

1. (16점) 수업시간에 배운 방법에 의하여 Maxwell-Boltzmann distribution을 유도하시오.

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

$$N = N_1 + N_2 + \dots + N_n \quad (1.1)$$

$$U = E_1 N_1 + E_2 N_2 + \dots + E_n N_n \quad (1.2)$$

그러면, 전체 시스템에 있는 입자를 각각의 energy state에 배분하는 경우의 수는 조합의 공식을 cascade로 적용시킴으로써 다음과 같이 계산할 수 있다.

$$Q(N_1, N_2, \dots, N_n) = \frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_n!} \quad (1.3)$$

이제 이것이 최대가 되는 configuration을 찾으려면, 그 때의 입자 분포가 바로 Maxwell-Boltzmann distribution이 된다. 이를 찾기 위해 Lagrange multiplier method를 사용하도록 한다. 이 때  $Q$ 값은 다루기에 너무 크므로  $\ln Q$ 을 가지고 찾는다.

한편, multiplier를 찾기 위해 주어진 constraint들은 다음과 같다.

$$1) \text{ 전체 입자수는 변하지 않는다. } \rightarrow f(N_1, N_2, \dots, N_n) = N_1 + N_2 + \dots + N_n = N \quad (1.4)$$

$$2) \text{ 전체 에너지는 변하지 않는다. } \rightarrow h(N_1, N_2, \dots, N_n) = E_1 N_1 + E_2 N_2 + \dots + E_n N_n = U \quad (1.5)$$

따라서 여기에 맞게 Lagrange multiplier method에 대응되는 식을 세우면,

$$\frac{\partial \ln Q}{\partial N_i} + \alpha \frac{\partial f}{\partial N_i} + \beta \frac{\partial h}{\partial N_i} = 0 \quad (\text{for } i = 1, 2, \dots, n) \quad (1.6)$$

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

$$\frac{\partial \ln Q}{\partial N_i} = \frac{\partial(-\ln N_i)}{\partial N_i} \approx \frac{\partial}{\partial N_i}(-N_i \ln N_i + N_i) = -\ln N_i \quad (1.7)$$

한편,  $\frac{\partial f}{\partial N_i} = 1$  이고  $\frac{\partial h}{\partial N_i} = E_i$  이므로 이들을 식 (1.7)과 함께 (1.6)에 대입하여 정리하면

$$-\ln N_i + \alpha + \beta E_i = 0 \quad (1.8)$$

를 얻고, 이를  $N_i$ 에 대해서 정리하면 다음과 같이 얻는다.

$$N_i = e^\alpha e^{\beta E_i} \quad (1.9)$$

이 때  $\beta = -(k_B T)^{-1}$  이고, 분포함수는 state에 들어가는 개수에 비례하므로, 최종적인 분포함수는 다음과 같다.

$$f_{MB}(E) = A e^{-E/k_B T}$$

(배점)

① 완벽하게 답안까지 유도한 경우: 16점 (중간과정에 대한 약간의 생략은 OK)

② 부분점수

1. 식 (1.3): 3점
2. 식 (1.4) & (1.5): 각 2점씩
3. 식 (1.6): 3점
4. 식 (1.8): 3점 \*(1.7)까지만 쓴 경우에는 -1점
5. 마지막 결과: 3점

(기타 사항)

① (1.8) 에서 정답으로 가는 과정에서 부호 뒤집는 실수: -2점

②  $N_i$  까지만 구하고 분포함수를 명시하지 않은 경우: -1점

③ 기타 중간과정서의 실수: -2점씩

2. (25점) 다음 물음에 답하시오.

(가) (15점) 2차원 구조(크기:  $L \times L$ )의 금속 또는 반도체에서, 자유 전자(electrons)의 density of states의 식을 에너지에 대한 함수로 유도하시오 ( $L$ 은 충분히 크다고 가정).

