1. **(15점) 수업시간에 배운 논리를 사용하여 전자(electron)에 대한 통계물리 분포의 식을 유도하시오. (식만 쓰지 말고 중요 단계에서 그 식이 타당한 이유를 설명하시오. 자연수 n이 크면 $\ln(n!) \approx n\ln n - n$ 이다.)**

(답)

각각의 Energy state(E_i)에 있는 입자의 수를 N_i라 하면

$$N = N_1 + N_2 + \cdots + N_n$$
$$U = E_1N_1 + E_2N_2 + \cdots + E_nN_n$$
$$(\text{단}, U\text{와 } N\text{은 일정})$$

이 때 i 번째 state가 가지고 있는 Energy degeneracy를 g_i 라 하면 각각의 N_i 와 g_i 에 대해서 입자가 배분될 수 있는 경우의 수는 다음과 같이 생각해서 구할 수 있다. 전자의 경우는 fermion이기 때문에 Pauli의 배타율을 따른다. 따라서 하나의 방에 입자가 있거나 없거나 중 하나이므로 g_i 개의 방이 있고 N_i 개의 입자가 이 방에 각각 한 개씩 들어가는 입자의 구성을 생각해보면 이는 g_i개의 방 가운데 입자가 들어갈 N_i 개의 방을 뽑아내는 조합의 수라고 생각할 수 있다. 이 때 입자들은 서로 구별되지 않으므로,

$$Q(N_i) = \binom{g_i}{N_i} = \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} \tag{1.1}$$

이다. 그리고 모든 Energy state 에 대해서는

$$Q(N_1, N_2, N_3, ..., N_n) = \prod_{i=1}^{n} Q(N_i) = \prod_{i=1}^{n} \frac{g_i!}{N_i!(g_i - N_i)!} \tag{1.2}$$

이 된다. 이 Q 값이 최대가 되는(Most probable) 구성을 찾기 위해서 Lagrange multiplier method를 사용하면 된다. 이 때 Q값은 크기 때문에 자연 로그를 취한 값을 사용한다.

$$\frac{\partial \ln Q}{\partial N_i} + \alpha \frac{\partial f}{\partial N_i} + \beta \frac{\partial h}{\partial N_i} = 0 \text{ (for } i = 1, 2, ..., n) \tag{1.3}$$

$$f(N_1, N_2, ..., N_n) = N_1 + N_2 + ... + N_n = N$$
$$h(N_1, N_2, ..., N_n) = E_1N_1 + E_2N_2 + ... + E_nN_n = U$$

한편,

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \ln Q}{\partial N_i} &= \frac{\partial}{\partial N_i}(-\ln(g_i - N_i)! - \ln N_i!) \\
&= \frac{\partial}{\partial N_i}(-(g_i - N_i)\ln(g_i - N_i) + (g_i - N_i) - N_i \ln N_i + N_i) \\
&= (\ln(g_i - N_i) - (g_i - N_i)\frac{(-1)}{(g_i - N_i)} - \ln N_i - N_i \frac{1}{N_i}) \\
&= \ln(g_i - N_i) - \ln N_i = \ln(\frac{g_i}{N_i} - 1)
\end{aligned} \tag{1.4}$$

이를 식 (1.3)에 대입하면

$$\ln(\frac{g_i}{N_i} - 1) + \alpha + \beta E_i = 0 \tag{1.5}$$

$\alpha = \frac{E_F}{kT}, \beta = -\frac{1}{kT}$ 를 식 (1.5)에 넣어 정리한 후 $N_i = g_i f(E_i)$ 임을 이용하면

$$f(E_i) = \frac{N_i}{g_i} = \frac{1}{1+e^{-\alpha-\beta E_i}} \tag{1.6}$$

따라서 전자에 대한 분포의 식은

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{1+e^{(E-E_F)/kT}} \tag{1.7}$$

이다.

