

Experimentalphysik C2

Festkörperphysik II

Markus Lippitz

6. April 2023

Inhaltsverzeichnis

1	Wärmeleitung und anharmonische Effekte	5
	Anhang	13
A	Julia und Pluto	15



Dieses Werk ist lizenziert unter einer [Creative Commons "Namensnennung – Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International"](#) Lizenz.

Kapitel 1

Wärmeleitung und anharmonische Effekte

Markus Lippitz

6. April 2023

Ziele

- Sie können die unten gezeigte Wärmeleitfähigkeit im Zusammenspiel von Wärmekapazität und Umklappprozessen erklären.
- Sie können die Konzepte Wechselwirkungsquerschnitt und mittlere freie Weglänge benutzen, um Streuprozesse zu beschreiben.



Abbildung 1.1: Wärmeleitfähigkeit K von Silizium (Glassbrenner und Slack, 1964).

Überblick

Bis zu diesem Punkt wurden das Bindungspotential der Atome im Festkörper als harmonisch, also rein parabelförmig angenommen. In diesem Kapitel gehen wir darüber hinaus und betrachten, wie in der Molekülphysik, anharmonische höhere Terme in Bindungspotential. Dies führt zur thermischen Ausdehnung und zur Phonon-Phonon-Wechselwirkung. Mit ihr werden wir die oben gezeigte Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit erklären.

Dieses Kapitel stellt die Verbindung zum vorangegangenen Semester her. Sie haben Gelegenheit, die zentralen Konzepte der ersten Kapitel der Festkörperphysik aus dem letzten Semester zu wiederholen. Wir brauchen den reziproken Raum, die Dispersionsrelation und die sich daraus ergebende Zustandsdichte, wenn wir im nächsten Kapitel zu Elektronen wechseln.



Dieses Werk ist lizenziert unter einer [Creative Commons "Namensnennung – Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International"](#) Lizenz.

Wiederholung

Vergewissern Sie sich, dass Sie die folgenden Fragen beantworten können, und lesen Sie ggf. noch einmal in Ihren Aufzeichnungen des letzten Semesters oder in meinem Skript¹ nach.

¹ Lippitz, 2022.

Kristallstruktur

- Was ist ein Bravais-Gitter, eine Basis, eine Kristallstruktur?
- Wie sehen häufig vorkommende Bravais-Gitter aus? Welche Symmetrien haben sie?
- Welche Arten von Bindungen gibt es in Festkörpern? Wo sind dabei die Elektronen, auch relativ zu 'ihrem' Atomkern?

Reziproker Raum

- Was ist der reziproke Raum, die Brillouin-Zone, ein Miller'scher Index?
- Wie sehen die reziproken Gitter von häufig vorkommenden Bravais-Gittern aus?
- Wie bestimmt man Gitterparameter experimentell ?
- Was besagt die Laue-Theorie der Beugung? Und die Bragg-Theorie?
- Was ist ein Strukturfaktor und ein Atomformfaktor?

Phononen

- Was ist ein Phonon, eine Dispersionsrelation, eine Zustandsdichte?
- Wie sieht die Dispersionsrelation einer ein- oder zwei-atomaren linearen Kette aus? Wie die zugehörige Zustandsdichte?
- Warum nennt man die Zweige optisch bzw. akustisch? Wie geht das im Dreidimensionalen?
- Wie kann man durch inelastische Neutronenstreuung diese Dispersionsrelation messen?

Wärmekapazität der Phononen

- Wie erklärt man mikroskopisch die Wärmekapazität (von Isolatoren), insbesondere deren Temperaturabhängigkeit?
- Was ist der Unterschied zwischen den Modellen von Debye und Einstein? Wann stimmt welches besser mit den Messungen überein?

Thermische Ausdehnung

Bislang haben wir das Bindungspotential $U(x)$ der Atome als harmonisch angenommen. Die Abhängigkeit von der Auslenkung x um die Ruheposition war also $U(x) \propto x^2$. Nun wollen wir betrachten, welchen Effekt höhere Terme im Potential haben. Bei den Molekül-Schwingungen hatten wir bereits

das Morse-Potential besprochen, mit dem ebenfalls die Abweichungen von der harmonischen Form modelliert wurde. Damals hat dies zu Verschiebung der ansonsten äquidistanten Schwingungsniveaus und zu einer Änderung der Auswahlregel für Schwingungsübergänge geführt.

