

КОНФЕРЕНЦИИ И СИМПОЗИУМЫ

Принцип запрета и эволюция вещества в статистиках частиц с иерархической структурой*

М.Ю. Романовский

Строятся и исследуются статистики наиболее вероятных распределений по энергии в системах многих частиц, одни из которых содержатся (или ограничены) внутри других частиц, а также в системах частиц, ограниченных внутри других частиц, которые, в свою очередь, ограничены внутри третьих частиц. Статистики распределений таких частиц по максимальным и минимальным значениям энергии оказываются совпадающими с полученными в первоначальном комбинаторном решении. Результаты позволяют обосновать принцип запрета Паули, минимальность энерговыделения в различных процессах, отсутствие частиц с отрицательной энергией, а также описывают усложнение строения вещества.

Ключевые слова: наивероятнейшее распределение, распределение экстремальных значений, иерархические структуры, ограничение, принцип запрета Паули, усложнение материи

PACS numbers: 02.50.-r, 05.20-у, 12.40.Ee, 31.15.bt

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2025.05.040010>

Содержание

1. Введение (763).
2. О связи статистики частиц с аксиомами современной физики (764).
3. Комбинаторная задача определения наивероятнейших распределений по энергии частиц, ограниченных внутри других частиц (765).
 - 3.1. Распределение по энергии частиц нижнего уровня, ограниченных в частицах верхнего уровня — двухуровневая задача.
 - 3.2. Распределение по энергии частиц нижнего уровня, ограниченных в частицах промежуточного уровня, ограниченных в частицах верхнего уровня — трёхуровневая задача.
4. Задача на определение распределений по энергии минимального и максимального значений (769).
 - 4.1. Распределения максимальных значений в двухуровневой задаче.
 - 4.2. Распределения "истинно" минимальных значений в двухуровневой задаче.
 - 4.3. Распределения экстремумов в трёхуровневой задаче.
5. Применения (772).
 - 5.1. Доказательство (природа) принципа Паули.
 - 5.2. О наивероятнейшем энерговыделении в структурированных средах.
 - 5.3. Усложнение иерархии структур по мере остывания системы

- 5.4. О ничтожной вероятности обнаружения частиц с отрицательной энергией.
 6. Обсуждение результатов (777).
- Список литературы (778).

1. Введение

Принцип запрета некоторым частицам находиться в одном энергетическом состоянии, возможность концентрации других частиц в состояниях с малыми энергиями были получены в статистической физике благодаря априорным предположениям [1]. Эти принципы позволили строить феноменологию эволюции вещества и законов его взаимодействия без ответа на вопросы, откуда физически берутся эти запреты и возможности. Целесообразно рассмотреть — с точки зрения статистической физики — простейшие законы построения таких "протоструктур", начиная с систем неструктурированных и неразличимых частиц.

Известно [1, 2], что система тождественных неразличимых частиц с дискретным энергетическим спектром при естественных предположениях о конечном числе всех частиц и существовании средней энергии частицы даёт в качестве наивероятнейшей экспоненциальную плотность вероятности распределения нахождения частицы в определённом i -ом энергетическом состоянии ϵ_i вида $W(\epsilon_i) = 1/T_{\text{eff}} \exp(-\epsilon_i/T_{\text{eff}})$, где T_{eff} — нормировочный коэффициент, имеющий смысл некоторой средней энергии или эффективной температуры системы частиц. Назовём этот результат "задачей 0". Термодинамические величины и законы в такой системе бесструктурных частиц хорошо известны.

М.Ю. Романовский

- (1) Частное учреждение по обеспечению развития атомной отрасли "Наука и инновации", ул. Большая Ордынка 24, 119017 Москва, Российская Федерация
 - (2) Национальный центр физики и математики, ул. Парковая 1, стр. 3, 607182 Саров, Нижегородская обл., Российская Федерация
 - (3) Российский национальный исследовательский медицинский университет имени Н.И. Пирогова, ул. Островитянова 1, 117997 Москва, Российская Федерация
- E-mail: MYRomanovsky@rosatom.ru

Статья поступила 28 июля 2025 г.

* Статья написана на основе доклада, представленного на Научной сессии Отделения физических наук Российской академии наук, 21 мая 2025 г. (см. УФН 196 (7) 707 (2026)).

Более сложные системы, состоящие из неразличимых частиц, имеющих внутреннюю структуру, во-первых, модифицируют термодинамические соотношения, как, например, это происходит для плазмы [3], так и приводят к новым эффектам типа "отрицательного трения" [4] (такие частицы часто именуется "активными"). Поэтому естественно возникает вопрос, что будет происходить с распределениями частиц по энергии в самом общем случае — если определённые группы частиц отграничены от других, или одни частицы (назовём их частицами верхнего уровня) содержат другие (нижнего уровня, также неразличимые).

Эта задача также рассматривалась ранее (см., например, [1, 2]). При дополнительном предположении об *a priori* разном количестве частиц нижнего уровня внутри частиц верхнего уровня, наивероятнейшее распределение даётся большим каноническим ансамблем. Условие тождественности частиц верхнего уровня здесь не ставится. Назовем это "задачей 0". Дело не обязательно ограничивается частицами и распределениями по энергии — можно рассматривать, например, системы, имеющие внутри определённые структуры, которые оказывают влияние на внешние проявления системы, этом случае роль "распределения по энергии" частиц нижнего уровня играет распределение по какому-то свойству (или признаку) системы нижнего уровня.

Естественным является переход к более общей постановке задачи с учётом наблюдаемой неразличимости частиц верхнего уровня, назовем это "задачей 1". Здесь следует найти наивероятнейшие распределения частиц нижнего уровня по энергии. Нельзя исключить, что таких распределений может быть несколько. Во-первых, это предполагаемые "истинные" распределения по энергии частиц нижнего уровня в одной частице верхнего уровня. Следует при этом выяснить, являются ли они наблюдаемыми, и если да, то в каких экспериментах. Во-вторых, какие распределения будут наблюдаемыми, и в чём их отличие от истинных. Естественным пределом задачи 1 при наличии внутри частицы верхнего уровня только одной частицы нижнего (при определённых условиях) является задача 0.

Постановка задачи может быть и более сложной, когда частицы имеют внутреннюю структуру в виде других частиц, которые, в свою очередь, содержат внутри себя ещё и третьи частицы, это можно назвать задачей 2. Здесь также следует определить истинные и наблюдаемые наивероятнейшие распределения частиц нижнего уровня по энергии. Достаточно общепринятым является представление о частицах, заключённых в коробки (см., например, [1]). Последние могут быть заключены в некоторые внешние коробки, тогда получается задача 2. С определёнными допущениями примером задачи 2 также могут служить атомные ядра, состоящие из нуклонов, которые, в свою очередь, состоят из кварков.

Решение задачи 1 подсказывает комбинаторная проблема о количестве комбинаций при распределении одинаковых предметов по группам. Покажем также, что к тем же результатам приведёт рассмотрение распределения максимальных и минимальных значений по энергии частиц нижнего уровня в частицах верхнего уровня по выборке частиц верхнего уровня. Решение задачи 2 будет приведено далее. Мы в дальнейшем будем именовать задачу 1 и частицы в ней как двухуровневую или двухслойную, а задачу 2 соответственно — как трёхуровневую или трёхслойную.

Результаты обеих задач могут трактоваться как разделение частиц нижнего уровня на сорта (псевдочастицы) с разным статистико-механическим поведением, наблюдаемым в разных экспериментах. В комбинаторной задаче 1 сортов таких псевдочастиц оказывается 2, в задаче 2 — уже 4. При рассмотрении обеих задач на максимальное и минимальное распределение по энергии оказывается возможным связать возникающие в комбинаторных задачах константы, имеющие смысл некоторых химических потенциалов, с возможной сферой взаимодействия частиц верхнего уровня.

Для псевдочастиц, возникающих в одночастичных наблюдениях в обоих постановках — комбинаторной и на распределение максимального и минимального значений — непротиворечивым образом возникает принцип запрета Паули. В разделе 2 приводятся основные факты "работы" априорного принципа Паули.

При естественных предположениях о разном количестве частиц (молекул) вещества, могущих вступить в реакцию энерговыделения (горения, взрыва и др.) в силу их расположения на поверхности/внутри структуры, динамике доступа к реагирующим молекулам и очевидном вероятностном характере процесса целесообразно провести комбинаторную процедуру определения наивероятнейшего распределения энерговыделения. В некотором простом приближении энерговыделение определится одним параметром комбинаторной схемы. Наивероятнейшее распределение окажется совпадающим с распределением безусловно минимальных значений энерговыделения.

При постоянном характере величин химических потенциалов (энергии присоединения/отсоединения одной частицы более низкого уровня от частицы более высокого уровня) плотности вероятности распределений определяются только величиной T_{eff} , и при её уменьшении (естественном "остывании" системы частиц) становятся по форме одинаковыми, что будет интерпретировано как стабилизация вещества. В разных диапазонах энергии наивероятнейшими оказываются разные частицы, это будет обсуждено в разделе 5.

Оказывается также, что ряд полученных распределений описывают частицы, у которых отсутствуют состояния с отрицательной энергией, что может трактоваться как отсутствие античастиц.

2. О связи статистики частиц с аксиомами современной физики

Помимо простой больцмановской статистики неразличимых частиц, в квантовой механике (в её разделе "квантовая статистика") возникают и другие — статистика Ферми–Дирака и Бозе–Эйнштейна. Простые соотношения для числа частиц в соответствующем энергетическом состоянии получаются в предположении статистики Ферми–Дирака в том случае, что в этом энергетическом состоянии может находиться не более одной частицы, в предположении статистики Бозе–Эйнштейна — что в этом энергетическом состоянии может находиться любое количество (неразличимых) частиц. Вывод этого факта элементарен [1, 2].

Таким образом, для частиц, подчиняющихся статистике Ферми–Дирака (фермионов) априорно выполняется принцип запрета Паули. В. Паули шёл от спектроскопических экспериментов в магнитном поле, и свой

принцип сформулировал так [5]: "В атоме не может существовать двух или больше эквивалентных электронов, для которых значения всех четырёх квантовых чисел одинаковы. Если в атоме находится электрон, для которого все эти числа имеют определённое значение, то это состояние "занято"". Возникшая и быстро доказанная гипотеза наличия спина у электрона [6] потребовала от Паули физического обоснования этого запрета, что он и произвёл в своей работе [7] о связи спина со статистикой. В этой теореме Паули получил ставший классическим результат, что операторы поля частиц с целым спином не могут подчиняться фермионным соотношениям коммутации, так как это ведёт к нарушению принципа причинности. Операторы поля частиц с полуцелым спином не могут подчиняться бозонным соотношениям коммутации, так как это ведёт к отрицательным значениям полной энергии системы. Отсюда делалось заключение, что частицы с целым спином подчиняются статистике Бозе–Эйнштейна, частицы с полуцелым — статистике Ферми–Дирака.

В дальнейшем рассмотрение вопроса о статистике частиц происходило именно в приложении к спину. Вопрос совершенно очевидно не был закрыт в [7], и его обсуждение продолжается и до сих пор [8] в силу всеобъемлющего характера. Предпринимались попытки вывода принципа Паули [9], но наиболее интересными стали попытки ввести "силы притяжения" для частиц Бозе–Эйнштейна (бозонов) и "силы отталкивания" для фермионов [10] для очевидного классического объяснения как запрета Паули, так и "конденсата" бозонов в наинизших энергетических состояниях. Альтернативно вводилось дополнительное "давление" фермионов [11], которое оказалось отличным от давления бозонов (правда, для квантовых расчётов применялся метод Вентцеля–Крамерса–Бриллюэна, сходимость которого к реальному результату ещё нужно доказывать). Также исследовалась связь квантовых вероятностей и статистических вероятностей для разных статистик [12].

Для более сложных структурированных и/или иерархически организованных систем также предпринимались попытки расчётов их термодинамических величин через статистику. Например, такая структурированная среда — это так называемая "мягкая материя" [13]. Из-за сложной внутренней структуры частиц могут возникать различные свойства (не только распределения по энергии). Существуют системы с двумя уровнями (или слоями) иерархии — организации, которые изучаются как экспериментально, так и теоретически. Одна из них является примером мягкого вещества — концентрированных коллоидов звездообразных полимерных смесей [14, 15]. В этих средах потенциал взаимодействия между звездообразными и линейными полимерами имеет характер двойной показательной зависимости из-за двухуровневой структуры — ядра и оболочки в звездообразных полимерах. Потенциал взаимодействия линейных частиц и частиц — "бутылочных ёршиков" [16], имеет тот же характер.

Другой пример подобной двухслойной системы рассмотрен в [17]. Есть и альтернативные примеры проблем, приводящие к возникновению "многослойных" иерархических систем с реализацией принципа запрета состояний, например, в химии [18]. Таким образом, возникает необходимость описания вышеприведённых систем с целью обобщения известных подходов статистической физики.

