강자성 도메인벽 동역학

이 문제에서는 강자성 시뮬레이터(Ferromagnetic Simulator) 프로그램을 이용하여 물리량을 계산한다. 자세한 프로그램 설명은 문제 끝에 제공된다.

얻은 수치 값을 엑셀 파일에 기록하되, 각 파일 제목에 해당 문제 절의 번호를 명시한다. 각 열에는 어떤 물리량을 담고 있는지 표시한다. 그래프도 같은 파일에 그릴 수 있다. 답안지에는 계산에 필요한 공식과 풀이를 설명하는 그림을 포함한다. 풀이 과정에서 생성한 모든 파일을 "report" 폴더에 저장한다.

경고! 프로그램은 계산에 수 분이 걸릴 수 있다. 작업 속도를 높이려면 프로그램의 여러 인스턴스를 실행할 수 있다. 한 인스턴스가 계산을 수행하는 동안 다른 인스턴스에서 얻은 그래프를 분석할 수 있다. 나중에 사용할 수 있도록 결과를 저장하는 것을 잊지 말 것.

강자성체(ferromagnet)는 외부 자기장이 없어도 0이 아닌 자기 모멘트를 가질 수 있는 물질이다. 강자성 물질의 상태는 자기 모멘트 밀도 $\vec{M}$, 즉 자화(magnetization)로 특징지어진다. 평형 상태에서 자기 모멘트 분포는 국소 에너지 최소에 해당한다. 강자성체는 서로 다른 자기 모멘트 방향을 갖는 영역 — 도메인(domain) — 으로 나뉜다. 이 도메인들은 도메인벽(domain wall) — 자화 방향이 바뀌는 전이 영역 — 으로 분리된다.

에너지가 최소가 아니거나 외부 자기장이 가해지면 자화는 시간에 따라 변한다. 자화의 시간 변화는 란다우-리프시츠-길버트(Landau–Lifshitz–Gilbert, LLG) 방정식으로 지배된다.

$$\frac{\partial \vec{M}}{\partial t} = -\gamma\, \vec{M} \times \vec{B}_{\text{eff}} + \alpha\, \frac{\vec{M}}{M_0} \times \frac{\partial \vec{M}}{\partial t}.$$

첫째 항은 자기장 속에서의 자화 세차운동을, 둘째 항은 에너지 소산을 기술한다. 여기서 $\vec{B}_{\text{eff}}$는 주어진 점에 작용하는 유효 자기장이다. 유효 자기장은 주어진 점의 자화와 그 이웃의 자화에 의존한다. γ는 자기회전비(gyromagnetic ratio, 전자의 자기 모멘트와 각운동량의 비), α는 무차원 길버트 감쇠 상수(Gilbert damping constant), M_0는 자화의 크기이다.

강자성체의 에너지 밀도(단위 부피당 에너지)가 자화의 함수 $w(\vec{M})$로 알려져 있다고 하자. 유효 자기장은 다음 도함수로 계산할 수 있다.

$$\vec{B}_{\text{eff}} = -\frac{\partial w}{\partial \vec{M}},$$

여기서 벡터에 대한 도함수는 자화 성분에 대한 도함수로 이루어진 벡터이다.

$$B_{\text{eff},x} = -\frac{\partial w}{\partial M_x}, \quad B_{\text{eff},y} = -\frac{\partial w}{\partial M_y}, \quad B_{\text{eff},z} = -\frac{\partial w}{\partial M_z}.$$

예를 들어 물질이 외부 자기장 $\vec{B}_0$에 놓이면, 이에 대응하는 에너지 밀도 기여는

$$\Delta w_B = -\vec{M} \cdot \vec{B}_0,$$

이고, 이에 대응하는 유효 자기장 변화는 $\Delta \vec{B}_{\text{eff}} = \vec{B}_0$이다.

이 문제에서는 데카르트 좌표에서 벡터곱에 대한 다음 공식을 사용할 수 있다.

$$(\vec{a} \times \vec{b})_x = a_y b_z - a_z b_y, \quad (\vec{a} \times \vec{b})_y = a_z b_x - a_x b_z, \quad (\vec{a} \times \vec{b})_z = a_x b_y - a_y b_x.$$

좌표축 x, y, z 방향의 단위 벡터는 각각 $\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$, $\vec{e}_z$이다.

Part A, B, C는 독립적으로 풀 수 있다.

Part A. 단일 자기 모멘트 (2.0점)

A.1 자화 $\vec{M}$이 LLG 방정식에 따라 변화하면, 벡터 $\vec{M}$의 크기가 시간에 따라 일정함을 보여라. **0.3점**

자화가 균일하다고(좌표에 무관) 하자. 단위 벡터 $\vec{m} = \vec{M}/M_0$을 정의한다. 여기서 $M_0 = |\vec{M}|$이다. LLG 방정식은 다음 형태로 쓸 수 있다.

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = -\gamma\,\vec{m} \times \vec{B}_{\text{eff}} + \alpha\,\vec{m} \times \frac{d\vec{m}}{dt}.$$

자화는 시간에만 의존하므로 편도함수 대신 전도함수를 쓸 수 있다. 계산을 위해 시간 도함수의 명시적 공식을 갖는 것이 유용하다.

$$\frac{d\vec{m}}{dt} = -\frac{\gamma}{1+\alpha^2}\,\vec{m} \times \vec{B}_{\text{eff}} - \frac{\alpha\gamma}{1+\alpha^2}\Big((\vec{m}\cdot\vec{B}_{\text{eff}})\,\vec{m} - \vec{B}_{\text{eff}}\Big).$$

A.2 강자성체가 z축 방향의 균일한 일정 자기장 B_0에 놓여 있다고 하자. 그러면 $\vec{B}_{\text{eff}} = B_0\vec{e}_z$이다. 성분 $m_z(t)$의 시간 의존성을 구하라. 초기 시각에 $m_y = m_z = 0$, $m_x = 1$이다. 다음 적분을 사용해도 된다. **0.9점**

$$\int \frac{dx}{1-x^2} = \frac{1}{2}\ln\left|\frac{1+x}{1-x}\right| + C.$$

A.3 앞 문제에서 기술한 계를 생각하자. 자기 모멘트 $\vec{m}$의 xy 평면으로의 사영이 z축을 중심으로 일정한 각속도로 회전함을 보여라. 이 각속도 Ω를 구하고, 답을 γ, α, B_0로 표현하라. **0.8점**

따라서 자기 모멘트는 유효 자기장 $\vec{B}_{\text{eff}}$를 중심으로 세차운동하며, 자기 모멘트는 점차 자기장 방향으로 정렬된다.

Part B. 정적 도메인벽 (3.5점)

이 부분에서는 정사각형 단면(정사각형 한 변의 크기 a)을 갖는 가는 강자성 와이어를 생각한다. 와이어 길이는 L이다. 와이어를 $N = L/a$개의 한 변 길이 a인 정육면체 셀로 나눈다. 각 셀 안에서 자화 $\vec{M}_i$는 균일하다고 가정한다. 자화의 크기 M_0가 일정하므로, 단위 벡터 $\vec{m}_i = \vec{M}_i/M_0$만 지정하면 충분하다. x축이 와이어를 따라 향하고, y, z축은 단면 변을 따른다고 하자.

