Pál Balázs
UXB26I

Véletlen fizikai folyamatok
5. házifeladat

2019. március 20.

1. FELADAT

K: *Az atomreaktorokban keletkező, erősen sugárzó hulladékok tárolására a geológiailag stabil, gránit alapú ősmasszívumokat tekintik alkalmasak. Finnországban most épül egy ilyen, kb. 500 m mélybe menő barlangrandszer[1], amelybe kb. 100 éven keresztül tervezik felhalmozni a hulladékot, ami után az egészet betemetik. Tegyük fel, hogy a terület geológiailag valóban stabil, s a rádioaktív magok csak a gániton keresztül történő diffúzión keresztül tudnak a felszínre jutni. Keressük ki gránit diffúziós együtthatóját nagyobb rendszámú atomokra és számítsuk ki, hogy mennyi idő elteltével fogunk rádioaktivitást észlelni a barlang felett a felszínen!*

1.1. Elméleti háttér

A diffúzió ilyen irányú számítását már az egyik beadandóban részleteztem, a továbbiakban annak az eredményére építek. Ismert, hogy a diffúzió definíció szerint az alábbi összefüggéssel írható le:

$$D = \frac{(\Delta x)^2}{2\tau} \tag{1}$$

Ahol D a diffúziós együttható, Δx a megtett úthossz, τ pedig a diffundálás alatt megtett idő, míg a részecske Δx távolságra eljutott. Ebből kifejezhető τ értéke D és Δx ismeretében:

$$\tau = \frac{(\Delta x)^2}{2D} \tag{2}$$

1.2. Sugárzó anyagok diffúziója gránitban

A nagy rendszámú elemek diffúziós együtthatójának ismerete a feladatban körüljárt téma miatt egy fontos kutatási területnek számít. A sugárzó anyagok hosszú távú tárolásához mindenképp szükséges ismeretnek számít ezen anyagok vizsgálata. Ezen motiváció nyomán készült kutatások alapján megkaphatjuk a feladat megoldásához szükséges adatokat. Név szerint a nehezebb, első sorban a radioaktív hulladékban előforduló sugárzó elemek diffúziós együtthatóját porózus anyagok, pl. gránit esetében. Ez az érték egyes modellek szerint nem konstans és akár nagy szóráshatáron belül is változhat a valóságban pl. egy radioaktív hulladéktárolóból indulva egy vastag gránit rétegen áthaladva[2]. Itt ennek ellenére az egyszerűség kedvéért egy átlagos konstans értékkel fogom közelíteni a számításaimban használt együtthatókat.
Az nagyobb méretű atomok/molekulák diffúziós együtthatója ezek alapján

$$D \approx \left[5 \cdot 10^{-15}, 5 \cdot 10^{-14}\right] \ \frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}} \tag{3}$$

nagyságrendbe esik[3][4]. Szintén az előzőek alapján az ^{233}U izotóp, gránitban történő diffúziójának együtthatója $D \approx 5 \cdot 10^{-15}\ \frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}}$.
Egyéb mérésekből az egyes sugárzó atomok Van der Waals sugarai ismertek, így pl. az urán esetén ez $r_w = 186$ pm, így átmérőjének vehetjük az $a = 372$ pm értéket[5]. A ^{209}Po esetén $r_w = 197$ pm, míg a ^{222}Ra Van der Waals sugara pedig $r_w = 283$ pm[6], tehát viszonylag széles mérettartományt fognak át, hiába közel azonos a rendszámuk. Egy sugárzó hulladékgyűjtőben nyilvánvalóan több féle különböző sugárzó izotóp is található, melyek diffúziójához szükséges időtartamot mind azonos módon számíthatjuk. Itt most csak a már említett ^{233}U diffúziójára vonatkozó számítást végzem el.

1.3. A kívülre diffundálás ideje

A feladat szövege alapján azt kell kiszámítsuk, hogy a sugárzó részecske mennyi idő alatt várható, hogy keresztül diffundál az 500 m vastag gránitrétegen. Az ismert adatokat behelyettesítve a (2)-es egyenletbe meg is kaphatjuk a kérdéses időhosszt:

$$\tau = \frac{(\Delta x)^2}{2D} = \frac{(500\ \mathrm{m})^2}{2 \cdot 5 \cdot 10^{-15}\ \frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}}} = \frac{2.5 \cdot 10^4\ \mathrm{m}^2}{10 \cdot 10^{-15}\ \frac{\mathrm{m}^2}{\mathrm{s}}} = \frac{1}{4} \cdot \frac{10^4}{10^{-15}}\ \mathrm{s} = \frac{1}{4} \cdot 10^{19}\ \mathrm{s} = 79.275 \text{ milliárd év} \tag{4}$$

