

Математическое моделирование

Парамакросистемы с упорядоченным заполнением состояний. Часть I

Д. Л. ДОРОФЕЕВ, А. Е. ПОПОВА

Аннотация. Рассмотрены свойства классической макроскопической системы с парастатистикой с неразличимыми элементами и состояниями. Показано, что такая система эквивалентна системе с различимыми состояниями, механизм заполнения которых является упорядоченным (IDA-система). Каждому микросостоянию системы ставится в соответствие диаграмма Юнга. Для микросостояния вводится понятие окрестности, с помощью которого определяется макросостояние. Получены аналитические выражения для вероятностей и энтропий макросостояний. Анализ равновесных состояний системы позволяет сделать вывод о том, что рост IDA-системы осуществляется по оболочкам.

Ключевые слова: *макросистемы, парастатистика, оболочки, диаграмма Юнга.*

1. Понятие о парамакросистемах

Понятие макросистемы, как системы, состоящей из большого числа однотипных элементов, является фундаментом статистической физики, но находит также приложение и в других областях, таких, как моделирование биологических, социально-экономических, транспортных и других процессов. Вместе с тем, при выходе за рамки ограниченного круга классических и квантовомеханических моделей макросистем мы сталкиваемся с необычными статистическими свойствами, заслуживающими специального рассмотрения.

Примерами моделей классических и квантовомеханических статистических систем могут служить классический идеальный газ, ферми- и бозе-газы [1, 2]. Кроме того, в квантовой механике известен ряд подходов к задаче построения обобщенных статистик, называемых *парастатистиками*, которые включают в себя статистики Бозе—Эйнштейна и Ферми—Дирака как частные случаи (см., например, работы [3–5]). Известный пример

реальных квантовых систем с парастатистикой — двумерные системы, в которых наблюдается дробный квантовый эффект Холла [6]. Поведение возникающих при этом квазичастиц описано в работах Ф. Вильчека (см., напр., [7]).

Аналогичное обобщение традиционных моделей классической статистики было предложено нами в работах [8, 9]. Напомним введенное в этих работах понятие макросистемы с парастатистикой, или парамакросистемы: это макроскопическая классическая система, состоящая из n элементов, которые могут находиться в g различных состояниях. В каждом из этих состояний одновременно могут находиться не более чем l элементов. При $l = 1$ имеем макроскопический аналог ферми-системы; $l = \infty$ дает макроскопический аналог бозе-системы. Если l — любое заданное целое число, то в этом случае мы говорим о *макросистеме с парастатистикой*; емкость состояний l называется *порядком парастатистики*. В [8, 9] парамакросистемы предлагалось классифицировать с учетом различимости или неразличимости элементов и их состояний на мик-

роуровне. Этот подход позволяет выделить большое число систем с разными статистиками. В настоящей работе мы остаемся в рамках этого подхода, но *особое внимание уделим не только различимости элементов и состояний, но также и механизму заполнения состояний и проанализируем его роль в формировании статистических свойств системы. Также будет дано описание нового типа моделей макросистем с упорядоченным заполнением состояний*, названного IDA, выписаны аналитические выражения для вероятностей и энтропий макросостояний, выявлен оболочечный принцип формирования равновесных макросостояний IDA-системы. Нам представляется, что данные модели могут найти приложение как в физических задачах (адсорбция, рост кристаллов, образование кластеров), так и в моделировании биологических и социально-экономических процессов.

2. Описание системы типа IDA

Рассмотрим ящик, поделенный на g ячеек, которые заполняются шарами (общее число шаров равно n , $n < g$). Все ячейки считаем эквивалентными (неразличимыми), и тогда они могут быть упорядочены произвольным образом. Нам будет удобнее упорядочивать их по убыванию их заселенностей. Набор заселенностей ячеек λ_i ($i = 1, \dots, g$) и будет считаться *микросостоянием* системы. Он представляет собой последовательность чисел λ_i , которые до некоторого $i = r < g$ отличны от нуля, и однозначно соответствует разбиению числа n ¹. В дальнейшем при перечислении заселенностей ячеек нули мы будем опускать.

Наглядным изображением разбиений являются так называемые *диаграммы Юнга* (см. рис. 1), в которых каждому числу λ_i сопоставляется столбец с числом клеток, равным λ_i [14]. В данной работе мы используем французскую запись диаграмм Юнга [10], в которой диаграмма начинается из левого нижнего угла. Таким образом, каждому микросостоянию системы соответствует диаграмма Юнга, высоты столбцов в которой равны заселенностям ячеек в ящике (рис. 1).

Определенные вышеописанным способом микросостояния появляются и при рассмотрении другого типа систем, а именно, таких, в которых состояния не являются эквивалентными, а упорядоченность их заселенностей возникает вследствие осо-

¹ Разбиением натурального числа n называется всякая конечная невозрастающая последовательность натуральных чисел $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_r$, для которой $\sum_{i=1}^r \lambda_i = n$ [15]. Числа λ_i называются *частями* разбиения.

