

# **Experimentalphysik C2**

## **Festkörperphysik II**

Markus Lippitz

6. April 2023



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Wärmeleitung und anharmonische Effekte</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Fermi-Gas</b>	<b>13</b>
	<b>Anhang</b>	<b>22</b>
<b>A</b>	<b>Julia und Pluto</b>	<b>25</b>



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"](https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/) 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 Skript<sup>1</sup> nach.

<sup>1</sup> 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 also<sup>2</sup>

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

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 Wahrscheinlichkeit<sup>3</sup>

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

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  $\alpha$  ist

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

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

## Zur Selbstkontrolle

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

<sup>2</sup> Siehe auch Kittel, 2006 eq. 5.38 und Kopitzki, 2017 eq. 2.57

<sup>3</sup> 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.<sup>4</sup> 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).



<sup>4</sup> 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  $\phi$ . 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

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

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  $\ell$ . Hier ist nun  $C$  die Wärmekapazität der Phononen,  $v$  deren Schallgeschwindigkeit und  $\ell$  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  $\sigma$ . Dazu benötigt man nur die Anzahl der Scheiben pro Volumen, also die Dichte  $n$ . Damit ist die mittlere freie Weglänge  $\ell$

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

In der Sprache der Streutheorie, wie beispielsweise bei der Röntgenstreuung, ist der Wechselwirkungsquerschnitt  $\sigma$  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  $\lambda$  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

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

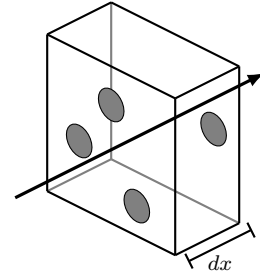


Abbildung 1.3: Scheiben der Fläche  $\sigma$  mit einer Anzahl-Dichte  $n$  ergeben geometrisch die mittlere freie Weglänge  $\ell$ .

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  $\Theta$ . 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  $\Theta$  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  $\Theta$  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).

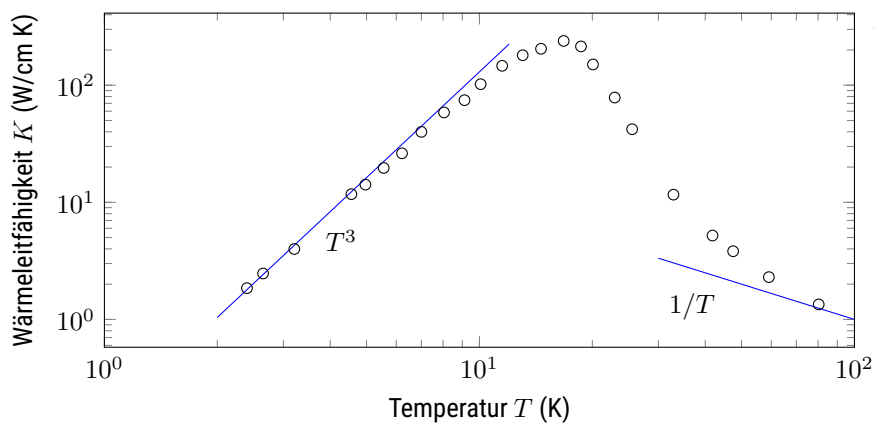


Abbildung 1.5: Wärmeleitfähigkeit  $K$  von Natriumfluorid (NaF) (Jackson, Walker und McNelly, 1970). Die Debye-Temperatur von NaF beträgt 491 K.

### 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. [↗](#).

# Kapitel 2

## Fermi-Gas

Markus Lippitz  
6. April 2023

### Ziele

- Sie können den elektrischen Widerstand von Metallen erklären.
- Sie können den mikroskopischen Ursprung des Wiedemann-Franz-Gesetzes erklären, also warum die Temperaturabhängigkeit der elektrischen und der thermischen Leitfähigkeit in Metallen so ähnlich bis identisch ist.



