T1. 다결정 확산

A1 v를 T와 물리 상수들로 나타내라. 이로부터 비례 관계 $D(T)$를 구하라.

열역학으로부터 $v = \sqrt{3kT/m}$임을 안다. 여기서 m은 입자의 질량이고 k는 볼츠만 상수이다. 격자간 자리 사이의 특성 도약 시간은 (전이 확률 × 입자의 속력)에 반비례하고, 확산 계수는 도약 시간에 반비례하므로

$$D(T) \propto v \exp(-E_g/kT) \propto \sqrt{T} \exp(-E_g/kT).$$

A2 입자의 제곱평균제곱근 변위 Δr_{sq}, 확산 계수 D, 시뮬레이션 시간 t가 **3차원의 경우**에 서로 어떻게 관련되는지 쓰라. *참고:* 무작위 행보(random walk)에서 세 축 각각에 대한 입자의 운동은 서로 독립이라고 볼 수 있다. **1차원의 경우** 확산 계수 D는 칸 크기 a와 특성 도약 시간 τ와 $D = a^2/2\tau$의 관계를 가진다. *참고:* 이 문항을 풀지 못하더라도, 이후에는 $\Delta r_{sq} = \sqrt{Dt}$로 간주하라.

먼저 한 축(이 축을 x라 하자)을 따른 입자의 제곱평균제곱근 변위를 구하자. 이 경우 운동은 준비 강의에서 다룬 것과 같은 방식으로 일어나므로, 입자 변위의 제곱평균은 다음과 같다:

$$\overline{x^2} = na^2,$$

여기서 n은 전체 도약 횟수이다. 도약 횟수는 다음과 같이 추정할 수 있다:

$$n = t/\tau.$$

$D = a^2/2\tau$를 고려하면 다음을 얻는다:

$$\overline{x^2} = 2Dt.$$

끝으로, 여러 축을 따른 운동은 서로 독립으로 볼 수 있으므로 $\overline{y^2} = \overline{z^2} = 2Dt$이다. 피타고라스 정리를 이용하면 다음을 얻는다:

$$\Delta r_{sq} = \sqrt{\overline{x^2} + \overline{y^2} + \overline{z^2}} = \sqrt{6Dt}.$$

A3 $D(T)$를 구하기 위한 점들을 얻고, 얻어진 의존성을 선형화하라. 에너지 E_g를 임의 단위로 2% 이상의 정확도로 구하라. 이 정확도를 어떻게 달성하는지 명시적으로 기술하라. 측정은 $T \in [1; 10]$, $t \in [1; 10]$, $N \in [10^2; 10^4]$ 범위에서 수행하라.

앞 문항의 결과를 이용하여 확산 계수를 구하자. $\Delta r_{sq} = \sqrt{6Dt}$이므로 $D = \Delta r_{sq}^2/6t$이다. 이를 문항 **A1**의 결과와 합치면 $\Delta r_{sq}^2/6t\sqrt{T} \propto \exp(-E_g/kT)$를 얻는다. 이제 가장 쉬운 방법은 $Y = \ln\left[\Delta r_{sq}^2 t^{-1} T^{-1/2}\right]$의 $X = 1/T$에 대한 의존성의 기울기를 구하는 것이다. 정확도를 보장하는 방법: 첫째, $\Delta r_{sq} \gg 1$이면 좋다. 둘째, $1/T$는 0.9만큼 변하고 E_g는 이 의존성의 기울기에 비례한다. 2%의 정확도를 보장하려면 최저 온도와 최고 온도에서의 오차의 합이 $\sigma_y(0.1) + \sigma_y(1.0) \leq 0.02 \cdot 0.9 E_g$이어야 한다. $y = \ln[\Delta r_{sq}^2 T^{-1/2}]$이므로 $\varepsilon_r(0.1) + \varepsilon_r(1.0) \leq 0.009 E_g$이다. 모든 점에서 $\varepsilon_r \leq 0.0045 E_g$인지 간단히 확인하면 된다. 데이터 점들을 얻어 아래 표에 정리하자:

t	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10
T	1.000	1.111	1.250	1.429	1.667	2.000	2.500	3.333	5.000	10.00
N	10000	10000	10000	10000	10000	10000	10000	10000	10000	10000
Δr_{sq}	13.750	17.009	20.882	25.999	32.154	40.362	50.733	65.932	86.227	122.632
σ_r	0.053	0.066	0.081	0.102	0.127	0.156	0.198	0.257	0.336	0.477
X	1.000	0.900	0.800	0.700	0.6	0.5	0.4	0.3	0.2	0.1
Y	2.939	3.312	3.664	4.035	4.383	4.747	5.092	5.473	5.807	6.164

요구한 정확도가 실제로 달성되었음을 알 수 있다. InteractiveBuffer.nb로 $Y(X)$를 그리고 기울기를 구하자.