3. Комбинаторная задача определения наивероятнейших распределений по энергии частиц, ограниченных внутри других частиц

3.1. Распределение по энергии частиц нижнего уровня, ограниченных в частицах верхнего уровня — двухуровневая задача

Задача 1 в комбинаторной постановке впервые рассматривалась в [19]. Итак, пусть имеется набор $\{m_i\}$ частиц верхнего уровня таких, что в m_1 неразличимых частицах содержится по p_1 частиц нижнего уровня¹, в m_2 — по p_2 , и так далее вплоть до N -ой частицы нижнего уровня. Здесь n — общее количество различных расстановок частиц нижнего уровня по частицам верхнего уровня. Полное количество N частиц нижнего уровня

$$N = \sum_{i=1}^n m_i p_i \quad (1)$$

распределено по всего M частицам верхнего уровня

$$M = \sum_{i=1}^n m_i. \quad (2)$$

При этом общее количество перестановок всех частиц нижнего уровня по всем частицам верхнего уровня есть W_{10} [19]:

$$W_{10} = \frac{N!}{\prod_{i=1}^n (p_i!)^{m_i}}, \quad (3a)$$

а при условии упомянутой неразличимости частиц верхнего уровня

$$W'_1 = \frac{N!}{\prod_{i=1}^n (p_i!)^{m_i} \prod_{i=1}^n (m_i!)}. \quad (3b)$$

Обычно пользуются выражением $\ln W'_1$:

$$\ln W'_1 = \ln(N!) - \sum_{i=1}^n m_i \ln(p_i!) - \sum_{i=1}^n \ln(m_i!). \quad (4a)$$

Заметим, что, если здесь положить $m_i \equiv 1$, то для задачи вычисления наивероятнейшего распределения, определяемого условиями (1), (2), (3b) мы имеем формулировку, аналогичную формулировке задачи 0².

Пусть каждая частица нижнего уровня может находиться в состоянии с какой-то энергией ϵ_i . Для отыскания наивероятнейшего распределения по этим энергиям при произвольном m_i следует учесть, что, кроме выражения (3b) или (4a), и связей (1) и (2) ещё имеется условия конечности полной энергии всей системы частиц

$$E = \sum_{i=1}^n p_i m_i \epsilon_i, \quad (5)$$

¹ Если вместо "частиц верхнего уровня" читать "связок", вместо "частиц нижнего уровня" читать "грибов", то получится формулировка задачи о сушке грибов [20], или задача о циклических перестановках [21].

² Если в задаче о получении большого канонического ансамбля допустить варьирование N , то её можно свести к задаче 1. Это не было сделано (см., например, [1]). Заметим, что на формуле (3b) остановились как в [1], так и в известном руководстве [22]. Почему это было сделано так (и не сделано очевидное дальнейшее) — неясно.

которое практически означает, что существует средняя "энергия" одной частицы нижнего уровня $\langle \epsilon_i \rangle$.

Решим задачу 1. Для этого сначала образуем вариацию от выражения (4а) с учётом простейших связей (1), (2) и (5). Для этого в уравнение (4а) надо в правую часть добавить члены $\alpha N + \beta M + \gamma E$, с лагранжевыми множителями α , β и γ :

$$\ln W_1 = \ln W'_1 + \alpha N + \beta M + \gamma E = \ln(N!) - \sum_{i=1}^n m_i \ln(p_i!) - \sum_{i=1}^n \ln(m_i!) + \alpha \sum_{i=1}^n m_i p_i + \beta \sum_{i=1}^n m_i + \gamma \sum_{i=1}^n p_i m_i \epsilon_i. \tag{4б}$$

Используем также первое приближение формулы Стирлинга по $m!$ и $p!$, и произведём варьирование δp_i и δm_i . Тогда получим для вариации наивероятнейшего распределения $\ln W_1$:

$$\delta \ln W_1 = \sum_{i=1}^n [-(\delta m_i) p_i (\ln p_i - 1) - (\delta p_i) m_i \ln p_i - (\delta m_i) \ln m_i + \alpha (\delta m_i) p_i + \alpha m_i (\delta p_i) + \beta (\delta m_i) + \gamma (\delta m_i) p_i \epsilon_i + \gamma m_i (\delta p_i) \epsilon_i] = 0. \tag{6}$$

Соберём члены при независимых вариациях δp_i и δm_i . Для первой вариации, сократив все слагаемые на ненулевые величины δp_i и m_i , получим первое уравнение системы:

$$\ln p_i = \alpha + \gamma \epsilon_i. \tag{7}$$

Для второй вариации, сократив на ненулевую величину δm_i и используя уравнение (7), получим:

$$\ln m_i = \beta + p_i. \tag{8}$$

Уравнения (7) и (8) дают решение задачи 1.

Решение уравнения (7) точно соответствует обычному представлению Больцмана – Гиббса (см. Введение, [1, 2]) и решению задачи 0. Отличия же от решения задачи 0' заключаются в том, что в задаче 0' не осуществляется варьирование по числу частиц верхнего уровня. Решения системы (7) и (8) очевидны:

$$p_i = \exp(\alpha + \gamma \epsilon_i) \tag{9}$$

и, в свою очередь,

$$m_i = \exp(\beta + \exp(\alpha + \gamma \epsilon_i)). \tag{10}$$

Таким образом, истинная функция наивероятнейшего распределения частиц нижнего уровня по энергии p_i оказывается точно такой же, как и наивероятнейшая функция распределения в задаче 0 — это плотность вероятности найти частицы нижнего уровня в энергетическом состоянии ϵ_i .

Однако, эта функция не является прямо наблюдаемой и прямо измеримой. Для того, чтобы измерить эту функцию распределения, следует иметь прибор, измеряющий p_i в зависимости от ϵ_i . Сделать это в какой-то одной определённой частице верхнего уровня нельзя в силу неразличимости частиц m_i .

Какие функции будут наблюдаемыми? Для выяснения этого перепишем систему (7) и (8), образовав простейшие линейные комбинации уравнений:

$$\ln p_i \pm \ln m_i = \alpha \pm \beta + \gamma \epsilon_i \pm p_i = \alpha \pm \beta + \gamma \epsilon_i \pm \exp(\alpha + \gamma \epsilon_i), \tag{11}$$

где мы воспользовались выражением (10). Таким образом, рассматриваться должны две функции — $p_i m_i$ и p_i / m_i , которые являются решениями системы (7) и (8).

Для дальнейшего анализа нужно определить константы в (7) и (8). Определим константу β в задаче 1. Величина m_i изменяется от некоторого положительного значения $\exp(\beta + \exp(\alpha))$ при $\epsilon_i = 0$ до $\exp(\beta)$ при $\epsilon_i \rightarrow \infty$. При больших ϵ_i ввиду очевидной отрицательности γ

$$\exp(\exp(\alpha + \gamma \epsilon_i)) \approx 1 + \exp(\alpha + \gamma \epsilon_i).$$

По физическому смыслу задачи при больших энергиях частицы нижнего уровня вряд ли может быть много частиц верхнего уровня, содержащих такую энергичную частицу нижнего уровня, и естественным образом для задачи 1 в первом приближении можно положить, что $\beta = 0$ при $\epsilon_i \rightarrow \infty$, и m_i стремится к 1 при $\epsilon_i \rightarrow \infty$, т.е., как уже указывалось, $\beta = 0$.

Очевидно, что функция $p_i m_i$ потенциально должна наблюдаться, поскольку она описывает распределение числа частиц (1). Эта функция значительно отличается от p_i (рис. 1, определения функций 1–7 на этом рисунке см. ниже):

$$p_i m_i = \exp(\alpha + \gamma \epsilon_i) \exp(\exp(\alpha + \gamma \epsilon_i)). \tag{12}$$

Нормированная на 1 функция этого распределения, описывающая некоторую плотность вероятности

$$(p_i m_i)_{\text{норм}} = |\gamma| \frac{\exp(\alpha + \gamma \epsilon_i) \exp(\exp(\alpha + \gamma \epsilon_i))}{\exp(\exp(\alpha)) - 1}, \tag{12а}$$

которая для $\alpha = 0,5, 1,5$ и $2,5$ приведена на рис. 1 в виде штриховых кривых. При увеличении α , т.е., например,

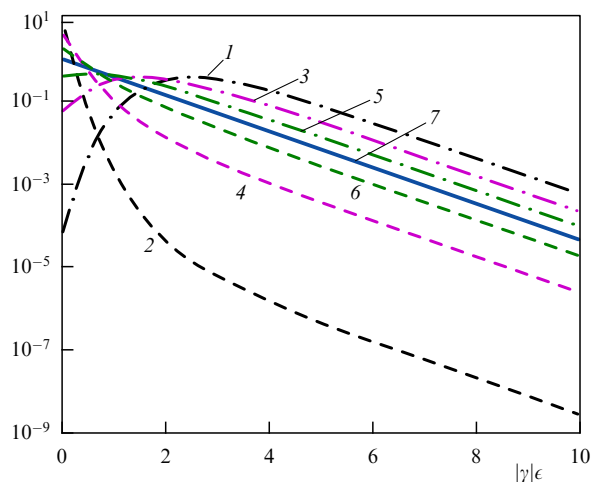


Рис. 1. Нормированные функции распределения $p_i m_i$ (штриховые кривые 2, 4 и 6) и p_i / m_i (штрих-пунктирные кривые 1, 3, 5) при различных параметрах нормировки α . Для кривых 1 и 2 $\alpha = 2,5$, для кривых 3 и 4 $\alpha = 1,5$, для кривых 5 и 6 $\alpha = 0,5$, а также $p_i = |\gamma| \exp(\gamma \epsilon_i)$ (сплошная прямая 7). Принято $|\gamma| = 1$. Полулогарифмический масштаб.

при уменьшении температуры при постоянном $\alpha/|\gamma|$, значение функции (12а) в нуле по сравнению с прямой 7 резко возрастает, а асимптотическое при умеренных и больших ϵ_i — очень сильно падает (см. рис. 1). Таким образом, плотность вероятности $p_i m_i$ (или нормированная плотность вероятности $(p_i/m_i)_{\text{норм}}$) описывает, по-видимому, конденсацию частиц нижнего уровня при малых энергиях, которая оказывается очень значительной при низких температурах. Наблюдаемость этой функции лучше всего реализуется, по-видимому, в многочастичных эффектах типа фазовых переходов, когда "все" частицы (верхнего уровня) участвуют в процессе. Здесь ситуация не зависит качественно от величины α .

Вторая функция, являющаяся решением (11) — функция p_i/m_i — это распределение p_i в расчёте на одну частицу верхнего уровня из набора m_i , она также представлена на рис. 1. Условия её наблюдения очевидно отличаются от $p_i m_i$. По-видимому, наиболее близкими по физическому смыслу будут одночастичные измерения энергетических спектров (в широком смысле спектроскопические наблюдения).

Рассмотрим распределение частиц нижнего уровня по энергиям в "среднем" на одну частицу верхнего уровня p_i/m_i :

$$\frac{p_i}{m_i} = \exp(\alpha + \gamma \epsilon_i) \exp(-\exp(\alpha + \gamma \epsilon_i)). \quad (13)$$

Здесь очевидно, что $|\gamma|$ имеет смысл некоторой "обратной эффективной температуры" системы; нормировка на 1 распределения (13) даёт множитель перед (13) $|\gamma|/(1 - \exp(-\exp(\alpha)))$, что уже при умеренном и тем более большом α практически совпадает с $|\gamma|$. Функция (13) достигает максимума при $\epsilon_i = \alpha/|\gamma|$, а, поскольку α является лагранжевым множителем при полном числе частиц (1), физический смысл α (а точнее, $\alpha/|\gamma|$) может состоять в том, что это химический потенциал частиц нижнего уровня μ , а $\alpha = |\gamma|\mu$. Заметим, что плотность вероятности (13) совпадает с плотностью вероятности распределения Гумбеля (типа I) [23].