(풀이)  $L \times L$ 의 금속 평면은 2차원의 infinite potential well로 생각할 수 있다. 이 구조 내에서의 파동함수와 파수는 다음과 같을 것이다. (물론 파수만이 중요함)

$$\psi(x, y) = \psi_x(x)\psi_y(y)$$

$$\psi_x(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_x x), \quad k_x = \frac{n_x \pi}{L} \quad (n_x = 1, 2, \dots) \quad (2.1)$$

$$\psi_y(y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_y y), \quad k_y = \frac{n_y \pi}{L} \quad (n_y = 1, 2, \dots) \quad (2.2)$$

이렇게 얻은 파동함수에 대한 파수 벡터를  $k$  space 상에서 표현해보면 ‘제 1사분면’ 위에서 등 간격(각각의 방향에 대해서  $\frac{\pi}{L}$ )으로 표현되는 점으로 표현이 될 것이다. 이 각 점들은 각각 하나의 (momentum) state에 대응되는데, 각각에 대해서 스핀의 영향까지 고려할 경우 두 개의 자유 전자의 state에 대응되게 된다. 따라서  $k$  space에서의 density of states는 다음과 같은 식으로 계산이 가능하다. (이 때,  $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ )

$$\begin{aligned} g(k) &= 2 \cdot \frac{dN}{dk} = \frac{dA_k/dk}{dA_k/dN} \\ &= 2 \cdot \frac{(\text{small area deviation for changing radius } k \text{ to } k+dk)}{(\text{small area deviation for changing number of states})} \end{aligned} \quad (2.3)$$

여기서 식 (2.3)의 분자와 분모는 각각 다음과 같이 계산될 수 있다.

$$\frac{dA_k}{dk} = 2\pi k \cdot \frac{1}{4} \quad (1/4 \text{은 전체 공간에서 제 1사분면에 대한 비율임}) \quad (2.4)$$

$$\frac{dA_k}{dN} = \frac{dk_x}{dn_x} \cdot \frac{dk_y}{dn_y} = \frac{\pi^2}{L^2} \quad (2.5)$$

따라서 이들을 대입하면  $k$ 에 대한 density of states는 다음과 같이 정리된다.

$$g(k) = \frac{L^2}{\pi} k \quad (2.6)$$

한편, 에너지와 파수와의 관계  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ 로부터  $dE = \frac{\hbar^2}{m^*} k dk$  를 얻을 수 있다. 이로부터 ‘단위면적당’ density of states를  $E$ 에 대해서 표현하면 최종적으로 다음과 같은 답을 얻는다.

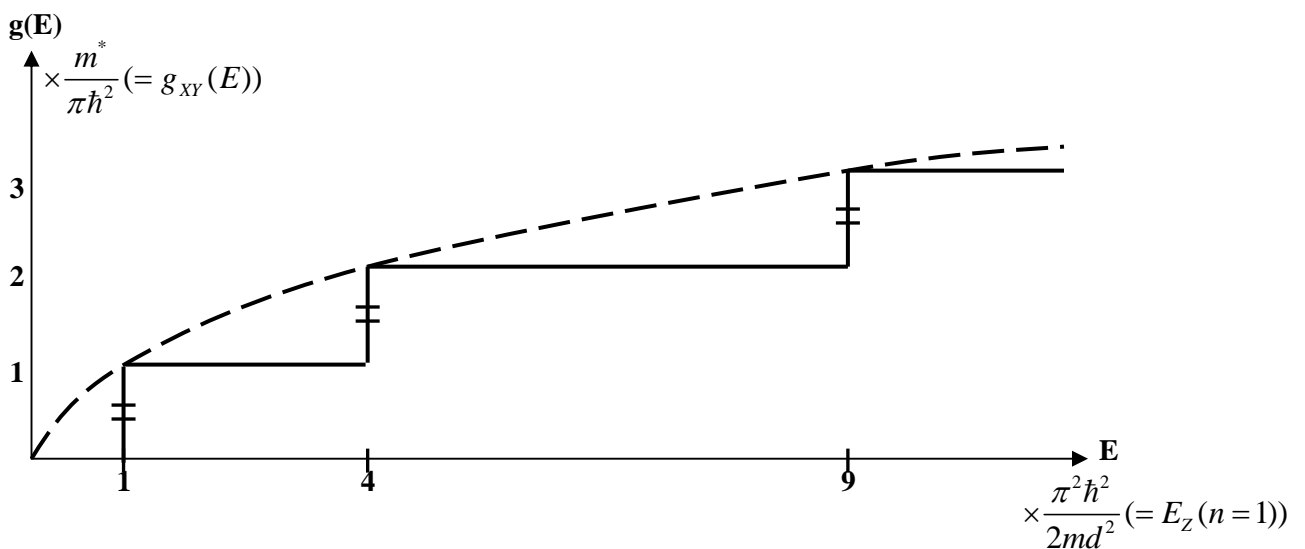
$$g(E) = g(k) \frac{dk}{dE} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2}$$