	1	2
1	1.	2.939
2	0.9	3.312
3	0.8	3.664
4	0.7	4.035
5	0.6	4.383
6	0.5	4.747
7	0.4	5.092
8	0.3	5.473
9	0.2	5.807
10	0.1	6.164

기울기는 다음과 같다.

$$-E_g = -3.58 \pm 0.02.$$

B1 이러한 구조에서 계수 α는 얼마인가?
참고: 수치 모형화로 넘어가기 위해 이 문항을 반드시 풀어야 하는 것은 아니다.

문제지로부터, 확산 흐름에 수직인 낱알 경계는 유효 확산 계수에 영향을 주지 않는다고 결론지을 수 있다. 그러면 유효 확산 계수는 다음과 같다:

$$D_{eff} \approx 2\delta D_{gb}/3 \implies \alpha = 2/3.$$

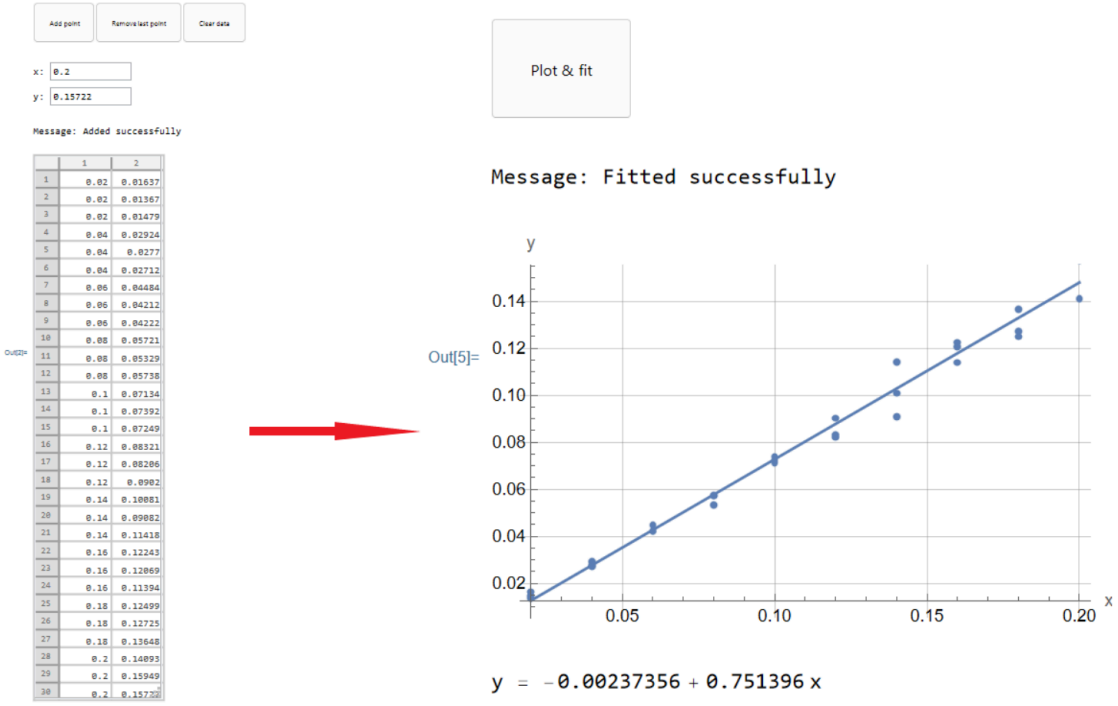
B2 $t \in [2;5]$, $D_{gb}/D \in [2;5]$, $\delta \in [0.005;0.05]$에서 다결정 내 확산을 시뮬레이션하여 α의 실험값을 구하라. **B1**의 결과와 비교하라.
참고: 프로그램을 실행하면, 불순물 입자의 평균 농도의 로그 $\ln \bar{c}$가 침투 깊이의 제곱 z^2에 대해 가지는 의존성이 Bavg.csv 파일에 기록된다. 이 의존성은 B.nb 프로그램으로 분석할 수 있다.