Ami a világegyetem jelenlegi életkorának több, mint 5-szöröse, tehát egy nagyon nagy szám. Az oka, hogy mégis csak 100 évre előre tervezik ezt a hulladék lerakót az, hogy a sugárzó részecskék nem csak ilyen diffúzión keresztül juthatnak át a gránitrétegen. A részecskék bomláskor nagy kinetikus energiát szerezhetnek, és így jóval megnövelve a szabad úthosszukat, jóval rövidebb idő után már kijuthatnak a gránitom túlra is.

2. FELADAT

K: *Vizsgáljuk az előadáson tárgyalt 2 Ising spinből álló rendszer relaxációjának problémáját! Az előadáson megkaptuk a rendszer dinamikai mátrixát, s meghatároztuk a sajátvektorokat és a megfelelő sajátértékeket (A számolás megtalálható a kurzus honlapján „Ising spinek dinamikája" cím alatt is).*

1. *Ismerve az összes sajátvektort és sajátértékeket, határozzuk meg milyen valószínűséggel van a rendszer t időpontban az $s_1 = -1, s_2 = -1$ állapotban, ha a kezdeti állapot $s_1 = +1, s_2 = -1$ volt.*

2. *Számítsuk ki a rendszer átlagos mágnesezettségének $M(t) = \langle s_1 + s_2 \rangle$ időfejlődését, ha a kezdeti állapotban minden konfiguráció egyenlő $\left(\frac{1}{4}\right)$ valószínűséggel van jelen.*

2.1. Állapotok valószínűsége

Az órán is látott leírás alapján keressük a következő egyensúlyi helyzetet:

$$P^{(e)}(s_1, s_2) = \frac{1}{z} e^{-\beta E(s_1,s_2)} = \frac{1}{z} e^{\beta \mathcal{J} s_1 s_2} \tag{5}$$

Ahol $-\mathcal{J} s_1 s_2 \equiv \mathscr{H} = E$ a kölcsönhatás energiája, amiben $\mathcal{J}$ a rendszer egy pozitív skálafaktora. Bevezetve $\beta \mathcal{J} \equiv K$ mennyiséget, a z normálási faktort a következő feltétel alapján írhatjuk fel:

$$\sum_{s_1 = \pm 1} \sum_{s_2 = \pm 1} P^{(e)}(s_1, s_2) = \frac{1}{z} \sum_{s_1 = \pm 1} \sum_{s_2 = \pm 1} e^{\beta \mathcal{J} s_1 s_2} = 1 \tag{6}$$

Így kifejezhetjük z-t:

$$\begin{aligned} z = \sum_{s_1 = \pm 1} \sum_{s_2 = \pm 1} e^{-\beta E(s_1,s_2)} \equiv \sum_{s_1 = \pm 1} \sum_{s_2 = \pm 1} e^{\beta \mathcal{J} s_1, s_2} = \sum_{s_1 = \pm 1} \sum_{s_2 = \pm 1} e^{K s_1, s_2} = \\ = e^{K \cdot 1 \cdot 1} + e^{K \cdot 1 \cdot (-1)} + e^{K (-1) \cdot 1} + e^{K (-1) \cdot (-1)} = 2 \cdot \left(e^{K} + e^{-K} \right) \end{aligned} \tag{7}$$

Ebből végül az adott állapot valószínűsége előáll az alábbi módon:

$$P^{(e)}(s_1, s_2) = \frac{1}{z} e^{K s_1 s_2} = \frac{e^{K s_1 s_2}}{2 \cdot (e^{K} + e^{-K})} \tag{8}$$

Ebből látható, hogy a rendszer energiája akkor alacsonyabb, ha a spinek azonos irányba állnak, míg magasabb, ha azok ellentétesek egymással:

$$P^{(e)}(\uparrow\uparrow) = P^{(e)}(\downarrow\downarrow) = \frac{e^{K}}{z} \tag{9}$$

$$P^{(e)}(\uparrow\downarrow) = P^{(e)}(\downarrow\uparrow) = \frac{e^{-K}}{z} \tag{10}$$

