

2. Diszkrét állapot térben lezajló folyamatok

2.1 A master egyenlet szemléletes származtatása

Tekintsünk egy rendszert, melynek vizsgált állapotai diszkrét változókból alkotott vektorokkal (n, m, \dots) indexelhetők. Adott esetben az index lehet például a rendszer kvantumszámainak összessége, de az alkalmazások nagy részében a teljes makroszkópikus rendszer helyett csak néhány lessan változó szabadsági fokot vizsgálunk /a többit háttérnek tekintjük/, s ilyenkor az állapot megadása is egyszerűbb /közvetlenül történő bolyongás esetén például három koordináta/. Tegyük fel, hogy a rendszer állapota — a háttérrel, vagy környezetével való kölcsönhatás következtében — bármelyik pillanatban megváltozhat, s hogy az $n \rightarrow n'$ ($n \neq n'$) átmenet Δt intervallum alatti bekövetkezésének valószínűsége

$$W_{n',n} \Delta t + o(\Delta t).$$

A továbbiakban csak Markov-típusú folyamatokkal foglalkozunk. Ilyenkor a $W_{n',n}$ átmeneti valószínűség nem függ attól, milyen állapotban volt korábban a rendszer, s így jelölésünk valóban következetes. Ha feltesszük, hogy a folyamat invariáns az időbeli eltolásra nézve, akkor explicit időfüggés sem léphet fel $W_{n',n}$ -ben /homogén folyamat/.

Jelölje $P_{n,m}(t)$ annak a valószínűségét, hogy a rendszer t idő alatt az n állapotba kerül, feltéve, hogy az m álla-

pontból indult. Az az esemény, hogy a rendszer a $t+\Delta t$ időpontban az n állapotban legyen, több egymást kizáró módon valósulhat meg: előfordulhat, hogy t idő eltelte után valamelyik másik (l) állapotban van, s utána Δt alatt beszóródik n -be, ill. előfordulhat, hogy már t idő alatt eléri az n állapotot, s azután nem szóródik ki onnét:

$$P_{n,m}(t+\Delta t) = \sum_{l \neq n} w_{n,l} P_{l,m}(t) \Delta t + (1 - \sum_{l \neq n} w_{l,n} \Delta t) P_{n,m}(t) + o(\Delta t).$$

Átrendezés ill. a $\Delta t \rightarrow 0$ határérték elvégzése után az un.

direkt master egyenletet kapjuk

$$\dot{P}_{n,m}(t) = \sum_{l \neq n} w_{n,l} P_{l,m}(t) - P_{n,m}(t) \sum_{l \neq n} w_{l,n}, \quad /2.1/$$

amely azt fejezi ki, hogy a valószínűség időegységre eső megváltozása a beszórási ill. kiszórási valószínűségek különbsége.

$P_{n,m}(t)$ -re egy másik egyenletet is lezármaztathatunk. Tekintsük ugyanis azt a lehetőséget, hogy a rendszer az első

Δt intervallumban eljut valamelyik l állapotba, vagy helyben marad, s az ezután következő t időtartam alatt kerül n -be:

$$P_{n,m}(\Delta t + t) = \sum_{l \neq n} P_{n,l}(t) w_{l,n} \Delta t + P_{n,m}(t) (1 - \sum_{l \neq n} w_{l,n} \Delta t) + o(\Delta t).$$

Ebből az un. fordított master egyenlet adódik

$$\dot{P}_{n,m}(t) = \sum_{l \neq n} w_{l,n} P_{n,l}(t) - P_{n,m}(t) \sum_{l \neq n} w_{l,n}. \quad /2.2/$$

Mindkét master egyenlet a

$$P_{n,m}(0) = \delta_{n,m} \quad /2.3/$$

kezdeti feltétel mellett vizsgálandó, hiszen zérus idő alatt nem történhet átmenet. Látni fogjuk, hogy a /2.1/ és /2.2/ egyenletek nem túl erős feltételek teljesülése esetén ekvivalensek, így elég csak az egyikkel foglalkoznunk. Néhány ki-

vételtől eltekintve a direkt master egyenletet használjuk majd.

