



<http://math-sci.ui.ac.ir>

Journal of Mathematics and Society

ISSN (print): 2345-6493, ISSN (on-line): 2345-6507

Vol. 8 No. 1 (2023), pp. 1-16.

© 2023 The Author(s)



<http://ui.ac.ir>

## FROM PERMUTATION PATTERNS TO THE PERIODIC TABLE\*\*

LARA PUDWELL<sup>ID</sup>

TRANSLATORS: SAEID ALIKHANI\*<sup>ID</sup> AND MARYAM SAFAZDEH<sup>ID</sup>

ABSTRACT. Permutation patterns is a burgeoning area of research with roots in enumerative combinatorics and theoretical computer science. This article first presents a brief overview of pattern avoidance and a survey of enumeration results that are standard knowledge within the field. Then, we turn our attention to a newer optimization problem of pattern packing. We survey pattern packing results in the general case before we consider packing in a specific type of permutation that leads to a new and surprising connection with physical chemistry. Note that the original paper has published in “Notices of the American Mathematical Society, 67, Number 7, 994-1001” and we have translated it into Farsi. This is just an extended abstract for Journal of Mathematics and Society.

### 1. Introduction

Let  $S_k$  be the set of all permutations on  $[k] = \{1, 2, \dots, k\}$ . Given  $\pi \in S_k$  and  $\rho \in S_l$ , we say that  $\pi$  contains  $\rho$  as a pattern if there exist  $1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_\ell \leq k$  such that  $\pi_{i_a} \leq \pi_{i_b}$  if and only if  $\rho_a \leq \rho_b$ . In this case we say that  $\pi_{i_1} \dots \pi_{i_\ell}$  is order-isomorphic to  $\rho$ , and that  $\pi_{i_1} \dots \pi_{i_\ell}$  is an occurrence or a copy of  $\rho$  in  $\pi$ . If  $\pi$  does not contain  $\rho$ , then we say that  $\pi$  avoids  $\rho$ .

Keywords: Permutation, Periodic table, Chemistry.

Communicated by Ali Reza Ashtafi.

Article Type: Translation Paper.

\*Corresponding author.

\*\*The above abstract has been extracted by the translator from the original article (L. Pudwell, From Permutation Patterns to the Periodic Table, *Notices of the American Mathematical Society*, **67** 994–1001.)

Received: 16-03-2022, Accepted: 24-01-2023, Published Online: 07-06-2023.

<http://dx.doi.org/10.22108/msci.2023.133089.1501> .

The definition of pattern containment may be made more visual by considering the plot of  $\pi$ . In particular, for  $\pi = \pi_1\pi_2 \cdots \pi_k \in S_k$ , the plot of  $\pi$  is the graph of the points  $(i, \pi_i)$  in the Cartesian plane.

Of particular interest are the sets  $S_k(\rho) = \{\pi \in S_k | \pi \text{ avoids } \rho\}$ . For example,

$$S_4(123) = \{1432, 2143, 2413, 2431, 3142, 3214, 3241, 3412, 3421, 4132, 4213, 4231, 4312, 4321\}$$

and  $\pi = 43512 \in S_5(123)$  since there is no increasing subsequence of length 3 in  $\pi$ .

## 2. Main Results

Much of the existing literature in permutation patterns studies the quantity  $s_k(\rho) = |S_k(\rho)|$  for various patterns  $\rho$ .

Starting with the simplest case, it is immediate that  $s_k(1) = 0$  if  $k \geq 1$  since each digit of a nonempty permutation is a copy of the pattern 1. We also have that  $s_k(\rho) = |S_k(\rho)|$  for  $k \geq 0$ , since the unique permutation of length  $k$  avoiding 12 (resp., 21) is  $J_k$  (resp.,  $I_k$ ). For more information, please refer to the original paper.

Rather than focusing on packing in all permutations, the author of the original paper in the rest of the paper focus on packing patterns into permutations with extra restrictions. This family of packing problems will provide a new link between permutations and physical chemistry.

**Definition 2.1.** *Permutation  $\pi$  is an alternating permutation if*

$$\pi_1 < \pi_2 > \pi_3 < \pi_4 \cdots .$$

*Alternating permutations are also known as zig-zag permutations or up-down permutations.*

**Theorem 2.2.** *The maximum number of copies of 123 in an alternating permutation of length  $k$  is given by*

$$\nu(123, \hat{I}_k) = \begin{cases} \frac{(k-2)(k^2-4k+6)}{6} & k \text{ is even,} \\ \frac{(k-1)(k-2)(k-3)}{6} & k \text{ is odd.} \end{cases}$$

## 3. Conclusion

This connection between pattern packing and physical chemistry is striking even to long-time permutation patterns researchers. Similarly, the quasi-polynomial sequence obtained for  $\nu(123, \hat{I}_k)$  had no previous interpretation in the literature other than as a sequence of atomic numbers. What, if any, chemical interpretation is there for  $\nu(123, \hat{I}_k)$  when  $k > 10$ ? What other chemical or physical structures can be described in terms of pattern packing or pattern avoidance? Are there other combinatorial

structures that give alternate ways to generate the sequences of atomic numbers of particular groups of chemical elements? The variety of applications of permutation patterns has grown tremendously in recent decades, and modeling electron orbitals can now be added to the list.