각 정육면체 셀(한 변 a)의 에너지는 다음 항들로 구성된다.

1. 자화 방향에 의존하는 이방성 에너지(anisotropy energy). 고려하는 와이어에 대해

$$W_{an} = -\frac{Ka^3 M_z^2}{2M_0^2} + \frac{K_1 a^3 M_y^2}{2M_0^2},$$

여기서 $K, K_1 > 0$은 상수이다. 이 에너지는 자화가 z축 방향일 때 최소이다.

2. 이웃한 셀 자기 모멘트 쌍의 상대적 방향에 의존하는 교환 에너지(exchange energy). 한 쌍의 셀에 대한 에너지는

$$W_{ex,i} = -\frac{A}{M_0^2}\,\vec{M}_i\vec{M}_{i+1}\,a,$$

여기서 $A > 0$은 상수이므로, 자기 모멘트가 같은 방향으로 정렬된 배치가 선호된다. 이웃한 셀 쌍마다 이러한 기여가 존재한다.

3. 외부 자기장 속 에너지

$$W_B = -a^3 \vec{B}\vec{M}.$$

위 표현식들은 에너지 밀도가 아니라 에너지임에 유의하라. 따라서 **유효 자기장 $\vec{B}_{\text{eff}}$ 성분을 계산하려면** 에너지를 자화에 대해 미분한 뒤 a^3으로 **나누어야** 한다.

다음 매개변수를 갖는 물질을 생각한다.

1. $A = 4.5 \times 10^{-10}\ \text{J/m}$;
2. $K = 5.0 \cdot 10^5\ \text{J/m}^3$;
3. $\gamma = 1.76 \cdot 10^{11}\ \text{s}^{-1} \cdot \text{T}^{-1}$;
4. $M_0 = 6.0 \cdot 10^5\ \text{A/m}$.

정육면체 셀의 한 변 크기는 $a = 3.0\ \text{nm}$이다.

B.1 위 에너지에 대응하는 유효 자기장은 다음과 같이 쓸 수 있다. **0.5점**

$$\vec{B}_{\text{eff},i} = B_{an} m_{i,z}\vec{e}_z + B_{ex}(\vec{m}_{i-1} + \vec{m}_{i+1}) - k_1 B_{an} m_{i,y}\vec{e}_y + \vec{B}_0.$$

여기서 $k_1 = K_1/K$는 무차원 계수이다. 모든 계산에서 $k_1 = 1$을 사용한다.
자기장 B_{ex}와 B_{an}의 공식과 수치 값을 구하라. 자기 모멘트 세차운동의 특성 진동수 $\omega = \gamma B_{an}$을 계산하라.

아래에서 모든 자기장은 B_{an} 단위로, 시간은 $1/\omega$ 단위로 측정하며, $\tau = \omega t$이다. 따라서 무차원 유효 자기장은

$$\vec{b}_{\text{eff},i} = m_{i,z}\vec{e}_z + \beta(\vec{m}_{i-1} + \vec{m}_{i+1}) - k_1 m_{i,y}\vec{e}_y + \vec{b},$$

이고, LLG 방정식은

$$\frac{d\vec{m}_i}{d\tau} = -\vec{m}_i \times \vec{b}_{\text{eff}} + \alpha\,\vec{m}_i \times \frac{d\vec{m}_i}{d\tau}.$$

이방성 에너지는 자기 모멘트가 z축과 평행할 때, 즉 $m_{i,z} = \pm 1$일 때 최소이다. $m_{i,z} = +1$인 영역과 $m_{i,z} = -1$인 영역 사이의 도메인벽은, 자화 방향이 양의 z축 방향에서 음의 z축 방향으로 바뀌는 전이 영역이다. 강자성 시뮬레이터 프로그램을 사용하여 도메인벽 내부의 좌표 x에 대한 자화 의존성을 연구할 것이다.

초기 시각에 와이어 왼쪽 부분의 자화는 $m_{i,z} = +1$, 오른쪽 부분은 $m_{i,z} = -1$이다. 자화 방향의 급격한 변화는 큰 교환 에너지를 초래하므로, 이 배치는 최적이 아니다. 큰 소산 상수 α를 설정하고 계가 시간에 따라 어떻게 변하는지 살펴보자. 비교적 짧은 시간이 지나면 계의 에너지는 최소에 가까워지고 계는 거의 변하지 않게 된다.

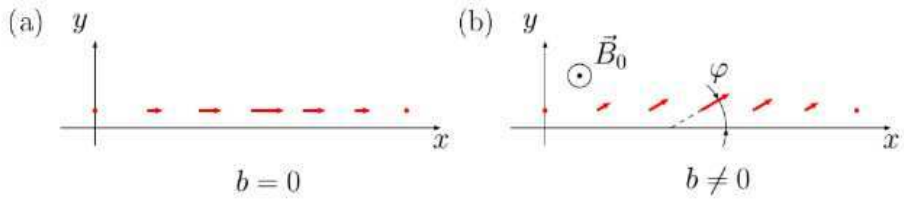
Part B2–B4에서 외부 자기장은 0이다, $b = 0$!

B.2	프로그램에서 매개변수 $\beta = 100$, $b = 0$으로 설정한다. 시간 T가 지난 후 계의 변화 속도가 무시할 만하도록 변화 시간 T와 감쇠 상수를 선택한다. 사용한 α, T 값을 답안지에 표시한다. "report" 폴더에 선택한 α, T 매개변수 값에 대한 프로그램 출력을 "B2"라는 파일명으로 저장한다. 도메인벽 폭 d는 $m_z = \pm 0.5$인 점들 사이의 거리이다. d의 값을 a 단위로 구하라.	**1.0점**

B.3	교환 에너지(β 값에 비례)에 대한 도메인벽 폭의 의존성을 $\beta = 20$에서 $\beta = 400$ 구간에서 연구하라. 적어도 5개의 점을 얻어라. 사용한 β 값과 대응하는 d 값을 엑셀 파일 "B3"에 기록하라. 사용한 열에 물리량의 이름을 적는 것을 기억하라. "report" 폴더에 프로그램 출력을 파일명 "B3_j"로 저장하라(j는 측정 번호). 작업지에 필요한 계산과 설명을 제시하라.	**1.5점**

B.4	$d(\beta) \sim \beta^c$라 할 때, 앞 부분의 결과를 이용하여 c의 값을 계산하라. 그래프를 그려야 한다면 엑셀 파일 "B3"에 저장하라.	**0.5점**

Part C. 외부 자기장 속 도메인벽 운동 (4.5점)



x 좌표에 대한 xy 평면으로의 자기 모멘트 사영 의존성: (a) 외부 자기장 없음, (b) 외부 자기장 있음

z축 방향으로 외부 자기장을 켠다, $b_{0,z} = b > 0$. 도메인벽이 움직이기 시작한다. $b < b_{cr}$이면 도메인벽은 등속 운동으로 정착하고, $b > b_{cr}$이면 운동은 비균일하게 유지된다. 임계 자기장 값 b_{cr}을 워커 한계(Walker limit)라 한다.

