň možné vypočítat pravděpodobnost nalezení částice v daném objemovém elementu  $d\mathbf{r}$ , v místě  $\mathbf{r}$  a čase  $t$ , která je dána následujícím vztahem [8]:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t)d\mathbf{r} = 1, \quad (1.6)$$

kde  $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$  představuje komplexně sdruženou funkci k vlnové funkci  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ .

### 1.1.2 Řešení kvantového harmonického oscilátoru

Dalším významným úkolem kvantové mechaniky je řešení kvantového harmonického oscilátoru. Příkladem kvantových harmonických oscilací může být kmitání jednotlivých atomů v rámci molekuly. Řešením těchto harmonických oscilací je možné popsat i další vlastnosti pevných látek, jako například tepelnou kapacitu. Tyto harmonické oscilace se typicky modelují jako jednorozměrné kmity, které jsou analogické ke klasickým harmonickým oscilacím.

Kvantový harmonický oscilátor je řešen užitím časově nezávislé Schrödingerovy rovnice (viz. (1.4)). Pro kvantové harmonické oscilace je nově definována konkrétní velikost potenciální složky energie částice ve tvaru:

$$U(x) = \frac{m\omega_0^2 x^2}{2}, \quad (1.7)$$

kde  $\omega_0$  představuje vlastní frekvenci oscilátoru. Po dosazení této potenciální složky energie částice do Hamiltonova operátoru získáváme časově nezávislou Schrödingerovu rovnici v následující podobě:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + \frac{m\omega_0^2 x^2}{2} \varphi(x) = E\varphi(x). \quad (1.8)$$

Řešením této rovnice je získán následující vztah:

$$E_N = \hbar\omega_0 \left( N + \frac{1}{2} \right), \quad (1.9)$$

kde  $E_N$  představuje diskrétní energii oscilátoru a  $N$  může nabývat hodnoty všech přirozených čísel včetně nuly [10] [12].

V případě trojrozměrného prostoru se problém kvantového harmonického oscilátoru převádí na řešení jednorozměrného kvantového harmonického oscilátoru v každém ze tří směrů. Výsledné řešení je pak součtem těchto tří dílčích řešení [10] [13].

Z rovnice (1.9) lze vyvodit množství závěrů. Prvním z nich je skutečnost, že kvantový harmonický oscilátor se může nacházet pouze v diskrétních stavech energie, spektrum je tedy také diskrétní, nikoliv spojité, jak je tomu v případě klasického oscilátoru. Dále platí, že v případě kvantového harmonického oscilátoru jsou vzdálenosti mezi jednotlivými energetickými hladinami stejně velké. Důležitým poznatkem v rozporu s klasickým modelem je také to, že v případě základního stavu ( $N = 0$ ) není energie oscilátoru nulová.

## 1.2 Fyzika pevných látek

Fyzika pevných látek se zabývá zkoumáním jevů vyskytujících se v pevných látkách. Tyto jevy jsou zkoumány a vysvětlovány množstvím vědních disciplín, například elektromagnetismem, atomovou fyzikou, klasickou mechanikou, kvantovou mechanikou či krystalografií. Pevné látky je možné rozdělit do dvou hlavních kategorií. První kategorií jsou látky amorfní, tedy látky, v nichž je uspořádání částic zcela náhodné a mají izotropní vlastnosti, tedy jejich vlastnosti jsou stejné ve všech směrech. Druhou kategorií jsou látky krystalické. V těchto látkách se částice sdružují do organizovaných struktur, které se vyznačují tím, že vytvářejí uspořádaný opakující se vzor. Z toho důvodu mají krystalické látky anizotropní vlastnosti, tedy jejich vlastnosti jsou závislé na orientaci krystalu.

### 1.2.1 Krystalová mřížka

Částicemi v těchto látkách mohou být atomy, ionty či celé molekuly. V případě krystalických látek záleží na typu vazeb, které se mezi atomy nacházejí. Typ této vazby ovlivňuje, jaké vlastnosti krystal má. Jedná se především o iontovou vazbu, kovovou vazbu a kovalentní vazbu, ačkoliv samozřejmě mezi částicemi dochází i k dalším vazebním interakcím, mnohdy k jejich kombinaci – příkladem můžou být van der Waalovy síly či vodíkové vazby [14].

V kontextu zkoumaného grafitu jsou důležité právě krystaly tvořené kovalentní vazbou, kdy dochází ke sdílení elektronů mezi dvěma sousedními atomy. Takové látky jsou většinou tvrdé, pevné a mají vysokou teplotu tání. Příkladem takových kovalentních krystalů může být vedle grafitu například křemík či diamant. V případě grafitu je dále nutné zmínit, že se nejedná výhradně o kovalentní vazby, neboť tyto vazby se nacházejí pouze mezi atomy uhlíku v rámci jedné vrstvy grafitu. Jednotlivé vrstvy grafitu jsou drženy pospolu výše zmíněnými van der Waalovými silami [14] [15].

Pro popis vnitřní struktury krystalů se používá krystalové mřížky. Jak již bylo řečeno, krystal se vyznačuje uspořádanou strukturou, která se v prostoru stále periodicky opakuje. Jednotlivé částice tvořící krystal se tedy v rámci krystalické mřížky zjednoduší na pouhé body v prostoru. Dále se předpokládá, že se v krystalu nevyskytují žádné poruchy a že krystal je nekonečně velký. Mezi takto vzniklou množinou bodů se následně

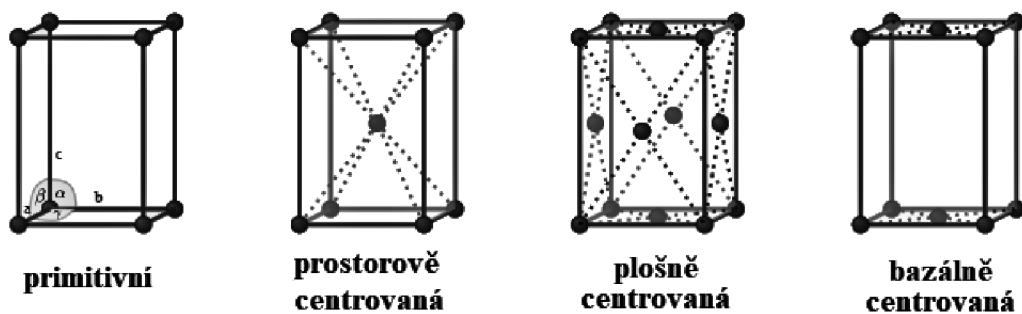
najdou poziční vektory  $\mathbf{R}$  Bravaisovy mřížky podle následující rovnice:

$$\mathbf{R} = N_1 \mathbf{a}_1 + N_2 \mathbf{a}_2 + N_3 \mathbf{a}_3, \quad (1.10)$$

kde  $\mathbf{a}_1$  až  $\mathbf{a}_3$  jsou primitivní vektory Bravaisovy mřížky, z nichž alespoň jeden neleží ve stejné rovině jako ostatní a  $N_1$  až  $N_3$  jsou všechna přirozená čísla včetně nuly. Rovnice výše popisuje trojrozměrnou krystalovou mřížku a nazývá se Bravaisovou mřížkou [7].

V případě Bravaisovy mřížky je možné se v krystalové mřížce pohybovat mezi body pouze za pomoci posunu o  $n$ -násobek primitivního vektoru v jeho směru. Zároveň platí, že struktura popsaná Bravaisovou mřížkou vypadá vždy stejně, nezávisle na tom, který bod se považuje za výchozí. Avšak vzhledem k tomu, že v rámci krystalové mřížky bývá často možné nadefinovat větší množství primitivních vektorů mezi jednotlivými body, navíc s ohledem na fakt, že některé krystalové mřížky mají zdánlivě větší množství periodicky opakujících se identických struktur, zavádí se pro Bravaisovu mřížku další tři pojmy, které ji popisují. Jedná se o prostorově centrovanou kubickou mřížku, kdy další bod mřížky leží přesně ve středu mezi dvojicí protilehlých vrcholů a protilehlých stěn, o plošně centrovanou kubickou mřížku, kde jsou body umístěny ve středu každé stěny a o bazálně centrovanou mřížku, kde jsou další body umístěny ve středu jednoho páru protilehlých stěn [16].

Tyto typy Bravaisovy mřížky jsou graficky znázorněny na následujícím obrázku:

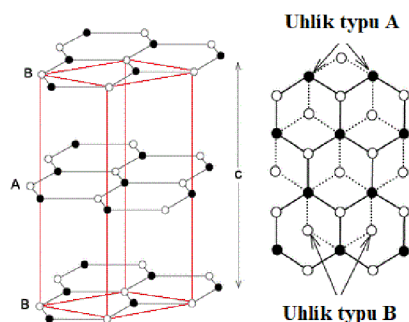


**Obrázek 1 – Různé typy centrovaných Bravaisových mřížek [17].**

Dále existuje takzvaná hexagonální těsně uspořádanou strukturu. Jedná se o opakující se plošně centrované kubické struktury, které tvoří bázi z bodů, jež jsou umístěny v těsné konfiguraci. Tato báze se periodicky opakuje každou třetí vrstvou. Druhá vrstva je vůči první vrstvě posunuta tak, aby opět tvořila těsně uspořádanou strukturu a opět se ob tři vrstvy opakuje [18].

Krystalová struktura grafitu je hexagonálně symetrická stejně jako hexagonální těsně uspořádaná struktura, avšak později v této práci budou rozvedeny rozdíly mezi těmito strukturami. Struktura grafitu je demonstrována na následujícím obrázku, za povšimnutí stojí primitivní buňka definovaná v rámci této struktury na levém obrázku (zvýrazněna červenou barvou):





Obrázek 2 – Krystalová struktura grafitu [19].

## 1.2.2 Primitivní buňka

V rámci Bravaisovy mřížky se dále definuje takzvaná primitivní buňka. Jedná se o buňku vyplňující prostor Bravaisovy mřížky takovým způsobem, že se v každé buňce vyskytuje výhradně jeden bod mřížky, buňky se zároveň nepřekrývají a navzájem se dotýkají. Posunem buňky ve směru vektorů Bravaisovy mřížky je možné vyplnit celý prostor. Vzhledem k tomu, že tvar této primitivní buňky je zcela nezávislý na Bravaisově mřížce, je však její použití pro popis struktury nevhodné. Toto je možné například vyřešit zavedením konvenční buňky, která vyplňuje prostor jako primitivní buňka, avšak jde vždy ve směru vektorů Bravaisovy mřížky [7].

V případě hexagonální těsně uspořádané struktury, respektive v případě grafitu, byla na obrázku výše (viz. Obrázek 2) zobrazena primitivní buňka uvnitř této struktury. Jedná se o konvenční buňku, ze které lze vypočítat primitivní vektory Bravaisovy mřížky. Vzhledem k tomu, že v rámci struktury grafitu se definuje primitivní buňka stejného tvaru jako v případě hexagonálně těsně uspořádané struktury, jsou následující rovnice relevantní i pro strukturu grafitu. Primitivní vektory Bravaisovy mřížky této primitivní buňky je pak možné určit následujícími rovnicemi [20]:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} \hat{x} + \frac{-\sqrt{3}a}{2} \hat{y}, \quad (1.11)$$

$$\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} \hat{x} + \frac{\sqrt{3}a}{2} \hat{y}, \quad (1.12)$$

$$\mathbf{a}_3 = c \hat{z}, \quad (1.13)$$

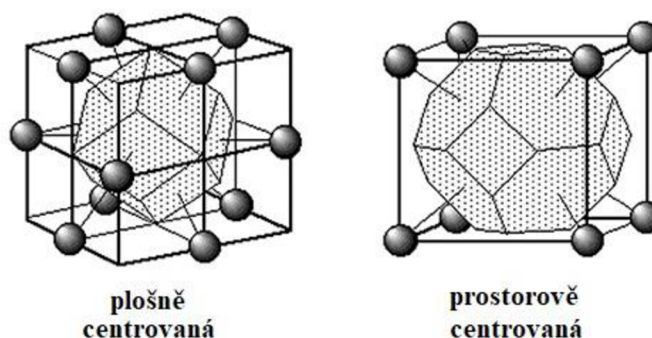
kde  $a$  představuje délku primitivní buňky ve směru  $\hat{x}$  a  $\hat{y}$  (z toho důvodu, že v případě grafitu je bázi buňky kosočtverec o délce hrany  $a$ ) a  $c$  představuje délku primitivní buňky ve směru  $\hat{z}$ . Primitivní buňka v rámci hexagonální těsně uspořádané struktury dále musí splňovat podmínky:  $a = b \neq c$ ;  $\alpha = \beta = 90^\circ$ ;  $\gamma = 120^\circ$  [16] [20].

Dalším způsobem popsání prostoru v Bravaisově mřížce, který je v podstatě standardním způsobem, je Wigner-Seitzova primitivní buňka.

Wigner-Seitzova primitivní buňka plně zachycuje vlastnosti Bravaisovy mřížky. Tato buňka obsahuje nejbližší prostor vybraného bodu Bravaisovy mřížky, tedy popisuje i

nejmenší možný objem či plochu (v případě dvojrozměrné Bravaisovy mřížky) v okolí tohoto bodu Bravaisovy mřížky. Buňka je vytvořena tak, že se v rámci Bravaisovy mřížky vytvoří úsečka mezi všemi nejbližšími sousedními body. Ty jsou ve svém středu rozděleny rovinou, která je kolmá na tuto úsečku. Po promítnutí těchto rovin mezi všemi nejbližšími sousedními body vzniká Wigner-Seitzova primitivní buňka. Tato buňka stále splňuje podmínky primitivní buňky, tedy nepřekrývá, buňky se dotýkají a jejím posunem ve směru vektorů Bravaisovy mřížky je možné vyplnit celý prostor [7].

Trojrozměrné Wigner-Seitzovy primitivní buňky pro prostorově a plošně centrovanou kubickou Bravaisovu mřížku jsou znázorněny na následujícím obrázku:



Obrázek 3 – Různé typy Wigner-Seitzových primitivních buněk [21].

### 1.2.3 Krystalová struktura grafitu

V případě grafitu se na první pohled nejedná o Bravaisovu mřížku. Krystal grafitu je tvořen dvojrozměrnými bázemi tvořenými hexagonálním uspořádáním atomů uhlíku (viz. Obrázek 2), které jsou na sousední tři atomy v rámci báze navázány silnými kovalentními vazbami o délce 0,142 nm. Takto vytvořené báze jsou mezi sebou navázány ve třetím směru slabými van der Waalsovými silami ve vzdálenosti 0,335 nm, a to v konfiguraci ABAB, kdy jsou ob jednu střídány báze, které jsou vůči předchozí bázi posunuty o délku jedné poloviny vzdálenosti protilehlých atomů v rámci jedné hexagonální buňky báze [22].

Ač se může zdát, že se jedná o hexagonálně těsně uspořádanou strukturu, bázi v rámci krystalu grafitu chybí uprostřed hexagonální struktury další atom. Tím dochází k situaci, kdy se v každé hexagonální struktuře každé vrstvy nachází trojice atomů, které mají přímo nad a pod sebou jiný atom uhlíku z jiné vrstvy, kdežto nad i pod zbývajícími třemi atomy se v sousedních bázích žádný atom uhlíku nenachází. Proto není dle definice Bravaisovy mřížky možné vytvořit strukturu grafitu pouhým posunutím bodů ve směru vektorů této Bravaisovy mřížky, protože pro vytvoření druhé poloviny bodů v rámci této mřížky je nutné tyto body otočit o  $180^\circ$  [7] [19].

Pro popis struktury grafitu je nicméně stále možné zavést primitivní buňku v rámci jeho struktury. Tato primitivní buňka má stejný tvar jako primitivní buňka v rámci hexagonální těsně uspořádané struktury, takže ačkoliv se formálně v případě grafitu

nejedná o hexagonální těsně uspořádanou strukturu, stále s ním lze pracovat stejným způsobem. Primitivní buňka uvnitř struktury grafitu je vyznačena červenou barvou na levé straně obrázku výše (viz. Obrázek 2). Základnou buňku je kosočtverec s délkou strany 0,246 nm a vnitřními úhly 60° a 120°, který spojuje atomy uhlíku v rovině báze grafitu. Základna této buňky je rozšířena do třetího rozměru ve směru kolmém k základně, čímž vytváří trojrozměrnou primitivní buňku o výšce 0,67 nm [23]. Tím splňuje podmínky určené v předešlé kapitole pro výpočet primitivních vektorů Bravaisovy mřížky hexagonální těsně uspořádané struktury. To dovoluje vypočítat Bravaisovu mřížku v struktuře grafitu za užití rovnic (1.11) až (1.13). Výsledkem poté je sada vektorů:

$$\mathbf{a}_1 = (0,123; -0,213; 0) \text{ nm}, \quad (1.14)$$

$$\mathbf{a}_2 = (0,123; 0,213; 0) \text{ nm}, \quad (1.15)$$

$$\mathbf{a}_3 = (0; 0; 0,67) \text{ nm}. \quad (1.16)$$

## 1.2.4 Reciproká mřížka

Dalším způsobem, jak lze charakterizovat krystalovou strukturu, je určením její reciproké mřížky. Jedná se o abstraktní matematický nástroj, jakým lze vysvětlit například difrakci vlnění v krystalech. Pro určení pozičních vektorů  $\mathbf{G}$  reciproké mřížky je jako v případě Bravaisovy mřížky možné použít rovnice (1.10) v obměněném následujícím tvaru:

$$\mathbf{G} = v_1 \mathbf{b}_1 + v_2 \mathbf{b}_2 + v_3 \mathbf{b}_3, \quad (1.17)$$

kde  $v_1$  až  $v_3$  jsou všechna přirozená čísla včetně nuly a  $\mathbf{b}_1$  až  $\mathbf{b}_3$  jsou primitivní vektory reciproké mřížky. Tyto primitivní vektory reciproké mřížky je možné vypočítat z primitivních vektorů Bravaisovy mřížky následujícími rovnicemi:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}, \quad (1.18)$$

$$\mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}, \quad (1.19)$$

$$\mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}. \quad (1.20)$$

Primitivní vektory reciproké mřížky ku primitivním vektorům Bravaisovy mřížky jsou nepřímo úměrné, tedy  $n$ -násobek primitivního vektoru Bravaisovy mřížky znamená  $1/n$ -násobek primitivního vektoru reciproké mřížky a naopak. To dále znamená, že pokud jednotkou reálného prostoru jsou například metry a centimetry (m, cm, ...), v reciprokém prostoru je jednotkou jejich převrácená hodnota ( $\text{m}^{-1}$ ,  $\text{cm}^{-1}$ , ...).

Zároveň je nutné si uvědomit, že protože vektory  $\mathbf{b}_1$  a  $\mathbf{b}_3$  vycházejí z Bravaisovy mřížky, stejně jako primitivní vektory Bravaisovy mřížky automaticky uspokojují podmínku, že alespoň jeden z primitivních vektorů reciproké mřížky neleží ve stejné rovině jako zbylé dva vektory [24].

Zároveň z rovnic (1.18) až (1.20) vyplývá, že reciproká mřížka sama o sobě tvoří novou Bravaisovu mřížku. Současně platí, že pokud z původní Bravaisovy mřížky je vypočítána reciproká mřížka – a následně se vypočítá nová reciproká mřížka této reciproké mřížky, vyjde opět původní Bravaisova mřížka. Je tedy možné přepočítávat Bravaisovu mřížku na reciprokou mřížku a naopak. Vhodným příkladem této skutečnosti může být opět kubická Bravaisova mřížka, v níž jsou všechny vektory na sebe navzájem kolmé a jsou stejné velikosti. Reciproká mřížka této kubické Bravaisovy mřížky má všechny vektory na sebe navzájem kolmé a všechny mají stejnou velikost, tedy reciproká mřížka je také kubická. Dále platí, že reciprokou mřížkou k plošně centrované kubické mřížce je prostorově centrovaná kubická mřížka a naopak. [7] [25].

V případě grafitu je možné určit primitivní vektory jeho reciproké mřížky ze znalosti primitivních vektorů Bravaisovy mřížky utvořené primitivní buňkou (viz. (1.14) až (1.16)). Výsledkem je opět sada vektorů [26]:

$$\mathbf{b}_1 = (25,541; -14,749; 0) \text{ nm}^{-1}, \quad (1.21)$$

$$\mathbf{b}_2 = (25,541; 14,749; 0) \text{ nm}^{-1}, \quad (1.22)$$

$$\mathbf{b}_3 = (0; 0; 9,378) \text{ nm}^{-1}. \quad (1.23)$$

## 1.2.5 Brillouinova zóna

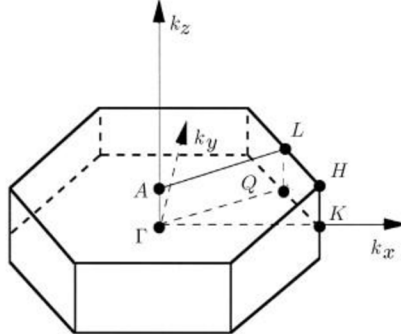
Brillouinovy zóny jsou dalším důležitým nástrojem pro popis a analýzu elektronové energie v pásové struktuře krystalů. Existuje větší množství Brillouinových zón, avšak když se mluví o Brillouinově zóně v jednotném čísle, myslí se vždy první Brillouinova zóna. V jejím případě se jedná o primitivní buňku v reciproké mřížce, která je vytvořena naprosto stejným způsobem, jakým se v krystalové mřížce konstruuje Wigner-Seitzova primitivní buňka, tedy opět se zvolí výchozí bod reciproké mřížky a od ní se vedou úsečky mezi výchozím bodem a nejbližšími sousedními body. Tato úsečka je rozdělena v polovině, a to rovinou, která je na ni kolmá. Tato rovina se v případě reciprokého prostoru nazývá Braggovou rovinou a tvoří hranici mezi dvojicí prvních Brillouinových zón. Stejně jako Wigner-Seitzova primitivní buňka i první Brillouinova zóna je plně symetrická a umožňuje svým posunem vyplnit celý reciproký prostor, přičemž má nejmenší možný objem (popř. plochu), který je ohraničený právě Braggovými rovinami, které první Brillouinova zóna nepřekračuje [14] [27] [28].

Vyšší Brillouinovy zóny mají mírně pozměněný způsob své konstrukce, při němž Brillouinova zóna překračuje hranici určenou předchozí Brillouinovou zónou, a tedy vždy ji překrývá. Z hlediska zkoumání vlastností grafitu však tyto vyšší Brillouinovy zóny nejsou významné [14] [29].

Dále se v souvislosti s Brillouinovou zónou zavádí koncept neredukovatelné Brillouinovy zóny. Jedná se o nejmenší možnou oblast v rámci Brillouinovy zóny, kterou již nelze dále rozdělit na dvě symetrické poloviny. Vzhledem k vysoké symetrii Brillouinovy zóny stačí popsat vlastnosti systému v rámci této neredukovatelné Brillouinovy zóny, čímž dojde k popisu vlastností systému v rámci celé Brillouinovy

zóny. Díky tomu, že celý prostor může být vyplněn identickými Brillouinovými zónami, dojde popsáním tohoto malého, jasně definovaného prostoru k popisu veškerého prostoru v rámci krystalu [30] [31].

Na následujícím obrázku je zobrazena Brillouinova zóna grafitu:



**Obrázek 4 – Brillouinova zóna v struktuře grafitu [32].**

Za zmínku stojí především významné body K a H (viz. Obrázek 4), stěžejní pro popis elektronických vlastností grafitu, neboť v jejich blízkosti dochází k významným jevům zkoumaným touto prací.

### 1.2.6 Blochův teorém

Již dříve bylo zmíněno, že krystaly jsou tvořeny periodicky se opakující mřížkou atomů. Na základě toho lze stanovit, že krystal vytváří takzvané potenciálové pole, které umožňuje elektronům nacházet se pouze v některých místech tohoto pole, neboť část pozic je elektronu nepřístupná z důvodu příliš vysokého potenciálu v dané oblasti způsobené přílišnou blízkostí jádra atomu. Toto potenciálové pole tedy má stejný periodický charakter jako výchozí mřížka atomu.

Pokud tedy budeme mít jednoelektronový Hamiltonián  $H'$ , jeho kinetická složka energie bude rovna kinetické složce energie klasického Hamiltoniánů (viz. rovnice (1.3)). Jeho potenciální složka ale bude změněna z důvodu přítomnosti potenciálového pole na následující tvar [14]:

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n), \quad (1.24)$$

kde  $\mathbf{a}_n$  představuje vektor příslušné mřížkové translace, tedy vektor, jehož směrem dochází k periodickému opakování potenciálového pole v struktuře. Pokud se následně řeší časově nezávislá Schrödingerova rovnice (viz. (1.4)) za užití výše zmíněného Hamiltoniánu, výsledkem je následující vztah:

$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_n) = e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_n} \cdot \Psi(\mathbf{r}), \quad (1.25)$$

kde  $\mathbf{k}$  představuje vlnový vektor elektronu v rámci konstantního potenciálu. Rovnice říká, že vlnová funkce  $\Psi$  získaná řešením Schrödingerovy rovnice v rámci periodického potenciálu obsahuje vektor  $\mathbf{k}$ , který při translaci o vektor  $\mathbf{a}_n$  mění pouze svou fázi popsanou  $e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}_n}$  [14] [33].

Výše popsané vztahy (viz. (1.24) a (1.25)) lze následně přepsat do jejich obecného tvaru, který se nazývá Blochovým teorémem:

$$\Psi(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r}) \cdot e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (1.26)$$

kde  $u(\mathbf{r})$  představuje funkci periodicity mřížky, tedy:

$$u(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = u(\mathbf{r}), \quad (1.27)$$

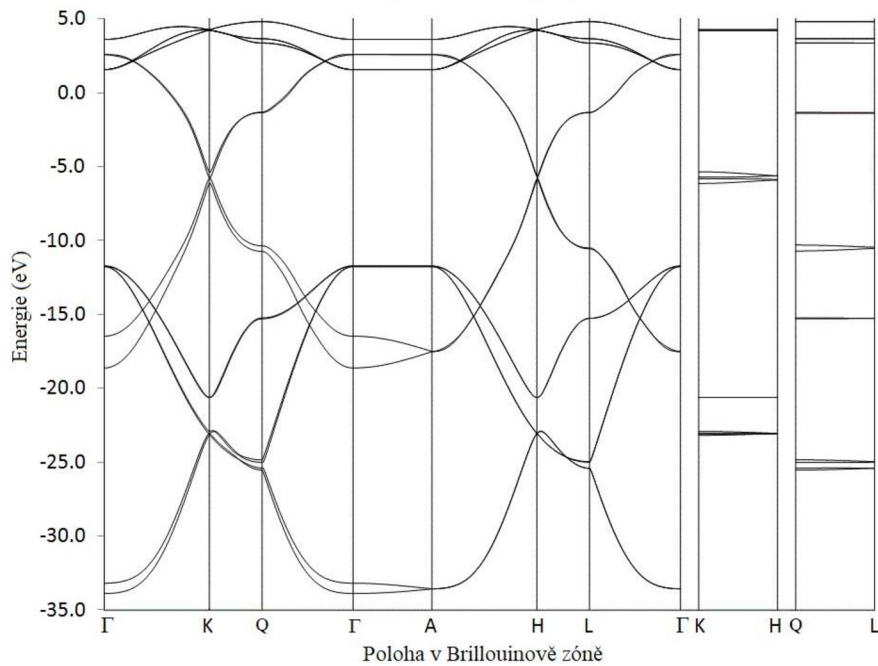
kde  $\mathbf{T}$  představuje vektor posunutí omezený okrajovými Born-von Karmanovými podmínkami [33].

## 1.2.7 Pásová struktura

Pro popis elektronických vlastností systému se zavádí takzvaná pásová struktura. Tato struktura se používá pro popis chování elektronu ve vrchních vrstvách obalu atomu. V rámci celého atomu se uvažuje pouze valenční vrstva, která se podílí na interakci s okolním prostředím. Tato vrstva se v rámci pásové struktury označuje jako valenční pás. Nad valenčním pásem se nachází vodivostní pás. Pokud se elektron nachází ve vodivostním pásu, podílí se na vodivosti v rámci struktury. Valenční a vodivostní pás od sebe může být separován takzvaným zakázaným pásem, který představuje zónu energie, v níž se elektron z důvodu kvantové povahy systému nemůže vyskytovat. Pásové struktury je možné charakterizovat energetickými hladinami, na nichž se nacházejí, respektive v případě zakázaného pásu je možné popsat jeho velikost energií, kterou je nutné dodat elektronu ve valenčním pásu pro jeho převedení do vodivostního pásu. To umožňuje klasifikaci látek na základě velikosti této potřebné energie (tj. šířce zakázaného pásu) na vodiče, polovodiče a izolanty [34] [35].

Grafit se vyznačuje unikátními vlastnostmi, kdy je vodivý ve směru jednotlivých bazálních rovin v rámci krystalu, nikoliv však ve směru kolmém na tyto roviny. Vzhledem k této skutečnosti se dá ke grafitu v rámci modelu přistupovat jako ke dvourozměrné rovině tvořené jedinou vrstvou atomů [36].

Z toho důvodu je možné grafit popsat jedinou Brillouinovou zónou (viz. Obrázek 4). Poté je možné vypočítat energie energetických pásů v různých bodech Brillouinovy zóny. Výsledkem je následující obrázek zobrazující model pásové struktury grafitu, který byl vytvořen užitím semiempirické metody NDDO (zkratka pro anglický název Neglect of diatomic differential overlap, česky Zanedbání diatomického diferenciálního překrytí) v rámci nástroje MAKPOL výpočetního balíčku MOPAC, který odpovídá rozložení pásové struktury grafitu v rámci Brillouinovy zóny [37] [38]:



**Obrázek 5 – Model pásové struktury grafitu [37].**

Obrázek výše zobrazuje 16 pásů, ačkoliv některé energetické pásy nejsou viditelné z důvodu jejich degenerace v různých bodech Brillouinovy zóny [37].

Vzhledem k této pásové struktuře se na grafit dá nahlížet jako na polokov, u kterého dochází k mizení zakázaného pásu mezi body K a H, tedy ke kontaktu valenčního a vodivostního pásu v rozích Brillouinovy zóny [36].

### 1.2.8 Hustota stavů

Další důležitý pojem pro popis elektronických vlastností systému je jeho hustota stavů. Jedná se o počet jednotlivých stavů o určité hodnotě energie, které mohou být obsazeny jednotlivými elektrony, respektive o počet elektronů na jednotku objemu a energie. Znalost hustoty stavů zároveň umožňuje určit celkový počet stavů jako funkci energie, tedy i rozložení jednotlivých energetických pásů [39].

Příklad výpočtu hustoty stavů je možné představit na volných elektronech, tedy elektronech, které mají výhradně kinetickou složku energie. Jeho rychlost lze nahradit De-Broglieho vlnou, která se určí užitím následujícího vztahu:

$$\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}, \quad (1.28)$$

kde  $\mathbf{p}$  představuje hybnost volného elektronu. Tato vlna odpovídá volnému elektronu, takže je nyní možné získat vztah pro energii elektronu v následujícím tvaru:

$$E = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*}, \quad (1.29)$$

kde  $m^*$  představuje efektivní hmotnost elektronu. Tento vztah umožňuje výpočet konkrétní povolené hodnoty energie pro daný elektron. Proto je možné si představit kouli

o poloměru  $k$  s tloušťkou stěny  $dk$ , což popisuje objem, v němž se může daný elektron nacházet. Její objem lze popsat následujícím vztahem:

$$V = 4\pi k^2 dk. \quad (1.30)$$

Počet stavů pak lze určit vztahem:

$$N_s = \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk. \quad (1.31)$$

Pakliže tloušťka stěny popisované koule nebude popisována elementem  $dk$ , ale  $dE$  a započteme, že elektron může nabývat na stejné hladině energie opačných spinů, získáváme následující funkci:

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \sqrt{\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^3} \cdot \sqrt{E}, \quad (1.32)$$

kde funkce  $g(E)$  představuje počet stavů, kterých mohou elektrony nabývat v rozsahu energie  $(E, E+dE)$ . Tuto funkci v případě volných elektronů nazýváme hustotou stavů [39] [14].

V obecnějším příkladu elektronů v krystalové struktuře může být hustota stavů vypočítána následujícím vztahem:

$$g_N(E) = \int_{S_N(E)} \frac{dS}{4\pi^3} \frac{1}{\nabla \varepsilon_N(\mathbf{k})}, \quad (1.33)$$

kde  $\varepsilon_N(\mathbf{k})$  představuje energetický pás  $N$ ,  $S_N(E)$  je povrch s konstantní hodnotou energie  $E$  v reciprokém prostoru a  $\nabla$  je matematický gradient. Tato hodnota představuje integraci převrácené hodnoty rychlosti pásu podél povrchu konstantní energie o hodnotě  $E$ , která je dána následujícím vztahem:

$$v_N(\mathbf{k}) = \frac{\nabla \varepsilon_N(\mathbf{k})}{\hbar}. \quad (1.34)$$

## 1.2.9 Fermiho energie a Fermiho plocha

Za předpokladu, že sledovaná struktura bude mít teplotu rovnou 0 K, nastane stav, kdy budou mít všechny elektrony v látce nejnižší možnou energii. Zde se zavádí koncept Fermiho energie, jejíž hodnota odpovídá nejvyššímu obsazenému elektronickému stavu při této teplotě. Tato energie popisuje maximální kinetickou složku energie nejrychlejších elektronů v látce při teplotě 0 K [40].