**Saeid Alikhani**

Department of Mathematical Sciences, Yazd University, 89195-741, Yazd, Iran

Email: [alikhani@yazd.ac.ir](mailto:alikhani@yazd.ac.ir)

**Maryam Safazadeh**

Department of Mathematical Sciences, Yazd University, 89195-741, Yazd, Iran

Email: [msafazadeh92@gmail.com](mailto:msafazadeh92@gmail.com)

## از الگوهای جایگشتی تا جدول تناوبی\*\*

لارا پادول<sup>id</sup>

مترجمان: سعید علیخانی\*<sup>id</sup> و مریم صفازاده<sup>id</sup>

چکیده. چکیده مترجم: این مقاله، نخست یک بررسی کوتاه درباره اجتناب از الگو و یک بررسی از نتایج شمارشی، که دانش استاندارد در این زمینه است، ارائه می‌دهد. سپس به یک مسئله بهینه‌سازی جدیدتر از دسته‌بندی الگو پرداخته می‌شود. نتایج دسته‌بندی الگو را در حالت کلی بررسی کرده و ارتباط جدید و شگفت‌انگیز با شیمی فیزیک مشاهده می‌شود.

### ۱. متن اصلی

الگوهای جایگشتی بحثی از پژوهش در حال رشد با ریشه در ترکیبیات شمارشی و علوم کامپیوتر نظری است. اگرچه بخش زیادی از کار کنونی در این زمینه هنوز به اصول آن در علوم کامپیوتر مربوط است، گسترش سریع آن در طول دو دهه گذشته منجر به ارتباطات شگفت‌انگیزی با بخش‌های دیگر ریاضیات شده است. این مقاله در ابتدا یک بررسی اجمالی درباره اجتناب از الگو و یک بررسی از نتایج شمارشی که دانش استاندارد در این زمینه است، ارائه می‌دهد. سپس ما توجه خود را به یک مسئله بهینه‌سازی جدیدتر از دسته‌بندی الگو معطوف می‌کنیم. قبل از اینکه دسته‌بندی را در نوع خاصی از جایگشت مورد توجه قرار دهیم، که منجر به ارتباطی جدید و شگفت‌انگیز با شیمی فیزیک می‌شود، نتایج دسته‌بندی الگو را در حالت کلی بررسی می‌کنیم.

فرض کنیم  $S_k$  مجموعه همه جایگشت‌ها روی  $[k] = \{1, 2, \dots, k\}$  است. دو جایگشت  $\pi \in S_k$  و  $\rho \in S_\ell$  داده شده است، گوئیم  $\pi$  به‌عنوان یک الگو شامل  $\rho$  است، اگر  $1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_\ell \leq k$  وجود داشته باشد به طوری که  $\pi_{i_a} \leq \pi_{i_b}$  اگر و تنها اگر  $\rho_a \leq \rho_b$  (در این جا منظور از  $\pi_j$  یا  $\rho_j$  همان تصویر  $j$  تحت جایگشت  $\pi$  یا  $\rho$  است، به عبارت دیگر  $\pi_j = \pi(j)$  یا  $\rho_j = \rho(j)$  (مترجمان)). در این حالت گوئیم  $\pi_{i_1} \dots \pi_{i_\ell}$  یکریخت-مرتب با  $\rho$  و  $\pi_{i_1} \dots \pi_{i_\ell}$  یک پیشامد (وقوع) یا یک نسخه از  $\rho$  در  $\pi$  است. اگر  $\pi$  شامل  $\rho$  نباشد، آن‌گاه می‌گوئیم  $\pi$  از  $\rho$  اجتناب می‌کند. برای مثال  $\pi = 43512$  شامل الگوی  $\rho = 231$  است زیرا ارقام  $\pi_2 \pi_3 \pi_5 = 352$  دارای نظم مرتبط یکسان مانند ارقام  $\rho$  است؛ این یکی از چهار مثال  $\pi$  در  $231$  است.

دبیر تخصصی رابط: علی‌رضا اشرفی

نوع مقاله: ترجمه ای

\* نویسنده مسئول

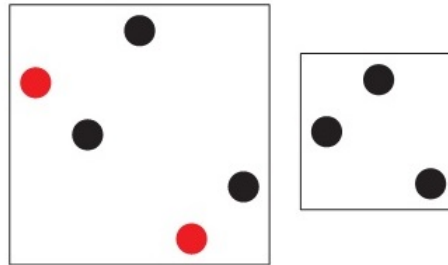
\*\*نوشته حاضر ترجمه مقاله زیر است:

L. Pudwell, From Permutation Patterns to the Periodic Table, *Notices of the American Mathematical Society*, 67 994–1001.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۱۲/۲۵ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۱۱/۰۴ تاریخ انتشار آنلاین: ۱۴۰۲/۰۳/۱۷