움직이는 도메인벽의 자기 모멘트 분포는 정적 도메인벽의 분포와 관련지을 수 있다. 자기장이 없을 때

$m_x(x) = f(x-x_0)$, $m_y = 0$이며, x_0은 도메인벽 중심 좌표이다. 자기장을 켠 후에는 $m_x(x) = f(x-x_0)\cos\varphi$, $m_y = f(x-x_0)\sin\varphi$이며, 각 φ는 좌표에 무관하고 x_0은 주어진 시각의 도메인벽 중심 좌표이다. 등속 운동 동안 각 φ는 시간에 무관하다.

Part C에서 모든 길이는 a 단위로, 모든 시간은 $1/\omega$ 단위로 측정하며, 항상 $\beta = 100$, $\alpha = 0.2$를 사용한다.

C.1 도메인벽이 어느 방향으로 움직이기 시작하는가(오른쪽 또는 왼쪽)? **0.2점**

C.2 프로그램에서 $\alpha = 0.2$, $\beta = 100$으로 설정한다. 외부 자기장 b에 대한 도메인벽 속도 v와 각 φ의 의존성을 구하라. $b = 0$에서 $b = b_{cr}$ 범위의 자기장을 연구하라. 사용한 b 값과 대응하는 v, φ 값을 엑셀 파일 "C2"에 기록하라. 사용한 열에 물리량의 이름을 적는 것을 기억하라. "report" 폴더에 프로그램 출력을 파일명 "C2_j"로 저장하라(j는 측정 번호). 작업지에 필요한 계산과 설명을 제시하라. $b_{cr} < 0.15$임이 알려져 있다. $b < b_{cr}$ 범위에서 적어도 5개의 점을 얻어야 한다. 도메인벽 운동 동안 그 중심에서 와이어 가장자리까지의 거리가 40보다 작아지면 가장자리 효과가 해를 크게 변형시켜 올바른 결과를 얻을 수 없음에 유의하라. 따라서 임계에 가까운 자기장 값에서는 가용한 최대 길이 $L = 200$을 사용해야 할 수 있다. 더 작은 자기장 값에서는 계산 속도를 높이기 위해 더 짧은 길이를 사용해도 된다. **2.0점**

C.3 의존성 $v(b)$를 그리고, 선형 부분에 대해 기울기 $\dfrac{dv}{db}$를 계산하라. 그리기에는 엑셀 파일 "C2"를 사용하라. **0.4점**

C.4 이론적 계산에 따르면 $b < b_{cr}$에 대해 속도는 다음과 같다. **0.6점**

$$v = v_c \sin 2\varphi.$$

Part C2의 데이터를 이용하여 선형화된 그래프를 그리고 v_c와 b_{cr}의 값을 구하라. 그리기에는 엑셀 파일 "C2"를 사용하라.

C.5 Part B의 수치 값을 이용하여 v_c를 m/s 단위로, $B_{cr} = B_{an} b_{cr}$을 T 단위로 계산하라. **0.3점**

C.6 $b > b_{cr}$에 대한 도메인벽 운동을 연구하자. $b = 0.2$에 대해 시간에 따른 도메인벽 좌표의 의존성을 측정하라. 도메인벽 좌표와 대응하는 시간 값을 엑셀 파일 "C6"에 기록하고, 해당 열에 물리량의 이름을 적는 것을 기억하라. 이 의존성을 그려라. 사용한 프로그램 출력을 "report" 폴더에 파일명 "C6"으로 저장하라. **1.0점**

강자성 시뮬레이터 프로그램 사용 설명

강자성 시뮬레이터 프로그램은 Part B에서 기술한 자기 모멘트 계에 대한 란다우-리프시츠-길버트(LLG)

방정식을 수치적으로 푼다. 상단의 라디오 버튼을 토글하여 문제 절(B 또는 C)을 선택할 수 있다. 이는 정육면체의 개수(N)와 초기 자기 모멘트 값에 영향을 준다.

매개변수 지정
두 문제 절 모두에 대해 다음 매개변수를 지정할 수 있다.

1. 길버트 감쇠 계수 α(입력란: alpha), 입력값은 $\alpha \in [0; 1]$을 만족해야 한다.
2. 매개변수 β(입력란: beta), 입력값은 $\beta \in [0; 500]$을 만족해야 한다.
3. 외부 자기장 b(입력란: b), 입력값은 $b \in [0, 1]$을 만족해야 한다.
4. 시뮬레이션 시간 T(입력란: T, Part B에서 정의한 무차원 단위), 입력값은 $T \in [0, 100]$을 만족해야 한다. 프로그램은 구간 $t \in [0, T]$에 대해 해를 계산한다.

Part C에서는 도메인벽 중심의 초기 위치에서 와이어 오른쪽 가장자리까지의 거리 L(정육면체 셀 크기 a 단위)도 지정할 수 있다. 입력값은 $L \in [50, 200]$을 만족해야 한다. L을 늘리면 도메인벽 운동 관찰이 개선되지만 계산 시간이 늘어난다. 도메인벽은 항상 왼쪽 가장자리에서 고정 거리 $L_1 = 50$에 위치하므로, 전체 계의 길이는 $L_1 + L$이다.

시뮬레이션 실행
원하는 매개변수를 설정하고 **Solve**를 클릭한다. 프로그램이 LLG 방정식을 수치적으로 적분한다. 일부 초기 조건에서는 계산에 수 분이 걸릴 수 있다. 해가 계산되면 **Plot** 버튼이 활성화된다.

결과 그리기
시간 $t \in [0, T]$을 지정하고 **Plot**을 클릭한다. 프로그램이 시각 t에서 $m_x(x)$, $m_y(x)$, $m_z(x)$의 부드러운 곡선을 표시한다.

실제로 계산된 값은 정수 위치 $x = i$에서만 존재함에 유의하라. 프로그램은 **200개의 시간점**에서 해를 산출하며, 이들은 $T/200$ 간격으로 균등하게 배치된다. **요청한 시간이 일치하지 않으면 가장 가까운 가용 값으로 반올림된다.**

저장/불러오기 기능
Save를 사용하여 해를 "report" 폴더에 저장한다. **Load**를 사용하여 이전에 저장한 해를 불러온다. 불러온 후에는 다시 계산하지 않고도 200개의 저장된 시간점 중 어느 것에 대해서든 $m_x(x)$, $m_y(x)$, $m_z(x)$를 그릴 수 있다. 참고: 사용하는 모든 해를 저장하라.

초기 조건
Part B에서 프로그램은 $N = 201$과 다음 초기 조건을 가정한다.

1. $m_{i,z} = +1$ for $i = 0, \ldots, 97$,
2. $m_{i,x} = 1$ for $i = 98, \ldots, 102$,
3. $m_{i,z} = -1$ for $i = 103, \ldots, 200$.