Sei also²

$$U(x) = cx^2 - gx^3 - fx^4, \quad (1.1)$$

mit c, g und f als positive Konstanten. Die Nullpunktsenergie ist hier der Einfachheit halber weggelassen. Der ungerade x^3 -Term flacht die positive x Seite ab und macht die negative Seite steiler. Der x^4 -Term wirkt symmetrisch, macht aber das Potential bei hohen Energien bzw. großen x breiter und so die Bindung weicher.

Nun interessiert die mittlere Auslenkung $\langle x \rangle$ bei einer durch die Boltzmann-Verteilung gegebenen Besetzung der Schwingungszustände. Ein Zustand mit dem Bindungsabstand x tritt auf mit der Wahrscheinlichkeit³

$$\frac{e^{-\beta U(x)}}{\int e^{-\beta U(x')} dx'}, \quad (1.2)$$

wobei wie immer $\beta = 1/k_B T$. Damit ist die mittlere Auslenkung

$$\langle x \rangle = \frac{\int x e^{-\beta U(x)} dx}{\int e^{-\beta U(x')} dx'}. \quad (1.3)$$

Der Nenner hängt ja nicht von x , sondern nur von x' ab und kann so vor das dx -Integral gezogen werden. Nun machen wir die Annahme, dass $U(x) \ll k_B T$, also $\beta U(x) \ll 1$ und schreiben im Zähler

$$e^{-\beta U(x)} = e^{-\beta cx^2} e^{+\beta(gx^3 + fx^4)} \approx e^{-\beta cx^2} (1 + \beta gx^3 + \beta fx^4). \quad (1.4)$$

Im Nenner ignorieren wir gleich alle Terme jenseits von cx^2 . Damit erhält man

$$\langle x \rangle = \frac{3g}{4c^2} k_B T. \quad (1.5)$$

Wie erwartet spielt der fx^4 -Term keine Rolle für die Änderung des Bindungsabstands. Sobald aber ein kubischer Term im Potential vorhanden ist ($g \neq 0$), dann ändert sich die mittlere Auslenkung hin zu größeren Werten, proportional zur Temperatur T . Die Gitterkonstante ändert sich also linear in der Temperatur, bzw. der Wärme-Ausdehnungskoeffizient α ist

$$\alpha = \frac{d}{dT} \frac{\langle x \rangle}{R_0} = \frac{3gk_B}{4c^2 R_0}, \quad (1.6)$$

mit dem mittleren Bindungsabstand R_0 bei $T = 0$.

Zur Selbstkontrolle

1. Wie groß ist ein typischer Wärme-Ausdehnungskoeffizient α ? Wie könnte man damit die Koeffizienten c und g des Potentials vergleichen?
2. Warum nimmt man hier die Boltzmann-Verteilung, und nicht Bose-Einstein?

² Siehe auch Kittel, 2006 eq. 5.38 und Kopitzki, 2017 eq. 2.57

³ Siehe z.B. Gl. 22.8 in Fließbach, 2018.

Phonon-Phonon-Wechselwirkung

Die Anharmonizität des Potentials führt dazu, dass die Phononen miteinander wechselwirken. Die Einführung der Normalmoden in der Molekül- oder Festkörperphysik war möglich, weil dort das Potential als harmonisch angenommen wurde. Der x^3 -Term führt dazu, dass die einzelnen Moden nicht mehr unabhängig voneinander sind, miteinander koppeln.⁴ Ein Molekül im Vakuum kann so Energie von einer hoch angeregten Schwingungsmode auf alle anderen Moden verteilen. Im Bild der quantisierten Schwingungen, wenn man also Phononen als Teilchen betrachtet, dann bedeutet dies, dass Phononen miteinander unter Beachtung der Energie- und Impulserhaltung wechselwirken, wie Billardkugeln.

Das kann man experimentell nachweisen. Zwei sich kreuzende Ultraschallwellen erzeugen eine dritte Welle in der durch die Impulserhaltung erwarteten Richtung (Abb. 1.2).



⁴ Eine Rechnung findet sich in Gross und Marx, 2023.

Abbildung 1.2: Phonon-Phonon-Wechselwirkung in polykristallinem Magnesium (Rollins Jr, Taylor und Todd Jr, 1964). Zwei Ultraschallwellen kreuzen sich unter dem Winkel ϕ . Man detektiert im Winkel der Impulserhaltung die resultierende Amplitude. Falls eine der Wellen transversal, die andere longitudinal ist, dann beobachtet man eine Auslöschung unter einem charakteristischen Winkel.