Bevezetve egy $w_1(s_1, s_2)$ és egy $w_2(s_1, s_2)$ rátát, mellyel a két spin állapotváltozását jellemezzük, felírható a rendszer időfejlődését kifejező Master-egyenlet:

$$\begin{aligned}\frac{\partial P(s_1, s_2, t)}{\partial t} &= -\left[w_1(s_1, s_2) + w_2(s_1, s_2)\right] P(s_1, s_2, t) + \\ &+ w_1(-s_1, s_2) P(-s_1, s_2, t) + w_2(s_1, -s_2) P(s_1, -s_2, t)\end{aligned} \tag{11}$$

Feltételezve, hogy a rendszer az egyensúly felé tart, a Master-egyenlet egy stacionárius megoldása ismert módon felírható a részletes egyensúly elve alapján:

$$w_1(s_1, s_2) P^{(e)}(s_1, s_2) = w_1(-s_1, s_2) P^{(e)}(-s_1, s_2) \tag{12}$$

Ezzel megkaptuk az w_1 átmenetek arányát:

$$\frac{w_1(s_1, s_2)}{w_1(-s_1, s_2)} = \frac{P^{(e)}(-s_1, s_2)}{P^{(e)}(s_1, s_2)} = \frac{e^{-Ks_1s_2}}{e^{Ks_1s_2}} = e^{-2Ks_1s_2} \tag{13}$$

Analóg módon a w_2-re is felírhatjuk a fentieket:

$$w_2(s_1, s_2) P^{(e)}(s_1, s_2) = w_2(s_1, -s_2) P^{(e)}(s_1, -s_2) \tag{14}$$

Ebből pedig ugyanúgy megkaphatjuk a w_2 ráták arányát:

$$\frac{w_2(s_1, s_2)}{w_2(s_1, -s_2)} = \frac{P^{(e)}(s_1, -s_2)}{P^{(e)}(s_1, s_2)} = \frac{e^{-Ks_1s_2}}{e^{Ks_1s_2}} = e^{-2Ks_1s_2} \tag{15}$$

Ezen fentiek felhasználásával beláthatjuk, hogy az alábbi spin-kicserélődési ráták kielégítik a (13) és (15) egyenleteket:

$$w_1(\uparrow\uparrow) = w_2(\uparrow\uparrow) = w_1(\downarrow\downarrow) = w_2(\downarrow\downarrow) = e^{-2K} \tag{16}$$

$$w_1(\uparrow\downarrow) = w_2(\uparrow\downarrow) = w_1(\downarrow\uparrow) = w_2(\downarrow\uparrow) = 1 \tag{17}$$

Ezeknek a felhasználásával a Master-egyenlet az egyes esetekre felírható a következő formában:

$$\frac{\partial P(\uparrow\uparrow, t)}{\partial t} = -2e^{-2K} P(\uparrow\uparrow, t) + 1 \cdot P(\downarrow\uparrow, t) + 1 \cdot P(\uparrow\downarrow, t) + 0 \cdot P(\downarrow\downarrow, t) \tag{18}$$

$$\frac{\partial P(\downarrow\uparrow, t)}{\partial t} = e^{-2K} \cdot P(\uparrow\uparrow, t) - 2 \cdot P(\downarrow\uparrow, t) + 0 \cdot P(\uparrow\downarrow, t) + e^{-2K} \cdot P(\downarrow\downarrow, t) \tag{19}$$

$$\frac{\partial P(\uparrow\downarrow, t)}{\partial t} = e^{-2K} \cdot P(\uparrow\uparrow, t) + 0 \cdot P(\downarrow\uparrow, t) - 2 \cdot P(\uparrow\downarrow, t) + e^{-2K} \cdot P(\downarrow\downarrow, t) \tag{20}$$

$$\frac{\partial P(\downarrow\downarrow, t)}{\partial t} = 0 \cdot P(\uparrow\uparrow, t) + 1 \cdot P(\downarrow\uparrow, t) + 1 \cdot P(\uparrow\downarrow, t) - 2e^{-2K} \cdot P(\downarrow\downarrow, t) \tag{21}$$

Ezeket a fenti egyenleteket egy 4×4 mátrix és egy 4 elemű vektor szorzataként is megfogalamzhatjuk. Vezessük be az alábbi vektort (használva az alábbi papírban található jelölést: [7]):

$$\vec{P}(t) = \begin{pmatrix} P(\uparrow\uparrow, t) \\ P(\downarrow\uparrow, t) \\ P(\uparrow\downarrow, t) \\ P(\downarrow\downarrow, t) \end{pmatrix} \tag{22}$$

