

## 1. FELADAT

K: Az atomreaktorokban keletkező, erősen sugárzó hulladékok tárolására a geológiailag stabil, gránit alapú ősmasszívumokat tekintik alkalmasnak. Finnországban most épül egy ilyen, kb. 500 m mélybe menő barlangrendszer[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 radioaktív magok csak a grániton keresztül történő diffúzió keresztül tudnak a felszínre jutni. Keressük ki gránit diffúziós együtthatóját nagyobb rendszámú atomokra és számítsuk ki, hogy mennyi idő elteltével fogunk radioaktivitást 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 építünk. Ismert, hogy a diffúzió definíció szerint az alábbi összefüggéssel írható le:

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

Ahol  $D$  a diffúziós együttható,  $\Delta x$  a megtett úthossz,  $\tau$  pedig a diffundálás alatt megtett idő, míg a részecske  $\Delta x$  távolságra eljutott. Ebből kifejezhető  $\tau$  értéke  $D$  és  $\Delta x$  ismeretében:

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

### 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 hulladékokban 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

$$D \approx [5 \cdot 10^{-15}, 5 \cdot 10^{-14}] \frac{\text{m}^2}{\text{s}} \quad (3)$$

nagyságrendbe esik[3][4]. Szintén az előzőek alapján az  $^{233}\text{U}$  izotóp, gránitban történő diffúziójának együtthatója  $D \approx 5 \cdot 10^{-15} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$ .

Egyéb mérésekből az egyes sugárzó atomok Van der Waals sugarai ismertek, így pl. az urán esetén ez  $r_w = 186 \text{ pm}$ , így átmérőjének vehetjük az  $a = 372 \text{ pm}$  értéket[5]. A  $^{209}\text{Po}$  esetén  $r_w = 197 \text{ pm}$ , míg a  $^{222}\text{Ra}$  Van der Waals sugara pedig  $r_w = 283 \text{ pm}$ [6], tehát viszonylag széles mérettartományt fognak át, hiába közel azonos a rendszámuk. Egy sugárzó hulladékgyűjtőben nyilvánvalóan többféle különböző sugárzó izotóp is található, melyek diffúziójához szükséges időtartamot mind azonos módon számíthatjuk. Itt most csak a már említett  $^{233}\text{U}$  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:

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

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 diffúzió keresztül juthatnak át a gránitrétegen. A részecskék bomlaskor nagy kinetikus energiát szerezhetnek, és így jóval megnövelve a szabad úthosszukat, jóval rövidebb idő után már kijuthatnak a grániton 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:

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

Ahol  $-\mathcal{J} s_1 s_2 \equiv \mathcal{H} = E$  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:

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

Így kifejezhetjük  $z$ -t:

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

Ebből végül az adott állapot valószínűsége előáll az alábbi módon:

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

### 3. FELADAT

K: Meredek hegyoldalon 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  $n$  magasságban!
2. Használjuk a generátorfüggvény formalizmust a stacionárius eloszlás kiszámítására!
3. Határozzuk meg, hogy átlagosan milyen magasra jut a hegymászó!
4. Van itt a hasonlóság a sorbanállás problémájával?

### 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](https://en.wikipedia.org/wiki/Onkalo_spent_nuclear_fuel_repository).
- [2] Igor Medved' and Robert Černý. "Varying coefficients of diffusion of  $^{133}\text{Ba}^{2+}$  and  $^{137}\text{Cs}^{+}$  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](https://doi.org/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.