Zur Selbstkontrolle

- Falls Sie die 'Moderne Optik' besucht haben: Könnte man diesen Effekt auch im Wellen-Bild beschreiben?

Wärmeleitfähigkeit

Bislang hatte der Festkörper überall die gleiche Temperatur. Nun betrachten wir beispielsweise einen Stab, der an beiden Enden durch ein Wärmebad auf eine zeitliche konstante aber verschiedene Temperatur gehalten wird. Makroskopisch ist der Fluss der thermischen Energie, also die Wärmestromdichte \mathbf{j}_q abhängig von der Wärmeleitfähigkeit K und dem Gradienten der Temperatur T , also

$$\mathbf{j}_q = -K \nabla T \quad . \quad (1.7)$$

Wir modellieren den Wärmestrom analog zur kinetischen Gastheorie als Diffusion von Phononen. Wie auch schon bei der Wärmekapazität der Phononen steigt mit steigender Temperatur die Anzahl der Phononen bei den durch die Zustandsdichte erlaubten Frequenzen. Am warmen Ende des Stabes gibt es also mehr Phononen, die dann zum kalten Ende gelangen und so Energie transportieren. Dieser Transportprozess steckt in der Wärmeleitfähigkeit K .

Die kinetische Gastheorie ergibt

$$K = \frac{1}{3} C v \ell \quad , \quad (1.8)$$

mit der Wärmekapazität pro Volumen C , der Teilchengeschwindigkeit v und der mittleren freien Weglänge ℓ . Hier ist nun C die Wärmekapazität der Phononen, v deren Schallgeschwindigkeit und ℓ eine noch zu beschaffende mittlere freie Weglänge. Eigentlich sind alle drei Größen von der Frequenz und ggf. auch der Richtung abhängig. Dies ignorieren wir hier und verstehen sie als effektive Größen. Das ist die *Dominante-Phononen-Näherung*, ähnlich wie beim Einstein-Modell die optischen Phononen als deltaförmige Zustandsdichte angenommen wurden.

Mittlere freie Weglänge

Die mittlere freie Weglänge kann rein geometrisch verstanden werden als Weglänge, bis zu der ein Strahl wieder auf eine Zielscheibe trifft. Die Fläche der Zielscheibe entspricht dabei dem Wechselwirkungsquerschnitt σ . Dazu benötigt man nur die Anzahl der Scheiben pro Volumen, also die Dichte n . Damit ist die mittlere freie Weglänge ℓ

$$\ell = \frac{1}{n \sigma} \quad . \quad (1.9)$$

In der Sprache der Streutheorie, wie beispielsweise bei der Röntgenstreuung, ist der Wechselwirkungsquerschnitt σ proportional zum Betragsquadrat $|A|^2$ der Streuamplitude.

Dem Scheibchen-Bild nahe kommt die Streuung an Punktdefekten im Kristall. Wenn die Ausdehnung a des Defekts viel kleiner als die Wellenlänge λ des Phonons ist, dann ist die Physik völlig analog zur Rayleigh-Streuung, beispielsweise von Licht an Luft-Molekülen. Der Streuquerschnitt ist in diesem Fall

$$\sigma \propto \frac{a^6}{\lambda^4} \quad \text{oder} \quad \propto a^6 \omega^4 \quad . \quad (1.10)$$

Dieser Effekt ist nicht temperaturunabhängig, kann also nicht helfen, die Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitung zu erklären. Er liefert vielmehr eine von der Qualität der Probe abhängen konstanten Beitrag.

Phonon-Phonon-Streuung

Auch die Phonon-Phonon-Wechselwirkung kann die freie Weglänge begrenzen, indem zwei einfallende Phononen in ein neues umgewandelt werden. Aus der Sicht eines der einfallenden Phononen ist die Streuwahrscheinlichkeit proportional zur Dichte $n(T)$ der anderen Phononen, also erwarten wir

$$\ell \propto \frac{1}{n(T)} \quad . \quad (1.11)$$

Bei der Streuung von Phononen in einem Kristall muss man allerdings den reziproken Gittervektor \mathbf{G} berücksichtigen. In einem Kristall ist die Impulserhaltung

$$\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_3 + \mathbf{G}_{hkl} \quad . \quad (1.12)$$

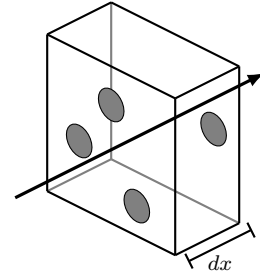


Abbildung 1.3: Scheiben der Fläche σ mit einer Anzahl-Dichte n ergeben geometrisch die mittlere freie Weglänge ℓ .