A $P_{n,m}(t)$ valószínűségeloszlás ismeretében az átmeneti valószínűségek könnyen megkonstruálhatók, hiszen

$$\dot{P}_{n,m}(t=0) = w_{n,m} \quad , \quad \text{ha } m \neq n \quad .$$

A master egyenlet jelentősége éppen abban áll, hogy az átmeneti valószínűségeket mikroszkopikus számolások, vagy heurisztikus érvek alapján sokszor előre meg tudjuk adni, s ezen deriváltak ismeretében az egyenlet már meghatározza magát a függvényt.

Abban az esetben, ha a kezdeti állapot nem egyértelmű, hanem egy P_m eloszlás jellemzi ($\sum_m P_m = 1$), akkor annak a valószínűsége, hogy a rendszer t idő múlva az n állapotban legyen

$$P_n(t) = \sum_m P_{n,m}(t) P_m \quad , \quad /2.4/$$

ami azt tükrözi, hogy n -be több kezdeti állapotból is eljuthatunk. Könnyen látható, hogy a $P_n(t)$ függvény is kielégíti a /2.1/ master egyenletet:

$$\dot{P}_n(t) = \sum_{l \neq n} w_{n,l} P_l(t) - P_n(t) \sum_{l \neq n} w_{l,n} \quad . \quad /2.5/$$

A $P_m = \delta_{m,1}$ kezdeti eloszlásnak megfelelő megoldás természetesen $P_{n,m}(t)$. A fordított master egyenletnek $P_n(t)$ nem megoldása.

Mivel a folyamat Markov-típusú, P_m és $P_{n,m}(t)$ ismerete elegendő a különböző többváltozós eloszlások meghatározásához is (l. /1.26 /).

1. feledat A $t=0$ pillanatban kozmikus sugárzásból

származó nagy energiájú nukleon éri légkörünket. Ez a részecske a légkör atomjaival ütközve újabb nukleonokat hoz létre, s azok is hasonlóképpen sokszorozódnak. Tegyük föl, hogy annak a valószínűsége, hogy egy nukleon Δt idő alatt létrehoz egy másodlagos nukleont $\lambda \Delta t + \sigma(\Delta t)$, s ez független a nukleon fajtajától és energiájától, valamint a korábbi eseményektől. Irjuk föl a folyamat master egyenletét!

2. feladat Egy üzemben N számú egyforma munkagép áll rendelkezésre. Ezen eszközök igénybevétele véletlenszerűen történik. Ha az egyik gép áll, akkor időegység alatt Λ valószínűséggel kerül használatba függetlenül attól, hogy mennyi ideje áll már. Ha egy gép működik, akkor időegység alatt μ valószínűséggel kapcsolják ki, a működés idejétől függetlenül. Kezdetben m számú gépet használtak. Irjuk föl azt az egyenletet, amely meghatározza annak a valószínűségét, hogy t idő múlva n gép működik.

2.2 A master egyenlet megoldásainak tulajdonságai

Röviden összefoglaljuk a /2.5/ master egyenlet megoldásainak legfontosabb általános tulajdonságait. A bizonyítások tisztán matematikai jellegűek, ezért azokkal nem foglalkozunk.

- 1./ Mindig létezik legalább egy stacionárius /időtől független/megoldás.
- 2./ A stacionárius megoldás egyértelmű, ha teljesül a következő feltétel: Rendeljük hozzá, a d -dimenziós tér / d az n vektor komponenseinek a száma/ különböző pontjaihoz a

rendszer egyes állapotait! Minden pontpárt kössünk össze egy vonallal, amennyiben az azoknak megfelelő két állapot között lehetséges átmenet /legalább az egyik irányban/. Ha ezen gráf bármely két pontja között találunk legalább egy folytonos vonalat /a gráf összefüggő/, akkor a stacionárius megoldás egyértelmű. Olyan rendszerben tehát, amelyben bármelyik állapotból eljuthatunk skármelyik másikba a stacionárius megoldás egyértelmű.