V případě, že se opět uvažuje modelová situace, lze pro volné elektrony vypočítat Fermiho energii  $E_f$  za užití vztahu [14] [41]:

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m_e} \cdot \mathbf{k}_F^2, \quad (1.35)$$

kde  $m_e$  představuje klidovou hmotnost elektronu a  $\mathbf{k}_F$  je Fermiho vlnový vektor, který je určen následujícím vztahem [41]:

$$\mathbf{k}_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n}, \quad (1.36)$$

kde  $n$  představuje hustotu nosičů náboje.



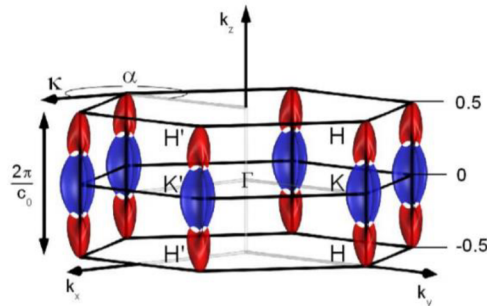
V případě reálných teplot pak dochází ke zvyšování pravděpodobnosti, že elektron bude nabývat vyšší energie, než je Fermiho energie. Z toho důvodu se zavádí takzvané Fermiho-Diracovo rozdělení  $f(E)$ , které určuje pravděpodobnost obsazení elektronických stavů při dané energii  $E$  a teplotě  $T$ . Toto rozdělení je dáno vztahem [42]:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_f}{k_B T}}}, \quad (1.37)$$

kde  $E$  představuje energetickou hladinu,  $k_B$  je rovna Boltzmannově konstantě, a  $T$  je absolutní teplota.

Dalším významným termínem je Fermiho plocha. Jedná se o povrch 3D struktury o stejné hodnotě energie v rámci reciprokého prostoru, který je analogický k ekvipotenciálním energetickým plochám v reálném prostoru. Analogicky k Fermiho energii představuje rozhraní mezi obsazenými a neobsazenými kvantovými stavy při teplotě 0 K. Její konkrétní tvar je závislý na periodicitě a symetrii pozorované krystalické látky a na její pásové struktuře. Například u materiálů, které mohou být popsány téměř výhradně volnými elektrony, jako je tomu u draslíku či mědi, je Fermiho povrch přibližně kulového tvaru [43] [44].

V rámci krystalu grafitu pak Fermiho plocha nabývá tvaru zobrazeném na následujícím obrázku. Na obrázku je vidět, že Fermiho plocha se v grafitu nachází v těsné blízkosti bodů K a H ve vrcholech Brillouinovy zóny. Fermiho plocha je dále trigonálně symetrická okolo osy  $k_z$ , což je na obrázku znázorněno rotací o  $120^\circ$  mezi osami procházejícími body Fermiho plochy ležícími nejdále od osy  $k_z$ .



Obrázek 6 – Fermiho plocha v Brillouinově zóně grafitu [6].

### 1.3 Elektronově-paramagneticko-rezonanční spektroskopie

Elektronově-paramagneticko-rezonanční spektroskopie je založena na principu elektronové paramagnetické rezonance (anglicky Electron paramagnetic resonance, EPR), kdy se využívá mikrovlnného záření pro zkoumání spinového systému v látkách/strukturách/molekulách s (jedním) nespárovaným elektronem, za působení vnějšího magnetického pole. Původně se EPR spektroskopie využívala pro pozorování molekul s nenulovým elektronovým spinem, jako jsou například různé chemické

radikály. Tyto látky se vyznačují svými paramagnetickými vlastnostmi, což vedlo k užívání názvu EPR pro popis těchto jevů [45]. Později bylo zjištěno, že lze užít EPR spektroskopii i pro studium dalších látek, které nutně nemusejí mít paramagnetické vlastnosti [46].

EPR spektroskopie využívá obdobných principů jako nukleární magneticko-rezonanční (zkráceně NMR) spektroskopie, společně s ní se řadí do tzv. magneto-optické spektroskopie. Na rozdíl od ní však nesleduje chování jader atomů, ale jejich elektronů, které se vyznačují nižší hmotností. Proto je nutné užívat frekvence v oblasti mikrovlnného záření, což má za následek vyšší citlivost této metody [45] [46].

V rámci EPR spektroskopie se užívá rozdělení dle mikrovlnných pásem, které popisují jednotlivé frekvence s odpovídající velikostí magnetického pole, na kterých EPR spektrometry běžně pracují. Přehled nejběžněji užívaných pásem je v následující tabulce:

**Tabulka 1 – Běžně užívané mikrovlnné pásy EPR spektroskopii [46]**

Mikrovlnný pás	Frekvence [GHz]	Magnetické pole [T]
S	~3,0	~0,107
X	~9,5	~0,339
K	~23	~0,82
Q	~35	~1,25
W	~95	~3,3

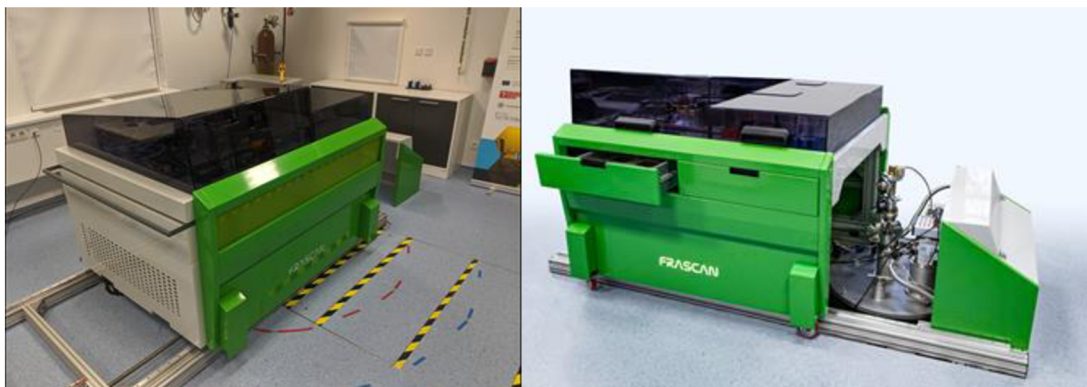
Z předchozí tabulky je patrné, že čím vyšší frekvence je v rámci EPR spektroskopie užita, tím silnější magnetické pole je nutné pro provedení měření. Pro upřesnění je nutné zmínit, že poměr mezi frekvencí mikrovlnného záření a magnetickým polem je platný pouze pro volné elektrony a pro nejčastější případ g-faktoru, kdy je roven ~2. Existují i méně užívané mikrovlnné pásy o vyšší frekvenci, které vyžadují velmi silného magnetického pole. Navíc je zpravidla vyžadována velmi nízká teplota vzorku pro provedení přesného měření z důvodu Boltzmannova rozdělení stavů, které říká, že při nižších teplotách dojde k navýšení rozdílu v populaci mezi jednotlivými energetickými úrovněmi. Z tohoto důvodu mohou být experimenty o vyšších frekvencích prováděny pouze za užití speciálních EPR spektrometrů, jako je například HFEPR spektrometr nacházející se v laboratoři EPR spektroskopie CEITEC VUT.

### 1.3.1 HFEPR spektrometr

Jak bylo nastíněno v předešlé kapitole, v laboratořích CEITEC VUT byl vytvořen HFEPR spektrometr, který byl navržen pro měření různých typů vzorků za působení magnetického pole v rozsahu od -16 T do 16 T a v rozsahu teplot od 1,8 K do 320 K. Quasi-optická sestava umožňuje ozářit vzorek mikrovlnným zářením v rozsahu od 80 GHz až do 1100 GHz [1].

V současné době tento spektrometr dovoluje měření v rozsahu teplot zhruba od 2 K do 320 K. Pro měření se používá mikrovlnné záření, které lze nastavit v rozsahu od

90 GHz až po zhruba 750 GHz. Na následujícím obrázku je zobrazen HFEPR spektrometr nacházející se v laboratoři EPR spektroskopie CEITEC VUT:

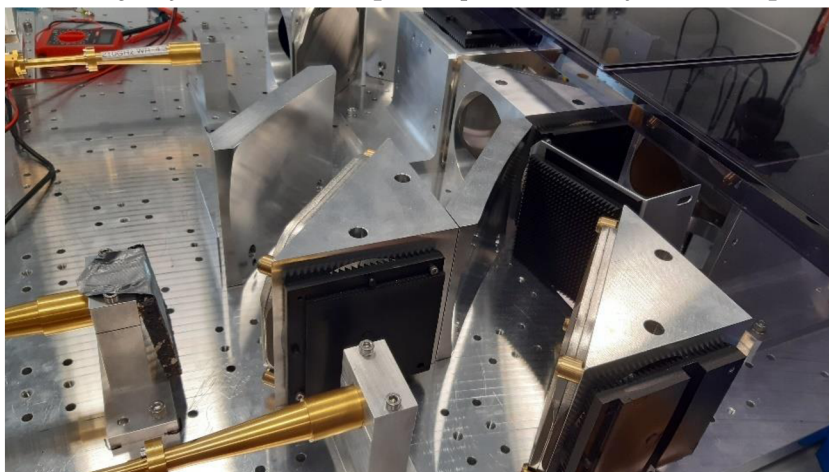


**Obrázek 7 – HFEPR spektrometr.**

Jako mikrovlnný zdroj je použit mikrovlnný syntetizér od společnosti Virginia Diodes Inc. [47], který je propojený s počítačem přes rozhraní USB a umožňuje generaci základního mikrovlnného signálu pro měření, který je možné nastavit na frekvenci v rozsahu 8 až 20 GHz. Tento syntetizér se v rámci spektrometru nachází dvakrát, kdy první slouží jako základní zdroj záření a druhý generuje signál s nastavitelným offsetem (obvykle desítky MHz) vůči prvnímu syntetizéru a slouží jako referenční signál. Signál z obou zdrojů je veden do aktivní signálové násobičky (zkráceně AMC), která zvýší frekvenci podle nastavení násobičky 9x nebo 12x (s rozsahem vstupní frekvence od 9 do 14,2 GHz). Tím se vygeneruje signál, který může mít frekvenci od 82 GHz do 170 GHz. Signál poté může dále procházet pasivní schottkyho násobičkou, která vytváří vyšší harmonické složky signálu. Dle zvolené násobičky je pomocí filtru typu pásmová propust vybrána druhá nebo třetí harmonická složka. Tím se dosáhne pokrytí frekvenčního rozsahu zhruba od 90 do 750 GHz. Signál je následně vyzářen z kuželového vroubkovaného vlnovodu ve formě Gaussovského svazku o výkonu v řádu desítek mW do quasi-optické sestavy.

Quasi-optická sestava je tvořena stolem od firmy Thomas Keating Ltd., na kterém jsou umístěny quasi-optické prvky. Nejpočetnějším prvkem jsou polarizační drátové mřížky, které umožňují polarizaci svazku v širokém rozsahu frekvencí (v řádu stovek GHz). Dalším důležitým prvkem jsou Faradayovy rotátory, které umožňují pootočení směru polarizace svazku. Frekvenční rozsah těchto rotátorů je omezen na desítky až stovky GHz. V sestavě se dále vyskytují mřížkové filtry a absorbéry, které slouží k odfiltrování nežádoucích polarizačních složek svazku. Mezi jednotlivými komponentami se užívá eliptických zrcadel, které slouží k zaostřování svazku, metalických zrcadel, které svazek odrážejí a zvyšují jeho dosah a mimoosa zrcadla, která se vyznačují nízkými ztrátami. Z quasi-optické sestavy je svazek vyveden skrze teflonové optické vakuové okno do vlnovodu ze slitiny alpaky směřujícího k držáku vzorku umístěném v supravodivém magnetu [47] [48] [49].

Na obrázku níže je vyobrazena část quasi-optické sestavy HFEPR spektrometru:

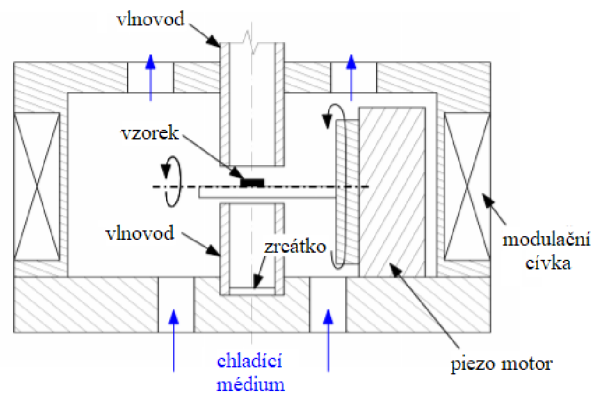


**Obrázek 8 – Quasi-optická sestava HFEPR spektrometru.**

Držák vzorku je umístěn uvnitř supravodivého elektromagnetu o indukčnosti 104 H, který při měření dokáže generovat magnetické pole o síle až 16 T. Současně je na kostře držáku vzorku navinuta cívka pro modulaci magnetického pole do 5 mT. s celkovou indukčností v řádu jednotek mH. Tato modulační cívka vytváří okolo vzorku homogenní magnetické pole, které je modulované od 1 do cca 100 kHz Lock-in zesilovačem od firmy Zurich Instruments AG.

Supravodivé cívky elektromagnetu jsou drženy ve stavu supravodivosti za užití tekutého helia. Držák vzorku je vyhotoven převážně z polyetheretherketonu (zkráceně PEEK, a to z důvodu jeho malé teplotní roztažnosti, dobrého izolačního odporu, chemické stability a dobré pevnosti i za nízkých teplot) a v supravodivém elektromagnetu upnutý skrze upínací hlavici, která propojuje držák s konektory a vlnovodem vedoucím z quasi-optické sestavy. Samotný držák vzorku je ještě dodatečně obklopen modulační cívkou, která vytváří střídavé (modulační) magnetické pole kolem vzorku. V držáku se dále nachází piezoelektrický motor, na který je upnuta tyčinka z křemenného skla, na níž se nachází měřený vzorek. To umožňuje rotovat vzorkem v jedné ose při měření a umožňuje v rámci měření vzorku grafitu měření při různých orientacích jeho krystalické struktury. Tyčinka se vzorkem se současně nachází v cestě mikrovlnného svazku v rámci vlnovodu. Vlnovod v rámci držáku je zhotoven z nemagnetické oceli. Celý vzorek je chlazen vlastním chladícím okruhem. Pod vzorkem na konci vlnovodu se nachází zrcátko, které odráží svazek po průchodu vzorkem zpět do quasi-optické sestavy skrze vlnovod [47] [50].

Na obrázku se nachází principiální schéma fungování držáku vzorku:



**Obrázek 9 – Schéma fungování rotačního držáku vzorku [50].**

Odražený svazek se vrací do quasi-optické sestavy, kde se díky Faradayově rotátoru a polarizačním mřížkám nevrací do zdroje, ale prochází do detektorů. Oba detektory jsou zhotoveny ze schottkyho diod, ve kterých dochází k mixování signálů z obou mikrovlnných zdrojů. Výsledkem jsou signály o frekvenci 1,88 GHz v obou detekčních větvích. Tyto signály jsou dále vedeny do radiofrekvenčního mixéru, z kterého je na výstup vybrána pouze nízkofrekvenční složka. Jedná se o superheterodynní detekci, po které se nízkofrekvenční signál přivádí do dříve zmíněného Lock-in zesilovače. Zde je signál demodulován a je odeslán do počítače ke zpracování [47].

### 1.3.2 Spektroskopie na úrovni Landauových hladin

V předešlých kapitolách bylo zmíněno, že HFEPR spektrometr obsahuje supravodivý elektromagnet, který vytváří silné magnetické pole okolo měřeného vzorku. Pokud se uvažuje modelová situace, kdy jsou volné elektrony vystaveny silnému magnetickému poli, dochází v klasickém pojetí fyziky k zakřívování drah jednotlivých elektronů, což je vysvětlováno Lorentzovou silou působící na elektrony. Poloměr těchto kruhových drah elektronů je pak závislý na velikosti působícího magnetického pole, stejně jako jeho moment hybnosti.

Pokud se však začne uvažovat stejná situace v případě kvantově mechanického systému, dojde ke kvantizaci jednotlivých magnetických drah, po kterých se elektrony mohou pohybovat. Podmínkou pro kvantově-mechanické chování systému je typicky velmi nízká teplota a velké magnetické pole, aby nastal stav, kdy teplotní energie elektronů je nižší než rozdíl energií mezi Landauovými hladinami. V případě grafitu může být dosaženo Landauovy kvantizace při teplotách menších než 10 K a magnetickém poli o velikosti řádově 0,01 T.

Cyklotronová frekvence  $\omega_c$ , s níž se elektrony pohybují po těchto kruhových drahách, je dána následujícím vztahem:

$$\omega_c = \frac{eB}{m^*}, \quad (1.38)$$

kde  $e$  představuje náboj elektronu a  $B$  představuje magnetickou indukci. Na základě této rovnice je tedy možné určit efektivní hmotnost elektronu  $m^*$  měřením tzv. cyklotronové rezonance při měření vzorku grafitu HFEPR spektrometrem.

Hladiny energie, na nichž se mohou elektrony vyskytovat, lze tedy pro dvourozměrný systém charakterizovat hodnotou jejich energie  $E_N$  za užití následujícího vzorce:

$$E_N = \hbar\omega_c \left( N + \frac{1}{2} \right). \quad (1.39)$$

Hodnoty energie popsané touto rovnicí, jichž můžou jednotlivé elektrony v systému nabývat, se nazývají Landauovy hladiny a jsou závislé na velikosti magnetické indukce

$B$ . Vztah

(1.39) je podobný vztahu pro popis kvantových harmonických oscilací (1.9), což znamená, že chování elektronů lze řešit jako kvantový harmonický oscilátor [51] [6].

V přítomnosti magnetického pole zároveň dochází k rozštěpení samotných Landauových hladin. Toto rozštěpení je popsáno Zeemanovým jevem, který popisuje jev, kdy v přítomnosti magnetického pole jsou energeticky upřednostňovány elektrony se záporným spinem před elektrony s kladným spinem. Tento jev je charakterizován následující rovnicí [46]:

$$\Delta E = g\mu_B B, \quad (1.40)$$

kde  $\Delta E$  představuje rozdíl energie,  $\mu_B$  je Bohrov magneton a  $g$  je Landého  $g$ -faktor.

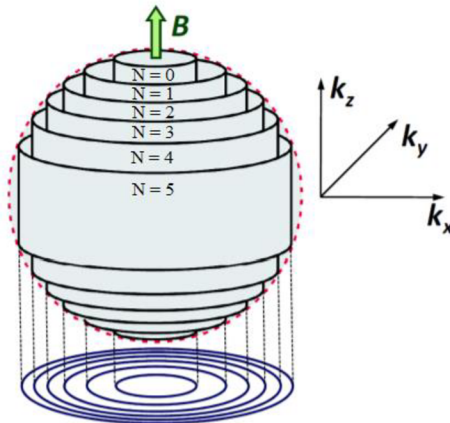
Kvantizace elektronů v magnetickém poli současně způsobuje kvantizaci hustoty stavů. Současně platí, že počet volných stavů jedné Landauovy hladiny je lineárně závislý na magnetické indukci. Spektroskopii na úrovni Landauových hladin je možné pozorovat přechody elektronů mezi jednotlivými Landauovými hladinami, které jsou závislé na použité frekvenci mikrovlnného záření při měření. Z toho lze vyvodit změnu Landauových hladin v závislosti na frekvenci spolu s Fermiho energií vzorku. Analýzou většího množství měření při různých frekvencích je možné popsat pásovou strukturu měřeného vzorku. Zároveň můžeme z měření cyklotronové rezonance ve vzorku popsat hustotu stavů v rámci vzorku. Následným propojením hustoty stavů s Fermiho-Diracovým rozdělením můžeme získat plochu, jejíž integrací zjistíme hustotu nosičů náboje ve vzorku [6].

Pokud se problematika Landauových hladin převede do trojrozměrného systému, je nutné rovnici pro výpočet Landauových hladin upravit, respektive přičíst energii elektronů ve směru osy  $k_z$ , jejichž dráha není ovlivněna magnetickým polem (viz. (1.29)). Rovnice tedy nabývá tvaru:

$$E_N = \hbar\omega_c \left( N + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2}{2m_e} k_z^2. \quad (1.41)$$

Právě z toho důvodu, že elektrony nejsou ovlivněny magnetickým polem ve směru  $k_z$ , nedochází k jejich kvantizaci v tomto směru, což v 3D systému vytváří z Landauových hladin Landauovy válce. Tyto Landauovy válce jsou omezeny pouze na oblast uvnitř

Fermiho povrchu. Landauovy válce uvnitř kulového Fermiho povrchu jsou vyobrazeny na následujícím obrázku [6]:



Obrázek 10 – Landauovy válce uvnitř Fermiho povrchu [52].

### 1.3.3 Shubnikovy-de Haasovy oscilace

Shubnikovy-de Haasovy oscilace popisují oscilační jev, který se projeví při měření vzorku jako pokles a nárůst absorbovaného mikrovlnného záření při vyšším magnetickém poli. Tyto oscilace jsou zapříčiněny kvantizací Landauových hladin [52].

V modelovém 2D systému elektronů můžeme definovat magnetické pole o magnetické indukci  $B_F$ , při níž je plně obsazena nultá Landauova hladina. Snižováním magnetického pole pod velikost  $B_F$  dojde k postupnému zaplňování další Landauovy hladiny. Elektrony poté nabývají vyšší energie v porovnání s nultou Landauovou hladinou. To způsobuje navýšení Fermiho energie systému. Stejně chování je možné sledovat i mezi všemi vyššími Landauovými hladinami při dalším snižování magnetického pole [6].

V předchozí kapitole bylo řečeno, že v případě 3D systému elektronů dochází ke kondenzaci elektronů do Landauových válců, které jsou omezeny oblastí (a tedy i tvarem) Fermiho povrchu. Pokud dojde k překročení Fermiho povrchu Landauovým válcem, dojde k okamžitému nárůstu nebo poklesu obsazení tohoto válce. To vyvolá oscilace v hustotě stavů na úrovni Fermiho energie, které jsou následně detekovatelné spektrometrem [52]. Tyto oscilace se při měření projeví jako oscilace optické konduktivity vzorku, což je popsáno Lifshitz-Kosevičovým vztahem [6]:

$$\frac{\Delta\sigma_{osc}}{\sigma_0} = \frac{5}{2} \sqrt{\frac{\pi e \hbar B}{E_F m^* |S''_{extr}|}} \cdot \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p^2} R_T(p) R_D(p) R_S(p) \cos \left[ 2\pi p \left( \frac{B_F}{B} - \gamma + \delta \right) \right] \quad (1.42)$$

kde  $\Delta\sigma_{osc}$  odpovídá změně optické konduktivity,  $\sigma_0$  je optická konduktivita naměřená pro nulové magnetické pole,  $|S''_{extr}|$  je druhá derivace řezu Fermiho povrchu kolmého ke směru magnetického pole,  $B_F$  je fundamentální frekvence a  $\gamma$  a  $\delta$  jsou faktory korekce fáze. Zbývající proměnné označené  $R$  ovlivňují velikost amplitudy oscilací. První z nich,

$R_T$ , je teplotní faktor popisující rozšiřování Fermiho-Diracova rozdělení vlivem konečného množství teplot, a je dán vztahem:

$$R_T(p) = \frac{\alpha \frac{m^* T}{m_e B}}{\sinh\left(\alpha p \frac{m^* T}{m_e B}\right)}, \quad (1.43)$$

kde:

$$\alpha = \frac{2\pi^2 k_B m_e}{\hbar e}. \quad (1.44)$$

$R_D$  pak představuje tzv. Dingleho faktor, který popisuje rozptyl elektronů zapříčiňující rozšiřování Landauových hladin, a je dán vztahem:

$$R_D(p) = \exp\left(-\alpha p \frac{m^* T_D(\tau)}{m_e B}\right), \quad (1.45)$$

kde  $\tau$  popisuje kvantovou dobu života a  $T_D$  je dáno vztahem:

$$T_D = \frac{\hbar}{2\pi k_B \tau}. \quad (1.46)$$

Poslední parametr,  $R_S$ , je spinový faktor, který popisuje Zeemanovo štěpení Landauových hladin v závislosti na spinu elektronu. Ten je dán vztahem:

$$R_S(p) = \cos\left(\frac{\pi}{2} p g \frac{m^*}{m_e}\right), \quad (1.47)$$

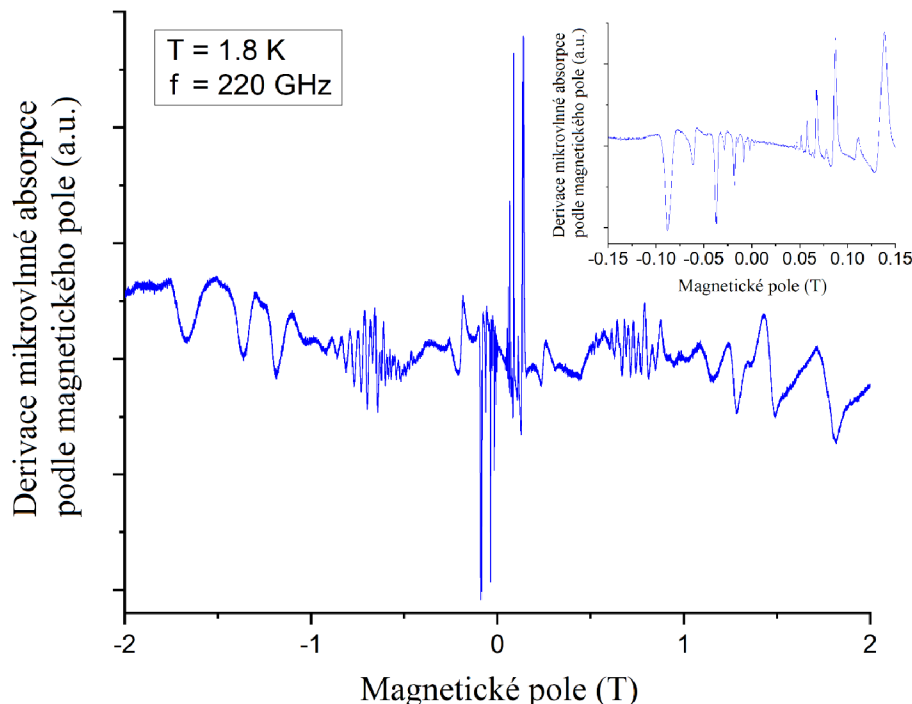
kde  $g$  představuje Landého  $g$ -faktor elektronů.

V případě měření vzorku grafitu HFEP R spektrometrem dojde při ozáření vzorku mikrovlnným zářením k absorbování tohoto záření elektrony systému při různé velikosti magnetického pole (viz. Obrázek 11). Obdržený signál je možné vynést do grafu, kde se na ose  $x$  nachází velikost magnetického pole a na ose  $y$  je vynesena derivace mikrovlnné absorpce podle magnetického pole (jejíž úroveň je měřena v arbitrárních jednotkách, kdy je zvolena referenční hodnota signálu, k níž jsou všechny ostatní hodnoty signálu poměrově škálovány). V oblasti nízkého magnetického pole je možné sledovat cyklotronovou rezonanci (v případě vzorku grafitu v magnetickém poli od cca -150 mT do 150 mT), kdy dochází k výrazným špičkám absorbovaného mikrovlnného záření v oblasti, kde došlo k přechodu elektronů mezi jednotlivými Landauovými hladinami. Pro vyšší magnetické pole (od -16 T do -150 mT a od 150 mT do 16 T) lze sledovat Shubnikov-de Haasovy oscilace, které se projevují jako oscilace v absorpci mikrovlnného záření. Tyto oscilace odpovídají překročení Fermiho energie Landauovými hladinami systému.

Současně je možné si povšimnout symetrie signálu okolo magnetického pole o velikosti cca 25 mT. Ve skutečnosti má být signál symetrický okolo hodnoty 0 T, avšak z důvodu hystereze magnetického pole elektromagnetu jsou hodnoty v případě vzorku grafitu mírně posunuty. To znamená, že obdržený signál je symetricky závislý na orientaci magnetického pole. Toto měření bylo již dříve provedeno HFEP R spektrometrem v laboratoři EPR spektroskopie CEITEC VUT. Pro měření byl použit



přírodní grafit, který byl ozářen mikrovlnným zářením o frekvenci 220 GHz při teplotě 1,8 K, zatímco byla měněna velikost magnetického pole v rozsahu od -2 do 2 T. Jedná se o dosud nepublikovaný výsledek měření vzorku přírodního grafitu, který byl proveden již dříve vědci ze skupiny MOTeS v CEITEC VUT:



**Obrázek 11 – Výsledek měření vzorku přírodního grafitu.**

## 1.4 Slonczewskiho-Weissův-McClureův model

Slonczewskiho-Weissův-McClureův (zkráceně SWM) model byl původně vytvořen pro popis pásové struktury grafitu. Pozdější modifikace tohoto modelu však umožnily provést numerické simulace i jiných vlastností grafitu, od jednotlivých Landauových hladin, přes Fermiho povrch, pro optické a magnetické vlastnosti. Zároveň byla v minulosti experimentálně dokázána správnost tohoto numerického modelu, což jej činí relevantním pro studované vlastnosti grafitu v rámci této práce.

Všechny podkapitoly týkající se SWM modelu jsou založeny na disertační práci Johannese M. Schneidera s názvem „Electronic properties of graphite“ [6].

### 1.4.1 SWM model bez přítomnosti magnetického pole

Pokud se SWM model aplikuje na krystal grafitu, aniž by do rovnic vstupovalo magnetické pole, umožňuje SWM model popis pásové struktury grafitu v rámci jeho Brillouinovy zóny. Do modelu vstupují jako parametry hodnoty energie  $\gamma_0$ - $\gamma_6$ , které popisují různé interakce mezi jednotlivými atomy v rámci krystalu grafitu. Parametr  $\gamma_0$  popisuje interakci mezi dvojicí atomů uhlíku ve stejné bázi krystalové mřížky grafitu,

tudíž má na elektronické vlastnosti grafitu největší vliv. Parametry  $\gamma_1$ - $\gamma_5$  popisují interakce atomů mezi různými vrstvami krystalu grafitu a parametr  $\gamma_6$  odpovídá drobnému posunu jednotlivých vrstev grafitu mezi sebou z důvodu vlivu sousedních vrstev. Hodnoty těchto parametrů jsou uvedeny v seznamu symbolů, konstant a zkratk.

Vzhledem k symetrii krystalové struktury grafitu je tedy možné jeho pásovou strukturu popsat následujícím SWM Hamiltoniánem:

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_1^0 & 0 & H_{13} & H_{13}^* \\ 0 & \varepsilon_2^0 & H_{23} & -H_{23}^* \\ H_{13}^* & H_{23}^* & \varepsilon_3^0 & H_{33} \\ H_{13} & -H_{23} & H_{33}^* & \varepsilon_3^0 \end{pmatrix}, \quad (1.48)$$

kde:

$$\varepsilon_1^0 = \Delta + \gamma_1 \Gamma + \frac{1}{2} \gamma_5 \Gamma^2, \quad \varepsilon_2^0 = \Delta - \gamma_1 \Gamma + \frac{1}{2} \gamma_5 \Gamma^2, \quad \varepsilon_3^0 = \frac{1}{2} \gamma_2 \Gamma^2, \quad (1.49)$$

$$H_{13} = \frac{1}{\sqrt{2}} (-\gamma_0 + \gamma_4 \Gamma) \sigma e^{i\alpha}, \quad H_{23} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\gamma_0 + \gamma_4 \Gamma) \sigma e^{i\alpha}, \quad H_{33} = \gamma_3 \sigma e^{i\alpha}.$$

V nichž:

$$\Gamma = 2 \cos(\pi k_z), \quad \sigma = \frac{\sqrt{3a_0 k}}{2}, \quad k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \quad (1.50)$$

$\alpha$  představuje úhel mezi vektorem hybnosti  $\mathbf{k}$  a úsečkou mezi  $\Gamma$ K body v Brillouinově zóně,  $a_0$  je rovinný parametr a  $k_x$  a  $k_y$  jsou parametry měřené v okolí H-K-H bodů na hraně Brillouinovy zóny [6].

## 1.4.2 SWM model v magnetickém poli

SWM model z předchozí kapitoly je dále možné rozšířit o vliv magnetického pole, které je rovnoběžné s osou  $k_z$  v rámci Brillouinovy zóny grafitu. Takto modifikovaný SWM model umožňuje zobrazit rozdělení jednotlivých Landauových hladin při působení magnetického pole na vzorek. SWM Hamiltonián v magnetickém poli má pak následující tvar:

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_1^0 & 0 & \zeta \sqrt{N+1} & -\zeta \sqrt{N} \\ 0 & \varepsilon_2^0 & \eta \sqrt{N+1} & -\eta \sqrt{N} \\ -\zeta \sqrt{N+1} & \zeta \sqrt{N} & \varepsilon_3^0 & \gamma_3 \Gamma \sqrt{\xi} a \\ -\zeta \sqrt{N} & -\eta \sqrt{N} & \gamma_3 \Gamma \sqrt{\xi} a^\dagger & \varepsilon_3^0 \end{pmatrix}, \quad (1.51)$$

kde:

$$\xi = 3a_0^2 \gamma_0^2 \left( \frac{e}{2\hbar} \right) B, \quad \zeta = \sqrt{\frac{\varepsilon}{2}} (1 - v), \quad \eta = \sqrt{\frac{\varepsilon}{2}} (1 + v), \quad (1.52)$$

a dále:

$$v = \frac{\gamma_4 \Gamma}{\gamma_0}. \quad (1.53)$$

$N$  představuje množinu celých čísel, kde  $N \geq -1$ ,  $a$  je kreační operátor a  $a^\dagger$  anihilační operátor. Pokud v tomto tvaru SWM Hamiltoniánu bude parametr  $\gamma_3$  nabývat jiných hodnot než 0, dojde k tomu, že výsledek SWM Hamiltoniánu pro  $N$  bude provázán s hodnotami  $N \pm 3$ . To nesplňuje dipólové výběrové pravidlo, které vyžaduje, aby  $N$  bylo provázáno s hodnotami  $N \pm 1$  [5]. Z toho důvodu je nutné SWM Hamiltonián upravit do následujícího tvaru, který nabývá nekonečného rozměru:

$$H = \begin{pmatrix} D_0(-1) & 0 & 0 & D_1(-1) & 0 & \dots \\ 0 & D_0(0) & 0 & 0 & D_1(0) & \dots \\ 0 & 0 & D_0(1) & 0 & 0 & \dots \\ D_1^+(-1) & 0 & 0 & D_0(2) & 0 & \dots \\ 0 & D_1^+(0) & 0 & 0 & D_0(3) & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (1.54)$$

kde  $D_0(N)$  je SWM Hamiltonián s parametrem  $\gamma_3 = 0$  (viz. (1.51)) a  $D_1^+(N)$  je adjungovaná matice  $D_1(N)$  a matice  $D_1(N)$  obsahuje nenulový parametr  $\gamma_3$  v následujícím tvaru [6]:

$$D_1(N) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma_3 \Gamma \sqrt{\xi} \sqrt{N+2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.55)$$

## 2. PRAKTICKÁ ČÁST

### 2.1 Simulace elektronických vlastností grafitu

V rámci této diplomové práce bylo provedeno několik simulací základních elektronických vlastností grafitu. Simulace byly provedeny v programu MATLAB za použití SWM modelu popsaného v teoretické části této práce. Simulace umožňují vizualizaci vlastností grafitu, což poskytuje lepší představu o tom, jaké fenomény se odehrávají v grafitu při jeho měření spektrometrem.