Для удобства расчётов приведём нормированное на 1 распределение плотности вероятности p_i/m_i :

$$\left(\frac{p_i}{m_i}\right)_{\text{норм}} = \frac{|\gamma|}{1 - \exp(-\exp(\alpha))} \frac{\exp(\alpha + \gamma \epsilon_i)}{\exp(\exp(\alpha + \gamma \epsilon_i))}. \quad (13a)$$

На рисунке 2 приведена функция (13а) для нескольких значений α с разными эффективными температурами $1/|\gamma|$. Вместе с возрастанием α (кривые 4–6 соответственно) нормировочный множитель в (13а) постепенно стремится к $|\gamma|$. Для малых эффективных температур (больших $|\gamma|$) это происходит практически сразу, и распределение $(p_i/m_i)_{\text{норм}}$ просто транслируется вдоль оси абсцисс в неизменном виде. На рисунке 2 видно значительное "сужение" максимумов (13а) при увеличении $|\gamma|$, т.е. при уменьшении эффективной температуры. Выявленный максимум распределения совпадает с величиной химического потенциала при $\epsilon_i = \mu = \alpha/|\gamma|$. Это означает, по-видимому, что при измерениях "на одну частицу" верхнего уровня частицы нижнего уровня могут присоединяться к (или отсоединяться от) частице верхнего уровня только в энергетические состояния, близкие μ . При понижении температуры ширина функции распределения уменьшается, и при малых темпера-

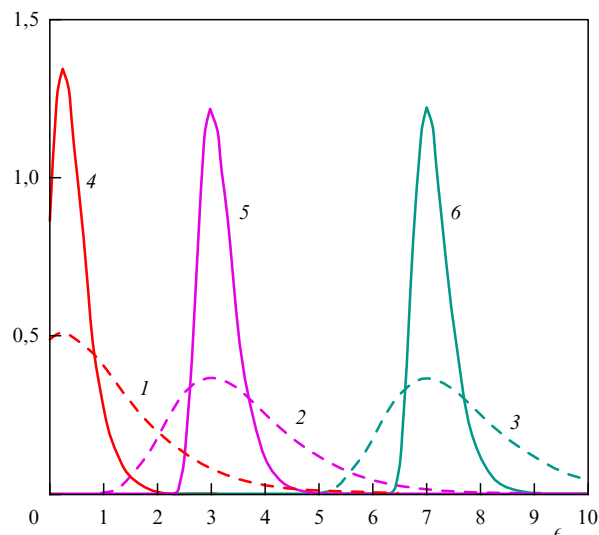


Рис. 2. Нормированные на 1 функции от ϵ_i плотности вероятности распределения $(p_i/m_i)_{\text{норм}}$ (13а) при $\alpha = 0,5, 3, 7$. Для штриховых кривых 1–3 $|\gamma| = 0,3$, для сплошных кривых 4–6 $|\gamma| = 1$. Равномерный масштаб.

турах функция распределения может стать настолько узкой, что в это состояние "поместится" уже не более одной частицы нижнего уровня.

Таким образом, двухступенчатая иерархическая система частиц, в которой частицы нижнего уровня отграничены в частицах верхнего уровня, распадается в комбинаторном рассмотрении на 2 сорта частиц нижнего уровня. По-видимому, эти сорта должны наблюдаться в разных экспериментах — на коллективное и одночастичное поведение. Первые частицы могут конденсироваться в состояния с малыми энергиями. Вторые — занимать состояния, характеризующиеся энергией присоединения (или отсоединения) к (от) системе (системы) этих частиц, т.е. в наивном приближении величиной химического потенциала частиц нижнего уровня внутри таких "верхних" частиц, а в силу узости функции плотности вероятности распределения по энергии — только эти состояния.

3.2. Распределение по энергии частиц нижнего уровня, отграниченных в частицах промежуточного уровня, отграниченных в частицах верхнего уровня — трёхуровневая задача

В комбинаторной постановке рассмотрим задачу 2 [19]. Как указывалось в разделе 1, возможна постановка задачи о распределении по энергиям частиц нижнего уровня, содержащихся в наборе частиц среднего уровня, которые, в свою очередь, содержатся в наборе частиц верхнего уровня. На всех трёх уровнях частицы являются неразличимыми³. Обозначим количество частиц нижнего уровня, содержащихся в частице среднего уровня через p_i , количество частиц среднего уровня с таким количеством частиц нижнего уровня в частицах среднего уровня m_i , и количество частиц верхнего уровня, в которые сложены частицы среднего уровня в количестве m_i через t_i . В этом случае полное количество комбинаций

³ На языке обобщённой "задачи о сушке грибов" это будет подсчёт распределения длин связок грибов, которые, в свою очередь, объединены в пучки разной величины. Неразличимыми теперь являются не только связки, но и пучки, не говоря уже о самих грибах.

распределений частиц нижнего уровня по всем частицам среднего уровня, и последних по частицам верхнего уровня запишется как

$$W'_2 = \frac{N!}{\prod_{i=1}^n (p_i!)^{m_i t_i} \prod_{i=1}^n (m_i!)^{t_i} \prod_{i=1}^n (t_i!)} . \quad (14)$$

Здесь n — снова полное число различных расстановок частиц нижнего уровня по частицам среднего уровня, а тех — по частицам верхнего уровня. Естественно определяются теперь общее количество частиц нижнего уровня

$$N = \sum_{i=1}^n m_i p_i t_i \quad (15)$$

общее количество частиц среднего уровня

$$M = \sum_{i=1}^n m_i t_i \quad (16)$$

и общее количество частиц верхнего уровня

$$T = \sum_{i=1}^n t_i . \quad (17)$$

Выражение для полной энергии соответствует

$$E = \sum_{i=1}^n p_i m_i t_i \epsilon_i . \quad (18)$$

По общему правилу образуем логарифм от этого количества расстановок

$$\ln W'_2 = \ln(N!) - \sum_{i=1}^n m_i t_i \ln(p_i!) - \sum_{i=1}^n t_i \ln(m_i!) - \sum_{i=1}^n \ln(t_i!) . \quad (19)$$

Соответственно, варьироваться должна величина (19) с наложенными связями (15)–(18) с необходимыми множителями Лагранжа α , β , γ , Δ , аналогичная (46):

$$\ln W_2 = \ln W'_2 + \alpha N + \beta M + \gamma E + \Delta T . \quad (20)$$

Переменные варьирования теперь p_i , m_i , t_i . При варьировании по p_i получаем первое уравнение, точно совпадающее с уравнением (7) (и с решением задачи 0):

$$\ln p_i = \alpha + \gamma \epsilon_i . \quad (21)$$

Варьируя (20) по m_i и используя (21), имеем уравнение, точно совпадающее с уравнением (8):

$$\ln m_i = \beta + p_i . \quad (22)$$

Наконец, варьируя (20) по t_i и используя (21) и (22), имеем третье уравнение задачи 2:

$$\ln t_i = \Delta + m_i . \quad (23)$$

Сделаем некоторые замечания относительно величин β и Δ . Последняя входит во все выражения как простой множитель, т.е. нужна только в случае какой-то специальной нормировки, в первом же приближении её можно считать равной нулю, хотя естественным было бы $\Delta = -1$, тогда t_i стремилась бы к 1 при $\epsilon_i \rightarrow \infty$ (см. выше). Величину β в задаче 2 для начала можно считать совпадающей с β из задачи 1, т.е. тоже равной нулю. Случай неравной нулю величины β будет рассмотрен ниже.

Создадим, как в задаче 1, простейшую линейную комбинацию уравнений (21)–(23):

$$\ln p_i \pm \ln m_i \pm \ln t_i = \alpha \pm \beta \pm \Delta + \gamma \epsilon_i \pm p_i \pm m_i$$

и воспользуемся решениями (22) и (23). Тогда

$$\ln p_i \pm \ln m_i \pm \ln t_i = \alpha \pm \beta \pm \Delta + \gamma \epsilon_i \pm \exp(\alpha + \gamma \epsilon_i) \pm \exp(\beta + \exp(\alpha + \gamma \epsilon_i)) . \quad (24)$$

По аналогии с задачей 1, решениями (24) и функциями распределения теперь являются выражения $p_i m_i t_i$, $p_i t_i / m_i$, $p_i / m_i t_i$, а также $p_i m_i / t_i$. Первая функция описывает рассмотренные многочастичные измерения с эффектом конденсации частиц при малых энергиях, ещё более сильной, чем аналогичная конденсация в задаче 1 (рис. 3). Вторая функция также описывает эффект конденсации частиц нижнего уровня, но он выражен слабее, чем для первой функции — ср. кривые 3 и 4 с кривыми 1 и 2 на рис. 3. Третья описывает некоторую, измеренную на одну частицу среднего уровня и на одну частицу верхнего уровня, функцию, имеющую выраженный максимум. Теперь, однако, этот максимум не совпадает с величиной α даже при нулевой β , а превосходит её: для $p_i / m_i t_i$ примерно на 1 в условиях рис. 3 (соответствует примерно одной единице эффективной температуры) (см. кривые 5 и 6).

Последняя функция — $p_i m_i / t_i$ является плотностью вероятности распределения $\exp(\exp(\beta)) / t_i$, если аргумент последней — энергию — распространить на всю отрицательную полуось. Нормированное распределение этой плотности вероятности для положительного значения аргумента есть

$$\left(\frac{p_i m_i}{t_i} \right)_{\text{norm}} = \frac{\exp(\alpha + \gamma \epsilon_i) \exp(\beta + \exp(\alpha + \gamma \epsilon_i)) \exp(-\exp(\beta + \exp(\alpha + \gamma \epsilon_i)))}{\exp(-\exp(\beta)) - \exp(-\exp(\beta + \exp(\alpha)))} . \quad (25)$$

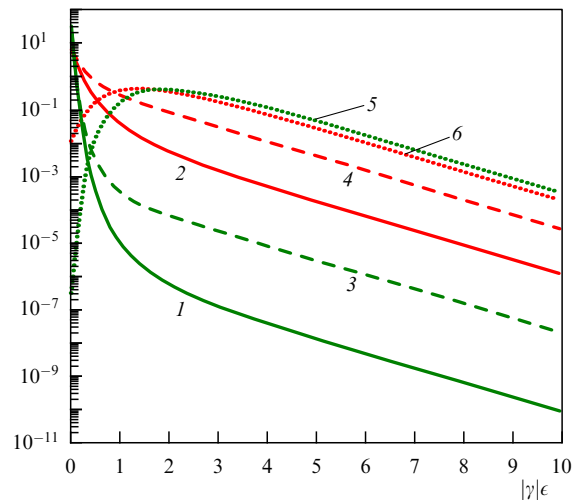


Рис. 3. Нормированные на 1 функции от ϵ_i плотности вероятности распределения $p_i m_i t_i$ (кривая 1 для $\alpha = 1$ и кривая 2 для $\alpha = 0,5$), $p_i t_i / m_i$ (кривая 3 для $\alpha = 1$ и кривая 4 для $\alpha = 0,5$), $p_i / m_i t_i$ (кривая 5 для $\alpha = 1$ и кривая 6 для $\alpha = 0,5$). Полулогарифмический масштаб, $|\gamma|$ принята равной 1.

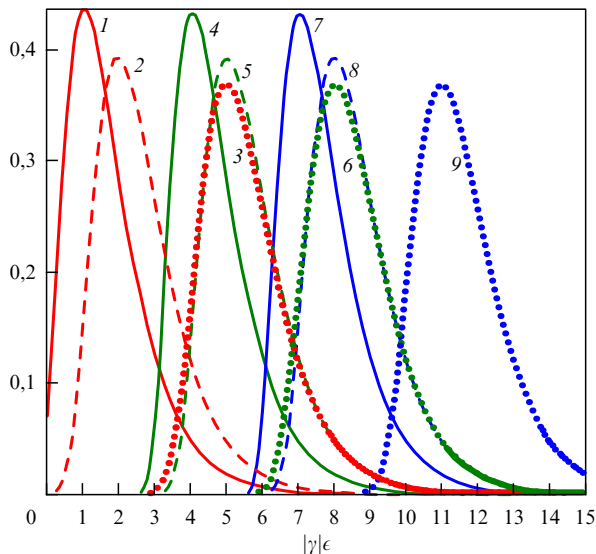


Рис. 4. Нормированные на 1 функции от ϵ_i плотности вероятности распределения $(p_i m_i / t_i)_{\text{norm}}$ (25): для сплошных кривых 1, 4 и 7 пары величин $\alpha = 0, \beta = 1$; $\alpha = 3, \beta = 1$; $\alpha = 6, \beta = 1$ соответственно, для штриховых кривых 2, 5 и 8 пары величин $\alpha = 0, \beta = 2$; $\alpha = 3, \beta = 2$; $\alpha = 6, \beta = 2$ соответственно, для точечных кривых 3, 6 и 9 пары величин $\alpha = 0, \beta = 5$; $\alpha = 3, \beta = 5$; $\alpha = 6, \beta = 5$ соответственно. Для всех кривых $|\gamma| = 1$. Равномерный масштаб.

Так же, как и для задачи 1, функция (25) является некоторой измеренной на одну частицу верхнего уровня "средней" функцией.

На рисунке 4 представлено поведение нормированной плотности вероятности распределения (25) в зависимости от лагранжевых множителей α и β . Максимум функции $p_i m_i / t_i$ при $\alpha \geq 1$ с большой точностью совпадает с величиной $|\gamma| \epsilon_i = \alpha + \beta$, поэтому величину β можно "наивно" трактовать как химический потенциал частицы среднего уровня в частице верхнего уровня (для α трактовка следует из задачи 1). При такой трактовке очевидно, что полный химический потенциал частицы нижнего уровня в частице верхнего уровня в задаче 2 складывается из двух химических потенциалов соответственно частицы нижнего уровня в частице среднего уровня и частицы среднего уровня в частице верхнего уровня. Этот факт сразу виден из рис. 4 — максимумы плотностей вероятности кривых 2, 3, 5, 6, 8 и 9 соответствуют сумме $\alpha + \beta$.