(나) (10점) z 축 방향으로 폭이 d이고 에너지 장벽이 무한대인 이상적인(ideal) 양자 우물 (quantum well)에서 z 축 방향으로의 전자의 운동에너지는  $\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2md^2}$  으로 표현됨을 배웠다(여기서 n은 자연수, m은 전자의 질량). 실은 이러한 전자는 x-y 평면(크기  $L \times L$ )상에서는 자유전자처럼 움직일 수 있다(L은 충분히 크다고 가정). 따라서 전자의 운동에너지는 x-y 평면에서의 운동에너지와 z 축 방향과 관련된 운동에너지의 합으로 생각할 수 있다. 이러한 구조에서, 전자의 density of states를 전체 에너지의 함수로 그래프를 그리시오. 그래프가 꺾이는 곳의 가로축, 세로축 눈금을 표시하시오.

(풀이) 주어진 양자 우물 구조에 대해 전자가 가지는 에너지를 다음과 같이 쓰자.

$$E = E_{XY} + E_Z = E_{XY} + \frac{n^2\pi\hbar^2}{2md^2} \quad (2.7)$$

이제 각각의 에너지 성분에 대해서 state들이 어떻게 나타나는지 따져보자. 우선  $E_{XY}$  에 대한 density of states는 (가)에서 구한 대로 ‘전자에 에너지 값에 관계없이’ 언제나 일정한 값으로 주어졌다. 반면  $E_Z$  에 대해서는 state가 양자화 되어 있기 때문에, 에너지 값이 바닥상태( $E_Z(n=1)$ )일 때의 정수의 제곱비씩 커질 때 마다 state의 개수는 같은 양만큼 늘어난다(①). 이제 이 둘을 합치면 전체 에너지 E의 값이  $E_Z(n=1)$ 의 정수의 제곱비씩 커질 때마다 전체 density of states는  $E_{XY}$ 에 대한 density of states( $g_{XY}$ )만큼씩 늘어나는 것으로 생각할 수 있다(②). 이를 다이어그램으로 그리면 다음과 같다.



(배점)

(가)

① 답안까지 유도한 경우: 15점 (중간과정에 대한 약간의 생략은 OK)

② 부분점수

1. (2.1) & (2.2) (파수만 써도 됨): 각각 2점씩
2. (2.3) 또는 그와 동등한 수준으로 density of states의 식이 어떻게 유도되어야 하는지를 기술한 경우: 2점
3. (2.4) & (2.5): 각각 3점씩, 또는 (2.6)을 바로 유도한 경우에도 6점 인정
4. 에너지와 파수의 관계로부터 나온 최종 결과: 3점

(나)