Abbildung 2.1: Temperaturabhängigkeit der thermischen ( $K$ ) und elektrischen ( $\sigma$ ) Leitfähigkeit von Kupfer und die daraus abgeleitete Lorenz-Zahl  $L = K/\sigma T$ . Das Wiedemann-Franz-Gesetz besagt, dass diese konstant ist. Daten aus Hust und Lankford, 1984.

### Überblick

Mit diesem Kapitel beginnen wir mit den elektronischen Eigenschaften der Festkörper. Bislang hatten wir diese dadurch ignoriert, dass die Beispiele immer als Isolatoren gewählt waren, Elektronen also keine Rolle gespielt haben. Von nun an stehen die Elektronen im Mittelpunkt. Wie in der Molekülphysik auch machen wir die adiabatische Näherung. Wir nehmen also an, dass die Elektronen viel schneller sind als die Kerne, die Kerne aber das Potential vorgeben, in dem sich die Elektronen bewegen. Weiterhin machen wir die Ein-Elektron-Näherung. Wir betrachten also nur ein Elektron. Die Anwesenheit



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.

aller anderen Elektronen beeinflusst nur das Potential, auch über das Pauli-Prinzip. Korrelationen zwischen Elektronen berücksichtigen wir erst in den Kapiteln zur Supraleitung und zum Magnetismus.

In diesem Kapitel bildet der Kristall ein großes Kastenpotential, aber die Kerne selbst kommen nicht vor. Im folgenden Kapitel wird dann das Kristallgitter wichtig werden.

## Freies Elektronengas

In beispielsweise Alkali-Metallen sind die meisten Elektronen an 'ihren' Atomkern gebunden und nur sehr wenige Elektronen pro Atomkern tragen zur Bindung bei. Diese Elektronen sehen nicht das vollständige Coulomb-Potential der stark positiv geladenen Atomrümpfe. Die gebundenen Elektronen schirmen dies ab, so dass nur ein schwaches und räumlich eher konstantes Potential verbleibt. In diesem Potential bewegen sich die Valenz-Elektronen der Alkali-Atome wie ein Gas. Man spricht daher von freiem Elektronengas oder auch Fermi-Gas.

Wir könnten die freien Elektronen als Teilchen im 3D-Kasten modellieren. Die Schrödingergleichung innerhalb des Kastens beinhaltet dann nur noch die kinetische Energie

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.1)$$

und ihre Lösung sind ebene Wellen

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (2.2)$$

mit dem Wellenvektor  $\mathbf{k}$  und der Normierung auf das Volumen  $V$  des Kastens. Die Energie beträgt dann

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}|\mathbf{k}|^2 = \frac{|\mathbf{p}|^2}{2m} \quad (2.3)$$

und ist von der Richtung natürlich unabhängig.

Die Gleichungen werden angenehmer, wenn wir (wie bei den Phononen) periodische Randbedingungen einführen: alle Eigenschaften sollen im Ort periodisch mit der Kasten-Größe  $L$  sein, also

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + L\hat{\mathbf{e}}_i) \quad , \quad (2.4)$$

mit  $\hat{\mathbf{e}}_i$  einem kartesischen Einheitsvektor. Wie bei den Phononen sind die möglichen Werte des Wellenvektors  $\mathbf{k}$  diskret

$$k_i = \frac{2\pi}{L} m_i \quad \text{mit} \quad i = x, y, z \quad . \quad (2.5)$$

## Zustandsdichte

Die Zustandsdichte im reziproken Raum ist konstant:

$$D(k)dk = \frac{V}{(2\pi)^3}dk \quad . \quad (2.6)$$

Um sie als Funktion der Energie zu erhalten benötigen wir wie bei den Phononen die Gruppengeschwindigkeit

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\partial E}{\partial(\hbar k)} = \frac{\hbar k}{m} \quad (2.7)$$

und erhalten<sup>1</sup>

$$D'(E)dE = \frac{V}{\hbar(2\pi)^3} dE \int_{E=\text{const.}} \frac{dS_E}{v_g} \quad (2.8)$$

Jetzt müssen wir noch berücksichtigen, dass wir jeden Zustand nach dem Pauli-Prinzip mit zwei Elektronen unterschiedlichen Spins besetzen können:

$$D(E)dE = 2D'(E)dE = \frac{(2m)^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} V \sqrt{E} dE \quad (2.9)$$