Valamint az alábbi mátrixot:

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} -2e^{-2K} & 1 & 1 & 0 \\ e^{-2K} & -2 & 0 & e^{-2K} \\ e^{-2K} & 0 & -2 & e^{-2K} \\ 0 & 1 & 0 & -2e^{-2K} \end{pmatrix} \tag{23}$$

Így a Master-egyenlet a következő formára redukálódik:

$$\partial_t \vec{P}(t) = \mathcal{A}\vec{P}(t) \tag{24}$$

Az egyensúlyi állapotot leíró (8) stacionárius eset pedig a következő alakot ölti:

$$\vec{P}^{(e)} = \vec{P}^{(1)} = \frac{1}{2 \cdot \left(e^{K} + e^{-K}\right)} \begin{pmatrix} e^{K} \\ e^{-K} \\ e^{-K} \\ e^{K} \end{pmatrix} \tag{25}$$

Ez az $\mathcal{A}$ mátrix, $\lambda_1 = 0$ sajátértékhez tartozó sajátvektora. A maradék sajátértéket és sajátvektort kiszámítva az órán látottak alapján már információval tudunk szolgálni az egyes állapotok időfejlődéséről. A sajátvektorok és sajátértékek a követekezők:

$$\lambda_2 = -2 \cdot \left(e^{-2K} + 1\right) \qquad \vec{P}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{26}$$

$$\lambda_3 = -2 \cdot e^{-2K} \qquad \vec{P}^{(3)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{27}$$

$$\lambda_4 = -2 \qquad \vec{P}^{(4)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{28}$$

Az egyes állapotok időfejlődése a fentiek segítségével megadható a következő módon:

$$\vec{P}^{(i)}\left(t\right) = a_i \cdot e^{\lambda_i t} \vec{P}^{(i)} \tag{29}$$

Ennek segítségével felírhatjuk az általános megoldás időfejlődését:

$$\vec{P}\left(t\right) = \vec{P}^{(e)} + \sum_{i\,=\,2}^{4} a_i \cdot e^{\lambda_i t} \vec{P}^{(i)} \tag{30}$$

Melyekben az a_i együtthatók meghatározhatóak az alábbi kezdőfeltételből:

$$\vec{P}\left(0\right) = \vec{P}^{(e)} + \sum_{i\,=\,2}^{4} a_i \vec{P}^{i} \tag{31}$$

A feladat első részében meghatározandó a $P\left(\downarrow\downarrow, t\right)$, ha a kezdeti állatot $P\left(\uparrow\downarrow, 0\right)$. Vektoros formában a kezdeti- és végállapot a következőképp írható fel:

$$\vec{P}\left(t = 0\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \vec{P}\left(t\right) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{32}$$

A (31) egyenletben leírtak alapján ki tudjuk fejezni az egyes komponenseket, felhasználva a (25) - (28) mennyiségeket:

$$0 = \frac{e^{K}}{z} a_1 + 1 \cdot a_2 + 1 \cdot a_3 + 0 \cdot a_4 = \frac{e^{K}}{z} a_1 + 1 \cdot a_2 + 1 \cdot a_3 \tag{33}$$

$$0 = \frac{e^{-K}}{z} a_1 - 1 \cdot a_2 + 0 \cdot a_3 + 1 \cdot a_4 = \frac{e^{-K}}{z} a_1 - 1 \cdot a_2 + 1 \cdot a_4 \tag{34}$$

$$1 = \frac{e^{-K}}{z} a_1 - 1 \cdot a_2 + 0 \cdot a_3 - 1 \cdot a_4 = \frac{e^{-K}}{z} a_1 - 1 \cdot a_2 - 1 \cdot a_4 \tag{35}$$

$$0 = \frac{e^{K}}{z} a_1 + 1 \cdot a_2 - 1 \cdot a_3 + 0 \cdot a_4 = \frac{e^{K}}{z} a_1 + 1 \cdot a_2 - 1 \cdot a_3 \tag{36}$$

Kivonva (33)-ból (36)-ot, kapjuk a következőt:

$$0 - 0 = \frac{e^{K}}{z} a_1 - \frac{e^{K}}{z} a_1 + a_2 - a_2 + a_3 - \left(-a_3\right) \quad \rightarrow \quad \boxed{0 = \cancel{2} \cdot a_3} \tag{37}$$