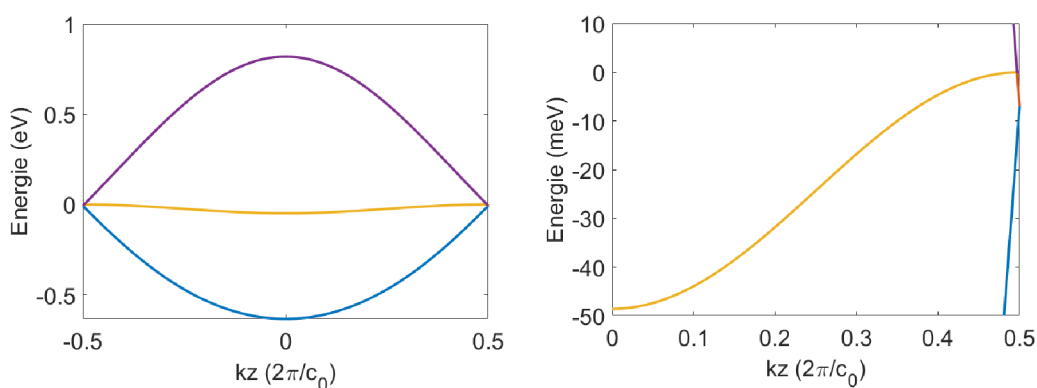
#### 2.1.1 Simulace pásové struktury

Pro výpočet pásové struktury byl použit SWM model bez přítomnosti magnetického pole. Zdrojový kód výpočtu je k nalezení v příloze Příloha 1 -. Princip výpočtu spočívá nejprve ve stanovení souřadnic odpovídajících vlnovým vektorům v rámci Brillouinovy zóny, které chceme počítat. Jak bylo již dříve vysvětleno, Brillouinova zóna grafitu se vyznačuje symetrií, kdy se nejvýznamnější struktury z hlediska elektronických vlastností grafitu objevují podél hrany tvořené body H-K-H (viz. Obrázek 6). Současně vzhledem k tomu, že se Brillouinova zóna opakuje napříč celou strukturou grafitu, následující výpočty popisují pásovou strukturu v okolí těchto bodů v rámci celé krystalové mřížky grafitu.

Po stanovení zkoumaných souřadnic ve zdrojovém kódu byla určena hladina, pro níž budou numericky vypočteny vlastní čísla SWM Hamiltoniánu, které odpovídají hodnotám energie v elektronvoltech. Tato energie byla poté vynesena do grafu v závislosti na souřadnicích, pro které byla vypočtena. Vzhledem k tomu, že tyto souřadnice odpovídaly vlnovým vektorům, bylo nejdříve nutné provést jejich normalizaci za užití vztahu  $2\pi/c_0$ , kde  $c_0$  odpovídá vzdálenosti jednotlivých grafitových vrstev, tedy 0,335 nm. Pro získání reálné velikosti vlnových vektorů ze souřadnic v grafu je nutné vynásobit jejich hodnotu tímto vztahem.

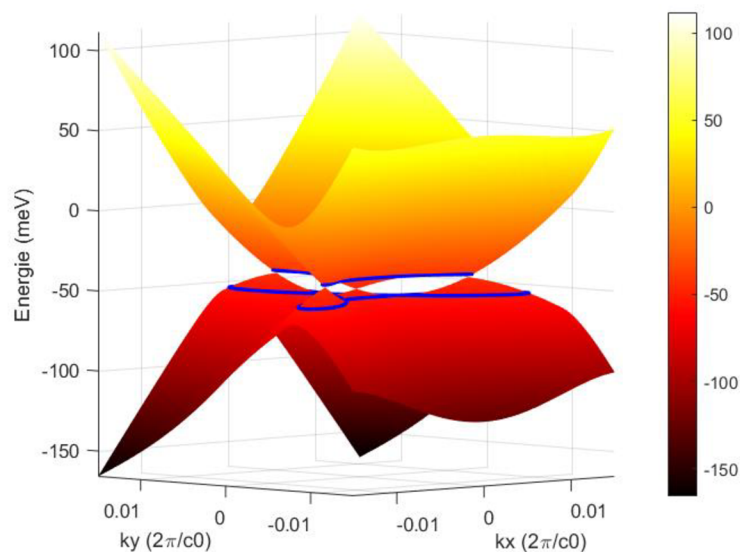
První provedená simulace (viz. Obrázek 12 vlevo) zkoumala pásovou strukturu grafitu podél osy  $k_z$  na hraně Brillouinovy zóny. Zobrazuje velikost energie v jednotkách eV v závislosti na poloze v této hraně. Jedná se tedy o pásovou strukturu od bodu H ( $k_z = -0,5$ ) na spodní straně Brillouinovy zóny, přes bod K ( $k_z = 0$ ) uprostřed, po bod H ( $k_z = 0,5$ ) na horní straně Brillouinovy zóny. Souřadnice  $k_x$  a  $k_y$  byly v tomto případě rovny nule. Z grafu je patrné, že pásová struktura grafitu je skutečně symetrická kolem bodu K. Simulace měla za úkol vypočítat energie 4 různých pásů, jak je však z grafu patrné, 2. a 3. pás (označená žlutou čarou) je však bez přítomnosti magnetického pole degenerovaný, tzn. nabývá stejné energie a pásy se tedy překrývají. Současně vzhledem k nižší strmosti těchto degenerovaných pásů v porovnání s 1. pásem (modrá čára) a 4. pásem (fialová čára) je možné vyvodit, že hustota stavů bude pro 2. a 3. pás

výrazně vyšší, tedy celkově jsou tyto degenerované pásy významnější pro další zkoumání. Fermiho energie v případě tohoto výpočtu je okolo -24 meV. Z tohoto důvodu byla provedena druhá simulace (viz. Obrázek 12 vpravo), kde je zobrazen detail těchto dvou degenerovaných pásů. Protože bylo předchozí simulací dokázáno, že je struktura symetrická kolem bodu K, graf zobrazuje závislost energie v jednotkách meV na poloze podél osy  $k_z$  v Brillouinově zóně pouze mezi body K ( $k_z = 0$ ) a H ( $k_z = 0,5$ ).



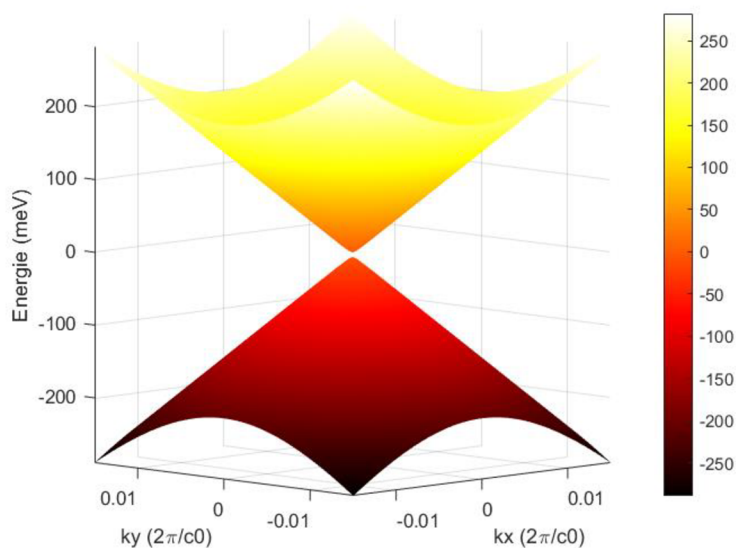
**Obrázek 12 – Pásová struktura grafitu podél osy  $k_z$ .**

Třetí provedená simulace (viz. Obrázek 13) zkoumala pásovou strukturu grafitu v okolí bodu K ( $k_z = 0$ ) pro 2. a 3. pás energie. Na vertikální ose je vynesena energie v jednotkách meV v závislosti na souřadnicích  $k_x$  a  $k_y$ , které se mění od -0,015 do 0,015. Tento omezený rozsah  $k_x$  a  $k_y$  souřadnic byl vybrán z toho důvodu, aby byly na výsledném grafu dobře viditelný sedlový průběh pásové struktury. Tato oblast se nazývá Lifshitzovým přechodem a v grafu je znázorněna modrou linií protínající body tohoto sedlového průběhu. V oblasti mezi dvojicí těchto modrých linií dochází ke tvorbě čtyř nespojitých ekvipotenciálních čar. Současně se oba pásy dotýkají v jednom centrálním bodě o souřadnicích  $k_x$  a  $k_y = 0$  a v dalších třech bodech s trigonální symetrií. Fakt, že jeden z těchto kontaktních bodů leží na souřadnicích  $k_x$  a  $k_y = 0$ , zároveň podporuje poznatek z předchozích simulací, že mezi 2. a 3. pásem dochází na těchto souřadnicích k jejich degeneraci. Současně je z grafu patrná trigonální symetrie pásové struktury grafitu okolo osy  $k_z$ .



**Obrázek 13 – Pásová struktura grafitu v bodu K.**

Poslední provedená simulace pásové struktury grafitu (viz. Obrázek 14) zobrazuje jeho pásovou strukturu v okolí bodu H ( $k_z = 0,5$ ) mezi 2. a 3. pásem. Na vertikální ose je opět vynesena energie v jednotkách meV v závislosti na  $k_x$  a  $k_y$  souřadnicích v rozsahu  $-0,015$  až  $0,015$ . Jak bylo dokázáno dříve, vzhledem k symetrii pásové struktury okolo bodu K podél osy  $k_z$  je tato pásová struktura identická ve všech vrcholech Brillouinovy zóny. Z obrázku je patrné, že pásová struktura v okolí tohoto bodu již není trigonálně symetrická, jak tomu bylo v případě pásové struktury v okolí bodu K, ale jedná se o kruhové dráhy.



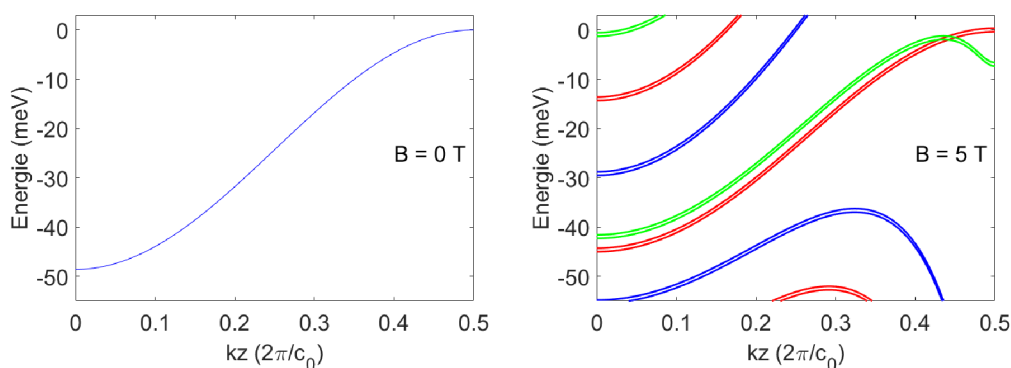
**Obrázek 14 – Pásová struktura grafitu v bodu H.**

## 2.1.2 Simulace Landauových hladin

Další provedená simulace zobrazuje kvantizaci energetických pásů v důsledku aplikace magnetického pole při výpočtu, což se projeví vytvořením Landauových hladin. Zdrojový kód pro provedení této simulace byl převzat z práce „Electronic properties of graphite“ od Johannese M. Schneidera, kde je k nalezení v příloze A.3 [6]. Simulace je opět založena na SWM modelu, tentokrát však byl započítán vliv magnetického pole. Po opětovném stanovení souřadnic odpovídajících vlnovým vektorům a jejich normalizaci vztahem  $2\pi/c_0$  byl vypočítán SWM Hamiltonián, jehož vlastní čísla odpovídají hodnotám energie v elektronvoltech. Tyto hodnoty byly opět vyneseny do grafu v závislosti na souřadnicích, kterým náleží. Navzdory tomu, že SWM model v magnetickém poli používá při výpočtu matice nekonečného rozměru, byl numerický výpočet proveden pouze pro matici  $600 \times 600$ , což zajišťuje dostatečné rozlišení výsledných simulací.

První provedená simulace Landauových hladin grafitu (viz. Obrázek 15 vlevo) zobrazuje hodnoty energie v jednotkách meV energetického pásu mezi body K ( $k_z = 0$ ) a H ( $k_z = 0,5$ ), opět při absenci magnetického pole ( $B = 0$ ). Z grafu je patrné, že simulace energetického pásu za užití SWM modelu, který započítává vliv magnetického pole, je identická s dříve provedenou simulací tohoto energetického pásu (viz. Obrázek 12 vpravo). Oba způsoby simulace tedy produkují vzájemně konzistentní výsledky.

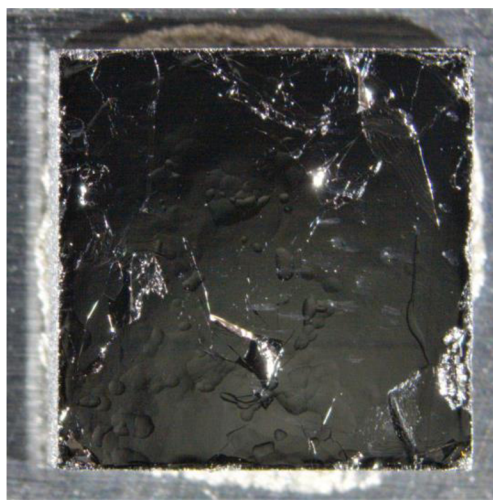
Druhá simulace Landauových hladin grafitu (viz. Obrázek 15 vpravo) zobrazuje rozštěpení energetického pásu na jednotlivé Landauovy hladiny. Na vertikální ose je opět vynesena hodnota energie těchto hladin v jednotkách meV mezi body K ( $k_z = 0$ ) a H ( $k_z = 0,5$ ). Nyní je však při výpočtech aplikováno magnetické pole o velikosti  $B = 5$  T. To způsobuje dříve zmíněnou kvantizaci energetického pásu. Elektrony mají možnost přecházet mezi dvojicí Landauových hladin, a to tak, aby bylo dodrženo dříve zmíněné dipólové výběrové pravidlo ( $|n| - |m| = \pm 1$ ). K přechodu dojde v případě, kdy je elektronu poskytnuta energie odpovídající rozdílu energií mezi dvojicí Landauových hladin splňující toto výběrové pravidlo. Tato energie je v například v případě spektrometru dodána mikrovlňným zářením. Za povšimnutí dále stojí rozštěpení každé Landauovy hladiny na dvojici hladin, které mají takřka identický průběh. Toto rozštěpení je dáno spinem elektronu a je vysvětleno dříve popsáním Zeemanovým jevem.



**Obrázek 15 – Landauovy hladiny grafitu mezi body K-H při  $B = 0$  a  $B = 5$  T.**

## 2.2 Příprava vzorků grafitu pro měření

Pro samotné laboratorní měření bylo nutné připravit vzorky grafitu o tloušťce několika mikrometrů. K tomuto účelu byl nejprve použit vysoce uspořádaný pyrolytický grafit, (anglicky Highly oriented pyrolytic graphite, zkráceně HOPG) který se běžně používá pro kalibraci řádkovacích tunelových mikroskopů. Námí použitý vzorek HOPG byl syntetického původu, dodaný firmou Bruker, který je pod mikroskopem zobrazený na následujícím obrázku:

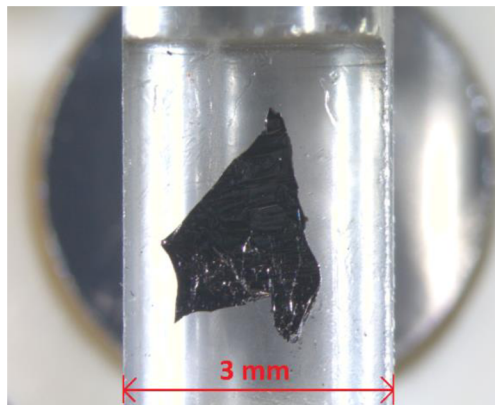


**Obrázek 16 – Vysoce uspořádaný pyrolytický grafit.**

Vzhledem k nutnosti separace pouze malého vzorku grafitu bylo použito modré lepicí pásky s přesně definovanou adhezí od firmy Microvolt, která se běžně používá při řezání polovodičových waferů. Přesně daná adheze je nutná pro rovnoměrné přilepení pásky ke vzorku HOPG. Poté byla páska odtrhnuta, čímž došlo k separaci námí požadovaného vzorku grafitu o tloušťce pár mikronů ze vzorku HOPG. V následujícím kroku byla připravena tyčinka ze safíru o průměru 3 mm, která je kompatibilní s rotačním držákem uvnitř HFEPR spektrometru. Na ní byla za pomoci pečlivě očištěné jehly nanесena tenká vrstva maziva, které plní funkci adheziva mezi tyčinkou a vzorkem grafitu. Mazivo

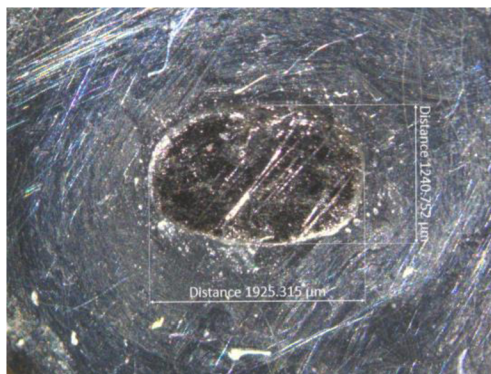


značky Apiezon, které bylo použito, se vyznačuje svou schopností adheze i při velmi nízkých teplotách a ve vakuu. Následně byl separovaný vzorek HOPG jemně přenesen z modré pásky na tyčinku za pomoci pinzety, tak, aby nedošlo k jeho poškození. Připravený vzorek HOPG o rozměrech zhruba 1,75 x 2,75 mm na tyčince z křemenného skla je pod mikroskopem zobrazen na následujícím obrázku:



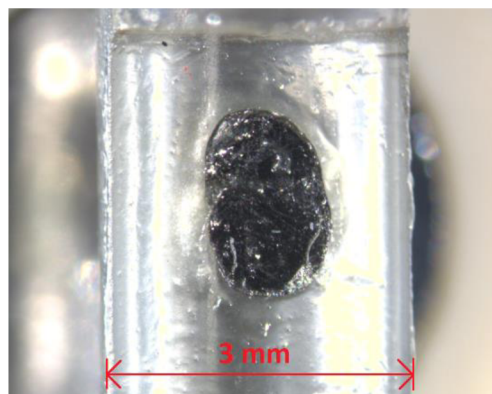
**Obrázek 17 – Vzorek HOPG pro měření.**

Jako druhý vzorek pro laboratorní měření byl vybrán přírodní grafit původem z Bulharska, který na základě předchozích zkušeností členů výzkumné skupiny MOTeS poskytuje kvalitní výstupní signál měření vhodný pro další analýzu. Na následujícím obrázku je zobrazen vybraný kus přírodního grafitu ležícího na křemíkovém zrcátku pod mikroskopem:



**Obrázek 18 – Přírodní grafit.**

Stejně jako v případě HOPG byl následně vybraný vzorek přenesen na tyčinku z křemenného skla o průměru 3 mm kompatibilní s rotačním držákem. Na tyčinku byla opět aplikována tenká vrstva maziva Apiezon, které slouží jako adhezivní vrstva mezi tyčinkou a vzorkem. Připravený vzorek přírodního grafitu na tyčince z křemenného skla má rozměry zhruba 1,93 x 1,24 mm, je pod mikroskopem zobrazen na následujícím obrázku:



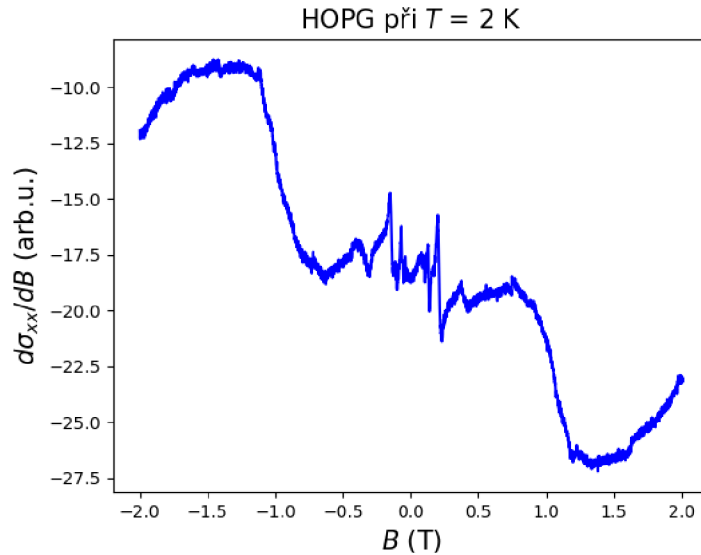
**Obrázek 19 – Vzorek přírodního grafitu pro měření.**

### **2.3 Analýza výsledků měření**

Pro analýzu získaných dat z měření byl vytvořen program v programovacím jazyce Python, který je k dispozici v příloze Příloha 1 -. Program byl vytvořen ve spolupráci s vědci z výzkumné skupiny MOTeS. Jeho spuštění vyžaduje množství souborů, které obsahují informace o pásové struktuře grafitu, a dále knihovny, které zajišťují pokročilé matematické a analytické operace (jako například SciPy, NumPy či peakdetect [53]). Tyto knihovny je možné najít v souborech přiložených k této diplomové práci. Program samotný umožňuje spuštění množství samostatných analytických a simulačních funkcí, jejichž výběr probíhá v první části kódu. Pro použití funkcí umožňujících analýzu měření je samozřejmě dále nutné mít k dispozici data z měření, která jsou opět k dispozici mezi soubory přiloženými k této diplomové práci.

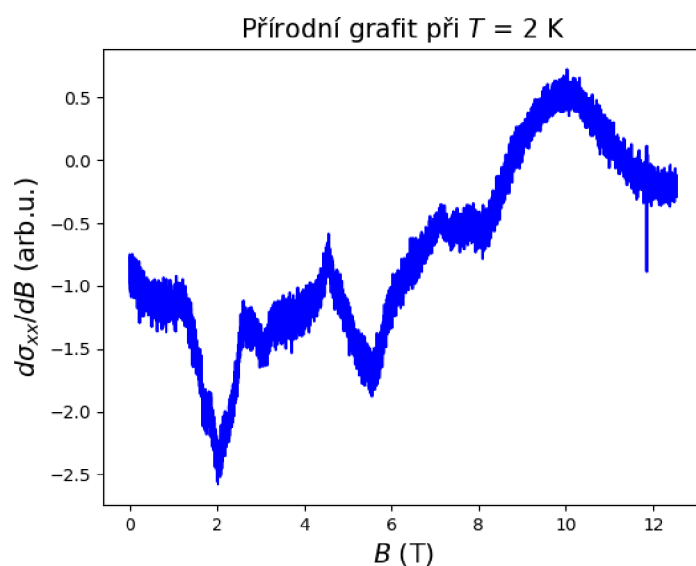
Prvním měřeným vzorkem byl HOPG, jehož příprava byla popsána v předchozí kapitole. Při měření bylo použito HFEPR spektrometru nacházejícího se v laboratoři EPR spektroskopie CEITEC VUT. V průběhu měření byl vzorek chlazen na teplotu okolo 2 K. Bylo provedeno velké množství měření v rozsahu od 280 GHz po 370 GHz, se snahou najít nejvhodnější frekvenci záření, která poskytne největší odezvu vzorku na toto záření. Pro různá měření bylo používáno různě velké magnetické pole (cca od 0 T do 3 T) se snahou získat co nejlepší data k následné analýze. Při měření bylo zjištěno, že v průběhu měření dochází k zahřívání měřeného vzorku rychlými změnami magnetického pole modulační cívky, což má nežádoucí vliv na výsledek měření, které je velice citlivé na teplotní výkyvy. Současně žádný soubor výsledných dat neposkytoval dostatečný odstup signálu od šumu, což pravděpodobně zapříčiňoval samotný vzorek. Po důkladném prozkoumání vzorku pod mikroskopem se ukazuje jako nejpravděpodobnější vysvětlení tohoto neúspěchu fakt, že jednotlivé roviny v rámci exfoliovaného vzorku HOPG nemají stejnou prostorovou orientaci. Přispívá k tomu i fakt, že exfoliovaný vzorek je velice tenký, a tedy velice náchylný na mechanické poškození. Z toho důvodu je obdržený signál z měření kombinací signálů odpovídajících jednotlivým rovinám ve vzorku, což způsobuje dříve zmíněný nízký odstup šumu od signálu. Díky kombinaci

těchto nepříznivých faktorů se ze všech měření nepodařilo získat ani jeden použitelný soubor dat, v kterém by se vyskytovalo větší množství harmonických složek cyklotronové rezonance nebo Shubnikových-de Haasových oscilací. Analýza získaných dat pro tento vzorek by tedy vedla k neprůkazným výsledkům. Výsledek měření vzorku HOPG je v následujícím grafu:



**Obrázek 20 – Výsledek měření vzorku HOPG.**

Vzhledem k tomu, že nebylo možné zajistit vzorek HOPG, u nějž by byla zaručena stejná orientace grafitových rovin, bylo rozhodnuto, že pro další měření bude použit namísto HOPG vzorek z přírodního grafitu původem z Bulharska, jehož příprava byla taktéž popsána v předchozí kapitole. Jako v případě vzorku HOPG bylo provedeno velké množství měření při teplotě okolo 2 K, s frekvencí mikrovlnného záření v rozsahu od 202 GHz do 435 GHz, opět ve snaze najít frekvenci, při níž by bylo dosaženo nejvyššího odstupů signálu od šumu. V případě tohoto měření bylo použito magnetické pole od cca 0 T po 13 T, tedy výsledek měření měl poskytnout dostatek dat pro analýzu jak cyklotronové rezonance, tak Shubnikových-de Haasových oscilací. V průběhu měření se však začalo vyskytovat množství technických problémů s měřicím zařízením, které měly nepříznivý vliv na výsledky měření. Tyto technické potíže následně zamezily dalšímu měření. Jednalo se zejména o nedostatečnou teplotní stabilitu v oblasti měřeného vzorku a o nedostatečné těsnění této oblasti, což bránilo vytvoření a udržení stabilního vakua nutného pro měření. Z těchto důvodů byla všechna data z měření vzorku přírodního grafitu vyhodnocena jako nepoužitelná pro analýzu, stejně jako tomu bylo v případě dat z měření vzorku HOPG. Výsledek měření vzorku přírodního grafitu je v zobrazen v grafu níže:



**Obrázek 21 – Výsledek měření vzorku přírodního grafitu.**

Vzhledem k předchozím neúspěchům a k nemožnosti nadále využívat HFEPR spektrometru pro další měření bylo konzultanty diplomové práce rozhodnuto, že pro analýzu měření v rámci této diplomové práce bude užito již dříve získaných dat z měření. Jedná se o tři série dat, kdy první byla získána měřením totožného vzorku přírodního grafitu z Bulharska. Tato data byla získána členem výzkumné skupiny MOTeS Ing. Antonínem Sojkou za užití HFEPR spektrometru z laboratoře EPR spektroskopie CEITEC VUT, a to při frekvenci mikrovlnného záření  $f = 210$  GHz a teplotě vzorku  $T = 5$  K při magnetickém poli  $B$  od  $-2$  T do  $2$  T. Tato série dat byla použita pro nalezení důležitých parametrů měřeného vzorku a pro následné srovnání těchto dat s daty získanými simulací.

Druhá série dat pochází z měření přírodního vzorku grafitu v Laboratoři vysokého magnetického pole (zkráceně LNCMI) v Grenoblu. Měření bylo provedeno vedoucím vědecké skupiny doc. Petrem Neugebauerem, při frekvenci mikrovlnného záření  $f = 190$  GHz a teplotě  $T = 5$  K při magnetickém poli  $B$  od  $-0,6$  T do  $0,6$  T. Vzorkem bylo v průběhu měření rotováno, což umožňuje analyzovat závislost obdrženého signálu na orientaci magnetického pole vůči rovinám grafitu ve vzorku.

Třetí série dat pochází opět z měření provedených v Grenoblu doc. Petrem Neugebauerem, kdy vzorkem byl přírodní grafit. Tentokrát však bylo měření prováděno při frekvenci  $f = 285$  GHz při magnetickém poli  $B$  od  $0$  T až po  $11,4$  T a měření bylo prováděno opakovaně pro různé teploty, konkrétně pro  $T = 5$  K,  $7,5$  K a  $15$  K. Tato data obsahují Shubnikovovy-de Haasovy oscilace a umožňují jejich následnou analýzu.

### 2.3.1 Analýza cyklotronové rezonance

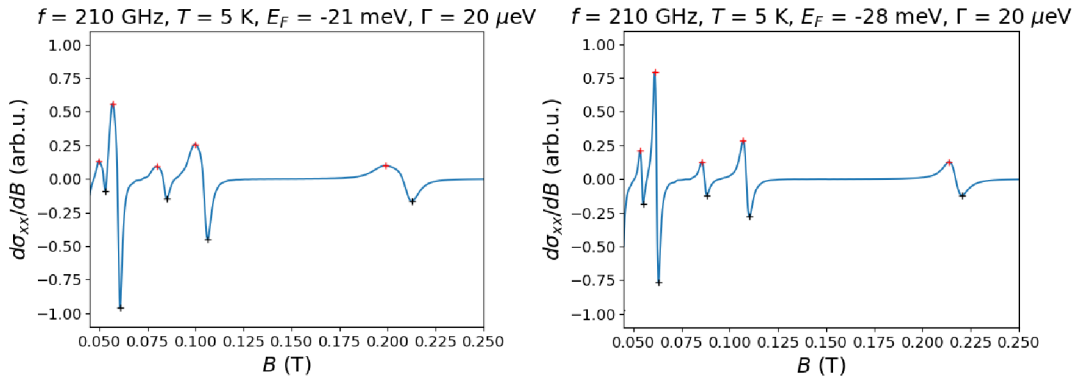
Jak již bylo řečeno v předchozí kapitole, pro analýzu dat z měření byl použit vytvořený program nacházející se v příloze Příloha 3 -. První funkcí tohoto programu je

simulace optické konduktivity grafitu a její derivace v závislosti na magnetickém poli. Vzhledem k tomu, že při laboratorním měření získáváme jako výslednou hodnotu právě derivaci optické konduktivity vzorku, umožňuje tato simulace cyklotronové rezonance v grafitu a následné srovnání získaných dat s používaným matematickým modelem pro výpočet cyklotronové rezonance [5]. Parametry simulace jsou teplota vzorku  $T$ , magnetické pole  $B$ , frekvence mikrovlnného záření  $f$ , Fermiho energie vzorku  $E_F$ , tzv. parametr rozšíření  $\Gamma$  a efektivní hmotnost nosičů náboje  $m^*$  ve vzorku. V průběhu měření je frekvence mikrovlnného záření a teplota vzorku známá a magnetické pole je rozmitáno, tedy je známým proměnným parametrem. Neznámými parametry jsou parametr rozšíření, efektivní hmotnost nosičů náboje a Fermiho energie vzorku. Základní odhad těchto neznámých parametrů je možné určit na základě literární rešerše [5]. Na základě tohoto prvotního odhadu je následně možné přesněji určit parametry simulace, která bude odpovídat datům získaným z laboratorního měření, což v důsledku umožňuje určit reálné hodnoty těchto parametrů pro měřený vzorek grafitu. Parametr rozšíření způsobuje zploštění spektrálních čar cyklotronové rezonance. Z fyzikálního hlediska je tento parametr závislý na těch vlastnostech vzorku, které způsobují rozptyl nosičů, tedy například na různých poruchách v krystalické struktuře grafitu. Je dán následujícím vztahem [5]:

$$\Gamma = \frac{\hbar}{\tau_B}, \quad (2.1)$$

kde  $\tau_B$  odpovídá charakteristickému času rozptylu nosičů (index  $B$  indikuje závislost na magnetickém poli). Prvotní odhad tohoto parametru určený na základě rešerše je  $\Gamma = 20 \mu\text{eV}$ , který je prozatím nezávislý na magnetickém poli. V případě efektivní hmotnosti nosičů náboje je nutné uvážit, zdali se jedná o elektrony nebo díry. Na základě literární rešerše bylo zjištěno, že se díry vyskytují v okolí bodu H v Brillouinově zóně grafitu [6] [54] [55]. V simulacích provedených v předchozí kapitole bylo ukázáno, že v okolí tohoto bodu je pásová struktura cylindricky symetrická (viz. Obrázek 14). V případě cyklotronové rezonance jsou z tohoto důvodu díry zodpovědné pouze za jeden vrchol. Všechny ostatní vrcholy cyklotronové rezonance jsou zapříčiněny elektrony, které se vyskytují v okolí bodu K v Brillouinově zóně grafitu, kde má pásová struktura trigonální symetrii, jak bylo opět demonstrováno simulacemi pásové struktury v okolí tohoto bodu (viz. Obrázek 13). Efektivní hmotnost nosičů náboje byla stanovena na základě literární rešerše na 0,06násobek hmotnosti elektronu (která činí  $9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$ ) [5]. Posledním neznámým parametrem tedy zůstává Fermiho energie grafitu. Fermiho energie v rámci simulací ovlivňuje polohu výskytu vrcholů harmonických složek cyklotronové rezonance v závislosti na magnetickém poli, a to tak, že při nižší Fermiho energii dojde k výskytu vrcholů cyklotronové rezonance ve vyšším magnetickém poli. Harmonické složky těchto oscilací jsou důsledkem trigonální symetrie pásové struktury v okolí bodu K a blízkostí Fermiho energie k Lifshitzovým přechodům. Současně tato energie ovlivňuje tvar vrcholů cyklotronové rezonance. Na základě předchozí rešerše byl

opět proveden odhad Fermiho energie. Ta by v případě grafitu měla být okolo hodnoty  $E_F = -25$  meV [5]. Následně byly provedeny dvě simulace, které ukazují vliv změny Fermiho energie na cyklotronovou rezonanci:



**Obrázek 22 – Simulace pro Fermiho energii o hodnotě -21 a -28 meV.**

Na grafech výše jsou vyobrazeny simulace pro Fermiho energii  $E_F = -21$  meV (vlevo) a  $E_F = -28$  meV (vpravo). Na ose y je vynesena normalizovaná derivace optické konduktivity, na ose x je vynesena velikost magnetického pole. Červenými křížky jsou označeny maxima derivace optické konduktivity a černými křížky naopak minima této derivace. Ze srovnání grafů je patrné, že snížení Fermiho energie o 7 meV způsobí viditelný posun vrcholů cyklotronové rezonance směrem doprava, tedy k vyššímu magnetickému poli.