<http://dx.doi.org/10.22108/msci.2023.133089.1501>

تعریف مهار الگو ممکن است با در نظر گرفتن طرح  $\pi$  بصری تر شود. به ویژه برای  $\pi \in S_k$ ، به ویژه برای  $\pi = \pi_1 \pi_2 \dots \pi_k$ ، طرح  $\pi$  نمودار نقاط  $(i, \pi_i)$  در صفحه دکارتی است. طرح های  $\pi = 43512$  و  $\rho = 231$  در شکل ۱ داده شده است. به عنوان یک راه جایگزین برای اینکه ببینید  $\pi$  شامل  $\rho$  است، به این توجه کنید که اگر سطرها و ستون ها با نقاط قرمز را از طرح  $\pi$  حذف کنیم، نقاط (سیاه) باقی مانده، یک طرح از  $\rho$  تشکیل می دهند.



شکل ۱. نمودارهای  $\rho = 231$  و  $\pi = 43512$

Figure 1: The plots of  $\pi = 43512$  and  $\rho = 231$

یکی از مجموعه های مورد علاقه ویژه، مجموعه های  $\{\pi \in S_k \mid \rho \text{ از } \pi \text{ اجتناب می کند}\} = S_k(\rho)$  است. برای مثال

$$S_4(123) = \{1432, 2143, 2413, 2431, 3142, 3214, 3241, 3412, 3421, 4132, 4213, 4231, 4312, 4321\}$$

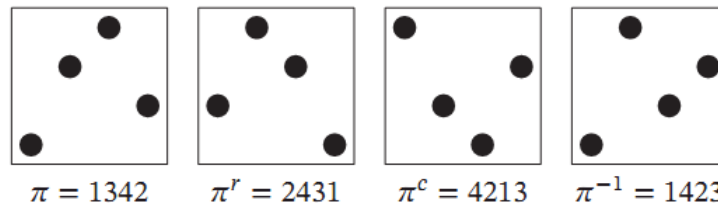
و  $\pi = 43512 \in S_5(123)$ ، زیرا هیچ زیر دنباله صعودی به طول ۳ در  $\pi$  وجود ندارد. یک پیشامد (وقوع) اخیر از اجتناب الگو قضیه اردوش-سکرش<sup>۱</sup> است که به صورت زیر قابل بازنویسی است [۹]:  
فرض کنیم  $I_a = 12 \dots a$  جایگشتی صعودی به طول  $a$  و  $J_b = b(b-1) \dots 1$  جایگشتی نزولی به طول  $b$  است. در این صورت اگر  $k > (a-1)(b-1)$ ، آن گاه  $S_k(I_a) \cap S_k(J_b) = \emptyset$ . مطالعه جایگشت های الگو-اجتناب در نوع خود توسط کارهای کنوت<sup>۲</sup> در کتاب هنر برنامه نویسی کامپیوتر [۱۲] آغاز شد که او نشان داد جایگشت  $\pi \in S_k$  بعد از عبور از پشته، قابل مرتب سازی است اگر و تنها اگر  $\pi \in S_k(123)$ . اجتناب الگویی همچنین ثابت کرده است که یک زبان مفید برای توصیف ورودی های قابل مرتب سازی از طریق انواع ماشین های دیگر است. تعمیم اجتناب الگویی برای مشخص کردن ویژگی های هندسی واریته شوبرت<sup>۳</sup> استفاده شده است. به تازگی، پژوهشگران الگوهای جایگشتی را با نتایجی در ژنومیک، مکانیک آماری و موارد دیگری مرتبط کرده اند.

## ۲. شمارش

بیشتر نوشتارهای علمی موجود در الگوهای جایگشتی، کمیت  $s_k(\rho) = |S_k(\rho)|$  را برای الگوهای مختلف  $\rho$  مطالعه می کنند. در حالی که نتایج موجود در این بخش ایده های اصلی در پژوهش الگوهای جایگشتی هستند، که ارتباط نزدیکی با نتیجه نهایی این مقاله ندارند. خواننده علاقمند به ارتباط با شیمی ممکن است بخواهد به بخش دسته بندی الگو برود. با ساده ترین حالت شروع می کنیم، سریع این نتیجه حاصل می شود که اگر  $k \geq 1$  آن گاه  $s_k(1) = 0$ ، چرا که هر رقم از جایگشت ناتهی یک کپی از الگوی ۱ است. همچنین برای  $k \geq 0$  داریم  $s_k(12) = s_k(21) = 1$ ، زیرا جایگشت یکتا به طول  $k$  که از ۱۲ (به ترتیب ۲۱) اجتناب می کند برابر است با  $J_k$  (به ترتیب  $I_k$ ).