Der reziproken Gittervektor \mathbf{G}_{hkl} meint eine (unendliche) Menge von Vektoren, die sich aus den Linearkombinationen der primitiven Einheitsvektoren mit den Koeffizienten h, k, l zusammensetzt. Damit unterscheiden wir den *Normalprozess* ($\mathbf{G} = 0$) vom *Umklappprozess* ($\mathbf{G} \neq 0$). Im Normalprozess gilt die Impulserhaltung in der strengen Form wie im Vakuum. Bei einem Gas von Phononen bleibt der Gesamtimpuls dann aber erhalten. Die Drift-Geschwindigkeit der Phononen kann sich nicht ändern und dieser Fall trägt nicht zu einem Wärmewiderstand bei.

Beim Umklappprozess kann sich aber die Richtung ändern. Die Summe $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ kann gerade über die erste Brillouin-Zone hinaus reichen, wird durch \mathbf{G} zurück verschoben und kann dann entgegen der ursprünglichen Vektoren zeigen (siehe Abbildung 1.4). Damit ändert sich der Gesamtimpuls des Phononen-Gases, was einem Wärmewiderstand entspricht.



Abbildung 1.4: Skizze zum Umklappprozess. Wenn die Summe von zwei reziproken Vektoren außerhalb der Brillouin-Zone liegt, dann führt die Addition von \mathbf{G} zur Änderung der Richtung.

Zur Selbstkontrolle

4. Zeigt Abbildung 1.4 den Realraum oder den reziproken Raum? Wie sieht das im anderen Raum aus?
5. Wie kommt es, dass hier die Impulserhaltung verletzt ist?

Temperaturabhängigkeit des Umklappprozesses

Damit der Umklappprozess stattfindet, muss

$$|\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2| \geq \frac{1}{2}|\mathbf{G}|, \quad (1.13)$$

wobei \mathbf{G} hier den kleinsten reziproken Gittervektor meint. Wir benötigen die Energie der Phononen mit solchen Impulsen \mathbf{k}_i . Dazu nehmen wir das Debye-Modell an, also einen linearen Zusammenhang zwischen dem Betrag des Impulses und der Frequenz des Phonons und eine Debye-Temperatur Θ . Am Rand der Brillouin-Zone haben die Phononen in diesem Modell die Energie $k_B\Theta$, so dass eine charakteristische Energie für den Einsatz des Umklappprozesses $k_B\Theta/2$ ist. Die Besetzungsdichte bei dieser Energie ist in der Bose-Einstein-Verteilung

$$\langle n \rangle \propto \frac{1}{e^{\Theta/2T} - 1} \quad (1.14)$$

und die mittlere freie Weglänge ist somit

$$\ell \propto e^{\Theta/2T} - 1 = \begin{cases} \Theta/T & \text{für } T \gg \Theta \\ e^{\Theta/2T} & \text{für } T \ll \Theta \end{cases}. \quad (1.15)$$

Bei sehr tiefen Temperaturen ist also die mittlere freie Weglänge durch die Streuung an Punktdefekten begrenzt und fällt dann exponentiell mit der Temperatur ab, weil immer mehr Phononen als Streupartner hinzu kommen. Mit steigender Temperatur geht der exponentielle Abfall oberhalb der Debye-Temperatur Θ in einen $1/T$ -Verlauf über.