Euztán szintén kivonva (34)-ből (35)-öt, kapjuk a következőt:

$$0 - 1 = \frac{e^{-K}}{z} a_1 - \frac{e^{-K}}{z} a_1 - a_2 - \left(-a_2\right) + a_4 - \left(-a_4\right) \quad \rightarrow \quad \boxed{-\frac{1}{2} = a_4} \tag{38}$$

Összeadva a (33) és (34) egyenleteket, felhasználva a fent kapott a_2 értékét, megkaphatjuk a_1-et:

$$0+0=\frac{e^K}{z}a_1+\frac{e^{-K}}{z}a_1+a_2-a_2+0-\frac{1}{2}\quad\rightarrow\quad\frac{z}{2\left(e^K+e^{-K}\right)}=a_1 \tag{39}$$

A (7) alapján azonban z értékét behelyettesítve:

$$\frac{z}{2\left(e^K+e^{-K}\right)}=\frac{2\left(e^K+e^{-K}\right)}{2\left(e^K+e^{-K}\right)}=\boxed{1=a_1} \tag{40}$$

Míg az a_2 értéke egy tetszőleges, a_2-t tartalmazó egyenlet alapján meghatározható, legyen ez pl. a (36)-os:

$$0=\frac{e^K}{z}\cdot 1+1\cdot a_2-1\cdot 0\quad\rightarrow\quad-\frac{e^K}{z}=\boxed{-\frac{e^K}{2\left(e^K+e^{-K}\right)}=a_2} \tag{41}$$

Ezek segítségével a (30) és (32) alapján a $P\left(\downarrow\downarrow,t\right)$ a következő lesz:

$$\begin{aligned}
P\left(\downarrow\downarrow,t\right)&=\frac{e^K}{z}a_1\cdot e^{\lambda_1 t}+1\cdot a_2\cdot e^{\lambda_2 t}-1\cdot a_3\cdot e^{\lambda_3 t}=\\
&=\frac{e^K}{2\left(e^K+e^{-K}\right)}\cdot e^{0\cdot t}-\frac{e^K}{2\left(e^K+e^{-K}\right)}\cdot e^{-2\cdot\left(e^{-2K}+1\right)t}=\\
&=\boxed{\left(1-e^{-2\cdot\left(e^{-2K}+1\right)t}\right)\cdot\frac{e^K}{2\left(e^K+e^{-K}\right)}}
\end{aligned} \tag{42}$$

2.2. A mágnesezettség időfejlődése

A mágnesezettség időfüggése leírható az egyes állapotokra történő összegzéssel, magának a mágnesezettség $m\left(t\right)=\left\langle s_1+s_2\right\rangle$ definíciója segítségével:

$$m\left(t\right)=\sum_{s_1\ =\ \pm1}\sum_{s_2\ =\ \pm1}\left(s_1+s_2\right)P(s_1,s_2,t) \tag{43}$$

A feladat szövegében szerepel, hogy $\vec{P}$ a következő alakú kezdetben:

$$\vec{P}\left(t=0\right)=\begin{pmatrix}1/4\\1/4\\1/4\\1/4\end{pmatrix} \tag{44}$$

A (31) egyenletben leírtak alapján ki tudjuk fejezni az egyes komponenseket, felhasználva a (25) - (28) mennyiségeket:

$$\frac{1}{4} = \frac{e^K}{z}a_1 + 1 \cdot a_2 + 1 \cdot a_3 + 0 \cdot a_4 = \frac{e^K}{z}a_1 + 1 \cdot a_2 + 1 \cdot a_3 \tag{45}$$

$$\frac{1}{4} = \frac{e^{-K}}{z}a_1 - 1 \cdot a_2 + 0 \cdot a_3 + 1 \cdot a_4 = \frac{e^{-K}}{z}a_1 - 1 \cdot a_2 + 1 \cdot a_4 \tag{46}$$

$$\frac{1}{4} = \frac{e^{-K}}{z}a_1 - 1 \cdot a_2 + 0 \cdot a_3 - 1 \cdot a_4 = \frac{e^{-K}}{z}a_1 - 1 \cdot a_2 - 1 \cdot a_4 \tag{47}$$

$$\frac{1}{4} = \frac{e^K}{z}a_1 + 1 \cdot a_2 - 1 \cdot a_3 + 0 \cdot a_4 = \frac{e^K}{z}a_1 + 1 \cdot a_2 - 1 \cdot a_3 \tag{48}$$