Vhodným nastavením simulačního programu je dále možné sledovat přímou závislost optické konduktivity na magnetickém poli, nejen její derivaci. Zde je vhodné připomenout, že derivace optické konduktivity sleduje rychlost změny optické konduktivity. Skutečným vrcholům cyklotronové rezonance tedy odpovídají vrcholy optické konduktivity, nikoliv její derivace. V případě derivace optické konduktivity těmito vrcholům cyklotronové rezonance odpovídá bod, kdy signál překračuje nulovou hodnotu derivace optické konduktivity. Detekce tohoto bodu je však v případě reálných dat z měření značně obtížná z důvodu vysokého šumu při měření, což zamezuje jednoznačnému určení nulové hodnoty derivace optické konduktivity. Z tohoto důvodu je vhodnější používat pro analýzu dat vrcholy optické konduktivity. Vzhledem k tomu, že výstupem měření je vždy derivace optické konduktivity, je následně nutné numericky integrovat obdržená experimentální data. Tím nastává problém, kdy po integraci dochází vlivem integrační konstanty k značnému posunu dat ve směru osy y. Následná aproximace této konstanty a její odečtení způsobuje zkreslení výstupních dat.

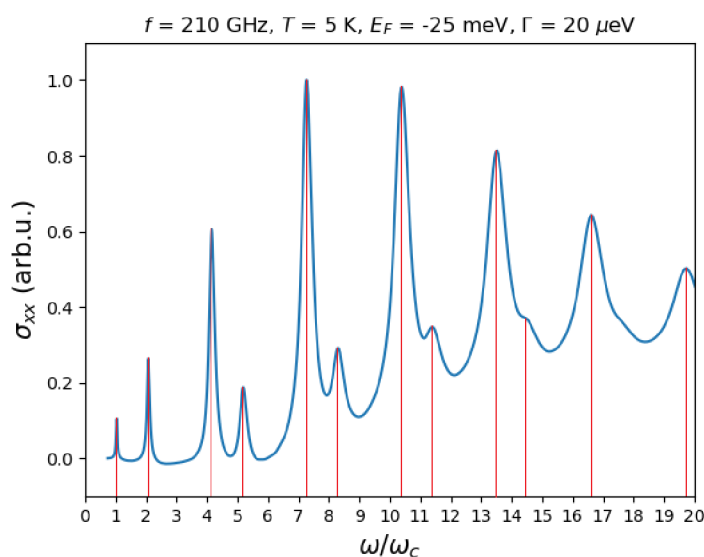
Simulační program dále umožňuje sledovat optickou konduktivitu a její derivaci v závislosti na  $\omega/\omega_c$ . V bodě, kdy  $\omega = \omega_c$ , přičemž  $\omega = 2\pi f$ , kde  $f$  odpovídá frekvenci mikrovlnného záření a  $\omega_c = eB/m^*$ , dochází k výskytu prvního vrcholu cyklotronové rezonance. Z fyzikálního hlediska lze toto chování interpretovat tak, že frekvence mikrovlnného záření odpovídá frekvenci periodického pohybu nosičů náboje. Z rovnice

(1.38) pro  $\omega_c$  je patrné, že  $\omega_c$  je závislá na efektivní hmotnosti nosiče náboje, tedy dostáváme různé vrcholy pro díry ( $m^* = 0,039m_e$ ) a pro elektrony ( $m^* = 0,06m_e$ ), kde  $m_e$  odpovídá hmotnosti volného elektronu [5]. Jak již bylo zmíněno dříve, vzhledem k tomu, že se díry vyskytují v okolí bodu H pásové struktury grafitu, které jsou kruhové, obdržíme pro díry pouze jediný vrchol cyklotronové rezonance. Naopak elektrony díky své trigonální symetrii, výskytu kolem bodu K a blízkosti Fermiho energie k Lifshitzovým přechodům musí splňovat pravidlo pro výskyt harmonických složek cyklotronové rezonance v následujícím tvaru [5]:

$$\omega = |3k \pm 1|\omega_c, \quad (2.2)$$

kde  $k$  nabývá hodnot v oboru celých čísel. Pro lepší ilustraci, po dosazení  $k = 0$  bychom měli najít v grafu závislosti optické konduktivity na  $\omega/\omega_c$  vrchol na pozici  $1\omega_c$  a  $-1\omega_c$ , pro  $k = 1$  na pozici  $2\omega_c$  a  $4\omega_c$ , pro  $k = 2$  na pozici  $5\omega_c$  a  $7\omega_c$  a tak dále.

Tento typ grafu na ose y vynáší optickou konduktivitu či její derivaci a na ose x vynáší pozici vrcholu v celých číslech. Tímto způsobem je možné ověřit pravidlo pro výskyt harmonických složek cyklotronové rezonance v grafitu uvedené ve vztahu (2.2). V případě simulace, kde bylo počítáno pouze s elektrony jako nosiči náboje, pak takový graf má následující podobu:

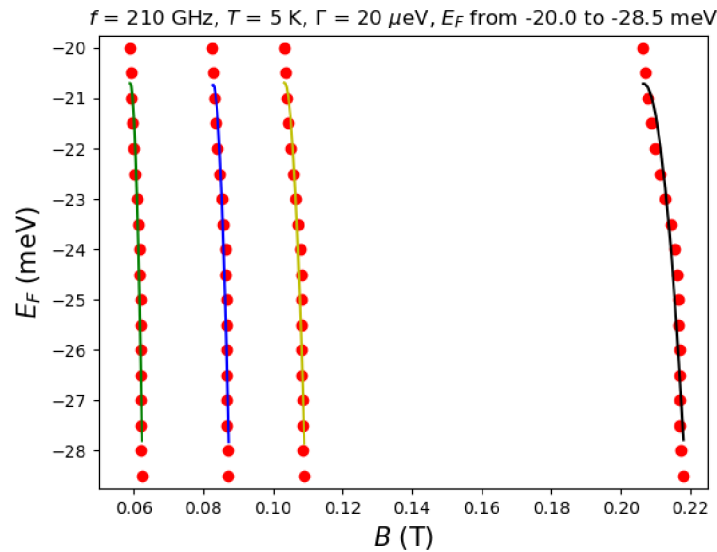


**Obrázek 23 – Harmonické oscilace cyklotronové rezonance.**

Z grafu je patrné, že se vrcholy harmonických složek cyklotronové rezonance vyskytují přibližně v bodech určených vztahem (2.2), ačkoliv u vyšších hodnot na ose x dochází k mírnému posunu výskytu vrcholu oscilace.

Další funkcí vytvořeného programu je možnost nalezení parametrů matematických funkcí, které popisují vývoj pozic vrcholů cyklotronové rezonance v závislosti na Fermiho energii. Princip spočívá v zaznamenání hodnot maxim optické konduktivity obdržených předchozími simulacemi v závislosti na magnetickém poli, a jejich následném vynesení do grafu, kdy je na ose x magnetické pole a na ose y Fermiho energie

získaných vrcholů. Výsledkem je následující graf zobrazující závislost pozice vrcholů optické konduktivity na magnetickém poli a Fermiho energii:



**Obrázek 24 – Závislost vrcholů cykl. rezonance na  $E_F$  od -20 do -28,5 meV.**

Obdržené body, které odpovídají zaznamenaným maximům optické konduktivity pro různé Fermiho energie, byly následně proloženy polynomem druhého řádu, čímž bylo zjištěno, že Fermiho energii pro první vrchol optické konduktivity lze určit výpočtem funkce (označena zelenou čarou):

$$E_F = -\left(643644 \frac{\text{meV}}{\text{T}^2}\right) B_V^2 + \left(75921 \frac{\text{meV}}{\text{T}}\right) B_V - (2259 \text{ meV}). \quad (2.3)$$

Funkce pro druhý vrchol (označena modrou čarou) má tvar:

$$E_F = -\left(359098 \frac{\text{meV}}{\text{T}^2}\right) B_V^2 + \left(59434 \frac{\text{meV}}{\text{T}}\right) B_V - (2480 \text{ meV}). \quad (2.4)$$

Funkce odpovídající třetímu vrcholu cyklotronové rezonance (žlutá čára) má tvar:

$$E_F = -\left(217589 \frac{\text{meV}}{\text{T}^2}\right) B_V^2 + \left(44937 \frac{\text{meV}}{\text{T}}\right) B_V - (2340 \text{ meV}). \quad (2.5)$$

A nakonec funkce pro čtvrtý vrchol cyklotronové rezonance (černá čára) má tvar:

$$E_F = -\left(54718 \frac{\text{meV}}{\text{T}^2}\right) B_V^2 + \left(22612 \frac{\text{meV}}{\text{T}}\right) B_V - (2356 \text{ meV}), \quad (2.6)$$

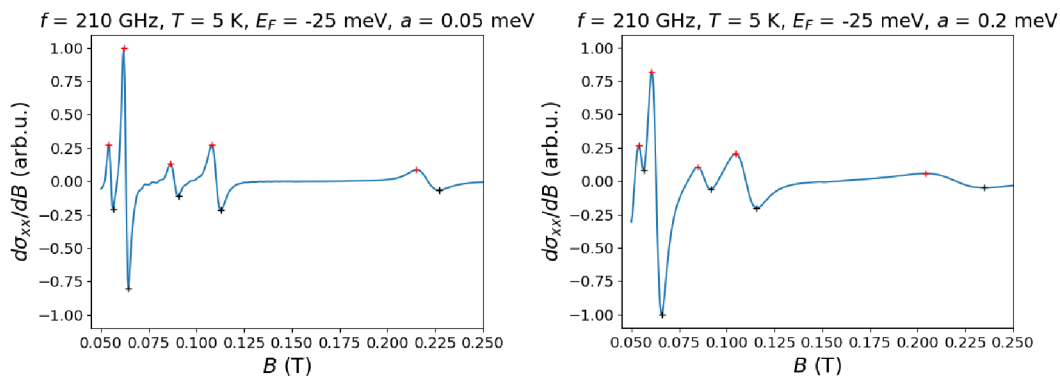
kde  $B_V$  odpovídá hodnotě magnetické indukce  $B$ , při které dosahuje cyklotronová rezonance maxima. Takto získané rovnice nám umožňují určit přibližnou hodnotu Fermiho energie měřeného vzorku grafitu. Je však nutné zmínit, že v případě získaných rovnic se jedná pouze o aproximaci funkce závislosti výskytu cyklotronové rezonance na Fermiho energii, ve skutečnosti tato závislost nemá tvar kvadratické funkce.

Prozatím byl v rámci simulací používán konstantní parametr  $\Gamma$ . Literární řešerši bylo ale zjištěno, že parametr  $\Gamma$  je ale ve skutečnosti závislý na odmocnině magnetického pole podle vztahu [5]:

$$\Gamma = a\sqrt{B}, \quad (2.7)$$



kde  $a$  je konstanta. Z tohoto důvodu je možné provést simulace pro několik hodnot parametru  $a$ , kdy bude sledován vliv tohoto parametru (tedy v důsledku i vliv parametru  $I$ ) na tvar vrcholů cyklotronové rezonance. Výsledek dvojice takových simulací je zobrazen na následujících grafech:

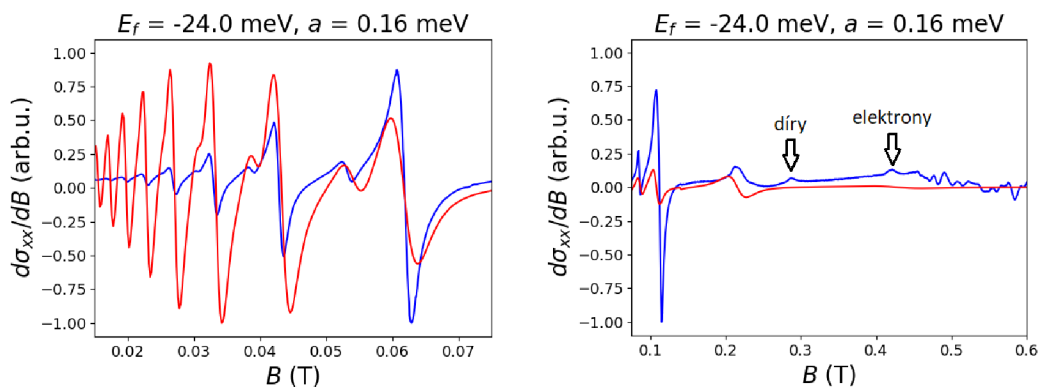


**Obrázek 25 – Závislost tvaru vrcholu cykl. rezonance na parametru  $I$ .**

V grafech je vynesena závislost derivace optické konduktivity na magnetickém poli pro jeden sledovaný vrchol. Je možné pozorovat, že zvýšení hodnoty parametru  $a$  vede ke znatelnému rozšíření jednotlivých vrcholů cyklotronové rezonance, což je obzvláště patrné při vyšším magnetickém poli. Pro simulaci v grafu vlevo byla použita hodnota parametru  $a = 0,05$  meV, pro simulaci v grafu vpravo pak hodnota  $a = 0,2$  meV. Vzhledem k tomu, že se jedná o derivaci, je možné zaznamenat maximální a minimální hodnotu této derivace a vypočítat z těchto hodnot rozšíření vrcholů cyklotronové rezonance způsobené změnou parametru  $a$ . Na základě této znalosti je dále možné určit vhodnou hodnotu parametru  $a$  tak, aby způsobené rozšíření vrcholů při vyšších hodnotách magnetického pole odpovídalo rozšíření vrcholů pozorovanému při laboratorním měření.

Program pro analýzu měření dále umožňuje porovnání naměřených dat s provedenou simulací. Jako naměřená data byla použita dříve získaná data z měření provedeným Ing. Antonínem Sojkou. Prováděné simulace reflektovaly parametry měření použité v průběhu experimentu. Vzhledem k tomu, že každé měření má drobný posun dat ve směru magnetického pole vůči nulové hodnotě, bylo nejprve nutné kompenzovat tento posun. Obdržené vrcholy cyklotronové rezonance totiž mají být symetrické okolo  $B = 0$  T, tedy jednotlivé vrcholy se mají vyskytovat na stejných hodnotách magnetického pole při obou orientacích tohoto pole. Proto byla v prvním kroku určena pozice dvou vrcholů z opačných orientací magnetického pole, které odpovídaly stejné cyklotronové rezonanci, a z nich byla vypočtena hodnota posunu naměřených dat vůči  $B = 0$  T. Současně díky této symetrii dat okolo nulové hodnoty magnetického pole bylo rozhodnuto, že pro usnadnění analýzy bude využíváno pouze kladných hodnot magnetického pole. Po této korekci posunu dat byly určeny pozice vrcholů cyklotronové rezonance odpovídajících vrcholům sledovaným v předchozích simulacích a za

užití rovnic (2.3) až (2.6) byla vypočtena Fermiho energie měřeného vzorku na hodnotu cca -24 meV. Poté byl pro určení konstanty  $a$  a použité při výpočtu proměnného parametru  $\Gamma$  analyzován vrchol cyklotronové rezonance, který odpovídal vrcholu pozorovaném v předcházejících simulacích vlivu tohoto parametru na tvar vrcholu. Z výsledků bylo určeno, že pro následující simulaci bude použita hodnota konstanty  $a = 0,16$  meV. Následně byla provedena simulace pro vypočtenou hodnotu Fermiho energie spolu s parametrem  $a$  a výsledek simulace byl zobrazen současně s reálnými hodnotami získanými z měření přírodního grafitu. Výsledek překrytí dat je v následujících grafech, kdy pro lepší přehlednost výsledků je v grafu vlevo vynesena část magnetického pole od 0,015 T do 0,075 T a v grafu vpravo je vynesena část magnetického pole od 0,075 T do 0,6 T:

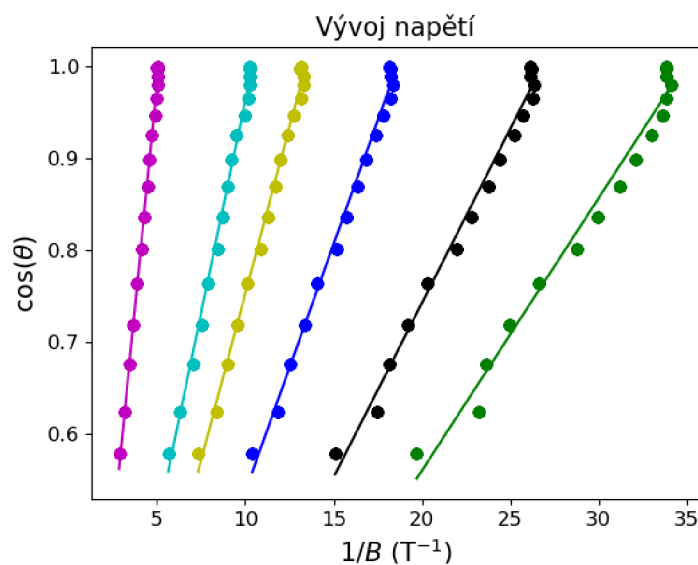


**Obrázek 26 – Překrytí dat získaných měřením a simulací.**

V grafech jsou data získaná měřením zobrazena modrou čarou a data obdržená simulací jsou zobrazena červenou čarou. Na ose x je vynášeno magnetické pole a na ose y je derivace optické konduktivity v pomocných jednotkách. Z grafů je vidět, že se jednotlivé vrcholy cyklotronové rezonance překrývají. Je ale také patrné, že velikost derivace optické konduktivity je ve většině případů mnohem vyšší v simulovaných datech než v datech získaných měřením. Pro získání lepších výsledků by bylo pravděpodobně nutné upravit parametry  $\gamma_0$ - $\gamma_6$  v rámci používaného SWM modelu. To však nebylo cílem této analýzy, neboť by bylo pro její provedení příliš mnoho neznámých parametrů. Co se týče oscilací, které se vyskytují okolo magnetického pole  $B = 0,5$  T a výše, v tomto případě se již nejedná o cyklotronovou rezonanci, ale o Shubnikovovy-de Haasovy oscilace, tudíž nejsou významné pro analýzu prováděnou v první části této práce. V rámci analýzy byly dále vypočteny teoretické pozice prvního vrcholu cyklotronové rezonance pro elektrony i díry. Za užití prvotního odhadu efektivní hmotnosti obou typů nosičů získaného na základě teoretické rešerše a dříve zmíněného vztahu  $\omega = \omega_c$  bylo vypočteno, že se první vrchol cyklotronové rezonance pro elektrony vyskytuje cca při  $B = 0,45$  T a pro díry cca při  $B = 0,29$  T. Následně byly v datech z měření nalezeny vrcholy v této oblasti magnetických polí, jejich pozice je vyznačena v grafu vpravo šipkami. Zde stojí za zmínku fakt, že vrchol odpovídající dírám v měřených datech neodpovídá žádnému

vrcholu v simulovaných datech, což znamená, že tento vrchol skutečně náleží dírám v okolí bodu H Brillouinovy zóny. Vrchol odpovídající elektronům v měřených datech odpovídá malému zvlnění v simulovaných datech při stejné velikosti magnetického pole. Na základě znalosti reálné pozice těchto vrcholů v rámci naměřených dat byla určena přesnější hodnota efektivní hmotnosti nosičů náboje pro měřený vzorek grafitu. V případě děr je tato hodnota  $m^* = (0,038 \pm 0,001)m_e$ , v případě elektronů pak  $m^* = (0,057 \pm 0,002)m_e$ .

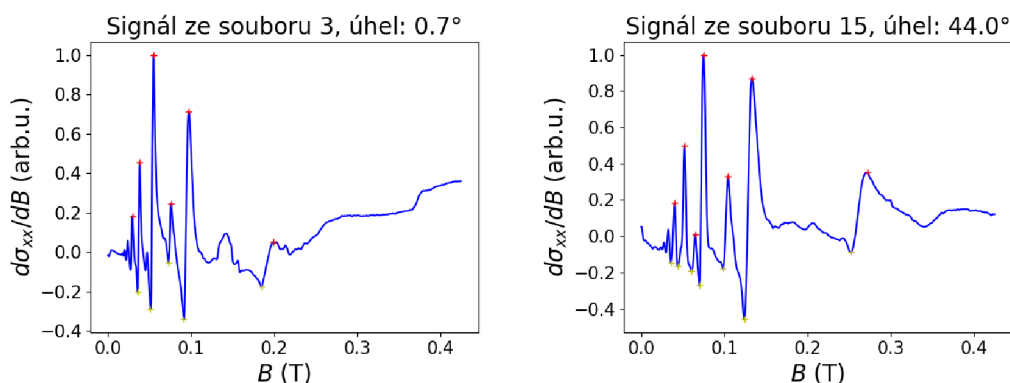
Dalším cílem diplomové práce byla analýza měření vzorku grafitu pro různé orientace v magnetickém poli. Pro tuto analýzu bylo užito dat naměřených doc. Petrem Neugebauerem. Vzorkem bylo v průběhu měření rotováno od cca  $-6,5^\circ$  do  $69^\circ$  kdy orientace  $0^\circ$  odpovídá stavu, ve kterém byly roviny grafitu v kolmé poloze vůči orientaci magnetického pole, a tedy magnetické pole bylo orientováno paralelně vůči ose c v rámci krystalické struktury grafitu. Stejně jako v případě předchozí analýzy Fermiho energie bylo nutné nejprve vykompenzovat mírný posun měřených dat vůči magnetickému poli, což bylo provedeno vypočítáním jednotlivých posunů vrcholů pro každý soubor dat z měření. Protože jsou výsledky měření opět symetrické kolem bodu  $B = 0$  T, při analýze byla věnována pozornost opět pouze cyklotronové rezonanci v kladných hodnotách magnetického pole. Dále bylo nutné určit přesnou orientaci grafitu v různých měřeních, kdy bylo v průběhu měření zaznamenáváno pouze napětí odpovídající natočení rotačního držáku vzorku v spektrometru. Vycházelo se přitom ze znalosti, že změna tohoto napětí o 5 V odpovídá rotaci vzorku o  $360^\circ$ . Po přepočtu napětí na úhel bylo nutné najít výchozí orientaci vzorku odpovídající  $0^\circ$ . Toho bylo docíleno tak, že byly do grafu vyneseny pozice jednotlivých vrcholů cyklotronové rezonance v závislosti na kosinu úhlu na ose y a  $1/B$  na ose x:



**Obrázek 27 – Závislost pozice vrcholů cykl. rezonance na kosinu úhlu a převrácené hodnotě magnetického pole.**

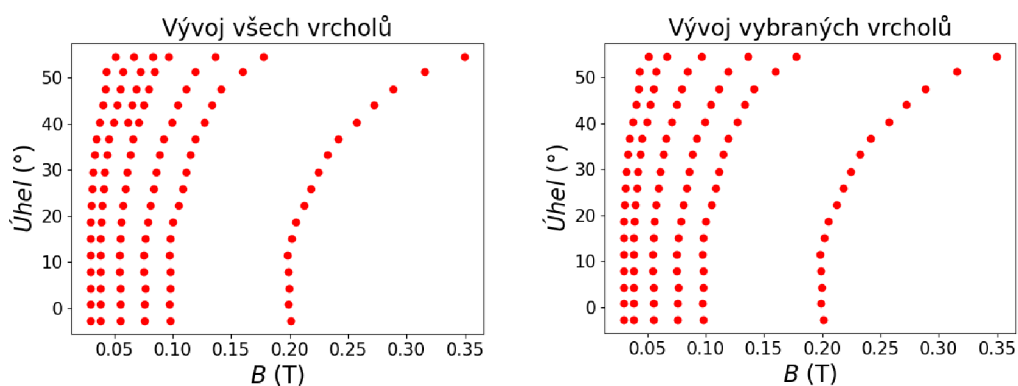
V grafu odpovídá každá z použitých barev stejnému vrcholu cyklotronové rezonance v různých měřeních pro různé úhly. Tyto vrcholy byly následně proloženy lineární funkcí  $y = ax + b$ . Protože koeficient  $a$  odpovídající směrnici přímky reprezentuje kolmou složku magnetického pole, koeficient  $b$  pak reprezentuje posun těchto dat. Tento posun ale musí být nulový. Proto byla následně sledována suma koeficientu  $b$  v této rovnici pro všechny obdržené lineární funkce za současného měření hledané hodnoty výchozího úhlu. Výchozí úhel byl nalezen tak, že tato suma koeficientu  $b$  byla co nejbližší hodnotě 0.

Takto upravená data umožňují po vhodném nastavení vytvořeného programu sledovat závislost pozice vrcholů cyklotronové rezonance na orientaci vůči magnetickému poli. Natočení vzorku od roviny kolmé k magnetickému poli způsobí posun vrcholů směrem k vyššímu magnetickému poli. Současně je možné sledovat, že při vyšším odklonu vzorku od této výchozí roviny dochází k mírnému rozšíření vrcholů cyklotronové rezonance a dochází k tomu, že některé vrcholy nabývají vyšší hodnoty signálu. Toto zvyšování hodnoty signálu pro vyšší úhly je však patrně pouhým artefaktem měření, protože se nepodařilo nalézt žádný fyzikální fenomén, který by tento jev objasňoval. Tato situace je ilustrovaná v následujících grafech:



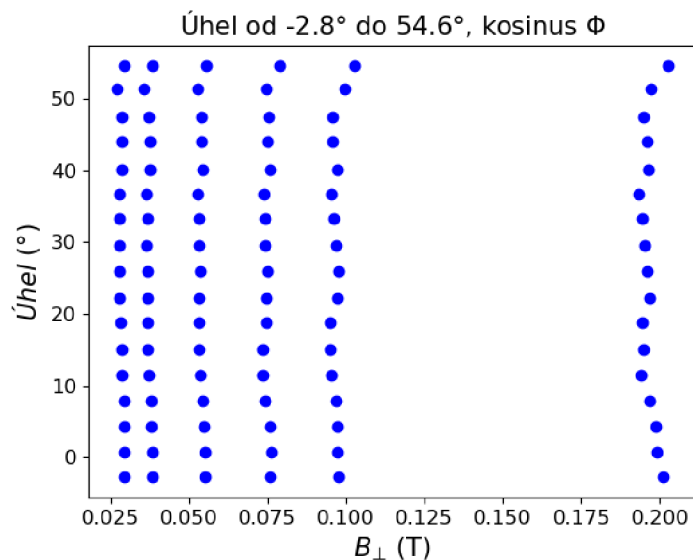
**Obrázek 28 – Obdržený signál pro rotaci vzorku o 0,7° a 44°.**

V grafech výše je vynesena normalizovaná derivace optické konduktivity vůči magnetickému poli pro rotaci vzorku 0,7° (vlevo) a 44° (vpravo). Ze srovnání grafů je patrné, že rotace od kolmé roviny způsobí znatelný posun vrcholů cyklotronové rezonance (vyznačeny červenými křížky) směrem vpravo k vyššímu magnetickému poli. Zároveň je vidět mírné rozšíření vrcholů (je však nutné mít na paměti, že se jedná o derivaci optické konduktivity, tedy v případě ilustrovaném v grafu odpovídá rozšíření vrcholů derivace optické konduktivity snížení strmosti vrcholů optické konduktivity). Dále je vidět detekce dalšího vrcholu (třetí vrchol zleva v grafu vpravo), který je však přítomen i v grafu vlevo, avšak s výrazně menší amplitudou. Z takto získaných dat je možné vytvořit graf závislosti pozice vrcholů na úhlu a magnetickém poli v následujících grafech:



**Obrázek 29 – Úhlová závislost pozice vrcholů cykl. rezonance.**

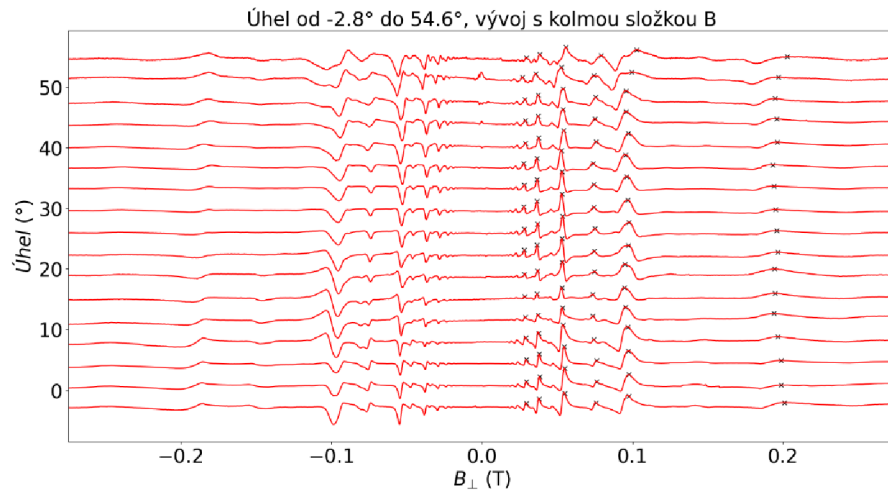
Graf vlevo zobrazuje vývoj zaznamenaných vrcholů, včetně výskytu nových vrcholů v oblasti vyššího úhlu (od cca 40°) sklonu vzorku. Pro následující krok analýzy dat byly vybrány pouze vrcholy zobrazené v grafu vpravo, kde jsou zaznamenány pouze ty vrcholy, které se vyskytují ve všech datech z měření. V dalším kroku byly pozice vrcholů vynásobeny kosinem odpovídajícího úhlu, čímž je získána složka magnetického pole kolmá vůči grafitovým rovinám. Tato kolmá složka určena vztahem  $B_{\perp} = B \cos \phi$ , kde  $\phi$  odpovídá úhlu mezi  $B$  a osou  $c$  v rámci struktury grafitu, je vynesena na horizontální ose grafu. Tato složka magnetického pole je zodpovědná za výskyt cyklotronové rezonance. Výsledkem je následující graf:



**Obrázek 30 – Závislost pozice vrcholů cykl. rezonance na kolmé složce magnetického pole.**

Z grafu jde vidět, že pozice vrcholů není nadále závislá na úhlu, ale je konstantní s kolmou složkou magnetického pole. Tato analýza tedy potvrzuje, že v případě grafitu se jedná o kvazi 2D systém s vysokou anizotropií struktury, což odpovídá teorii o vnitřní struktuře grafitu, kde dochází pouze k minimálnímu přenosu nosičů náboje mezi

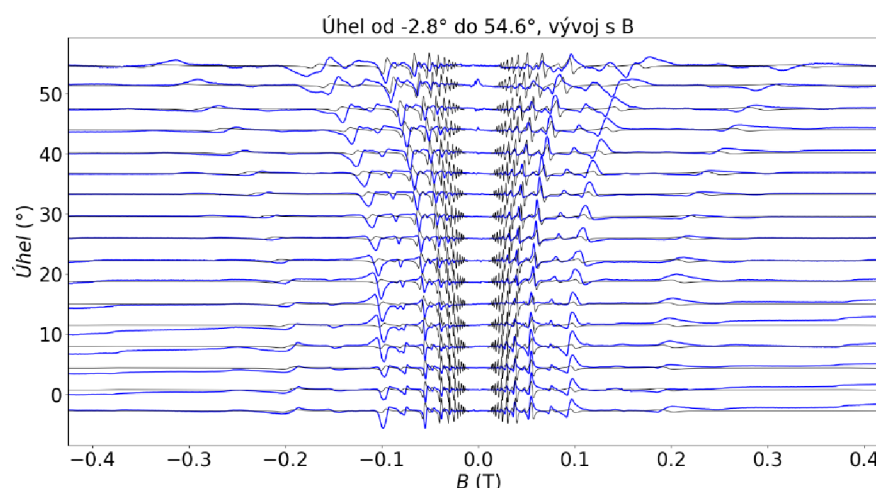
jednotlivými rovinnými bázemi uhlíku. Pro názornější ukázkou vývoje vrcholů s kolmou složkou magnetického pole byl vytvořen následující graf:



**Obrázek 31 – Srovnání dat získaných z měření pro různé úhly v závislosti na  $B_{\perp}$ .**

V grafu je vynesena úhlová závislost měřených dat, přesněji jejich derivace optické konduktivity na ose y v závislosti na kolmé složce magnetického pole na ose x. Černými křížky jsou vyznačeny dříve sledované vrcholy cyklotronové rezonance. Z grafu je patrné, že vrcholy cyklotronové rezonance jsou nyní zarovnané vertikálně nad sebou, uvažuje-li se pouze kolmá složka magnetického pole. Za zmínku ovšem stojí fakt, že s vyšším úhlem dochází k viditelnému rozšíření jednotlivých vrcholů cyklotronové rezonance. Vzhledem k tomu, že v tomto kroku analýzy byl odstraněn vliv kolmé složky magnetického pole na tvar vrcholů, všechny ostatní pozorovatelné změny v naměřených datech musejí být zapříčiněny planární složkou magnetického pole. Je tomu tak i v případě tohoto mírného rozšíření vrcholů. Současně tento graf názorně demonstruje již dříve zmiňovanou symetrii naměřeného signálu okolo bodu  $B = 0$  T.