$\vec{m}_i$의 다른 모든 성분은 0이다.

Part C의 초기 상태로, 프로그램은 $N = 401$개의 정육면체 셀에 대해 $\beta = 100$의 정적 해를 미리 계산한다. 지정된 계의 길이(L 매개변수로 결정)에 맞추기 위해, 필요한 영역을 넘어서는 초과 값은 잘라낸다.

폴리인의 진동 구조

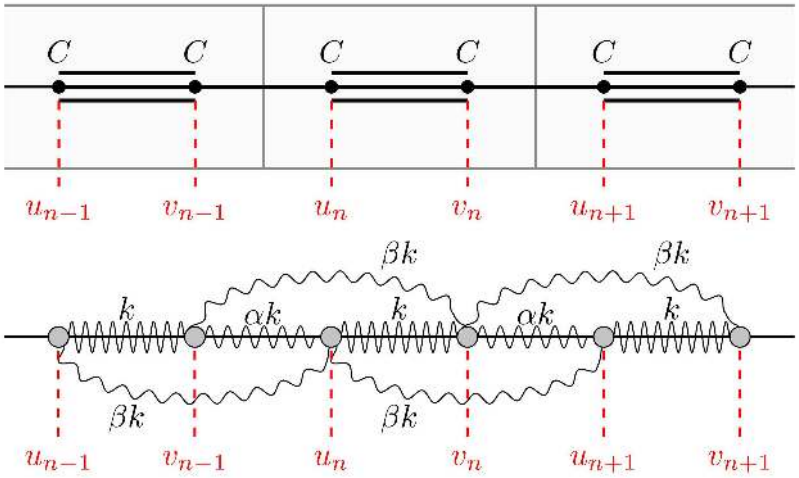
이 문제에서는 폴리인(polyyne) — 구조 안에 탄소 원자 사이의 단일 결합과 삼중 결합이 교대로 나타나는 유기 화합물 — 을 탐구한다. 다음 상수를 사용할 수 있다.

- $N_A = 6.02 \cdot 10^{23}\ \mathrm{mol}^{-1}$ — 아보가드로 수,
- $M_C = 12.0\ \mathrm{g/mol}$ — 탄소 원자의 몰질량,
- $\hbar = \dfrac{h}{2\pi} = 1.055 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{J \cdot s}$ — 약분된 플랑크 상수.

Part A. 무한한 탄소 원자 사슬 (6.5점)

먼저 그림과 같이 단일 결합과 삼중 결합이 교대로 나타나는 1차원 무한 탄소 원자 사슬을 살펴본다. 공-용수철 모형(ball-and-spring model)으로 계를 기술한다. 모든 탄소 원자(공)는 동일한 질량 m을 가지며, 삼중 결합은 용수철 상수 k인 용수철에, 단일 결합은 용수철 상수 αk인 용수철에 대응하고, 추가로 한 칸 건너 원자(공)마다 용수철 상수 βk인 용수철로 연결되어 있다고 가정한다(시각화 편의상 이러한 용수철은 그림에서 곡선 모양으로 표시되어 있으나, 실제로는 모든 용수철이 수평이다).

다음 표기를 사용한다: u_n, v_n — 삼중 결합으로 연결된 왼쪽과 오른쪽 원자(공)의 평형 위치로부터의 변위. 이러한 두 원자가 단위 격자(unit cell)를 이룬다고 한다. 지수 n은 모든 정수 값을 취함에 유의하라.



A.1 계의 총 에너지에 대한 표현식을 쓰라. 답을 모든 좌표 u_n, v_n, 그들의 1차 시간 도함수, 그리고 매개변수 m, k, α, β로 표현하라. **0.8점**

계의 총 에너지의 시간 도함수는 $\dot{E} = \sum_n (A\dot{u}_n + B\dot{v}_n)$으로 표현할 수 있으며, A와 B는 u_n, v_n 및 그들의 2차 시간 도함수를 포함하는 표현식이다. 방정식 $A = 0$과 $B = 0$은 계의 운동을 기술하며 뉴턴 제2법칙과 동등한 것으로 밝혀진다.

다음 형태의 무한 합은 지수 "이동"으로 변환할 수 있음에 유의하라.

$$\sum_n a_n b_{n-1} = \sum_n a_{n+1} b_n.$$

A.2 모든 원자의 운동을 기술하는 미분방정식 계를 유도하라. 답을 좌표 u_n, v_n과 그들의 2차 시간 도함수, 그리고 매개변수 m, k, α, β로 표현하라. **0.8점**

이러한 선형 미분방정식 계를 풀기 위해 복소 진폭법(method of complex amplitudes)을 사용한다. 이는 복소 함수 형태의 해를 찾는 것으로, 참 해는 그 실수부(또는 허수부)에 해당한다. 이 문제에서 우리는 평면파 형태의 해에 관심이 있다.

$$u_n(t) = U \cdot \exp(-i\omega t + iqn), \qquad v_n(t) = V \cdot \exp(-i\omega t + iqn).$$

A.3 계수 U와 V에 대해 다음 형태의 선형 방정식 계를 유도하라. **0.9점**

$$\begin{cases} a \cdot U + b \cdot V = 0, \\ c \cdot U + d \cdot V = 0. \end{cases}$$

계수 a, b, c, d를 m, k, α, β, ω, q로 표현하라. 오일러 공식 $\exp(ix) = \cos x + i \sin x$가 필요할 수 있다.

얻어진 방정식 계는 반드시 자명한 해 $U = V = 0$을 갖는다. 그러나 우리는 탄소 사슬이 진동하는 다른 경우에 관심이 있다. 다음 사실이 유용할 것이다: 이러한 형태의 선형 방정식 계가 자명하지 않은 해를 가질 **필요충분조건은 관계식** $ad - bc = 0$**이 만족되는 것**이다. 중요하게도, 이 경우 무한히 많은 해가 존재한다: 그것들은 같은 형태이지만 진폭이 다른 진동에 해당한다.

사슬 원자들의 집단적 진동 운동을 포논(phonon)이라 한다. 포논이 사슬을 따라 "달린다"고 말한다. 양 ω는 진동수, q는 포논의 준운동량(quasimomentum)이라 한다.

포논 분산 관계(스펙트럼)는 포논 진동수 ω의 준운동량 q에 대한 의존성을 가리킨다.

A.4 고려하는 탄소 사슬에서 전파될 수 있는 두 가능한 포논에 대한 분산 관계를 유도하라. 답으로 비 ω/ω_0를 명시하라. 여기서 $\omega_0 = \sqrt{k/m}$이다. 답(명시된 비)은 매개변수 α, β, q만 포함할 수 있다. **1.0점**

A.5 앞 부분에서 찾은 분산 관계를 $q \to 0$인 경우에 대해 $q = 0$ 주위로 테일러 급수 전개하여 간단히 하라. 답에는 전개에서 처음으로 0이 아니고 상수가 아닌 항이 포함되어야 한다.
다음 근사 공식을 사용하라: $1 - \cos x \simeq x^2/2$, $(1 + x)^\gamma \simeq 1 + \gamma x$ $(x \to 0)$. **1.0점**

$q \to 0$일 때 $\omega(q) \propto q$인 포논을 **음향(acoustic)** 포논이라 하고, 그 외의 모든 포논을 **광학(optical)** 포논이라 한다.