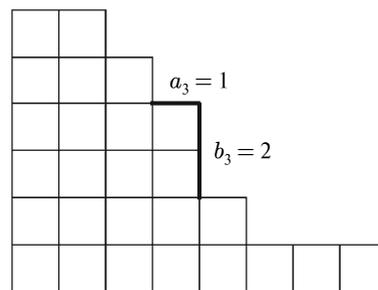


Рис. 1. Диаграмма Юнга во французской записи, соответствующая микросостоянию IDA-системы; $\lambda_1 = 6$, $\lambda_2 = 6$, $\lambda_3 = 5$, $\lambda_4 = 4$, $\lambda_5 = 2$, $\lambda_6 = 1$. a_3 , b_3 — длина и высота 3-го выступа

бенностей механизма их заполнения. Объясним подробнее, что мы имеем в виду.

Представим себе ящик бесконечной протяженности, ограниченный слева бесконечно высокой стенкой. Ящик поделен на ячейки (каждая бесконечной емкости), следующие слева направо. В этот ящик случайным образом попадают шары. Поставим условие: пускай шар остается в ящике только в том случае, если у него имеется не менее двух соседей (соседями могут быть шары, а также дно или стенка ящика). Это означает, что в получившейся конфигурации шаров заселенности ячеек будут следовать в невозрастающем порядке. Такую конфигурацию, которой однозначно соответствует некоторая диаграмма Юнга, мы и в этом случае принимаем за микросостояние системы². Возможный порядок накопления шаров в ящике показан на рис. 2.

Таким образом, как для систем с неразличимыми состояниями, так и для систем с различимыми состояниями, но с упорядоченным их заполнением, мы приходим к одной и той же статистике, которую мы, следуя обозначениям, предложенным в [8], назовем IDA: I означает, что все элементы системы неразличимы (*англ. indistinguishable*), D показывает различимость состояний (*англ. distinguishable*); последнее A говорит о том, что механизм заполнения состояний является упорядоченным (*англ. arranged*).

Зафиксируем количество элементов в системе (шаров) n и обозначим Γ_n — множество всех микросостояний такой системы, а $N(\Gamma_n)$ — их количество, т. е. количество разбиений числа n [13]. В дальней-

² Если бы нам потребовалось работать с *различимыми* элементами в системе и для каждой ячейки указывать номера содержащихся в ней шаров по порядку попадания в ящик, то микросостоянию соответствовала бы схема Юнга, заполненная натуральными числами, упорядоченными по возрастанию в столбцах и строках, начиная с левой нижней клетки, в которой всегда расположен шар с номером один. Такой порядок заполнения схемы Юнга называется *натуральным*, а сама схема, или таблица, Юнга — стандартной [14].

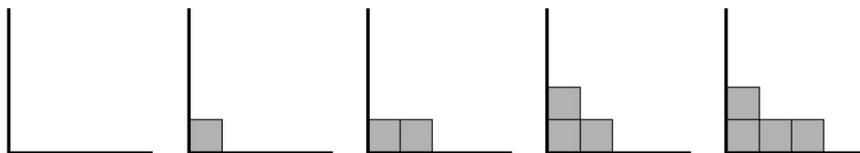


Рис. 2. Модель IDA–системы: шары, падающие в левый нижний угол ящика

шем в обозначении $N(\Gamma_n)$ мы будем опускать аргумент Γ_n и писать просто N .

За неимением детальной информации о процессе формирования микросостояний, будем считать вероятности всех микросостояний одинаковыми и равными $1/N$. Введем теперь понятие макросостояния для исследуемой модели.

В пространстве микросостояний нашей системы зададим следующую метрику: назовем расстоянием $\rho(\lambda, \lambda')$ между двумя микросостояниями λ и λ' наименьшее число клеток, которые нужно переставить, чтобы получить из диаграммы λ диаграмму λ' или наоборот. Определенное таким образом расстояние вычисляется по формуле:

$$\rho(\lambda, \lambda') = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^g |\lambda_i - \lambda'_i|. \tag{1}$$

Назовем *окрестностью радиуса k микросостояния λ* множество микросостояний $Q_k(\lambda)$, лежащих от λ на расстоянии, меньшем либо равном k :

$$Q_k(\lambda) = \{\lambda' \mid \rho(\lambda, \lambda') \leq k\}. \tag{2}$$

Такие окрестности будем рассматривать как *макросостояния* системы. Иначе говоря, *макросостоянием с центром λ и радиусом k* будем называть окрестность радиуса k микросостояния λ .

Такой способ определения макросостояния системы является естественным в ряде ситуаций, возникающих при исследовании физических систем. Например, при наблюдении процесса осаждения частиц на некоторую поверхность, когда могут считаться эквивалентными (или неразличимыми в силу ограниченной точности приборов) состояния, различающиеся перестановкой небольшого числа адсорбирующихся частиц (обозначим это число k). Тем самым мы приходим к понятию макросостояния как окрестности радиуса k .

В настоящей работе мы ограничимся рассмотрением статистики макросостояний с радиусом, равным единице. Это рассмотрение, естественно, может быть выполнено и для окрестностей с большими радиусами. Единичную окрестность микросостояния $Q_1(\lambda)$ далее будем обозначать $Q(\lambda)$.

Вероятность макросостояния $P(Q(\lambda))$ будем определять по формуле:

$$P(Q(\lambda)) = \frac{N(Q(\lambda))}{N}, \tag{3}$$

где $N(Q(\lambda))$ — количество диаграмм в окрестности, иначе говоря, емкость окрестности.