D_{gb}/D가 크고 δ가 작을수록 시뮬레이션 결과가 좋을 것임은 분명하다. A형 확산은 큰 시간 규모에서 나타나므로 최대 시뮬레이션 시간을 사용하는 것이 좋다. 따라서 $(5, 5, 0.005)$를 출발점으로 고르자. B.nb의 그래프는 이상적으로 기울기 $k = -\dfrac{1}{4D_{eff}t}$를 가져야 하므로, 임의 단위로 다음과 같이 쓴다:

$$D_{eff} = \frac{1}{4|k|t} = 1 + \alpha\delta(D_{gb}/D - 1).$$

$X = \delta(D_{gb}/D - 1)$과 $Y = \left[\dfrac{1}{4|k|t} - 1\right]$을 좌표로 고르면 이 의존성은 선형이 된다. X를 크게 변화시키는 가장 좋은 방법은 δ를 키우는 것이다. 가장자리 효과를 줄이기 위해 B.nb의 Width 슬라이더를 낮추는 것도 권할 만하다. 데이터 점들을 얻어 아래 표에 정리하고 InteractiveBuffer.nb로 그래프를 그리자:

t	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
D_{gb}/D	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
δ	0.005	0.010	0.015	0.020	0.025	0.030	0.035	0.040	0.045	0.050
$\lvert k\rvert$	0.049194 0.049325 0.049271	0.048579 0.048652 0.048679	0.047854 0.047978 0.047974	0.047294 0.047470 0.047286	0.046670 0.046558 0.046616	0.046159 0.046208 0.045863	0.045421 0.045837 0.044876	0.044546 0.044615 0.044885	0.044445 0.044355 0.043995	0.043823 0.043122 0.043207
Y	0.01637 0.01367 0.01479	0.02924 0.02770 0.02712	0.04484 0.04212 0.04222	0.05721 0.05329 0.05738	0.07134 0.07392 0.07259	0.08321 0.08206 0.09020	0.10081 0.09082 0.11418	0.12243 0.12069 0.11394	0.12499 0.12725 0.13648	0.14093 0.15949 0.15722
X	0.02	0.04	0.06	0.08	0.10	0.12	0.14	0.16	0.18	0.20



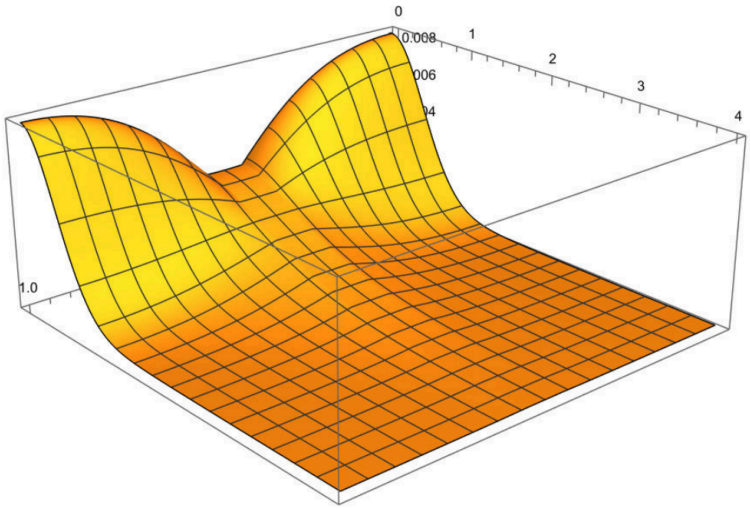
시뮬레이션 결과는 $\alpha = 0.75 \pm 0.09$이며, 이는 오차 범위 안에서 이론적 추정과 일치한다.

C1 수치 모형화에 기대지 않고 이 계수들에 대해 무엇을 말할 수 있는가? 미리 결정할 수 있는 계수들의 값을 모두 구하라.

여기서 유일한 "선험적" 제약은 차원에 관한 것이다. 편리하게도 우변에서 a를 제외한 모든 인자는 무차원이므로 $\psi = -6/5$이다.

C2 나머지 계수들을 수치 시뮬레이션으로 구하라. 측정은 $t \in [0.005; 0.200]$, $D_{gb}/D \in [5; 50]$, $\delta \in [0.02; 0.20]$ 범위에서 수행하라. 프로그램을 실행하면, Cavg.csv 파일에는 불순물 입자의 평균 농도의 로그 $\ln \bar{c}$가 침투 깊이 $z^{6/5}$에 대해 가지는 의존성이, Cmap.csv 파일에는 농도의 로그 $\ln c$가 침투 깊이 $z^{6/5}$와 고체 표면을 따른 좌표 y에 대해 가지는 의존성이 기록된다. 이 의존성들은 C.nb 프로그램으로 분석할 수 있다.

