양자역학의 기초 HW #8 답안

1. 수업시간에 배운 논리를 사용하여 Bose-Einstein distribution의 식을 유도하시오.

각각의 energy state (E_i)에 들어가 있는 입자의 수를 N_i 라고 하자. 그럼, 총 입자 수와 전체 에너지(U)는 다음과 같이 정의될 수 있다.

$$N = N_1 + N_2 + ... + N_n$$

$$U = E_1 N_1 + E_2 N_2 + ... + E_n N_n$$

이 때 i^{th} state가 가지고 있는 energy degeneracy가 q_i 라고 하면, N_i 개의 입자가 가질 수 있는 중복도(또는 N_i 개의 입자가 배분될 수 있는 총 경우의 수)는 다음과 같이 중복조합의 공식에 의해 계산된다.

$$\Omega(N_i) = \frac{(N_i + q_i - 1)!}{N_i!(q_i - 1)!}$$

따라서 모든 energy state를 포괄하는 전체 system에 대해서 중복도를 계산해 보면, 다음과 같은 식이 얻어진다.

$$\Omega(N_1, N_2, N_3, ..., N_n) = \prod_{i=1}^{n} \Omega(N_i) = \prod_{i=1}^{n} \frac{(N_i + q_i - 1)!}{N_i!(q_i - 1)!}$$

이제 이것이 최대가 되는 configuration을 찾으면, 그 때의 입자 분포가 바로 Bose-Einstein distribution이 된다. 이를 찾기 위해 어떤 constraint가 주어질 경우 그 안에서 다변수 함수의 극대값을 찾는데 유용항 방법인 Lagrange multiplier method(미적분학 교과서 참조)를 사용하도록 한다. 이 때 Ω 값은 너무 크므로 값에 로그를 취한 $\ln \Omega$ 을 가지고 찾는다.

한편, Multiplier를 찾기 위해 주어진 constraint들은 다음과 같다.

1) 전체 입자수는 변하지 않는다. → $f(N_1, N_2, ..., N_n) = N_1 + N_2 + ... + N_n = N$

2) 전체 에너지는 변하지 않는다. → $h(N_1, N_2, ..., N_n) = E_1 N_1 + E_2 N_2 + ... + E_n N_n = U$

따라서 여기에 맞게 Lagrange multiplier method에 대응되는 식을 세우면,

$$\frac{\partial \ln \Omega}{\partial N_i} + \alpha \frac{\partial f}{\partial N_i} + \beta \frac{\partial h}{\partial N_i} = 0 \text{ (for } i = 1, 2, ..., n)$$

여기서 $\ln \Omega$ 에 대한 Stirling approximation ($\ln(n!) \simeq n \ln n - n$)을 사용하면,

$$\frac{\partial \ln \Omega}{\partial N_i} \simeq \ln(N_i + q_i - 1) - \ln(N_i)$$

$$\therefore \frac{\partial \ln \Omega}{\partial N_i} + \alpha \frac{\partial f}{\partial N_i} + \beta \frac{\partial h}{\partial N_i} \simeq \ln(N_i + q_i - 1) - \ln(N_i) + \alpha + \beta E_i = 0$$

를 얻고, 이는 다음과 같이 정리할 수 있다.

$$-\alpha-\beta E_i=\ln(1+\frac{q_i-1}{N_i}) \rightarrow \frac{q_i-1}{N_i}=e^{-\alpha}e^{-\beta E_i}-1$$

따라서 Bose-Einstein distribution은 다음과 같이 얻을 수 있다.

$$\therefore f_{BE}(E_i)=\frac{q_i}{N_i}=\frac{1}{e^{-\alpha}e^{-\beta E_i}-1}$$

2. 교재 p. 333, Exercise # 43.

9-43: Using Equation (9.29),

$$f_1=f_{FD}(\epsilon_F+\Delta\epsilon)=\frac{1}{e^{\Delta\epsilon/kT}+1}, \qquad \text{and}$$

$$f_2=f_{FD}(\epsilon_F-\Delta\epsilon)=\frac{1}{e^{-\Delta\epsilon/kT}+1}.$$

From these expressions,

$$\begin{aligned} f_1+f_2 &= \frac{1}{e^{\Delta\epsilon/kT}+1}+\frac{1}{e^{-\Delta\epsilon/kT}+1} \\ &= \frac{1}{e^{\Delta\epsilon/kT}+1}+\frac{e^{\Delta\epsilon/kT}}{e^{\Delta\epsilon/kT}+1} \\ &= 1. \end{aligned}$$

3. 보충자료 12의 마지막 페이지 Exercise #3.

이 경우 Schrödinger 방정식은

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = E\psi$$

로 나타낼 수 있고 이를 변수분리 한 해는

$$\psi(x,y) = X(x)Y(y) = \sin k_x x \sin k_y y$$

이에 대해서 경계조건을 만족시키는 해는 각각

$$k_x x_0 = n_x\pi \qquad k_x = \frac{n_x\pi}{x_0}$$

$$k_y y_0 = n_y\pi \quad \text{이므로} \quad k_y = \frac{n_y\pi}{y_0}$$

(단, $n_x = 1,2,3,\ldots$, $n_y = 1,2,3,\ldots$)

한편, g(E)dE 를 구하기 위해서 k-space에서 g(k)dk를 먼저 구하면

$$g(k)dk = \frac{2\times\frac{2\pi k}{4}dk}{(\frac{\pi}{x_0})(\frac{\pi}{y_0})}\frac{1}{A} = \frac{k}{\pi}dk$$

그리고

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$dE = \frac{\hbar^2 k}{m}dk$$

$$\therefore kdk = \frac{m}{\hbar^2}dE$$

$$\therefore g(E)dE = g(k)dk = \frac{k}{\pi}dk = \frac{m}{\pi\hbar^2}dE$$

4. 보충자료 12의 마지막 페이지 Exercise #8.

앞서 3번에서 구한 값과 이미 알고 있는 f(E)를 이용하면 다음과 같은 등식이 성립한다.

$$\frac{N}{A} = \int_0^\infty f(E)g(E)dE$$
$$= \int_0^\infty \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}}+1} \cdot \frac{m}{\pi\hbar^2} dE$$

이 때 $p = e^{\frac{E-E_F}{kT}}$ 라 치환하면 $dE = kT\frac{dp}{p}$ 이므로

$$\frac{N}{A} \cdot \frac{\pi\hbar^2}{m} = kT\int_{e^{\frac{-E_F}{kT}}}^{\infty} \frac{dp}{p(p+1)}$$
$$= kT\left[\ln\frac{p}{p+1}\right]_{e^{\frac{-E_F}{kT}}}^{\infty}$$

좌변을 정리하면

$$\frac{N}{A} \cdot \frac{\pi\hbar^2}{m} = \frac{Nh^2}{4\pi mA} = E_F(0)$$

즉,

$$e^{\frac{E_F(0)}{kT}} = 1 + e^{\frac{E_F}{kT}}$$
$$\frac{E_F}{kT} = \ln(e^{\frac{E_F(0)}{kT}} - 1)$$

$$\therefore E_F(T) = kT\ln(e^{\frac{E_F(0)}{kT}} - 1)$$