(채점 기준)

- 식 (1.2) 을 유도해 내는데 fermion의 특성과 관련된 설명이 없으면 3점, 설명이 포함되어 있을 경우 5점
- Lagrange multiplier method를 사용하는 이유에 대해서 설명 없이 사용할 경우 3점, 설명이 있으면 5점
- 식 (1.4) 임을 보이면 2점(과정이 없을 경우 점수 없음)
- 식 (1.6) 에서 $f(E_i) = \frac{N_i}{g_i}$ 임에 대한 언급 2점
- 식 (1.7) 임을 보이면 1점

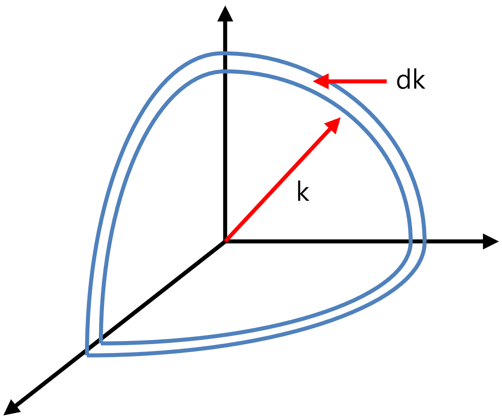
2번 문항. (25점)

3차원 box 에서의 파동함수는, 슈뢰딩거 방정식에 x,y,z가 0,L에서 파동함수가 0이라는 조건을 이용함으로써 다음과 같이 구해진다.

$$\psi(x,y,z) = A\sin(\frac{n_x\pi}{L_x}x)\sin(\frac{n_y\pi}{L_y}y)\sin(\frac{n_z\pi}{L_z}z)$$

문제의 경우, $L_x = L_y = L_z = L$ 이 되고, 따라서 $k_x = \frac{n_x\pi}{L}, k_y = \frac{n_y\pi}{L}, k_z = \frac{n_z\pi}{L}$ 으로 주어진다.

구하려고 하는 것은 mode density g(k) 로, 이것은 아래 그림과 같은 k 껍질 내에 들어있는 mode 의 수를 나타내는 것과 같다.



$$g(k)dk = \frac{1}{8}\times\frac{4\pi k^2 dk}{(\frac{\pi}{L})^3}\times 2 = \frac{L^3}{\pi^2}k^2 dk$$

(n은 양수만 해당되므로 1/8을 곱해야 하며, 2는 전자의 spin이 두 방향이 있기 때문에 곱해진다.)

단위 부피당 mode의 개수라고 생각하게 되면,

$g(k)dk = \frac{k^2}{\pi^2}dk$ 으로 적을 수 있으며,

$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, $dE = \frac{\hbar^2 k}{m}dk$ 임을 이용하여 위 식을 k대신 E에 관한 식으로 바꾸게 되면,

$g(E)dE = (\frac{k}{\pi^2})\times(kdk) = (\frac{\sqrt{2mE}}{\pi^2\hbar})\times(\frac{mdE}{\hbar^2}) = \frac{\sqrt{2}m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E}dE$ 가 된다.

이제 두께가 d(≪ L) 인 경우, 두께를 z축이라 하면, $k_z = \frac{n_z\pi}{d}$ 값은 k_x ,k_y 에 비해서 매우 커지게 되어, 2차원 square에서의 solution이 1차원적으로 discrete 하게 더해지는 것으로 생각할 수 있다.

2차원 문제의 경우를 위와 비슷한 방법으로 풀어보면,

$g(k)dk = \frac{1}{4}\times\frac{2\pi kdk}{(\frac{\pi}{L})^2}\times 2 = \frac{L^2}{\pi}kdk$, 단위 면적당 모드는, $g(k)dk = \frac{k}{\pi}dk$

마찬가지로 $dE = \frac{\hbar^2 k}{m}dk$ 임을 이용하면, $g(E)dE = \frac{m}{\pi\hbar^2}dE$

즉, $g(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2}$ 이라는 constant로 주어지는데, 이것은 x,y 방향에 대한 것이다.

$E < \frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}1^2$ 인 경우, $E = E_{xy} + E_z = E_{xy} + \frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}n_z^{\ 2}$ ($n_z = 0,1,2...$) 를 만족하는 n_z 는 0뿐이므로, $g(E) = 0$ 이다.