문제지에서 말했듯이, B형 확산의 규모는 a보다 훨씬 작고(즉 $\sqrt{2[D_{gb}/D]t} \ll 1$) 동시에 δa보다 훨씬 커야 한다(즉 $\sqrt{2t} \gg \delta$). 그러면 예를 들어 입력 매개변수를 $(0.100; 25; 0.10)$으로 두면, 어느 입력 매개변수든 넓은 범위에서 바꾸어도 B형 확산을 얻을 수 있다. 시뮬레이션한 확산이 B형인지 아닌지는 농도 분포를 그려 문제지의 그림과 비슷한지 보면 언제든 확인할 수 있다. 예를 들어 초기 매개변수 $(0.100; 25; 0.10)$에 대한 농도 지도는 다음과 같다:



기울기 $k = \frac{d \ln \bar{c}}{dz^{6/5}}$를 구하기 위해 C.nb가 만든 그래프에서 선형 구간만 잘라 쓸 것이다.

ξ는 서로 다른 δ로 확산을 시뮬레이션하고 InteractiveBuffer.nb로 $\ln|k|(\ln\delta)$를 그려 구할 수 있다. η와 ζ도 같은 방식으로(각각 $[D_{gb}/D]$와 t를 바꾸어) 구할 수 있다.

데이터 점들을 얻어 아래 표에 정리하자($\delta^{-0.39}[D_{gb}/D]^{-0.68}t^{-0.44} \equiv Z$):

δ	0.100	0.080	0.060	0.120	0.150
k	-1.08567	-1.11796	-1.2865	-0.942494	-0.903676
$\ln\delta$	-2.303	-2.526	-2.813	-2.120	-1.897
$\ln\|k\|$	0.092	0.112	0.252	-0.059	-0.101
Z	0.758	0.826	0.925	0.706	0.647

D_{gb}/D	25	35	50	15	10
k	-1.08567	-0.865926	-0.675888	-1.55123	-2.00586
$\ln[D_{gb}/D]$	3.219	3.555	3.912	2.708	2.303
$\ln\|k\|$	0.092	-0.144	-0.392	0.439	0.696
Z	0.758	0.603	0.473	1.072	1.413

t	0.100	0.080	0.120	0.150	0.200
k	-1.08567	-1.18623	-0.99746	-0.908966	-0.799996
$\ln t$	-2.303	-2.526	-2.120	-1.897	-1.609
$\ln\|k\|$	0.092	0.171	-0.003	-0.095	-0.223
Z	0.758	0.836	0.699	0.634	0.558