Энтропия состояния, вычисляемая как логарифм вероятности, следовательно, имеет вид:

$$S(Q(\lambda)) = \ln P(Q(\lambda)) = \ln N(Q(\lambda)) - \ln N. \tag{4}$$

Вычисление вероятности макросостояния с центром λ (для фиксированного числа частиц n) возможно посредством перебора всех остальных разбиений, с нахождением расстояния от λ до каждого из них. Отобрав среди этих разбиений только те, которые находятся от λ на расстоянии $\rho \leq 1$, можно вычислить емкость единичной окрестности λ , а значит, и вероятность соответствующего макросостояния. Однако с ростом n количество его разбиений растет чрезвычайно быстро, поэтому ниже предлагается алгоритм, позволяющий определить величину единичной окрестности заданного разбиения без перебора всех остальных разбиений.

Для нахождения емкости единичной окрестности разбиения важным оказывается число выступов и впадин в его диаграмме Юнга. Будем говорить, что на i -й позиции диаграммы есть выступ, если заселенность i -й ячейки больше, чем заселенность следующей ячейки. Так, диаграмма, изображенная на рис. 1, имеет 5 выступов. Количество выступов в диаграмме обозначим q . Для каждого выступа введем длину a_i и высоту b_i . Так, на рис. 1 третий выступ имеет высоту 2 и длину 1. Далее, будем говорить, что на j -й позиции диаграммы имеется впадина, если либо $j = 1$, либо $\lambda_{j-1} > \lambda_j$. Если число выступов в диаграмме равно q , то число впадин будет равняться $q + 1$. Рассмотрение возможных перестановок элементов приводит к следующему выражению для величины единичной окрестности (его вывод см. в Приложении 1):

$$N(Q(\lambda)) = q^2 + \sum_{i=1}^q p_i + 1. \tag{5}$$

Здесь $p_i = p(a_i) + p(b_i) - 1$;

$$p(x) = \begin{cases} 0, & x = 1, \\ 1, & x > 1. \end{cases} \tag{6}$$

Заметим также, что *сопряженным* к разбиению λ называется разбиение λ' , диаграмма которого получается из диаграммы λ транспонированием, т. е.

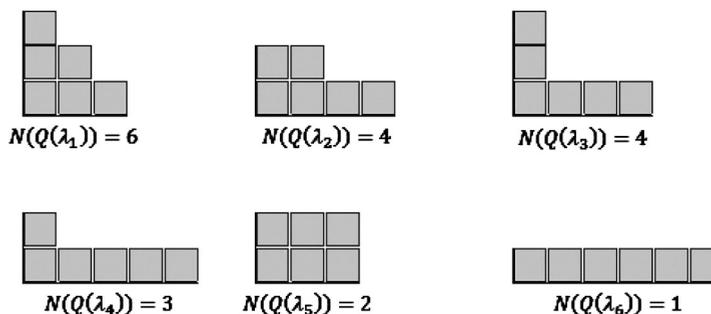


Рис. 3. Разбиения числа $n = 6$ и величины их единичных окрестностей. Разбиения, сопряженные показанным на рисунке, имеют равную с ними величину окрестности

отражением относительно главной диагонали. Таким образом, λ'_i , число клеток в i -й строке λ' , есть в то же время число клеток в i -м столбце диаграммы λ [10]. Из симметрии нашей задачи и из условия равновероятности микросостояний следует, что состояния, соответствующие сопряженным между собой диаграммам, имеют одинаковую вероятность.

Макросостояния с наибольшей вероятностью, следуя принятой в статистической физике терминологии, будем называть *равновесными*.

На рис. 3 изображены разбиения числа $n = 6$, первое из которых $\lambda_1 = \{3, 2, 1\}$ имеет наибольшую единичную окрестность и, следовательно, является равновесным. Данное разбиение сопряжено самому себе. Ради экономии места, а также из соображений простоты восприятия, мы не поместили на этом рисунке диаграммы, сопряженные показанным здесь (и, следовательно, имеющие равные с ними единичные окрестности).

На рис. 4 представлены величины единичных окрестностей для разбиений числа $n = 14$. Разбиения упорядочены по убыванию величины окрестности, и каждому из них присвоен номер m . Получаемый график представляет собой совокупность горизонтальных отрезков. Длина каждого отрезка равна количеству макросостояний с соответствующей емкостью. В случае $n = 14$ наибольший размер окрестности $N(Q(\lambda)) = 15$ имеют два разбиения: $\lambda_1 = \{5, 3, 2, 2, 1, 1\}$ и $\lambda_2 = \{6, 4, 2, 1, 1\}$, — сопряженные друг другу. Соответствующие им макросостояния: $Q(\lambda_1)$ и $Q(\lambda_2)$, таким образом, оказываются наиболее вероятными.

3. Равновесные состояния системы IDA

Рассмотрим равновесные состояния IDA-системы последовательно для различных значений n .