Für die Wärmeleitfähigkeit benötigen wir noch die Temperaturabhängigkeit der Wärmekapazität C . Diese ist nach dem Debye-Modell proportional

zu T^3 bei $T \ll \Theta$. Weit oberhalb Θ gilt das Dulong-Petit-Gesetz und die Wärmekapazität ist konstant. Insgesamt erhalten wir damit

$$K = \frac{1}{3}cv\ell \propto \begin{cases} \Theta/T & \text{für } T \gg \Theta & \text{Phonon-Phonon} \\ T^n e^{\Theta/2T} & \text{für } T \ll \Theta & \text{Phonon-Phonon} \\ T^3 & \text{für } T \ll \Theta & \text{Phonon-Defekt} \end{cases} \quad (1.16)$$

Der Exponent n bei $T \ll \Theta$ soll die genaue Temperaturabhängigkeit offen lassen. Dazu müsste man das Integral im Debye-Modell der Wärmekapazität im Bereich $T \approx \Theta$ lösen.

Für Silizium finden wir in den gemessenen Daten (Abb. 1.1) sowohl die T^3 -Abhängigkeit bei tiefen Temperaturen, als auch die T^{-1} oberhalb der Debye-Temperatur. Der Übergangsbereich ist aufwändiger zu modellieren. Natriumfluorid (NaF) verhält sich ähnlich (Abb. 1.5).

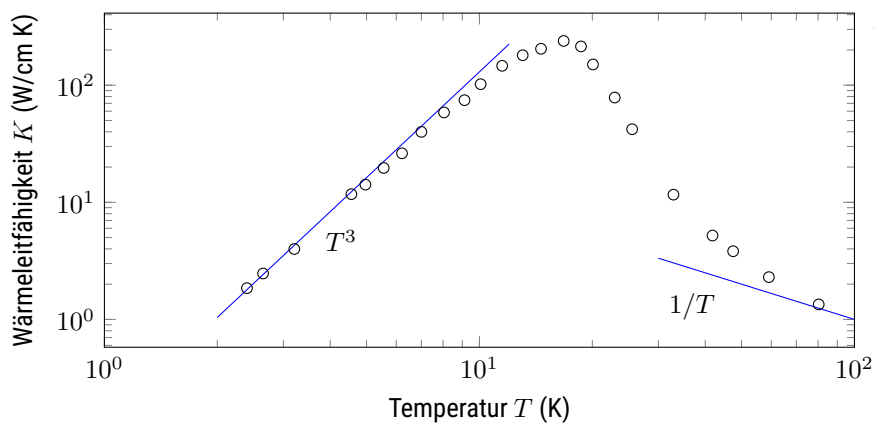


Abbildung 1.5: Wärmeleitfähigkeit K von Natriumfluorid (NaF) (Jackson, Walker und McNelly, 1970). Die Debye-Temperatur von NaF beträgt 491 K.

Zur Selbstkontrolle

- Beschreiben Sie in Ihren Worten, wie es zur Temperaturabhängigkeit der Wärmeleitfähigkeit kommt, insbesondere bei hohen und niedrigen Temperaturen.

Zusammenfassung

Schreiben Sie hier ihre persönliche Zusammenfassung des Kapitels auf. Konzentrieren Sie sich auf die wichtigsten Aspekte und die am Anfang genannten Ziele des Kapitels.

Literatur

- Fließbach, Thorsten (2018). *Statistische Physik*. Springer. [🔗](#).
- Glassbrenner, C Jo und Glen A Slack (1964). "Thermal conductivity of silicon and germanium from 3 K to the melting point". In: *Physical review* 134.4A, A1058. [🔗](#).
- Gross, Rudolf und Achim Marx (2023). *Festkörperphysik*. 4. De Gruyter. [🔗](#).
- Jackson, Howard E, Charles T Walker und Thomas F McNelly (1970). "Second sound in NaF". In: *Phys. Rev. Lett.* 25.1, S. 26. [🔗](#).
- Kittel, Charles (2006). *Einführung in die Festkörperphysik*. Hrsg. von Siegfried Hunklinger. 14. Oldenbourg.
- Kopitzki, Konrad (2017). *Einführung in die Festkörperphysik*. Hrsg. von Peter Herzog. 7. Springer. [🔗](#).
- Lippitz, Markus (2022). *Lecture notes 'Molekülphysik und Festkörperphysik I'*. Version v22.2. CC-BY-SA 4.0. [🔗](#).
- Rollins Jr, Fred R, Lyle H Taylor und Paul H Todd Jr (1964). "Ultrasonic study of three-phonon interactions. II. Experimental results". In: *Physical Review* 136.3A, A597. [🔗](#).