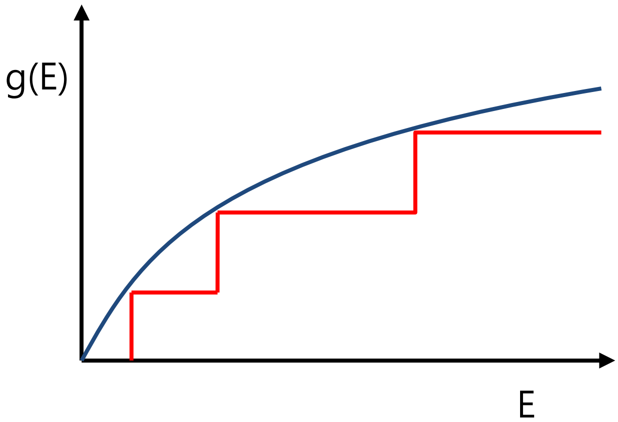
$\frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}1^2 < E < \frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}2^2$ 인 경우, 만족하는 n_z 가 (0),1 이고, x,y방향으로는 $g(E) = \frac{m}{\pi\hbar^2}$ 개의

Density of states 를 가지므로 총 Density of states는 $g(E)=\frac{m}{\pi\hbar^2}$ 이다.

$\frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}2^2 < E < \frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}3^2$ 인 경우, 만족하는 n_z 가 (0),1,2 이고, 각각의 대해 $g(E)=\frac{m}{\pi\hbar^2}$ 개의 Density of states 를 가지므로 총 Density of states는 $g(E)=\frac{2m}{\pi\hbar^2}$ 이다.

이런 식으로 $\frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}n_z^2 < E < \frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}(n_z+1)^2$ 의 영역에서는 $g(E)=\frac{m}{\pi\hbar^2}n_z$ 으로 주어지게 된다.

이것은 아래 그림과 같이 discrete한 분포를 따르게 되며,



d값이 다시 커지게 되면, $E=\frac{\hbar^2\pi^2}{2md^2}n_z^2$ $(n_z=0,1,2...)$ 에서 n_z 가 discrete해도 E는 거의 continuous 하게 되므로,

$\frac{m}{\pi\hbar^2}n_z=\frac{m}{\pi\hbar^2}(\frac{\sqrt{2md}}{\hbar\pi}\sqrt{E})=\frac{\sqrt{2}m^{\frac{3}{2}}d}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E}$ 가 되고, 역시 d에 대해서 normalization하면, 앞에서 구한 3차원 문제와 동일해 짐을 알 수 있다.

그림으로 생각하면, 위 그림에서 discrete한 붉은 선이 점차 촘촘해지면서 푸른 선으로 수렴하게 되는 것이라고 볼 수 있다.

(채점 기준)

(1)3차원 box에서의 Density of states 계산 (10점)

(2)d<<L인 경우, kz값이 커지고 2차원 square의 discrete한 sum으로 표현됨을 설명(3점)

(3)2차원 square문제 풀이(5점)

-결과만 적으면 2점 감점

(4)d가 커짐에 따라 3차원 box의 문제로 수렴함을 설명(7점)

틀린 전개를 통하여 동일한 답을 얻어낸 경우 5점 감점

계산 실수 3점 감점

3. (15점) Photodiode, light emitting diode, laser diode가 어떻게 다른지 총 15 줄 이내로 설명하시오.

Photodiode는 빛 에너지를 전기에너지로 변환하는 Optical sensor의 한 종류이다. 이것은 반도체의 PN junction에 optical detection 기능을 추가한 것으로 Photodiode는 응답속도가 빠르고, 감도 파장이 넓으며, 광전류의 직진성이 양호하다는 특징이 있다.