- 3./ Ha a P_n^* stacionárius megoldás egyértelmű, akkor tetszőleges kezdeti eloszlás esetén az un. határeloszlás, vagyis a $P_n(t)$ megoldás $t \rightarrow \infty$ határesetre, a stacionárius megoldással egyezik meg:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P_n(t) = P_n^* \quad /2.6/$$

/ergodikus tulajdonság/. Speciálisan $P_{n,m}(\infty) = P_n^*$, m -től függetlenül.

- 4./ Ha a 2. állítás feltétele teljesül, akkor adott P_m kezdeti eloszláshoz olyan egyértelmű időfüggő megoldás, $P_n(t)$ tartozik, amelyben minden $t > 0$ -ra

$$0 \leq P_n(t) \leq 1 \quad \text{és} \quad \sum_n P_n(t) = 1, \quad /2.7/$$

tehát a $P_n(t)$ függvény valóban valószínűség-eloszlásként értelmezhető az egész folyamat során. A /2.7/ összefüggések természetesen a $P_{n,m}(t)$ feltételes valószínűségekre is fennállnak, hiszen ez a $P_m = \delta_{m,m}$ kezdeti eloszláshoz tartozik. Ha a megoldás egyértelmű, a $P_{n,m}(t)$ függvény mind a direkt, mind a fordított egyenletnek megoldása.

A fenti állítások szigorúan véve csak véges számú állapo-

tot tartalmazó állapottérben lezajló folyamatokra érvényesek, de hasonló kijelentések tehetők végtelen állapottérben is, amennyiben további feltételek teljesülését is megköveteljük /például azt, hogy az egymástól távol eső állapotok között kicsi legyen az átmenet valószínűsége, lásd 9. feladat/.

2.3 Stacionárius megoldás, a részletes egyensúly

A P_n^* stacionárius megoldás egyik lehetséges meghatározása a /2.5/ egyenletből adódik, hiszen ilyenkor $\dot{P}_n(t) = 0$. Természetesen ugyanez az eredmény kapható az időfüggő megoldás aszimptotikus viselkedéseként is /2.6/, amennyiben a megoldás egyértelmű.

Fontos speciális eset, ha az egyensúlyi eloszlás eleget tesz az ún. részletes egyensúly elvének. Ez azt jelenti, hogy bármelyik két állapot /pl. m és n / között ugyanannyi átmenet történik időegység alatt az egyik irányban, mint a fordított irányban. Matematikai megfogalmazásban:

$$w_{n,m} P_n^* = w_{m,n} P_m^* \quad \text{minden } n, m \text{-re.} \quad /2.8/$$

Megmutatjuk, hogy amennyiben egy rendszer stacionárius megoldása eleget tesz a részletes egyensúly elvének, továbbá teljesülnek azok a 2.2-ben megadott feltételek, melyek a megoldás egyértelműségét biztosítják, akkor a P_n^* eloszlás egyszerűen megadható.

Válasszunk egy tetszőleges n_0 állapotot. Ezután keressünk egy átmenet-láncolatot n_0 -ból n -be. Feltételeink szerint legalább egy ilyen láncolat létezik. Tegyük föl, hogy ez a

szimmetrikusságában nyilvánul meg

$$w_{n,m} = w_{m,n} \quad , \quad /2.10/$$

ahol n és m a rendszer két tetszőleges állapotát jelöli a fenti értelemben. Definiáljuk az entrópiát az

$$S(t) = - \sum_n P_n(t) \ln P_n(t)$$

összefüggéssel. Az entrópia időderiváltjára a /2.5/ master egyenlet és /2.10/ alapján a következőt kapjuk.