Для $n = 1$ существует только одно разбиение $\{1\}$. Для $n = 2$ два из двух возможных разбиений:

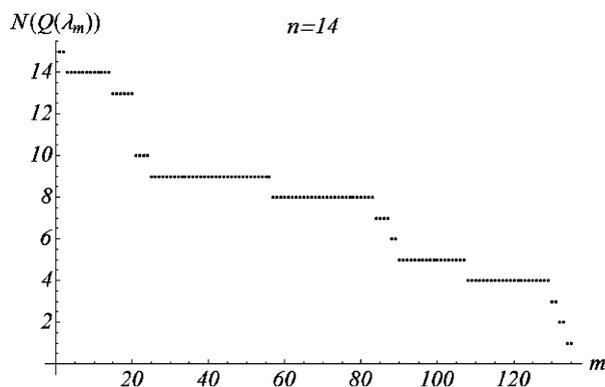


Рис. 4. Величины окрестностей для разбиений числа $n = 14$

$\{2, 0\}$ и $\{1, 1\}$, — являются сопряженными и, следовательно, имеют одинаковую единичную окрестность с емкостью 2.

При $n = 3$ наибольшую единичную окрестность имеет разбиение $\{2, 1\}$. Ее емкость равняется 3.

В этом месте целесообразно ввести несколько новых обозначений.

Клетки диаграммы будем обозначать: (i, j) , где i — номер столбца, j — номер строки, начиная снизу, и назовем s -й оболочкой совокупность клеток диаграммы, убывающих по высоте в столбцах с шагом единица, начиная с s : $(1, s), (2, s-1), \dots, (s, 1)$. Так, заполненная третья оболочка выделена на рис. 5. Назовем оболочки буквами a, b, c, \dots , и будем называть *конфигурацией* совокупность разбиений с одинаковым числом клеток на соответствующих оболочках. Конфигурации будем, как в атомной спектроскопии, обозначать названиями оболочек с указанием количества элементов на каждой из них. Максимальное количество элементов на оболочке совпадает с ее порядковым номером.

К примеру, первая оболочка a заполняется при $n = 1$. Так как на ней находится всего один элемент, эту конфигурацию мы обозначаем $1a$. Следом

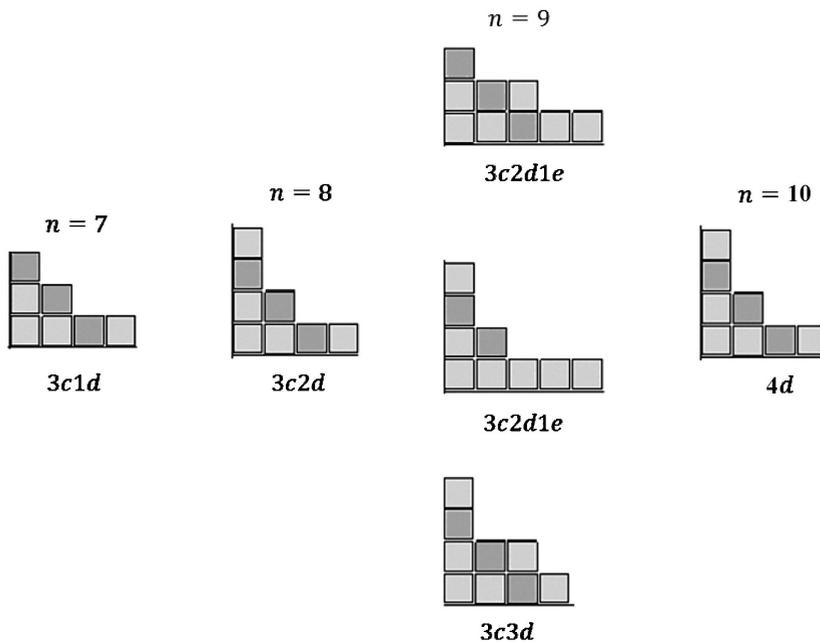


Рис. 5. Заполнение оболочки с номером 4. темным цветом выделена заполненная третья оболочка *c*. кроме показанных здесь конфигураций, наиболее вероятными являются также сопряженные им

за *a* начинает заполняться оболочка *b*. Конфигурации *1a1b*, в которой на оболочке *b* появляется первая частица, соответствуют два разбиения: $\{2, 0\}$ и $\{1, 1\}$. При $n = 3$ оболочка *b* оказывается заполненной, при этом имеем конфигурацию *2b*, которому соответствует разбиение $\{2, 1\}$. Разбиение $\{2, 1\}$ соответствует заполненной оболочке, а его части $\lambda_1 = 2$ и $\lambda_2 = 1$ следуют строго по убыванию с шагом единица. Далее мы в записи можем не отражать уже заполненные внутренние оболочки и обозначать конфигурацию просто количеством элементов на самой внешней заполненной и последующих незаполненных оболочках. Так, за конфигурацией *2b* следуют конфигурации *2b1c*, а затем *2b2c*. Третьей заполненной оболочке (конфигурация *3c*) соответствует разбиение $\{3, 2, 1\}$ числа $n = 6$.

Расчеты с использованием выражения (5) показывают, что в равновесных состояниях с числом частиц

$$n_s = s(s + 1)/2, \quad s = 1, 2, \dots, \quad (7)$$

в системе оказываются заполненными оболочки с первой по *s*-ю и нет частично заполненных оболочек. Числа n_s также называются треугольными [11].