При $0 \leq \alpha < 1$ максимум функции $p_i m_i / t_i$ лишь несколько превышает величину $\alpha + \beta$ (см. рис. 4 кривые 1, 4 и 7). Для остальных кривых это совпадение уже выполняется с точностью до $\exp(-2(\alpha + \beta))/2$. Также из рис. 4 следует, что разные химические потенциалы (пропорциональные α и β) в сумме составляющие одинаковые величины, определяют плотности вероятности, очень схожие друг с другом (кривые 3 и 5, а также 6 и 8 на рис. 4).

Из функции распределения вероятности $\exp(\exp(\beta))/t_i$ можно получить только одну из четырёх функций плотности вероятности — $p_i m_i / t_i$, к ней мы вернёмся в следующем разделе.

Таким образом, задача 2, описывающая трёхуровневую иерархическую систему частиц, даёт расщепление поведения частиц нижнего уровня на 4 типа. Из них 2 типа описывают конденсирующиеся в состояния с малыми значениями энергии частицы. Один тип частиц, описы-

ваемых функцией плотности вероятности $p_i m_i / t_i$, весьма схож с типом частиц, описываемых функцией p_i / m_i в задаче 1. В наивном представлении этот тип (как и схожий с ним в задаче 1), возможно, даёт "нормальные" связанные частицы.

4. Задача на определение распределений по энергии минимального и максимального значений

4.1. Распределения максимальных значений в двухуровневой задаче

Задача 1 допускает другую постановку. В ней процесс решения и получаемые результаты, во-первых, совпадают с продемонстрированными выше, а, во-вторых, гораздо больше проясняют смысл полученных результатов [24].

Будем считать, что задача 0 теперь обобщается таким образом, что имеется плотность вероятности распределения по энергиям p_i частиц нижнего уровня внутри каждой частицы верхнего уровня (или распределение внутри коробки, или распределение связок грибов по длине) из набора m_i . Считая теперь этот набор m_i выборкой, определим функцию распределения (и затем плотность вероятности) максимального значения p_i по всем выборкам m_i . Будем придерживаться процедуры [24].

Обозначим переменную функции плотности вероятности распределения p_i как $|\gamma| \epsilon_i = x$, величина x изменяется в пределах от 0 до $+\infty$ ⁴. Эта функция распределения $F(x)$ есть, естественно, $F(x) = 1 - \exp(-x)$. Вероятность найти максимальное значение в выборке m_i определяется выражением [24]

$$m_i [1 - F(x_{\text{im}})] = 1, \quad (26)$$

где x_{im} — характеристическое максимальное значение. Из (26) следует, что

$$x_{\text{im}} = \ln m_i \quad \text{и/или} \quad \frac{\exp(x_{\text{im}})}{m_i} = 1. \quad (27)$$

Функцией распределения $F_m(x)$ наибольшего значения во всей m_i выборкам будет, очевидно, функция $F(x)$, возведённая в степень m_i [24]. Тогда, используя второе соотношение (27) и предельный переход, получим

$$F_m(x) = \left(1 - \frac{\exp(-(x - x_{\text{im}}))}{m_i}\right)^{m_i} \xrightarrow{m_i \rightarrow \infty} \exp(-\exp(-(x - x_{\text{im}}))). \quad (28)$$

Дифференцируя предельную функцию распределения (28), получаем плотность вероятности p_i / m_i , в которой

⁴Заметим, что перенос "основного состояния" плотности вероятности p_i из нуля в отрицательную величину $-\epsilon_0$ приводит только к простому сдвигу переменной ϵ_i , которая теперь изменяется от $-\epsilon_0$ до $+\infty$. Плотности вероятности, полученные в задаче 1, теперь могут быть записаны как $|\gamma|(\pm \exp(\exp(\pm \alpha)) \mp 1)^{-1} \exp(\alpha + \gamma(\epsilon_i + \epsilon_0)) \times \exp(\pm \exp(\alpha + \gamma(\epsilon_i + \epsilon_0)))$ для $(p_i m_i)_{\text{norm}}$ (верхний знак) и $(p_i / m_i)_{\text{norm}}$ (нижний знак) соответственно. Величины α могут принимать здесь и отрицательные значения, которые, по сравнению с рассмотренными в предыдущем разделе, для получения тех же функций плотностей вероятности просто сдвигаются на $-\epsilon_0$. Все получаемые ниже результаты остаются теми же самыми.

$x_{im} = \alpha$, что соответствует нормировке больцман – гиббсовского распределения

$$m_i \exp(-x) = \exp(- (x - \ln m_i))$$

на число частиц верхнего уровня m_i .

Таким образом, задача определения плотности вероятности распределения максимальных значений функций p_i по выборкам $\{m_i\}$ в двухуровневой задаче даёт ровно тот же результат, что и задача 1 определения наивероятнейшей плотности вероятности p_i/m_i . Лагранжева константа α в последней совпадает с величиной $x_{im} = \ln m_i$, что позволяет сделать некоторые физические обобщения.

Совпадение нормированного на эффективную температуру химического потенциала α комбинаторной задачи с характеристическим средним [23, 24] задачи на распределение максимальных значений ограничивает величину m_i , показывая "сферу взаимодействия" частиц верхнего уровня, т.е. ту сферу, вне которой частицы верхнего уровня из этой сферы уже не взаимодействуют. Здесь содержатся зачатки разделения взаимодействий на коротко- и дальнедействующие, по-видимому, при больших (начальных) температурах $T_{эф}$ дальнее действие отсутствует.

4.2. Распределения "истинно" минимальных значений в двухуровневой задаче

Рассмотрим теперь по аналогичной схеме функцию $p_i m_i$. Функция m_i в отличие от $1/m_i$ функцией распределения никакой случайной величины не является.

Будем считать, что комбинаторная задача теперь обобщается таким образом, что имеется плотность вероятности распределения групп p_i частиц нижнего уровня внутри каждого тела (частицы верхнего уровня) из набора m_i . Считая теперь этот набор m_i выборкой, определим функцию распределения (и затем плотность вероятности) минимального значения p_i по всем выборкам m_i . Будем придерживаться процедуры [23, 24].

Рассмотрим функцию $p_i m_i$. Известно [23], что функция плотности вероятности распределения минимальных значений p_i в выборке m_i (или распределение по энергии частиц нижнего уровня в частицах верхнего уровня) есть $m_i \exp(m_i(\alpha - x))$ (мы ввели переменную $|\gamma|\epsilon_i = x$).

Построим новую функцию плотности вероятности по следующей схеме: сначала возьмем вышеуказанное распределение минимального значения, оно может реализоваться в любом конкретном случае по всей выборке m_i (в любой из частиц верхнего уровня). Поскольку нам безразлично, в какой реализации это произойдет (в какой частице верхнего уровня будет), мы возьмем эту плотность вероятности со статистическим весом комбинаторных перестановок с повторением, т.е. с $1/(m_i!)$. Это даст член $[(m_i - 1)!]^{-1} \exp(m_i(\alpha - x)) = \exp(\alpha - x)[(m_i - 1)!]^{-1} \times \exp((m_i - 1)(\alpha - x))$ — и он будет первым членом нашей будущей суммы — финального значения некоторой функции плотности вероятности.

В неполных на одно тело $m_i - 1$ реализациях (частицах верхнего уровня) плотность вероятности распределения минимального значения будет $(m_i - 1) \times \exp((m_i - 1)(\alpha - x))$. Мы возьмём эту функцию с весом, по тем же самым соображениям, $1/[(m_i - 1)!]$, получим член будущей суммы и вклад в некоторую функцию плотности вероятности $[(m_i - 2)!]^{-1} \exp((m_i - 1)(\alpha - x)) = \exp(\alpha - x)[(m_i - 2)!]^{-1} \exp((m_i - 2)(\alpha - x))$, и проде-

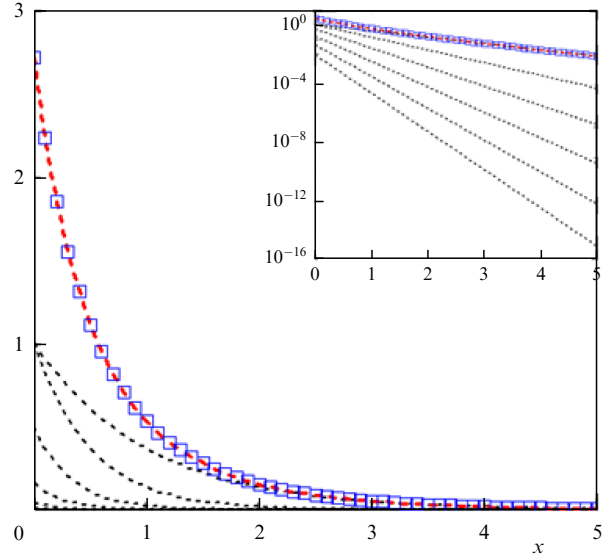


Рис. 5. Функция $\exp(-x) \exp(\exp(-x))$ (кривая из открытых квадратов) в сравнении с суммой функций $\exp(-x) \sum_{k=0}^5 \exp(-kx)/k!$ (жирная верхняя из штриховых кривых). Шесть нижних штриховых кривых — функции $\exp(-x) \exp(-kx)/k!$, k изменяется от 0 до 5. Основной рисунок, равномерные координаты. На врезке — то же в полулогарифмическом масштабе.

лаем эту процедуру в общей сложности $m_i - 1$ раз. Все полученные функции плотности вероятности при предельном переходе

$$\exp(\alpha - x)[(m_i - k')!]^{-1} \exp((m_i - k')(\alpha - x)) \xrightarrow{m_i - k' = k} \exp(\alpha - x)(k!)^{-1} \exp(k(\alpha - x))$$

дадут в сумме некоторую искомую функцию плотности вероятности

$$f(x) = \lim_{m_i \rightarrow \infty} \left[\exp(\alpha - x) \sum_{k=0}^{m_i-1} \frac{\exp(k(\alpha - x))}{k!} \right] \rightarrow \exp(\alpha - x) \exp(\exp(\alpha - x)). \tag{29}$$

Функция $p_i m_i$ точно совпадает с $f(x)$ при $\alpha = 0$ (рис. 5). Практически эта функция $f(x)$ представляет собой плотность вероятности минимальных значений p_i , получаемых в каждой из реализаций выборки m_i (энергия частицы нижнего уровня принимает минимальное значение в частице верхнего уровня при условии того, что в остальных реализациях также принимается минимальное значение). По-видимому, это — прямое свидетельство того факта, что $f(x)$ (или $p_i m_i$) описывает некоторое коллективное поведение частиц верхнего уровня, а также и частиц нижнего уровня в упомянутых частицах верхнего уровня.

Заметим важное отличие $f(x)$ от p_i/m_i . Последняя описывает плотность распределения вероятности для "нормальной" частицы нижнего уровня иметь определённую энергию, которая является максимальной в наборе частиц верхнего уровня. В каждой из частиц верхнего уровня (в каждой реализации из выборки) результат — распределение максимального значения — один и тот же, хотя, конечно, он определяется всей выборкой. Для функции $f(x)$ (или, вообще говоря, для функции $p_i m_i$) результат для каждой реализации принципиально различен. Это может означать, что система частиц верхнего

уровня с такими частицами нижнего уровня представляет собой некоторую коллективную систему, где частицы нижнего уровня в частице верхнего уровня как-то "чувствуют" друг друга. Таким образом, в этом случае отграниченность определяет ещё и какое-то (коллективное?) взаимодействие между этими частицами. Это — более сильное утверждение, чем то, которое требуется для описания "нормальных" частиц функцией p_i/m_i — здесь отграниченность приводит только к наблюдению максимальных значений распределения p_i . Заметим, что в двухслойной задаче на определение "истинно" минимальных значений нельзя ввести новую статистическую характеристику типа характеристического среднего предыдущей задачи. Это свидетельствует в пользу распределения "истинно" минимальных значений без возникновения новых констант задачи.

Расчёт плотностей вероятности распределений по энергии частиц нижнего уровня по выборке частиц верхнего уровня приводит к точно такому же результату, как и комбинаторный расчёт. Со статистико-механической точки зрения наивероятнейшими (наблюдаемыми) могут быть только либо состояния с максимальной энергией, либо с безусловно (см. выше) минимальной энергией частиц нижнего уровня.

4.3. Распределения экстремумов в трёхуровневой задаче

Аналогично задаче 1, задача 2 может быть решена в постановке на определение распределения вероятности максимальных и минимальных значений. Соответствующие вычисления функций распределения вероятностей максимальных и минимальных значений, которые послужили бы подтверждением и обобщением комбинаторных вычислений, возможно выполнить в случае задачи 2 только для функций $p_i m_i / t_i$ и $p_i m_i t_i$. Действительно, рассмотрим, как можно применить процедуру раздела 3 для частиц наиболее низкого уровня, которые отграничены в частицах среднего уровня из выборки m_i , которые, в свою очередь, отграничены в частицах наиболее высокого уровня из набора t_i (или распределения внутри коробок числом m_i , которые расположены в других коробках в количестве t_i , или распределение m_i связок грибов, собранных в пучки t_i).

