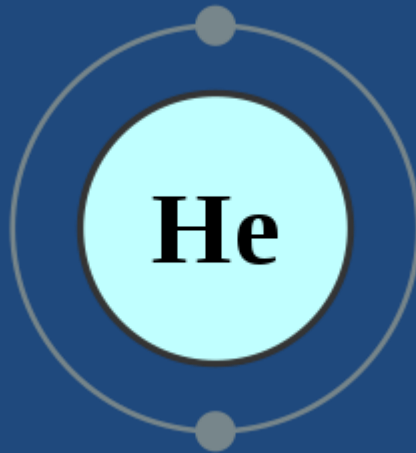


제5장

똑같은 입자

이제 전자가 두 개 이상 있는 경우를 생각해봅시다.

헬륨 원자



$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$$

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$$

헬륨 원자

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$$

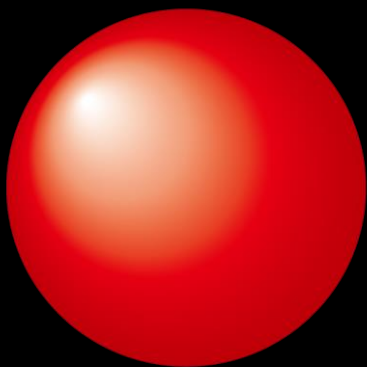
두 입자의 질량과 전하량이 같다면,
이 해밀토니안은 첫 번째 입자와 두 번째 입자의 교환에 대해서
동일한 형태를 가집니다.

따라서 해밀토니안의 입장에서는
두 입자를 구분할 수 없습니다 indistinguishable.

헬륨 원자

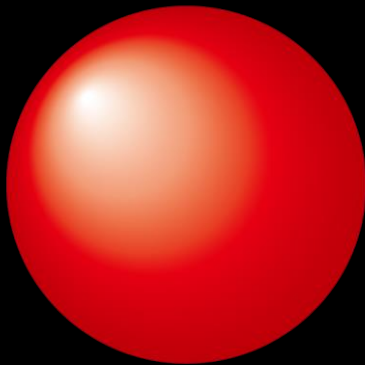
$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_2^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$$

전자의 상태를 결정하는 방정식은 슈뢰딩거 방정식 뿐입니다.
따라서 슈뢰딩거 방정식에서 두 입자를 구분할 수 없다면,
전 우주에서 두 입자를 구분할 수 있는 방법은 없습니다.
따라서 우리는 두 입자를
같은 입자^{identical particles}로 보아야 합니다.



이름: 빨강이

특징: 빨갱다. 동그랳다.



주관적인 것, 또는 사람들이 합의한 것
지칭된 것

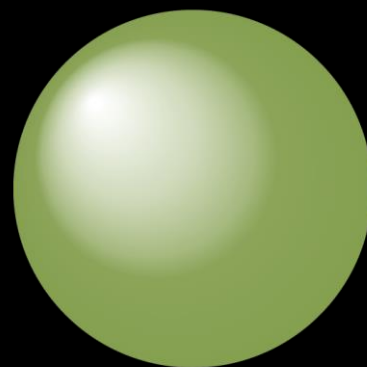
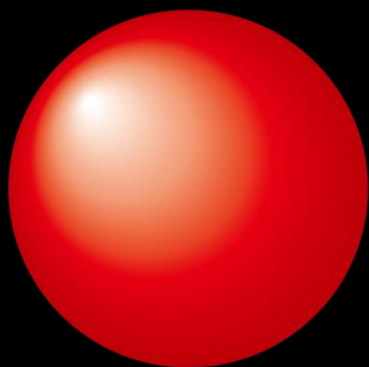


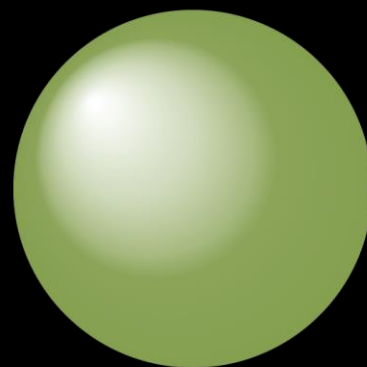
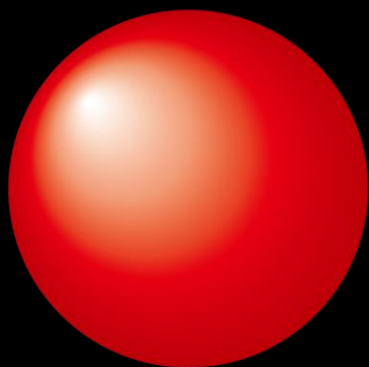
이름: 빨강이

특징: 빨갱다. 동그랗다.

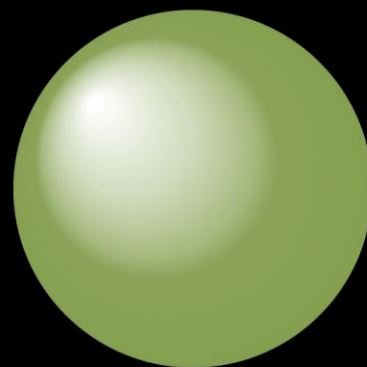
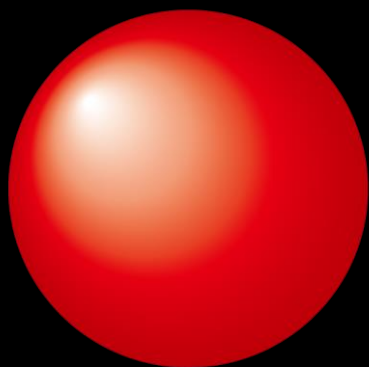


객관적인 것, 실험 및 관측을 통해 얻어진 것
속성이라고 불리는 것

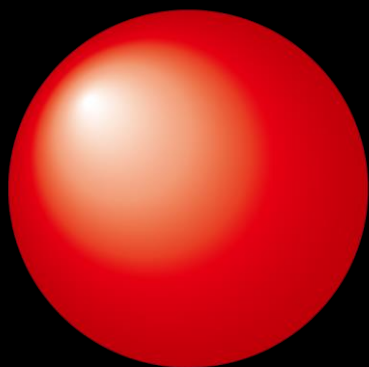




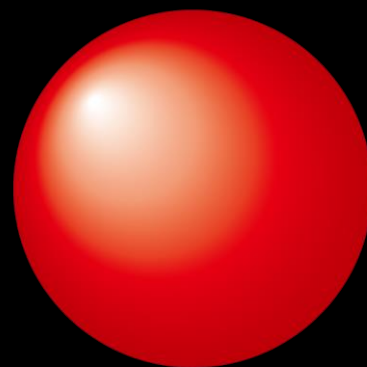
우리는 왼쪽과 오른쪽을 구분할 수 있습니다(distinguishable).
실험 및 측정을 통해서 **속성**이 다르다는 것을 알 수 있기 때문입니다.

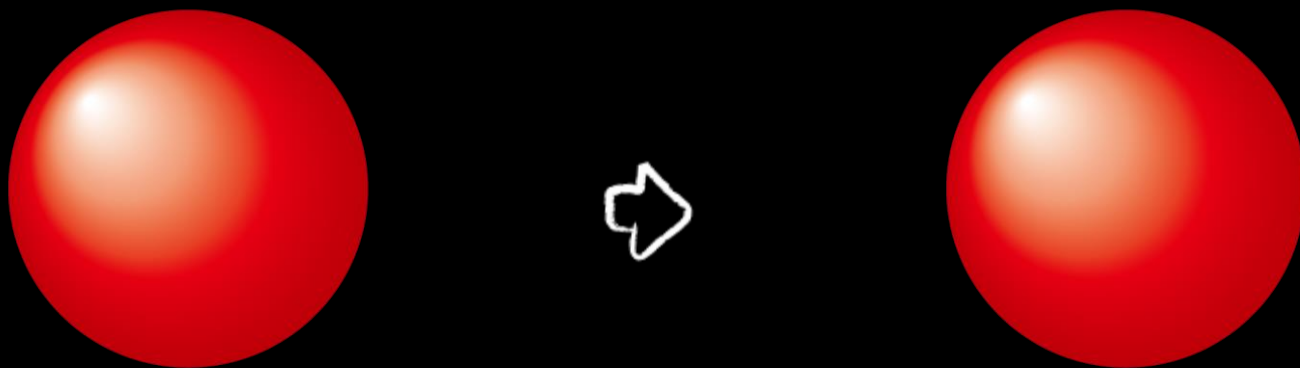


우리는 왼쪽과 오른쪽을 구분할 수 있습니다(distinguishable).
실험 및 측정을 통해서 **속성**이 다르다는 것을 알 수 있기 때문입니다.
따라서 오른쪽은 빨강이와 같지 않습니다(not identical).

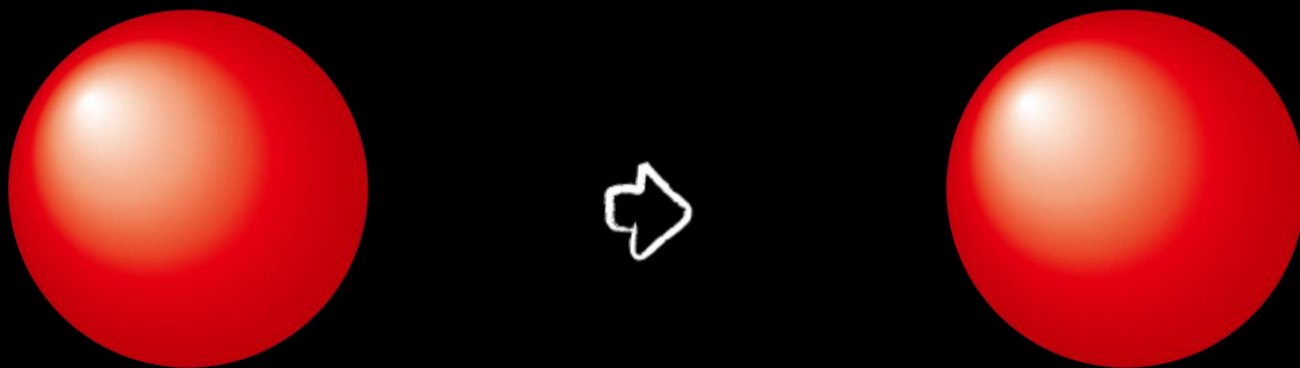


copy-and-paste

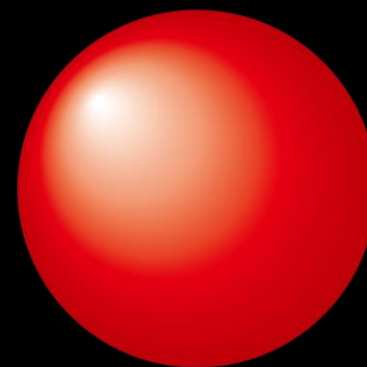
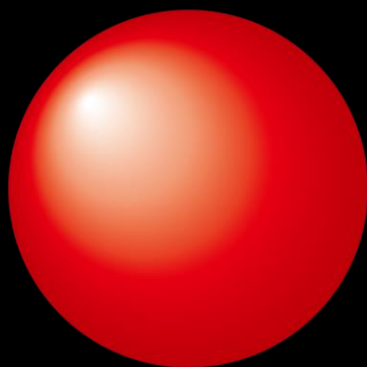




오른쪽과 왼쪽을 구분할 수 있을까(distinguishable)?



오른쪽과 왼쪽을 구분할 수 있을까(distinguishable)?
오른쪽과 왼쪽은 같은 빨강이일까(identical)?



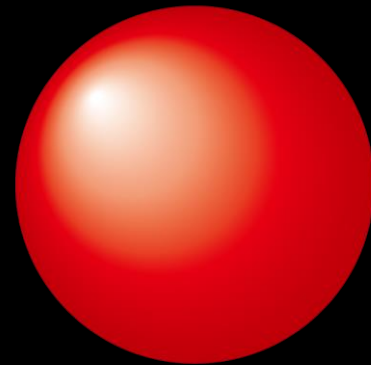
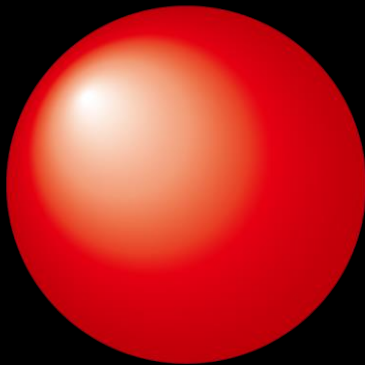
왼쪽과 오른쪽을 우리는 구분할 수 없습니다(indistinguishable).
이 때 우리는 **두 가지 의견**을 가질 수 있습니다.

첫 번째 의견: 우리는 지칭에 의해서 둘을 구별할 수 있다.

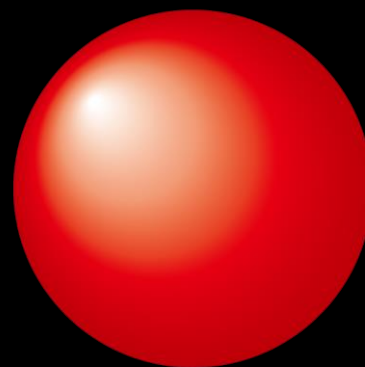
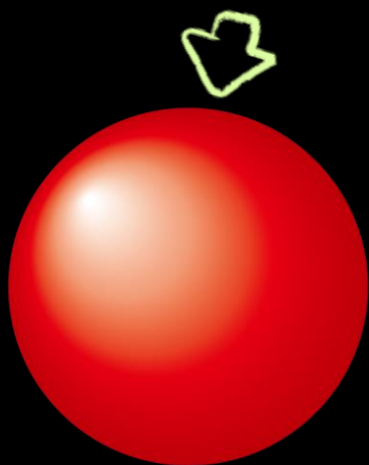


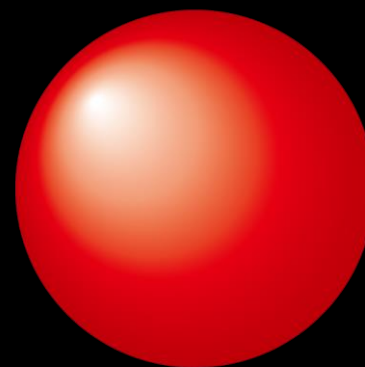
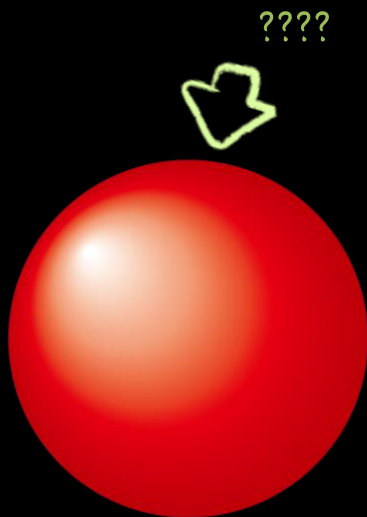
“신성로마제국은 신성하지도 않고, 로마에 있지도 않고, 제국도 아닌 어떤 것이다.”
- 볼테르/크립키가 재인용 -

바른 이 녀석이 배설강이!