A.6 앞 부분에서 얻은 분산 관계를 $q \to \pi$인 경우에 대해 $(q-\pi)$에 대해 0 주위로 테일러 급수 전개하여 간단히 하라. $\alpha < 1$임이 알려져 있다고 가정하라. 답에는 전개에서 처음으로 0이 아니고 상수가 아닌 항이 포함되어야 한다. **1.0점**

A.7 다음 경우에 대해 $q \in [-\pi, \pi]$에서 분산 곡선 $\omega(q)$의 그래프를 그려라. **1.0점**

- $\alpha = 0.5$, $\beta = 0.1$;
- $\alpha = 0.5$, $\beta = 3.0$.

곡선들의 상대적 배치, 점 $q = 0$과 $q = \pi$ 근처에서의 거동, 그리고 가능한 극값에 주의하라.

Part B. 폴리인의 분광학 (3.5점)

문제 Part A에서 논의한 모형은 이제부터 다룰 유기 화합물인 **폴리인**을 상당히 정확하게 기술한다. Part A의 모형과 달리, 실제 분자는 유한한 길이를 가지며 이것이 포논 스펙트럼에 영향을 줌에 유의하는 것이 중요하다.

Part A와 같은 사슬을 생각하되, 유한 길이라고 하자. 이것이 $N+1$개의 단위 격자로 이루어진다고 가정한다. 즉 지수 n은 0에서 N까지의 모든 정수 값을 취한다. 사슬의 양 끝이 고정되어 있다고 가정한다. 즉 변위 $u_0 = u_N = v_0 = v_N = 0$이 어느 시각에든 성립한다.

무한 사슬 모형에서 해는 진행 평면파 형태로 찾아졌다. 이러한 계의 동역학은 선형 방정식 계로 기술되므로, 해들의 임의의 선형 결합도 해가 된다. 즉 함수 집합 u_n, v_n과 $\tilde{u}_n$, $\tilde{v}_n$이 해라면, 함수 집합 $\mu u_n + \eta \tilde{u}_n$, $\mu v_n + \eta \tilde{v}_n$($\mu$, η는 임의의 복소수)도 계의 동역학을 기술하는 방정식 계를 만족한다.

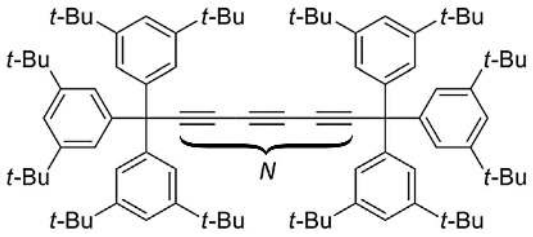
사슬에서 서로 반대 방향(즉 준운동량 q와 $-q$)으로 전파되는 두 평면파의 계수 μ, η를 갖는 선형 결합을 생각하자.

B.1 $N+1$개의 단위 격자를 갖는 유한 사슬에 대해 경계 조건을 적용하여, μ와 η에 대한 두 선형 방정식 계를 얻어라. 방정식의 계수는 양 q와 N에만 의존할 수 있다. **0.8점**

유도된 계를 만족하는 계수 μ, η를 갖는 선형 결합은, 지정된 경계 조건을 갖는 유한 사슬을 기술하는 동역학 방정식의 해를 나타낸다.

B.2 준운동량의 어떤 값 q_l에서 계가 자명하지 않은 해를 갖는가? 답을 N과 정수 l로 표현하라. **0.7점**

2010년대 초, 앨버타 대학교의 캐나다 과학자 웨슬리 A. 샬리푸(Wesley A. Chalifoux)와 릭 R. 티크윈스키(Rik R. Tykwinski)는 대칭 말단캡 폴리인(symmetric endcapped polyyne) $SP[N]$을 합성하는 방법을 개발하였다. 여기서 N은 탄소 사슬의 삼중 결합 수를 나타낸다. 분자 구조는 그림에 나와 있다.



SP[*N*]

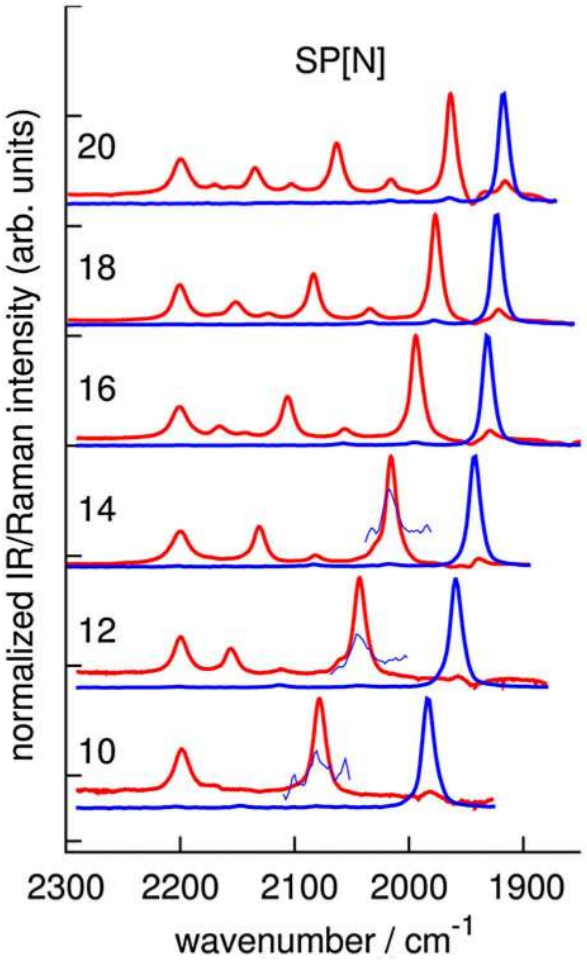
말단기(end group)의 물리적 의미는 그것들이 경계 조건을 결정한다는 것이다. 지정된 말단기는 사슬의 양 끝(네 이웃과 결합한 원자)을 고정된 것으로 간주할 수 있게 한다. 질문 B1–B2에서 보았듯이, 사슬의 유한한 크기와 경계 조건의 도입은 포논 스펙트럼에서 이산적인 공명만이 관측되는 결과를 낳는다.