До $n = 8$ включительно частично заполненной может оставаться только одна оболочка. Начиная с $n = 9$ частицы могут находиться одновременно на нескольких внешних оболочках. Оболочки начинают заполняться с крайних элементов, прилегающих к дну и стенке ящика. Так, на рис. 5 показана

на последовательность заполнения оболочки с номером 4. В том случае, если наиболее вероятных диаграмм несколько, они получаются друг из друга перестановкой внешних элементов, находящихся на частично заполненных оболочках, как в случае $n = 9$, см. рисунок.

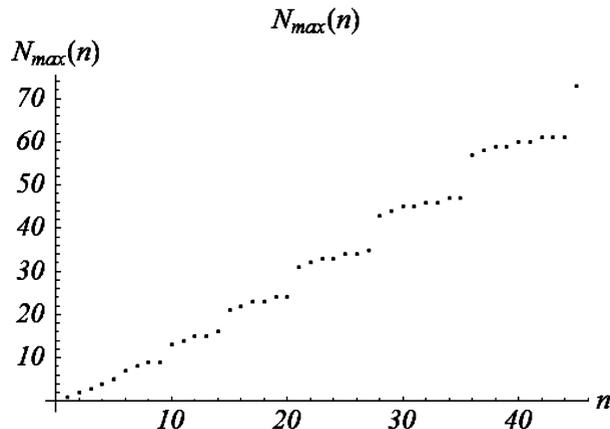


Рис. 6. Изменение емкости окрестности наиболее вероятного разбиения с ростом *n*

При $n = 15$ равновесное состояние имеет вид: $\{5, 4, 3, 2, 1\}$, что соответствует заполненной пятой оболочке, конфигурация *5e*.

На рис. 6 представлен график роста емкости наиболее вероятного состояния с увеличением числа частиц. Когда число частиц n принимает значе-

ния n_s (см. (7)), величина окрестности терпит скачок.

Характерный для модели IDA механизм заполнения состояний позволяет получить явное выражение для емкости равновесного состояния (вывод см. в Приложении 2):

$$N_{\max}(n) = N_s + [\sqrt{4\Delta n + 1} - 1], \quad (8)$$

где

$$N_s = s(s-1) + 1; \quad s = \left[\frac{\sqrt{8n+1} - 1}{2} \right]; \quad \Delta n = n - n_s. \quad (9)$$

Квадратные скобки в (8, 9) обозначают целую часть.

Отметим также черты сходства IDA-системы с ростом кластеров инертных газов. В IDA-системе, так же, как и в названном типе кластеров, значение имеют только связи между ближайшими соседями и можно не брать в расчет дальнедействующие силы. Кроме того, так же, как и в случае с кластерами, при малом количестве частиц заполнение идет по оболочкам, тогда как с ростом размера кластера (как и конфигурации типа IDA) начинают одновременно заполняться несколько оболочек [12].

Заключение

Рассмотрен тип парамакросистем, для статистических характеристик которого важную роль играет механизм заполнения состояний. Построен алгоритм нахождения вероятности макросостояния IDA-системы (формулы (3), (5)). Показано, что заполнение IDA-системы имеет оболочечный характер, подобно модели электронных оболочек атома и оболочечной модели атомного ядра. Получено аналитическое выражение (8) для емкости единичной окрестности наиболее вероятных состояний.

В реальных физических системах описанный механизм заполнения состояний может быть представлен, к примеру, процессом адсорбции, в котором для осаждающейся частицы более энергетически выгодным является положение с большим числом соседей. Если частица не имеет достаточно связей с уже осевшими частицами, она не может оставаться на поверхности и отрывается. Кроме того (см., например, обзор [12] Р. С. Берри и Б. М. Смирнова), сходный механизм характерен и для процесса роста кластеров, при котором наиболее стабильными являются кластеры с наибольшим числом связей между ближайшими соседями.

Приложение 1

Чтобы найти число диаграмм, лежащих в единичной окрестности данной, нужно сосчитать все различные способы перестановки одной клетки в этой диаграмме. Чтобы не было нарушено условие убывания заселенностей ячеек, можно переставлять только клетки, находящиеся на вершинах выступов. Из тех же соображений, клетки могут быть размещены только во впадинах диаграммы. Если в диаграмме q выступов, то впадин для новых клеток в ней будет $q + 1$. Для каждого выступа найдем число способов N_i , которыми его вершина может быть переставлена на новое место, а затем просуммируем полученные числа по всем выступам диаграммы. Поскольку сама исходная диаграмма включается в свою единичную окрестность, к полученной сумме нужно еще прибавить единицу.

Величина слагаемого N_i , соответствующего i -му выступу, определяется формой данного выступа. Если и длина a_i , и высота b_i выступа равны единице, т. е. выступ совпадает со своей вершиной, то при удалении ее в диаграмме останется только q впадин, из которых одну клетка занимала раньше. Следовательно, в диаграмме для нее останется еще $q - 1$ впадин, в которые она может быть переставлена. Таким образом, вклад в общую сумму для выступа, у которого $a_i = b_i = 1$, равняется $N_i = q - 1$.

В случае выступа, у которого $a_i > 1$, $b_i = 1$ или $a_i = 1$, $b_i > 1$, после удаления клетки с выступа в диаграмме остается прежнее число впадин $q + 1$, из которых для формирования новых диаграмм клетка может занять $N_i = q$.