Az előző feladtban látotakhoz hasonló módokon járhatunk el. Vonjuk ki a (48)-ból (45)-öt. Ekkor megkapjuk a_3 értékét:

$$\frac{1}{4} - \frac{1}{4} = \frac{e^K}{z}a_1 + 1 \cdot a_2 - 1 \cdot a_3 - \frac{e^K}{Z}a_1 - 1 \cdot a_2 - 1 \cdot a_3 \quad \to \quad \boxed{0 = a_3} \tag{49}$$

Ezután (47)-ből vonjuk ki (46)-ot:

$$\frac{1}{4} - \frac{1}{4} = \frac{e^{-K}}{z}a_1 - 1 \cdot a_2 - 1 \cdot a_4 - \frac{e^{-K}}{z}a_1 + 1 \cdot a_2 - 1 \cdot a_4 \quad \to \quad \boxed{0 = a_4} \tag{50}$$

Most adjuk össze (45)-öt és (46)-ot:

$$\frac{1}{4} + \frac{1}{4} = \frac{e^K}{z}a_1 + 1 \cdot a_2 + 1 \cdot a_3 + \frac{e^{-K}}{z}a_1 - 1 \cdot a_2 + 1 \cdot a_4 = \frac{e^K}{z}a_1 + \frac{e^{-K}}{Z}a_1 \tag{51}$$

Így a_1 értékére a következő kifejezést kapjuk:

$$\frac{1}{2} = \left(\frac{e^K}{z} + \frac{e^{-K}}{Z}\right)a_1 \quad \to \quad \frac{z}{2 \cdot \left(e^K + e^{-K}\right)} = \frac{2 \cdot \left(e^K + e^{-K}\right)}{2 \cdot \left(e^K + e^{-K}\right)} = \boxed{1 = a_1} \tag{52}$$

Végül pedig a_2 értékét határozzuk meg pl. a (45) egyeneltből:

$$\frac{1}{4} = \frac{e^K}{z}a_1 + 1 \cdot a_2 + 1 \cdot a_3 = \frac{e^K}{z} + a_2 \quad \to \quad \boxed{\frac{1}{4} - \frac{e^K}{z} = a_2} \tag{53}$$

Ezen kapott értékek felhasználásával megkonstruálhatjuk a $\vec{P}$ vektort:

$$\vec{P} = \begin{pmatrix} \frac{e^K}{z} \cdot e^{\lambda_1 t} + \left(\frac{1}{4} - \frac{e^K}{z}\right) \cdot e^{\lambda_2 t} \\ \frac{e^{-K}}{z} \cdot e^{\lambda_1 t} - \left(\frac{1}{4} + \frac{e^K}{z}\right) \cdot e^{\lambda_2 t} \\ \frac{e^{-K}}{z} \cdot e^{\lambda_1 t} - \left(\frac{1}{4} + \frac{e^K}{z}\right) \cdot e^{\lambda_2 t} \\ \frac{e^K}{z} \cdot e^{\lambda_1 t} + \left(\frac{1}{4} - \frac{e^K}{z}\right) \cdot e^{\lambda_2 t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{e^K}{z} + \left(\frac{1}{4} - \frac{e^K}{z}\right) \cdot e^{-2 \cdot \left(e^{-2K} + 1\right)t} \\ \frac{e^{-K}}{z} - \left(\frac{1}{4} + \frac{e^K}{z}\right) \cdot e^{-2 \cdot \left(e^{-2K} + 1\right)t} \\ \frac{e^{-K}}{z} - \left(\frac{1}{4} + \frac{e^K}{z}\right) \cdot e^{-2 \cdot \left(e^{-2K} + 1\right)t} \\ \frac{e^K}{z} + \left(\frac{1}{4} - \frac{e^K}{z}\right) \cdot e^{-2 \cdot \left(e^{-2K} + 1\right)t} \end{pmatrix} \tag{54}$$

Az (43)-as összefüggés alapján most már felírhatjuk a keresett $m\left(t\right)$ mágnesezettséget:

$$m\left(t\right) = \sum_{s_1 \ = \ \pm 1} \sum_{s_2 \ = \ \pm 1} \left(s_1 + s_2\right) P(s_1, s_2, t) =$$

$$= \left(1+1\right) \cdot \left(\frac{e^K}{z} + \left(\frac{1}{4} - \frac{e^K}{z} \right) \cdot e^{-2\cdot\left(e^{-2K}+1\right)t} \right) + \overbrace{\left(1-1\right) \cdot \vec{P}^{(2)}}^{=\ 0} + \overbrace{\left(-1+1\right) \cdot \vec{P}^{(3)}}^{=\ 0} +$$
$$+ \left(-1+-1\right) \cdot \left(\frac{e^K}{z} + \left(\frac{1}{4} - \frac{e^K}{z} \right) \cdot e^{-2\cdot\left(e^{-2K}+1\right)t} \right) \tag{55}$$