Light Emitting Diode(LED)는 majority carrier가 electron인 n형 반도체 결정과 majority carrier가 hole인 p형 반도체 결정이 서로 접합된 구조를 가지는 광전변환 반도체 소자로서, 화합물 반도체의 특성을 이용해 전기신호를 원하는 영역의 파장대역을 갖는 빛으로 변환시켜 신호를 보내고 받는데 사용된다. GaAs와 같은 direct bandgap semiconductor를 이용하며, 전류가 흘러서 생긴 electron hole pair(EHP)가 recombination되면서 생기는 photon의 **spontaneous emission**결과 빛을 방출하게 된다. **그 결과 방향성이 없고, 파장이 LD에 비하여 넓은 영역에 걸쳐 있게 된다.**

Photodiode는 빛 에너지를 전기에너지로 전환하지만, LED는 전기에너지를 빛 에너지로 전환한다.

Laser Diode(LD)는 외부에서 반도체 접합에 전류를 인가함으로써 접합재질에 따른 특정파장의 빛이 방출되며, 이 빛이 반도체 소자 자체에 형성된 (또는 외부에 설치된) Optical resonator를 통해 Feedback되면서 반복적으로 **stimulated emission** 된다. **그 결과 나오는 빛은 직진성이 좋고 파장의 범위도 비교적 좁다.**

Photodiode 는 역방향 bias, LED와 LD는 순방향 bias에서 작동한다.

<채점 기준>
Photodiode, LED, LD 각 5점씩
각각의 굵은 글씨에 대한 내용 없으면 -1점씩
각 소자에 대한 기본적인 설명이 부족하면 각 해당점수 5점에서 2점 감점

4. **(20점) 다음의 물음에 답하시오.**

(a) **(4점) 어떤 학자가 다음과 같이 말했다. 그 학자는 누구이겠는가? "When I started to think about it, I felt that the main problem was to explain how the electrons could sneak by all the ions in a metal... By straight Fourier analysis I found to my delight that the wave differed from the plane wave of free electrons only by a periodic modulation."**

(답) Felix Bloch

(채점 기준)

- Kronig- Penney라고 적은 경우 2점

(b) **(8점) 다음 그림이 말하고자 하는 바를 5줄 이내로 설명하시오.**

(답) 일반적인 자유 공간에서 전자의 움직임은 k에 대해서 연속적인 에너지 값을 가지게 된다. 하지만 원자핵이 주기적으로 배열되어 있는 공간을 전자가 느낄 때는 특정 파수에 대해서 Bragg 회절(반사)에 의해 좌우로 진행하지 못하는 standing wave가 형성이 되고 하나의 k 값에 대해서 두 가지의 에너지를 가지는 상태가 존재하게 된다. 또한 이 경우 두 에너지 사이의 값을 갖는 상태는 존재할 수 없게 되는 Energy gap이 생기게 된다.

(채점 기준)

- Energy gap 에 대한 설명이 말 혹은 그림으로 포함되어 있을 경우만 8점

(4점) 그리고, $|\psi(+)|^2$와 $|\psi(-)|^2$ 중 어느 쪽이 에너지가 더 큰 경우인가?

(답) $|\psi(-)|^2$ 가 에너지가 더 큰 경우이다.

(채점 기준)

- 답이 맞을 경우만 4점. 이외에는 전부 점수 없음.

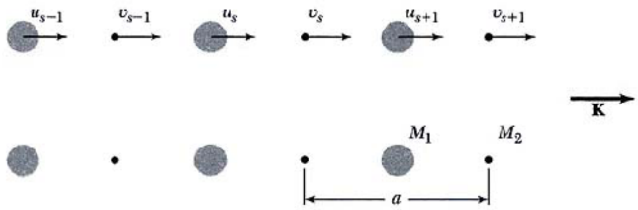
(4점) 그 이유는?

(답) 그림에서 나타내고 있는 함수는 확률 밀도 함수로써 이 값이 클 경우 그 곳에서 전자가 발견될 확률이 크다는 것을 의미한다. 그림에서 보면 $|\psi(+)|^2$의 경우는 원자핵에서 발견될 확률이 크고 $|\psi(-)|^2$의 경우는 원자핵과 원자핵 사이에서 발견될 확률이 크다. 원자핵 근처에서는 potential energy가 낮고 원자핵과 원자핵 사이에서는 potential energy가 크므로 전자가 원자핵과 원자핵 사이에서 발견될 확률이 크다는 것은 원자핵 근처에서 발견될 경우 보다 그만큼 에너지가 높은 상태에 있다는 것을 의미한다.