$$\dot{S}(t) = - \sum_n \dot{P}_n(t) (\ln P_n(t) + 1) = - \sum_{n,m} w_{n,m} (P_m(t) - P_n(t)) (\ln P_n(t) + 1).$$

Indexcsere majd az így előállt két egyenlet összeadása után

$$\dot{S}(t) = \frac{1}{2} \sum_{n,m} w_{n,m} \{ (P_n(t) - P_m(t)) (\ln P_n(t) - \ln P_m(t)) \}.$$

A kapcsos zárójelben álló kifejezés sohasem lehet negatív, nullává is csak akkor válik, ha $P_n = P_m$. Az entrópia tehát sohasem csökkenhet,

$$\dot{S}(t) \geq 0 \quad ,$$

s állandósága csak akkor valósul meg, ha a $P_n(t)$ eloszlás egyenletes és időben állandó. Ezzel levezettük egyrészt az entrópiatételt, másrészt az egyensúlyi statisztikus fizika alapvető föltevését, miszerint zárt rendszerben valamennyi állapot egyforma valószínűséggel fordul elő. Az utóbbi állítás és /2.10/ együtt azt jelentik, hogy a részletes egyensúly feltétele, /2.8/ termodinamikai egyensúlyban lévő zárt rendszerben teljesül.

A fenti származtatás jól mutatja, hogy milyen lényeges a mikroszkópikus reverzibilitás feltételezése a makroszkópikus folyamatok irreverzibilis viselkedésének megértése szempontjából. A stochasztikus folyamatoknak a nem-egyensúlyi jelenségek leírásában játszott fontos szerepének további illusztrálá-

sára látunk példát a függelékben. Megmutatjuk, hogyan vezethető le a transzport folyamatok megértésében alapvető Boltzmann-egyenlet a kvantummechanika elvei ill. a master egyenlet felhasználásával.

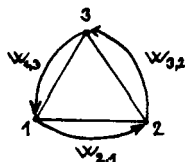
A részletes egyensúly kérdéséhez visszatérve T hőmérsékletű hőtartállyal kapcsolatban álló rendszer esetén a szabad energia általánosított formáját érdemes vizsgálni, melyről hasonló módon kimutatható, hogy sohasem növekszik. Minimális értékét akkor veszi fel, ha az n állapot megvalósulásának valószínűsége $\exp(-E_n/kT)$ -vel arányos, ahol E_n az állapot energiája, k a Boltzmann-állandó /kanonikus sokaság/. Belátható, hogy az átmeneti valószínűségek tetszőleges m és n indexekre eleget tesznek a

$$\frac{w_{m,n}}{w_{n,m}} = e^{-\frac{E_m - E_n}{kT}} \quad /2.11/$$

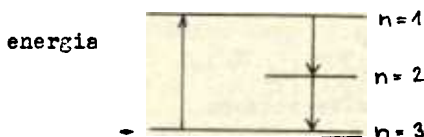
feltételnek, mely éppen a részletes egyensúly megvalósulását jelenti.

Összefoglalva azt mondhatjuk, hogy termodinamikai egyensúlytól nem túl távol lévő rendszerekben a részletes egyensúly elve érvényes. Fordítva a /2.10/ ill. /2.11/ összefüggések annak feltételeként tekinthetők, hogy a rendszer a termodinamikai egyensúlyi állapothoz tartson. Ha a megfelelő feltétel nem teljesül akkor a rendszer nem juthat el a termodinamikai egyensúlyba, de eljuthat stacionárius állapotba, ami esetleg még a részletes egyensúly elvének /2.8/ is eleget tesz. Nemfizikai, vagy egyensúlytól távoli rendszerekben a részletes egyensúly csak speciális esetekben valósul meg.

3. feladat Tekintsünk egy három állapotú rendszert, melyben cirkuláris átmenet lehetséges: a 3. állapotból az 1.-be kerül a rendszer, s minden lépés egyirányú.