Нам нужно определить функции распределения для четырёх функций плотности вероятности задачи 2. Затем мы должны сформировать функцию распределения максимальных и минимальных значений и перейти к окончательному распределению вероятностей нахождения частиц в определённых энергетических состояниях вышеупомянутых иерархических систем. Функция распределения для плотности вероятности $(p_i m_i)_{\text{норм}}$ равна

$$\Phi_{10} = \frac{1 - \exp(\exp((\alpha + \gamma \epsilon_i) - \exp(\alpha)))}{1 - \exp(-\exp(\alpha))}. \quad (30)$$

Для упрощения последующих выкладок, поскольку при $\alpha \geq 2$ Φ_{10} с хорошей точностью переходит в Φ_1 :

$$\Phi_{10} \cong \Phi_1 = 1 - \exp(\exp(\alpha + \gamma \epsilon_i) - \exp(\alpha)). \quad (30a)$$

В этом же приближении функция распределения Φ_2 для плотности вероятности $(p_i/m_i)_{\text{норм}}$

$$\Phi_2 = \exp(-\exp(\alpha + \gamma \epsilon_i)) \sim \frac{1}{m_i}. \quad (30б)$$

Напомним, что если F — функция распределения случайной величины, то функция распределения её максимального значения в выборке t_i равна F^{t_i} , в то время как функция распределения минимального значения равна $1 - (1 - F)^{t_i}$. Соответственно, ясно, какие функции распределения из двух функций Φ_1 и Φ_2 очевидны для использования для формирования распределения максимальных значений: это Φ_1 . Кроме этого, воспользуемся уравнением для максимального характеристического значения, как это было сделано в разделе 4.1. Тогда функция распределения максимальных значений Φ_1 в выборке t_i имеет вид

$$\Phi_{\text{max}} = \exp(\exp(\beta) - (\exp(\beta + \exp(\alpha + \gamma \epsilon_i))), \quad (31)$$

где $\beta = \ln(t_i) - \exp(\alpha)$. Легко видеть, что функция плотности вероятности для Φ_{max} (её производная по ϵ_i) совпадает с функцией $p_i m_i / t_i$.

Этот результат физически совершенно неординарен. Действительно, мы определили распределение максимальных значений для "трёхслойной" функции распределения вероятности: частицам нижнего уровня быть в состоянии энергии ϵ_i и содержаться в m_i частицах среднего уровня, которые, в свою очередь, содержатся в t_i частицах верхнего уровня. Но "трёхслойная" функция распределения максимальных значений получается из "двухслойных" функций распределения минимальных значений. В наивном представлении это выглядит так, что псевдобозоны складываются в псевдофермион.

Чтобы определить распределение "истинно" минимальных значений Φ_{min} , а в данном случае распределение именно для функции плотности вероятности $p_i m_i t_i$, нужно проделать тот же трюк, что и в разделе 3. Для этого нужно опять использовать Φ_1 , т.е. "двухслойное" распределение минимальных значений. Проведя вышеуказанный трюк, мы находим

$$\frac{\partial \Phi_{\text{min}}}{\gamma \partial \epsilon_i} = \exp(\alpha + \gamma \epsilon_i) \exp(\beta + \exp(\alpha + \gamma \epsilon_i)) \times \exp(\exp(\beta + \exp(\alpha + \gamma \epsilon_i))) = p_i m_i t_i$$

т.е. ненормированная функция $p_i m_i t_i$ из раздела 3 с $\beta = -\exp(\alpha)$ как и в выражении (31).

Таким образом, применение функции распределения Φ_1 для определения распределения обоих экстремумов даёт те же функции, которые были получены в комбинаторных подходах раздела 3. На первый взгляд получается, что "трёхслойные" частицы, как псевдобозоны с плотностью распределения вероятности $p_i m_i t_i$, так и псевдофермионы с плотностью распределения вероятности $p_i m_i / t_i$ могут быть "сооружены" только из "двухслойных" псевдобозонов, поскольку распределение вероятности Φ_2 пока не использовалось.

Казалось бы, получение распределения минимального значения⁵ с использованием функции Φ_2 элементарно. Действительно,

$$\Phi_{\text{min}}^r = 1 - (1 - \Phi_2)^{t_i} = 1 - \left(1 - \frac{\Phi_2 \exp(\ln t_i)}{t_i}\right)^{t_i} \rightarrow 1 - \exp(\exp(\ln t_i) - \exp(-\exp(\alpha + \gamma \epsilon_i))) \quad (32)$$

⁵ В данном случае это будет не распределение "истинного", а распределение обычного минимального значения в определении [23].

и это Φ_{\min}^r суть обычное распределение минимального значения для распределения Φ_2 по выборке t_i . Однако, плотность вероятности этого распределения не совпадает ни с одной из функций комбинаторной плотности вероятности из раздела 3. Аналогично, проделав трюк с определением истинно минимального значения с Φ_2 , никаких комбинаторных функций из раздела 3 мы не получим. Означает ли это, что "двухслойные" псевдофермионы не могут складываться ни в "трёхслойные" псевдобозоны, ни в трёхслойные псевдофермионы, как это "успешно" делают "двухслойные" псевдобозоны?

5. Применения

5.1. Доказательство (природа) принципа Паули

Как было показано, расчёт плотностей вероятности распределений по энергии частиц нижнего уровня по выборке частиц верхнего уровня в двухуровневой задаче I приводит к точно такому же результату, как и комбинаторный расчёт. Со статистико-механической точки зрения наивероятнейшими (наблюдаемыми) могут быть только либо состояния с максимальной энергией, либо с безусловно (см. выше) минимальной энергией частиц нижнего уровня. Для первых это приводит к принципу Паули. Рассмотрим природу принципа запрета Паули.

На объяснение природы принципа запрета Паули в вышеприведённых расчётах указывают несколько фактов. Во-первых, в постановке задачи на максимальное значение функция плотности вероятности p_i/m_i , описывает распределение максимального значения p_i в выборке m_i , или, что то же в терминах частиц, плотность вероятности найти частицу нижнего уровня в состоянии с максимальной энергией во всей выборке частиц верхнего уровня. Таким образом, речь идёт только об одной частице нижнего уровня в определённом энергетическом состоянии, т.е. о реализации принципа запрета Паули.

Во-вторых, оба типа расчётов распределения плотности вероятности p_i/m_i при понижении температуры дают уменьшение ширины функции (см. рис. 2), и при малых температурах функция распределения плотности вероятности может стать настолько узкой, что в это состояние "поместится" уже не более одной частицы нижнего уровня. При этом закономерен вопрос, в какие состояния уходят остальные частицы нижнего уровня.

На рисунке 6 изображена модельная ситуация, где присутствует ансамбль частиц верхнего уровня с разными α (разными химическими потенциалами для частиц нижнего уровня). В этом случае остальные частицы нижнего уровня разместятся в энергетических состояниях соответствующих распределений (штриховые кривые на рис. 6) с одинаковыми максимумами. При плотном распределении с $\alpha_{\min} < \alpha < \alpha_{\max}$ (α_{\min} может быть и нулём) суммарная плотность вероятности распределения (сплошная кривая на рис. 6) по энергии в этом случае будет выглядеть как постоянная до $\epsilon < \alpha_{\max}/|\gamma|$, а затем экспоненциально убывать (см. врезку рис. 6). Такое суммарное распределение будет хорошо совпадать с распределением Ферми с $\mu \approx \alpha_{\max} = \alpha_{\max}/|\gamma|$. Таким образом, получается, что плотность распределения Ферми для всех отграниченных частиц (количественно отграничение определяется некоторой энергией — энергией Ферми, близкой по значению к химическому потенциалу этой системы отграниченных частиц) может быть представ-

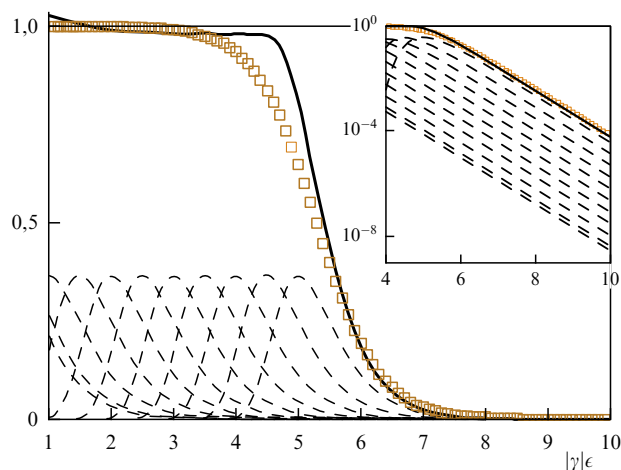


Рис. 6. Функции p_i/m_i (штриховые кривые) с α от 0,5 до 5 (через 0,5), а также сплошная кривая, представляющая сумму всех этих функций. Открытые квадраты — функция Ферми $1/[\exp\{(\gamma\epsilon - \gamma\alpha) + 1\}]$ при $\alpha = 5,3$. На врезке в полулогарифмическом масштабе приведены значения этих функций для больших аргументов — видна экспоненциальная асимптотика суммарной функции. $|\gamma| = 1$.

лена как сумма плотностей вероятности распределений групп частиц, у каждой из которых свой химический потенциал. Это также может быть ключом к трактовке проявления принципа запрета Паули.

Для этого же вполне можно ограничиться, не прибегая к сложным построениям рис. 6, тем соображением, что при одночастичных измерениях состояния системы частиц всегда будет детектироваться некоторая энергия частицы нижнего уровня, причём при малых температурах частиц эта энергия может быть единственной — остальные значения могут просто не попасть "внутри" кривых 4–6 рис. 2 в силу расстояния между уровнями дискретного энергетического спектра. Таким образом, одному энергетическому состоянию будет соответствовать только одна частица: это и можно трактовать как осуществление принципа Паули.

Этот принцип теперь можно сформулировать следующим образом. Отграниченные в частицах верхнего уровня частицы нижнего уровня имеют в качестве наивероятнейшей плотность вероятности распределения по энергии в виде узкой колоколообразной кривой. Помимо того, что при малых температурах в это распределение "попадает" только одна частица, оно также является распределением частиц нижнего уровня, имеющих максимальную энергию в частице верхнего уровня. Таким образом, в одном (максимальном) энергетическом состоянии может находиться только одна отграниченная частица — она и наблюдается.

5.2. О наивероятнейшем энерговыделении в структурированных средах

Процесс энерговыделения в любой реакции — химической, ядерной, термоядерной — имеет статистический характер. Молекулы/атомы/ядра/частицы, находящиеся в определённом объёме вещества, могут вступать в реакцию — фактически всегда при соударении — а могут и не вступать вплоть до завершения процесса. Очевидно, что количество молекул и т.п. в этом объёме, принявших участие в реакции, есть случайная величина. Эта случайная величина определяет энерговыделение.

Всё вступающее в реакцию вещество можно разделить на группы молекул, распадающихся ядер и прочих⁶, энерговыделение в первой группе может быть ϵ_1 при количестве частиц в ней p_1 , во второй — ϵ_2 при количестве частиц в ней p_2 , и т.д. Так может быть определена функция распределения (или плотность вероятности распределения) энерговыделения. Наблюдаемыми величинами при этом будут некоторые средние — на одну молекулу, на одно ядро, на единицу объёма и т.п. Этими средними могут быть величины размерности энергии, тогда можно говорить о характерных энерговыделениях в рассматриваемых реакциях.

Искомые функции распределения и затем — их средние — могут быть и будут определены с использованием рассмотренных в разделе 3 комбинаторных схем. Простейшая комбинаторная схема в случае предположения о равновероятности участия в реакции всех частиц рассмотрена в разделе 1 (задача 0).

Если же вступление в реакцию частиц в телах неравновероятно (одни, например, находятся на поверхности, другие — в толще вещества), то можно ожидать отличий в распределениях энерговыделений. Соответственно, энерговыделения в однотипных процессах в таких веществах, а тем более энерговыделения в различных процессах — горения и взрыва (см., например, [25]) — различаются. Об этом пойдет речь в данном разделе.

Вступление в реакцию зависит от многих параметров — плотности вещества, структуры вещества (степени дисперсности, специальных мер защиты и т.п.), температуры вещества, и других характеристик. Покажем, что, с точки зрения предлагаемой комбинаторной схемы расчёта, все эти параметры можно в грубом приближении свести к одному — эффективной работе выхода частицы из массива вещества для последующего вступления в реакцию, и затем учесть это в функции распределения. Действительно, в химической реакции могут "гореть" только частицы, находящиеся на поверхности твёрдого образца вещества (тела), в ядерные реакции будут вступать только те частицы, до которых долетят нейтроны, при химическом взрыве в реакцию вступают частицы на фронте ударной волны и т.п. В общем случае наше рассмотрение будет применимо к квазистационарным процессам — горению вещества с постепенным отделением реагирующих молекул от тела, эффектам на фронте ударной волны, и т.д. В самом грубом приближении все эти процессы и могут быть учтены в единственном параметре работы выхода частицы из блока вещества со вступлением в энерговыделение в результате реакции.