Anhang

Anhang A

Julia und Pluto

Markus Lippitz
4. April 2023

Wir benutzen in dieser Veranstaltung die Programmiersprache *Julia*¹ für graphische Veranschaulichungen und numerische 'Experimente'. Ich bin überzeugt, erst wenn man einen Computer überreden kann, etwas zu tun, ein Model darzustellen, einen Wert auszurechnen, erst dann hat man es wirklich verstanden. Vorher hat man nur die ganzen Probleme noch nicht gesehen.

¹<https://julialang.org>

Man kann Julia mit verschiedenen Benutzeroberflächen verwenden. Wir benutzen *Pluto*.²

²<https://github.com/fonsp/Pluto.jl>

Julia

Julia ist eine Programmiersprache, die für Numerik und wissenschaftliches Rechnen entwickelt wurde. Sie ist ein Mittelding zwischen Matlab, Python und R. Aus meiner Sicht übernimmt sie jeweils das Beste aus diesen Welten und eignet sich so gerade für Einsteiger. Wir werden im Laufe des Semesters verschiedene Beispiel-Skripte zusammen besprechen, und es wird auch numerische Übungsaufgaben geben.

Ein Beispiel

Lassen Sie uns zunächst ein einfaches Beispiel betrachten.

```
using Plots
x = range(0, 2 * pi; length=100)
plot(x, sin.(x); label="ein Sinus")
```

Für manche Dinge benötigt man Bibliotheken, die man mit `using` laden kann. Halten sie sich bei der Auswahl der Bibliotheken zunächst an die Beispiele, die ich zeige.

Dann definieren wir eine Variable `x` (einfach durch benutzen) als äquidistanter 'Zahlenstrang' zwischen 0 und 2π mit 100 Werten. Funktionen wie `range` haben immer benötigte Parameter, die über ihre Position in der Parameterliste definiert sind (hier: Anfangs- und End-Wert), sowie weitere optionale. Diese folgen nach einem Semikolon in der Form `<Parameter>=<Wert>`.

Schließlich zeichnen wir die Sinus-Funktion über diesen Wertebereich. Beachten sie den Punkt in `sin.(x)`. Er bedeutet 'wende `sin` auf alle Elemente von `x` an'. Das ist sehr praktisch.



Dieses Werk ist lizenziert unter einer [Creative Commons "Namensnennung – Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International"](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/) Lizenz.

Informationsquellen

Aktuell ist die Version 1.8.5. Mit der Version 1.0 hat sich einiges geändert. Ignorieren sie Webseiten, die älter als 3 Jahre sind, bzw. die sich auf eine Version vor 1.0 beziehen.

Offizielle Dokumentation auf der website³. Oder fragen Sie google mit 'Julia' als Stichwort oder mit der Bibliothek / Funktion und angehängter Endung '.jl'.

³ <https://docs.julialang.org/en/v1/>

Beispiele Julia by example⁴, Think julia⁵, Introduction to Computational Thinking⁶

⁴ <https://juliabyexample.helpmanual.io/>

⁵ <https://benlauwens.github.io/ThinkJulia.jl/latest/book.html>

⁶ <https://computationalthinking.mit.edu/Fall22/>

Unterschiede Vergleich⁷ mit Matlab, Python und anderen Sprachen. Und als Übersichtstabelle⁸

⁷ <https://docs.julialang.org/en/v1/manual/noteworthy-differences/>

⁸ <https://cheatsheets.quantecon.org/>

Cheat Sheets Allgemein⁹ und für Plots¹⁰

⁹ <https://juliadocs.github.io/Julia-Cheat-Sheet/>

¹⁰ <https://github.com/sswatson/cheatsheets/>

Benutzeroberflächen

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, wie man kürzere oder längere Programme in Julia schreiben kann. Hier eine Auswahl

Kommandozeile und Editor Man kann Julia interaktiv an der Kommandozeile (REPL, read-eval-print loop) benutzen. In einem externen Editor könnte man wiederholende Kommandos in Skript-Dateien schreiben.

IDE Das geht komfortabler mit einer integrierten Umgebung, beispielsweise einer Julia-Erweiterung¹¹ für Visual Studio Code. Das ist sicherlich die Herangehensweise bei größeren Projekten.

¹¹ <https://www.julia-vscode.org/>

Jupyter notebook Jupyter¹² setzt sich zusammen aus Julia, Python und R. Diese drei Sprachen kann man in einem Notebook-Format benutzen. Programmcode steht dabei in Zellen, die Ausgabe und auch beschreibender Text und Grafiken dazwischen. Das eignet sich besonders, wenn Rechnungen von Beschreibungen oder Gleichungen begleitet werden sollen, beispielsweise in (Praktikums-)Protokollen oder Übungsaufgaben.