잠깐 볼을 꺾다가...





두 번째 의견: 속성이 같으면 둘은 동일하다.



라이프니츠는 모든 일에는 충분한 이유가 있다고 생각했다.
모든 것은 속성들의 관계에 의해서 완전히 결정된다.

현대 물리학에서는 후자의 견해가
자연을 좀 더 잘 설명해준다고 생각합니다.

즉, 속성이 같으면 동일하다고 가정해야만
설명할 수 있는 자연 현상이 있습니다.

그리고 모든 자연 현상은 속성들의 관계에 의해서
완전히 설명될 수 있다고 생각합니다.

대칭화 조건

$$\psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = A[\psi_a(\vec{r}_1)\psi_b(\vec{r}_2) \pm \psi_b(\vec{r}_1)\psi_a(\vec{r}_2)]$$

상대론적 효과에 의해
스핀이 정수인 **보존**Boson은 대칭화(+),
스핀이 반정수인 **페르미온**Fermion은 반대칭화(-)를
요구하게 됩니다.

대칭화 조건

$$\psi(\vec{r})\chi(s)$$

대칭화는 입자의 전체 파동함수에 대해서 요청되므로,
스핀의 상태는 대칭($s=1$, triplet)일 수도 있고
반대칭($s=0$, singlet)일 수도 있습니다.

대칭화 조건의 의미

$$\psi_d(x_1, x_2) = \psi_a(x_1)\psi_b(x_2)$$

$$\psi_{\pm}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) \pm \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)]$$

위와 같은 두 개의 파동함수를 생각하고,
두 입자를 구분할 수 있는 경우와
두 입자가 동일한 경우
기댓값이 어떻게 달라지는지를 살펴봅시다.

구분할 수 있는 경우

$$\psi_d(x_1, x_2) = \psi_a(x_1)\psi_b(x_2)$$

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_d = \langle x_1^2 \rangle_a + \langle x_2^2 \rangle_b - 2\langle x_1 \rangle_a \langle x_2 \rangle_b$$

동일한 경우

$$\psi_{\pm}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(x_1)\psi_b(x_2) \pm \psi_b(x_1)\psi_a(x_2)]$$

$$\langle (x_1 - x_2)^2 \rangle_{\pm} = \langle x_1^2 \rangle_a + \langle x_2^2 \rangle_b - 2\langle x_1 \rangle_a \langle x_2 \rangle_b \mp |\langle x \rangle_{ab}|^2$$

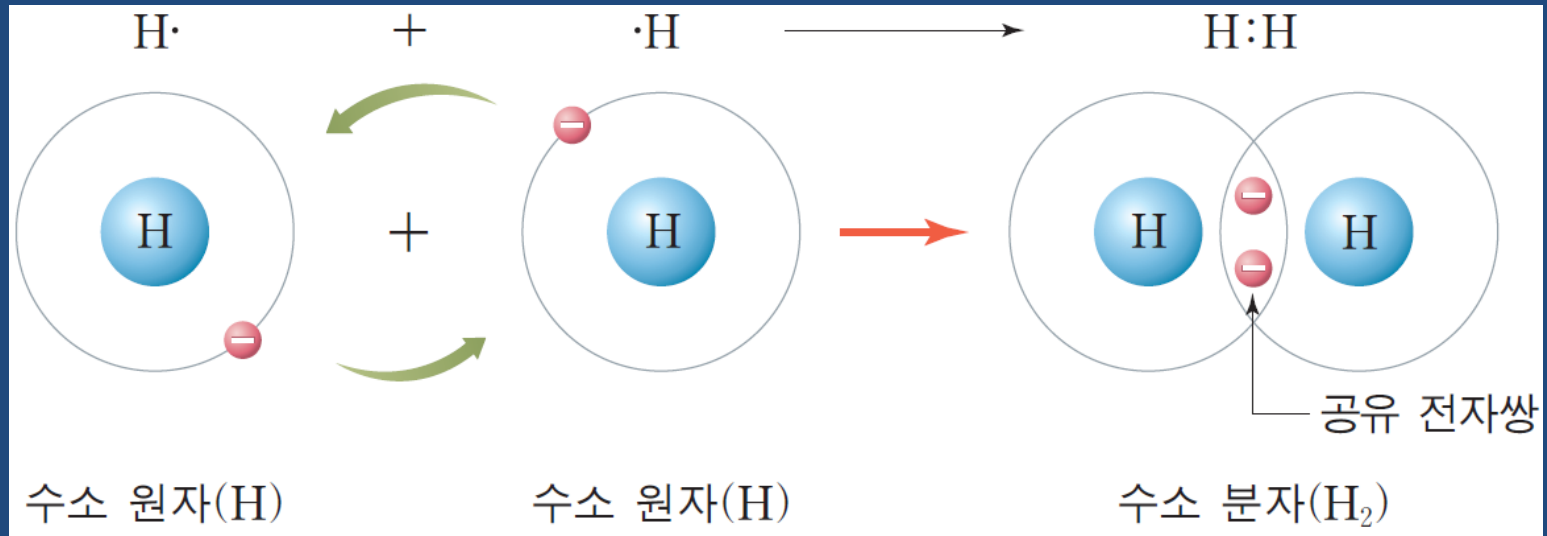
$$\langle x \rangle_{ab} = \int x \psi_a^* \psi_b dx$$

대칭화 조건의 효과

$$\langle \Delta x^2 \rangle_{\pm} = \langle \Delta x^2 \rangle_d \mp 2|\langle x \rangle_{ab}|^2$$

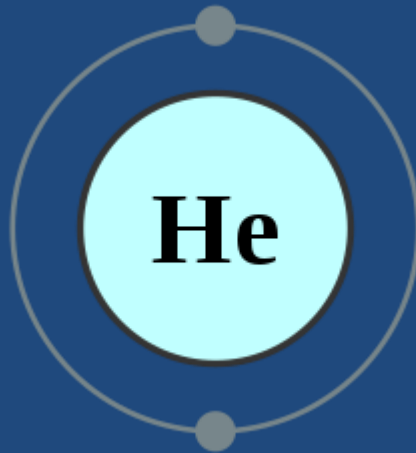
보존의 경우는 거리가 가까워지려고 하고,
페르미온의 경우는 거리가 멀어지려고 합니다.
거리가 충분히 멀리 떨어져 있으면
구분 가능하다고 생각해도 괜찮습니다.

공유 결합



수소 원자 두 개를 생각해봅시다.
각 전자가 가진 스핀이 반대칭 상태일 때,
전자의 **오비탈**은 **보존**처럼 서로 가까워지려고 하게 됩니다.
이 효과에 의해서 수소원자 두 개가
공유결합을 하고 있는 상태가 안정적이게 됩니다.

헬륨 원자



$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t)$$

헬륨 원자를 기술하기 위해서는 원자핵과 전자 사이의
중심력 뿐만 아니라 전자들 사이의 반발력도 고려해야 합니다.

오비탈에 전자를 채우는 방법

특정 (n, ℓ, m) 에 대해서 (스핀이 다를 수 있으므로) 두 개의 전자가 가능합니다.

오비탈에 전자를 채우는 방법

특정 (n, ℓ, m) 에 대해서 (스핀이 다를 수 있으므로) 두 개의 전자가 가능합니다.

$$n = 1 \quad \rightarrow \quad 1 \times \underset{\text{스핀}}{2} = 2\text{개} \quad (\text{H, He})$$

오비탈에 전자를 채우는 방법

특정 (n, ℓ, m) 에 대해서 (스핀이 다를 수 있으므로) 두 개의 전자가 가능합니다.

$$n = 1 \quad \longrightarrow \quad 1 \times \underset{\text{스핀}}{2} = 2\text{개} \quad (\text{H, He})$$

$$n = 2 \quad \longrightarrow \quad 2^2 \times 2 = 8\text{개} \quad (\text{Li} \sim \text{Ne})$$

$\ell = 0$ 1개
 $\ell = 1$ 3개

오비탈에 전자를 채우는 방법

특정 (n, ℓ, m) 에 대해서 (스핀이 다를 수 있으므로) 두 개의 전자가 가능합니다.

$$n = 1 \quad \longrightarrow \quad 1 \times \underset{\text{스핀}}{2} = 2\text{개} \quad (\text{H, He})$$

$$n = 2 \quad \longrightarrow \quad 2^2 \times 2 = 8\text{개} \quad (\text{Li} \sim \text{Ne})$$

$\ell = 0$ 1개
 $\ell = 1$ 3개

$$n = 3 \quad \longrightarrow \quad 3^2 \times 2 = 18\text{개}$$

$\ell = 0$ 1개
 $\ell = 1$ 3개

까지는 정상적으로 (Na ~ Ar)

오비탈에 전자를 채우는 방법

특정 (n, ℓ, m) 에 대해서 (스핀이 다를 수 있으므로) 두 개의 전자가 가능합니다.

$$n = 1 \quad \longrightarrow \quad 1 \times 2 = 2\text{개} \quad (\text{H, He})$$

스핀

$$n = 2 \quad \longrightarrow \quad 2^2 \times 2 = 8\text{개} \quad (\text{Li} \sim \text{Ne})$$

$\ell = 0$ 1개
 $\ell = 1$ 3개

$$n = 3 \quad \longrightarrow \quad 3^2 \times 2 = 18\text{개}$$

$\ell = 0$ 1개
 $\ell = 1$ 3개 까지는 정상적으로 (Na ~ Ar)

$n = 3, \ell = 2$ 보다 $n = 4, \ell = 0$ 이 에너지가 더 낮으므로 $n = 4$ 부터 다시 채우기 시작함.

주기율표

Periodic Table of the Elements																	
1 1 H hydrogen 1.008 [1.0078, 1.0082]																	18 2 He helium 4.0026
3 Li lithium 6.94 [6.938, 6.997]	4 Be beryllium 9.0122											13 5 B boron 10.81 [10.806, 10.821]	14 6 C carbon 12.011 [12.009, 12.012]	15 7 N nitrogen 14.007 [14.006, 14.008]	16 8 O oxygen 15.999 [15.999, 16.000]	17 9 F fluorine 18.998	10 Ne neon 20.180
11 Na sodium 22.990	12 Mg magnesium 24.305 [24.304, 24.307]											13 Al aluminium 26.982	14 Si silicon 28.085 [28.084, 28.086]	15 P phosphorus 30.974	16 S sulfur 32.06 [32.059, 32.076]	17 Cl chlorine 35.45 [35.446, 35.457]	18 Ar argon 39.948
19 K potassium 39.098	20 Ca calcium 40.078(4)	21 Sc scandium 44.956	22 Ti titanium 47.867	23 V vanadium 50.942	24 Cr chromium 51.996	25 Mn manganese 54.938	26 Fe iron 55.845(2)	27 Co cobalt 58.933	28 Ni nickel 58.693	29 Cu copper 63.546(3)	30 Zn zinc 65.38(2)	31 Ga gallium 69.723	32 Ge germanium 72.630(8)	33 As arsenic 74.922	34 Se selenium 78.971(8)	35 Br bromine 79.904 [79.901, 79.907]	36 Kr krypton 83.798(2)
37 Rb rubidium 85.468	38 Sr strontium 87.62	39 Y yttrium 88.906	40 Zr zirconium 91.224(2)	41 Nb niobium 92.906	42 Mo molybdenum 95.95	43 Tc technetium	44 Ru ruthenium 101.07(2)	45 Rh rhodium 102.91	46 Pd palladium 106.42	47 Ag silver 107.87	48 Cd cadmium 112.41	49 In indium 114.82	50 Sn tin 118.71	51 Sb antimony 121.76	52 Te tellurium 127.60(3)	53 I iodine 126.90	54 Xe xenon 131.29
55 Cs caesium 132.91	56 Ba barium 137.33	57-71 lanthanoids	72 Hf hafnium 178.49(2)	73 Ta tantalum 180.95	74 W tungsten 183.84	75 Re rhenium 186.21	76 Os osmium 190.23(3)	77 Ir iridium 192.22	78 Pt platinum 195.08	79 Au gold 196.97	80 Hg mercury 200.59	81 Tl thallium 204.38 [204.38, 204.39]	82 Pb lead 207.2	83 Bi bismuth 208.98	84 Po polonium	85 At astatine	86 Rn radon
87 Fr francium	88 Ra radium	89-103 actinoids	104 Rf rutherfordium	105 Db dubnium	106 Sg seaborgium	107 Bh bohrium	108 Hs hassium	109 Mt meitnerium	110 Ds darmstadtium	111 Rg roentgenium	112 Cn copernicium	113 Nh nihonium	114 Fl flerovium	115 Mc moscovium	116 Lv livermorium	117 Ts tennessine	118 Og oganesson