Zur Selbstkontrolle

1. Wie kann man den Wurzelförmigen Verlauf der Zustandsdichte  $D(E)$  verstehen?

## Fermi-Energie und Fermi-Kugel

Elektronen sind Fermionen, haben einen halbzahlgigen Spin und unterliegen dem Pauli-Prinzip und der Fermi-Dirac-Statistik. Im thermischen Gleichgewicht ist also jeder Zustand besetzt wie

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1} \quad (2.10)$$

mit dem chemischen Potential  $\mu$ . Die Fermi-Dirac-Verteilung ist (um das Pauli-Verbot zu erfüllen) maximal Eins. Wenn  $f(E) \ll 1$ , also  $E - \mu \gg k_B T$ , dann geht sie in die Boltzmann-Verteilung über.

Das chemische Potential  $\mu$  kommt aus der Ableitung beispielsweise der inneren Energie  $U$  nach der Stoffmenge  $n_i$ . Bei mehreren Stoffen gibt es also mehrere  $\mu_i$ .

$$\mu_i = \left( \frac{\partial U}{\partial n_i} \right)_{V, S, n_j \neq n_i} \quad (2.11)$$

bzw.

$$dU = TdS - pdV + \sum_i \mu_i dn_i \quad (2.12)$$

Bei uns ist der Stoff natürlich die Elektronen, daher brauchen wir im folgenden kein Index an  $\mu$ .

Bei  $E = \mu$  geht die Fermi-Dirac-Verteilungsfunktion immer durch 1/2. Am absoluten Nullpunkt ( $T = 0$ ) ist sie konstant Eins für  $E < \mu$  und konstant Null darüber. Wir bezeichnen als *Fermi-Energie*  $E_F$  die Energie, bis zu der alle Zustände lückenlos gefüllt sind. Das entspräche dem chemischen Potential, wenn letzteres nicht temperaturabhängig wäre. So definieren wir

$$E_F = \mu(T = 0) \quad (2.13)$$

Damit ist die Fermi-Energie *nicht* temperaturabhängig. Später werden wir den Begriff 'Fermi-Niveau' einführen, der nur ein anderes Wort für chemisches Potential ist und damit temperaturabhängig.

<sup>1</sup> Für 3 Dimensionen. Niedrigdimensionale Strukturen kommen später.

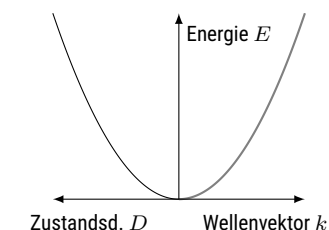


Abbildung 2.2: Dispersionsrelation  $E(k)$  und Zustandsdichte  $D(E)$  eines Fermi-Gases in 3 Dimensionen.

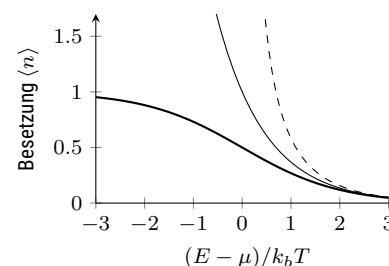


Abbildung 2.3: Fermi-Dirac-Statistik (fett) in Vergleich zur Bose-Einstein-Statistik (gestrichelt) und Boltzmann-Statistik (dünn).

Wir berechnen die Fermi-Energie  $E_F$ , indem wir bei  $T = 0$  nach und nach Elektronen in unseren Kasten einfüllen, also die Zustandsdichte  $D(E)$  soweit aufintegrieren, bis wir  $N$  Elektronen untergebracht haben. Die Elektronendichte  $n$  ist also<sup>2</sup>

$$n = \frac{N}{V} = \int_0^{E_F} D(E) dE \quad . \quad (2.14)$$

Damit erhalten wir

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2)^{2/3} n^{2/3} \quad . \quad (2.15)$$

Alle Komposita mit 'Fermi-' sind entsprechend definiert. Der Fermi-Impuls  $k_F$  ist einfach

$$k_F = (3\pi^2 n)^{1/3} \quad . \quad (2.16)$$

Die *Fermi-Kugel* ist die Kugel im reziproken Raum mit dem Radius  $k_F$ . Am absoluten Nullpunkt sind also alle Elektronen innerhalb dieser Kugel. Später werden wir Beispiele dafür sehen, dass die Form keine Kugel mehr ist, sondern durch eine mehr oder weniger komplexe *Fermi-Fläche* eingeschlossen wird.