Add point | Remove last point | Clear data

x: −1.897

y: −0.101

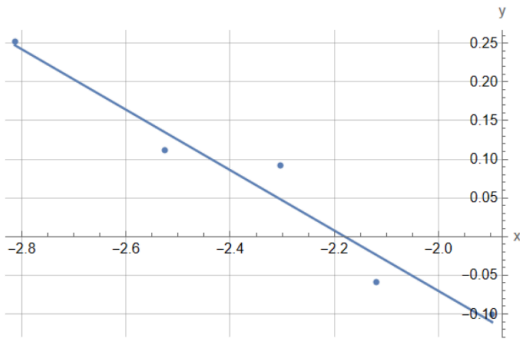
Out[5]= Message: Added successfully

	1	2
1	−2.303	0.092
2	−2.526	0.112
3	−2.813	0.252
4	−2.12	−0.059
5	−1.897	−0.101

Plot & fit

Message: Fitted successfully

Out[8]=



y = −0.851181 − 0.39042 x

Add point | Remove last point | Clear data

x: 2.303

y: 0.696

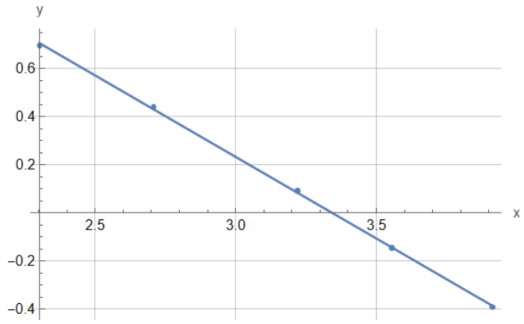
Out[5]= Message: Added successfully

	1	2
1	3.219	0.092
2	3.555	−0.144
3	3.912	−0.392
4	2.708	0.439
5	2.303	0.696

Plot & fit

Message: Fitted successfully

Out[8]=



y = 2.2673 − 0.678186 x

Add point | Remove last point | Clear data

x: −1.609

y: −0.223

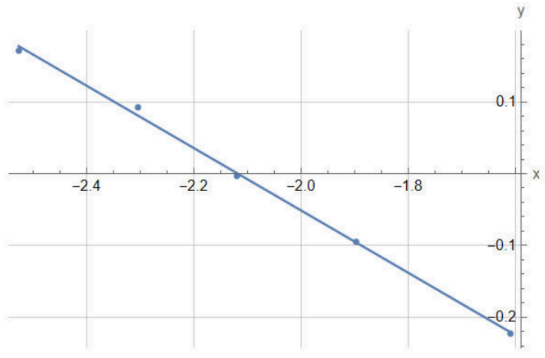
Out[5]= Message: Added successfully

	1	2
1	−2.303	0.092
2	−2.526	0.171
3	−2.12	−0.003
4	−1.897	−0.095
5	−1.609	−0.223

Plot & fit

Message: Fitted successfully

Out[8]=



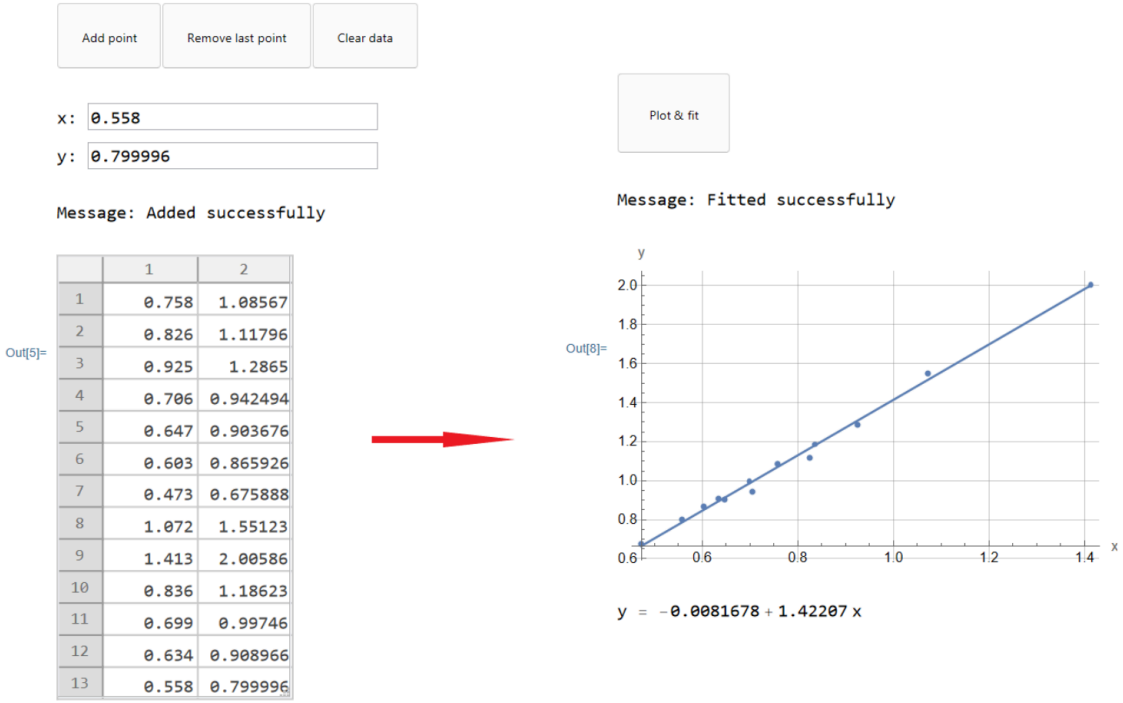
y = −0.921417 − 0.435111 x

구하려는 계수들은 그려진 직선들의 기울기이므로:

$$\xi = -0.39 \qquad \eta = -0.68 \qquad \zeta = -0.44$$

C3 C의 값을 가능한 한 정확하게 구하라.

ψ, ξ, η, ζ를 알면, C는 $Y = |k|$의 $X = \delta^{-0.39}[D_{gb}/D]^{-0.68}t^{-0.44}$에 대한 의존성의 기울기로 구할 수 있다. 앞 문항에서 얻은 점들에 대해 X를 계산하면 InteractiveBuffer.nb로 그래프를 그릴 수 있다:



	1	2
1	0.758	1.08567
2	0.826	1.11796
3	0.925	1.2865
4	0.706	0.942494
5	0.647	0.903676
6	0.603	0.865926
7	0.473	0.675888
8	1.072	1.55123
9	1.413	2.00586
10	0.836	1.18623
11	0.699	0.99746
12	0.634	0.908966
13	0.558	0.799996

기울기는 다음과 같다:

$$C = 1.42$$