57 La lanthanum 138.91	58 Ce cerium 140.12	59 Pr praseodymium 140.91	60 Nd neodymium 144.24	61 Pm promethium	62 Sm samarium 150.36(2)	63 Eu europium 151.96	64 Gd gadolinium 157.25(3)	65 Tb terbium 158.93	66 Dy dysprosium 162.50	67 Ho holmium 164.93	68 Er erbium 167.26	69 Tm thulium 168.93	70 Yb ytterbium 173.05	71 Lu lutetium 174.97
--	-------------------------------------	---	--	-------------------------------	--	---------------------------------------	--	--------------------------------------	---	--------------------------------------	-------------------------------------	--------------------------------------	--	---------------------------------------

89 Ac actinium	90 Th thorium 232.04	91 Pa protactinium 231.04	92 U uranium 238.03	93 Np neptunium	94 Pu plutonium	95 Am americium	96 Cm curium	97 Bk berkelium	98 Cf californium	99 Es einsteinium	100 Fm fermium	101 Md mendelevium	102 No nobelium	103 Lr lawrencium
-----------------------------	--------------------------------------	---	-------------------------------------	------------------------------	------------------------------	------------------------------	---------------------------	------------------------------	--------------------------------	--------------------------------	-----------------------------	---------------------------------	------------------------------	--------------------------------

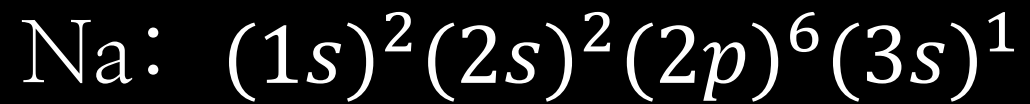
$\ell = 0$: s-오비탈

$\ell = 1$: p-오비탈

$\ell = 2$: d-오비탈

$\ell = 3$: f-오비탈

·
·
·



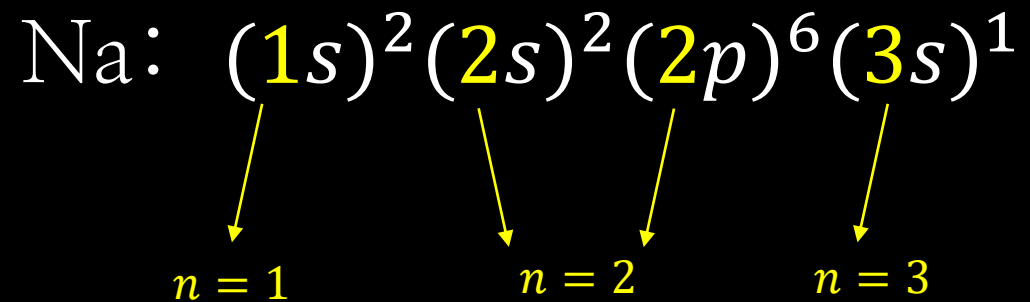
$\ell = 0$: s-오비탈

$\ell = 1$: p-오비탈

$\ell = 2$: d-오비탈

$\ell = 3$: f-오비탈

·
·
·



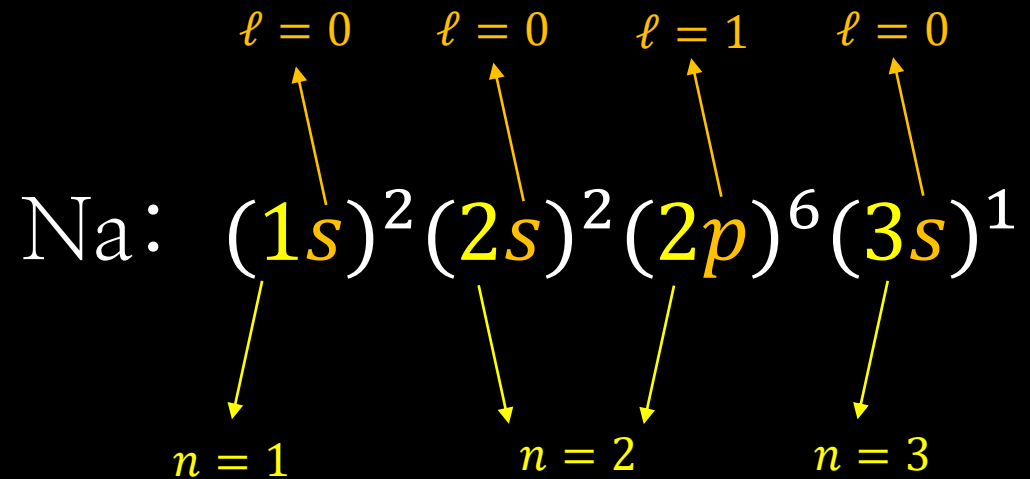
$\ell = 0$: s-오비탈

$\ell = 1$: p-오비탈

$\ell = 2$: d-오비탈

$\ell = 3$: f-오비탈

·
·
·



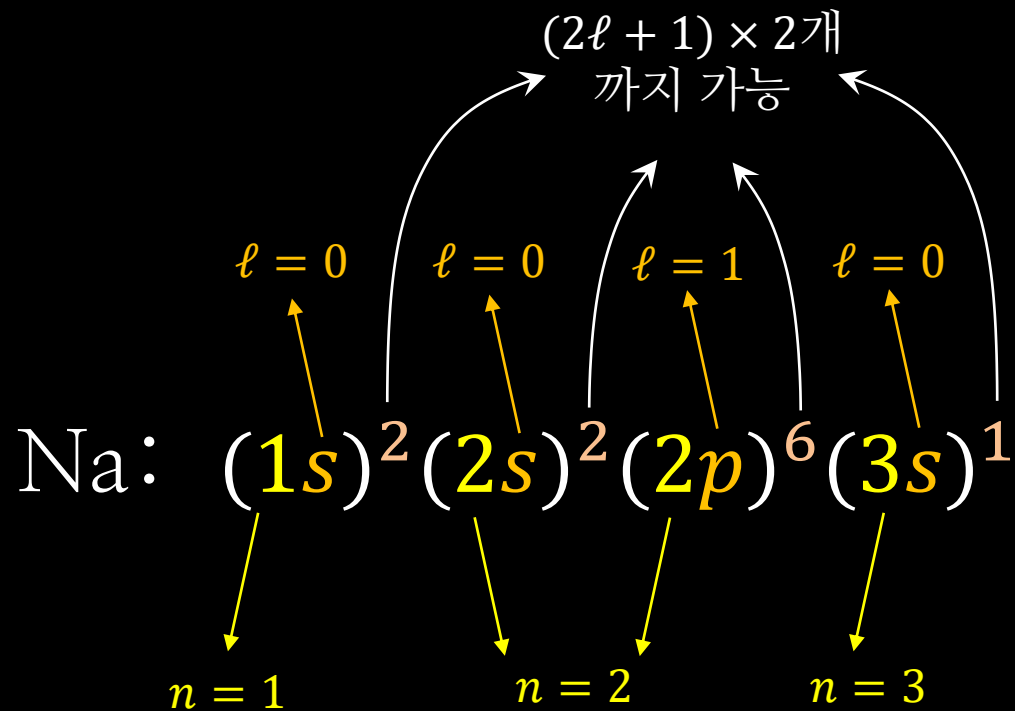
$\ell = 0$: s-오비탈

$\ell = 1$: p-오비탈

$\ell = 2$: d-오비탈

$\ell = 3$: f-오비탈

·
·
·

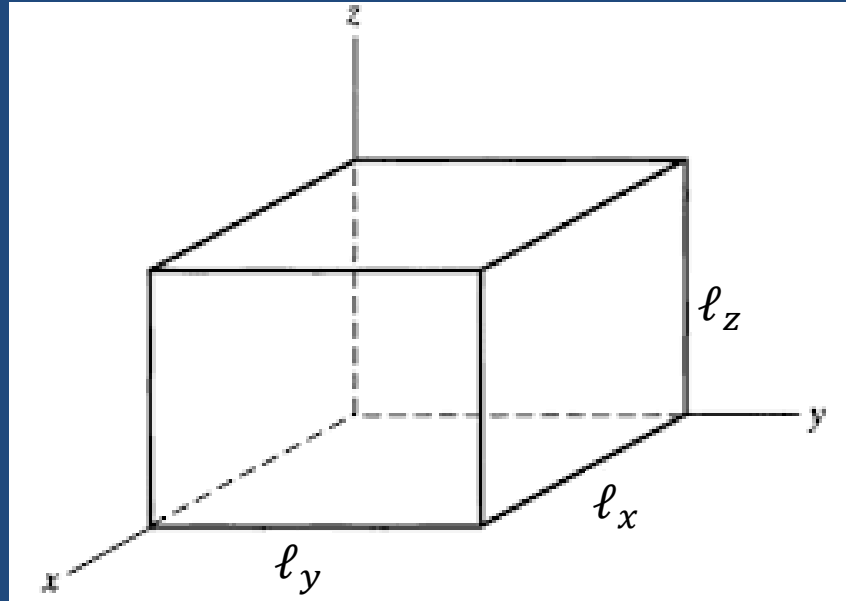




양자역학으로부터 원자의 구조를 이해하게 되어,
다양한 자연 현상들을 설명할 수 있게 됩니다.

파울리의 배타원리와 페르미 압력

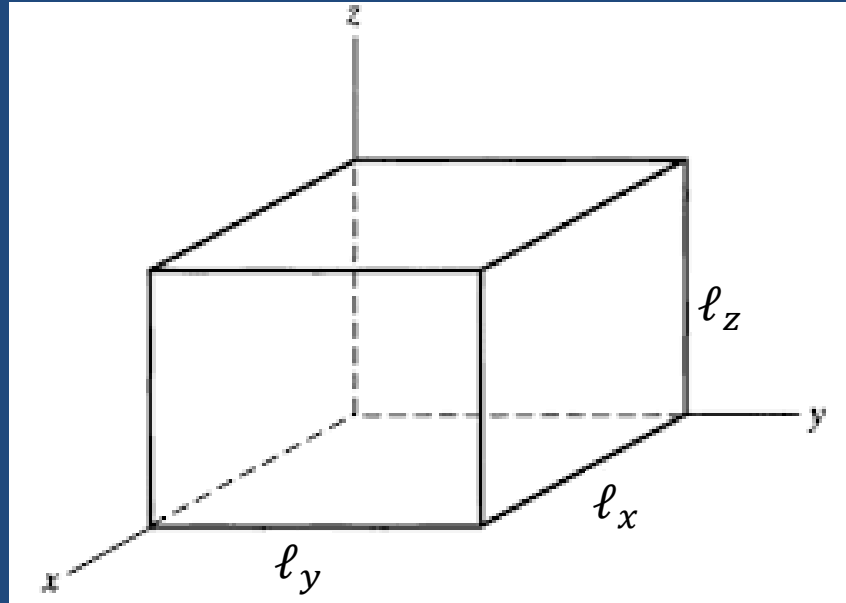
상자에 전자를 채우기



위와 같은 3차원 상자에 전자를 채운다고 합시다.
양자화 조건에 의해서, 다음 조건이 요구됩니다.

$$k_i \ell_i = n_i \pi$$

이제 k -공간에서 어떤 일이 일어나는지를 알아봅시다.



전자는 에너지가 낮은 곳을 선호하므로 작은 k 를 선호합니다.
그러나 파울리의 배타원리에 의해
같은 k 에 입자를 쌓아둘 수는 없게 됩니다.

전자는 다음과 같은 규칙으로 k -공간을 채워나가게 됩니다.

$$\frac{1}{8} \left(\frac{4}{3} \pi k_F^3 \right) = \frac{Nq}{2} \left(\frac{\pi^3}{V} \right)$$

k_F : k -공간의 바깥 반지름

N : 입자의 수

q : 입자 당 가지고 있는 전자의 수

π^3/V : $k_x k_y k_z$ 단위 블록의 부피

전자는 다음과 같은 규칙으로 k -공간을 채워나가게 됩니다.

$$\underbrace{\frac{1}{8}}_{k\text{-공간에서 } k_i > 0 \text{인 영역}} \left(\frac{4}{3} \pi k_F^3 \right) = \underbrace{\frac{Nq}{2}}_{\text{스핀 업과 다운}} \left(\frac{\pi^3}{V} \right)$$

k_F : k -공간의 바깥 반지름

N : 입자의 수

q : 입자 당 가지고 있는 전자의 수

π^3/V : $k_x k_y k_z$ 단위 블록의 부피

전자는 다음과 같은 규칙으로 k -공간을 채워나가게 됩니다.

$$\underbrace{\frac{1}{8}}_{k\text{-공간에서 } k_i > 0 \text{인 영역}} \left(\frac{4}{3} \pi k_F^3 \right) = \underbrace{\frac{Nq}{2}}_{\text{스핀 업과 다운}} \left(\frac{\pi^3}{V} \right)$$

k_F : k -공간의 바깥 반지름

N : 입자의 수

q : 입자 당 가지고 있는 전자의 수

π^3/V : $k_x k_y k_z$ 단위 블록의 부피

k_F : 페르미 면 surface

E_F : 페르미 에너지

페르미 에너지는 전자가 가질 수 있는 가장 높은 에너지를 말합니다.
이 번에는 **전자의 총 에너지**를 구해보시다.

$$dE = (dk\text{껍질 안에 포함되는 전자 수}) \times \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

페르미 에너지는 전자가 가질 수 있는 가장 높은 에너지를 말합니다.
이 번에는 **전자의 총 에너지**를 구해보시다.

$$dE = (dk\text{껍질 안에 포함되는 전자 수}) \times \frac{\hbar^2}{2m} k^2$$

$$\begin{aligned} (dk\text{껍질 안에 포함되는 전자 수}) &= \frac{(dk\text{껍질의 부피})}{(\text{전자 1개당 차지하는 부피})} \\ &= \frac{\frac{1}{8} (4\pi k^2) dk}{\frac{1}{2} \frac{\pi^3}{V}} \end{aligned}$$

적분을 하면 다음과 같습니다.

$$E = \frac{\hbar^2}{10\pi^2 m} (3\pi^2 Nq)^{5/3} V^{-2/3}$$

이것을 사용해서 압력도 구할 수 있습니다.

$$E = \frac{\hbar^2}{10\pi^2 m} (3\pi^2 Nq)^{5/3} V^{-2/3}$$

$$p = -\frac{\partial E}{\partial V} \propto V^{-5/3}$$

즉 페르미온은 압축을 할 때 압력이 생깁니다.
이것을 **축퇴압** degeneracy pressure이라고 부르고
물체가 단단함을 갖는 이유가 됩니다.