Если реакции энерговыделения (взаимодействия молекул, в том числе сложные — цепные [25] и т.д.) происходят быстро, то получаемая функция распределения будет иметь смысл текущей, т.е. определённой в данный конкретный момент времени. Соответственно, работа выхода тоже должна быть взята в этот же момент времени. Если работа выхода меняется гораздо медленнее скорости реакции энерговыделения, она может войти в ответ в виде зависящей от (медленного) времени величины. Затем этот параметр — работу выхода — возможно использовать в комбинаторной схеме. Следующий шаг — использование ещё одного параметра, соответствующее усложнение комбинаторной схемы и т.д.

⁶ В дальнейшем будем говорить о вступающих в реакцию частицах, или просто частицах.

Будет использована комбинаторная схема с одним вышеупомянутым дополнительным параметром [26]. Она описывает более сложные системы, состоящие из неразличимых с точки зрения энерговыделения тел, имеющих внутреннюю структуру, состоящую, в свою очередь, также из неразличимых частиц. Эта неразличимость здесь понимается не в смысле бозе- и фермичастиц, но в том смысле, что нам безразлично, какая частица прореагировала — нас интересует только выделившаяся энергия. Поэтому естественно возникает вопрос, что будет происходить с распределениями по энерговыделению в самом общем случае — если определённые группы частиц отграничены от других, или одни тела — частицы (назовём их частицами верхнего уровня) содержат другие (нижнего уровня, также неразличимые).

Решение задачи даёт рассмотрение комбинаторной проблемы о количестве комбинаций при распределении предметов по группам (см. раздел 3). К тем же результатам приводит рассмотрение некоторого специального распределения минимальных значений по энергии частиц нижнего уровня в частицах верхнего уровня по выборке частиц верхнего уровня (раздел 4).

Наблюдаемыми величинами задачи о плотности вероятности распределения энерговыделения в рассматриваемой иерархической системе являются средние. Для определения среднего функции $p_i m_i$ нужно сначала выбрать её нормировку. Для простоты целесообразно это сделать на одну молекулу (на одно ядро). Тогда среднее (математическое ожидание) $S(\alpha)$ нормированной функции распределения

$$S(\alpha) = \int_0^{\infty} \epsilon_i (p_i m_i)_{\text{norm}} d\epsilon_i = \frac{\text{Ei}(\exp(\alpha) - C - \alpha)}{|\gamma|(\exp(\exp(\alpha)) - 1)} \quad (33)$$

будет представлять из себя характерное энерговыделение в соответствующем процессе — горения, взрыва — рассчитанное на одну молекулу (ядро) реагирующего вещества. В (33) $\text{Ei}(x)$ — интегральная показательная функция [27], $C = 0,577$ — постоянная Эйлера. Зависимость S от параметра α приведена на рис. 7.

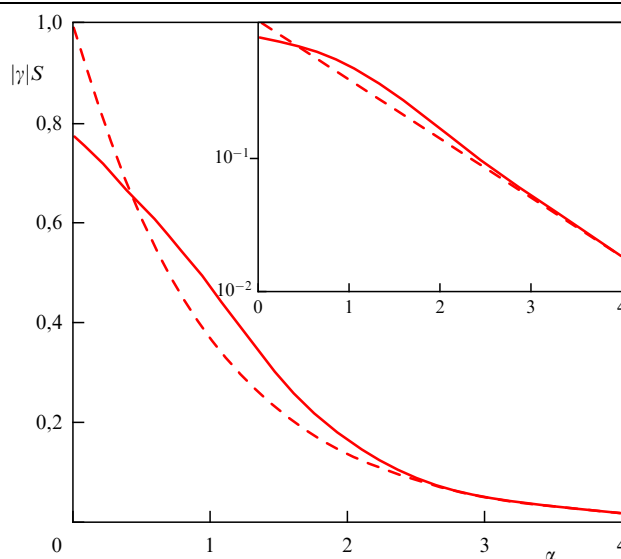


Рис. 7. Зависимость среднего S нормированной функции распределения $(p_i m_i)_{\text{norm}}$ от параметра α , сплошная кривая. Для сравнения штриховой кривой приведена функция $\exp(-\alpha)$. На врезке — та же зависимость в полулогарифмических координатах.

Заметим, что даже при $\alpha = 0$, т.е. при нулевой работе отрыва молекулы от тела для вступления в реакцию энерговыведения, $S(0)|\gamma| \approx 0,77 < 1$. Напоминаем, что $|\gamma|^{-1}$ — по определению, некоторая средняя энергия, которая, при расчёте на одну частицу, и будет теоретическим энерговыведением при горении. По-видимому, это означает, что среднее энерговыведение на частицу нижнего уровня всегда меньше теоретического значения даже при нулевой работе отрыва молекулы, так как всё равно присутствует некоторая динамика процесса горения/взрыва. При $\alpha \rightarrow \infty$, пользуясь асимптотикой $Ei(x)$, получим $S \rightarrow \exp(-\alpha)|\gamma|^{-1}$. Качественно это означает, что, если в тела верхнего уровня m_i объединены очень большие количества молекул, и работа отрыва их поэтому велика, наивероятнейшее энерговыведение будет весьма слабым. Это характерно, по-видимому, для атомных реакторов, где у замедляемых нейтронов отбирается большая энергия — т.е. работа их выхода велика, на рис. 7 она лежит в области асимптоты $S(\alpha)$. Самое сильное энерговыведение наблюдается при $\alpha = 0$, т.е. в однородных газах.

Таким образом, решение комбинаторной задачи даёт значение среднего энерговыведения на одну частицу нижнего уровня в различно структурированных средах. При увеличении работы выхода от соответствующего тела вступающей в реакцию частицы (или сложной динамики последней) это энерговыведение экспоненциально быстро уменьшается. Поэтому самое простое с практической точки зрения — дробить тела верхнего уровня m_i так, чтобы они содержали минимально возможное (с точки зрения технологического процесса, где идёт энерговыведение) количество частиц⁷ — тогда энерговыведение на одну прореагировавшую частицу будет значительным (хотя и меньшим соответствующего характерного энерговыведения в процессе). Кроме этого, макроскопическая динамика реагирующих молекул в телах не должна приводить к их быстрому выводу из зоны реакции — т.е. надо, в общем, не терять замедленные нейтроны, бороться с линейными динамическими образованиями типа ударных волн, а организовывать различные (микро)вихревые движения для лучшего вовлечения молекул в реакции.

По-видимому, уменьшение среднего энерговыведения (33) с ростом работы выхода $\sim \alpha$ является очевидным фундаментальным фактом в физике горения и взрыва. Это среднее энерговыведение очевидно и есть эффективное энерговыведение соответствующего процесса, которое всегда меньше, чем $|\gamma|^{-1}$. Эта величина сравнивается с $|\gamma|^{-1}$ только при стремлении работы выхода к бесконечной отрицательной величине, что, вероятно, означает, что в α физически учитывается не только "прямая" работа отделения частицы от тела для энерговыведения, но и сопутствующая этому динамика.

Другим фундаментальным фактом является совпадение плотности вероятности распределения безусловно минимального значения энерговыведения (см. выше) с наивероятнейшим. По-видимому, это означает, что реализующееся энерговыведение в процессе, нужное для поддержания процесса, всегда наименьшее.

Ещё одним результатом может стать незапрещённая медленная зависимость α от времени. Таким образом,

⁷ Для ядерных реакторов это означает, по-видимому, что лучше использовать реакторы с максимально возможным количеством топливных сборов.

характерное энерговыведение в процессе может меняться со временем в соответствии с (33) и рис. 7, где $\alpha = \alpha(t)$ и, соответственно, $S = S(t)$.

5.3. Усложнение иерархии структур по мере остывания системы частиц

Во всех полученных результатах для двухслойных частиц фигурирует лишь один параметр — множитель Лагранжа α (или некоторое характеристическое среднее), который интерпретируется как отношение химического потенциала μ в системе — энергии присоединения/отделения частицы нижнего уровня в задаче 1 и частиц нижнего и промежуточного уровня в задаче 2 к некоторой эффективной температуре T_{eff} (измеренной в энергетических единицах, см. также раздел 1). Очевидно, что при изменении последней результирующие функции распределения будут меняться (см. раздел 3 рис. 2). Аналогично происходят изменения плотности вероятности в трёхслойных частицах. При сравнении плотностей вероятностей распределений оказывается, что при увеличении α для функции $(p_i/m_i)_{\text{norm}}$ равно как и суммы $\alpha + \beta$ для функций $(p_i m_i / t_i)_{\text{norm}}$ и $(p_i / m_i t_i)_{\text{norm}}$ эти функции становятся одинаковыми и представляют собой одну и ту же функцию, транслируемую вправо по оси энергий (рис. 8).

Максимум функции $(p_i/m_i)_{\text{norm}}$ достигает, как мы уже видели, при $|\gamma|\epsilon_i = \alpha$, матожидание этой функции

$$\langle \epsilon_i \rangle = \frac{1}{|\gamma|} (\alpha - C),$$

т.е. оно несколько (на постоянную Эйлера, умноженную на $1/|\gamma| = T_{\text{eff}}$) меньше энергии максимума плотности вероятности распределения. Дисперсия плотности вероятности распределения $(p_i/m_i)_{\text{norm}}$ есть

$$\sigma_{\epsilon_i} = \sqrt{\langle \epsilon_i^2 \rangle - \langle \epsilon_i \rangle^2} = \frac{\pi}{\sqrt{6}|\gamma|},$$

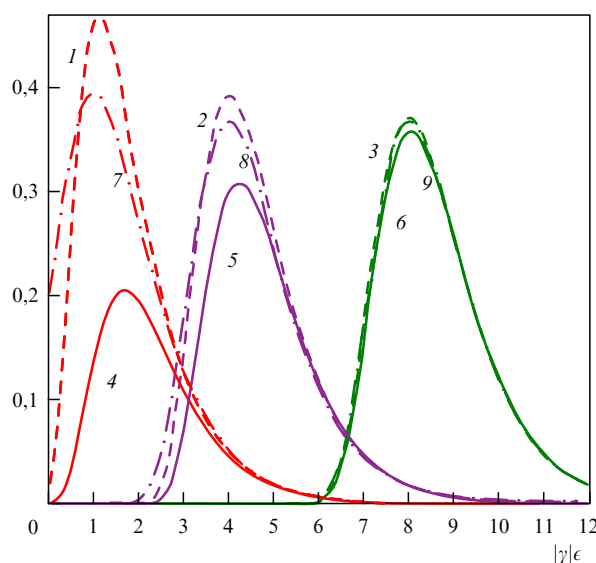


Рис. 8. Нормированные на 1 распределения $(p_i m_i / t_i)_{\text{norm}}$ (кривые 1–3) и $(p_i / m_i t_i)_{\text{norm}}$ (кривые 4–6). Для кривых 1 и 4 $\alpha = \beta = 0,5$, для кривых 2 и 5 $\alpha = \beta = 2$, для кривых 3 и 6 $\alpha = \beta = 4$. Вероятности нормированного распределения $(p_i / m_i)_{\text{norm}}$ (кривые 7–9) при (7) $\alpha = 1$, (8) $\alpha = 4$, (9) $\alpha = 8$. Для всех кривых принято $|\gamma| = 1$.

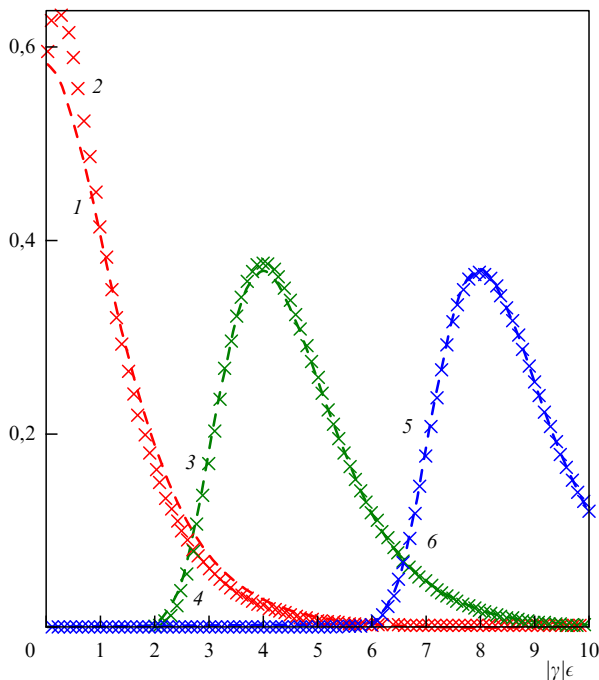


Рис. 9. Функции $(p_i/m_i)_{\text{norm}}$ (штриховые кривые 1, 3, 5) и $(p_i m_i/t_i)_{\text{norm}}$ (крестовые кривые 2, 4, 6) в зависимости от параметров α и β ($\mu, \mu_1, T_{\text{eff}}$). Для кривой 1 α принято равным 0, для кривой 3 $\alpha = 4$, и для кривой 5 $\alpha = 8$. Для кривой 2 $\alpha = \beta = 0$, для кривой 4 $\alpha = 1, \beta = 3$, для кривой 6 $\alpha = 2, \beta = 6$. Видно практически полное совпадение "двухслойных" функций 5 и "трёхслойных" функций 6.