① 정확한 설명과 그림이 존재하는 경우: 10점

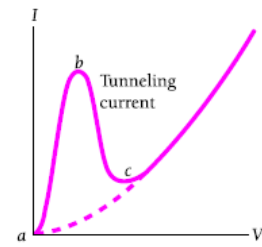
② 부분점수

1. z방향의 energy state에 대한 특성(에너지 준위의 양자화) 기술(①): 3점
2. 전체 경우에 대한 기술(②): 4점
3. 설명이 부족한 채 그림만 있는 경우: 7점

(기타 사항)

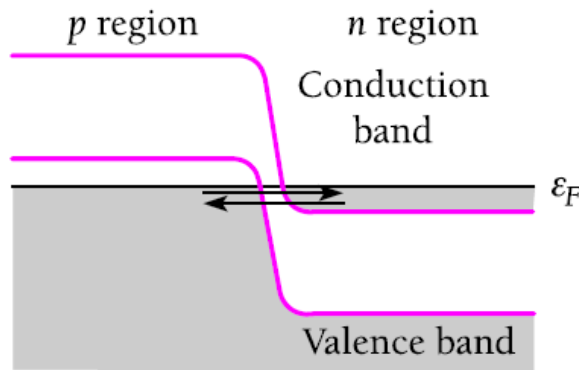
① 위에서 구한 답은 Quantum well device 전체에 대한 density of state를 구했다기 보다는 '단위 면적'당 density of state를 구한 것이다. 따라서 원래 의도한 정답에는  $L^2$ 가 곱해져야 하나, 이처럼 단위 면적에 대해 normalized되어 있는 경우도 통계 물리에서 많이 다루기 때문에 위와 같이 정답으로 인정하기로 한다.

3. (15점) 옆 그림과 같은 특성을 내는 다이오드의 energy band diagram을 그려서 이와 같은 특성이 나타나는 원리를 설명하시오 (ab 구간, bc구간, c 이상의 구간으로 나누어서 설명).



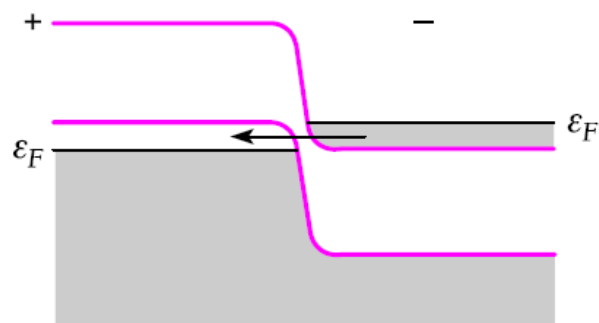
(풀이) 이와 같은 특성을 내는 다이오드는 터널 다이오드(tunnel diode)로 highly doping concentration을 지닌 p-type과 n-type 다이오드를 접합하여 만든다. 이렇게 만들면 공핍층의 두께가 얇으므로 터널링이 잘 일어난다.

1) No bias (point a)



Bias volage가 존재하지 않을 경우, 가운데 존재하는 공핍층을 두고 양 영역에 존재하는 전자들은 서로의 영역으로 터널링한다. Fermi level이 동일하기 때문에 양 단에서 터널링하는 전자의 양은 동일하고, 따라서 전류는 흐르지 않는다(열평형 상태). ※만일 T=0이라면 분포상 전자가 터널링할 맞은편 자리에 비어있는 공간이 없기 때문에 터널링 자체가 일어나지 못하여 전류가 흐르지 않는다.