(채점 기준)

- 그림에 표시된 probability density와 potential 에너지와의 관계를 잘 이해하고 있을 경우만 4점.

5. (25점) Phonon과 관련된 보충자료에 다음 그림이 있었다. 이에 대해 아래와 같은 식들이 성립한다. 아래 식들에서 네모 네 개에 들어갈 부호(더하기, 빼기, 곱하기 또는 나누기)들을 각각 쓰시오. 또한 K에 따른 ω의 대략적 그림을 그리고, 곡선들에서 각 끝 점의 좌표를 쓰시오. (외워서 쓰지 말고 유도할 것.). 단, $M_1 > M_2$ 이다.



$$M_1 \frac{d^2u_s}{dt^2} = C(v_s \boxed{+} v_{s-1} \boxed{-} 2u_s) \ ;$$
$$M_2 \frac{d^2v_s}{dt^2} = C(u_{s+1} \boxed{+} u_s \boxed{-} 2v_s) \ . \qquad ①$$

Traveling wave form의 solution

$$u_s = u\exp(isKa)\exp(-i\omega t) \qquad\qquad v_s = v\exp(isKa)\exp(-i\omega t) \qquad ②$$

②를 ①에 대입하여 정리하면,

$$-\omega^2 M_1 u = Cv[1+\exp(-iKa)] - 2Cu$$
$$-\omega^2 M_2 v = Cu[1+\exp(iKa)] - 2Cv \qquad ③$$

이 때, u와 v의 일차 연립방정식의 nontrivial solution이 존재하려면, matrix로 나타내었을 경우의 determinant가 0이 되어야 한다.

$$\begin{vmatrix} 2C - M_1\omega^2 & -C[1+\exp(-iKa)] \\ -C[1+\exp(iKa)] & 2C - M_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0$$

$Ka \ll 1$, $Ka = \pm\pi$ (at the zone boundary) 라고 가정하고 ω^2 에 대한 solution을 구하면,

$$\omega^2 \cong 2C(\frac{1}{M_1}+\frac{1}{M_2})$$ (optical branch)

$$\omega^2 \cong \frac{\frac{1}{2}C}{M_1+M_2}K^2a^2$$ (acoustical branch)

$K_{max} = \pm\frac{\pi}{a}$ 일 때, $\omega^2 = \frac{2C}{M_1}$, $\omega^2 = \frac{2C}{M_2}$

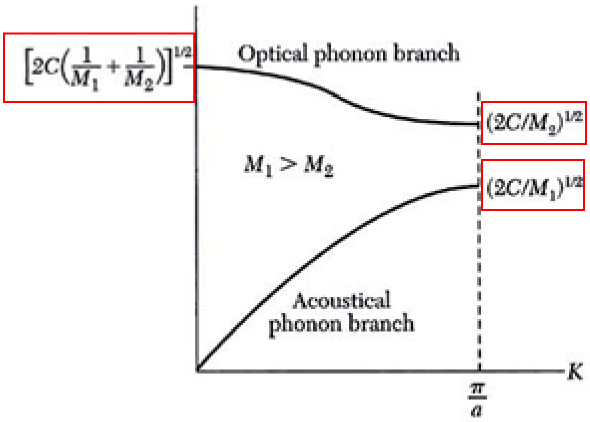


Figure 7 Optical and acoustical branches of the dispersion relation for a diatomic linear lattice, showing the limiting frequencies at $K = 0$ and $K = K_{max} = \pi/a$. The lattice constant is a.

<채점 기준>

부호 -> 8점(하나에 2점씩)

유도과정 -> 10점

그림 -> 7점

유도과정이나 그림이 없으면 각 해당점수 없음

유도과정이 부실한 경우 -5점

그림 제대로 표현 안 된 경우 -3점