Toto zjištění umožňuje srovnání naměřených dat s daty ze simulace, v nichž se zohlední tato úhlová závislost pozice vrcholů cyklotronové rezonance. Zde je však nutné zmínit, že simulace bere v úvahu pouze kolmou složku magnetického pole, nikoliv jeho rovinnou složku. Simulace byla provedena pro  $f = 190$  GHz,  $E_F = -24$  meV,  $a = 0,08$  meV a výsledek této simulace byl vynásoben kosinem příslušného úhlu odpovídajícího jednotlivým měřením. Následně byla data z měření proložena odpovídajícími daty ze simulace pro stejný úhel. Výsledek proložení dat je v následujícím grafu:



**Obrázek 32 – Proložení naměřených dat simulací.**

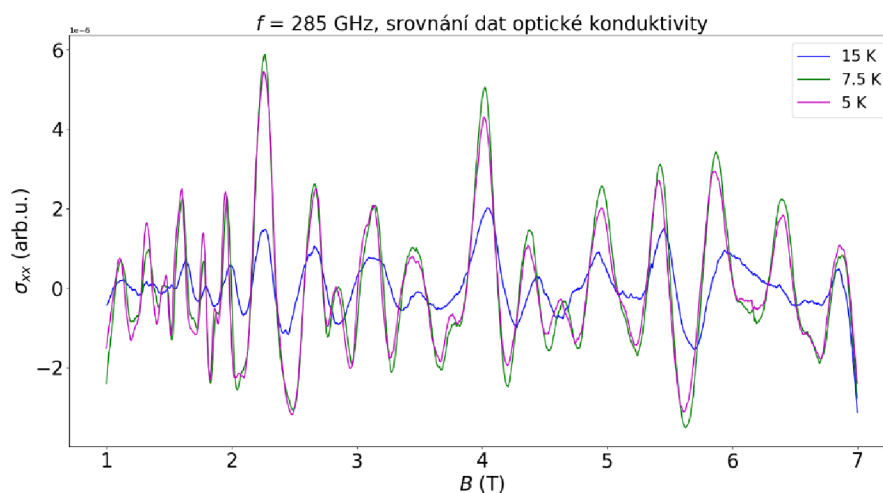
V grafu výše je na ose y vynesena úhlová závislost derivace optické konduktivity v závislosti na magnetickém poli na ose x. Modrá čára představuje data z měření, černá čára představuje simulovaná data. Z grafu jde vidět, že simulovaná data správně následují tvar a pozici cyklotronové rezonance měřeného vzorku přírodního grafitu. Pro simulaci byla použita Fermiho energie  $E_F = -26$  meV. Zde za zmínku stojí nepatrný vrchol vyskytující se okolo magnetického pole  $B = \pm 0,15$  T při orientaci  $0^\circ$ . Tato dvojice vrcholů (jeden pro kladné, druhý pro záporné magnetické pole) je pozorovatelná ve všech měřeních, avšak vlivem změny úhlu při měření dochází při vyšších úhlech k posunu těchto vrcholů směrem od  $B = 0$  T. Vrcholy ani v jednom případě neodpovídají žádnému z vrcholů obdržených simulacemi ve stejné oblasti magnetického pole, což znamená, že se pravděpodobně jedná o vrchol způsobený dírami v okolí bodu H Brillouinovy zóny. V tom případě by díram odpovídala efektivní hmotnost nosičů náboje  $m^* = 0,023m_e$ , což je téměř poloviční hodnota běžně udávané efektivní hmotnosti děr. Z tohoto důvodu není jisté, zdali se jedná skutečně o vrchol způsobený dírami, nebo o artefakt způsobený měřením. Pro srovnání, první vrchol odpovídající elektronům se vyskytuje okolo magnetického pole  $B = \pm 0,38$  T, což odpovídá  $m^* = 0,055m_e$ , což je výsledek konzistentní s literární rešerší.

### 2.3.2 Analýza Shubnikových–de Haasových oscilací

Mimo analýzy cyklotronové rezonance byla dále provedena analýza Shubnikových-de Haasových oscilacích, které jsou výraznější při vyšším magnetickém poli. Pro tuto analýzu bylo použito dat z měření získaných v Grenoblu doc. Petrem Neugebauerem. První analýza spočívá v určení závislosti velikosti amplitudy Shubnikových-de Haasových oscilací na teplotě. Jak bylo zmíněno již dříve, data použitá v rámci této analýzy pocházela z měření, která byla prováděna pro různé teploty vzorku. Naneštěstí většina dostupných dat z těchto měření sledovala pouze velmi specifickou oblast

magnetického pole, v níž nejsou Shubnikovovy-de Haasovy oscilace pozorovatelné. Pro námi prováděnou analýzu bylo nutné, aby byl vzorek měřen v širokém rozsahu velikosti magnetického pole. Současně pro zjednodušení analýzy a pro pochopení vlivu teploty na amplitudu signálu, byla frekvence mikrovlnného záření ponechána konstantní napříč měřeními. Následné srovnání závislosti velikosti amplitudy na teplotě by jinak bylo příliš zkreslené vlivem rozdílných velikostí amplitud pro různé frekvence měření. Z tohoto důvodu byly nalezeny pouze čtyři soubory dat při stejné frekvenci mikrovlnného záření  $f = 285$  GHz, pro teploty  $T = 5$  K, 7,5 K, 15 K a 100 K v rozsahu magnetického pole  $B$  od 0 T po 11,4 T. V případě dat z měření pro poslední zmíněnou teplotu nebyl pozorován výskyt Shubnikovových-de Haasových oscilací, proto byl tento soubor dat také vyřazen. Pro následnou analýzu bylo tedy možné použít pouze tři různých měření pro první tři zmíněné teploty vzorku.

V případě všech tří měření byla opět zaznamenávána derivace optické konduktivity v závislosti na magnetickém poli. Z tohoto důvodu bylo nejprve nutné výsledky numericky integrovat pro získání optické konduktivity a pro nalezení přesné pozice Shubnikovových-de Haasových oscilací. Tato část analýzy byla provedena za použití programu napsaného v jazyce Python, který je k dispozici v příloze Příloha 3 -. Tento program byl vyvinut ve spolupráci s Mgr. Jorgem Navarrem. Stejně jako dříve použitý program pro analýzu cyklotronové rezonance i tento program vyžaduje pro spuštění knihovny přiložené k této práci. Tato situace je ilustrována v následujícím grafu:

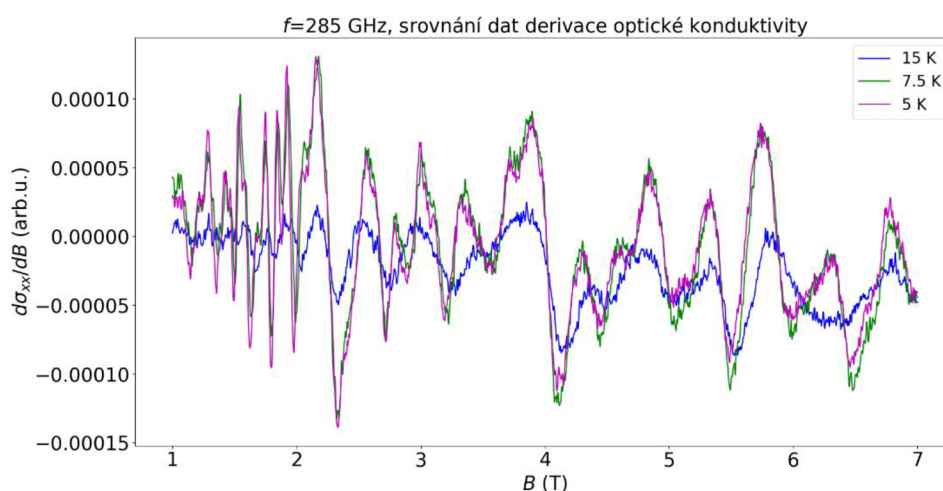


**Obrázek 33 – Srovnání optické konduktivity pro různé teploty.**

V grafu je na vertikální ose vynesena optická konduktivita a na horizontální ose je vyneseno magnetické pole. Křivka modré barvy odpovídá teplotě  $T = 15$  K, křivka zelené barvy teplotě 7,5 K a křivka fialové barvy teplotě 5 K. Z grafu lze vyčíst, že u množství vrcholů je amplituda Shubnikovových-de Haasových oscilací vyšší pro nižší teploty. Avšak u množství vrcholů je amplituda těchto oscilací nejvyšší pro 7,5 K. Chyba může být

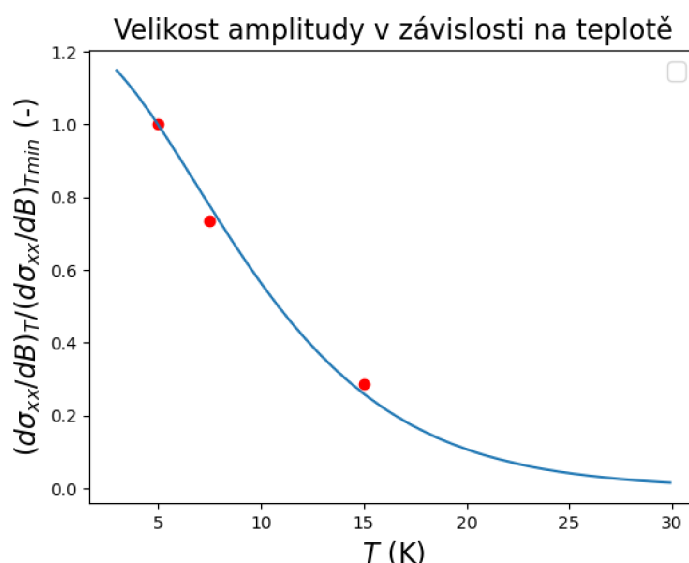


způsobena dříve zmiňovaným vlivem odčítání integrační konstanty vzniklé numerickým integrováním dat. Vzhledem k velkému šumu v rámci dat nebylo možné použít pouhého odečtení této konstanty, ale pro docílení srovnatelných dat v rámci předchozího grafu musela být použita jiná metoda, která má za následek velkou ztrátu informace o velikosti amplitudy oscilací. Pokud by se bral v úvahu pouze jediný vrchol Shubnikových-de Haasových oscilací, pak by bylo touto metodou možné docílit různých velikostí amplitudy těchto oscilací, což vede k velké nedůvěryhodnosti takto obdržených hodnot. Z tohoto důvodu bylo rozhodnuto, že bude vybrán namísto jednoho z vrcholů optické konduktivity vrchol její derivace. Průběh derivace optické konduktivity v závislosti na magnetickém poli použitý pro následnou analýzu je zobrazen v grafu níže:



**Obrázek 34 – Srovnání derivace optické konduktivity pro různé teploty.**

Graf opět zobrazuje fialovou barvou průběh signálu pro měření při  $T = 5$  K, zelenou barvou pro  $T = 7,5$  K a modrou barvou pro  $T = 15$  K. V tomto případě u většiny vrcholů derivace optické konduktivity nabývá amplituda nejvyšší hodnoty pro  $T = 5$  K, ale je zároveň patrné, že v datech je velké množství šumu a současně jak bylo již dříve řečeno, vrchol derivace optické konduktivity neodpovídá vrcholu Shubnikových-de Haasových oscilací. Nicméně i přesto byly zaznamenány hodnoty minima derivace optické konduktivity pro všechny tři teploty v okolí magnetického pole o hodnotě  $B = 1,8$  T. Následně byla každá z těchto hodnot vydělena velikostí amplitudy této oscilace pro nejnižší měřenou teplotu  $T = 5$  K. Tyto body byly následně proloženy funkcí, která odpovídá vývoji velikosti amplitudy Shubnikových-de Haasových oscilací v závislosti na teplotě. Výsledek je v následujícím grafu:



**Obrázek 35 – Vývoj Shubnikových-de Haasových oscilací s teplotou.**

V grafu je na ose y vynesena relativní amplituda oscilací vůči amplitudě oscilace pro nejnižší měřenou teplotu a teplota na ose x. Červené tečky označují zaznamenané vrcholy, jedná se tedy o poměr velikostí jednotlivých amplitud Shubnikových-de Haasových oscilací pro různé teploty vůči nejvyšší naměřené hodnotě amplitudy. Modrá čára pak zobrazuje prokládací funkci predikující vývoj této závislosti s teplotou. Tato funkce byla získána analýzou složky teplotního útlumu v Lifshitz-Kosevičově vztahu (viz. rovnice (1.43)). V grafu výše (viz. Obrázek 35) je na ose y vynesena hodnota derivace optické konduktivity podělená hodnotou derivace optické konduktivity pro nejnižší teplotu, což je nutné reflektovat i v prokládací funkci. Rovnice tedy nabývá následující podoby:

$$\frac{R_T(p)}{R_{T_0}(p)} = \frac{\alpha \frac{m^* T}{m_e B} \sinh\left(\alpha p \frac{m^* T_0}{m_e B}\right)}{\alpha \frac{m^* T_0}{m_e B} \sinh\left(\alpha p \frac{m^* T}{m_e B}\right)}. \quad (2.8)$$

V případě prvního zlomku obsahujícího  $\alpha$  je možné odstranit opakující se veličiny. Vzhledem k tomu, že při analýze nepracujeme s proměnným magnetickým polem, ale s konkrétními hodnotami, je  $B$  považováno za konstantu a lze jej proto také odstranit. Z prvního zlomku tedy zůstává pouze zlomek  $T/T_0$ . V případě druhého zlomku obsahujícího funkci hyperbolického sinusu je nutné rozšířit výraz funkce ve jmenovateli o  $T_0/T_0$ . Hodnota  $p$  je v tomto případě uvažovaná jako  $p = 1$ , protože výpočet pro tuto hodnotu se v rámci Lifshitz-Kosevičova vztahu nejvíce podílí na velikosti výsledné amplitudy oscilací. V dalším kroku je tedy možné substituovat všechny konstantní veličiny pod souhrnný parametr  $A$ , čímž získáme výslednou funkci, která byla použita pro proložení dat v grafu, ve tvaru:

$$f(T) = \frac{T}{T_0} \frac{\sinh(A)}{\sinh\left(A \frac{T}{T_0}\right)}, \quad (2.9)$$

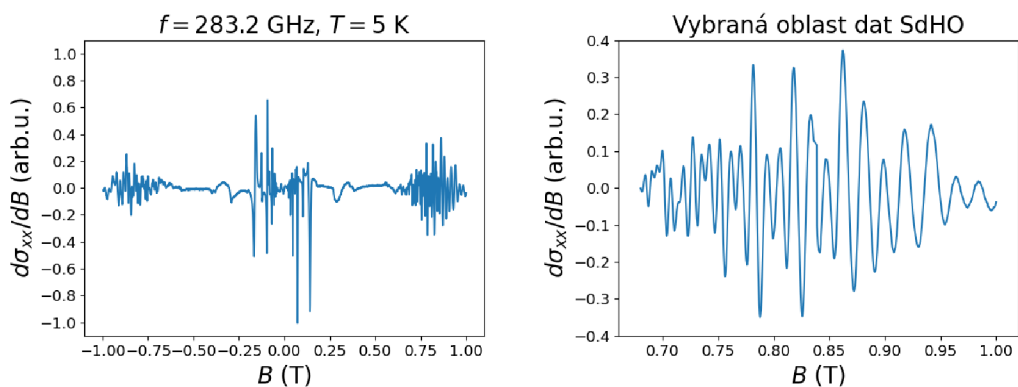
kde  $A$  bude po dosazení za  $\alpha$  dle rovnice (1.44) a následné úpravě mít tvar:

$$A = \frac{2\pi^2 k_B T_0 m^*}{\hbar e B}. \quad (2.10)$$

V rámci programu použitého pro analýzu pak byla použita metoda, která určila optimální hodnotu  $A$  na základě dříve získaných hodnot minima derivace optické konduktivity pro různé teploty a vynesla výslednou závislost teploty podělené minimální měřenou teplotou za užití předpisu prokládací funkce z rovnice (2.9).

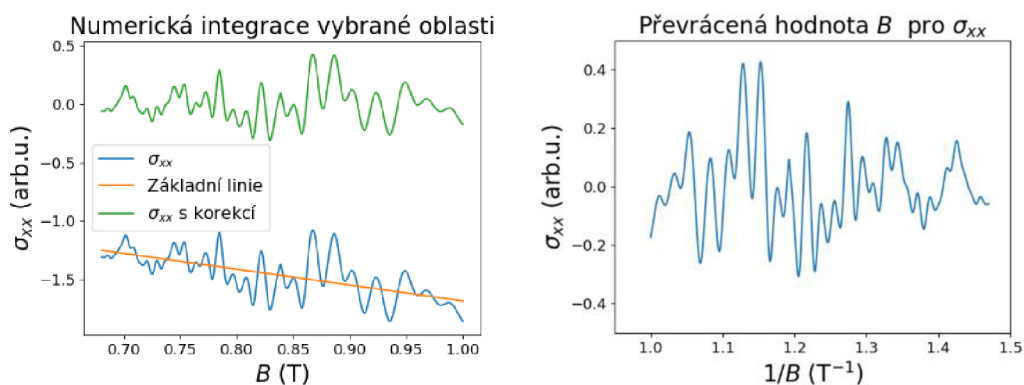
Z takto získaných dat je nyní možné určit efektivní hmotnost nosičů náboje, které jsou zodpovědné za tyto oscilace. Toho lze dosáhnout podělením hodnoty  $A = 2,582 \cdot 10^{-31}$ , která byla získána z prokládací funkce, hmotností volného elektronu. Výsledek tohoto výpočtu je ten, že efektivní hmotnost nosičů náboje  $m^* = 0,2834m_e$ . Tento výsledek je pravděpodobně chybný, protože na základě literární rešerše bylo zjištěno, že efektivní hmotnost děr má být v tomto případě  $m^* = 0,039m_e$  a efektivní hmotnost elektronů pak  $m^* = 0,057m_e$  [56]. Vliv na tento chybný výsledek mohl mít i fakt, že výpočet byl prováděn z vrcholu derivace optické konduktivity, nikoliv optické konduktivity, avšak jak bylo zmíněno již dříve, optickou konduktivitu nebylo možné pro výpočet použít z důvodu pochybné důvěryhodnosti obdržených výsledků po numerické integraci. Na základě těchto zjištění je možné vyvodit pouze jediný závěr, a to ten, že by bylo měření nutné opakovat na zařízení s vyšší citlivostí a pro větší množství teplot, počínaje ještě nižší počáteční teplotou měření, a následně by analýza musela být opakována, tentokrát pro reprezentativní hodnoty optické konduktivity.

Poslední provedená analýza měření určuje hodnotu fundamentální frekvence  $B_F$  vzorku za užití Fourierovy transformace. Fundamentální frekvence z fyzikálního hlediska souvisí s průřezem Fermiho povrchu a projevují se jako perioda Shubnikových-de Haasových oscilací. Oscilace s nižší fundamentální frekvencí jsou přiřazovány díram, zatímco oscilace s vyšší fundamentální frekvencí jsou přiřazovány elektronům. Důvodem je velikost průřezu Fermiho povrchu, neboť průřez odpovídající díram je menší než průřez tohoto povrchu odpovídajícího elektronům. Pro tuto analýzu bylo opět použito měření provedené v Grenoblu při frekvenci  $f = 283,2$  GHz za teploty  $T = 5$  K při magnetickém poli  $B$  od  $-1$  T do  $1$  T. V grafech níže jsou náhledy použitých dat pro tuto část analýzy:



**Obrázek 36 – Data pro analýzu Shubnikových-de Haasových oscilací.**

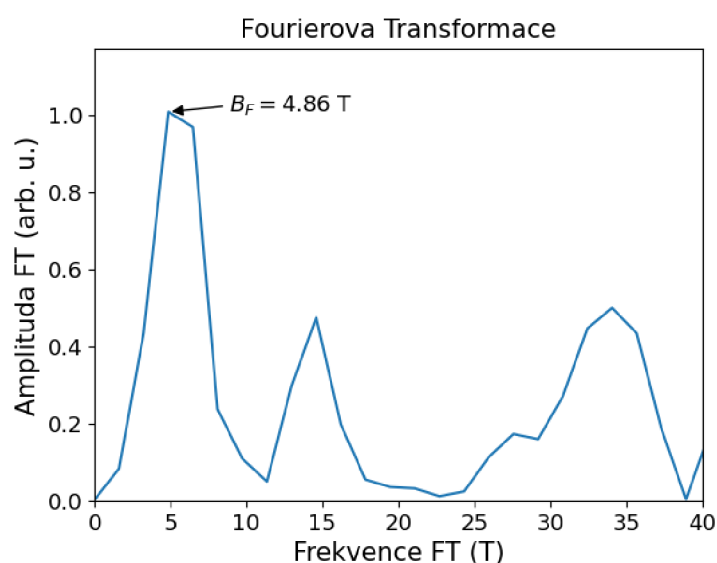
V grafech je opět vynesena na ose y derivace optické konduktivity a na ose x magnetické pole. V levém grafu je vidět celý rozsah dat získaných z měření. Je patrné, že data jsou opět symetrická kolem  $B = 0$  T, kdy od cca  $-0,4$  T do  $0,4$  T je viditelná dříve analyzovaná cyklotronová rezonance. V oblastech od  $-1$  do  $-0,65$  T a od  $0,65$  T do  $1$  T je možné pozorovat Shubnikovy-de Haasovy oscilace. Později zmíněný interval magnetického pole je zobrazený v grafu vpravo a bude použit jako výchozí soubor hodnot pro následnou analýzu těchto oscilací. Pro provedení Fourierovy transformace je nutné pracovat s optickou konduktivitou, nikoliv její derivací, proto byla opět provedena numerická integrace těchto dat. Kroky numerické integrace a její výsledek je zobrazen v grafu níže:



**Obrázek 37 – Numerická integrace Shubnikových-de Haasových oscilací.**

V grafu vlevo jsou zobrazeny dílčí kroky vedoucí k obdržení optické konduktivity. Modrou čarou jsou vyobrazeny původní hodnoty získané numerickou integrací signálu z grafu na Obrázek 36. Je patrné, že se data nacházejí v záporných hodnotách optické konduktivity a zároveň mají mírný sklon směrem dolů se zvyšujícím se magnetickým polem. Proto byla určena základní linie, počítající s posunem dat ve směru osy y od nulové hodnoty a se sklonem určeným integrační konstantou vzniklou v důsledku numerické integrace. Tato linie je v datech zobrazena žlutou čarou. Po odečtení této

základní linie od signálu získaného numerickou integrací je obdržen signál optické konduktivity s korekcí, vyobrazený zelenou čarou. V tomto grafu je demonstrováno, že v tomto případě numerická integrace dat poskytuje kvalitní výsledek pro následující analýzu, na rozdíl od dříve prováděné teplotní analýzy Shubnikových-de Haasových oscilací. V grafu vpravo je pak vyobrazena nově získaná optická konduktivita vynesena na ose y, na ose x je však vynesena převrácená hodnota magnetického pole, neboť pro provedení Fourierovy transformace je nutné použít takto upravené hodnoty signálu. Fourierova transformace samotná byla provedena užitím příslušné funkce opět za použití programu, který se nachází v příloze Příloha 3 -. Výsledek této Fourierovy transformace se nachází v grafu níže:



**Obrázek 38 – Výsledek Fourierovy transformace.**

V grafu výše je na ose y vynesena amplituda Fourierovy transformace v pomocných jednotkách zobrazující poměrovou velikost jednotlivých vrcholů. Na ose x je pak vynesena frekvence Fourierovy transformace. Vzhledem k tomu, že vstupním souborem dat byla převrácená hodnota magnetického pole v jednotkách  $T^{-1}$ , je výsledek Fourierovy transformace závislý na převrácené hodnotě této jednotky, tedy v jednotkách Tesla. První nejvyšší vrchol pak odpovídá naší hledané fundamentální frekvenci, tedy  $B_F = 4,86$  T. Dále je možné si povšimnout dalších vrcholů okolo hodnoty 14,5 T a 34 T, což jsou artefakty způsobené Fourierovou transformací.

Tuto hodnotu fundamentální frekvence je nyní možné srovnat s výsledky, které byly naměřeny užitím jiných metod. Tradičně se pro měření Shubnikových-de Haasových oscilací používá vzorku grafitu, který musí být speciálně nakontaktován k nosnému substrátu určenému k provedení měření. Následně je měřena změna rezistivity vzorku v závislosti na magnetickém poli, čímž jsou pozorovány Shubnikovy-de Haasovy oscilace. V naší provedeném experimentu byla měřena absorpce mikrovlnného záření

vzorkem v závislosti na magnetickém poli, což odpovídá optické konduktivitě vzorku. Vzhledem k tomu, že rezistivita i konduktivita spolu úzce souvisí, je možné přímé srovnání obdržených dat.

Například v experimentu provedeným S. B. Hubbardem a spol. (viz. [56]) byla měřena rezistivita vzorku HOPG při teplotách  $T$  od 30 mK po 3830 mK. Shubnikovovy-de Haasovy oscilace byly dobře pozorovatelné pouze při extrémně nízkých teplotách ( $T < 1$  K). Naměřené oscilace byly analyzovány obdobně jako v této práci provedením Fourierovy transformace. Výsledná fundamentální frekvence pro díry byla určena jako  $B_F = 4,36$  T a  $B_F = 5,97$  T pro elektrony. Zde je nutné zmínit, že výsledné vrcholy Fourierovy transformace nebyly příliš úzké, kvalitou zpracování byly srovnatelné s námi prezentovaným výsledkem v grafu na Obrázek 38.

Další experiment byl proveden Johannesem M. Schneiderem (viz. [6]), kdy byla měřena opět rezistivita pro vzorek HOPG, a navíc přírodní grafit. Experiment byl opět prováděn tradiční metodou, opět při extrémně nízkých teplotách  $T = 10$  mK. Na základě následně provedené Fourierovy transformace byla určena fundamentální frekvence  $B_F = 4,51$  T pro díry a  $6,14$  T pro elektrony.

Experiment provedený Igorem A. Luk'yanchukem a Yakovem Kopelevichem (viz. [57]) zkoumal vzorek HOPG za použití stejné metody měření při teplotě  $T = 2$  K. Výsledkem Fourierovy transformace na výsledcích tohoto měření bylo nalezení fundamentální frekvence  $B_F = 4,61$  T pro díry a  $6,41$  T pro elektrony (zde je nutné poznamenat, že ve skutečnosti došlo v tomto zdroji k zaměnění děr s elektrony, což bylo následně diskutováno v práci provedené J. Schneiderem – viz. [6]).

Jak bylo dříve řečeno, námi provedená Fourierova transformace nám určila výslednou fundamentální frekvenci  $B_F = 4,86$  T. Srovnáním s dříve provedenými experimenty lze tedy dojít k závěru, že se jedná o fundamentální frekvenci děr. Analýzou nebyl nalezen vrchol odpovídající elektronům, protože první vrchol zabírá oblast v rozsahu frekvencí od cca 2,5 po 7,5 T, což je oblast, v níž by se vrchol odpovídající elektronům měl nacházet. Nicméně není možné vyloučit, že námi určená hodnota fundamentální frekvence (přiřazená dírák) byla ovlivněna i elektrony. Na druhou stranu na základě literární rešerše bylo zjištěno, že protože vliv jednotlivých typů nosičů na velikost pozorovaných oscilací je závislý na čase rozptylu částic, tak by měly pohyblivější elektrony mít na velikost Shubnikových-de Haasových oscilací menší vliv než méně pohyblivé díry [56], což potvrzuje závěr, že se v našem případě jedná o fundamentální frekvenci odpovídající dírák.

Dále je nutné poznamenat, že ačkoliv námi použitá hodnota poskytuje nepatrně vyšší výsledek fundamentální frekvence v porovnání s jinými experimenty, námi aplikovaná metoda provedení experimentu je mnohem rychlejší a jednodušší, kdy stačí měřený vzorek umístit do držáku vzorku a vložit jej do měřícího zařízení. Oproti tomu tradiční metody vyžadují náročné kontaktování měřeného vzorku na nosný substrát, kterým může být například i křemíkový substrát s litograficky vytvořenými kontakty, což je

technologicky i časově mnohem náročnější způsob přípravy vzorku. Současně je nutné poznamenat, že námi prováděný experiment umožňoval sledovat Shubnikovy-de Haasovy oscilace při teplotě vzorku  $T = 5$  K. Literární rešerše ukázala, že u tradičních metod je používána ještě nižší (a tedy i obtížněji dosažitelná) teplota vzorku v řádu desítek až stovek mK pro pozorování Shubnikových-de Haasových oscilací [56]. Při vyšších teplotách je náročnější tyto oscilace rozlišit. Pokud by bylo měření opakováno za použití naší metody při podobně nízkých teplotách, bylo by možné pozorovat více oscilací při nižším magnetickém poli, v tom případě by následná Fourierova transformace zobrazovala ostřejší vrcholy odpovídající fundamentální frekvenci pro díry i elektrony.

### 3. ZÁVĚR

Tato diplomová práce se zabývala analýzou výsledků měření grafitu získaných za užití spektrometru a následným srovnáním těchto dat se simulacemi, na základě čehož byly vyvozeny významné fyzikální vlastnosti grafitu.

V teoretické části této práce byly definovány významné termíny z oblasti kvantové mechaniky a fyziky pevných látek, které umožňují popis struktury grafitu, jeho elektronické vlastnosti a dále pak pochopení výsledků měření. Další část teoretické rešerše se věnovala EPR spektroskopii, jejímu principu, dále funkčními principu HFEPR spektrometru nacházejícím se v laboratoři EPR spektroskopie CEITEC VUT. V této části byly definovány jevy, kterých je při měření tímto spektrometrem využíváno, což umožňuje analyzovat data z měření. Poslední část teoretické rešerše se zabývala SWM modelem používaným pro numerický výpočet pásové struktury grafitu.

Praktická část této práce nejprve využívá SWM modelu pro simulaci pásové struktury a Landauových hladin grafitu za užití programu MATLAB. Simulace nejprve zobrazují pásovou strukturu mezi body H-K-H podél osy  $k_z$  na hraně Brillouinovy zóny, což zobrazuje symetrii Brillouinovy zóny okolo bodu K. Následující simulace ukazuje těsné okolí bodu K a H ve směru  $k_x$  a  $k_y$ . Tato simulace ukazuje trigonální symetrii a Lifshitzovy přechody v okolí bodu K a válcovou symetrii v okolí bodu H. Další provedené simulace používaly skriptu převzatého z práce Johannese M. Schneidera, který využívá SWM model započítávající vliv magnetického pole. Byla provedena simulace pro nulové a nenulové magnetické pole, která ukazuje štěpení energetických pásů do jednotlivých Landauových hladin.

V praktické části se dále nachází popis přípravy vzorku HOPG a přírodního grafitu. V případě HOPG je popsán proces exfoliace tohoto vzorku. Přípravené vzorky byly měřeny HFEPR spektrometrem, ale z důvodu technických obtíží s měřícím zařízením nebylo možné získat použitelná data pro analýzu. Z tohoto důvodu bylo rozhodnuto, že pro analýzu cyklotronových rezonancí a Shubnikových-de Haasových oscilací bude použito dříve obdržných dat z měření vzorku přírodního grafitu.

První část analýzy se zabývala cyklotronovou rezonancí. Byl vytvořen program umožňující simulaci optické konduktivity a její derivace v závislosti na magnetickém poli. Pro simulaci je nutné znát parametry měření, tedy frekvenci mikrovlnného záření, teplotu vzorku a magnetické pole. Dále je potřeba určit parametr rozšíření, Fermiho energii a efektivní hmotnost nosičů náboje. Na základě teoretické rešerše byl vytvořen prvotní odhad těchto parametrů. Nejprve byl pozorován vliv Fermiho energie na pozici vrcholů cyklotronové rezonance v simulacích. Tím byly stanoveny rovnice, které umožňují výpočet přibližné hodnoty Fermiho energie měřeného vzorku. Poté byl ověřen vztah pro výskyt harmonických složek cyklotronové rezonance v rámci simulací. Následně byl sledován vliv parametru rozšíření na tvar vrcholů cyklotronové rezonance v simulacích, na základě čehož byla určena hodnota parametru a ovlivňující velikost



parametru rozšíření pro data z měření. Na základě těchto parametrů byla provedena simulace a její výsledek byl zobrazen spolu s daty z měření. Tato simulace správně následovala data z měření z hlediska pozice vrcholů cyklotronové rezonance, nikoliv však z hlediska velikosti amplitudy těchto vrcholů. Pro získání přesné shody by bylo nutné upravit parametry  $\gamma_0$ - $\gamma_6$  v SWM modelu, což ale nebylo cílem této práce. Z naměřených dat byla navíc určena efektivní hmotnost děr a elektronů.