중력과 전자의 축퇴압이 평형을 이루게 된다면 어떻게 될까요?

중력과 전자의 축퇴압이 평형을 이루게 된다면 어떻게 될까요?

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3$$

$$E_{deg} = AR^{-2}$$

$$E_{grav} = -BR^{-1}$$

중력과 전자의 축퇴압이 평형을 이루게 된다면 어떻게 될까요?

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3$$

$$E_{deg} = AR^{-2}$$

$$E_{grav} = -BR^{-1}$$

중력과 축퇴압이 평형을 이루는 경우를
백색 왜성white dwarf라고 합니다.

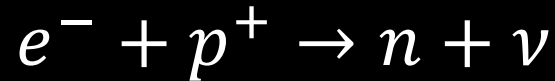
중력이 좀 더 강해지면 상대론적으로 ($E = \hbar ck$) 다루어야 합니다.

$$V = \frac{4}{3}\pi R^3$$

$$E_{deg} = AR^{-1} \propto N^{4/3}R^{-1}$$

$$E_{grav} = -BR^{-1} \propto N^2R^{-1}$$

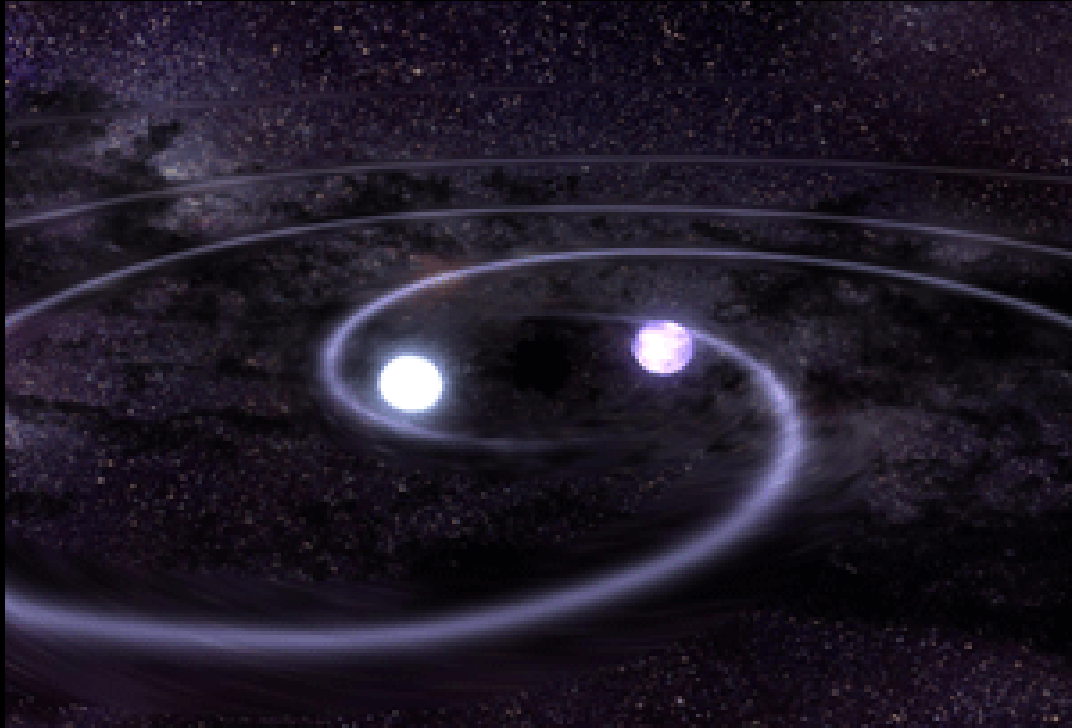
이 경우 평형상태보다 입자가 더 많아지면,
중력이 축퇴압을 능가해서 수축을 계속하게 됩니다.
이 때의 한계질량을 **찬드라세카 한계** Chandrasekhar limit 라고 합니다.
대략 **태양질량의 1.4배** 정도 되는 것으로 알려져 있습니다.



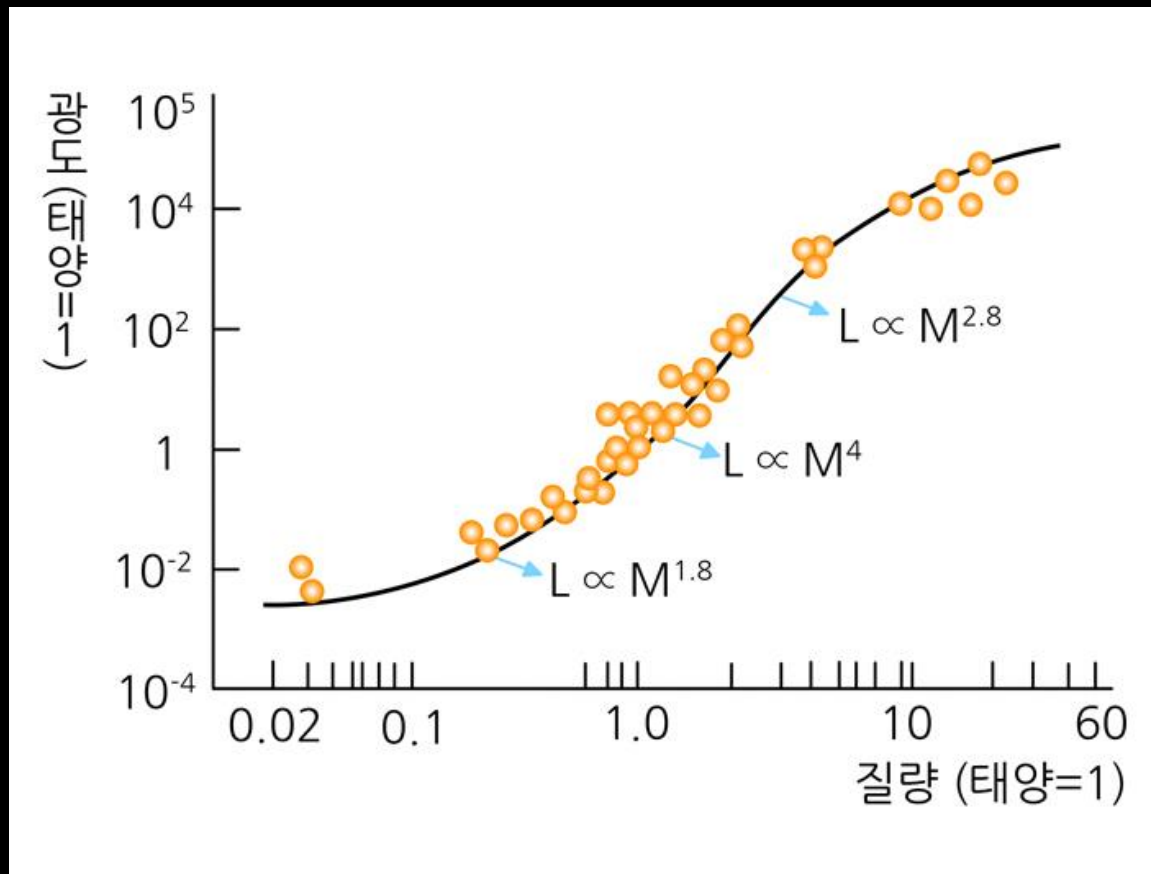
찬드라세카 한계보다 더 무거운 경우에는
내부에서 전자와 양성자가 반응을 일으켜서
중성자를 생성하게 됩니다.

이 반응은 엄청나게 많은 에너지를 방출하게 되는데,
이것은 초신성 폭발의 한 가지 메커니즘이 됩니다.

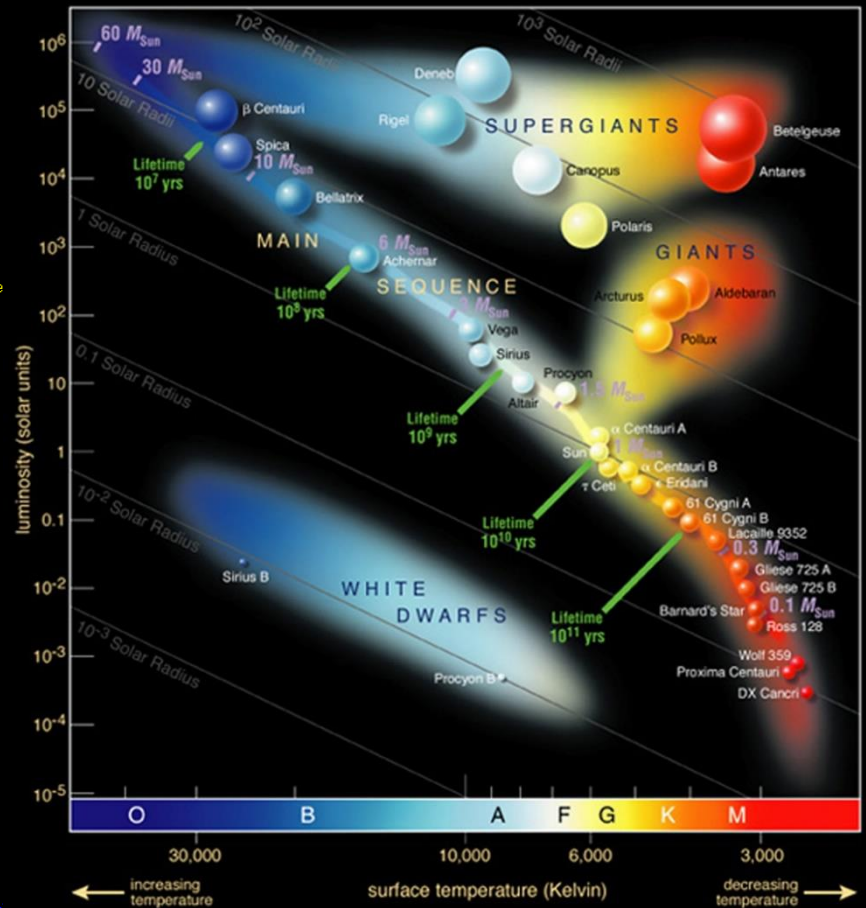
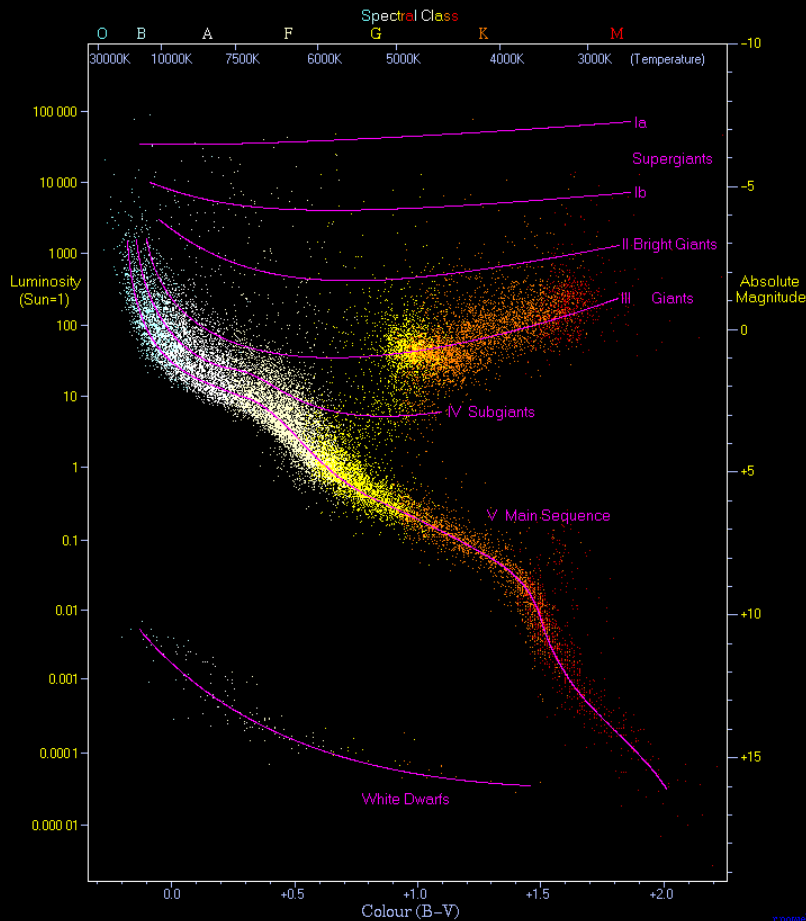
초신성 폭발 이후에는 내부에 중성자별neutron star이나
블랙홀black hole이 남게 됩니다.