<sup>1</sup>Erdős-Szekeres <sup>2</sup>Knuth <sup>3</sup>Schubert varieties

این حقیقت که  $s_k(12) = s_k(21)$  حالتی خاص از یک پدیده کلی‌تر است. در صورتی‌که برای همه  $k$  ها  $s_k(\rho) = s_k(\rho^*)$  گوئیم  $\rho$  و  $\rho^*$  ویلف-هم‌ارز هستند. تعدادی از هم‌ارزی‌های ویلف با در نظر گرفتن طرح یک جایگشت، مانند شکل‌های ۱ و ۲ مشخص می‌شوند. همه نقاط در طرح  $\pi$  در مربع  $[1, k] \times [1, k]$  قرار دارند و بنابراین ممکن است تقارن‌های مختلف مربع را اعمال کنیم که برگشت‌ها را روی مجموعه  $S_k$  به دست آوریم. برای  $\pi \in S_k$ ، تعریف می‌کنیم  $\pi^r = \pi_k \cdots \pi_1$  و  $\pi^c = (k+1-\pi_1) \cdots (k+1-\pi_k)$  که به ترتیب معکوس و مکمل  $\pi$  نامیده می‌شوند. توجه کنید که طرح  $\pi^r$  از انعکاس طرح  $\pi$  در امتداد خط عمودی در  $\frac{k+1}{2}$  گرفته می‌شود و  $\pi^c$  از انعکاس طرح  $\pi$  در امتداد خط افقی در  $\frac{k+1}{2}$  گرفته می‌شود. مهم دیگری را با در نظر گرفتن  $\pi^{-1}$  به دست می‌آوریم که طرح  $\pi$  را روی خط  $y = x$  منعکس می‌کند. برای مثال نمودارهای  $\pi = 1342$  و  $\pi^r = 2431$  و  $\pi^c = 4213$  و  $\pi^{-1} = 1423$  در شکل ۲ نشان داده شده‌اند. توجه کنید که اگر  $\pi$  شامل  $\rho$  باشد، آن‌گاه  $\pi^r$  شامل  $\rho^r$ ،  $\pi^c$  شامل  $\rho^c$  و  $\pi^{-1}$  شامل  $\rho^{-1}$  است. بنابراین این برگشت‌ها روی  $S_k$  یک نگاشت دوسویی نیز بین  $S_k(\rho)$ ،  $S_k(\rho^r)$ ،  $S_k(\rho^c)$  و  $S_k(\rho^{-1})$  ایجاد می‌کند. به‌عنوان یک نتیجه، برای هر الگوی  $\rho$ ، ویلف-هم‌ارز با  $\rho^c$ ،  $\rho^r$  و  $\rho^{-1}$  است. این ویلف-هم‌ارزها که از عمل گروه دوجهی روی طرح  $\pi$  نتیجه می‌شود، به‌عنوان ویلف-هم‌ارزهای بدیهی شناخته می‌شوند.



شکل ۲. نمودارهای  $\pi = 1342$  و  $\pi^r = 2431$  و  $\pi^c = 4213$  و  $\pi^{-1} = 1423$  از چپ به راست

Figure 2: The plots of  $\pi = 1342$ ,  $\pi^r = 2431$ ,  $\pi^c = 4213$  and  $\pi^{-1} = 1423$

با ویلف-هم‌ارز بدیهی، داریم:

$$s_k(132) = s_k(213) = s_k(231) = s_k(312), \quad s_k(123) = s_k(321).$$

در حقیقت، برای هر  $\rho \in S_3$  نتیجه می‌شود  $s_k(\rho) = \frac{\binom{2k}{k}}{k+1}$ . به حالت  $s_k(132)$  توجه کنید. داریم  $s_0(132) = s_1(132) = s_2(132)$ . حال،  $\pi \in S_k(132)$  در نظر بگیرید و فرض کنیم که  $\pi_i = k$  برای هر  $\pi_a$  و  $\pi_b$  با  $a < i < b$ ، باید  $\pi_a > \pi_b$ ؛ در غیر این صورت  $\pi_a k \pi_b$  یک الگوی ۱۳۲ شکل می‌دهد. از آن‌جا که  $\pi_1 \cdots \pi_{i-1}$  و  $\pi_{i+1} \cdots \pi_k$  هم باید از ۱۳۲ اجتناب کنند، ایجاب می‌کند که

$$s_k(132) = \sum_{i=1}^k s_{i-1}(132) \cdot s_{k-i}(132).$$

به راحتی قابل بررسی است که  $s_k(\rho) = \frac{\binom{2k}{k}}{k+1}$  در این رابطه بازگشتی صدق می‌کند و با مقادیر اولیه مورد نیاز مطابقت دارد. توجه کنید که  $s_k(\rho)$  عدد  $k$ ام کاتالان است. جایگشت‌های الگو-اجتناب، تنها یکی از صدها مباحثی است که دارای زمینه‌های ترکیبیاتی شمارشی هستند. مثلاً استنلی<sup>۴</sup> [۱۶] بیش از ۲۰۰ پیشامد از دنباله مشهور اعداد کاتالان را جمع‌آوری کرده است.