V rámci analýzy cyklotronové rezonance byl také zjišťován vliv různých orientací vzorku vůči magnetickému poli. Vzorkem bylo v průběhu měření rotováno, díky čemuž bylo možné sledovat vliv změny úhlu na obdržený signál. Z výsledků měření byly zaznamenány jednotlivé vrcholy signálu, které byly přepočítány tak, aby braly v potaz pouze vliv kolmé složky magnetického pole vůči ose c v grafitu. Výsledek dokazuje, že se v případě grafitu jedná o kvazi 2D systém s vysokou anizotropií. Následně byla provedena simulace, která byla vynesena do grafu spolu s daty z měření pro různé úhly, což opět ukazuje, že data ze simulací správně následují data z měření. Nicméně bylo zjištěno, že tvar signálu se mění i přes odečtení vlivu kolmé složky magnetického pole, což naznačuje, že tvar vrcholů cyklotronové rezonance je ovlivněn i rovinnou složkou magnetického pole. Objasnění tohoto pozorování vyžaduje další zkoumání.

Druhá část analýzy se věnovala Shubnikovým-de Haasovým oscilacím. Nejprve byla provedena analýza velikosti těchto oscilací na teplotě. Analýza byla prováděna s užitím tří souborů dat z měření, kdy bylo každé měření prováděno při jiné teplotě. Byl vybrán jeden vrchol Shubnikových-de Haasových oscilací pro každý soubor dat a byl vytvořen graf relativní velikosti těchto oscilací pro různé teploty vůči oscilacím při nejnižší teplotě. Takto zaznamenané vrcholy byly proloženy prokládací funkcí, na jejímž základě byla určena efektivní hmotnost nosičů náboje. Výsledek byl ve srovnání s výsledky získanými literární rešerší o řád vyšší, což vede k závěru, že by bylo nutné měření provést znovu pro větší množství teplot.

Poslední provedená analýza zjišťovala fundamentální frekvenci vzorku. Oblast dat z měření, v níž se vyskytovaly Shubnikovovy-de Haasovy oscilace, byla numericky integrována. Následně byla provedena Fourierova transformace, díky čemuž byl nalezen vrchol odpovídající fundamentální frekvenci děr. Výsledek je srovnatelný s výsledky získanými literární rešerší. Výsledek Fourierovy transformace byl značně hrubý, z toho důvodu nebylo možné přesně určit fundamentální frekvenci elektronů. Ve srovnání s tradičními metodami měření je však námi užitá metoda rychlejší a poskytuje srovnatelně kvalitní výsledky i při vyšších teplotách. V budoucnu by bylo možné získat lepší výsledky analýzy opakováním měření při nižší teplotě a vyšším magnetickém poli, díky čemuž by měl být výsledek Fourierovy transformace přesnější.

# LITERATURA

- [1] NEUGEBAUER, Petr. Magneto-Optical and THz Spectroscopy. *CEITEC* [online]. Brno: CEITEC - Středoevropský technologický institut, 2020 [cit. 2020-11-12]. Dostupné z: <http://spectroscopy.ceitec.cz/>
- [2] SKODA, Marta, Ilona DUDEK, Anna JAROSZ a Dariusz SZUKIEWICZ. Graphene: One Material, Many Possibilities—Application Difficulties in Biological Systems. *Journal of Nanomaterials* [online]. 2014, **2014**, 1-11 [cit. 2020-12-16]. ISSN 1687-4110. Dostupné z: doi:10.1155/2014/890246
- [3] KIELMAS, Maria. What Are the Uses of Graphite?. *Sciencing* [online]. Santa Monica (California): Leaf Group Ltd., 2020 [cit. 2020-12-15]. Dostupné z: <https://sciencing.com/uses-graphite-5670130.html>
- [4] SLIZOVSKIY, Sergey, Edward MCCANN, Mikito KOSHINO a Vladimir FAL'KO. Films of rhombohedral graphite as two-dimensional topological semimetals. *Communications Physics* [online]. 2019, **2**(1) [cit. 2020-12-15]. ISSN 2399-3650. Dostupné z: doi:10.1038/s42005-019-0268-8
- [5] ORLITA, M., P. NEUGEBAUER, C. FAUGERAS, A.-L. BARRA, M. POTEMSKI, F. PELLEGRINO a D. BASKO. Cyclotron Motion in the Vicinity of a Lifshitz Transition in Graphite. *Physical Review Letters* [online]. 2012, **108**(1), 1-11 [cit. 2020-11-14]. ISSN 0031-9007. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRevLett.108.017602
- [6] SCHNEIDER, Johannes. *ELECTRONIC PROPERTIES OF GRAPHITE* [online]. Grenoble, 2010 [cit. 2020-12-11]. Dostupné z: <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00544540/document>. Disertace. Joseph Fourier University. Vedoucí práce Duncan Maude.
- [7] ASHCROFT, Neil a N. MERMIN. *Solid state physics*. 1. [neuved.]: Harcourt, Inc., 1976. ISBN 0-03-083993-9.
- [8] SHERRILL, David. Postulates of Quantum Mechanics. *A Brief Review of Elementary Quantum Chemistry* [online]. Atlanta (Georgia): Georgia

- Institute of Technology, 2006 [cit. 2020-11-20]. Dostupné z:  
<http://vergil.chemistry.gatech.edu/notes/quantrev/node20.html>
- [9] SKÁLA, Lubomír. *Úvod do kvantové mechaniky*. 1. Praha: Academia, 2005. ISBN 80-200-1316-4.
- [10] OPATRŇÝ, Tomáš. *Základy moderní fyziky: studijní modul* [online]. 1. Olomouc: Univerzita Palackého v Olomouci, 2012 [cit. 2020-11-12]. ISBN 978-80-244-3333-2. Dostupné z:  
[http://mofy.upol.cz/vystupy/02\\_texty/modul\\_zmf.pdf](http://mofy.upol.cz/vystupy/02_texty/modul_zmf.pdf)
- [11] GREINER, Walter. *Quantum Mechanics: An Introduction*. 4th ed. Berlin: Springer, 2001. ISBN 3-540-67458-6.
- [12] NAVE, Rod. Quantum Harmonic Oscillator. *HyperPhysics* [online]. Atlanta (Georgia): Georgia State University, 2016 [cit. 2020-11-29]. Dostupné z: <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/hosc.html>
- [13] WEBB, Stephen. The Quantum Harmonic Oscillator. *FisicaNET* [online]. Porto Alegre: Alberto Ricardo Prass [cit. 2020-11-29]. Dostupné z:  
[https://www.fisica.net/mecanica-quantica/quantum\\_harmonic\\_oscillator\\_lecture.pdf](https://www.fisica.net/mecanica-quantica/quantum_harmonic_oscillator_lecture.pdf)
- [14] PROCHÁZKA, Vít. *Fyzika pevných látek: studijní modul* [online]. 1. Olomouc: Univerzita Palackého v Olomouci, 2012 [cit. 2020-11-12]. ISBN 978-80-244-3300-4. Dostupné z:  
[http://mofy.upol.cz/vystupy/02\\_texty/modul\\_fpl.pdf](http://mofy.upol.cz/vystupy/02_texty/modul_fpl.pdf)
- [15] The Fundamental Types of Crystalline Solids. *LibreTexts: Chemistry* [online]. Davis, California: LibreTexts, 2020 [cit. 2020-11-14]. Dostupné z:  
[https://chem.libretexts.org/Courses/Sacramento\\_City\\_College/SCC%3A\\_Chem\\_400\\_-\\_General\\_Chemistry\\_I/Text/12%3A\\_Solids\\_and\\_Modern\\_Materials/12.4%3A\\_The\\_Fundamental\\_Types\\_of\\_Crystalline\\_Solids](https://chem.libretexts.org/Courses/Sacramento_City_College/SCC%3A_Chem_400_-_General_Chemistry_I/Text/12%3A_Solids_and_Modern_Materials/12.4%3A_The_Fundamental_Types_of_Crystalline_Solids)
- [16] 1.4. Krystalová mřížka. *Multimediální studijní texty z mineralogie* [online]. Brno: Fakulta informatiky Masarykovy univerzity, 2009 [cit.

- 2020-11-16]. Dostupné z:  
<https://is.muni.cz/do/1499/el/estud/prif/ps09/9045979/web/kapitola1/4.htm>  
 1
- [17] Symmetry, Crystal Systems and Bravais Lattices. *Physics in a nutshell* [online]. Lüneburg: Tobias Wegener, 2014 [cit. 2020-11-17]. Dostupné z:  
<https://www.physics-in-a-nutshell.com/article/6/symmetry-crystal-systems-and-bravais-lattices>
- [18] TOMÁNEK, Pavel. *Nanotechnologie* [online]. 1. Brno: FEKT Vysokého učení technického, 2007 [cit. 2020-11-17]. Dostupné z:  
[https://moodle.vutbr.cz/pluginfile.php/148209/mod\\_resource/content/3/Na-notechnologie.pdf](https://moodle.vutbr.cz/pluginfile.php/148209/mod_resource/content/3/Na-notechnologie.pdf)
- [19] MILEV, Adriyan, Nguyen TRAN, G. KANNANGARA a Michael WILSON. Unoccupied electronic structure of ball-milled graphite. *Physical Chemistry Chemical Physics* [[online]. 2010, **12**(25), 1 [cit. 2020-11-17]. ISSN 1463-9076. Dostupné z: doi:10.1039/b926345d
- [20] PHY.F20 Molecular and Solid State Physics: Hexagonal close-packed. *TU Graz: Graz University of Technology* [online]. Graz: Graz University of Technology [cit. 2020-12-03]. Dostupné z:  
<http://lampx.tugraz.at/~hadley/ss1/crystalstructure/structures/hcp/hcp.php>
- [21] DUNLAP, Richard. Novel Microstructures for Solids: Crystalline structure. *IOPScience* [online]. Bristol: IOP Publishing, 2020 [cit. 2020-11-17]. Dostupné z: <https://iopscience.iop.org/book/978-1-64327-338-9/chapter/bk978-1-64327-338-9ch1>
- [22] GRAY, Dodd, Adam MCCAUGHAN a Bhaskar MOOKERJI. Crystal Structure of Graphite, Graphene and Silicon. *West Virginia University* [online]. Morgantown, West Virginia: West Virginia University, 2020 [cit. 2020-11-17]. Dostupné z:  
<http://community.wvu.edu/~miholcomb/graphene.pdf>
- [23] Structural Description. *Asbury Carbons* [online]. Asbury (New Jersey): Asbury Carbons, 2019 [cit. 2020-12-03]. Dostupné z:

- <https://asbury.com/resources/education/graphite-101/structural-description/>
- [24] KITTEL, Charles a Paul MCEUEN. *Introduction to solid state physics*. 8th ed. Hoboken: Wiley, 2005. ISBN 04-714-1526-X.
- [25] SOUBUSTA, Jan. *Fyzika pevných látek SLO/PL* [online]. 1. Olomouc: Univerzita Palackého v Olomouci, 2012 [cit. 2020-11-14]. ISBN 978-80-244-3095-9. Dostupné z:  
<https://fyzika.upol.cz/cs/system/files/download/vujtek/texty/pl.pdf>
- [26] Direct and Reciprocal Lattice Visualizer. *Calistry* [online]. Calistry.org, 2015 [cit. 2020-12-03]. Dostupné z: <http://calistry.org/viz/direct-and-reciprocal-lattice-visualizer>
- [27] BADRAN, Rashad. Brillouin Zones and their importance. *The Hashemite University* [online]. Zarqa: The Hashemite University, 2017 [cit. 2020-11-18]. Dostupné z:  
<https://eis.hu.edu.jo/ACUploads/10010/Reciprocal%20lattice-Brillouin%20Zones.pdf>
- [28] SOLID STATE PHYSICS. *Catedra de Fizica Solidului* [online]. Magurele: Universitatea din Bucuresti - Facultatea de Fizica, 2020 [cit. 2020-11-18]. Dostupné z:  
[http://193.226.50.185/cursuri/solid\\_en/curs\\_solid\\_EN.pdf](http://193.226.50.185/cursuri/solid_en/curs_solid_EN.pdf)
- [29] Brillouin zone. *Online Dictionary of Crystallography* [online]. Chester: International Union of Crystallography, 2019 [cit. 2020-11-18]. Dostupné z: [https://dictionary.iucr.org/Brillouin\\_zone](https://dictionary.iucr.org/Brillouin_zone)
- [30] Brillouin Zones. *LibreTexts: Engineering* [online]. Davis, California: LibreTexts, 2020 [cit. 2020-11-19]. Dostupné z:  
[https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Materials\\_Science/Supplemental\\_Modules\\_\(Materials\\_Science\)/Electronic\\_Properties/Brillouin\\_Zones](https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Materials_Science/Supplemental_Modules_(Materials_Science)/Electronic_Properties/Brillouin_Zones)
- [31] WESSNER, Wilfried. 6.2 Geometric Properties of the Irreducible Wedge. *Mesh Refinement Techniques for TCAD Tools* [online]. Wien: TU Wien, 2006 [cit. 2020-11-19]. Dostupné z:  
<https://www.iue.tuwien.ac.at/phd/wessner/node30.html>

- [32] GROSSO, Giuseppe a Giuseppe PARRAVICINI. Geometrical Description of Crystals: Direct and Reciprocal Lattices. *Solid State Physics* [online]. Elsevier, 2014, , 67-105 [cit. 2020-12-03]. ISBN 9780123850300. Dostupné z: doi:10.1016/B978-0-12-385030-0.00002-5
- [33] 2.1.4 Periodic Potentials and Bloch's Theorem. *Christian-Albrechts-Universität zu Kiel: Faculty of Engineering* [online]. Kiel: Christian-Albrechts-Universität zu Kiel, 2020 [cit. 2020-12-03]. Dostupné z: [https://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/semi\\_en/kap\\_2/backbone/r2\\_1\\_4.html](https://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/semi_en/kap_2/backbone/r2_1_4.html)
- [34] PÁSOVÉ DIAGRAMY. *Fyzika polovodičů 2000* [online]. Brno: VUT, 2000 [cit. 2020-12-07]. Dostupné z: <http://www.trunky.cz/bp/fypolo/4.htm>
- [35] Elektrické vlastnosti pevných látek. *Encyklopedie fyziky* [online]. Praha: Jaroslav Reichl, Martin Všeticka, c2016-2020 [cit. 2020-12-07]. Dostupné z: <http://fyzika.jreichl.com/main.article/view/773-elektricke-vlastnosti-pevnych-latek>
- [36] SLONCZEWSKI, J. a P. WEISS. Band Structure of Graphite. *Physical Review* [online]. 1958, **109**(2), 272-279 [cit. 2020-12-07]. ISSN 0031-899X. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRev.109.272
- [37] Band Structure for Graphite. *MOPAC* [online]. Colorado Springs (Colorado): Stewart Computational Chemistry, 2007 [cit. 2020-12-07]. Dostupné z: [http://openmopac.net/manual/Graphite/Band\\_structure\\_Graphite.html](http://openmopac.net/manual/Graphite/Band_structure_Graphite.html)
- [38] *MOPAC*® [online]. Colorado Springs (Colorado): Stewart Computational Chemistry, 2007 [cit. 2020-12-16]. Dostupné z: <http://openmopac.net/>
- [39] Density of States. *Libre Texts: Engineering* [online]. Davis, California: LibreTexts, 2020 [cit. 2020-12-07]. Dostupné z: [https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Materials\\_Science/Supplemental\\_Modules\\_\(Materials\\_Science\)/Electronic\\_Properties/Density\\_of\\_States](https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Materials_Science/Supplemental_Modules_(Materials_Science)/Electronic_Properties/Density_of_States)
- [40] Fermi Energy. *BYJU'S* [online]. Bangalore: BYJU'S, 2020 [cit. 2020-12-07]. Dostupné z: <https://byjus.com/physics/fermi-energy/>

- [41] CZERNIA, Dominik. Fermi Level Calculator. *Omni Calculator* [online]. Kraków: Omni Calculator sp. z o.o., 2011 [cit. 2020-12-09]. Dostupné z: <https://www.omnicalculator.com/physics/fermi-level>
- [42] What is Fermi energy?. *Metropolia* [online]. Helsinki: Metropolia, 2020 [cit. 2020-12-07]. Dostupné z: <https://wiki.metropolia.fi/pages/viewpage.action?pageId=108377262>
- [43] Fermi Energy and Fermi Surface. *Libre Texts: Engineering* [online]. Davis, California: LibreTexts, 2020 [cit. 2020-12-09]. Dostupné z: [https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Materials\\_Science/Supplemental\\_Modules\\_\(Materials\\_Science\)/Electronic\\_Properties/Fermi\\_Energy\\_and\\_Fermi\\_Surface](https://eng.libretexts.org/Bookshelves/Materials_Science/Supplemental_Modules_(Materials_Science)/Electronic_Properties/Fermi_Energy_and_Fermi_Surface)
- [44] Fermi surface. *Wikiwand* [online]. San Francisco (California): Wikiwand, 2013 [cit. 2020-12-09]. Dostupné z: [https://www.wikiwand.com/en/Fermi\\_surface](https://www.wikiwand.com/en/Fermi_surface)
- [45] KUBÁČEK, Pavel. Elektronová paramagnetická rezonance. *Základy fyzikální chemie: Multimediální elektronický výukový materiál* [online]. Brno: Masarykova univerzita, 2011 [cit. 2020-12-14]. Dostupné z: [https://is.muni.cz/do/rect/el/estud/prif/js11/fyz\\_chem/web/fotony/EPR.htm](https://is.muni.cz/do/rect/el/estud/prif/js11/fyz_chem/web/fotony/EPR.htm)
- [46] KAUR, Parminder a Yu OYALA. EPR: Theory. *Libre Texts: Chemistry* [online]. Davis (California): LibreTexts, 2020 [cit. 2020-12-14]. Dostupné z: [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical\\_and\\_Theoretical\\_Chemistry\\_Textbook\\_Maps/Supplemental\\_Modules\\_\(Physical\\_and\\_Theoretical\\_Chemistry\)/Spectroscopy/Magnetic\\_Resonance\\_Spectroscopies/Electron\\_Paramagnetic\\_Resonance/EPR%3A\\_Theory](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/Physical_and_Theoretical_Chemistry_Textbook_Maps/Supplemental_Modules_(Physical_and_Theoretical_Chemistry)/Spectroscopy/Magnetic_Resonance_Spectroscopies/Electron_Paramagnetic_Resonance/EPR%3A_Theory)
- [47] LÁZNIČKA, Tomáš. *DESIGN OF MOBILE VACUUM CHAMBER FOR LOADING SAMPLES INTO HIGH-FREQUENCY ELECTRON PARAMAGNETIC RESONANCE SPECTROMETER* [online]. Brno, 2020 [cit. 2020-12-11]. Dostupné z: [https://www.vutbr.cz/www\\_base/zav\\_prace\\_soubor\\_verejne.php?file\\_id=2](https://www.vutbr.cz/www_base/zav_prace_soubor_verejne.php?file_id=2)

13971. Diplomová práce. Vysoké učení technické v Brně. Vedoucí práce Petr Neugebauer.
- [48] PASCHOTTA, Rüdiger. Faraday Rotators. *RP Photonics* [online]. Bad Dürkheim: RP Photonics Consulting GmbH [cit. 2020-12-11]. Dostupné z: [https://www.rp-photonics.com/faraday\\_rotators.html](https://www.rp-photonics.com/faraday_rotators.html)
- [49] THz Optical Components. *THz: Terahertz* [online]. Cardiff: Thomas Keating Ltd a QMC Instruments Ltd, c2008-2019 [cit. 2020-12-11]. Dostupné z: <http://www.terahertz.co.uk/qmc-instruments-ltd/thz-optical-components>
- [50] GABRIŠ, Andrej. *NÁVRH DRŽÁKU VZORKU PRO STUDIUM ORIENTOVANÝCH KRYSTALŮ POMOCÍ VYSOKOFREKVENČNÍ PARAMAGNETICKÉ RESONANCE* [online]. Brno, 2019 [cit. 2020-12-11]. Dostupné z: [https://www.vutbr.cz/www\\_base/zav\\_prace\\_soubor\\_verejne.php?file\\_id=212681](https://www.vutbr.cz/www_base/zav_prace_soubor_verejne.php?file_id=212681). Bakalářská práce. Vysoké učení technické v Brně. Vedoucí práce Antonín Sojka.
- [51] Landau levels: a microscopic model for the quantum hall effect. *TU Delft: OpenCourseWare* [online]. Delft: TU Delft, 2007 [cit. 2020-12-11]. Dostupné z: <https://ocw.tudelft.nl/course-readings/landau-levels-microscopic-model-quantum-hall-effect/>
- [52] WEINBRENNER, Paul. Shubnikov-de Haas Oscillations and Effective Cyclotron Mass in the Organic Superconductors  $\kappa$ -(ET)<sub>2</sub>Cu[N(CN)<sub>2</sub>]Cl and  $\kappa$ -(ET)<sub>2</sub>Cu(NCS)<sub>2</sub> near the Mott-Insulator Transition. *Walther-Meißner-Institute for Low Temperature Research* [online]. Garching: Walther-Meißner-Institut, 2020 [cit. 2020-12-13]. Dostupné z: <https://www.wmi.badw.de/publications/theses/Weinbrenner,Paul%20Bachelor%20Thesis%202017.pdf>
- [53] Anaxilaus / peakdetect. *GitHub* [online]. San Francisco (California): GitHub, Inc., 2021 [cit. 2021-05-15]. Dostupné z: <https://github.com/anaxilaus/peakdetect>



- [54] SCHROEDER, P. R., M. S. DRESSELHAUS, a A. JAVAN. Location of Electron and Hole Carriers in Graphite from Laser Magnetoreflexion Data. *Phys. Rev. Lett.* [online]. American Physical Society, 1968, **20**(23), 1292-1295 [cit. 2021-05-17]. Dostupné z:  
doi:10.1103/PhysRevLett.20.1292
- [55] WOOLLAM, John A. Graphite Carrier Locations and Quantum Transport to 10 T (100 kG). *Physical Review B* [online]. 1971, **3**(4), 1148-1159 [cit. 2021-05-17]. ISSN 0556-2805. Dostupné z:  
doi:10.1103/PhysRevB.3.1148
- [56] HUBBARD, S. B., T. J. KERSHAW, A. USHER, A. K. SAVCHENKO a A. SHYTOV. Millikelvin de Haas–van Alphen and magnetotransport studies of graphite. *Phys. Rev. B* [online]. American Physical Society, 2011, (83) [cit. 2021-05-15]. Dostupné z:  
doi:https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.035122
- [57] LUK'YANCHUK, Igor A. a Yakov KOPELEVICH. Phase Analysis of Quantum Oscillations in Graphite. *Physical Review Letters* [online]. 2004, **93**(16) [cit. 2021-05-23]. ISSN 0031-9007. Dostupné z:  
doi:10.1103/PhysRevLett.93.166402

# SEZNAM SYMBOLŮ, KONSTANT A ZKRATEK

## Zkratky:

HFEPR	...	Vysokofrekvenční elektronová paramagnetická rezonance
MOTeS	...	Magneto-Optická a Terahertzová spektroskopie
NDDO	...	Zanedbání diatomického diferenciálního překrytí
EPR	...	Elektronová paramagnetická rezonance
NMR	...	Nukleární magnetická rezonance
AMC	...	Aktivní signálová násobička
PEEK	...	Polyetheretherketon
SWM	...	Slonczewski-Weiss-McClure
HOPG	...	Vysoce uspořádaný pyrolytický grafit
LNCMI	...	Laboratoř vysokého magnetického pole v Grenoblu

## Symbole:

<b>Značka</b>	...	<b>Název</b>	<b>Jednotka</b>
$E$	...	Energie, pokud není řečeno jinak	J nebo eV
$E_N$	...	Diskrétní energie oscilátoru	J nebo eV
$N$	...	Kvantové číslo, pokud není řečeno jinak	–
$\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_3$	...	Primitivní vektory Bravaisovy mřížky	m
$\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_3$	...	Primitivní vektory reciproké mřížky	$\text{m}^{-1}$
$m^*$	...	Efektivní hmotnost elektronu	kg
$g_N(E)$	...	Hustota stavů	$\text{eV}^{-1}\text{m}^{-1}$
$E_f$	...	Fermiho energie	J nebo eV
$n$	...	Hustota nosičů náboje	$\text{m}^{-3}$
$f(E)$	...	Fermiho-Diracovo rozdělení	–
$T$	...	Absolutní teplota	K
$\omega_c$	...	Cyklotronová frekvence	Hz
$B$	...	Magnetické pole, pokud není řečeno jinak	T
$E_N$	...	Energie Landauovy hladiny	J nebo eV
$H$	...	Hamiltonián	J nebo eV
$K$	...	Bod v Brillouinově zóně	–
$H$	...	Vrchol Brillouinovy zóny	–

**Konstanty:**

<b>Značka</b>	<b>...</b>	<b>Název</b>	<b>Hodnota</b>	<b>Jednotka</b>
$\hbar$	...	Redukovaná Planckova konstanta	$1,055 \cdot 10^{-34}$	J · s
$m_e$	...	Klidová hmotnost elektronu	$9,109 \cdot 10^{-31}$	kg
$k_B$	...	Boltzmannova konstanta	$1,381 \cdot 10^{-23}$	J · K <sup>-1</sup>
$e$	...	Náboj elektronu	$1,602 \cdot 10^{-19}$	C
$\mu_B$	...	Bohrův magneton	$5,788 \cdot 10^{-5}$	eV · T <sup>-1</sup>
$\gamma_0$	...	Parametr hodnoty energie	3,37	eV
$\gamma_1$	...	Parametr hodnoty energie	0,363	eV
$\gamma_2$	...	Parametr hodnoty energie	-0,0243	eV
$\gamma_3$	...	Parametr hodnoty energie	0,31	eV
$\gamma_4$	...	Parametr hodnoty energie	0,07	eV
$\gamma_5$	...	Parametr hodnoty energie	0,05	eV
$\gamma_6$	...	Parametr hodnoty energie	-0,007	eV
$c_0$	...	Vzdálenost vrstev grafitu	$0,335 \cdot 10^{-9}$	m
$a_0$	...	Vzdálenost atomů uhlíku	$0,246 \cdot 10^{-9}$	m
$g$	...	Landého g-faktor	2,5	—

# SEZNAM PŘÍLOH

Příloha 1 - Zdrojový kód pro výpočet SWM Hamiltoniánu bez přítomnosti magnetického pole .....	1
Příloha 2 - Zdrojový kód pro analýzu cyklotronové rezonance.....	5
Příloha 3 - Zdrojový kód pro analýzu Shubnikových-de Haasových oscilací.....	24

# Příloha 1 - Zdrojový kód pro výpočet SWM Hamiltoniánu bez přítomnosti magnetického pole

```
clear all
close all

%Coordinates along kz axis
kx1=0;
ky1=0;
kz1=-0.5:0.001:0.5;
kz2=0:0.001:0.5;

%Coordinates along kx,ky at K and H points
k=-0.015:0.0001:0.015;
%k=-0.002:0.0001:0.002;
[kx,ky]=meshgrid(k);
kzK=0;
kzH=0.5;

%Band energies along kz
E1=Eband(kx1,ky1,kz1,1)
E2=Eband(kx1,ky1,kz1,2);
E3=Eband(kx1,ky1,kz1,3);
E4=Eband(kx1,ky1,kz1,4);
E5=Eband(kx1,ky1,kz2,1);
E6=Eband(kx1,ky1,kz2,2);
E7=Eband(kx1,ky1,kz2,3);
E8=Eband(kx1,ky1,kz2,4);

%Band energies at kz=0 (K point)
E2K=Eband(kx,ky,kzK,2);
E3K=Eband(kx,ky,kzK,3);

%Band energies at kz=0.5 (H point)
E2H=Eband(kx,ky,kzH,2);
E3H=Eband(kx,ky,kzH,3);

%Plotting of Band energies along kz
figure(1)
plot(kz1,E1(:),'LineWidth',2)
hold on
plot(kz1,E2(:),'LineWidth',2)
plot(kz1,E3(:),'LineWidth',2)
plot(kz1,E4(:),'LineWidth',2)
xlabel('kz (2\pi/c_0)')
ylabel('Energie (eV)')
fig = gcf;
set( findall(fig, '-property', 'fontsize'), 'fontsize', 18)

%Plotting detail of degenerate Band energies along kz
figure(2)
plot(kz2,1000*E5(:),'LineWidth',2)
hold on
plot(kz2,1000*E6(:),'LineWidth',2)
plot(kz2,1000*E7(:),'LineWidth',2)
plot(kz2,1000*E8(:),'LineWidth',2)
```

```

xlabel('kz (2\pi/c_0)')
ylim([-50 10])
ylabel('Energie (meV)')
fig = gcf;
set( findall(fig, '-property', 'fontsize'), 'fontsize', 18)

%Plotting of band energies at K point
figure(3)
surf(kx,ky,1000*E2K,'edgecolor', 'none');
hold on
[M1,c1]=contour3(kx,ky,1000*E2K,[-53.15,-53.15],'-b');
[M2,c2]=contour3(kx,ky,1000*E2K,[-50,-50],'-r');
surf(kx,ky,1000*E3K,'edgecolor', 'none');
[M2,c2]=contour3(kx,ky,1000*E3K,[-40.6, -40.6],'-b');
c1.LineWidth=2;
c2.LineWidth=2;
colormap hot
colorbar
xlabel('kx (2\pi/c0)')
ylabel('ky (2\pi/c0)')
zlabel('Energie (meV)')

%Plotting of band energies at H point
figure(4)
surf(kx,ky,1000*E2H,'edgecolor', 'none');
hold on
[M1,c3]=contour3(kx,ky,E2H,[0,0],'-b');
surf(kx,ky,1000*E3H,'edgecolor', 'none');
[M1,c4]=contour3(kx,ky,E3H,[0,0],'-b');
colormap hot
colorbar
xlabel('kx (2\pi/c0)')
ylabel('ky (2\pi/c0)')
zlabel('Energie (meV)')

function E_N=Eband(kx,ky,kz,N)
    % Gets the eigenvalues of each hamiltonian matrix for each component
    of kx,ky,kz
    % Input: wave vectors kx,ky,ky normalized by 2*pi/c0, c0= 3.35A
    % supposes that kx and ky are generated by [kx,ky]=meshgrid(...)
    % N=1,2,3,4: each band index
    % Output: Matrix of dimensions Lx*Ly*Lz with the energies of the
    band N.
    % being Lx the length of kx taken as a vector

    L=size(kx); % since kx is generated by meshgrid, kx is a matrix of
    dimensions Lx*Ly
    Lx=L(1);
    Ly=L(2);
    Lz=length(kz);

    %Initializing matrix
    E_N=zeros(L(1),L(2),Lz);

    % Calculating energies
    for kk=1:Lz
        for jj=1:Ly
            for ii=1:Lx
                dummyE=Hamiltonian(kx(ii,jj),ky(ii,jj),kz(kk));

```

```

        E_N(ii,jj,kk)= dummyE(N);
    end
end
end
end

function E_N=Hamiltonian(kx,ky,kz)
% Hamiltonian of graphite considering hopping parameter gamma_3!=0
% Input:
% kx,ky,kz: wave vectors normalized by 2*pi/c0, c0= 3.35A
% Output: E_N= Energies of the 4 bands. length(E_N)==4

% Constants
a0=2.46e-10; % distance between carbon atoms in single graphite
lattice
e=1.6e-19; % elementary charge
hbar=1.055e-34; % Reduced Planck constant
h=hbar*2*pi; % Planck constant
muB=5.789e-5; % Bohr magneton
gs = 2.5; % value for g factor

% Hopping parameters,
g0= 3.37;
g1= 0.363;
g2= -0.0243;
g3= 0.31;
g4= 0.07;
g5= 0.05;
Delta= -0.007; % It corresponds to gamma_6

%Normalizing kx and ky
c0=3.35e-10;
kx=kx*2*pi/c0;
ky=ky*2*pi/c0;

GAMMA= 2*cos(kz*pi);
sigma= sqrt(3).*a0.*sqrt(kx.^2 +ky.^2)./2;

alpha=alphaf(kx,ky);

e1= Delta +g1*GAMMA +0.5*g5*GAMMA.^2;
e2= Delta -g1*GAMMA +0.5*g5*GAMMA.^2;
e3= 0.5*g2*GAMMA.^2;

H_13= 1/sqrt(2).* (-g0+g4.*GAMMA).*sigma.*exp(1j.*alpha);
H_23= 1/sqrt(2).* (g0+g4.*GAMMA).*sigma.*exp(1j.*alpha);
H_33= g3.*GAMMA.*sigma.*exp(1j.*alpha);

H= [e1,0,H_13,conj(H_13); 0,e2,H_23,-conj(H_23);
conj(H_13),conj(H_23),e3,H_33; H_13,-H_23,conj(H_33),e3];

[E_N]= eig(H);
E_N=sort(E_N);
end

function a=alphaf(kx,ky)
% Angle with respect to the ky axis
if ky==0 & kx==0
    a=0;