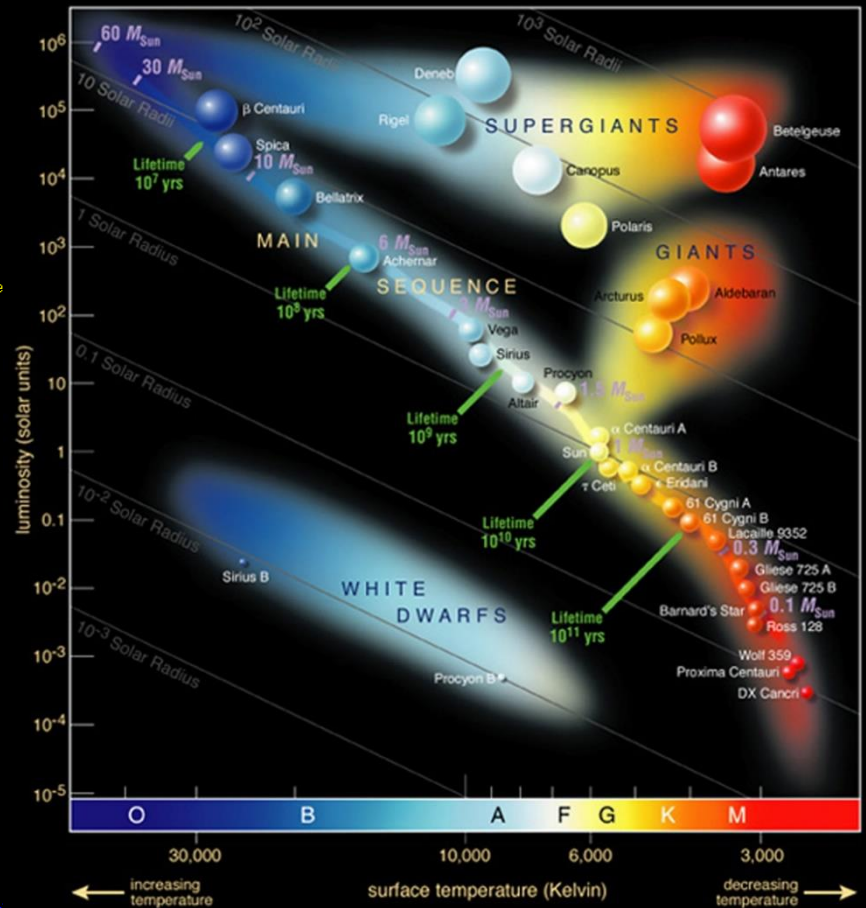
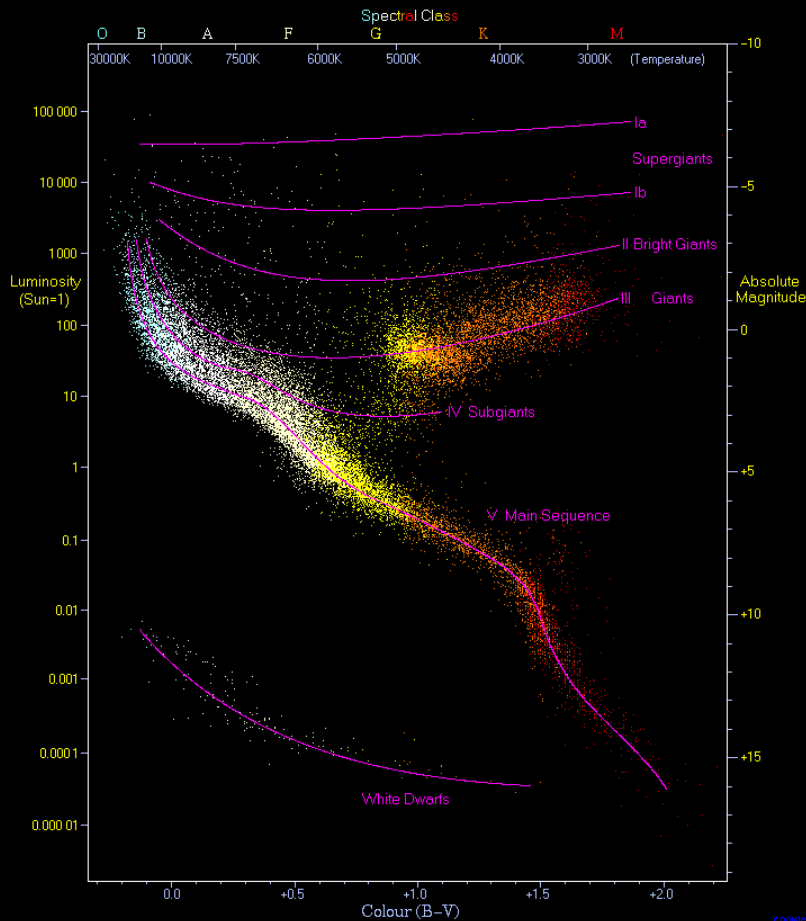
천문학자들은 쌍성계의 운동을 분석해서
별까지의 거리와 별들의 질량을 측정할 수 있었습니다.
우리는 별의 상대광도를 측정할 수 있으므로
질량과 절대광도를 계산할 수 있게 됩니다.



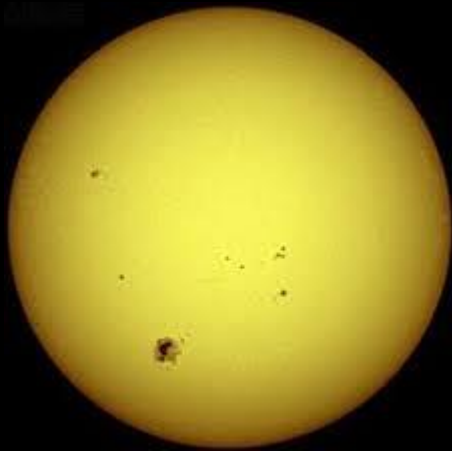
한 가지 흥미로운 사실은
질량과 절대광도는 서로 의존하는 관계에 있다는 것입니다.



Hertzsprung과 Russell은 별들을 측정하면서
 광도와 색깔에 따라서 분류를 해 보았습니다.
 이것을 HR 다이어그램이라고 부릅니다.

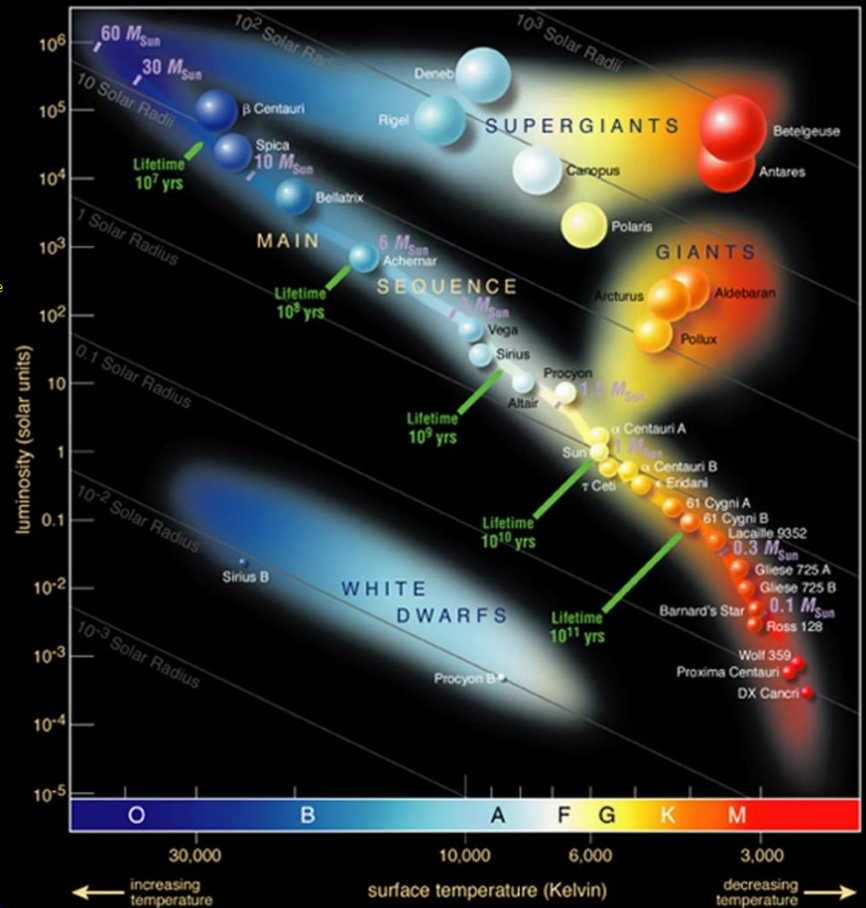
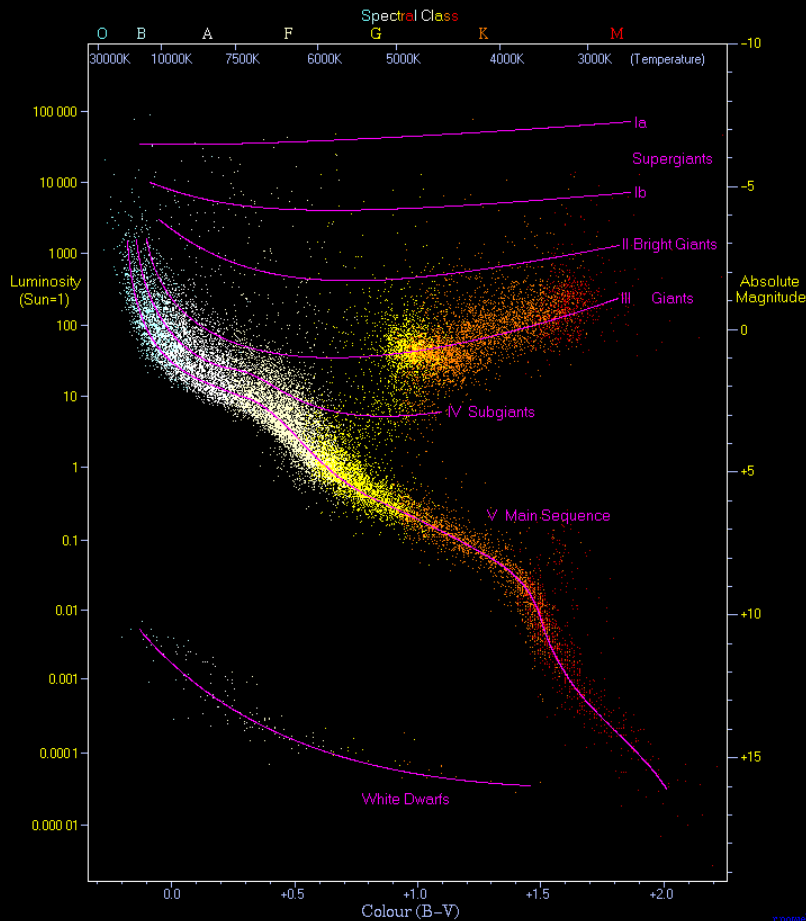


HR 다이어그램의 가장 특징적인 부분은 거의 대부분의 별(주계열성)은 광도와 색 사이에 일정한 관계를 가지고 있다는 것입니다.

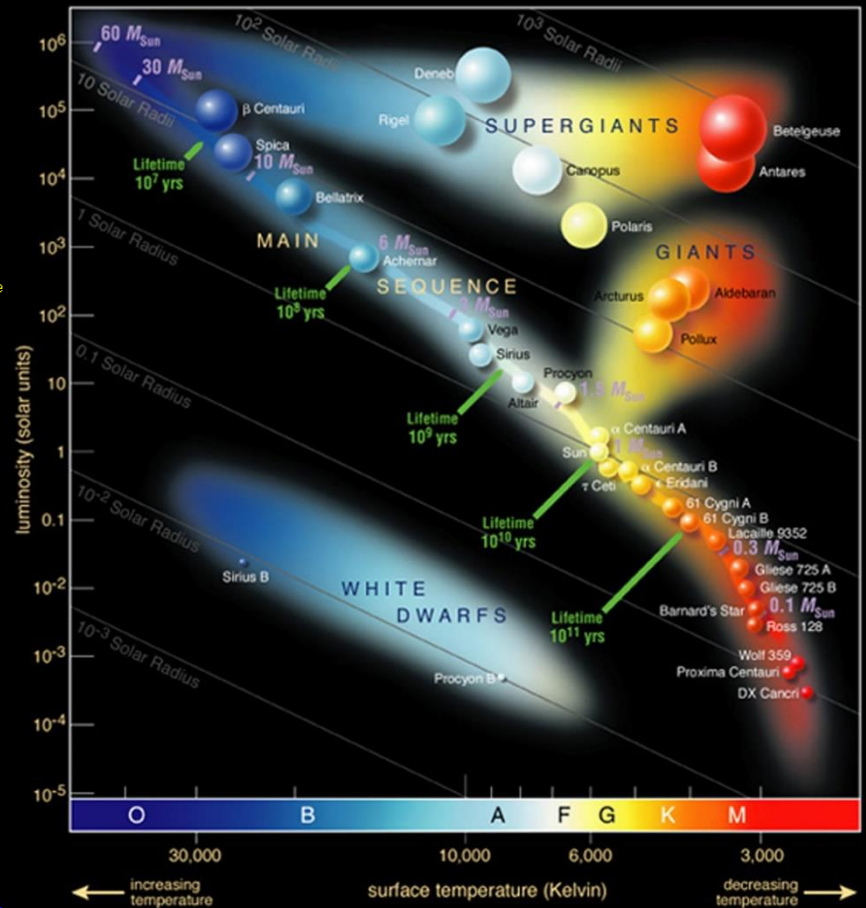
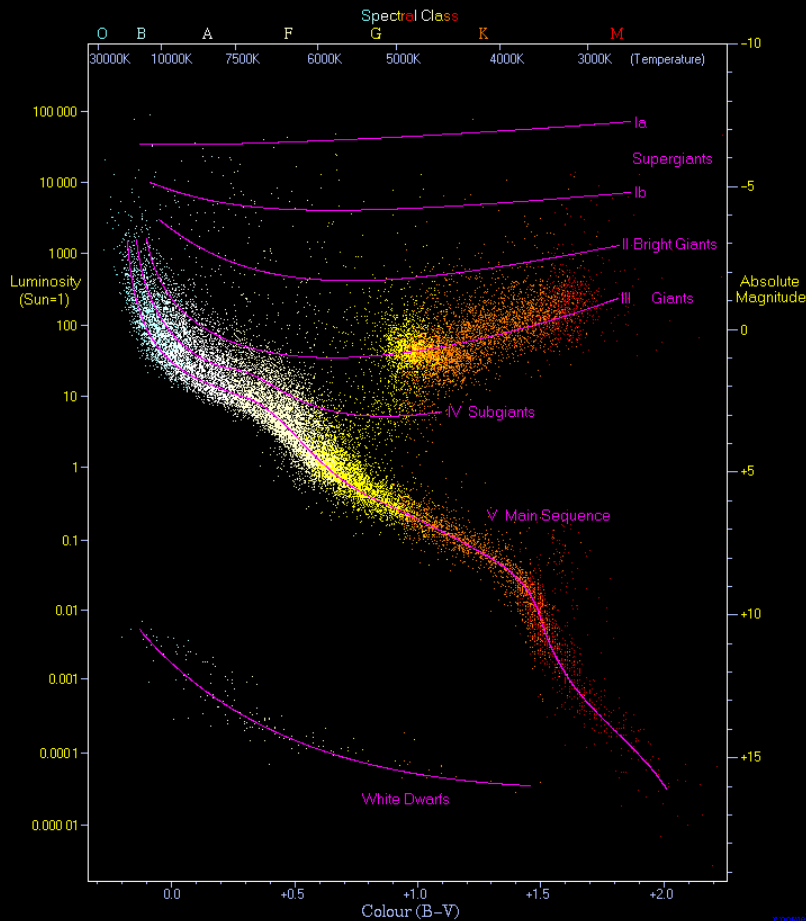


항성이란 중력과 핵융합에 의한 반발력이
균형을 이루고 있는 상태를 말합니다.