Die Fermi-Energie von den hier betrachteten Metallen liegt typischerweise im Bereich von einigen Elektronvolt und die Fermi-Temperatur damit bei einigen 10 000 K, weit jenseits der Schmelztemperatur. Für Elektronen im Festkörper besteht also kein so großer Unterschied zum absoluten Nullpunkt. Die Stufenfunktion der Fermi-Dirac-Verteilung wird etwas abgerundet. Wenn man es maßstabsgerecht zeichnen würde, dann könnte man aber bei Raumtemperatur keinen Unterschied erkennen.

<sup>2</sup> Analog kann man ein temperaturabhängiges chemisches Potential ausrechnen. Siehe Hunklinger, 2014 oder Gross und Marx, 2023.

### Zur Selbstkontrolle

2. Woran liegt es, dass hier die Fermi-Fläche gerade eine Kugeloberfläche ist? Was ist notwendig, damit andere Formen entstehen?
3. Was bedeutet 'Für Elektronen im Festkörper besteht also kein so großer Unterschied zum absoluten Nullpunkt'?

## Wärmekapazität der freien Elektronen

Analog zum Vorgehen bei den Phononen berechnen wir die Wärmekapazität der Elektronen als Ableitung der inneren Energie nach der Temperatur. Wir beginnen<sup>3</sup> mit der spezifischen inneren Energie  $u$

$$u = \frac{U}{V} = \int_0^\infty E D(E) f(E) dE \quad . \quad (2.17)$$

Am absoluten Nullpunkt läuft das Integral nur bis  $E_F$  und  $f(E)$  ist so einfach, dass wir es weglassen können

$$u_0 = u(T = 0) = \int_0^{E_F} E D(E) dE = \frac{3n}{5} k_B T_F \quad . \quad (2.18)$$

Bei einem klassischen freien Gas von Teilchen hätten wir

$$u_{\text{klassisch}} = \frac{3n}{2} k_B T \quad \text{und} \quad c_{\text{klassisch}} = \frac{3n}{2} k_B \quad . \quad (2.19)$$

<sup>3</sup> Hunklinger, 2014 folgend



Weil  $T_F \gg T$  ist die innere Energie eines freien Elektronengases sehr hoch, was am Ende ein Effekt des Pauli-Verbots ist. Wir müssen zu sehr hochenergetischen Zuständen ausweichen, um noch Elektronen zufügen zu können.

Die Ableitung  $\partial u / \partial T$  ist aufwändig. Lehrbücher zeigen ein paar Schritte. Ich möchte das hier abkürzen und so argumentieren: ein freies Elektronengas ist quasi ein klassisches Gas, nur kann aufgrund der Fermi-Dirac-Statistik nur der Anteil  $T/T_F$  weitere Energie aufnehmen und so zur Wärmekapazität beitragen. Zustände, die weiter von  $E_F$  entfernt sind, sind entweder vollständig besetzt, so dass im Abstand  $k_B T$  kein freier Zustand vorhanden ist, oder sie sind vollständig unbesetzt. Die Abschätzung ist also

$$c_{\text{geschätzt}} = c_{\text{klassisch}} \frac{T}{T_F} = \frac{3n k_B}{2} \frac{T}{T_F} \quad (2.20)$$

Eine etwas bessere Rechnung ergibt einen um den Faktor  $\pi^2/3$  größeren Wert

$$c_{\text{el}} = \frac{\pi^2 n k_B}{2} \frac{T}{T_F} = \gamma T \quad (2.21)$$

mit der Sommerfeld-Konstanten  $\gamma$ .