¹² <https://jupyter.org/>

Mathematica hat ein ähnliches Zellen-Konzept. Ein Nachteil ist, dass Zellen den Zustand des Kernels in der Reihenfolge ihrer Ausführung beeinflussen. Die Reihenfolge muss aber nicht der in der Datei entsprechen; insbesondere ändert ein Löschen der Zellen den Kernel nicht. Das kann sehr verwirrend sein, oder man muss der Kernel oft neu starten.

Pluto Man kann auch in Pluto¹³ Programmcode, Text und Grafik mischen. Das Zellen-Konzept von Pluto ist das aber von Excel, limitiert auf eine Excel-Spalte. Die Anordnung der Gleichungen in den Zellen spielt keine Rolle. Alles wird nach jeder Eingabe neu evaluiert. Eine Logik im Hintergrund sorgt dafür, dass nur unbedingt notwendige Berechnungen neu ausgeführt werden. Aus meiner Sicht sollte das für Anfänger intuitiv zu bedienen sein und für kleiner Projekte völlig ausreichen sein. *Wir benutzen Pluto als Oberfläche in dieser Veranstaltungen.*

¹³ <https://github.com/fonsp/Pluto.jl>

Installation

Installieren Sie Julia und Pluto auf ihrem Computer. Eine gute Anleitung ist am MIT¹⁴. Kurzfassung: Julia vom website installieren, dann in Julia das Pluto-Paket installieren (`import Pkg; Pkg.add("Pluto")`) und aufrufen via `using Pluto; Pluto.run()`.

¹⁴ <https://computationalthinking.mit.edu/Fall22/installation/>

Benutzung von Pluto

Eine schöne Einführung in Pluto (und Julia) gibt es auf der Pluto homepage¹⁵, am MIT (hier¹⁶ bzw. eigentlich die ganze site) und am WIAS.¹⁷

¹⁵ <https://github.com/fonsp/Pluto.jl/wiki>

¹⁶ https://computationalthinking.mit.edu/Fall22/basic_syntax/

¹⁷ <https://www.wias-berlin.de/people/fuhrmann/SciComp-WS2021/assets/nb01-first-contact-pluto.html>

- Shift-Enter führt eine Zelle aus
- Der Ausführungs-Optimierer verlangt, dass jede Zelle einen geschlossenen Block bildet. Also darf da nur ein Kommando stehe, oder mehrere müssen mit `begin ... end` geschachtelt werden.
- Jede Zelle hat nur eine Ausgabe, die der letzten Zeile. Die Ausgabe steht über der Zelle selbst.
- Pluto verwaltet Bibliotheken selbständig, einfach mit `using` benutzen, installiert wird automatisch.
- Pluto speichert automatisch alles. Man kann aber die Datei umbenennen / bewegen.

Literatur

- Fließbach, Thorsten (2018). *Statistische Physik*. Springer. [↗](#).
- Glassbrenner, C Jo und Glen A Slack (1964). "Thermal conductivity of silicon and germanium from 3 K to the melting point". In: *Physical review* 134.4A, A1058. [↗](#).
- Gross, Rudolf und Achim Marx (2023). *Festkörperphysik*. 4. De Gruyter. [↗](#).
- Jackson, Howard E, Charles T Walker und Thomas F McNelly (1970). "Second sound in NaF". In: *Phys. Rev. Lett.* 25.1, S. 26. [↗](#).
- Kittel, Charles (2006). *Einführung in die Festkörperphysik*. Hrsg. von Siegfried Hunklinger. 14. Oldenbourg.
- Kopitzki, Konrad (2017). *Einführung in die Festkörperphysik*. Hrsg. von Peter Herzog. 7. Springer. [↗](#).
- Lippitz, Markus (2022). *Lecture notes 'Molekülphysik und Festkörperphysik I'*. Version v22.2. CC-BY-SA 4.0. [↗](#).
- Rollins Jr, Fred R, Lyle H Taylor und Paul H Todd Jr (1964). "Ultrasonic study of three-phonon interactions. II. Experimental results". In: *Physical Review* 136.3A, A597. [↗](#).