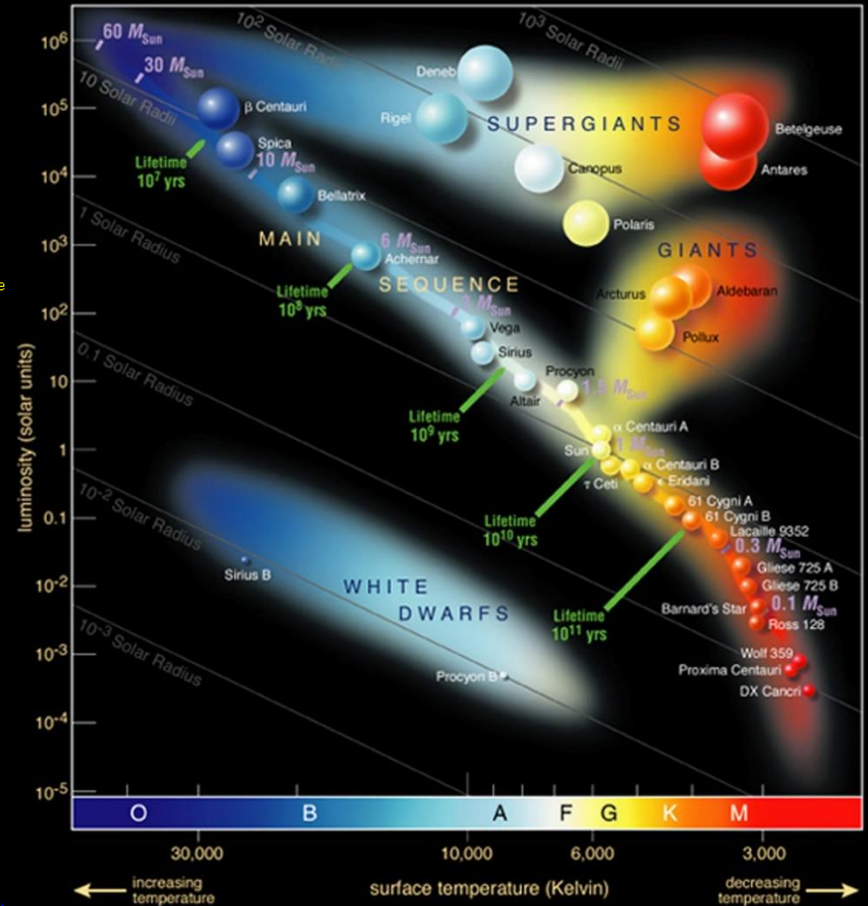
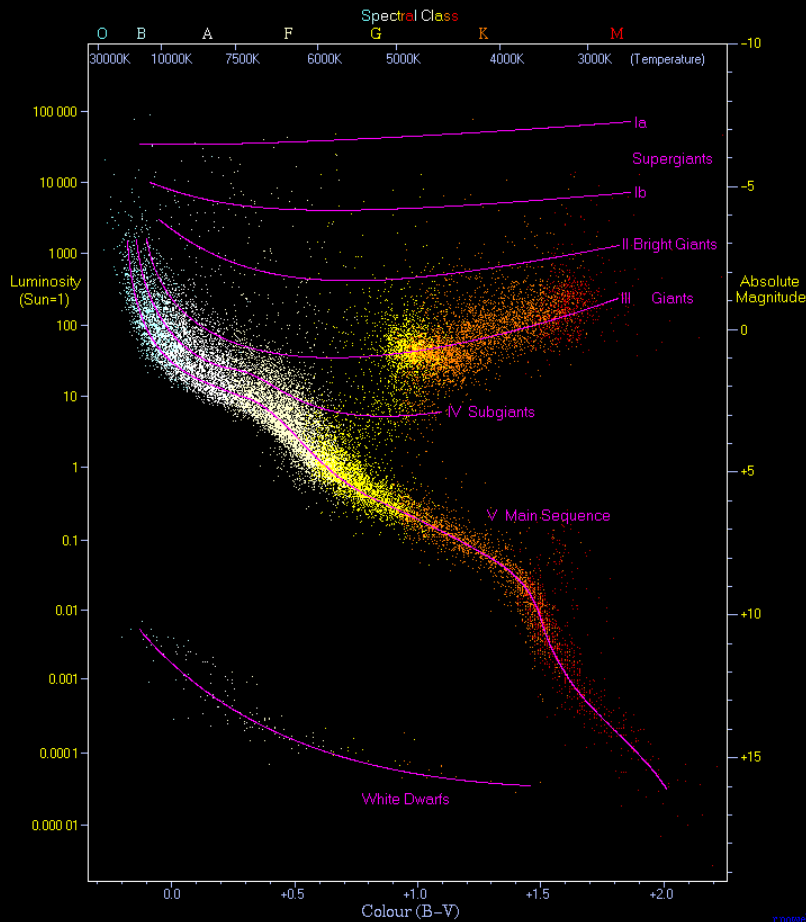
이러한 균형의 조건으로부터
경험적으로 측정된 질량-광도 관계와
광도-색(온도) 관계를
설명할 수 있게 됩니다.



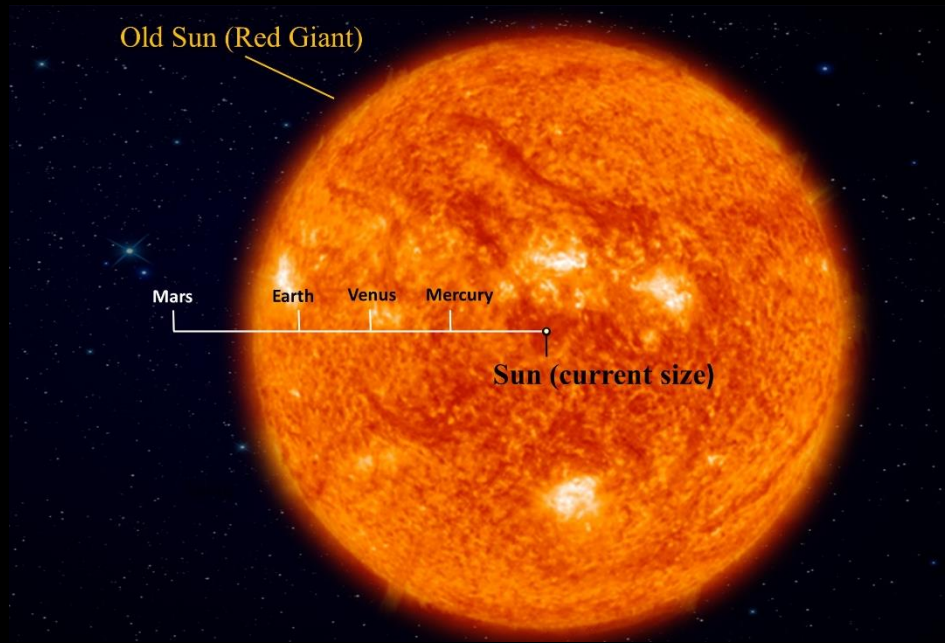
HR 다이어그램의 또 다른 특징은
주계열성 이외에 다른 별들이 있다는 것이었습니다.



온도가 낮지만 밝은 별은 크기가 커야 합니다.
이것을 적색 거성 red giant 이라고 부릅니다.



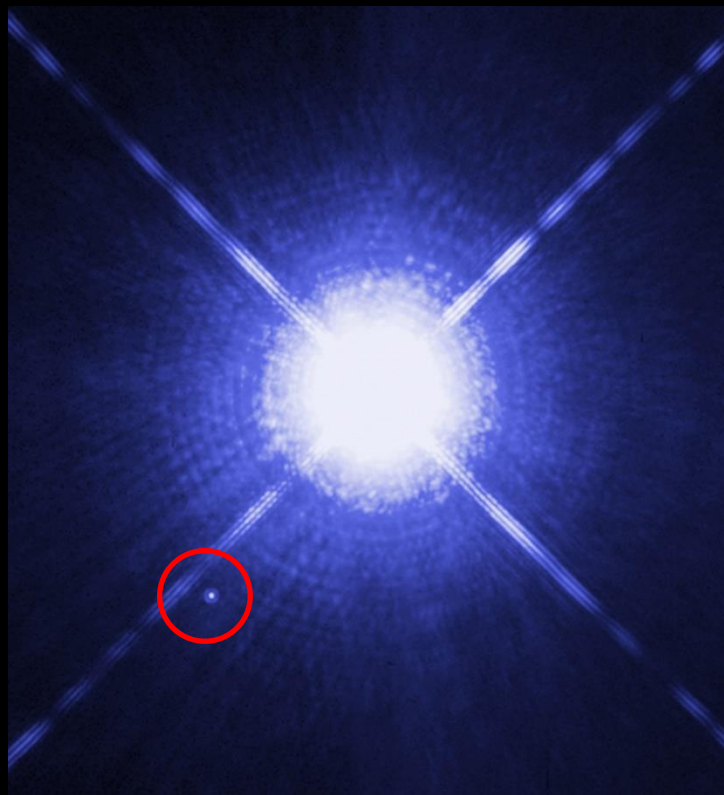
반대로 온도가 높지만 어두운 별은 크기가 작아야 합니다.
이것을 **백색 왜성** white dwarf이라고 합니다.



항성에서 핵융합으로 수소를 소모하고 나면
중력에 의해서 수축을 합니다.

수축에 의해 새로운 핵 반응이 일어나면서
복잡한 과정에 의해 바깥쪽으로 물질을 밀어내게 됩니다.

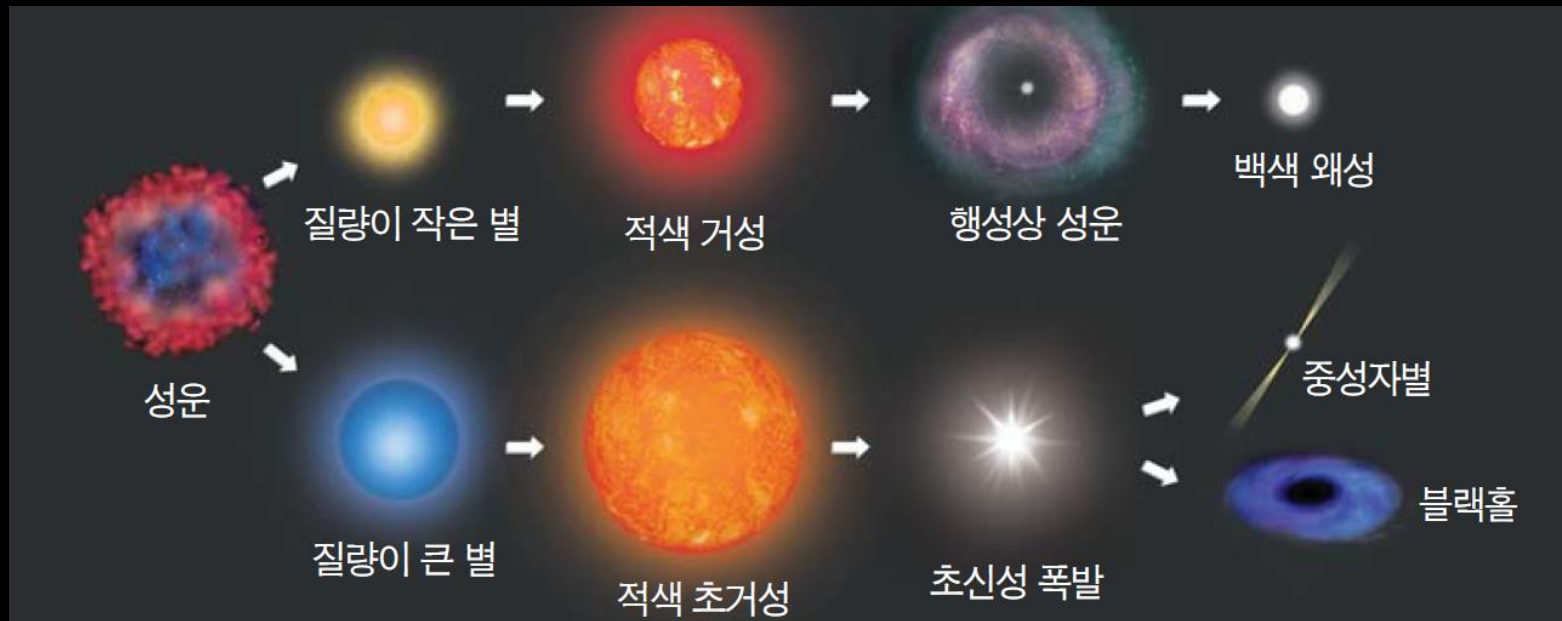
결과적으로 항성은 거대해지면서 서서히 식어가게 됩니다.
이것을 적색거성이라고 합니다.