<sup>4</sup>Stanley

همچنین تعدادی نگاشت دوسویی بین  $S_k(123)$  و  $S_k(132)$  وجود دارد که ارقام مختلف را حفظ می‌کند. برای مثال، متن بونا<sup>۵</sup> در [۷] را ببینید.

اگرچه  $s_k(\rho)$  برای الگوهای به طول حداکثر ۳ فقط به  $k$  و  $|\rho|$  بستگی دارد، اما حالت کلی پیچیده‌تر است. مشخص است که اگر  $\rho \in S_4$ ، آن‌گاه  $\rho$  ویلف-هم‌ارز نسبت به  $1342$ ،  $1234$  یا  $1324$  است اما  $s_k(1342)$ ،  $s_k(1234)$  و  $s_k(1324)$  برای  $k$  به قدر کافی بزرگ، سه مقدار متمایز هستند. بونا [۶] نشان داد که دنباله  $s_k(1342)$  دارای یک تابع مولد جبری غیرگویا است. گسل [۱۰] نشان داد که دنباله  $s_k(1234)$  دارای یک تابع مولد هولونرم غیرجبری است. اگرچه فرمول کلی شناخته شده برای  $s_k(1324)$  وجود ندارد و درک بهتر ساختار  $S_k(1324)$  برای  $k$  بزرگ یک بخش فعال در حال پیشرفت از پژوهش است.

الگوهایی که تاکنون در مورد آن‌ها بحث کردیم به‌عنوان الگوهای جایگشتی کلاسیک شناخته می‌شوند. تعدادی از تغییرات در نظر گرفته شده است که شامل الگوهای متوالی (جایی که ارقام  $\rho$  باید در موقعیت‌های مجاور  $\pi$  ظاهر شوند)، الگوهای پیوندی (یک ترکیب بین الگوهای متوالی و کلاسیک) و الگوهای دوگوشی (که روی اندازه‌های نسبی ارقامی که یک کپی از  $\rho$  تشکیل می‌دهند، و نه فقط در موقعیت‌های آن‌ها، محدودیت‌هایی ایجاد می‌کند) است. الگوهای بارد، یعنی جایی که  $\pi$  از  $\rho$  اجتناب می‌کند، مگر آن‌که  $\rho$  بخشی از یک الگوی مشخص بزرگتر از  $\pi$  باشد، در توصیف جایگشت‌های قابل مرتب‌سازی پس از عبور از پشته و در توصیف ویژگی‌های هندسی از وارپته شویوت مفید بوده‌اند. انواع دیگر سوالات شمارشی نیز مورد توجه هستند. پژوهشگران کلمات الگو-اجتناب، افرازهای مجموعه‌ای، افرازهای اعداد صحیح، مسیرهای مشبک و دیگر اشیا ترکیبی با تعاریف مناسب از الگوها را برشمرده‌اند. اجتناب الگویی به خودی خود یک حالت خاص از سوال عمومی‌تر مورد مطالعه است؛

$$S_{k,c}(\rho) = \{\pi \in S_k \mid \text{است } \rho \text{ از } c \text{ کپی } \pi\}$$

تاکنون ما روی وضعیتی که  $c = 0$  باشد، تمرکز کرده‌ایم. برای بعضی الگوهای خاص  $\rho$ ،  $|S_{k,c}(\rho)|$  برای  $c \geq 1$  شناخته شده است، اما در کل، سوال مهار الگو سخت است. تاریخچه جایگشت‌های الگو-اجتناب بسیار گسترده است، اما در ادامه این مقاله روی دسته‌بندی‌های الگو متمرکز می‌شویم. به عبارت دیگر با یک الگوی  $\rho$ ، حداکثر مقدار  $c$  را در نظر می‌گیریم (به‌عنوان تابعی از  $k$  داده شده) که  $S_{k,c}(\rho)$  برای آن ناتهی است.

### ۳. دسته‌بندی

در این بخش، حداکثر تعداد کپی از  $\rho$  را در نظر می‌گیریم که می‌تواند در یک جایگشت به طول  $k$  رخ دهد. فرض کنیم  $\nu(\rho, \pi)$  تعداد رخ داده‌های  $\rho$  در  $\pi$  باشد. اگر بخواهیم  $\max_{\pi \in S_k} \nu(\rho, \pi)$  را تعیین کنیم، سودمند است که به جای اینکه فقط تعداد کپی‌ها را گزارش کنیم، درصد کپی‌های  $\rho$  از همه زیردنباله‌های به طول  $|\rho|$  در  $\pi$  را گزارش دهیم.

**تعریف ۱.۳.** چگالی دسته‌بندی  $\rho$  که با  $d(\rho)$  نشان داده می‌شود، به صورت زیر است:

$$d(\rho) = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\max_{\pi \in S_k} \nu(\rho, \pi)}{\binom{k}{|\rho|}}.$$

در ادامه این بخش تاریخچه دسته‌بندی را بررسی می‌کنیم. اگرچه برای آخرین ارتباطمان با شیمی فیزیک، ما به دسته‌بندی در نوع خاصی از جایگشت اهمیت می‌دهیم که در بخش بعدی به آن پرداخته می‌شود. خواننده‌ای که بیشتر از دسته‌بندی الگویی

<sup>5</sup>Bóna

به این ارتباط شیمی علاقمند است، ممکن است تعریفِ مجموع در زیر را بخواند و سپس به بخش مربوط به جایگشت‌های متناوب بپردازد.