Ebben ahogy jelöltem is, csak a $\vec{P}^1 = P\left(\uparrow\uparrow\right)$ és $\vec{P}^4 = P\left(\downarrow\downarrow\right)$ spinállapotok adnak járulékot. Tovább oldva az egyenletet:

$$m\left(t\right) = 2 \cdot \left(\frac{e^K}{z} + \left(\frac{1}{4} - \frac{e^K}{z} \right) \cdot e^{-2\cdot\left(e^{-2K}+1\right)t} \right) - 2 \cdot \left(\frac{e^K}{z} + \left(\frac{1}{4} - \frac{e^K}{z} \right) \cdot e^{-2\cdot\left(e^{-2K}+1\right)t} \right) =$$
$$= 2 \cdot \left[\underbrace{\left(\frac{e^K}{z} + \left(\frac{1}{4} - \frac{e^K}{z} \right) \cdot e^{-2\cdot\left(e^{-2K}+1\right)t} \right) - \left(\frac{e^K}{z} + \left(\frac{1}{4} - \frac{e^K}{z} \right) \cdot e^{-2\cdot\left(e^{-2K}+1\right)t} \right)}_{=\ 0} \right] \tag{56}$$

Tehát általánosan feltételezhetjük, hogy az azonos valószínűségű konfigurációkkal induló rendszerben:

$$\boxed{m\left(t\right) = 2 \cdot \left[P\left(\uparrow\uparrow, t\right) - P\left(\downarrow\downarrow, t\right)\right] = 0} \tag{57}$$

Ha ez nem csak elszámolás, akkor ennek egy lehetséges magyarázatát könnyű megadni. A $(\uparrow\downarrow)$ és $(\downarrow\uparrow)$ spinállapotok random mozgás hatására mindig a kisebb energiájú $(\uparrow\uparrow)$ és $(\downarrow\downarrow)$ állapotok felé mozognak. Mivel a rendszer teljesen szimmetrikus, így mind a $(\uparrow\uparrow)$ és $(\downarrow\downarrow)$ állapotok számának növekedési rátája megegyezik. Mivel a mágnesezettséget ezen kettő utóbbi határozza meg a (57) összefüggésnek megfelelően, így érthető, hogy ez a mennyiség 0 lesz, ugyanis állandóan azonos számú $(\uparrow\uparrow)$ és $(\downarrow\downarrow)$ lesz a rendszerben.

3. FELADAT

K: *Meredek hegyoldalban függőlegesen l távolságra vannak a kapaszkodók. A hegymászó w rátával lép felfelé, s w_0 annak a rátája, hogy lecsúszik egy szintet, s onnan folytatja a mászást. Feladatok:*

1. *Írjuk fel az egyenletet, amely meghatározza, hogy a hegymászó milyen P_n valószínűséggel van nl magasságban!*
2. *Használjuk a generátorfüggvény formalizmust a stacionárius eloszlás kiszámítására!*
3. *Határozzuk meg, hogy átlagosan milyen magasra jut a hegymászó!*
4. *Van itt hasonlóság a sorbanállás problémájával?*

3.1. A Master-egyenlet

A rendszer időbeli fejlődését leíró Master-egyenletet felírhatjuk az órán is tanult módon, w és w_0 rátákkal jelölve a fel- és lefelé haladás rátáját:

$$\frac{dP_n(t)}{dt} = -(w + w_0) P_n(t) + wP_{n-1}(t) + w_0 P_{n+1}(t), \qquad \text{ahol } t = nl \tag{58}$$

Érdekes és fontos megfigyelni, hogy az egyenlet alakja megegyezik a sorbanállásnál látott Master-egyenlettel, ahol w_{be} és w_{ki} szimbolizálta a bemenő és kimenő rátákat. Itt a diszkrét kapaszkódó szinteket értelmezhetjük egy sorbanállásnál is látott kiszolgáló rendszerben tartózkodó igények számával. Így a feljebb lépés w rátája analóg lesz a kiszolgálási rendszerbe érkező igények w_{be}, valamint a lefelé csúszás w_0 rátája a rendszerből távozó igények w_{ki} rátájával. Hasonlóan az óraihoz, vezessük be a $q = \frac{w}{w_0}$ mennyiséget:

$$\frac{1}{w_0}\frac{dP_n(t)}{dt} = -(q + 1) P_n(t) + qP_{n-1}(t) + P_{n+1}(t) \tag{59}$$

Ebben most $q < 1$, hiszen ez a feltétele annak, hogy a rendszer ne szálljon el a végtelenben és kialakulhasson valamilyen egyensúlyi helyzet is.