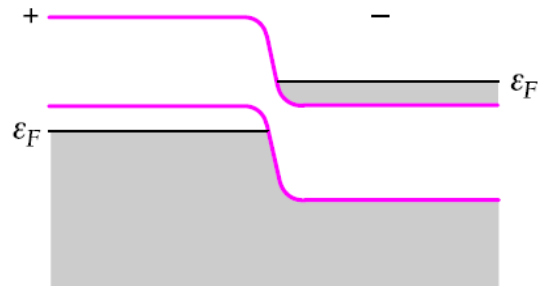
2) Small forward bias (interval a-b)



작은 forward bias를 걸어준 경우, n-type 영역의 Fermi level이 p-type 영역의 Fermi level보다 다소 높아지게 된다. 따라서 그림에서 보듯이 양쪽에서의 전자의 overlap이 줄어들어

p-type 영역에서 터널링 할 수 있는 빈 공간이 더 많아지기 때문에  $n \rightarrow p$  로의 터널링이 더 우세하게 된다. 따라서 순방향의 전류가 흐르게 된다. 이 때 bias의 크기가 커질수록 p-type 영역에서의 빈 공간이 더 늘어나기 때문에 터널링 전류의 크기는 더 커지게 된다.

### 3) More forward bias (interval b-c)



그러나 forward bias를 보더 크게 걸어줄 경우, 그림과 같이 n-type의 conduction band(CB)와 p-type의 valence band(VB) 사이의 overlap이 발생하지 않게 된다. 따라서 터널링이 일어날 수 없게 되고, 따라서 이에 의한 전류의 크기가 급격하게 줄어들게 된다.

### 4) Large forward bias (above point c)

이보다 더 forward bias를 많이 걸어줄 경우, 일반적인 forward-biased 다이오드와 같은 energy band 특성을 나타내게 되고, 따라서 일반적인 다이오드와 같이 작동하게 된다.

(배점)

① 2)~4): 각각 5점씩

② 1)을 명시한 경우: 만점을 인정받지 못할 경우에 한해 부분점수 3점 인정

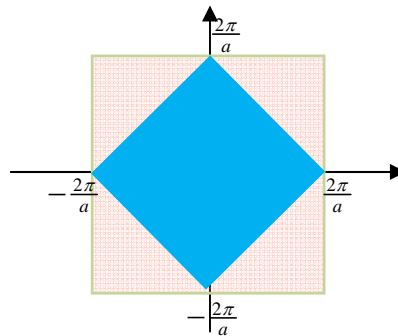
(기타 사항)

① 그림/글 중 경우: -2점

② 1)은 기본적인 상태에서의 에너지 밴드 구조에 대한 논의가 기본이 되어야 그로부터 여타의 논의를 진행할 수 있다는 의미에서 모범답안 내에 포함시켰다. 그러나 문제에서 바이어스가 없는 상태의 경우를 명시적으로 묻지 않았으므로 쓰지 않은 경우에도 만점을 받을 수 있도록 답안을 조정하였다.

4. (16점) 옆 그림과 같이 원자가 배열된 2차원의 고체에서 전자의 first Brillouin zone과 second Brillouin zone이 어떻게 되는지 그리고 그렇게 되는 이유를 설명하시오.

(풀이) 이같은 2차원의 고체에 대한 전자의 first BZ와 second BZ를 그리면 다음과 같다. 이는 기본적인 square-lattice에서의 전자의 BZ는 원자의 격자 배열을 45도 회전한 것과 같다는 것으로부터 예측할 수 있다.



이제 이와 같은 그림이 어떻게 나타났는지에 대해 보다 자세히 살펴보도록 하자. 이와 같은 현상이 일어나는 데 대한 기본적인 원리는 물질과의 Bragg reflection에 있음을 주지 하도록 한다.

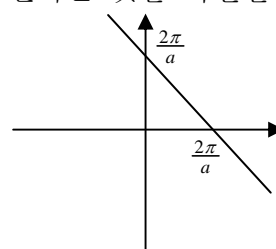
### 1) First Brillouin Zone

First Brillouin zone은 unit간의 길이가 보다 긴 사선방향의 plane에 대해서 Bragg reflection이 일어남으로써 발생한다. 이는 파장이 길수록 오히려 물질과의 momentum은 작다는 점으로부터 직관적으로 이해할 수 있다.