ساده‌ترین الگو به طول  $a$  برای دسته‌بندی کردن، الگوی افزایش یکنواخت است. داریم  $d(I_a) = 1$ ، زیرا هر زیر دنباله از  $I_k$  به طول  $a$  یک کپی از  $I_a$  است. برای الگوهای کلی‌تر ممکن است در ابتدا مشخص نباشد که  $d(\rho)$  وجود دارد، اما یک استدلال منتشر نشده از فرد گالوین<sup>۶</sup> (شرح داده شده توسط پرایس<sup>۷</sup> در [۱۵]) نشان می‌دهد که  $\frac{\max_{\pi \in S_k} \nu(\rho, \pi)}{\binom{k}{|\rho|}}$  برای  $k \geq |\rho|$  نافزایشی است. زیرا این دنباله، که به وضوح از پایین کراندار به  $\infty$  است، همگرا می‌شود. نوع اصلی دیگر الگوی جایگشتی که می‌توانیم چیزی در مورد  $d(\rho)$  بگوییم، الگوهای لایه‌ای است.

**تعریف ۲.۳.** مجموع جایگشت‌های  $\alpha = \alpha_1 \cdots \alpha_a$  و  $\beta = \beta_1 \cdots \beta_b$  که با  $\alpha \oplus \beta$  نشان داده می‌شود، از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\alpha \oplus \beta = \begin{cases} \alpha_i & 1 \leq i \leq a \\ a + \beta_{i-a} & a + 1 \leq i \leq a + b \end{cases}$$

**تعریف ۳.۳.** یک جایگشت، جایگشت لایه‌ای است اگر بتوان آن را به فرم  $J_{a_1} \oplus J_{a_2} \oplus \cdots \oplus J_{a_p}$  به‌ازای اعداد صحیح مثبت  $a_1, \dots, a_p$  نوشت.

جایگشت نشان داده شده در شکل ۳ مثالی از یک جایگشت لایه‌ای است چون به فرم  $J_1 \oplus J_2 \oplus J_2 \oplus J_2 \oplus J_1$  است. اگرچه ساده‌ترین الگوی جایگشت لایه‌ای نابديهی،  $J_1 \oplus J_2 = 132$  است. استرامکوئیست<sup>۸</sup> [۱۷] نشان داد اگر  $\rho$  لایه‌ای باشد، آن‌گاه  $\frac{\max_{\pi \in S_k} \nu(\rho, \pi)}{\binom{k}{|\rho|}}$  توسط یک  $\pi$  لایه‌ای به دست آمده است. استرامکوئیست و بعدتر بارتن<sup>۹</sup> [۱۷] با تمرکز بر لایه

$\pi \in S_k$  نشان دادند که  $d(132) = 2\sqrt{3} - 3 \simeq 0.464$  و نشان دادند که  $\frac{\max_{\pi \in S_k} \nu(\rho, \pi)}{\binom{k}{|\rho|}}$  هنگامی به دست آمده است که

لایه بالایی از اندازه  $k \simeq \left(\frac{3 - \sqrt{3}}{2}\right)k$  بوده و ورودی‌های باقی‌مانده به صورت بازگشتی با یک جایگشت لایه‌ای ۱۳۲-دسته‌ای بهینه به طول  $k - a$  پر شوند.

برای الگوی به طول ۴، پرایس [۱۵] نشان داد که  $d(1432)$  از ریشه  $x^3 - 12x^2 + 156x - 64$  به دست آمده است و  $d(2143) = \frac{3}{8}$ . بعدتر آلبرت و همکاران [۱] نشان دادند که  $d(1243) = \frac{3}{8}$ . کران‌های برای  $d(1324)$ ،  $d(1342)$  و  $d(2413)$  شناخته شده هستند. اما هنوز معلوم نشده است که آیا دقیق هستند یا نه؟ حالت ۱۳۲۴، این را نشان می‌دهد که ممکن است یک الگو، الگوی لایه‌ای باشد و اما تشخیص آن از روی چگالی دسته‌بندی ساده نباشد. انواع دسته‌بندی‌های دیگر برای هر دو الگوهای دسته‌بندی به جایگشت‌ها و کلمات وجود دارد (برای مثال، جایگشت با ارقام تکراری) [۵، ۸، ۱۱، ۱۸، ۱۹، ۲۰]، اما در حالت کلی، مسائل دسته‌بندی پیشرفت کندتری نسبت به مسائل اجتناب از الگو داشته است.

#### ۴. دسته‌بندی در جایگشت‌های متناوب

به جای تمرکز روی دسته‌بندی همه جایگشت‌ها، در ادامه این مقاله بر روی دسته‌بندی الگوها به جایگشت‌هایی با محدودیت‌های بیشتر تمرکز خواهیم کرد. این خانواده از مسائل دسته‌بندی، پیوند جدیدی بین جایگشت‌ها و شیمی فیزیک فراهم خواهد کرد.