Ez olyan atom, vagy molekula modelljének tekinthető, mely az alapállapotból /3./ külső hatásra a egyik gerjesztett állapotba /1./ juthat, ahonnan egy közbenső energiszint /2./ érintésével bomlik le /lézer/.



Határozzuk meg a stacionárius megoldást, s mutassuk meg, hogy a részletes egyensúly elve nem teljesül!

2.4 Az általános megoldás

A /2.5/ master egyenlet az idő változóra nézve lineáris differenciál-egyenlet, mely az

$$A_{n,n'} \equiv \omega_{n,n'}(1 - \delta_{n,n'}) - \delta_{n,n'} \sum_{l \neq n} \omega_{l,n'} \quad /2.12/$$

mátrix bevezetésével a

$$\dot{P}_n(t) = \sum_{n'} A_{n,n'} P_{n'}(t)$$

alakba írható. Ha a partikuláris megoldást a $P_n(t) = e^{-\lambda t} \gamma_n$

feltevéssel kívánjuk meghatározni, egyszerűbb algebrai egyen-

letre jutunk: $\sum_{n'} A_{n,n'} \gamma_n^{(\lambda)} = -\lambda^{(n)} \gamma_n^{(\lambda)}$.

Az λ index bevezetése azért szükséges, mert a fenti sajátérték egyenletnek több megoldása is létezik. A $\lambda^{(0)}=0$ sajátérték tartozik a stacionárius megoldáshoz. $A_{n,n}$ nem feltétlenül szimmetrikus, tehát a bal-, és jobboldali saját vektorok különbözhetnek egymástól. Az általános megoldás a fenti megoldások lineáris kombinációjaként adódik. Aszimptotikus viselkedését, miközben a stacionárius megoldáshoz tart, a legkisebb pozitív valós részű sajátérték jellemzi.

A fentivel lényegében ekvivalens eljárás az, amikor vektoralakban írjuk föl az egyenletet

$$\dot{P}(t) = \underline{A} P(t).$$

Ennek megoldása

$$P(t) = e^{\underline{A}t} P(0),$$

/2.13/

ahol $P(0)$ a kezdeti eloszlás vektora.

A nagy dimenziószámú /esetleg végtelen dimenziós/ mátrixok jelenléte miatt a master egyenlet egzakt megoldása csak speciális esetekben ismert.

1. példa Poisson-folyamat Vizsgáljunk egy rádióaktív preparátumot, melyben nagyszámu atom van. A tapasztalat szerint egy atom elbomlásának időegységre eső valószínűsége (λ) konstans, s független attól, hogy az atom milyen régóta van elbomlatlan állapotban. Tegyük föl, hogy a felezési idő jóval hosszabb a mérés időtartamánál. Ekkor annak ν valószínűsége, hogy egy atom elbomoljon, közelítőleg állandónak vehető $\nu \approx \lambda N$, ahol N az aktív atomok száma. Jellemezzük a rendszer állapotait az elbomlott atomok n számával! Csak a $W_{n+1,n} = \nu$ átmeneti valószínűség különbözik zérustól, hiszen minden bomláskor

eggyel növekszik az n érték, és két egyidejű esemény valószínűsége igen csekély (ritkaság). Határozzuk meg az eloszlásfüggvényt, ha kezdetben $m \ll N$ elbomlott atom volt a preparátumban.

A fentiek alapján a master egyenlet mátrixa

$$\underline{A} = \nu \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & -1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & -1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & -1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = -\nu \underline{1} + \nu \underline{L}$$

ahol $\underline{1}$ az egységmátrix és $L_{nm} = \delta_{n,n+1}$. Jelölje \underline{e}_j azt az egységvektort, amelyben csak a j . komponens különbözik nullától: $(\underline{e}_j)_k = \delta_{jk}$. Ezzel a jelöléssel a kezdeti eloszlás