Наконец, если и длина, и высота выступа больше единицы: $a_i > 1$ и $b_i > 1$, — при удалении клетки в диаграмме становится на одну впадину больше: $q + 2$. Из них могут быть использованы все, кроме той, которую клетка занимала ранее, т. е. $N_i = q + 1$.

Таким образом, в общем виде можно записать:

$$N_i = q + p_i,$$

где $p_i = p(a_i) + p(b_i) - 1$;

$$p(x) = \begin{cases} 0, & x = 1, \\ 1, & x > 1. \end{cases} \quad (10)$$

Сложив все N_i и прибавив единицу в конце, получаем формулу (5).

Приложение 2

Рассмотрим произвольную диаграмму Юнга λ с q выступами. Пусть A — размер диаграммы по горизонтали, т. е. длина ее первой строки, B — размер диаграммы по вертикали, иначе говоря, высота первого ее столбца.

Лемма 1. $q \leq \min\{A, B\}$.

Доказательство. Очевидно, поскольку каждый из выступов занимает не менее одной строки по вертикали и не менее одного столбца по горизонтали.

Лемма 2. У каждого выступа равновесной диаграммы один из размеров обязательно равен единице.

Доказательство. Рассмотрим диаграмму λ с q выступлениями, у которой j -й выступ имеет размеры $a_j > 1, b_j > 1$. Величина единичной окрестности λ дается формулой (5). Переставим вершину j -го выступа на свободное место справа от последнего столбца λ . Полученную диаграмму обозначим λ' , число выступов в λ' обозначим q' . Единичная окрестность λ'

запишется как $N' = q'^2 + 1 + \sum_{i=1}^{q'} p'_i$. Покажем, что $N' > N$ и, следовательно, диаграмма λ не может быть равновесной.

В исходной диаграмме $p_j = +1$. В конечной диаграмме на месте j -го выступа образовались два новых, для которых $p'_j, p'_{j+1} \geq -1$. Число выступов новой диаграммы $q' = q + 1$ или $q + 2$. О выступлениях, не затронутых изменениями, известно, что $p'_i = p_i$ для $i = 1, \dots, j - 1$; $p'_i = p_{i-1}$ для $i = j + 2, \dots, q + 1$. Если $q' = q + 2$, то для $i = q + 2$ имеем $p'_{q+2} \geq -1$. Отсюда

$$N' - N = q'^2 - q^2 - \sum_{i=1}^q p_i + \sum_{i=1}^{q'} p'_i \geq q'^2 - q^2 - \sum_{i=q+1}^q 1 - 3 = (q' - q)(q' + q - 1) - 2 > 0$$

при $q > 1$.

Случай $q = 1$ рассмотрим отдельно. Имеем $j = q = 1$; $N = q^2 + 1 + 1$. В этом случае существуют две различные возможности:

- $b_1 = 2$. Тогда $q' = q + 1 = 2$; $p'_1 \geq -1, p'_2 = 0$. Получаем $N' = q'^2 + 1 + p_1 + p_2 \geq q'^2 + 1 - 1$. Отсюда $N' - N \geq q'^2 - q^2 - 1 - 1 = 2^2 - 1^2 - 2 = 1 > 0$.
- $b_1 > 2$. В этом случае $q' = q + 2 = 3$. Для p'_i имеем: $p'_1, p'_2 \geq -1, p'_3 = -1$. Отсюда $N' \geq q'^2 + 1 - 3$ и $N' - N \geq q'^2 - q^2 - 4 = 3^2 - 1^2 - 4 = 4 > 0$.

Для всех возможных случаев лемма доказана. \square

Лемма 3. Пусть две диаграммы: λ и λ' , — содержат n и n' клеток и q и q' выступов, соответственно. Тогда если $n' \geq n$, а $q' < q$, то λ' не является равновесной.

Доказательство. Величины единичных окрестностей λ и λ' даются формулой (5). Их разность имеет вид:

$$N - N' = q^2 - q'^2 + \sum_{i=1}^q p_i - \sum_{i=1}^{q'} p'_i,$$

причем для λ все величины $p_i \geq -1$. Диаграмма λ' , у которой присутствуют выступления с размерами $a_i, b_i > 1$, является заведомо неравновесной по лемме 2, поэтому рассмотрим диаграмму λ' , в которой у каждого выступа хотя бы один размер равен единице. Это означает, что $p'_i \leq 0$ для всех i . Имеем:

$$N - N' \geq q^2 - q'^2 - q > (q - 1)^2 - q'^2 \geq 0.$$

Отсюда видим, что $N' < N$. Следовательно, λ' не может быть равновесной. \square

Следствие: равновесная диаграмма обладает наибольшим возможным (при данном n) количеством выступов.

Лемма 4. Назовем «треугольной» диаграмму $\lambda_{(s)} = \{s, s - 1, \dots, 1\}$. Число ее клеток равно $n_s = s(s+1)/2$. Пусть λ' — произвольная диаграмма с числом клеток $n' \geq n_s$. Если в λ' содержится такой столбец λ'_j , что $\lambda'_j < \lambda_{(s)j}$, то λ' не является равновесной.