<sup>۶</sup>Fred Galvin <sup>۷</sup>Price <sup>۸</sup>Stromquist <sup>۹</sup>Barton



تعریف ۱.۴. جایگشت  $\pi$  یک جایگشت متناوب است اگر

$$\pi_1 < \pi_2 > \pi_3 < \pi_4 \dots$$

جایگشت‌های متناوب به نام جایگشت‌های زیگ-زاگ یا جایگشت‌های بالا-پایین نیز شناخته می‌شوند. آن‌ها را نخستین بار آندره [۲، ۳] در قرن نوزدهم مطالعه کرد. فرض کنیم  $A_k$  مجموعه جایگشت‌های متناوب به طول  $k$  باشد. آندره نتیجه شگفت‌انگیزی را ثابت کرد که

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{|A_k| x^k}{k!} = \sec(x) + \tan(x),$$

که یک تفسیر ترکیبیاتی برای بسط یک سری از توابع مثلثاتی ارائه می‌دهد. حال، به جای تعریف چگالی دسته‌بندی که در بالا بیان شد، تعریف تعدیل شده زیر را در نظر می‌گیریم.

تعریف ۲.۴. چگالی دسته‌بندی متناوب  $\rho$  که با  $d_A(\rho)$  نشان داده می‌شود، برابر است با

$$d_A(\rho) = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\max_{\pi \in A_k} \nu(\rho, \pi)}{\binom{k}{|\rho|}}.$$

اگرچه برای شیمی و یا شیمی‌دان و نتایج آینده آن‌ها ضروری به نظر نمی‌رسد، اما خواننده علاقه‌مند ممکن است بخواهد  $d_A(\rho)$  را با چگالی دسته‌بندی کلاسیک  $d_\rho$  که در بخش قبل معرفی شد، مقایسه کند. می‌دانیم  $d(\rho)$  وجود دارد، زیرا

$$\frac{\max_{\pi \in S_k} \nu(\rho, \pi)}{\binom{k}{|\rho|}},$$

نسبت به  $k$  نوافزایشی است. اگرچه وقتی توجه‌مان را به جایگشت‌های متناوب محدود می‌کنیم، موضوع دیگر برای  $\frac{\max_{\pi \in A_k} \nu(\rho, \pi)}{\binom{k}{|\rho|}}$  اینگونه نبوده و این کسر نوافزایشی نیست. اگر  $d_A(\rho)$  وجود داشته باشد، بی‌درنگ برای هر الگوی  $\rho$ ، به دست می‌آوریم  $d_A(\rho) \leq d(\rho)$ ، زیرا  $A_k \subseteq S_k$ ، در واقع معلوم شده که برای هر الگوی  $\rho$ ،  $d_A(\rho) = d(\rho)$ . چون  $d(\rho)$  وجود دارد، ممکن است دنباله‌ای از جایگشت‌ها با  $\tau_k \in S_k$  بسازیم به طوری که  $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\nu(\rho, \tau_k)}{\binom{k}{|\rho|}} = d(\rho)$ . اثبات این‌که  $d_A(\rho) = d(\rho)$  به ساختاری بستگی دارد که هر نقطه در طرح  $\tau_k$  را با یک جایگشت متناوب جایگزین می‌کند تا یک دنباله از جایگشت‌های متناوب  $\sigma_k$  با  $\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\nu(\rho, \sigma_k)}{\binom{k}{|\rho|}} = d(\rho)$  نیز تولید کند.

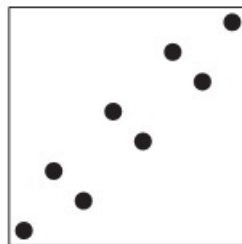
برای دیدن ارتباط با شیمی فیزیک، مسئله آخری که آن‌را در نظر می‌گیریم، دسته‌بندی  $I_a$  به یک جایگشت متناوب به طول  $k$  است. ما از قبل راه بهینه برای دسته‌بندی  $I_a$  به جایگشت دلخواه به طول  $k$  را می‌دانیم که آن‌را به  $I_k$  دسته‌بندی می‌کنیم، جایی که هر زیردنباله به طول  $a$  یک کپی از  $I_a$  است. اگرچه  $I_k \notin A_k$ ، برای رسیدگی به این، جایگشت متناوب  $\hat{I}_k$  را می‌سازیم

<sup>10</sup> André

که به صورت زیر تعریف شده است:

$$\hat{I}_k = \begin{cases} J_1 \oplus J_2 \oplus \dots \oplus J_2 \oplus J_1 & k \text{ زوج است.} \\ \underbrace{J_1 \oplus J_2 \oplus \dots \oplus J_2}_{\substack{\frac{k}{2} - 1 \\ \text{بار}}} & k \text{ فرد است.} \end{cases}$$

به عنوان یک مثال، طرح  $\hat{I}_k$  در شکل ۳ داده شده است.