공명의 위치는 빛-물질 상호작용에 기반한 방법인 적외선(IR) 분광학과 라만(Raman) 분광학을 사용하여 실험적으로 결정할 수 있다. 서로 다른 삼중 결합 수 N을 갖는 $SP[N]$ 폴리인에 대해, 분자에서 발생할 수 있는 포논의 에너지가 측정된다. 그림은 포논 스펙트럼을 보여준다: 빨간색은 IR 분광학으로 얻은 결과를, 파란색은 라만 분광학 데이터를 나타낸다. 저에너지 광학 포논의 들뜸은 가장 오른쪽 세기 피크에 해당한다(그림에 나온 모든 경우에서 "파란색"으로 나타난다). 포논 에너지 E는 그 진동수 ω와 $E = \hbar\omega$ 공식으로 관련된다. 참고: 가로축은 에너지를 역센티미터(inverse centimeter)로 나타낸다. 에너지를 줄(Joule) 단위로 얻으려면 다음 변환 공식을 사용하라.

$$1\ \mathrm{cm}^{-1} = 1.99 \cdot 10^{-23}\ \mathrm{J}.$$

질문 B1–B2에서처럼 단위 격자 전체가 아니라 단 하나의 원자만 고정되므로, 계를 기술하기 위해 다음 접근을 사용해야 한다. 사슬의 양 끝에 탄소 원자를 하나씩 가상으로 추가하여 말단 원자에 삼중 결합으로 연결하고, 말단 단위 격자를 고정한다. 이로써 양 끝이 고정된 $N + 2$개의 단위 격자로 이루어진 사슬이 된다.

실험적으로 연구된 사슬에서 수 N이 충분히 크므로, 위에서 설명한 접근 후 가장자리에 나타난 원거리 결합(βk)은 포논 스펙트럼에 사실상 영향을 주지 않는다. 실험 데이터의 추가 분석에서는 가장 오른쪽 파란색 세기 피크만 사용하고, 나머지는 모두 무시하라.



B.3 값 $\beta = 3.0$과 실험 결과(가장 오른쪽 피크만)를 이용하여, 단일 결합과 삼중 결합의 용수철 상수를 결정하라. 실험에서 실현된 매개변수 α와 β에 대해 분산 관계 $\omega(q)$가 구간 $(0; \pi)$에서 증가 함수임이 알려져 있다고 가정하라. **2.0점**

여러분이 조사한 탄소 사슬은 분자 전자공학에 사용될 수 있어 과학적으로 흥미롭다. 이 문제는 다음 논문에 발표된 실험 결과를 포함한다: Agarwal, N.R., Lucotti, A., Fazzi, D., Tommasini, M., Castiglioni, C., Chalifoux, W.A. and Tykwinski, R.R. (2013), Structure and chain polarization of long polyynes investigated with infrared and Raman spectroscopy. J. Raman Spectrosc., 44: 1398–1410.

단전자 트랜지스터

이 문제의 모든 부분에서 기본 전하 $e = 1.6 \times 10^{-19}$ C가 답에 나타날 수 있다.

단전자 트랜지스터(single-electron transistor)는 저온(수 켈빈 정도)에서 관측되는 쿨롱 봉쇄(Coulomb blockade) 현상에 기반하여 작동하는 전자 부품이다. 이 문제에서는 이 효과를 조사하고 0 K에서 단전자 트랜지스터의 작동 원리를 설명한다.

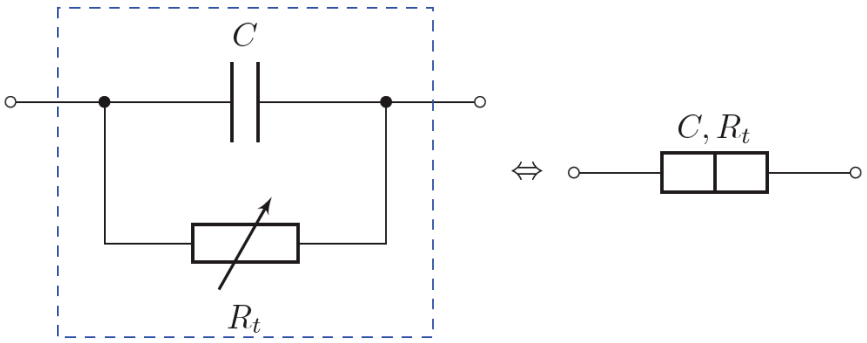
참고: 전기 회로에서 "접지(ground)"는 전위가 0으로 정의되는 점을 가리킨다. "접지" 기호는 그림에 나와 있다.

Part A. 터널 효과 (3.0점)

쿨롱 봉쇄 현상은 근본적으로 터널링(tunneling), 즉 터널 효과에 기반한다. 그 본질은 특정 조건에서 계가 퍼텐셜 에너지 장벽을 넘을 수 있다는 데 있다. 터널링은 최종 에너지가 초기 에너지를 초과하지 않을 때 가능하다. 초과 에너지는 열로 방출된다.

터널링은 터널 접합(tunnel junction)의 두 판 사이에서 개별 기본 전하가 순차적으로 이동하는 것으로 이루어진다. 이 계의 "고전적" 모형에서, 전자 수송은 축전기와 병렬로 연결된 저항 R_t를 통해 일어난다. 에너지는 저항에서 소산된다. 저항은 터널링이 에너지적으로 허용될 때 유한하고, 그렇지 않을 때 무한대가 된다.

이후, 터널 접합의 전하 또는 에너지는 축전기의 전하 또는 에너지를 의미한다.



터널 접합 회로(왼쪽)와 전기 회로도에서의 기호(오른쪽)

전원에서 분리된 터널 접합을 생각하자.

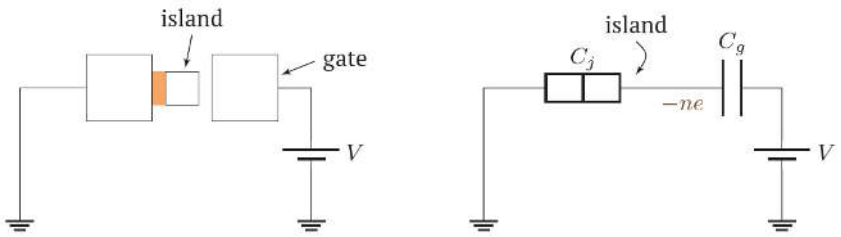
A.1 (터널 접합의 등가 회로에서) 정전용량 C인 축전기의 판이 전자 전하 n개와 같은 전하를 가질 때의 에너지에 대한 표현식을 쓰라. 이제 값 n이 1만큼 증가한다고 하자. 축전기 에너지의 변화 ΔW는 무엇인가? **0.1점**

이후로는 다른 소자들과 함께 전기 회로에 연결된 터널 접합을 생각한다. 회로도에서 터널 접합은 맞닿은 두 직사각형으로 표시된다.