$\underline{p}(0) = \underline{e}_m$ alakban adható meg. /2.13/ szerint a megoldás:

$$\underline{p}(t) = e^{-\nu t} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (\nu t \underline{L})^k \underline{e}_m.$$

Könnyen megállapíthatjuk, hogyan hat az \underline{L} mátrix az \underline{e}_m vektorra:

$$(\underline{L} \underline{e}_m)_i = \sum_j L_{ij} (\underline{e}_m)_j = \sum_j \delta_{i,j+1} \delta_{mj} = \delta_{i,m+1} = (\underline{e}_{m+1})_i,$$

amiből az is következik, hogy $(\underline{L})^k \underline{e}_m = \underline{e}_{m+k}$.

A megoldás végső alakja tehát

$$\underline{p}(t) = e^{-\nu t} \left[\underline{e}_m + \nu t \underline{e}_{m+1} + \frac{1}{2!} (\nu t)^2 \underline{e}_{m+2} + \frac{1}{3!} (\nu t)^3 \underline{e}_{m+3} + \dots \right]$$

Ebből leolvasható, hogy

$$P_{n,m}(t) = \begin{cases} e^{-\nu t} \frac{(\nu t)^{n-m}}{(n-m)!} & , \text{ ha } n \geq m \\ 0 & \text{ ha } n < m \end{cases} \quad /2.14/$$

Speciálisan, ha kezdetben nincs elbomlott atom, akkor

$$P_{n,0}(t) = e^{-\nu t} \frac{(\nu t)^n}{n!} .$$

Megkaptuk tehát azt a jól ismert eredményt, amely szerint rövid mérési idők alatt a számlálócsövek jeleinek száma Poisson-eloszlást követ. Ennek feltételei, mint láttuk: memória nélküli bomlás, ritkaság, közelítőleg állandó aktivitás (ν). /Más levezetés található pl. Jánossy Lajos: A valószínűségelmélet alapjai című könyvében./

A Poisson eloszlás tulajdonságainak ismeretében rögtön felírhatjuk n várható értékét ill. szórását:

$$\langle n \rangle = m + \nu t \quad , \quad \langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = \nu t .$$

A ν mennyiség egy másik szemléletes jelentését kapjuk a következő gondolatmenettel: A $P_{n,m}(t) = e^{-\nu t}$ kifejezés úgy is értelmezhető, mint annak a valószínűsége, hogy a tartózkodási idő az m állapotban nagyobb t -nél /hiszen ilyen valószínűséggel nem történik elmozdulás ebből az állapotból./ $1 - e^{-\nu t}$ tehát annak a valószínűsége, hogy a tartózkodási idő nem több t -nél. Az ennek megfelelő valószínűségsűrűség $\nu e^{-\nu t}$.

Az m állapotban való tartózkodás átlagos ideje ezért

$$T_m = \nu \int_0^{\infty} t e^{-\nu t} dt = \frac{1}{\nu} . \quad /2.15/$$

Mindez arra is utal, hogy a $P_{n,m}(t)$ függvény kapcsolatba hozható az idő szerinti valószínűségeloszlással. A kérdés részletesebb tárgyalására a 2.7. fejezetben térünk vissza.

2. példa Kétállapotú rendszer Képzeljünk el egy mágneses dipólust /mágneses nyomatéka μ /, mely csak a tér adott egyenesével párhuzamosan helyezkedhet el. Két állapota létezik attól függően, hogy "felfelé", vagy "lefelé" mutat /klasszi-

kus spin/, s a két állapotot az $S=\pm 1$ indexeléssel szokás megkülönböztetni. A T hőmérsékletű környezettel való kölcsönhatás következtében a dipólus átbillen egyik állapotából a másikba. Tegyük föl, hogy a folyamat Markov-típusú, s hogy valamelyik átmeneti valószínűség, például mérések alapján, ismert; legyen $\omega_{1,-1} = \omega_0$. Határozzuk meg a valószínűség eloszlás és az átlagos mágneses nyomaték időbeli változását, ha a rendszer kezdetben az $S=+1$ állapotban volt, s külső mágneses tér nincsen jelen.