Zusammen mit dem Debye-Modell für die Phononen können wir so nun auch die Wärmekapazität von Metallen beschreiben. Wir erhalten

$$c_{\text{ges}} = \gamma T + \begin{cases} 3n_A k_B & \text{für } T \gg \Theta \\ \beta T^3 & \text{für } T \ll \Theta \end{cases} \quad (2.22)$$

mit  $\beta$  aus dem Debye-Modell und  $n_A$  der Teilchenzahl-Dichte der Atom-Kerne.

Dieses Modell beschreibt die Wärmekapazität von Alkali-Metallen und anderen 'einfachen' Metallen gut (Abb. 2.5). In anderen Fällen finden sich deutliche Abweichung, beispielsweise bei Nickel. Hier ist die gemessene Wärmekapazität um etwa den Faktor 15 höher als die wie oben berechnete. Bei den Alkali-Metallen ist die Annahme des freien Elektronengases gerechtfertigt. Bei Nickel tragen aber Elektronen zur Wärmekapazität bei, die aus atomaren d-Orbitalen stammen, daher eine Vorzugsrichtung haben und keine isotrope Zustandsdichte im Kristall besitzen. Dies führt zu einer hohen Zustandsdichte an der Fermi-Energie und so zu einer erhöhten Wärmekapazität.<sup>4</sup>

Zur Selbstkontrolle

4. Wo zeigt sich in Abb. 2.4 die Wärmekapazität?

## Drude-Modell

Lassen Sie uns zunächst das Drude-Modell besprechen. Dies liefert das Ohm'sche Gesetz, also ein richtiges Ergebnis, aber aus heutiger Sicht aus den falschen Gründen. Es wurde 1900 von Paul Drude eingeführt. Die Annahmen sind ein freies Elektronengas, das eine mittlere thermische Geschwindigkeit  $v_{th}$  besitzt. Die Elektronen stoßen mit den Atomrümpfen. Das externe elektrische Feld  $\mathcal{E}$  überlagert der thermischen Bewegung eine Driftbewegung mit der Geschwindigkeit  $v_d$ . Die Bewegungsgleichung ist

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -e \mathcal{E} - m \frac{\mathbf{v}_d}{\tau} \quad (2.23)$$

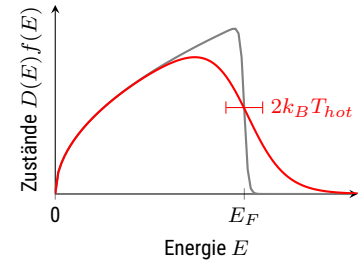


Abbildung 2.4: Nur Zustände in der Nähe der Fermi-Energie tragen zur Wärmekapazität bei. Die graue Kurve ist um den Faktor 10 kühler.

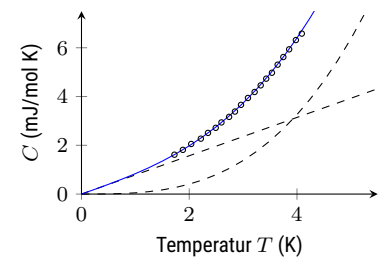


Abbildung 2.5: Wärmekapazität von Kupfer bei tiefen Temperaturen nach Rayne, 1956. Elektronen und Phononen tragen bei.

<sup>4</sup> siehe Hunklinger, 2014, Abbildung 8.9

Der letzte Term ist eine Art Reibungskraft, die durch die Stöße der Elektronen entsteht.  $\tau$  ist dabei die mittlere Zeit zwischen zwei Stößen. Im stationären Fall ( $d\mathbf{v}/dt = 0$ ) erhält man

$$\mathbf{v}_d = -\frac{e\tau}{m}\mathcal{E} = -\mu\mathcal{E} \quad \text{mit} \quad \mu = \frac{|\mathbf{v}_d|}{|\mathcal{E}|} = \frac{e\tau}{m} \quad (2.24)$$

mit der Beweglichkeit  $\mu$ . Die Stromdichte ist dann

$$\mathbf{j} = -en\mathbf{v}_d = ne\mu\mathcal{E} = \sigma\mathcal{E} \quad \text{mit} \quad \sigma = ne\mu = \frac{ne^2\tau}{m} \quad (2.25)$$