```

```
elseif kx>=0 & ky>=0
    a=atan(-kx/ky);
elseif kx<=0 & ky>=0
    a=atan(-kx./ky);
elseif kx<=0 & ky<=0
    a=pi+atan(-kx/ky);
elseif kx>=0 & ky<=0
    a=-pi+atan(-kx/ky);
end
end
```



# Příloha 2 - Zdrojový kód pro analýzu cyklotronové rezonance

```
# -*- coding: utf-8 -*-
import numpy as np
from scipy.constants import e, pi, c, Boltzmann as kb, m_e
from scipy import integrate
import peakdetect as pk
import matplotlib.pyplot as plt
import Graphite_Functions as gf
import FittingFunctions as ff
import time

kb=kb/e #Boltzmann constant in eV/K
hbar=6.582119624E-16 #Reduced Planck constant in eV*s
az= 3.35E-10 #lattice parameter in z direction. units: m
'''Loading data'''
A1=np.load('Bands data/areaPlus_4.npy') *(2*pi*hbar/az)**2 #
Area[E,kz] rows correspond to energy, columns to kz
A2=np.load('Bands data/areaMinus_4.npy') *(2*pi*hbar/az)**2 # Units:
eV^2 s^2/m^2
kz=np.load('Bands data/kz_4.npy')
Econtours1=np.load('Bands data/Econtours1_4.npy')
Econtours2=np.load('Bands data/Econtours2_4.npy')
#Fourier transforms
# Pxn1[E,kz,n] with len(n)=120. In the case of
# disconnected energy contours, the first 60 entries in n
# correspond to central energy contour (central pocket)
# and the rest 60 entries to the leg contour.
# In the case of a connected energy contour, the last
# 60 entries are 0
Pxn1=np.load('Bands data/Pxn_plus_6.npy')
Pyn1=np.load('Bands data/Pyn_plus_6.npy')
w1=2*pi*np.load('Bands data/w_plus_6.npy') #multiplying by 2*pi to get
the output of fftfreq in angular frequency. See test2.py
Pxn2=np.load('Bands data/Pxn_minus_6.npy')
Pyn2=np.load('Bands data/Pyn_minus_6.npy')
w2=2*pi*np.load('Bands data/w_minus_6.npy')

'''----- INPUT PARAMETERS -----
-----'''
#General parameters
Ef_start=-0.024 #Fermi energy in eV
Ef_step=-0.001 #Size of each step between each simulation
(Ef_start is being decreased to lower values by this Ef_step value)
ef_count= 1 #number of runs of the simulation, given the Fermi
energy decreased by step

#Main functions
run_sim = False #Allows the simulation
run_fermi = False #Allows plotting of ds_xx peaks per Ef in dependance
on B
run_plotting = True #Allows plotting of previously acquired data
run_overlap = True #Overlaps measurement data with simulation
run_angle = True #Allows plotting of angle dependance on B for
measurement data
```

```

run_angle_comparison = True #Allows plotting of angle dependance on B
for all measurement data in one graph

#Fermi energy plotting custom parameters
delete_peaks_fermi = False #deletes peaks that are not useful for
fermi energy calculation (only 3 peaks needed)
deleted_peaks = 1 #number of peaks to delete

#Plotting, if run_plotting is true
plot_sxx_to_B = False #Plots sigma_xx in dependance on B
plot_dsxx_to_B = True #Plots derigation of sigma_xx in dependance on B
plot_sxx_to_wwc = False #plots sigma_xx in dependance on omega/omega
c0
plot_dsxx_to_wwc = False #plots derivation of sigma_xx in dependance
on omega/omega c0

#Plotting, plot_angle_sum must be true to enable plot_Bperpendicular
and plot_volt_dependance
#works properly for Fr_det_min = 0 and Fr_det_max = 0.425
plot_angle_onebyone = False #Plots every single measurement data from
grenoble, one by one, with Fr_det_min+max resolution
plot_angle_sum = True #Plots only the peaks development with angle in
dependance on Bexp
plot_Bperpendicular = True #Plots only the peaks development with
angle in dependance on perpendicular component of Bexp
#plot_volt_dependance is for config only, often causes error because
of different length of lists of detected peaks, which is dependant on
the selected Fr_sum_min/max field window because of normalization of
these data
plot_volt_dependance = True #Plots voltage dependance of data to
ensure that zero angle value is correct
custom_peak_detection = True #Detect missing peaks for Fr_det_min = 0
and Fr_det_max = 0.425 in grenoble file 2 and 6
#might be necessary to set custom_peak_delete to True if running
plot_Bperpendicular and plot_volt_dependance
custom_peak_delete = True #Deletes peaks for Fr_det_min = 0 and
Fr_det_max = 0.425 that emerge with higher magnetic field from file 13
up
smooth_const = 25 #25, smoothing constant of grenoble measurement data
lookahead_const = 15 #15, lookahead constant of grenoble measurement
data for peak detection
peakdetect_const = 0.15 #0.15, minimum value to detect peaks in
grenoble measurement data
counter_angle_original = 2 #2, first measurement data file from
grenoble with usable peaks
last_measurement_data = 18 #18, last measurement data file from
grenoble with usable peaks
multiplier_angle_comparison = 2.85 #multiplies the resulting
signal so its easier to see the peaks

#Overlap of measurement data with simulation data
plot_complete_view = True #Plots complete view of overlap of
measurement data with simulation data
plot_detailed_view = True #Plots detailed view of overlap of
measurement data with simulation data
Fr_det_min = 0.01 #detailed section of that field, min value
Fr_det_max = 0.425 #detailed section of that field, max value
Fr_sum_min = 0 #detailed section of that field, min value for summary
of run_angle

```

```

Fr_sum_max = 0.425 #detailed section of that field, max value for
summary of angles run_angle
Fr_comp_min = -0.425 #detailed section of field for
run_angle_comparison, min value
Fr_comp_max = 0.425 #detailed section of field for
run_angle_comparison, max value
skiprowsvar = 1 #30 for classical files, 1 for corrected files
MeasDataFileName="Experimental data/Bulgarian graphite
HFEPR/corrected_1-Graphine Bulgarian_2--2T 210GHz.dat" #Path to
measurement data
data_offset = 0.0266 #0.0247 #zero is shifted by 24,7mT
Fr_val = 16.5 #Magnetic field range in the plot, must be high enough
meas_full_y_offset = 0 #0 for normal data, -0.905 for zero corrected
data
meas_full_multiplier = 1 #1 for normal data, 10 for zero corrected
data
meas_det_y_offset = 0#0 for normal data, -0.94 for zero corrected data
meas_det_multiplier = 1 #1 for normal data, 14 for zero corrected data

#Simulation parameters
B=np.append(np.arange(0.01,0.15,0.0002), np.arange(0.15,0.425,0.001))
f=190E9#measurement frequency of microwaves
T=5 #temperature in K
a=0.08E-3 #proportionality constant when G depends on sqrt(B):
G=a*sqrt(B). a in eV
G= 20E-6 #broadening parameter in eV, now completelyreplaced with a
mc0=0.06*m_e #effective mass of the carriers in graphite, in kg

#Peak detection parameters, normalized
delta_s_b = 0.01 #min. difference in sigma in dependance on B to be
recognized as peak
delta_ds_b = 0.01 #min. diff in deriv. of sigma in dependance on B
delta_s_wwc = 0.01 #min. difference in sigma in dependance on w/wc0 to
be recognized as peak
delta_ds_wwc = 0.01 #min. difference in derivation of sigma in
dependance on w/wc0 to be recognized as peak
la_range = 30 #Lookahead range, how many points is compared between
each other

w=2*pi*f #Microwave frequency in Hz
wc0= e*B/mc0 #cyclotron frequency w.r.t the magnetic field. in Hz
ef_counter = 0
Ef=Ef_start

'''Calculating the optical conductivity'''
def conductivity3(B,w,a):
    '''Calculates the optical conductivity, accepts B as a vector. Now
w1 and w2 are real cyclotron frequencies
instead of integer numbers'''
    t1=time.time()
    sigma_xx=np.zeros(len(B))
    dE1=Econtours1[1]-Econtours1[0]
    dE2=Econtours2[1]-Econtours2[0]
    dkz=kz[1]-kz[0]
    for ib,BB in enumerate(B):
        print('magnetic field', ib, ' out of ', len(B) )
        dummyl_cent= np.nansum(nl_cent**2 *(Pyl_cent/BB)**2/( hbar**2
*(w -BB*w1_cent )**2 +(a*np.sqrt(BB))**2), -1)

```

```

        dummy1_leg= np.nansum(n1_leg**2 *(Py1_leg/BB)**2/( hbar**2 *(w
-BB*w1_leg ) **2 +(a*np.sqrt(BB))**2), -1)
        dummy2_cent= np.nansum(n2_cent**2 *(Py2_cent/BB)**2/( hbar**2
*(w -BB*w2_cent ) **2 +(a*np.sqrt(BB))**2), -1)
        dummy2_leg= np.nansum(n2_leg**2 *(Py2_leg/BB)**2/( hbar**2 *(w
-BB*w2_leg ) **2 +(a*np.sqrt(BB))**2), -1)
        sigma_xx[ib]= np.nansum(-
1*df1[:,np.newaxis]*(a*np.sqrt(BB))*(m1_cent/m1_cent**2)
*dummy1_cent)*dE1*dkz*2*pi/az \
+np.nansum(-
1*df1[:,np.newaxis]*3*(a*np.sqrt(BB))*(m1_leg/m1_leg**2)
*dummy1_leg)*dE1*dkz*2*pi/az \
+np.nansum(-
1*df2[:,np.newaxis]*(a*np.sqrt(BB))*(m2_cent/m2_cent**2)
*dummy2_cent)*dE2*dkz*2*pi/az \
+np.nansum(-
1*df2[:,np.newaxis]*3*(a*np.sqrt(BB))*(m2_leg/m2_leg**2)
*dummy2_leg)*dE2*dkz*2*pi/az
        print('sigma_xx[ib]', sigma_xx[ib])
        t2=time.time()
        print('time for conductivity calculation with for loop ', t2-t1)
        return sigma_xx

'''MAIN LOOP'''
if run_sim == True:
    while ef_counter < ef_count:
        '''calculating df/dE to simplify calculations later'''
        df1= gf.dfdE(Econtours1, Ef, T)
        df2= gf.dfdE(Econtours2, Ef, T)

        '''slicing Econtour so we perform less calculations'''
        print('length before slicing E1, E2', len(Econtours1),
len(Econtours2))
        mask1=np.where(1E-1<np.abs(df1))
        mask2=np.where(1E-1<np.abs(df2))

        Econtours1=Econtours1[mask1]
        Econtours2=Econtours2[mask2]
        A1=A1[mask1[0],:]
        A2=A2[mask2[0],:]
        Pxn1=Pxn1[mask1[0],:,:]
        Pyn1=Pyn1[mask1[0],:,:]
        w1=w1[mask1[0],:,:]
        Pxn2=Pxn2[mask2[0],:,:]
        Pyn2=Pyn2[mask2[0],:,:]
        w2=w2[mask2[0],:,:]

        df1= gf.dfdE(Econtours1, Ef, T)
        df2= gf.dfdE(Econtours2, Ef, T)
        print('length after slicing E1, E2', len(Econtours1),
len(Econtours2))

        '''Separating components of cyclotron orbits'''
        Px1_cent, Px1_leg= Pxn1[:,::,60], Pxn1[:,::,60:]
        Py1_cent, Py1_leg= Pyn1[:,::,60], Pyn1[:,::,60:]
        w1_cent, w1_leg= w1[:,::,60], w1[:,::,60:]
        Px2_cent, Px2_leg= Pxn2[:,::,60], Pxn2[:,::,60:]
        Py2_cent, Py2_leg= Pyn2[:,::,60], Pyn2[:,::,60:]
        w2_cent, w2_leg= w2[:,::,60], w2[:,::,60:]

```

```

'''dealing with problematic points: they are close to the
points where both bands
touch each other. The Fourier transform is inaccurate in such
points, that is why
we turn them into zero'''
#The bands touch at four points, the center point and three
legs
ind1_cent= np.where(Py1_cent[:, :, 1]!=np.max(Py1_cent, -1))
ind1_leg= np.where(Py1_leg[:, :, 1]!=np.max(Py1_leg, -1))
ind2_cent= np.where(Py2_cent[:, :, 1]!=np.max(Py2_cent, -1))
ind2_leg= np.where(Py2_leg[:, :, 1]!=np.max(Py2_leg, -1))
Px1_cent[ind1_cent[0], ind1_cent[1], :] = np.zeros(60)
Py1_cent[ind1_cent[0], ind1_cent[1], :] = np.zeros(60)
Px1_leg[ind1_leg[0], ind1_leg[1], :] = np.zeros(60)
Py1_leg[ind1_leg[0], ind1_leg[1], :] = np.zeros(60)
Px2_cent[ind2_cent[0], ind2_cent[1], :] = np.zeros(60)
Py2_cent[ind2_cent[0], ind2_cent[1], :] = np.zeros(60)
Px2_leg[ind2_leg[0], ind2_leg[1], :] = np.zeros(60)
Py2_leg[ind2_leg[0], ind2_leg[1], :] = np.zeros(60)

'''frequencies translated to integer numbers: easier for
optical
conductivity calculations'''
n1_cent, n1_leg= w1_cent/w1_cent[:, :, 1, np.newaxis],
w1_leg/w1_leg[:, :, 1, np.newaxis]
n2_cent, n2_leg= w2_cent/w2_cent[:, :, 1, np.newaxis],
w2_leg/w2_leg[:, :, 1, np.newaxis]
n1_cent[np.isnan(n1_cent)], n1_leg[np.isnan(n1_leg)] = 0, 0
n2_cent[np.isnan(n2_cent)], n2_leg[np.isnan(n2_leg)] = 0, 0

'''Calculating the effective mass'''
# Effective mass in eV*s^2/m^2. Calculated as eB/wc (in S.I.
units,
# divided by e to get it in eV) B=1T in Fourier transf.
calculation
m1_cent, m1_leg =e*1/w1_cent[:, :, 1]/e, e*1/w1_leg[:, :, 1]/e
m2_cent, m2_leg =-e*1/w2_cent[:, :, 1]/e, -e*1/w2_leg[:, :, 1]/e
m1_cent[np.isinf(m1_cent)], m1_leg[np.isinf(m1_leg)] = 0, 0
m2_cent[np.isinf(m2_cent)], m2_leg[np.isinf(m2_leg)] = 0, 0
print('m2_center', m2_cent)

sigma_xx=conductivity3(B,w,a)
ds_xx=np.gradient(sigma_xx, B[1]-B[0])

'''Saving data'''
file_title = 'Ef_Sim/Ef_' + '{:.1f}'.format(Ef*1000) +
'meV.npz'
np.savez(file_title, B=B, sigma_xx=sigma_xx, ds_xx=ds_xx,
wwc0=w/wc0)

Ef = Ef + Ef_step
ef_counter += 1

'''Plotting of data, displays all the data of every simulation'''
if run_plotting == True:
    ef_counter = 0
    Ef = Ef_start
    while ef_counter < ef_count:

```

```

        name= '$f$ = '+{:n}'.format(f*1E-9) + ' GHz, $T$ = '
+{:n}'.format(T) + r' K, $E_{F}$ = '+{:n}'.format(Ef*1000)+' meV,
$a$ = '+str(a*1000)+' meV'
        file_title = 'Ef_Sim/Ef_' + '{:.1f}'.format(Ef*1000) +
'meV.npz'
        Loaded_data = np.load(file_title)
        '''Data normalization'''
        sigma_normalized = []
        ds_xx_normalized = []
        sval_max = abs(max(Loaded_data['sigma_xx'], key=abs))
        dsval_max = abs(max(Loaded_data['ds_xx'], key=abs))
        for svar in Loaded_data['sigma_xx']:
            sigma_normalized.append(svar/sval_max)
        for dsvar in Loaded_data['ds_xx']:
            ds_xx_normalized.append(dsvar/dsval_max)
        ''' PLOTS'''
        if plot_sxx_to_B == True:
            fig1_peaks = pk.peakdetect(sigma_normalized,
Loaded_data['B'], lookahead=la_range, delta=delta_s_b)
            fig1_hPeaks = np.array(fig1_peaks[0])
            fig1_lPeaks = np.array(fig1_peaks[1])
            fig,ax=plt.subplots()
            ax.plot(Loaded_data['B'], sigma_normalized)
            ax.plot(fig1_hPeaks[:,0], fig1_hPeaks[:,1], 'r+')
            plt.axis([Fr_det_min, Fr_det_max, -0.1, 1.1])
            plt.xlabel('$B$ (T)', fontsize=15)
            plt.ylabel('$\sigma_{xx}$ (arb.u.)', fontsize=15)
            plt.title(name)
        if plot_dsxx_to_B == True:
            fig2_peaks = pk.peakdetect(ds_xx_normalized,
Loaded_data['B'], lookahead=la_range, delta=delta_ds_b)
            fig2_hPeaks = np.array(fig2_peaks[0])
            fig2_lPeaks = np.array(fig2_peaks[1])
            fig,ax=plt.subplots()
            ax.plot(Loaded_data['B'], ds_xx_normalized)
            ax.plot(fig2_hPeaks[:,0], fig2_hPeaks[:,1], 'r+')
            ax.plot(fig2_lPeaks[:,0], fig2_lPeaks[:,1], 'k+')
            plt.axis([Fr_det_min, Fr_det_max, -1.1, 1.1])
            plt.xlabel('$B$ (T)', fontsize=18)
            plt.xticks(fontsize=13)
            plt.yticks(fontsize=13)
            plt.ylabel('$d\sigma_{xx}/dB$ (arb.u.)', fontsize=18)
            plt.title(name, fontsize=17)
            plt.gcf().subplots_adjust(left=0.16)
            plt.gcf().subplots_adjust(bottom=0.14)
        if plot_sxx_to_wwc == True:
            fig3_peaks = pk.peakdetect(sigma_normalized,
Loaded_data['wwc0'], lookahead=la_range, delta=delta_s_wwc)
            fig3_hPeaks = np.array(fig3_peaks[0])
            fig3_lPeaks = np.array(fig3_peaks[1])
            fig,ax=plt.subplots()
            ax.plot(Loaded_data['wwc0'],sigma_normalized)
            plt.axis([0,20, -0.1, 1.1])

plt.xticks([0,1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13,14,15,16,17,18,19,20])
            plt.xlabel('$\omega/\omega_c$', fontsize=15)
            plt.ylabel('$\sigma_{xx}$ (arb.u.)', fontsize=15)
            plt.title(name)
        if plot_dsxx_to_wwc == True:

```

```

        fig4_peaks = pk.peakdetect(ds_xx_normalized,
Loaded_data['wwc0'], lookahead=la_range, delta=delta_ds_wwc)
        fig4_hPeaks = np.array(fig4_peaks[0])
        fig4_lPeaks = np.array(fig4_peaks[1])
        fig,ax=plt.subplots()
        ax.plot(Loaded_data['wwc0'],ds_xx_normalized)
        plt.axis([0,20, -1.1, 1.1])
        plt.xlabel('$\omega/\omega_c$', fontsize=15)
        plt.ylabel('$d\sigma_{xx}/dB$ (arb.u.)', fontsize=15)
        plt.title(name)
    del Loaded_data.f
    Loaded_data.close()
    Ef = Ef + Ef_step
    ef_counter += 1

'''Plotting of data, displays only the dependance of peaks on Fermi
energy and magnetic field'''
if run_fermi == True:
    ef_counter = 0
    Ef = Ef_start
    datalist = []
    sizelist = []
    pk_ef = np.array([])
    fig,ax=plt.subplots()
    plt.axis([Fr_det_min,Fr_det_max,
Ef_start*1000+(Ef_step*1000*ef_counter)-(Ef_step*1000/2), Ef_start*1000-
(Ef_step*1000/2)])
    plt.xlabel('$B$ (T)', fontsize=15)
    plt.ylabel('$E_{F}$ (meV)', fontsize=15)
    while ef_counter < ef_count:
        file_title = 'Ef_Sim/Ef_' + '{:.1f}'.format(Ef*1000) +
'meV.npz'
        Loaded_data = np.load(file_title)

        '''Data normalization'''
        ds_xx_normalized = []
        dsval_max = abs(max(Loaded_data['ds_xx'], key=abs))
        for dsvar in Loaded_data['ds_xx']:
            ds_xx_normalized.append(dsvar/dsval_max)
        s_xx_normalized = []
        sval_max = abs(max(Loaded_data['sigma_xx'], key=abs))
        for svar in Loaded_data['sigma_xx']:
            s_xx_normalized.append(svar/sval_max)
        ef_peaks = pk.peakdetect(s_xx_normalized, Loaded_data['B'],
lookahead=la_range, delta=delta_ds_b)
        ef_hPeaks = np.array(ef_peaks[0])
        if delete_peaks_fermi == True:
            if Ef < -0.02:
                ef_hPeaks = np.delete(ef_hPeaks, 0, 0)
                counter_aux = 0
                while counter_aux <= (deleted_peaks-1):
                    ef_hPeaks = np.delete(ef_hPeaks, 0, 0)
                    counter_aux += 1
                ef_hPeaks = np.delete(ef_hPeaks, 4, 0)

        ax.plot(ef_hPeaks[:,0], np.full(len(ef_hPeaks[:,1]), Ef*1000),
'ro')
        print("Shape of peaks for Ef= "+'{:.1f}'.format((Ef)*1000)+"")
    ")

```

```

print(ef_hPeaks.shape)
datalist.append(ef_hPeaks[:,0])
sizelist.append(ef_hPeaks[:,0].shape)

del Loaded_data.f
Loaded_data.close()
Ef = Ef + Ef_step
ef_counter += 1
plt.title('$f$ = '+{:n}'.format(f*1E-9) + ' GHz, $T$ = '
+{:n}'.format(T) + r' K, $E_{F}$ from
'+{:1f}'.format(Ef_start*1000)+' to '+{:1f}'.format((Ef-
Ef_step)*1000)+' meV')

print("List of all detected peaks")
print(datalist)
print("List of shapes of these peaks")
print(sizelist)
print("Largest value on previous list")
largest_val=max(sizelist)
print(largest_val[0])
Ef = Ef_start

pk_1 = np.array([])
pk_2 = np.array([])
pk_3 = np.array([])
pk_4 = np.array([])
for sup_x in range(ef_count):
    for sup_y in range(largest_val[0]):
        if sup_y == 0:
            pk_1 = np.append(pk_1,datalist[sup_x][sup_y])
        if sup_y == 1:
            pk_2 = np.append(pk_2,datalist[sup_x][sup_y])
        if sup_y == 2:
            pk_3 = np.append(pk_3,datalist[sup_x][sup_y])
        if sup_y == 3:
            pk_4 = np.append(pk_4,datalist[sup_x][sup_y])
    pk_ef = np.append(pk_ef,Ef*1000)
    Ef = Ef + Ef_step

print("Peaks sorted by fermi energy")
print(pk_1)
print(pk_2)
print(pk_3)
print(pk_4)
print("Corresponding Fermi energy list of the same size")
print(pk_ef)

eq1 = np.polyfit(pk_1, pk_ef, 2)
eq2 = np.polyfit(pk_2, pk_ef, 2)
eq3 = np.polyfit(pk_3, pk_ef, 2)
eq4 = np.polyfit(pk_4, pk_ef, 2)
ax.plot(pk_1, eq1[0]*pk_1**2+eq1[1]*pk_1+eq1[2], 'g')
ax.plot(pk_2, eq2[0]*pk_2**2+eq2[1]*pk_2+eq2[2], 'b')
ax.plot(pk_3, eq3[0]*pk_3**2+eq3[1]*pk_3+eq3[2], 'y')
ax.plot(pk_4, eq4[0]*pk_4**2+eq4[1]*pk_4+eq4[2], 'k')

print("Equation of the first peaks set (green): " +str(eq1[0])+" *
x^2 + "+str(eq1[1])+" * x + "+str(eq1[2]))

```



```

    print("Equation of the second peaks set (blue): " +str(eq2[0])+" *
x^2 + "+str(eq2[1])+" * x + "+str(eq2[2]))
    print("Equation of the third peaks set (yellow): " +str(eq3[0])+"
* x^2 + "+str(eq3[1])+" * x + "+str(eq3[2]))
    print("Equation of the fourth peaks set (black): " +str(eq4[0])+"
* x^2 + "+str(eq4[1])+" * x + "+str(eq4[2]))

'''Measurement data overlapping with simulation'''
if run_overlap == True:
    ef_counter = 0
    Ef = Ef_start

    MeasData =
np.loadtxt(open(MeasDataFileName,'r'),skiprows=skiprowsvar)
    B_exp=(MeasData[:,0]/1000)+data_offset
    ds_exp=MeasData[:,1]
    B_exp_det = B_exp
    ds_exp_det = ds_exp
    B_exp = B_exp[np.logical_and(-Fr_val<B_exp,B_exp<Fr_val)]
    B_exp_det =
B_exp_det[np.logical_and(Fr_det_min<B_exp_det,B_exp_det<Fr_det_max)]
    ds_exp = 1E6*ds_exp[np.logical_and(-Fr_val<B_exp,B_exp<Fr_val)]
    ds_exp_det =
ds_exp[np.logical_and(Fr_det_min<B_exp,B_exp<Fr_det_max)]

    '''Measurement data normalization'''
    meas_full_normalized = []
    meas_detail_normalized = []
    meas_full_max = abs(max(ds_exp, key=abs))
    meas_detail_max = abs(max(ds_exp_det, key=abs))
    for mvar in ds_exp:

meas_full_normalized.append(((mvar/meas_full_max)*meas_full_multiplier
)+meas_full_y_offset)
        for nvar in ds_exp_det:

meas_detail_normalized.append(((nvar/meas_detail_max)*meas_det_multipl
ier)+meas_det_y_offset)

    while ef_counter < ef_count:
        name= '{:n}'.format(f*1E-9) + 'GHz_'+'{:n}'.format(Ef*1000) +
'meV_' + '{:n}'.format(T) + 'K'
        file_title = 'Ef_Sim/Ef_' + '{:.1f}'.format(Ef*1000) +
'meV.npz'
        Loaded_data = np.load(file_title)

    '''Simulation data normalization'''
    ds_xx_normalized = []
    dsval_max = abs(max(Loaded_data['ds_xx'], key=abs))
    for dsvar in Loaded_data['ds_xx']:
        ds_xx_normalized.append(dsvar/dsval_max)
    s_xx_normalized = []
    sval_max = abs(max(Loaded_data['sigma_xx'], key=abs))
    for svar in Loaded_data['sigma_xx']:
        s_xx_normalized.append(svar/sval_max)

    if plot_complete_view == True:
        fig,ax=plt.subplots() #overlap of measurement with
simulation, complete view

```

```

ax.plot(B_exp, meas_full_normalized, 'b')
plt.xlabel('$B_{exp}$ (T)$', fontsize=15)
plt.ylabel('$d\sigma_{xx}/dB$', fontsize=15)
plt.title("$E_{f}$ = "+ '{:.1f}'.format((Ef)*1000)+'meV')

if plot_detailed_view == True:
    fig,ax=plt.subplots() #overlap of measurement with
simulation, detailed view
    ax.plot(B_exp_det, meas_detail_normalized, 'b')
    ax.plot(Loaded_data['B'], ds_xx_normalized, 'r')
    plt.axis([Fr_det_min, Fr_det_max, -1.1, 1.1])
    plt.xlabel('$B$ (T)', fontsize=20)
    plt.ylabel('$d\sigma_{xx}/dB$ (arb.u.)', fontsize=20)
    plt.title("$E_{f}$ = "+ '{:.1f}'.format((Ef)*1000)+' meV,
$a$ = '+str(a*1000)+' meV', fontsize=20)
    plt.xticks(fontsize = 13)
    plt.yticks(fontsize = 13)
    plt.gcf().subplots_adjust(left=0.16)
    plt.gcf().subplots_adjust(bottom=0.14)

    integrated_s = integrate.cumtrapz(ds_exp_det,B_exp_det)
    B_exp_det2 = B_exp_det[1:]
    lin_params=np.polyfit(B_exp_det2,integrated_s,1)
    base= lin_params[1] + lin_params[0]*B_exp_det2
    integrated_s = integrated_s - base
    ints_xx_normalized = []
    intsvl_max = abs(max(integrated_s, key=abs))
    for intsvr in integrated_s:
        ints_xx_normalized.append(((intsvr/intsvl_max)*0.8)+0.15)

    fig,ax=plt.subplots() #overlap of measurement with simulation,
detailed view
    ax.plot(B_exp_det2, ints_xx_normalized, 'b')
    ax.plot(Loaded_data['B'], s_xx_normalized, 'r')
    plt.axis([Fr_det_min, Fr_det_max, -1.1, 1.1])
    plt.xlabel('$B$ (T)$', fontsize=15)
    plt.ylabel('$d\sigma_{xx}/dB$ (arb.u.)', fontsize=15)
    plt.title("$E_{f}$ = "+ '{:.1f}'.format((Ef)*1000)+'meV')

    del Loaded_data.f
    Loaded_data.close()
    Ef = Ef + Ef_step
    ef_counter += 1

def load_angle_data(dummy_counter):
    switcher={
        1: "Experimental data/Rotated_graphite/001-190GHz-NG-0-
401V.dat",
        2: "Experimental data/Rotated_graphite/002-190GHz-NG-0-
453V.dat",
        3: "Experimental data/Rotated_graphite/003-190GHz-NG-0-
502V.dat",
        4: "Experimental data/Rotated_graphite/004-190GHz-NG-0-
552V.dat",
        5: "Experimental data/Rotated_graphite/005-190GHz-NG-0-
602V.dat",
        6: "Experimental data/Rotated_graphite/006-190GHz-NG-0-
651V.dat",

```

```

        7: "Experimental data/Rotated_graphite/007-190GHz-NG-0-
700V.dat",
        8: "Experimental data/Rotated_graphite/008-190GHz-NG-0-
752V.dat",
        9: "Experimental data/Rotated_graphite/009-190GHz-NG-0-
800V.dat",
        10: "Experimental data/Rotated_graphite/010-190GHz-NG-0-
852V.dat",
        11: "Experimental data/Rotated_graphite/011-190GHz-NG-0-
902V.dat",
        12: "Experimental data/Rotated_graphite/012-190GHz-NG-0-
954V.dat",
        13: "Experimental data/Rotated_graphite/013-190GHz-NG-1-
002V.dat",
        14: "Experimental data/Rotated_graphite/014-190GHz-NG-1-
050V.dat",
        15: "Experimental data/Rotated_graphite/015-190GHz-NG-1-
103V.dat",
        16: "Experimental data/Rotated_graphite/016-190GHz-NG-1-
151V.dat",
        17: "Experimental data/Rotated_graphite/017-190GHz-NG-1-
205V.dat",
        18: "Experimental data/Rotated_graphite/018-190GHz-NG-1-
250V.dat"
    }
    return switcher.get(dummy_counter, "Error: File does not exist")

def load_angle(dummy_counter):
    #var_angle = -36.14
    var_angle = -35.4
    switcher={
        1: ((0.401/0.01389)+var_angle),
        2: ((0.453/0.01389)+var_angle),
        3: ((0.502/0.01389)+var_angle), #0°
        4: ((0.552/0.01389)+var_angle),
        5: ((0.602/0.01389)+var_angle),
        6: ((0.651/0.01389)+var_angle),
        7: ((0.700/0.01389)+var_angle),
        8: ((0.752/0.01389)+var_angle),
        9: ((0.800/0.01389)+var_angle),
        10: ((0.852/0.01389)+var_angle),
        11: ((0.902/0.01389)+var_angle),
        12: ((0.954/0.01389)+var_angle),
        13: ((1.002/0.01389)+var_angle),
        14: ((1.050/0.01389)+var_angle),
        15: ((1.103/0.01389)+var_angle),
        16: ((1.151/0.01389)+var_angle),
        17: ((1.205/0.01389)+var_angle),
        18: ((1.250/0.01389)+var_angle)
    }
    return switcher.get(dummy_counter, "Error: Angle does not exist")

def load_offset(dummy_counter):
    #'''
    switcher={
        1: 0,
        2: 0.003026,
        3: -0.0055945,
        4: -0.0053485,

```

```

5: 0.004586,
6: -0.005935,
7: 0.0047735,
8: -0.00519,
9: 0.0052195,
10: -0.005102,
11: 0.0052605,
12: -0.00519,
13: 0.005657,
14: -0.0061285,
15: 0.0071605,
16: -0.006703,
17: 0.00563,
18: -0.0081165
}
return switcher.get(dummy_counter, "Error: Offset does not exist")

'''Angle dependance on magnetic field plotting'''
if run_angle == True:

    if plot_angle_sum == True:
        fig2, ax2=plt.subplots()
        plt.xlabel('$B$ (T)', fontsize=20)
        plt.ylabel('$\Upsilon$hel$ ($^\circ$)', fontsize=20)
        plt.title("Vývoj vybraných vrcholů", fontsize=20)
        plt.xticks(fontsize=15)
        plt.yticks(fontsize=15)
        plt.gcf().subplots_adjust(bottom=0.15)

        fig6, ax6=plt.subplots()
        plt.xlabel('$B$ (T)', fontsize=20)
        plt.ylabel('$\Upsilon$hel$ ($^\circ$)', fontsize=20)
        plt.title("Vývoj všech vrcholů", fontsize=20)
        plt.xticks(fontsize=15)
        plt.yticks(fontsize=15)
        plt.gcf().subplots_adjust(bottom=0.15)

        if plot_Bperpendicular == True:
            fig3, ax3=plt.subplots()
            plt.xlabel(r'$B_{\bot}$ (T)', fontsize=15)
            plt.ylabel('$\Upsilon$hel$ ($^\circ$)', fontsize=15)
            plt.xticks(fontsize=12)
            plt.yticks(fontsize=12)
            plt.title("\Upsilonhel od
"+'{:.1f}'.format(load_angle(counter_angle_original))+"$^\circ$ do
"+'{:.1f}'.format(load_angle(last_measurement_data))+"$^\circ$, kosinus
$\Phi$", fontsize=15)
            if plot_volt_dependance == True:
                fig4, ax4=plt.subplots()
                plt.xlabel('$1/B$ (T$^{-1}$)', fontsize=15)
                plt.ylabel(r'$\cos(\theta)$', fontsize=15)
                plt.title("Vývoj napětí", fontsize=15)
                plt.xticks(fontsize=12)
                plt.yticks(fontsize=12)

datalist_angle = []
sizelist_angle = []
list_x = []
list_y = []