Доказательство. Если диаграмма λ' содержит такой столбец λ'_j , что $\lambda'_j < \lambda_{(s)j}$, то $\lambda'_j < s - j + 1$. Рассмотрим две диаграммы, содержащиеся в λ' :

$$\lambda'_{(1)} = \{\lambda'_1 - \lambda'_j, \lambda'_2 - \lambda'_j, \dots, \lambda'_{j-1} - \lambda'_j\} \quad \text{и} \\ \lambda'_{(2)} = \{\lambda'_j, \lambda'_{j+1}, \dots, \lambda'_r\},$$

где r — номер последнего столбца в λ' . Число выступов в λ' можно записать как $q' = q'_1 + q'_2$, где q'_1, q'_2 — количества выступов в $\lambda'_{(1)}, \lambda'_{(2)}$, соответственно. Пусть $A'_1 = j - 1$ — размер диаграммы $\lambda'_{(1)}$ по горизонтали, $B'_2 = \lambda'_j$ — размер $\lambda'_{(2)}$ по вертикали. Тогда $A'_1 + B'_2 = j - 1 + \lambda'_j < s$. Согласно лемме 1,

$$q'_1 \leq A'_1, \quad q'_2 \leq B'_2,$$

поэтому общее число выступов в λ' : $q' = q'_1 + q'_2 \leq A'_1 + B'_2 < s$. Следовательно, λ' не является равновесной (см. лемму 3 и ее следствие). \square

Лемма 5. Если $n = n_s$, то равновесной является «треугольная» диаграмма $\lambda_{(s)}$. Размер ее окрестности равняется

$$N(Q(\lambda_{(s)})) = N_s = s(s - 1) + 1.$$

Доказательство. То, что «треугольная» диаграмма является равновесной, следует из леммы 4. Величина ее единичной окрестности вычисляется по формуле (5). Для $\lambda_{(s)}$ все $p_i = -1$, поэтому получаем

$$N(Q(\lambda_{(s)})) = N_s = s^2 + 1 - s = s(s - 1) + 1. \quad \square$$

Лемма 6. Если $n_s < n < n_{s+1}$, то для равновесной диаграммы λ с n клетками справедливы следующие утверждения:

- 1) $\lambda_{(s)}$ полностью содержится в λ ;
- 2) размер ее окрестности превосходит N_s ;
- 3) число выступов в ней равно s .

Доказательство. Первое утверждение непосредственно следует из леммы 4. Второе утверждение доказывается тем, что из $n > n_s$ клеток можно построить диаграмму, у которой величина единичной окрестности превосходит N_s . Для этого достаточно добавить $n - n_s$ клеток в первую строку диаграммы $\lambda_{(s)}$. Третье утверждение доказывается следующим образом. Так как у равновесной диаграммы с $n < n_{s+1}$ клеток найдется хотя бы один столбец, такой, что $\lambda_j < \lambda_{(s+1)j}$, то, по лемме 4, количество выступов в ней меньше, чем $s + 1$. Далее, поскольку для равновесной диаграммы с $n > n_s$ размер единичной окрестности превосходит N_s , число выступов в ней $q \geq s$. Отсюда для числа выступов диаграммы имеем: $s \leq q < s + 1$, следовательно, $q = s$. □

Итак, в процессе формирования следующей оболочки число выступов в равновесной диаграмме должно оставаться неизменным. Согласно (5), величина окрестности диаграммы зависит, кроме количества выступов, еще и от их размеров. Поэтому для увеличения окрестности равновесного состояния должно увеличиваться количество длинных выступов в диаграмме. Длинными мы будем называть выступы, у которых $a_i = 1, b_i > 1$ или $a_i > 1, b_i = 1$. Вообще, так как у равновесных диаграмм только один из размеров выступов может быть больше единицы, мы в дальнейшем, там где это не приведет к путанице, будем любой из размеров выступов называть длиной.

Изменение окрестности равновесного состояния по сравнению с $\lambda_{(s)}$ обозначим $\Delta N(n) = N_{\max}(n) - N_s$.

Опишем здесь механизм построения оболочек, при котором увеличивается число длинных выступов в диаграмме.

В качестве исходной диаграммы возьмем $\lambda_{(s)}$. У этой диаграммы $\Delta N = 0$. Начнем прибавлять к ней клетки так, чтобы число выступов не изменялось, но как можно больше выступов становились длинными. Число добавленных клеток $n - n_s$ обозначим Δn . Первая клетка должна быть добавлена