mit der Elektronendichte  $n$  und der Leitfähigkeit  $\sigma$ . Damit haben wir den linearen Zusammenhang zwischen Strom und Spannung des Ohm'schen Gesetzes erhalten. Der makroskopische Widerstand (bzw. dessen reziproker Wert, die Leitfähigkeit  $\sigma$ ) ist verknüpft mit zwei mikroskopischen Größen, der Elektronendichte  $n$  und der mittleren Stoßzeit  $\tau$ . Erstere ergibt sich aus der Zahl der Valenz-Elektronen pro Atom und der Gitterkonstanten des Kristalls. Letzte liegt wie oben schon erwähnt bei etwa 10 fs.

Dieses Modell ignoriert völlig das Pauli-Prinzip und dass es eine Fermi-Dirac-Verteilung gibt, bei der quasi alle Zustände besetzt sind. Die allermeisten Elektronen können gar nicht streuen, weil sie dazu einen leeren Endzustand bräuchten, den es nicht gibt. Wir werden aber sehen, dass ein besseres Modell das gleiche Ergebnis liefert.

## Drude-Sommerfeld-Modell

Arnold Sommerfeld entwickelte eine verbesserte Theorie. Die Elektronen sind quasi frei, es gilt die Schrödinger-Gleichung und das Pauli-Prinzip. Wir machen aber die Annahme, dass die Fermi-Fläche eine Kugel ist, die Bandstruktur also isotrop und insbesondere das Band nur halb gefüllt, so dass die Fermi-Fläche weit von der Grenze der Brillouinzone entfernt ist.

Ohne externes Feld fließt im thermischen Gleichgewicht kein Strom, weil die Fermi-Kugel um  $\mathbf{k} = 0$  zentriert ist. Weil wir Isotropie angenommen haben gibt es auch in nur teilweise gefüllten Bändern für jedes Elektron mit  $\mathbf{k}$  eines mit  $-\mathbf{k}$ .

Eine externes Feld  $\mathcal{E}$  bewegt jedes Elektron und damit die gesamte Fermikugel kontinuierlich immer weiter von der Gleichgewichtsposition weg:

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = -e\mathcal{E} = \mathbf{F} \quad (2.26)$$

Streuprozesse können dann aber Elektronen von 'vorne' an der Fermikugel in den frei werdenden Bereich 'hinter' der Kugel umlagern. Die Stöße wirken also rückstellend auf die Bewegung der Fermikugel. Im sich einstellenden Gleichgewicht wird die Fermikugel bei einer mittleren Stoßzeit  $\tau$  um

$$\delta k = \frac{-e\tau\mathcal{E}}{\hbar} \quad (2.27)$$

aus dem Ursprung verschoben sein. Nur der Anteil  $\delta k/k_F$  der Elektronen trägt zum Ladungstransport bei. Das sind aber die an der Fermi-Kante, also die schnellsten von allen. Für die Leitfähigkeit ergibt das Sommerfeld-Modell also

$$\sigma = ne\mu = \frac{ne^2}{m^*} \tau(E_F) \quad (2.28)$$

mit  $\tau(E_F)$  der Stoßzeit der Elektronen an der Fermi-Kante. Der Unterschied zum Drude-Modell besteht nur in einer etwas anderen Bedeutung zweier Parameter. Damit ist nicht überraschend, dass auch das Drude-Modell die experimentellen Ergebnisse richtig wiedergibt.

Zur Selbstkontrolle

5. Erklären Sie, warum das Drude- und das Sommerfeld-Modell zum (scheinbar ?) gleichen Ergebnis kommen.

## Temperaturabhängigkeit der elektrischen Leitfähigkeit

Die elektrische Leitfähigkeit  $\sigma$  ist temperaturabhängig über die mittlere Stoßzeit  $\tau$ . Elektronen können mit verschiedenen anderen Partnern streuen (stoßen): mit Phononen, mit Defekten und mit der Probenoberfläche. Dabei addieren sich die Streu-Raten, also die reziproken Stoß-Zeiten. Nur die Streuung an Phononen ist temperaturabhängig. Die anderen Effekte führen zu einem konstanten Wert, der bei tiefen Temperaturen erreicht wird, wenn keine Phononen besetzt sind.