보다 자세히 그 조건을 구하기 위해 직접 Bragg condition을 구해보자. plane간의 길이가  $\frac{a}{\sqrt{2}}$ 인 사선방향에 대해서 Bragg condition을 구하면 다음과 같이 나타나게 된다.

$$k = \frac{n\pi}{\frac{a}{\sqrt{2}} \sin \theta} \quad (n=1,2,\dots)$$

이 때  $n=1$ 이라고 하면  $k \sin \theta = \frac{\sqrt{2}\pi}{a}$ 를 얻게 되고, 따라서 45도 기울어진 회전된 평면에 대해서 이를 만족하는 파수 벡터들은 k space 상에서 다음 그림과 같은 선을 형성하게 된다. 한편 이러한 현상은 k space 상에서 상하좌우 대칭적으로 나타나므로 First BZ는 처음 그림에서와 같은 마름모 꼴의 모양이 된다는 것을 확인할 수 있다.



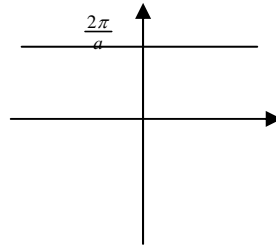


## 2) Second Brillouin Zone

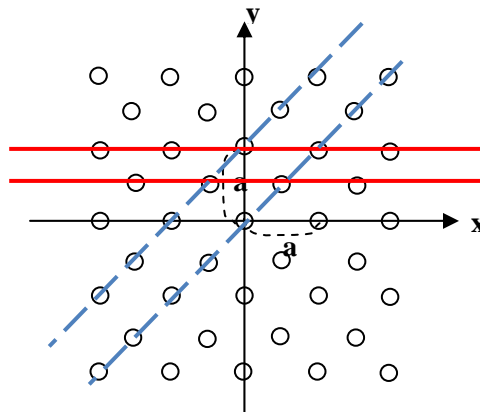
Second Brillouin zone 역시 위와 비슷한 방식으로 구할 수 있다. 단, 이 때는 plane간의 길이가 보다 짧은 정방향의 plane에 대해서 Bragg condition을 구해야 한다. 이를 위와 같은 식으로 plane간의 길이가  $\frac{a}{2}$ 인 정방향에 대하여 구해 보면,

$$k = \frac{n\pi}{\frac{a}{2} \sin \theta} \quad (n=1,2,\dots)$$

따라서 이 경우에는  $n=1$ 에서  $k \sin \theta = \frac{2\pi}{a}$ 를 얻으며, 기울어져 있지 않는 평면이므로 k space에서 그림을 그려보면 다음과 같은 선을 형성하게 된다. 이에 따라 마찬가지로 상하 좌우로 대칭적인 그림을 그려보면 Second BZ는 처음 그림에서와 같은 정사각형 꼴의 모양이 된다는 것을 확인할 수 있다.



(참고: 주어진 결정구조에서 BZ를 따질 때에 보는 사선방향과 정방향의 plane)



(배점)

- ① Brillouin Zone의 그림: 8점
- ② Bragg reflection을 통한 BZ의 설명: 8점 (각각 4점씩)

5. (28점) 다음 표의 빈칸들 (가)~(하)를 채우시오. (표는 생략)

(가) Indistinguishable

(나) Pauli exclusion principle (또는 exclusive principle)

(다) Indistinguishable

(라) Pauli Exclusion Principle

(마) Boson

(바) Symmetric

(사) Anti-symmetric

(아) Photons

(자) Phonons

(차) Electrons

(카)  $f_{MB}(\epsilon) = A e^{-\epsilon/k_B T}$

(타)  $f_{BE}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\alpha} e^{\epsilon/k_B T} - 1}$

(파)  $f_{FD}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\epsilon - \epsilon_F/k_B T} + 1}$

(하)  $f_{MB}$

---

(배점)

① 각 문항 당 2점씩

② 우리말로 쓴 답안에 대해서는 정답처리.