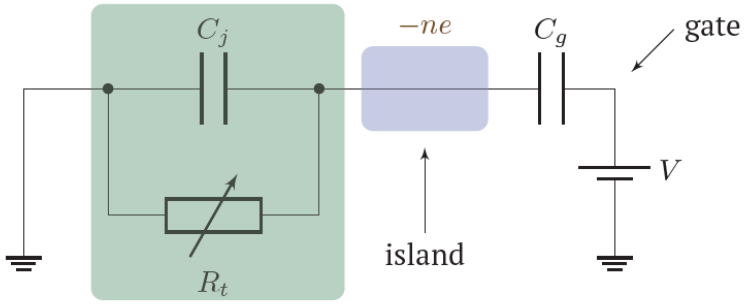
단전자 상자

단전자 상자(single-electron box)는 일렬로 정렬된 세 전극으로 이루어진 계이다. 중앙 전극을 섬(island)이라 하고, 양옆 전극을 뱅크(bank)라 한다. 섬에는 n개의 전자가 들어 있으며, 이 수는 터널링 사건을 통해 변할 수 있다. n은 양수일 수도 음수일 수도 있음에 유의하라(섬의 전자 과잉 또는 부족을 나타냄).

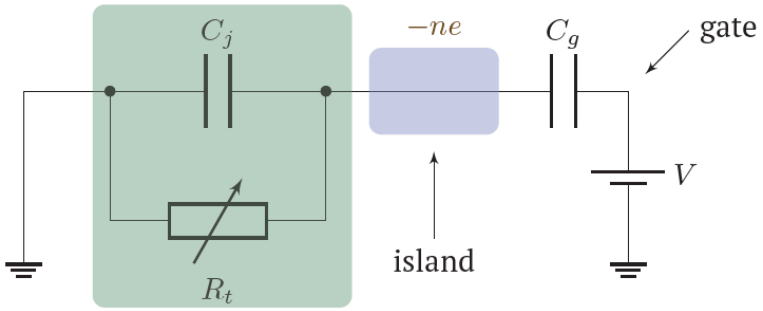
섬과 왼쪽 뱅크 사이에는 정전용량 C_j인 터널 접합이 있고, 섬과 오른쪽 뱅크는 정전용량 C_g인 보통의 축전기를 이룬다. 이 구성에서 오른쪽 뱅크를 게이트(gate)라 한다. 뱅크 사이에는 일정한 전위차 V가 유지된다. 모든 부품 매개변수를 명시한 대응 전기 회로도가 그림에 나와 있다.



단전자 상자



터널링이 에너지적으로 허용될 때의 “고전적” 모형 (터널링 허용)



터널링이 에너지적으로 금지될 때의 "고전적" 모형 (터널링 금지)

A.2 축전기와 터널 접합 위의 전하 q_g와 q_j에 대한 표현식을 유도하라. 축전기와 터널 접합의 정전용량은 각각 C_g와 C_j, 전원 전압은 V, 섬 위의 전자 수는 n이다. **0.3점**

A.3 섬 위의 전자 수 n이 1만큼 증가할 때, 축전기와 터널 접합으로 이루어진 계의 에너지 변화에 대한 표현식을 유도하라. 답을 n, C_g, $C = C_j + C_g$로 표현하라. **0.3점**

A.4 한 전자가 섬으로 터널링할 때(섬 전자 수 n이 1만큼 증가하는 것에 해당) 전원이 한 일 A와 회로에서의 열 소산 Q에 대한 표현식을 유도하라. 답을 n, C_g, C, V로 표현하라. **0.5점**

이후로는 회로에서 소산된 열 Q가 0보다 클 때 터널링이 허용되는 것으로 간주한다.

A.5 열 Q가 터널 저항 R_t를 통한 전류 흐름 동안 소산된다고 가정하라. 한 전자가 섬으로 터널링하는 동안 R_t를 통한 전류 I_t에 대한 표현식을 유도하라. 또한 이 표현식이 유효한 n에 대한 제약(즉 터널링이 에너지적으로 허용될 때)을 명시하라. 답을 n, C_g, C, V, R_t로 표현하라. **0.5점**

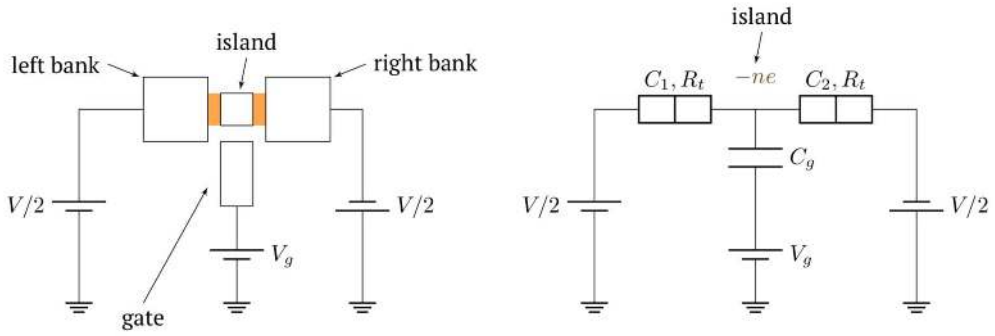
A.6 터널링이 에너지적으로 허용된다고 가정하고, 전원을 통해 흐르는 전류 I를 터널 전류 I_t로 표현하라. 양의 전류 방향은 전원의 음극 단자 쪽이다. 표현식에는 양 C_g, C, V도 포함될 수 있다. 섬의 전자 수가 증가하는 경우와 감소하는 경우 모두에 해당하는 과정을 고려하라. **0.3점**

A.7 $n = 0$과 $n = 1$에 대한 $I(V)$ 특성을 하나의 그래프에 그려라. 모든 특징적인 양상을 포착할 수 있도록 충분히 넓은 전압 범위에 걸쳐 의존성을 표시하라. **1.0점**

Part B. 단전자 트랜지스터 (4.5점)

단전자 트랜지스터는 두 뱅크에 터널 접합으로 연결된 섬과, 섬과 축전기를 이루는 게이트로 구성된다. 게이트는 순수하게 용량성으로 결합되어 있다(저항이 무한대). 왼쪽 뱅크에 전압 $+V/2$가, 오른쪽 뱅크에

전압 $-V/2$가 가해진다. 전자 부품의 매개변수를 명시한 트랜지스터의 회로도와 등가 회로가 그림에 나와 있다.



단전자 트랜지스터

B.1	섬에 n개의 전자가 들어 있다고 하자. 섬의 전위 φ를 n, V, V_g, C_1, C_2, C_g로 표현하라.	**0.2점**
B.2	한 전자가 왼쪽(첫 번째) 뱅크에서 섬으로 터널링하는 동안 전원들이 한 총 일에 대한 표현식을 유도하라. 답을 V, V_g, C_1, C_2, C_g로 표현하라.	**1.0점**
B.3	섬에 n개의 전자가 들어 있다고 하자. 한 전자가 왼쪽(첫 번째) 뱅크에서 섬으로 터널링하는 동안 회로에서 소산된 총 열을 표현하라. 답을 n, V, V_g, C_1, C_2, C_g로 표현하라.	**1.0점**
B.4	왼쪽 뱅크에서 섬으로 터널링하는 동안 열 소산이 양이 되는 것에 대응하는 V에 대한 조건(부등식)을 유도하라. 답을 n, V, V_g, C_g, C_2로 표현하라.	**0.3점**
B.5	오른쪽 뱅크에서 섬으로 터널링하는 경우, 그리고 섬에서 두 뱅크로 터널링하는 경우에 대해 질문 B4와 유사한 V에 대한 조건을 유도하라. 충분한 시간이 지난 후 섬에 n개의 전자가 존재하는 것에 대응하는 영역의 도표를 그려라. 도표는 V 대 V_g 축에 그려야 한다. 각 영역에 대해 도표 위에 n 값을 명시하라.	**1.5점**