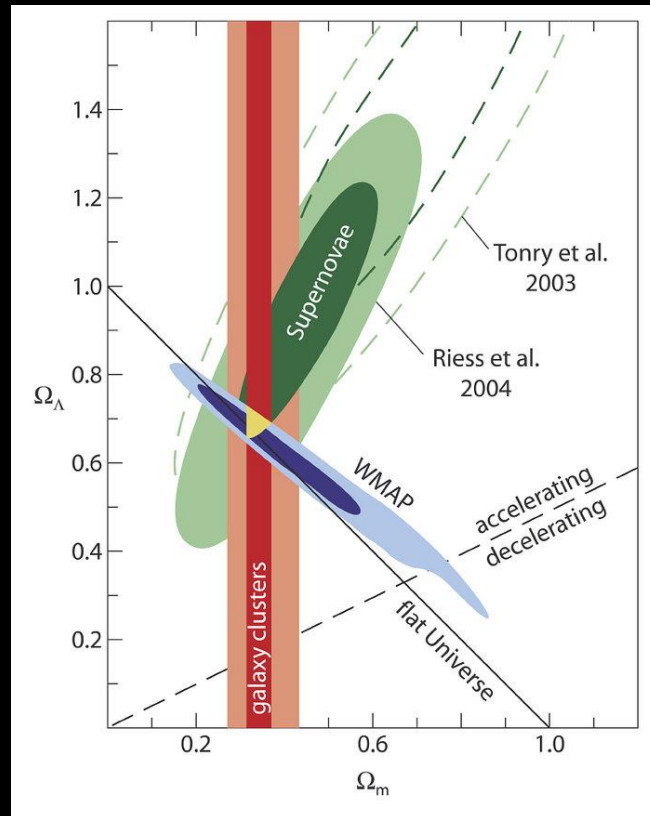
모든 핵융합의 연료를 소모하고 나서
적색거성의 바깥쪽의 물질들이 밖으로 흩어지고 나면
그 중심에는 전자의 **축퇴압**과 **중력**이 평형을 이룬
백색 왜성이 남게 됩니다.



그러나 질량이 조금 더 커서 **찬드라세카 한계**보다 커진다면, 중력에 의해 내부에서 전자-양성자의 반응이 일어나게 되고 **초신성 폭발**을 일으키게 됩니다.



초신성 폭발 이후에는
 내부에 **중성자별**neutron star이 남거나
블랙홀black hole이 남게 됩니다.



우리는 초신성 폭발이 일어나는 시점인
찬드라세카 한계에 대해서 잘 알고 있기 때문에,
초신성 폭발은 우주 먼 곳까지의 거리를 측정하는
좋은 방법을 제공합니다.

양자역학에서 통계역학으로

밀도 행렬

$$\hat{\rho} \equiv |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{n=1}^N |c_n|^2 |n\rangle\langle n| = \sum_{n=1}^N p_n |n\rangle\langle n|$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

밀도 행렬

$$\hat{\rho} \equiv |\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{n=1}^N |c_n|^2 |n\rangle\langle n| = \sum_{n=1}^N p_n |n\rangle\langle n|$$

그러면 일반적으로 다음이 성립합니다.

$$\text{tr } \hat{\rho} \hat{Q} = \langle \hat{Q} \rangle$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

폰 노이만 엔트로피 von Neumann entropy

폰 노이만은 다음과 같은 방법으로 엔트로피를 정의했습니다.

$$S_{vN} \equiv -\text{tr} \hat{\rho} \ln \hat{\rho} = - \sum_{n=1}^N p_n \ln p_n$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

폰 노이만 엔트로피 von Neumann entropy

폰 노이만은 다음과 같은 방법으로 엔트로피를 정의했습니다.

$$S_{vN} \equiv -\text{tr} \hat{\rho} \ln \hat{\rho} = - \sum_{n=1}^N p_n \ln p_n$$

이것은 새년Shannon이 정의한 정보information의 기댓값과도 같습니다.

$$I_n \equiv -\ln p_n$$

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$$

정보란?

$$I_n \equiv -\ln p_n$$

확률이 낮을 수록 정보의 양도 증가합니다.

양자역학에서 통계역학으로

폰 노이만 엔트로피의 최대값은 모든 상태가 같은 확률을 가질 때 얻어진다는 것을 보일 수 있습니다.

즉, $p_n = 1/N$ 을 요청합니다. 이 때 우리는 최대의 엔트로피, 즉 볼츠만 엔트로피 Boltzmann entropy를 얻게 됩니다.

$$-\sum_{n=1}^N p_n \ln p_n = \ln N \equiv S_B$$

양자역학에서 통계역학으로

폰 노이만 엔트로피의 최대값은 모든 상태가 같은 확률을 가질 때 얻어진다는 것을 보일 수 있습니다.

즉, $p_n = 1/N$ 을 요청합니다. 이 때 우리는 최대의 엔트로피, 즉 볼츠만 엔트로피 Boltzmann entropy를 얻게 됩니다.

$$-\sum_{n=1}^N p_n \ln p_n = \ln N \equiv S_B$$

통계역학 및 열역학의 이론적 기초가
여기에서부터 시작됩니다.

열역학thermodynamics과 통계역학statistical mechanics의
차이는 무엇일까요?

열역학은 측정 가능한 양들 사이의 관계에 대한 것입니다.

$$dE = TdS - pdV$$

$$pV = NkT$$

$$E = \frac{3}{2}NkT$$

열역학은 측정 가능한 양들 사이의 관계에 대한 것입니다.

$$dE = TdS - pdV$$

$$pV = NkT$$

$$E = \frac{3}{2}NkT$$

여기에는 아직 **확률**에 대한 이야기는 없습니다.

특정 상태가 선호되기 위해서는 그 상태에 해당하는
경우의 수가 많아야 합니다.

특정 상태가 선호되기 위해서는 그 상태에 해당하는
경우의 수가 많아야 합니다.

가장 무작위적일 때
경우의 수가 가장 많다는 것이 알려져 있습니다.

특정 상태가 선호되기 위해서는 그 상태에 해당하는
경우의 수가 많아야 합니다.

가장 무작위적일 때
경우의 수가 가장 많다는 것이 알려져 있습니다.

이것은 엔트로피가 최대가 되어야 한다는
것과 같은 말이 됩니다.

양자역학에서 통계역학으로

폰 노이만 엔트로피의 최대값은 모든 상태가 같은 확률을 가질 때 얻어진다는 것을 보일 수 있습니다.

즉, $p_n = 1/N$ 을 요청합니다. 이 때 우리는 최대의 엔트로피, 즉 볼츠만 엔트로피 Boltzmann entropy를 얻게 됩니다.

$$-\sum_{n=1}^N p_n \ln p_n = \ln N \equiv S_B$$

양자역학에서 통계역학으로

폰 노이만 엔트로피의 최대값은 모든 상태가 같은 확률을 가질 때 얻어진다는 것을 보일 수 있습니다.

즉, $p_n = 1/N$ 을 요청합니다. 이 때 우리는 최대의 엔트로피, 즉 볼츠만 엔트로피 Boltzmann entropy를 얻게 됩니다.

$$-\sum_{n=1}^N p_n \ln p_n = \ln N \equiv S_B$$

확률을 이렇게 할당한 통계적 표본들을 작은바른틀 앙상블 microcanonical ensemble이라고 합니다.

바른틀 앙상블 canonical ensemble

우리는 여기에 좀 더 구속조건을 줄 수 있습니다.

바른틀 앙상블 canonical ensemble

우리는 여기에 좀 더 구속조건을 줄 수 있습니다.
예를 들어, 시스템이 큰 열원^{heat bath} 안에 놓여있다면,
에너지는 변할 수 있지만 에너지의 기댓값은 변하지 않습니다.

$$\langle H \rangle = \text{const}$$

바른틀 앙상블 canonical ensemble

우리는 여기에 좀 더 구속조건을 줄 수 있습니다.
예를 들어, 시스템이 큰 열원^{heat bath} 안에 놓여있다면,
에너지는 변할 수 있지만 에너지의 기댓값은 변하지 않습니다.

$$\langle H \rangle = \text{const}$$

폰 노이만 엔트로피를 이러한 구속조건 하에서 최대화 하게 되면,
라그랑주 승수^{Lagrange multiplier}에 의해 온도가 도입됩니다.

바른틀 앙상블 canonical ensemble

우리는 여기에 좀 더 구속조건을 줄 수 있습니다.
예를 들어, 시스템이 큰 열원^{heat bath} 안에 놓여있다면,
에너지는 변할 수 있지만 에너지의 기댓값은 변하지 않습니다.

$$\langle H \rangle = \text{const}$$

폰 노이만 엔트로피를 이러한 구속조건 하에서 최대화 하게 되면,
라그랑주 승수^{Lagrange multiplier}에 의해 온도가 도입됩니다.
이 때의 확률분포는 볼츠만 인자^{Boltzmann factor}를 따르게 됩니다.

큰 그림: 통계역학에서 열역학으로

엔트로피 최대 원리 + 구속조건
constraints/ensembles

큰 그림: 통계역학에서 열역학으로

엔트로피 최대 원리 + 구속조건
constraints/ensembles



볼츠만 인자 $p_j \propto e^{-E_j/kT}$
Boltzmann factor

큰 그림: 통계역학에서 열역학으로

엔트로피 최대 원리 + 구속조건
constraints/ensembles



볼츠만 인자 $p_j \propto e^{-E_j/kT}$
Boltzmann factor



분배 함수 $Z = \sum p_j = e^{-F/kT}$
partition function

큰 그림: 통계역학에서 열역학으로

엔트로피 최대 원리 + 구속조건
constraints/ensembles



볼츠만 인자 $p_j \propto e^{-E_j/kT}$
Boltzmann factor



분배 함수 $Z = \sum p_j = e^{-F/kT}$
partition function



에너지 함수 $F = E - ST$
energy function

따라서 통계역학에서는
미시적 원리 또는 양자역학적 원리에 의해
확률을 부여하고,
이러한 확률들을 통해 분배함수를 적고,
최종적으로 열역학적 양을 구해서
현상을 성공적으로 설명할 수 있기를 바랍니다.

양자통계역학 quantum statistical mechanics

보존 입자들에 대해
분배함수는 다음과 같이 적을 수 있습니다.

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nE/kT} = \frac{1}{1 - e^{-E/kT}}$$

양자통계역학 quantum statistical mechanics

페르미온 입자들에 대해
분배함수는 다음과 같이 적을 수 있습니다.

$$Z = \sum_{n=0}^1 e^{-nE/kT} = 1 + e^{-E/kT}$$

양자통계역학 quantum statistical mechanics

보존 입자들에 대해 주어진 에너지에 대한
입자의 수의 기댓값은 다음과 같습니다.

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} n \frac{e^{-nE/kT}}{Z} = \frac{1}{e^{E/kT} - 1}$$

양자통계역학 quantum statistical mechanics

페르미온 입자들에 대해 주어진 에너지에 대한
입자의 수의 기댓값은 다음과 같습니다.

$$\langle n \rangle = \sum_{n=0}^1 n \frac{e^{-nE/kT}}{Z} = \frac{1}{e^{E/kT} + 1}$$

양자통계역학 quantum statistical mechanics

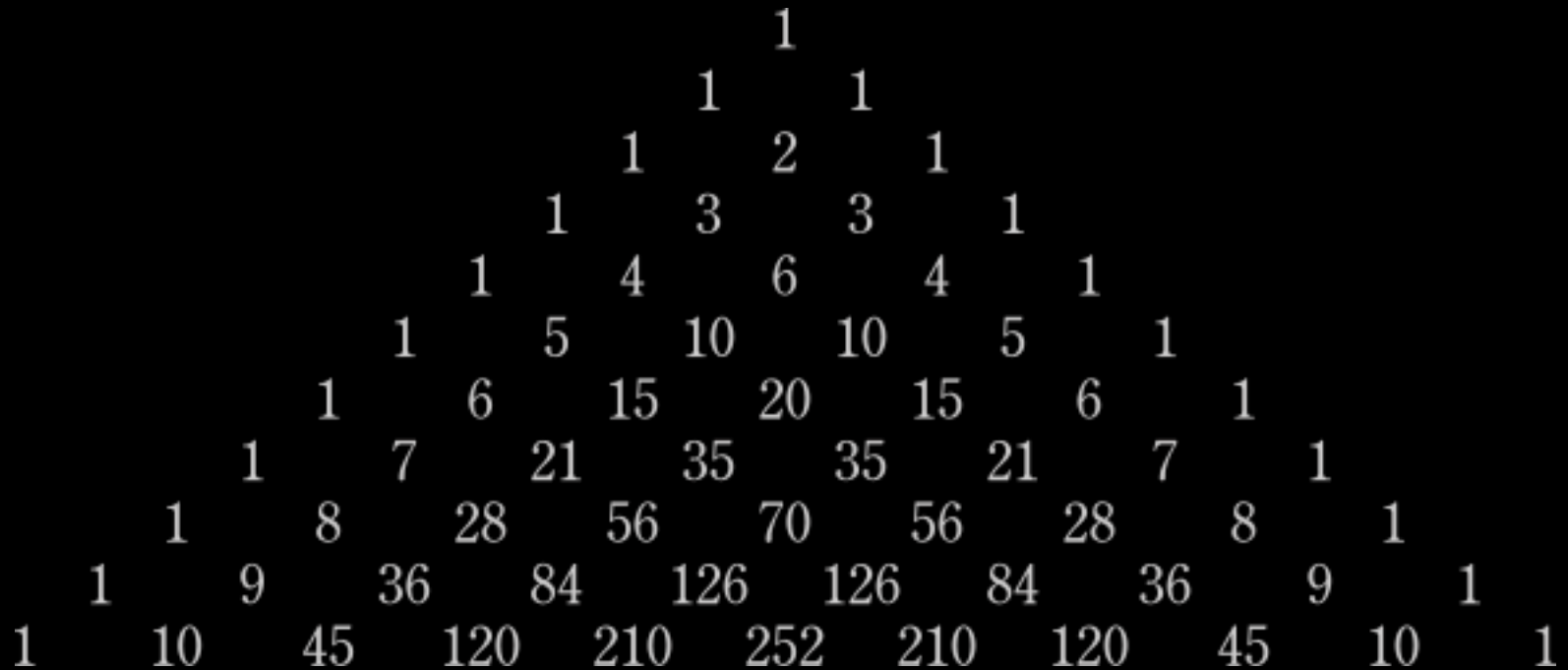
이러한 입자 수의 분포를 각각
보즈-아인슈타인 분포와 페르미-디랙 분포라고 부릅니다.