Bereits in Kapitel 1 hatten wir die mittlere freie Weglänge definiert als (Gl. 1.9)

$$\ell = \frac{1}{n \sigma_{st}} = \tau v_F, \quad (2.29)$$

wobei wir hier den Streuquerschnitt  $\sigma_{st}$  genannt haben, um ihn von der Leitfähigkeit  $\sigma$  zu unterscheiden.  $\sigma_{st}$  ist für unsere Zwecke konstant. Elektronen bewegen sich mit der Fermi-Geschwindigkeit  $v_F$ , die so den Zusammenhang zwischen Stoßzeit und Weglänge herstellt.

Bei einer Temperatur  $T$  (viel) größer als der Debye-Temperatur  $\Theta$  ändert sich die Dichte  $n$  der Phononen wie  $T/\Theta$ , so dass wir für die Leitfähigkeit  $\sigma$  erhalten

$$\sigma \propto \begin{cases} \text{const} & \text{für } T \ll \Theta \\ \frac{1}{T} & \text{für } T \gg \Theta \end{cases}. \quad (2.30)$$

Der Übergangsbereich ist wie immer aufwändig und durch das Bloch-Grüneisen-Gesetz beschrieben, das einen  $T^{-5}$ -Term liefert.<sup>5</sup>

<sup>5</sup> Siehe z.B. Hunklinger, 2014

## Thermische Leitfähigkeit der Elektronen

Abschließend wollen wir noch die thermische Leitfähigkeit der Elektronen diskutieren, nachdem die anderen Kombinationen aus Elektronen oder Phononen mit Wärmekapazität oder Wärmeleitfähigkeit schon früher besprochen wurden. Im täglichen Leben machen wir die Erfahrung, dass Metalle Wärme besser leiten als Isolatoren. Elektronen scheinen also einen hohen Beitrag zur Wärmeleitfähigkeit zu liefern.

Die Wärmeleitfähigkeit der Phononen hatten wir in Gl. 1.8 definiert. Hier gehen wir analog vor:

$$K = \frac{1}{3} C v \ell, \quad (2.31)$$

wobei jetzt alle Größen als elektronische zu verstehen sind, also  $K$  die elektronische Wärmeleitfähigkeit,  $C$  deren Wärmekapazität,  $v$  deren Geschwin-

digkeit und  $\ell = v_F \tau$  die mittlere freie Weglänge. Wir setzen Gl. 2.21 für  $C$  ein sowie die Fermi-Geschwindigkeit  $v_F$  für  $v$  und erhalten

$$K = \frac{1}{3} \frac{\pi^2 n k_B}{2} \frac{T}{T_F} v_F \ell = \frac{\pi^2 n k_B^2 \tau}{3 m} T \quad (2.32)$$

mit  $T_F = m v_F^2 / (2 k_B)$ . Die Temperaturabhängigkeit der Stoßzeit  $\tau$  der Elektronen mit Phononen muss aber wie oben mit berücksichtigt werden.

## Wiedemann-Franz-Gesetz

Da in der Temperaturabhängigkeit der elektrischen und auch der thermischen Leitfähigkeit die Temperaturabhängigkeit der Elektron-Phonon-Streuung auftaucht, ist es nicht verwunderlich, dass beide Leitfähigkeiten miteinander in Beziehung stehen. Das ist das Wiedemann-Franz-Gesetz

$$\frac{K_{el}}{\sigma} = \frac{\pi^2}{e} \left( \frac{k_B}{e} \right)^2 T = L T \quad (2.33)$$

mit der universellen Lorenz-Zahl  $L \approx 2.5 \cdot 10^{-8} \Omega \text{WK}^{-2}$ . Gute Wärmeleiter sind also auch gute elektrischer Leiter. In der Realität gewichten die beiden Transportprozesse die Streuung etwas unterschiedlich, so dass es zu Abweichungen bei mittleren Temperaturen kommt, siehe Abb. 2.1.