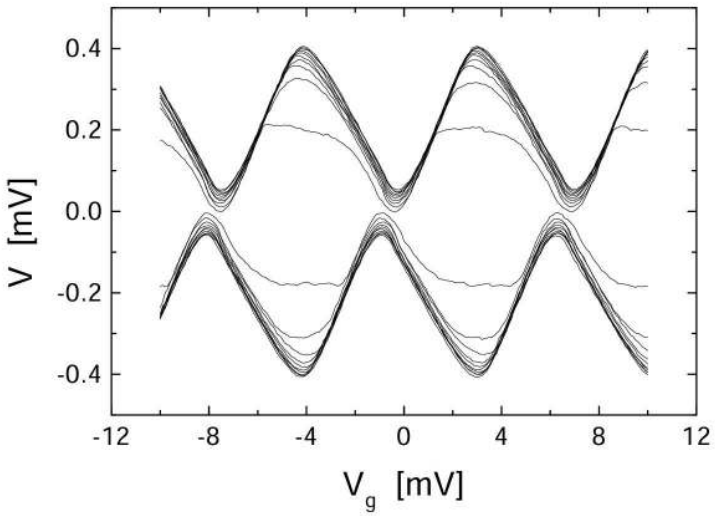
(V, V_g) 도표에서, 충분한 시간이 지난 후 단 두 전이만 에너지적으로 허용되는 영역들을 생각하자: 한 접합을 통한 $n \to n+1$과 다른 접합을 통한 $n+1 \to n$. 이 경우 한 뱅크에서 다른 뱅크로 섬을 통해 정상 전류가 흐른다. 이제 그 크기를 결정한다.

한 쌍의 터널링 사건 후 섬의 전하가 변하지 않으므로, 축전기들 위의 전하도 일정하게 유지된다. 따라서 결과 전류는 첫째와 둘째 접합을 통한 터널링 시간의 합으로 결정된다.

B.6 터널 접합들이 동일하다고 가정하라: 각각 정전용량 C_1과 터널 저항 R_t를 갖는다. 충분한 시간이 지난 후 섬에 $n = 0$과 $n = 1$개의 전자 상태만 가능한 전압 쌍 (V_g, V)를 생각하라. 회로에서 터널 전류 $I(V_g, V)$의 크기를 결정하라. 양의 전류 방향은 왼쪽 뱅크에서 오른쪽 뱅크 쪽이다. **0.5점**

Part C. 유한 온도에서의 터널링 (2.5점)

C.1 그래프는 저온 $T = 10$ mK에서 고정된 전류 값 $I \approx 1$ pA에 대해 측정한 실험적 $V(V_g)$ 의존성을 보여준다. Part B에서 얻은 결과에 기반하여 정전용량 $C_1 = C_2$와 C_g를 결정하라. **0.5점**



V. A. Krupenin et al., 2001

고정된 양의 온도 T를 생각하자. $\Gamma^{(i)}_{n\to n\pm1}$을 i번째 접합을 통해 섬으로/섬에서 터널링하는 단위 시간당 확률(rate)이라 하고, $p(n)$을 섬에 n개의 전자가 있을 확률이라 하자.

참고: 어떤 과정의 비율이 Γ이면, 시간 dt 동안 그것이 일어날 확률은 $dp = \Gamma dt$이다.

C.2 $\Gamma_{n\to n\pm1} = \Gamma^{(1)}_{n\to n\pm1} + \Gamma^{(2)}_{n\to n\pm1}$이라 하자. 전자는 어느 뱅크로든 터널링할 수 있다. 섬에 n개의 전자가 있을 확률의 시간 도함수 $dp(n)/dt$를 확률 $p(n)$, $p(n\pm1)$과 비율 $\Gamma_{n\to n\pm1}$, $\Gamma_{n\pm1\to n}$으로 표현하라. **0.3점**

트랜지스터를 통한 정상 전류 흐름(모든 확률 $p(n)$이 일정함을 의미)을 살펴볼 것이다. 또한 그 너머로는 터널링이 멈추는 섬 위 전자의 임계 수 n_0이 존재한다고 가정한다: $n > n_0$에 대해 $p(n) = 0$이고 $\Gamma_{n-1\to n} = 0$이다.

C.3 명시된 가정과 확립된 경계 조건으로부터, $p(n)$과 $p(n+1)$을 연결하는 관계를 $p(n+1) = A \cdot p(n)$ 형태로 유도하라. 여기서 A는 여러 m에 대한 비율 $\Gamma_{m\to m\pm1}$만 포함하는 표현식이다. **0.5점**

저온($kT \ll e^2/C$)과 작은 전압($|V| \ll e/C$, $|V_g - e/2C_g| \ll e/C_g$)을 생각한다. 양자역학에 따르면, i번째 접합을 통해 섬으로/섬에서 터널링하는 단위 시간당 비율의 일반적 형태는 다음과 같다.

$$\Gamma^{(i)}_{n\to n\pm1} = \frac{1}{e^2 R_t} \frac{Q^{(i)}_{\pm}(n)}{1 - \exp\left[-\dfrac{Q^{(i)}_{\pm}(n)}{kT}\right]}$$

여기서 $Q^{(i)}_{\pm}(n)$은 터널링 과정 동안 소산된 열이다.

C.4 질문 B3에서 유도한 표현식과 유사한 관계를 이용하여, $n > 0$에 대한 $\Gamma_{n\to n+1}$과 $n < 1$에 대한 $\Gamma_{n\to n-1}$이 n의 변화에 따라 지수적으로 **감쇠함**을 보여라. $T \to 0$이라 가정하라. **0.3점**

이후로는 $p(0)$과 $p(1)$을 제외한 모든 $p(n)$을 0으로 취급한다.

C.5 확률 $p(0)$과 $p(1)$을 비율 $\Gamma_{0\to1}$과 $\Gamma_{1\to0}$으로 표현하라. $p(0) + p(1) = 1$임을 고려하라. **0.5점**

C.6 트랜지스터를 통한 전류에 대한 표현식을 쓰라. 답을 $\Gamma^{(i)}_{0\to1}$, $\Gamma^{(i)}_{1\to0}$으로 표현하라. **0.4점**

열에 대한 표현식을 터널링 비율 $\Gamma^{(i)}_{n\to n\pm1}$의 공식에 대입하면, 방대한 계산 끝에 전류의 전압·온도 의존성이 얻어진다. 이 뚜렷한 의존성 덕분에 단전자 트랜지스터를 저온 측정 장치로 사용할 수 있으며, 이는 과학 축제 문제에서 탐구된다.