Mágneses tér hiányában mindkét állapot energiája ugyanakkora, ezért a /2.11/ részletes egyensúlyi feltétel alapján

$\omega_{-1,1} = \omega_0$. A master egyenlet

$$\dot{P}_{s,1}(t) = -\omega_0 P_{s,1}(t) + \omega_0 P_{-s,1}(t) \quad , \quad s = -1, +1 \quad ,$$

mely a $P_{1,1}(0)=1$ és $P_{-1,1}(0)=0$ kezdeti feltétel mellett oldandó meg. A $P_{-1,1}(t) = 1 - P_{1,1}(t)$ összefüggést felhasználva az eredmény egyszerűen megkapható:

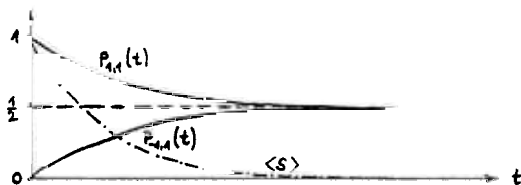
$$P_{1,1}(t) = \frac{1}{2} (1 + e^{-2\omega_0 t}) \quad , \quad P_{-1,1}(t) = \frac{1}{2} (1 - e^{-2\omega_0 t}) \quad .$$

A két valószínűség tehát idővel kiegyenlítődik, a $P_{1,1}^* = P_{-1,1}^* = \frac{1}{2}$ stacionárius megoldáshoz tart /könnyen belátható, hogy a kezdeti eloszlástól függetlenül/.

Az átlagos mágnesezettség

$$\mu \langle S \rangle = \mu \sum_{s=-1}^{+1} S P_{s,1}(t) = \mu \{ P_{1,1}(t) - P_{-1,1}(t) \} = \mu e^{-2\omega_0 t}$$

a μ értékről relaxál a zérus egyensúlyi értékig.



Vizsgáljuk most meg, hogyan módosul az eljárás, ha nem egyetlen rendszert, hanem N számú ugyanilyen rendszer együttesét /sokaság/ kívánjuk leírni. Aszerint kapunk különböző állapotokat, hogy hány részrendszer van a $+1$ /ill. -1 / állapotban. Jelölje n a felfelé mutató spinek számát, $n=0,1,\dots,N$. Mivel a részrendszerek függetlenek és egyformák, annak a valószínűsége, hogy időegység alatt n eggyel csökkenjen $w_{n-1,n} = w_0 n$, az $n \rightarrow n+1$ átmenet valószínűsége viszont a lefelé mutató spinek számával arányos: $w_{n+1,n} = w_0 (N-n)$. A két vagy több lépéses átmenet esélye elhanyagolhatóan kicsi. A teljes rendszer master egyenlete ezért így írható, ha az m állapotból indultunk:

$$\dot{P}_{n,m}(t) = w_0 (n+1) P_{n+1,m}(t) + w_0 (N-n+1) P_{n-1,m}(t) - w_0 N P_{n,m}(t).$$

Az ilyen típusú egyenletek megoldásával a következő fejezetben foglalkozunk. A konkrét számolás azt mutatja, hogy az $m=N$ esetben $\frac{n}{N}$ várható értéke éppen az előző módszerrel kapott valószínűség:

$$\frac{\langle n \rangle}{N} = P_{1,1}(t),$$

ami a két eljárás egyenértékűségére utal.

4. feladat a./ Irjuk le a 2. példában megadott rendszer viselkedését a spin irányával párhuzamos külső H mágneses tér jelenlétében!

b./ Legyen a két-állapotú rendszer a $t=0$ pill-

lanatig a T_0 hőmérsékletű hőtartállyal egyensúlyban. Ekkor hirtelen T hőmérsékletű környezetbe helyezzük át. Hogyan változik a valószínűség eloszlás és a rendszer átlagos energiája?