Das Drude-Modell sagt das Wiedemann-Franz-Gesetz richtig voraus. Dabei kompensieren sich allerdings der Fehler in der Wärmekapazität der Elektronen mit dem in ihrer Geschwindigkeit<sup>6</sup>.

<sup>6</sup> siehe Gross und Marx, 2023, Kap. 7.3.2.1

## 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

- Gross, Rudolf und Achim Marx (2023). *Festkörperphysik*. 4. De Gruyter. [↗](#).
- Hunklinger, Siegfried (2014). *Festkörperphysik*. 4. aktualisierte Auflage. München: De Gruyter. [↗](#).
- Hust, Jerome G und Alan B Lankford (1984). "Thermal conductivity of aluminum, copper, iron, and tungsten for temperatures from 1 K to the melting point". In: *NBSIR 84-3007*. [↗](#).
- Rayne, JA (1956). "The Heat Capacity of Copper Below 4.2 °K". In: *Aust. J. Phys.* 9.2, S. 189–197. [↗](#).



# Anhang





# Anhang A

## Julia und Pluto

Markus Lippitz  
4. April 2023

Wir benutzen in dieser Veranstaltung die Programmiersprache *Julia*<sup>1</sup> 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.

<sup>1</sup><https://julialang.org>

Man kann Julia mit verschiedenen Benutzeroberflächen verwenden. Wir benutzen *Pluto*.<sup>2</sup>

<sup>2</sup><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  $2\pi$  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 website<sup>3</sup>. Oder fragen Sie google mit 'Julia' als Stichwort oder mit der Bibliothek / Funktion und angehängter Endung '.jl'.

<sup>3</sup> <https://docs.julialang.org/en/v1/>

*Beispiele* Julia by example<sup>4</sup>, Think julia<sup>5</sup>, Introduction to Computational Thinking<sup>6</sup>

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

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

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

*Unterschiede* Vergleich<sup>7</sup> mit Matlab, Python und anderen Sprachen. Und als Übersichtstabelle<sup>8</sup>

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

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

*Cheat Sheets* Allgemein<sup>9</sup> und für Plots<sup>10</sup>

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

<sup>10</sup> <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-Erweiterung<sup>11</sup> für Visual Studio Code. Das ist sicherlich die Herangehensweise bei größeren Projekten.

<sup>11</sup> <https://www.julia-vscode.org/>

*Jupyter notebook* Jupyter<sup>12</sup> 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.

<sup>12</sup> <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 Pluto<sup>13</sup> 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.*

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

## Installation

Installieren Sie Julia und Pluto auf ihrem Computer. Eine gute Anleitung ist am MIT<sup>14</sup>. Kurzfassung: Julia vom website installieren, dann in Julia das Pluto-Paket installieren (`import Pkg; Pkg.add("Pluto")`) und aufrufen via `using Pluto; Pluto.run()`.

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

## Benutzung von Pluto

Eine schöne Einführung in Pluto (und Julia) gibt es auf der Pluto homepage<sup>15</sup>, am MIT (hier<sup>16</sup> bzw. eigentlich die ganze site) und am WIAS.<sup>17</sup>

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

<sup>16</sup> [https://computationalthinking.mit.edu/Fall22/basic\\_syntax/](https://computationalthinking.mit.edu/Fall22/basic_syntax/)

<sup>17</sup> <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. [↗](#).
- Hunklinger, Siegfried (2014). *Festkörperphysik*. 4. aktualisierte Auflage. München: De Gruyter. [↗](#).
- Hust, Jerome G und Alan B Lankford (1984). "Thermal conductivity of aluminum, copper, iron, and tungsten for temperatures from 1 K to the melting point". In: *NBSIR 84-3007*. [↗](#).
- 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. [↗](#).
- Rayne, JA (1956). "The Heat Capacity of Copper Below 4.2 °K". In: *Aust. J. Phys.* 9.2, S. 189–197. [↗](#).
- 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. [↗](#).