3.2. Generátorfüggvény formalizmus

Vezessük be a fenti $P_n(t)$ eloszlásfüggvény Laplace-transzformáltját:

$$G(s,t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-sn} P_n(t) \tag{60}$$

Melynek keressük stacionárius pontjait, amik az alábbi formában fogalmazhatóak meg:

$$\frac{\partial G(s,t)}{\partial t} = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-sn} \frac{d}{dt} P_n(t) \quad \rightarrow \quad \frac{\partial G^{(\mathrm{st.})}(s,t)}{\partial t} \overset{!}{=} 0 \tag{61}$$

Az órán megoldottuk az (58)-as egyenletet, az egyszerűség kedvéért $w_0 = 1$ értéket feltételezve, és megtaláltuk a $G^{(st.)}$ függvényt:

$$G^{(st.)} = \frac{P_0(t)}{1 - e^{-s} q} \tag{62}$$

Ahol $P_0(t)$ értéke megadható:

$$G^{(st.)}(s = 0, t) = \frac{P_0(t)}{1 - q} = 1 \quad \rightarrow \quad P_0(t) = 1 - q \tag{63}$$

Tehát P_0 kostans. A generátorfüggvények ismert és tanult formalizmusa lehetővé teszi számunkra, hogy megadjuk a keresett $\langle n \rangle$ mennyiséget, ami a mászó által elért átlagos magasságot jelöli. Ez a (62) generátorfüggvény első momentuma:

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= - \left. \frac{\partial G^{(st.)}(s,t)}{\partial s} \right|_{s=0} = - \frac{d}{ds} \frac{1-q}{1 - e^{-s} q} = - (1-q) \left. \frac{e^{-s} q}{(1 - e^{-s} q)^2} \right|_{s=0} = \\ &= \frac{(1-q) q}{(1-q)^2} = \frac{q}{1-q} \end{aligned} \tag{64}$$

Mivel $q = \frac{w}{w_0}$, és $w_0 = 1$, ezért ez a következő alakba írható:

$$\boxed{\langle n \rangle = \frac{w}{1-w}} \tag{65}$$

Tehát ilyen magasra jut a hegymászó átlagosan, mászás közben. Pl. $w = 0.9$ ráta esetén:

$$\langle n \rangle = \frac{0.9}{1 - 0.9} = \frac{0.9}{0.1} = 9 \tag{66}$$

Tehát $9 \cdot l$ magasságba.

Felhasznált irodalom

[1] *Onkalo spent nuclear fuel repository — Wikipedia, The Free Encyclopedia.* [Online; accessed March 18, 2019]. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Onkalo_spent_nuclear_fuel_repository.

[2] Igor Medveď and Robert Černý. "Varying coefficients of diffusion of $^{133}Ba^{2+}$ and $^{137}Cs^{+}$ in granite". In: *AIP Conference Proceedings*. Vol. 1978. 1. AIP Publishing. 2018, p. 080007.

[3] Kazuya Idemitsu et al. "Diffusivity of Uranium(VI) in Water-Saturated Inada Granite." In: *MRS Proceedings* 257 (Jan. 1991). DOI: 10.1557/PROC-257-625.

[4] Tetsuji Yamaguchi et al. "Effective diffusivity of the uranyl ion in a granite from Inada, Ibaraki, Japan". In: *Journal of contaminant hydrology* 26.1-4 (1997), pp. 109–117.

[5] A. Bondi. "van der Waals volumes and radii". In: *The Journal of physical chemistry* 68.3 (1964), pp. 441–451.

[6] Manjeera Mantina et al. "Consistent van der Waals radii for the whole main group". In: *The Journal of Physical Chemistry A* 113.19 (2009), pp. 5806–5812.

[7] Zoltán Rácz. "Interacting spins in a heat bath". In: (2016), p. 2. URL: http://cgl.elte.hu/~racz/2-Ising-spins.pdf.