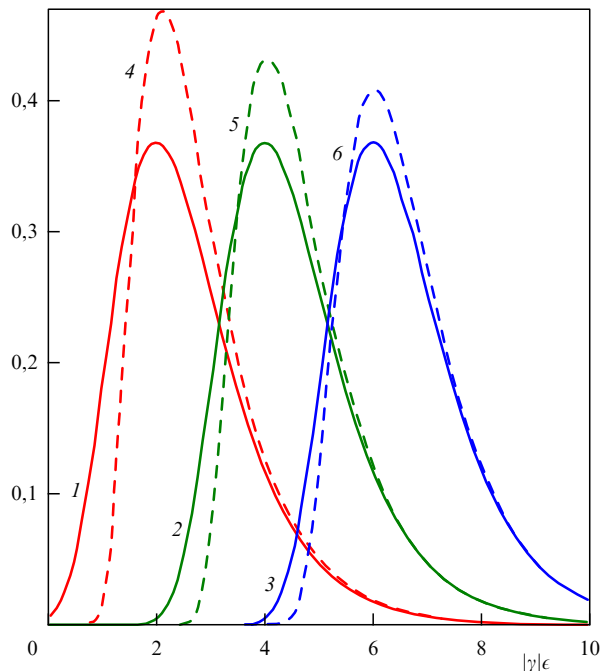


Рис. 10. Функции $(p_i/m_i)_{\text{norm}}$ (кривые 1–3) и $(p_i m_i/t_i)_{\text{norm}}$ (кривые 4–6) в зависимости от параметров α и β ($\mu, \mu_1, T_{\text{eff}}$). Для кривой 1 α принято равным 2, для кривой 2 $\alpha = 4$, и для кривой 3 $\alpha = 6$. Для кривой 4 $\alpha = 1,5, \beta = 0,5$, для кривой 5 $\alpha = 3, \beta = 1$, для кривой 6 $\alpha = 4,5, \beta = 1,5$.

т.е. она вообще не зависит от каких-либо параметров задачи 1, кроме эффективной температуры. Этот факт указывает на наличие базовой, можно сказать, "протофизической" (протоφ φυσική), константы, которую ещё следует определить. Такие же простые соотношения для функции $(p_i m_i/t_i)_{\text{norm}}$ аналитически привести нельзя.

Таким образом, ключевую роль в реализации физических эффектов играют всего две величины — химический потенциал $\mu = \alpha/|\gamma|$ (для функции $(p_i m_i/t_i)_{\text{norm}}$ ещё и $\mu_1 = \beta/|\gamma|$), и эффективная температура $T_{\text{eff}} = 1/|\gamma|$. Функции $(p_i/m_i)_{\text{norm}}$ и $(p_i m_i/t_i)_{\text{norm}}$ приведены на рис. 9 и 10. Различие между рисунками следующее: на рис. 9 $\mu_1 \gg \mu$, а суммарный химический потенциал $\mu_1 + \mu$ для функции $(p_i m_i/t_i)_{\text{norm}}$ равен химическому потенциалу функции $(p_i/m_i)_{\text{norm}}$. В свою очередь, на рис. 10 изображена обратная ситуация, $\mu_1 \ll \mu$, равенство же интегральных химических потенциалов также выполняется.

Видно, что в первом случае кривые плотностей вероятностей распределений уже при $\alpha = \mu/T_{\text{eff}} = 4$ для $(p_i/m_i)_{\text{norm}}$, и $\alpha + \beta = \mu + \mu_1/T_{\text{eff}} = 4$ для $(p_i m_i/t_i)_{\text{norm}}$ практически совпадают, и дальнейший рост химического потенциала приводит к ещё лучшему совпадению.

Не так обстоит дело, если $\mu_1 \ll \mu$, т.е. энергия присоединения/отрыва частицы нижнего уровня к частице среднего уровня гораздо больше энергии присоединения/отрыва частицы среднего уровня к частице верхнего уровня, что показано на рис. 10. в этом случае плотности вероятности различаются вплоть до интегрального $\alpha + \beta = 8$, а при дальнейшем увеличении практически совпадают. По-видимому, большинству физически реализуемых ситуаций отвечает как раз рис. 10.

Этот рисунок иллюстрирует ещё один важнейший физический результат: неизменность формы плотностей

вероятности распределений $(p_i/m_i)_{\text{norm}}$ и $(p_i m_i/t_i)_{\text{norm}}$ от величины α и $\alpha + \beta$ — функции только транслируются вправо при возрастании α и $\alpha + \beta$. Но только "трансляция вправо" при неизменных μ и μ_1 означает следующее. Во-первых, происходит "остывание" системы: T_{eff} уменьшается при неизменных μ и μ_1 , при этом ещё нужно учитывать, что дополнительно к сдвигу вправо и "ширина колокола" плотности вероятности будет убывать, а максимальная его величина — возрастать; для простоты это не показано на рисунках статьи кроме специально оговоренных случаев. Во-вторых, система частиц (и сами частицы) перестают меняться. Заметим, что практически полное совпадение функций $(p_i/m_i)_{\text{norm}}$ и $(p_i m_i/t_i)_{\text{norm}}$ при больших величинах α и $\alpha + \beta$ даёт право установить величину первых двух моментов второй точно такими же, как и у первой — т.е. снова дисперсия не будет зависеть ни от чего, кроме T_{eff} , и следует ожидать возникновения физической константы.

Какие физические явления можно ожидать при остывании системы? Уменьшение T_{eff} без изменений μ (и μ вместе с μ_1) будет сопровождаться перемещением распределений плотности вероятности частиц по энергии вправо по оси энергий, причём довольно быстро это перемещение сведётся к простой трансляции — для функции $(p_i/m_i)_{\text{norm}}$ начиная практически с $\alpha = \mu/T_{\text{eff}} = 4$, а для функции $(p_i m_i/t_i)_{\text{norm}}$ от в физически интересном случае $\mu_1 \ll \mu$ — начиная примерно с $\alpha + \beta = (\mu + \mu_1)/T_{\text{eff}} = 10$. Начавшаяся простая трансляция, по-видимому, означает, что частицы перестают менять свое поведение (плотность вероятности их распределения остаётся неизменной), или, что является более сильным утверждением, частицы всех двух (или трёх) уровней перестают меняться. Дальнейшее снижение температуры будет

происходить уже в рамках "нормальной" физики — а до этого (при $\alpha < 4$ и $\alpha + \beta < 10$) процессы происходили ещё в рамках "протофизики" — и мы имеем дело с "современными" частицами.

С уменьшением T_{eff} происходит ещё одно важнейшее явление — усложнение частиц. Действительно, рассмотрим рис. 10. Для всех приведённых на нём модельных случаев (напомним, что рис. 10 отвечает случаю $\mu_1 \ll \mu$, т.е. работа по отрыву частицы нижнего уровня от частицы среднего уровня гораздо больше, чем работа отрыва частицы среднего уровня от частицы верхнего уровня) значения функции плотности вероятности распределения $(p_i/m_i)_{\text{norm}}$ до определённого значения энергии (гораздо) больше значений функции плотности вероятности распределения $(p_i m_i/t_i)_{\text{norm}}$, т.е. вероятность возникнуть "двухслойной" частице (гораздо) выше, чем "трёхслойной". После этого значения — наоборот, вероятность возникнуть "двухслойной" частице (гораздо) меньше, чем "трёхслойной". Таким образом, по мере падения T_{eff} , сначала из стохастики неразличимых частиц единственного ("больцмановского") уровня возникают двухуровневые ("двухслойные") частицы, а потом из "двухслойных" — "трёхслойные". Это — наиболее грубое описание космологической эволюции материи.

5.4. О ничтожной вероятности обнаружения частиц с отрицательной энергией

Обратим внимание на тот факт, что, если распространить аргумент x на диапазон от $-\infty$ до $+\infty$, то функция $1/m_i = \exp(-\exp(-(x - x_{\text{im}})))$ будет точным распределением вероятности некоторой случайной величины, для x сохраняем соотношение $x = |\gamma|\epsilon_i$. Примечателен факт, что при определённом, не очень большом значении $x_{\text{im}} \cong \alpha = |\gamma|\mu \geq 6$, частиц нижнего уровня в состояниях с отрицательной энергией нет вовсе (вероятность обнаружить хоть одну чудовищно мала $\sim 10^{-180}$), иллюстрацией чего служит рис. 11.

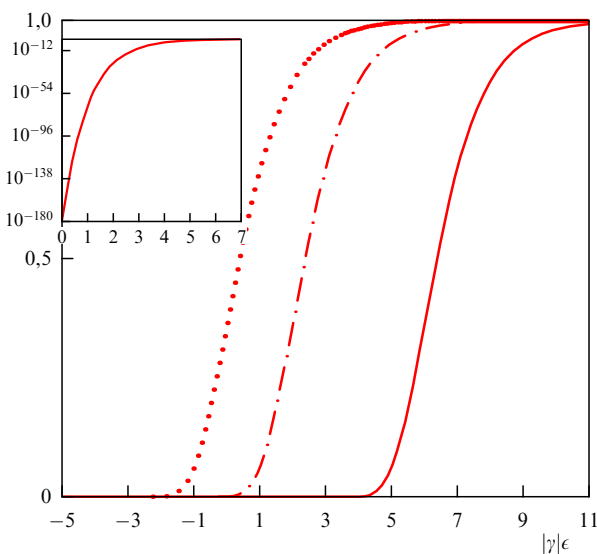


Рис. 11. Функция распределения $1/m_i$ в зависимости от энергии ϵ_i для значений $\alpha = |\gamma|\mu$ равных 0 для точечной кривой, 2 — для штрихпунктирной и 6,025 — для сплошной. При $\alpha = |\gamma|\mu = 6,025$ значение функции в нуле 10^{-180} . Равномерные координаты, $|\gamma|$ принято равным 1. На врезке — кривая $1/m_i$ с $\alpha = 6,025$ в полулогарифмическом масштабе.

Поскольку факт отграничения частиц нижнего уровня в частицах верхнего уровня достигается за счёт некоторого взаимодействия, оно предполагает ненулевые значения химического потенциала. По-видимому, именно наличие взаимодействия приводит к отсутствию частиц в состояниях с отрицательной энергией.

Для функций, возникающих в задаче 2, заметим только следующее. Точным распределением некоторой случайной величины является функция

$$\frac{\exp(\exp(\beta))}{t_i} = \exp(\exp(\beta)) \exp(-\exp(\beta + \exp(\alpha - x))) \quad (35)$$

при изменении аргумента $x = |\gamma|\epsilon_i$ от $-\infty$ до $+\infty$ (рис. 12). Значение этой функции в нуле $< 10^{-180}$ уже при $\alpha = 2$ и $\beta \geq 3,4$. Если аргумент начинается с нуля (или с какой-то величины, соответствующей энергии основного состояния частицы нижнего уровня), то простым дифференцированием по переменной получается функция плотности вероятности $p_i m_i/t_i$ (рис. 12).

Эта функция плотности вероятности также описывает частицы нижнего уровня, которые не могут находиться в состояниях с отрицательной энергией. Для этого достаточно иметь ненулевым хотя бы один из двух химических потенциалов (см. выше).

Из сравнения рис. 11 и рис. 12 очевидно, что "полное" исчезновение частиц в состояниях с отрицательной энергией наступает при меньших значениях суммарного химического потенциала в трёхслойной задаче по сравнению с величиной химического потенциала двухслойной. Таким образом, на исчезновение частиц с отрицательной энергией влияет не только общее остывание системы (увеличение $\alpha = \mu/T_{\text{eff}}$ и $\alpha + \beta = (\mu + \mu_1)/T_{\text{eff}}$ при неизменных μ и μ_1), но и структуризация вещества — превышение вероятности найти трёхслойную частицу по сравнению с двухслойной.