с краю — в первый столбец или в нижнюю строчку. Тогда длина одного из выступов, а следом за ней и ΔN увеличатся на единицу. Равновесное состояние с $\Delta n = 1$ порождается одной из двух сопряженных друг другу диаграмм: $\{s + 1, s - 1, s - 2, \dots, 1\}$ и $\{s, s - 1, \dots, 1, 1\}$. Состояние с двумя элементами на внешней оболочке будет содержать два длинных выступа на краях. Соответствующее разбиение имеет вид: $\{s + 1, s - 1, s - 2, \dots, 1, 1\}$, — и сопряжено само себе. У него $\Delta N = 2$. Так, с добавлением к исходной диаграмме двух клеток емкость равновесного состояния возросла на два. Чтобы увеличить $N_{\max}(n)$ еще на единицу, нужно построить на нашей диаграмме третий длинный выступ. Для этого можно, например, последовательно прибавить две клетки к верхней части диаграммы, в первый и второй столбцы. Получившаяся диаграмма имеет вид: $\{s + 2, s, s - 2, s - 3, \dots, 1, 1\}$. У нее и у диаграммы, сопряженной ей, величина единичной окрестности будет $N_{\max} = N_s + 3$. Симметричным добавлением двух клеток с другой стороны диаграммы будет построен следующий длинный выступ. Получается, что на этом этапе длинные выступы пристраивались симметрично с двух сторон диаграммы (сверху и справа), и каждый раз для этого, а значит, и для увеличения емкости равновесного состояния на единицу, требовалось добавление двух клеток. Построение каждого из двух следующих длинных выступов потребует добавления трех клеток с каждой стороны диаграммы, и теперь ΔN составит 6. Далее для построения с одной стороны каждого последующего длинного выступа потребует добавления на единицу большего количества элементов. Выпишем последовательно те количества добавляемых элементов, которые приводят к увеличению ΔN на единицу: 1, 1, 2, 2, 3, 3, 4, 4,.... Соответствующее изменение ΔN с ростом Δn представлены в табл. 1.

Эта последовательность нарушится тогда, когда элементов на внешних оболочках станет достаточно для заполнения следующей, $s + 1$ -й, оболочки. Тогда все клетки, которые находились на оболочках более высокого уровня, переместятся с них на $s + 1$ -ю и мы получим состояние, которому соответствует разбиение: $\{s + 1, s, s - 1, \dots, 1\}$.

Таблица 1

Изменение величины единичной окрестности наиболее вероятного состояния ΔN с ростом числа элементов на внешних оболочках $\Delta n = n - n_s$

$\Delta n = n - n_s$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$\Delta N = N_{\max}(n) - N_s$	0	1	2	2	3	3	4	4	4	5	5	5	6

Из этих результатов легко получить зависимость ΔN от Δn :

$$\Delta N = [\sqrt{4\Delta n + 1} - 1]. \quad (11)$$

Конечная формула будет удобнее для использования, если все величины в ней будут выражаться через одну — число клеток диаграммы. Чтобы это условие было выполнено, выразим номер последней полностью заполненной оболочки s через n . Для $n = n_s$ имеем равенство:

$$s(s+1)/2 = n_s,$$

откуда находим $s = (\sqrt{8n_s + 1} - 1)/2$. Поскольку s должно оставаться целым и постоянным при $n_s \leq n < n_{s+1}$, для произвольного n от этого выражения следует взять целую часть. Окончательно получаем

$$s = \left[\frac{\sqrt{8n + 1} - 1}{2} \right].$$

Подставив все величины в $N_{\max}(n)$, получим формулу (8).

Литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика. Часть 1. Сер. Теоретическая физика. Т. V. М.: Наука, 1976.
2. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Статистическая физика. Часть 2. Теория конденсированного состояния. Сер. Теоретическая физика. Т. IX. М.: Наука, 1978.
3. Green H. S. A generalized method of field quantization // Phys. Rev. 1953. V. 90. No. 270.
4. Govorkov A. B. Does the existence of antiparticles forbid violations of statistics? // Mod. Phys. Lett. A. J. 1992. V. 7. No. 26. P. 2383–2388.
5. Greenberg O. W. Particles with small violations of fermi or bose statistics // Phys. Rev. D. J. 1991. V. 43. No. 12. P. 4111–4120.
6. Кейдж М., Чэнг А., Гирвин С., Холдейн Ф., Лафлин Р., Прендэж Р., Пруискен А., Таулесс Д., Клицинг К. Квантовый эффект Холла. М.: Мир, 1989.
7. Wilczek F. Quantum mechanics of fractional-spin particles // Phys. Rev. Lett. J. 1982. V. 49. No 14. P. 957–959.
8. Дорофеев Д. Л., Зон Б. А., Попков Ю. С. Новые механизмы формирования макросостояний в макросистемах // АИТ. 2008. Т. 2. № 63. С. 52–63.
9. Дорофеев Д. Л., Зон Б. А., Попков Ю. С. Учет априорной информации в парамакросистемах // АИТ. 2008. Т. 10. № 30. С. 19–30.
10. Макдональд И. Симметрические функции и многочлены Холла. М.: Мир, 1985.
11. Виленкин Н. Я. Комбинаторика. М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1969.
12. Берри Р. С., Смирнов Б. М. Фазовые переходы и сопутствующие явления в простых системах связанных атомов // УФН. 2005. Т. 175. № 4. С. 367–411.
13. Гульден Я., Джексон Д. Перечислительная комбинаторика. М.: Наука, 1990.
14. Каплан И. Г. Симметрия многоэлектронных систем. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1969.
15. Эндрюс Г. Теория разбиений. М.: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982.

Дорофеев Дмитрий Львович. Доцент Воронежского ГУ. К. ф.-м. н. Окончил Воронежский ГУ в 1991 г. Количество печатных работ: 33. Область научных интересов: статистическая физика, квантовая механика, теория макросистем. E-mail: dmitrii.dorofeev@gmail.com

Попова Александра Евгеньевна. Окончила Воронежский ГУ в 2010 г. Магистр физики. Область научных интересов: статистическая физика, квантовая механика, теория макросистем. E-mail: SashaPopova7891@gmail.com