```

```

pk_angle = np.array([])
counter_angle = counter_angle_original
while counter_angle <= last_measurement_data:
    loaded_angle_data = load_angle_data(counter_angle)
    AngleData =
np.loadtxt(open(loaded_angle_data,'r'),skiprows=30)
    loaded_offset = load_offset(counter_angle)

    B_ang = (AngleData[:,0])+loaded_offset
    ds_ang = AngleData[:,1]
    B_ang_det = B_ang
    ds_ang_det = ds_ang

    B_ang = B_ang[np.logical_and(-Fr_val<B_ang,B_ang<Fr_val)]
    B_ang_det =
B_ang_det[np.logical_and(Fr_sum_min<B_ang_det,B_ang_det<Fr_sum_max)]
    ds_ang = ds_ang[np.logical_and(-Fr_val<B_ang,B_ang<Fr_val)]
    ds_ang_det =
ds_ang[np.logical_and(Fr_sum_min<B_ang,B_ang<Fr_sum_max)]
    ds_smooth = ff.smooth(ds_ang_det, smooth_const)

    '''Measurement data normalization'''
    angle_normalized = []
    angle_max = abs(max(ds_smooth, key=abs))
    for ovar in ds_smooth:
        angle_normalized.append(ovar/angle_max)

    '''Peak Detect'''
    angle_peaks = pk.peakdetect(angle_normalized, B_ang_det,
lookahead=lookahead_const, delta=peakdetect_const)
    angle_hPeaks = np.array(angle_peaks[0])
    angle_lPeaks = np.array(angle_peaks[1])

    if custom_peak_detection == True:
        if ((counter_angle == 3) and (Fr_det_min <= 0.185) and
(Fr_det_max >= 0.2015)) == True:
            B_ang_custom3 = B_ang
            B_ang_custom3 =
B_ang_custom3[np.logical_and(0.185<B_ang_custom3,B_ang_custom3<0.2015)]
] #0.2015 first peak, 0.2125 second peak
            ds_ang_custom3 =
ds_ang[np.logical_and(0.185<B_ang,B_ang<0.2015)]
            ds_smooth_custom3 = ff.smooth(ds_ang_custom3,
smooth_const)
            angle_normalized_custom3 = []
            angle_max_custom3 = abs(max(ds_smooth, key=abs))
            for ovar_custom3 in ds_smooth_custom3:

angle_normalized_custom3.append(ovar_custom3/angle_max_custom3)
            angle_peaks_custom3 =
pk.peakdetect(angle_normalized_custom3, B_ang_custom3, lookahead=10,
delta=0.001)
            angle_hPeaks_custom3 =
np.array(angle_peaks_custom3[0])
            angle_hPeaks = np.concatenate((angle_hPeaks,
angle_hPeaks_custom3), axis=0)

            if ((counter_angle == 7) and (Fr_det_min <= 0.0275) and
(Fr_det_max >= 0.0335)) == True:

```

```

        B_ang_custom7 = B_ang
        B_ang_custom7 =
B_ang_custom7[np.logical_and(0.0275<B_ang_custom7,B_ang_custom7<0.0335
)]
        ds_ang_custom7 =
ds_ang[np.logical_and(0.0275<B_ang,B_ang<0.0335)]
        ds_smooth_custom7 = ff.smooth(ds_ang_custom7,
smooth_const)
        angle_normalized_custom7 = []
        angle_max_custom7 = abs(max(ds_smooth, key=abs))
        for ovar_custom7 in ds_smooth_custom7:

angle_normalized_custom7.append(ovar_custom7/angle_max_custom7)
        angle_peaks_custom7 =
pk.peakdetect(angle_normalized_custom7, B_ang_custom7, lookahead=10,
delta=0.01)
        angle_hPeaks_custom7 =
np.array(angle_peaks_custom7[0])
        angle_hPeaks = np.concatenate((angle_hPeaks,
angle_hPeaks_custom7), axis=0)

'''Plotting'''
if plot_angle_onebyone == True:
    x_hpeaks_plus = []
    x_lpeaks_plus = []
    x_hpeaks_minus = []
    x_lpeaks_minus = []
    fig,ax=plt.subplots() #angle data plotting
    ax.plot(B_ang_det, angle_normalized, 'b')
    largest_val_hpeaks = max(angle_hPeaks.shape)
    largest_val_lpeaks = max(angle_lPeaks.shape)
    for y_hvar in range(largest_val_hpeaks):
        x_hpeaks_actual = angle_hPeaks[:,0][y_hvar]
        y_hpeaks_actual = angle_hPeaks[:,1][y_hvar]
        if x_hpeaks_actual <= 0:
            ax.plot(x_hpeaks_actual, y_hpeaks_actual, 'k+')
            x_hpeaks_minus.append(x_hpeaks_actual)
        if x_hpeaks_actual >= 0:
            ax.plot(x_hpeaks_actual, y_hpeaks_actual, 'r+')
            x_hpeaks_plus.append(x_hpeaks_actual)
    for y_lvar in range(largest_val_lpeaks):
        x_lpeaks_actual = angle_lPeaks[:,0][y_lvar]
        y_lpeaks_actual = angle_lPeaks[:,1][y_lvar]
        if x_lpeaks_actual <= 0:
            ax.plot(x_lpeaks_actual, y_lpeaks_actual, 'g+')
            x_lpeaks_minus.append(x_lpeaks_actual)
        if x_lpeaks_actual >= 0:
            ax.plot(x_lpeaks_actual, y_lpeaks_actual, 'y+')
            x_lpeaks_plus.append(x_lpeaks_actual)
    x_lpeaks_minus=np.sort(x_lpeaks_minus)
    x_hpeaks_minus=np.sort(x_hpeaks_minus)
    x_lpeaks_plus=np.sort(x_lpeaks_plus)
    x_hpeaks_plus=np.sort(x_hpeaks_plus)
    print(" ")
    print("File MD"+str(counter_angle)+"", angle:
"+' {:.1f}'.format(load_angle(counter_angle))+""")
    print("One-by-one detected black
peaks:"+str(x_hpeaks_minus))

```

```

        print("One-by-one detected green peaks:
"+str(x_lpeaks_minus))
        print("One-by-one detected red peaks:
"+str(x_hpeaks_plus))
        print("One-by-one detected yellow peaks:
"+str(x_lpeaks_plus))
        plt.xlabel('$B$ (T)', fontsize=20)
        plt.ylabel('$d\sigma_{xx}/dB$ (arb.u.)', fontsize=20)
        plt.xticks(fontsize=15)
        plt.yticks(fontsize=15)
        plt.gcf().subplots_adjust(bottom=0.15)
        plt.gcf().subplots_adjust(left=0.17)
        plt.title("Signál ze souboru "+str(counter_angle)+"", úhel:
"+' {:.1f}'.format(load_angle(counter_angle))+""", fontsize=20)

    if plot_angle_sum == True:
        x_hpeaks_plus_sum = []
        x_lpeaks_minus_sum = []
        largest_val_hpeaks_sum = max(angle_hPeaks.shape)
        largest_val_lpeaks_sum = max(angle_lPeaks.shape)
        for y_hvars in range(largest_val_hpeaks_sum):
            x_hpeaks_actual_sum = angle_hPeaks[:,0][y_hvars]
            if x_hpeaks_actual_sum >= 0:
                ax6.plot(x_hpeaks_actual_sum,
np.full(x_hpeaks_actual_sum.shape, load_angle(counter_angle)), 'ro')
                x_hpeaks_plus_sum.append(x_hpeaks_actual_sum)
            for y_lvvars in range(largest_val_lpeaks_sum):
                x_lpeaks_actual_sum = angle_lPeaks[:,0][y_lvvars]
                if x_lpeaks_actual_sum <= 0:
                    ax6.plot(x_lpeaks_actual_sum,
np.full(x_lpeaks_actual_sum.shape, load_angle(counter_angle)), 'go')
                    x_lpeaks_minus_sum.append(x_lpeaks_actual_sum)
            x_lpeaks_minus_sum=np.sort(x_lpeaks_minus_sum)
            x_hpeaks_plus_sum=np.sort(x_hpeaks_plus_sum)

        if custom_peak_delete == True:
            if counter_angle >= 14:
                x_hpeaks_plus_sum=np.delete(x_hpeaks_plus_sum, 2)

        ax2.plot(x_hpeaks_plus_sum,
np.full(x_hpeaks_plus_sum.shape, load_angle(counter_angle)), 'ro')
        ax2.plot(x_lpeaks_minus_sum,
np.full(x_lpeaks_minus_sum.shape, load_angle(counter_angle)), 'ro')

        cosine = np.cos((np.pi/180)*load_angle(counter_angle))
        if plot_Bperpendicular == True:
            ax3.plot(x_hpeaks_plus_sum*cosine,
np.full(x_hpeaks_plus_sum.shape, load_angle(counter_angle)), 'bo')
            ax3.plot(x_lpeaks_minus_sum*cosine,
np.full(x_lpeaks_minus_sum.shape, load_angle(counter_angle)), 'bo')
            print("Negative magnetic field peaks for angle:
"+' {:.1f}'.format(load_angle(counter_angle))+""":
"+str(x_lpeaks_minus_sum))
            print("Positive magnetic field peaks for angle:
"+' {:.1f}'.format(load_angle(counter_angle))+""":
"+str(x_hpeaks_plus_sum))

        datalist_angle.append(x_hpeaks_plus_sum)
        sizelist_angle.append(x_hpeaks_plus_sum.shape)

```

```

        list_y.append(np.full((last_measurement_data - 1),
cosine))
        if plot_volt_dependance == True:
            ax4.plot((1/x_hpeaks_plus_sum),
np.full(x_hpeaks_plus_sum.shape, cosine), 'ro')

        counter_angle += 1

    if (plot_angle_sum & plot_volt_dependance) == True:
        print("List of all detected peaks")
        print(datalist_angle)
        print("List of shapes of these peaks")
        print(sizelist_angle)
        print("Largest value on previous list")
        largest_val_angle=max(sizelist_angle)
        print(largest_val_angle[0])
        counter_angle = counter_angle_original
        apk1 = np.array([])
        apk2 = np.array([])
        apk3 = np.array([])
        apk4 = np.array([])
        apk5 = np.array([])
        apk6 = np.array([])
        for sup_x in range(17):
            for sup_y in range(largest_val_angle[0]):
                if sup_y == 0:
                    apk1 =
np.append(apk1,datalist_angle[sup_x][sup_y])
                if sup_y == 1:
                    apk2 =
np.append(apk2,datalist_angle[sup_x][sup_y])
                if sup_y == 2:
                    apk3 =
np.append(apk3,datalist_angle[sup_x][sup_y])
                if sup_y == 3:
                    apk4 =
np.append(apk4,datalist_angle[sup_x][sup_y])
                if sup_y == 4:
                    apk5 =
np.append(apk5,datalist_angle[sup_x][sup_y])
                if sup_y == 5:
                    apk6 =
np.append(apk6,datalist_angle[sup_x][sup_y])

            pk_angle = np.append(pk_angle,load_angle(counter_angle))
            counter_angle += 1

    ax4.plot(1/apk1, list_y, 'go')
    ax4.plot(1/apk2, list_y, 'ko')
    ax4.plot(1/apk3, list_y, 'bo')
    ax4.plot(1/apk4, list_y, 'yo')
    ax4.plot(1/apk5, list_y, 'co')
    ax4.plot(1/apk6, list_y, 'mo')
    beq1 = np.polyfit((1/apk1), list_y, 1)
    beq2 = np.polyfit((1/apk2), list_y, 1)
    beq3 = np.polyfit((1/apk3), list_y, 1)
    beq4 = np.polyfit((1/apk4), list_y, 1)
    beq5 = np.polyfit((1/apk5), list_y, 1)
    beq6 = np.polyfit((1/apk6), list_y, 1)

```



```

ax4.plot(1/apk1, beq1[0]*(1/apk1)+beq1[1], 'g')
ax4.plot(1/apk2, beq2[0]*(1/apk2)+beq2[1], 'k')
ax4.plot(1/apk3, beq3[0]*(1/apk3)+beq3[1], 'b')
ax4.plot(1/apk4, beq4[0]*(1/apk4)+beq4[1], 'y')
ax4.plot(1/apk5, beq5[0]*(1/apk5)+beq5[1], 'c')
ax4.plot(1/apk6, beq6[0]*(1/apk6)+beq6[1], 'm')

print("Equation of first peak set (green): "
+str(beq1[0][0])+" * x + "+str(beq1[1][0]))
print("Equation of second peak set (black): "
+str(beq2[0][0])+" * x + "+str(beq2[1][0]))
print("Equation of third peak set (blue): " +str(beq3[0][0])+"
* x + "+str(beq3[1][0]))
print("Equation of fourth peak set (yellow): "
+str(beq4[0][0])+" * x + "+str(beq4[1][0]))
print("Equation of fifth peak set (cyan): " +str(beq5[0][0])+"
* x + "+str(beq5[1][0]))
print("Equation of sixth peak set (magenta): "
+str(beq6[0][0])+" * x + "+str(beq6[1][0]))

if run_angle_comparison == True:
    fig5, ax5=plt.subplots()
    plt.axis([Fr_comp_min, Fr_comp_max, -8.50, 59.3])
    plt.xlabel('$B_{\text{T}}$', fontsize=25)
    plt.ylabel('$\text{Úhel } (\text{°})$', fontsize=25)
    plt.title("Úhel od
+'{: .1f}'.format(load_angle(counter_angle_original))+"" do
+'{: .1f}'.format(load_angle(last_measurement_data))+"" , vývoj s B",
    fontsize=25)
    plt.xticks(fontsize=25)
    plt.yticks(fontsize=25)

    fig6, ax6=plt.subplots()
    plt.axis([-0.275, 0.275, -8.50, 59.3])
    plt.xlabel(r'$B_{\text{bot}}$ (T)', fontsize=25)
    plt.ylabel('$\text{Úhel } (\text{°})$', fontsize=25)
    plt.title("Úhel od
+'{: .1f}'.format(load_angle(counter_angle_original))+"" do
+'{: .1f}'.format(load_angle(last_measurement_data))+"" , vývoj s
kolmou složkou B", fontsize=25)
    plt.xticks(fontsize=25)
    plt.yticks(fontsize=25)

    counter_angle = counter_angle_original
    while counter_angle <= last_measurement_data:
        loaded_angle_data = load_angle_data(counter_angle)
        AngleData =
np.loadtxt(open(loaded_angle_data, 'r'), skiprows=30)
        loaded_offset = load_offset(counter_angle)

        B_ang = (AngleData[:,0])+loaded_offset
        ds_ang = AngleData[:,1]
        B_ang_det = B_ang
        ds_ang_det = ds_ang
        B_ang = B_ang[np.logical_and(-Fr_val<B_ang, B_ang<Fr_val)]
        B_ang_det =
B_ang_det[np.logical_and(Fr_comp_min<B_ang_det, B_ang_det<Fr_comp_max)]
        ds_ang = ds_ang[np.logical_and(-Fr_val<B_ang, B_ang<Fr_val)]

```

```

        ds_ang_det =
ds_ang[np.logical_and(Fr_comp_min<B_ang,B_ang<Fr_comp_max)]
        ds_smooth = ds_ang_det

        '''Measurement data normalization'''
        angle_normalized = []
        angle_max = abs(max(ds_smooth, key=abs))
        for pvar in ds_smooth:

angle_normalized.append(((pvar/angle_max)*multiplier_angle_compari
son)+load_angle(counter_angle))

        cosine = np.cos((np.pi/180)*load_angle(counter_angle))
        if (plot_angle_sum & plot_volt_dependance) == True:
            apk1_val = (np.nonzero(B_ang_det[:,None] == apk1))[0]
            apk2_val = (np.nonzero(B_ang_det[:,None] == apk2))[0]
            apk3_val = (np.nonzero(B_ang_det[:,None] == apk3))[0]
            apk4_val = (np.nonzero(B_ang_det[:,None] == apk4))[0]
            apk5_val = (np.nonzero(B_ang_det[:,None] == apk5))[0]
            apk6_val = (np.nonzero(B_ang_det[:,None] == apk6))[0]
            if counter_angle == 3:
                apk1_val = apk1_val[0]
                apk2_val = apk2_val[0]
                apk3_val = apk3_val[0]
                apk4_val = apk4_val[1]
                apk5_val = apk5_val[0]
                apk6_val = apk6_val[0]
            elif counter_angle == 4:
                apk1_val = apk1_val[1]
                apk2_val = apk2_val[0]
                apk3_val = apk3_val[0]
                apk4_val = apk4_val[0]
                apk5_val = apk5_val[0]
                apk6_val = apk6_val[0]
            elif counter_angle == 8:
                apk1_val = apk1_val[0]
                apk2_val = apk2_val[0]
                apk3_val = apk3_val[1]
                apk4_val = apk4_val[0]
                apk5_val = apk5_val[1]
                apk6_val = apk6_val[0]
            elif counter_angle == 9:
                apk1_val = apk1_val[0]
                apk2_val = apk2_val[0]
                apk3_val = apk3_val[0]
                apk4_val = apk4_val[0]
                apk5_val = apk5_val[1]
                apk6_val = apk6_val[0]
            else:
                apk1_val = apk1_val[0]
                apk2_val = apk2_val[0]
                apk3_val = apk3_val[0]
                apk4_val = apk4_val[0]
                apk5_val = apk5_val[0]
                apk6_val = apk6_val[0]

            ax6.plot(B_ang_det[apk1_val]*cosine,
angle_normalized[apk1_val], 'kx')

```

```

        ax6.plot(B_ang_det[apk2_val]*cosine,
angle_normalized[apk2_val], 'kx')
        ax6.plot(B_ang_det[apk3_val]*cosine,
angle_normalized[apk3_val], 'kx')
        ax6.plot(B_ang_det[apk4_val]*cosine,
angle_normalized[apk4_val], 'kx')
        ax6.plot(B_ang_det[apk5_val]*cosine,
angle_normalized[apk5_val], 'kx')
        ax6.plot(B_ang_det[apk6_val]*cosine,
angle_normalized[apk6_val], 'kx')

ax5.plot(B_ang_det, angle_normalized, 'b')
ax6.plot(B_ang_det*cosine, angle_normalized, 'r')

if run_overlap == True:
    Ef = Ef_start
    file_title = 'Ef_Sim/Ef_' + '{:.1f}'.format(Ef*1000) +
'meV.npz'
    Loaded_data = np.load(file_title)

    '''Simulation data normalization'''
    ds_xx_normalized = []
    dsval_max = abs(max(Loaded_data['ds_xx'], key=abs))
    for dsvar in Loaded_data['ds_xx']:

ds_xx_normalized.append(((dsvar/dsval_max)*2.2)+load_angle(counter_ang
le))

    minus_B = -1*Loaded_data['B'][:, :-1]
    minus_ds = ds_xx_normalized[:, :-1]
    plus_B = Loaded_data['B']
    plus_ds = ds_xx_normalized
    ax5.plot(minus_B/cosine, minus_ds, 'k', linewidth=0.75)
    ax5.plot(plus_B/cosine, plus_ds, 'k', linewidth=0.75)

    del Loaded_data.f
    Loaded_data.close()
    counter_angle += 1

plt.show()

```

## Příloha 3 - Zdrojový kód pro analýzu Shubnikových-de Haasových oscilací

```
# -*- coding: utf-8 -*-
import numpy as np
from scipy.constants import e, pi, c, Boltzmann as kb, m_e, h
from scipy import integrate
from scipy import signal
from scipy import optimize
import peakdetect as pk
import matplotlib.pyplot as plt
import Graphite_Functions as gf
import FittingFunctions as ff
import time

def load_data(dummy_counter): #Containt measurement data locations
    switcher={
        1: "2008-09-29 Natural Graphite - SdH temps/01_100K-
285GHz.dat",
        2: "2008-09-29 Natural Graphite - SdH temps/46_15K-
285GHz.dat",
        3: "2008-09-29 Natural Graphite - SdH temps/35_07K-
285GHz.dat",
        4: "2008-09-29 Natural Graphite - SdH temps/45_05K-285GHz.dat"
    }
    return switcher.get(dummy_counter, "Error: File does not exist")
f = 285 #Measurement frequency
T = [100, 15, 7.5, 5] #Temperatures during measurement
det_B_min = 1 #Minimal magnetic field for plotting
det_B_max = 7 #Maximal magnetic field for plotting
color = ['r', 'b', 'g', 'm']
counter = 2 #From which file to start
smooth_const = 15 #constant for data smoothing

datalist_s = []
fig,ax1=plt.subplots()
plt.xlabel(r'$B$ (T)', fontsize=25)
plt.ylabel(r'$d\sigma_{xx}/dB$ (arb.u.)', fontsize=25)
plt.title(r'$f$='+str(f)+' GHz, srovnání dat derivace optické
konduktivity', fontsize=25)
plt.xticks(fontsize=25)
plt.yticks(fontsize=25)

fig,ax2=plt.subplots()
plt.xlabel(r'$B$ (T)', fontsize=25)
plt.ylabel(r'$\sigma_{xx}$ (arb.u.)', fontsize=25)
plt.title(r'$f$ = '+str(f)+' GHz, srovnání dat optické konduktivity',
fontsize=25)
plt.xticks(fontsize=25)
plt.yticks(fontsize=25)

while counter <= 4:
    '''Data load'''
    loaded_data = load_data(counter)
    DataFile = np.loadtxt(open(loaded_data, 'r'), skiprows=30)
    B_exp=DataFile[:,0]
    ds_exp = DataFile[:,1]
```

```

    if counter == 4:
        B_exp = B_exp[:, :-1]
        ds_exp = ds_exp[:, :-1]
        B_exp_det = B_exp
        ds_exp_det = ds_exp
        B_exp = B_exp[np.logical_and(-16<B_exp, B_exp<16)]
        B_exp_det =
B_exp_det[np.logical_and(det_B_min<B_exp_det, B_exp_det<det_B_max)]
        ds_exp = ds_exp[np.logical_and(-16<B_exp, B_exp<16)]
        ds_exp_det =
ds_exp[np.logical_and(det_B_min<B_exp, B_exp<det_B_max)]
        s_exp_det = integrate.cumtrapz(ds_exp_det, B_exp_det)
        B_exp_det2 = B_exp_det[1:]
        ds_smooth = ff.smooth(ds_exp_det, smooth_const)
        s_smooth = s_exp_det
        Integration_normalized = s_smooth
        Derivation_normalized = ds_smooth
        '''Baseline subtraction'''
        lin_params=np.polyfit(B_exp_det2, Integration_normalized, 1)
        base=ff.smooth(Integration_normalized, 501)
        Integration_normalized = Integration_normalized - base

        '''Peak Detect'''
        peaks = pk.peakdetect(Integration_normalized, B_exp_det2,
lookahead=10, delta=1e-9)
        lPeaks = np.array(peaks[1])
        datalist_s.append(lPeaks[:, 1][0])
        hPeaks = np.array(peaks[0])
        datalist_s.append(hPeaks[:, 1][0])
        peaks_all = pk.peakdetect(Integration_normalized, B_exp_det2,
lookahead=5, delta=5e-7)
        hPeaks_all = np.array(peaks_all[0])
        ax1.plot(B_exp_det, Derivation_normalized, color[counter-1],
label = (str(T[counter-1])+' K'))
        ax2.plot(B_exp_det2, Integration_normalized, color[counter-1],
label = (str(T[counter-1])+' K'))

        fig, ax=plt.subplots()
        ax.plot(B_exp_det2, Integration_normalized+base,
label=r'\sigma_{xx}$')
        ax.plot(B_exp_det2, base, label='Baseline')
        ax.plot(B_exp_det2, Integration_normalized, label =
r'\sigma_{xx}$ background-corrected')
        #ax2.plot(hPeaks_all[:, 0], hPeaks_all[:, 1], 'ro')
        plt.xlabel('$B$ (T)', fontsize=16)
        plt.ylabel('Microwave absorption (arb. u.)', fontsize=16)
        plt.title(r'$f$='+str(f)+' GHz, $T$='+str(T[counter-1])+' K',
fontsize=16)
        plt.xticks(fontsize=13)
        plt.yticks(fontsize=13)
        plt.legend(fontsize=14)

        fig, ax5=plt.subplots()
        counter_aux = 0
        sizelist = []
        while counter_aux < len(hPeaks_all):
            sizelist.append(counter_aux+1)
            counter_aux += 1
        params=np.polyfit(1/hPeaks_all[:, 0], sizelist, 1)

```

```

        line = params[0]*(1/hPeaks_all[:,0]) + params[1]
        ax5.plot(1/hPeaks_all[:,0], line, color[counter-1])
        ax5.plot(1/hPeaks_all[:,0], sizelist, 'ro')
        plt.xlabel('$1/B$ (T)', fontsize=16)
        plt.ylabel('Peak number', fontsize=16)
        plt.title(r'Peaks position, $T$='+str(T[counter-1])+ ' K',
        fontsize=16)
        print("Function for T="+str(T[counter-1])+ "K:
        "+str(params[0])+"*x"+"+str(params[1]))
        counter += 1

print("Peaks list for temps:")
print(datalist_s)
min_temp = datalist_s[2]
print(min_temp)
ax1.legend(fontsize=20)
ampl=np.array([8.4E-5,6.18E-5,2.41E-5])
Temp=np.array([5,7.5,15])
Temp2 = np.arange(3,30,0.1)

def Dingle(T,T0,Amstar): #Fitting function calculation
    return T/T0 * np.sinh(Amstar)/np.sinh(Amstar*T/T0)
Tparams,desv_est = optimize.curve_fit(lambd,T,Amstar:
Dingle(T,Temp[0] ,Amstar) , Temp,ampl/ampl[0])

fig,ax1=plt.subplots()
ax1.plot(Temp,ampl/ampl[0], 'ro')
ax1.plot(Temp2, Dingle(Temp2, Tparams[0]))
plt.xlabel(r'$T$ (K)', fontsize=16)
plt.ylabel(r'$\frac{d\sigma_{xx}}{dB}_T / \frac{d\sigma_{xx}}{dB}_{Tmin}$ (-)',
        fontsize=16)
plt.title('Velikost amplitudy v závislosti na teplotě', fontsize=16)
A = (2*(pi**2)*kb*5)/((h/2*pi)*e*2)
print(Tparams)
print(desv_est)
print(A)
result=(Tparams[0]/A)/m_e
print(result)
fig,ax3=plt.subplots()
ax3.plot(T[1], datalist_s[0]/min_temp, "bo", label = '15 K')
ax3.plot(T[2], datalist_s[1]/min_temp, "go", label = '7,5 K')
ax3.plot(T[3], datalist_s[2]/min_temp, "mo", label = '5 K')
plt.xlabel(r'$T$ (K)', fontsize=16)
plt.ylabel(r'T/Tmin (arb.u.)', fontsize=16)
plt.title('SdH amplitude height in dependance on temperature',
        fontsize=16)
ax3.legend(fontsize=14)
ax2.legend(fontsize=20)

'''FOURIER TRANSFORM CALCULATION'''
fileName="Experimental data/004_Graphite_Suhner.dat"
Data = np.loadtxt(open(fileName,'r'), skiprows=30)
B_exp=Data[:,0]
ds_exp=Data[:,1] #Derivative of conductivity
dsy_exp=Data[:,2]
s_exp = integrate.cumtrapz(ds_exp,B_exp) #conductivity, integrating
reduces the length of the array by one
B_exp2= B_exp[1:] #reducing the magnetic field by one entry

```

```

'''Selecting the magnetic field range of the date'''
arr1= np.flatnonzero(np.logical_and(B_exp>0.68,B_exp<1))
arr2=arr1
B_p=B_exp[arr1]
ds_p=ds_exp[arr1]
B_p2=B_exp2[arr2]
s_p=s_exp[arr2]*1E6 #1E6 to get the signal in the order of 1E1
ds_smooth=ds_p
s_smooth=s_p

'''subtracting the baseline '''
#base by linear fit
lin_params=np.polyfit(B_p2,s_smooth,1)
base= lin_params[1] + lin_params[0]*B_p2
s_smooth = s_smooth - base

''' Getting the local maxima '''
B_max,i_max=ff.Bminima(-1*s_smooth,B_p2,Bwindow=0.01) #multiplying by
-1 to get the maxima.
print('Bmax ', B_max)

'''Calculating the Fourier transform'''
#Algorithm made by Jorge. Not good results as there is no windowing of
the data
X,Y,x2,y2=ff.fourier_SdH(s_smooth,B_p2) #x2 = 1/B. y2= rearranged
s_smooth

###
#calculating the Fourier transf. with other algorithm
# found in page https://dsp.stackexchange.com/questions/24680/why-is-the-magnitude-of-the-second-component-of-my-fft-spectrum-always-the-large?rq=1
#for zero padding the signal
#exponent for the next power of two higher than the length of the
signal. for instace, len(y2)==10, pad=4, 2**(pad)=16. padded y2:
[y2[0],...,y2[9],0,0,0,0,0,0,0]
pad= np.log10(len(y2))/np.log10(2)
pad=int(pad)+1
# using Hann window and padding
freq, spectrum = signal.periodogram(y2, window="hann", fs=1/(x2[1]-
x2[0]), nfft=2**pad)

#Physical parameters for the Fourier transform
mc0=0.06*m_e #effective mass of the carriers at the H point of
graphite, in kg
f=283.2E9 #Frequency of the measurement in Hz
w=2*np.pi*f # Microwave frequency in Hz
wc0= e*B_p/mc0 #cyclotron frequency w.r.t the magnetic field. in Hz

fig,ax=plt.subplots()
ax.plot(B_exp,ds_exp*3333)
plt.xlabel('$B$ (T)', fontsize=20)
plt.ylabel('$d\sigma_{xx}/dB$ (arb.u.)', fontsize=20)
plt.xticks(fontsize=13)
plt.yticks(np.arange(-1, 1.1, step=0.2), fontsize=13)
plt.axis([-1.1,1.1, -1.1, 1.1])
plt.title('$f=283.2$ GHz, $T=5$ K', fontsize=20)
plt.gcf().subplots_adjust(left=0.15)
plt.gcf().subplots_adjust(bottom=0.14)

```

```

fig,ax=plt.subplots()
ax.plot(B_p,ds_smooth*3333)
plt.xlabel('$B$ (T)', fontsize=20)
plt.xticks(fontsize=13)
plt.yticks(fontsize=13)
plt.axis([0.66,1.02, -0.4, 0.4])
plt.ylabel('$d\sigma_{xx}/dB$ (arb.u.)', fontsize=20)
plt.title("Vybraná oblast dat SdHO",fontsize=20)
plt.gcf().subplots_adjust(left=0.15)
plt.gcf().subplots_adjust(bottom=0.14)

fig,ax=plt.subplots()
ax.plot(B_p2,s_smooth+base, label=r'$\sigma_{xx}$')
ax.plot(B_p2,base, label='Základní linie')
ax.plot(B_p2,s_smooth, label=r'$\sigma_{xx}$ s korekcí')
plt.xlabel('$B$ (T)', fontsize=20)
plt.ylabel('$\sigma_{xx}$ (arb.u.)', fontsize=20)
plt.title("Numerická integrace vybrané oblasti",fontsize=20)
plt.xticks(fontsize=13)
plt.yticks(fontsize=13)
plt.legend(fontsize=15)
plt.gcf().subplots_adjust(left=0.15)
plt.gcf().subplots_adjust(bottom=0.14)

fig,ax=plt.subplots()
ax.plot(x2,y2)
plt.xlabel(r'$1/B$ (T$^{-1}$)', fontsize=20)
plt.ylabel('$\sigma_{xx}$ (arb.u.)', fontsize=20)
plt.title("Převrácená hodnota $B$ pro $\sigma_{xx}$",fontsize=20)
plt.xticks(fontsize=13)
plt.yticks(fontsize=13)
plt.axis([0.95,1.5, -0.5, 0.5])
plt.gcf().subplots_adjust(left=0.15)
plt.gcf().subplots_adjust(bottom=0.14)

#FFT using PSD
fig,ax=plt.subplots()
ax.plot(freq,np.abs(spectrum)*645)
plt.axis([0,40,0,750*np.max(np.abs(spectrum))])
peak_x, peak_y= freq[np.argmax(np.abs(spectrum))],
645*np.max(np.abs(spectrum))
dx= ax.get_xlim()[1]-ax.get_xlim()[0] #length of the plot in the x
axis
ann_text= r'$B_F = $' + '{:.2f}'.format(peak_x) + ' T'
plt.annotate(ann_text, xy=(peak_x,peak_y), xytext=(peak_x+dx*0.1
,peak_y),arrowprops=dict(arrowstyle="->",facecolor='black',relpos=(0,
0.5)), fontsize=13)
plt.title('Fourierova Transformace', fontsize=15)
plt.xlabel('Frekvence FT (T)', fontsize=15)
plt.ylabel('Amplituda FT (arb. u.)', fontsize=15)
plt.xticks(fontsize=13)
plt.yticks(fontsize=13)

plt.show()

```