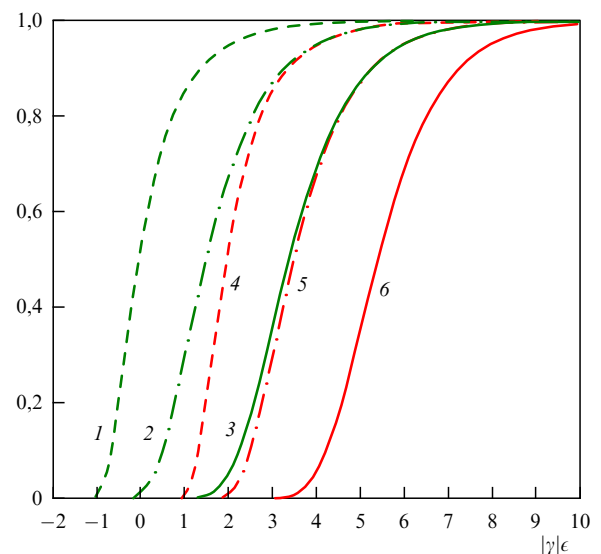


Рис. 12. Функции распределения вероятности (35) для различных значений α и β : для кривой 1 $\alpha = 0$ $\beta = -1$, для кривой 2 $\alpha = 0$ $\beta = 1$, для кривой 3 $\alpha = 0$ $\beta = 3$, для кривой 4 $\alpha = 2$ $\beta = -1$, для кривой 5 $\alpha = 2$ $\beta = 1$, для кривой 6 $\alpha = 2$ $\beta = 3$. Равномерные координаты, $|\gamma|$ принято равным 1.

6. Обсуждение результатов

Таким образом, обобщение статистического бoльцмановского подхода путём усложнения неразличимых частиц введением иерархии строения таких частиц открывает новые возможности для описания возникающих их статистических свойств. Иерархические двух- и трёхуровневые системы поддаются как простому комбинаторному расчёту, так и определению их статистик распределений максимального и минимального значений. Основным результатом для обеих задач 1 и 2 является совпадение наиболее вероятных распределений по энергии с распределением максимальных и минимальных значений.

Результаты задач 1 и 2 следует интерпретировать как зависящие от способа наблюдения. Все наблюдения в спектроскопических экспериментах (не обязательно оптических, вообще большинства измерений спектров энергии) дают некоторые отнесенные к одной частице верхнего уровня функции распределения. Основным результатом задачи 1 является обнаружение максимума функции плотности вероятности распределения частиц по энергиям при одночастичном наблюдении. В самом простом подходе к описанию этот максимум совпадает с химическим потенциалом частиц нижнего уровня в частицах верхнего уровня — энергией присоединения/отсоединения частицы нижнего уровня от остальных таких частиц в частице верхнего уровня, (достаточно) постоянной величины. При этом простом подходе все частицы нижнего уровня с энергиями меньше химического потенциала должны интерпретироваться как связанные.

Как уже указывалось, при малых эффективных температурах функция плотности вероятности найти частицу нижнего уровня в одночастичном измерении в состоянии ϵ_i имеет очень узкий максимум. Это значит, что при определённой малой (и ещё меньшей) температуре это состояние занимает не более одной частицы. Подобный результат может быть истолкован как реализация принципа запрета Паули — когда одно энергетическое состояние занимает не более чем одна частица определённого сорта, соответствующая знаку "—" в левой части (11). Некоторая модификация задачи 1, в которой возникает набор функций $\{p_i/m_i\}$ с различными α , приводит, при суммировании этих функций, к функции, хорошо совпадающей с распределением Ферми. Это ещё одна возможная прямая реализация принципа Паули, появляющаяся в результате решения задачи 1.

Дополнительно к этому установлено, что функция плотности вероятности p_i/m_i описывает распределение максимального значения p_i в выборке m_i , или, что то же в терминах частиц, плотность вероятности найти частицу нижнего уровня в состоянии с максимальной энергией во всей выборке частиц верхнего уровня. Поскольку очевидно, что в состоянии с максимальной энергией может находиться только одна частица нижнего уровня, это снова указывает на прямую реализацию принципа запрета Паули.

Уже при умеренных значениях $\alpha \sim 6$ доля частиц нормированной плотности вероятности распределения (13а) с энергиями большими соответствующего значения химического потенциала $\sim 10^{-180}$, т.е. таких (свободных?) частиц, весьма вероятно нет во всей Вселенной.

Наивная интерпретация результатов задачи 1 с двумя функциями распределения — $p_i m_i$ и p_i/m_i — состоит в

том, что мы имеем дело с частицами двух сортов — псевдобозонов для первой функции (так как плотность вероятности распределения частиц по энергии описывает конденсацию в низкоэнергетических состояниях при малой температуре), и псевдофермионов (так как при малых температурах одно энергетическое состояние, как оказалось, с максимальной энергией, занимает только одна такая частица).

Такая же интерпретация результатов задачи 2 приводит к 4 сортам частиц. Псевдобозоны с ещё более выраженным эффектом конденсации описываются функцией $p_i m_i t_i$, частиц с энергиями, большими величины химического потенциала, здесь нет вовсе. Похожие результаты даёт функция $p_i t_i / m_i$, но эффект конденсации в ней выражен меньше. Напротив, частицы верхнего уровня, описываемые функцией $p_i / m_i t_i$, содержат частицы нижнего уровня в энергетических состояниях выше химического потенциала, а функция $p_i / m_i t_i$, по-видимому, описывает некоторые "нормальные" частицы, поскольку полный химический потенциал частицы нижнего уровня в частице среднего уровня, а последней — в частице верхнего уровня аддитивно складывается из химических потенциалов частицы нижнего уровня в частице среднего уровня и частицы среднего уровня в частице верхнего уровня.

При остывании систем частиц (уменьшении эффективной температуры, что общепринято, например, в космологии) — как двухслойных, так и трёхслойных — сначала гораздо более вероятно появление двухуровневых частиц — псевдофермионов, а при ещё большем уменьшении T_{eff} — и таких же трёхслойных частиц по сравнению с неструктурированным "океаном" частиц нижнего уровня. Здесь достаточно только одного факта остывания некоторого исходного хаоса неразличимых неструктурированных частиц, и их отграничения (ещё не взаимодействия) в частицы более высокого уровня, т.е. описание системы частиц получается даже не физическим, а протофизическим.

При естественных предположениях о разном количестве частиц вещества, могущих вступить в реакцию энерговыделения (горения, взрыва и др.) в силу их расположения на поверхности/внутри структуры, динамике доступа к реагирующим частицам и очевидном вероятностном характере процесса проведена комбинаторная процедура определения наиболее вероятного распределения энерговыделения. В некотором простом приближении энерговыделение определяется одним параметром комбинаторной схемы. Наиболее вероятное распределение оказывается совпадающим с распределением безусловно минимальных значений энерговыделения. Результат может быть использован для количественной интерпретации отличия величин энерговыделения при горении, взрыве и в других процессах при различных условиях.

Полученные в задачах 1 и 2 распределения естественно обобщаются на состояния с отрицательными энергиями. Наиболее наивная трактовка экстремально малых значений функций распределений вероятности $1/m_i$ и $\exp(\exp(\beta))/t_i$ при отрицательных значениях аргумента — нормированной энергии (взятых в диапазоне значений энергии от $-\infty$ до $+\infty$) может состоять в том, что частицы нижнего уровня с отрицательной энергией (или с энергией, меньшей определённой отрицательной величины ϵ_0 (см. сноску 3)) не могут складываться в частицы верхнего уровня, или же что частиц в состоянии с

энергией, меньшей энергии основного состояния, быть не может⁸. Причиной же этого, т.е. причиной таких малых значений функций распределения при отрицательном значении аргумента является ограничение одних частиц внутри других, или неявное предположение о взаимодействии.

Таким образом, получены статистики наиболее вероятных распределений по энергии в системах иерархически организованных частиц, которые совпадают со статистиками распределений экстремальных значений. Результаты позволяют обосновать принцип запрета Паули, конденсацию частиц с минимальными энергиями, минимальность энерговыделения в различных процессах, отсутствие частиц с отрицательной энергией, а также описывают сложение строения протовещества — появление частиц с внутренней структурой и усложнение её — по мере его остывания.

Список литературы

1. Isihara A *Statistical Physics* (New York: Academic Press, 1971); Пер. на русск. яз.: Исихара А *Статистическая физика* (М.: Мир, 1973)
2. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Статистическая физика* Ч. 1 (М.: Физматлит, 2002); Пер. на англ. яз.: Landau L D, Lifshitz E M *Statistical Physics* Vol. 1 (Oxford: Pergamon Press, 1980)
3. Romanovsky M Yu, Ebeling W *Contrib. Plasma Phys.* **46** 195 (2006)
4. Romanczuk P et al. *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **202** 1 (2012)
5. Паули В, в сб. *Теоретическая физика 20 века* (Пер. под ред. Я А Смородинского) (М.: ИЛ, 1962); Пер. с англ.: Pauli W, in *Theoretical Physics in the Twentieth Century. A Memorial Volume to Wolfgang Pauli* (Eds M Fierz, V F Weisskopf) (New York: Interscience Publ., 1960)
6. Uhlenbeck G E, Goudsmit S *Naturwissenschaften* **13** 953 (1925)
7. Pauli W *Phys. Rev.* **58** 716 (1940)
8. Duck I, Sudarshan E C G *Pauli and the Spin-Statistics Theorem* (Singapore: World Scientific, 1997) DOI:10.1142/3457
9. Broyles A. arXiv:quant-ph/9906046v1
10. Mullin W J, Blaylock G *Am. J. Phys.* **71** 1223 (2003)
11. Durand L *Am. J. Phys.* **72** 1082 (2004)
12. Abdulmuhsen H A *J. Math. Phys.* **47** 083302 (2006)
13. Likos C N *Soft Matter.* **2** 478 (2006)
14. Camargo M, Likos C N *J. Chem. Phys.* **130** 204904 (2009)
15. Camargo M, Likos C N *Phys. Rev. Lett.* **104** 078301 (2010)
16. Bichler K J et al. *Macromolecules* **53** 78 (2020)
17. Dickman R, Vidigal R R *J. Stat. Mech. Theory Exp.* **2007** P05003 (2007)
18. Szidarovszky T *Phys. Rev. A* **108** 053118 (2023); arXiv:2307.03508v5
19. Романовский М Ю *ЖЭТФ* **159** 350 (2021); Romanovsky M Yu *J. Exp. Theor. Phys.* **132** 294 (2021)
20. Виленкин Н Я *Комбинаторика* (М.: Наука, 1969); Виленкин Н Я *Популярная комбинаторика* (М.: Наука, 1975)
21. Stanley R P *Enumerative Combinatorics* Vol. 1 (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1997)
22. Румер Ю Б, Рывкин М Ш *Термодинамика, статистическая физика и кинетика* 2-е изд., испр. и доп. (Новосибирск: Изд-во Новосибирск. ун-та, 2000)
23. Gumbel E *Statistics of Extremes* (New York: Columbia Univ. Press, 1962); Пер. на русск. яз.: Гумбель Е *Статистика экстремальных значений* (М.: Мир, 1965); Gumbel E *Statistics of Extremes* (New York: Dover Publ., 2021)
24. Romanovsky M *Chaos Solitons Fractals* **159** 112170 (2022)
25. Зельдович Я Б и др. *Математическая теория горения и взрыва* (М.: Наука, 1980); Пер. на англ. яз.: Zeldovich Ya B et al. *The Mathematical Theory of Combustion and Explosions* (New York: Consultants Bureau, 1985)
26. Романовский М Ю *Докл. РАН. Физика, технические науки* **516** 93 (2024)
27. Abramowitz M, Stegun I A (Eds) *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (United States. National Bureau of Standards. Applied Mathematics Series, 55) (New York: Dover Publ., 1964); Пер. на русск. яз.: Абрамовиц М, Стиган И (Ред.) *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами* (М.: Наука, 1979)

⁸ Что, по-видимому, следует интерпретировать как отсутствие античастиц.

The exclusion principle and the evolution of matter in statistics of particles with hierarchical structure

M.Yu. Romanovsky

⁽¹⁾ PE Science and Innovation, ul. Bol'shaya Ordynka 24, 119017 Moscow, Russian Federation

⁽²⁾ ANO National Center for Physics and Mathematics, ul. Parkovaya 1, str. 3, 607182 Sarov, Nizhny Novgorod region, Russian Federation

⁽³⁾ Pirogov Russian National Research Medical University, ul. Ostrovityanova 1, 117997 Moscow, Russian Federation

E-mail: MYRomanovsky@rosatom.ru

Statistics of the most probable energy distributions are constructed and investigated in systems with many particles, some of which are contained (or delimited) within other particles, as well as in systems with particles delimited within other particles, which, in turn, are delimited within third particles. The statistics of the distributions of such particles with respect to the maximum and minimum energy values turn out to coincide with those obtained in the initial combinatorial solution. The results provide a basis for proving the Pauli exclusion principle, the minimality of energy release in various processes, and the absence of particles with negative energy, as well as describe the complication of the structure of matter.

Keywords: most probable distributions, distributions of extremes, hierarchical structures, delimitation, Pauli exclusion principle, matter complication

PACS numbers: **02.50.** –r, **05.20**–y, 12.40.Ee, 31.15.bt

Bibliography — 27 references

Received 28 July 2025

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **196** (7) 763–778 (2026)

Physics – Uspekhi **69** (7) (2026)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2025.05.040010>

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2025.05.040010>