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{E/kT} \mp 1}$$

우리는 지금까지 **바른틀 앙상블**을 가지고
양자통계를 계산했습니다.

동일한 문제를 **작은바른틀 앙상블**에서 먼저 계산한 뒤에
구속조건을 나중에 부여함으로서
계산할 수도 있습니다.

이항분포 binomial distribution



파스칼의 삼각형

이항분포 binomial distribution

$$\binom{n}{k} = \frac{n!}{k! (n - k)!}$$

n 개의 표본에서 k 개를 순서를 생각하지 않고 선택하는 경우의 수는 이항분포를 따릅니다.

페르미온의 경우

$$\binom{d_n}{N_n} = \frac{d_n!}{N_n! (d_n - N_n)!}$$

n 번째 에너지 상태에 대해서
 d_n 개의 중첩도(degeneracy) 중에서 N_n 개의 페르미온 입자를
순서를 생각하지 않고 배열하는 경우의 수는
위와 같습니다.

보존의 경우

$$\binom{d_n + N_n - 1}{N_n} = \frac{(d_n + N_n - 1)!}{N_n! (d_n - 1)!}$$

같은 선택문제에 있어서,
보존의 경우에는 입자들이 겹칠 수 있으므로
 d_n 개의 중첩도(degeneracy) 중에서 N_n 개의 입자를
순서를 생각하지 않고 배열하는 경우의 수는
위와 같습니다.

페르미온의 경우

$$Q_F = \prod_{n=1}^{\infty} \binom{d_n}{N_n}$$

페르미온의 경우 가능한 모든 경우의 수는
위와 같습니다.

보존의 경우

$$Q_B = \prod_{n=1}^{\infty} \binom{d_n + N_n - 1}{N_n}$$

보존의 경우 가능한 모든 경우의 수는
위와 같습니다.

작은바른틀 앙상블의 엔트로피

$$S = k \log Q$$

작은바른틀 앙상블 microcanonical ensemble의 엔트로피는
볼츠만 엔트로피, 즉 **경우의 수**에 의해서 주어집니다.

구속조건

$$S = k \log Q + \alpha \left[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n \right] + \beta \left[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n \right]$$

위와 같이 에너지와 입자의 수에 대해서
구속조건을 줄 수 있습니다.
 α 와 β 는 라그랑주 승수입니다.

스털링Stirling의 근사공식

$$\log Q_F \simeq \sum_{n=1}^{\infty} [\log d_n! - N_n \log N_n + N_n - (d_n - N_n) \log(d_n - N_n) + (d_n - N_n)]$$

$$\log Q_B \simeq \sum_{n=1}^{\infty} [(d_n + N_n - 1) \log(d_n + N_n - 1) - (d_n + N_n - 1) - N_n \log N_n + N_n - \log(d_n - 1)!]$$

엔트로피 항은 스텔링의 근사공식 $\log z! \simeq z \log z - z$ 으로 전개할 수 있습니다.

구속조건

$$S = k \log Q + \alpha \left[N - \sum_{n=1}^{\infty} N_n \right] + \beta \left[E - \sum_{n=1}^{\infty} N_n E_n \right]$$

구속조건을 고려하고 S 를 N_n 으로 미분해서
0이 되는 지점을 구하면,
큰바른틀 앙상블에서
엔트로피가 가장 큰 경우를 구하게 됩니다.

가장 가능성이 높은 점유 수

$$N_n = \frac{d_n}{e^{(\alpha + \beta E_n)/k} + 1} \quad : \text{페르미온}$$

$$N_n = \frac{d_n - 1}{e^{(\alpha + \beta E_n)/k} - 1} \quad : \text{보존}$$

구속조건을 고려하고 S 를 N_n 으로 미분해서
0이 되는 지점을 구하면,
큰바른틀 앙상블에서
엔트로피가 가장 큰 경우를 구하게 됩니다.

파라미터의 해석

$$\alpha = -\frac{\mu}{T} \qquad \beta = \frac{1}{T}$$

열역학과의 대응을 생각하면 라그랑주 승수는
위와 같은 해석을 하게 됩니다.

파라미터의 해석

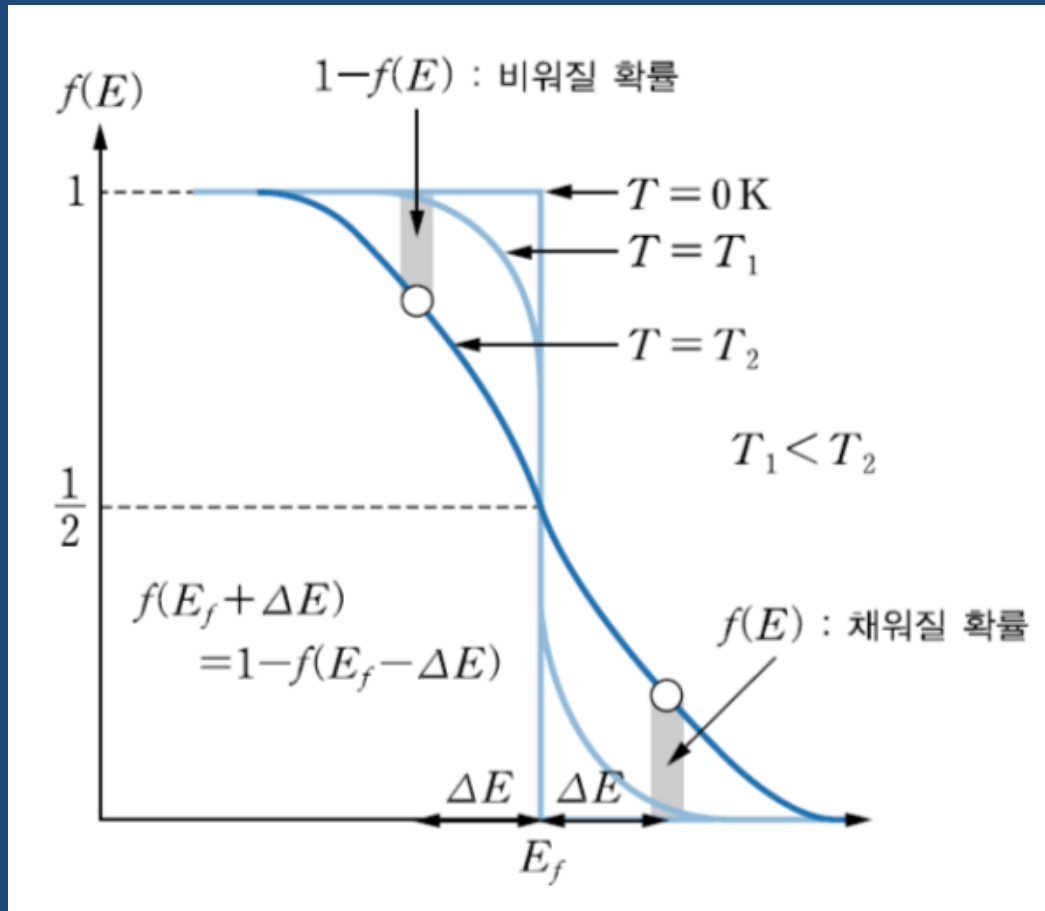
$$\alpha = -\frac{\mu}{T} \qquad \beta = \frac{1}{T}$$

열역학과의 대응을 생각하면 라그랑주 승수는
위와 같은 해석을 하게 됩니다.

따라서 에너지에 대한 입자 수의 기댓값은 (바른틀 양상블에 대해)
다음과 같이 됩니다. (점유 수 = 입자 수 $\times$ 중첩도)

$$\langle n \rangle = \frac{1}{e^{E/kT} \mp 1}$$

페르미-디랙 분포



흑체 복사

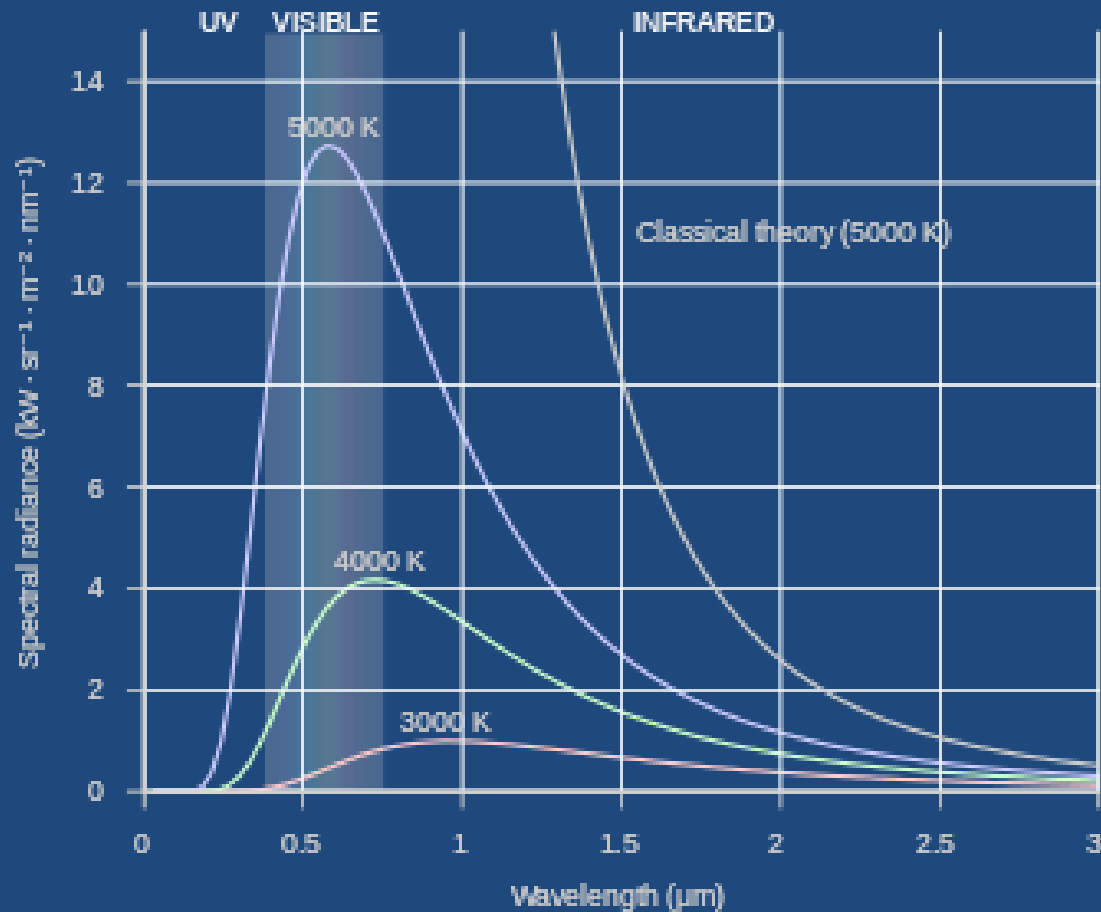
에너지 밀도: $u(\omega)d\omega = \hbar\omega \frac{d_g \langle n_\omega \rangle}{V}$

중첩도: $d_g = \frac{V}{\pi^2} k^2 dk$

플랑크의 흑체복사법칙

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

흑체 복사

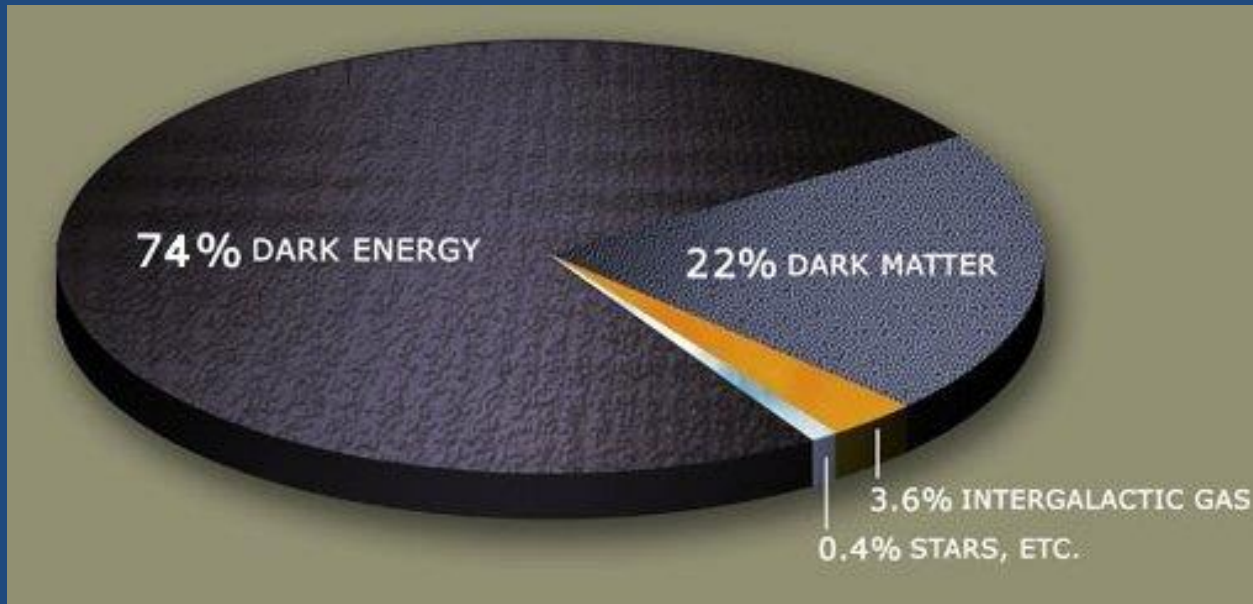


보즈-아인슈타인 응축condensation

Bose - Einstein Condensation

임계온도 이하에서 모든 보존들이 바닥상태에 놓이게 되면 개별 입자가 아니라 입자들이 응축된 하나의 장치럼 보이게 됩니다.

보즈-아인슈타인 응축condensation



우주의 암흑물질도 보즈-아인슈타인 응축된
어떤 물질에 의한 것이 아닐까 하는 추정도 있습니다.

감사합니다