شکل ۳. نمودار  $\hat{I}_8$

Figure 3: The plot of  $\hat{I}_8$

اگرچه برای مقادیر خاص  $k$ ،  $\frac{\nu(I_a, \hat{I}_k)}{\binom{k}{a}} < 1$ ، ادعا می‌کنیم که  $\hat{I}_k$  ساختاری است که ثابت می‌کند  $d_A(I_a) = 1$ . برای موردی که  $I_3 = ۱۲۳$  را به  $\hat{I}_k = \pi$  دسته‌بندی می‌کنیم، توجه کنید که هر زیر دنباله به طول ۳ هنوز هم یک الگو تشکیل می‌دهد، مگر اینکه ۲ رقم از زیر دنباله از لایه یکسانی از  $\hat{I}_k$  بیاید. در حالی که  $\binom{k}{3}$  زیر دنباله به طول ۳ در  $\hat{I}_k$  وجود دارد، کمتر از  $\binom{k}{3}$  زیر دنباله با دو رقم از لایه یکسان  $\hat{I}_k$  وجود دارد. بنابراین  $\nu(I_3, \hat{I}_k) \geq \binom{k}{3} - 2\binom{k}{3}$  و

$$1 \geq d_A(۱۲۳) \geq \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{\binom{k}{3} - 2\binom{k}{3}}{\binom{k}{3}} = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{k-8}{k-2} = 1.$$

از آنجا که یک زیر دنباله به طول ۳ از  $\hat{I}_k$  تنها زمانی نمی‌تواند یک الگوی ۱۲۳ باشد که از ارقام مجاوری استفاده کند که باید به وسیله تعریف جایگشت متناوب در ترتیب نزولی باشد، در واقع  $\hat{I}_k$  جایگشتی متناوب به طول  $k$  با حداکثر تعداد از کپی‌های ۱۲۳ است. پیدا کردن مقدار دقیق  $\nu(۱۲۳, \hat{I}_k)$  تمرینی ساده است. داریم:

قضیه ۳.۴. حداکثر تعداد کپی‌های ۱۲۳ در جایگشت متناوب به طول  $k$  از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\nu(۱۲۳, \hat{I}_k) = \begin{cases} \frac{(k-2)(k^2 - 4k + 6)}{6}, & k \text{ زوج است،} \\ \frac{(k-1)(k-2)(k-3)}{6}, & k \text{ فرد است.} \end{cases}$$

1 IA												18 VIIIA																																	
1 H (1,0)	2 IIA										13 IIIA	14 IVA	15 VA	16 VIA	17 VIIA	2 He (1,0)																													
3 Li (2,0)	4 Be (2,0)											5 B (2,1)	6 C (2,1)	7 N (2,1)	8 O (2,1)	9 F (2,1)	10 Ne (2,1)																												
11 Na (3,0)	12 Mg (3,0)	3 IIIA	4 IVB	5 VB	6 VIB	7 VIIB	8 VIIIB	9 VIIIB	10 VIIIB	11 IB	12 IIB	13 Al (3,1)	14 Si (3,1)	15 P (3,1)	16 S (3,1)	17 Cl (3,1)	18 Ar (3,1)																												
19 K (4,0)	20 Ca (4,0)	21 Sc (3,2)	22 Ti (3,2)	23 V (3,2)	24 Cr (3,2)	25 Mn (3,2)	26 Fe (3,2)	27 Co (3,2)	28 Ni (3,2)	29 Cu (3,2)	30 Zn (3,2)	31 Ga (4,1)	32 Ge (4,1)	33 As (4,1)	34 Se (4,1)	35 Br (4,1)	36 Kr (4,1)																												
37 Rb (5,0)	38 Sr (5,0)	39 Y (4,2)	40 Zr (4,2)	41 Nb (4,2)	42 Mo (4,2)	43 Tc (4,2)	44 Ru (4,2)	45 Rh (4,2)	46 Pd (4,2)	47 Ag (4,2)	48 Cd (4,2)	49 In (5,1)	50 Sn (5,1)	51 Sb (5,1)	52 Te (5,1)	53 I (5,1)	54 Xe (5,1)																												
55 Cs (6,0)	56 Ba (6,0)	57 La (5,2)	72 Hf (5,2)	73 Ta (5,2)	74 W (5,2)	75 Re (5,2)	76 Os (5,2)	77 Ir (5,2)	78 Pt (5,2)	79 Au (5,2)	80 Hg (5,2)	81 Tl (6,1)	82 Pb (6,1)	83 Bi (6,1)	84 Po (6,1)	85 At (6,1)	86 Rn (6,1)																												
87 Fr (7,0)	88 Ra (7,0)	89 Ac (6,2)	104 Rf (6,2)	105 Db (6,2)	106 Sg (6,2)	107 Bh (6,2)	108 Hs (6,2)	109 Mt (6,2)	110 Ds (6,2)	111 Rg (6,2)	112 Cn (6,2)	113 Uut (7,1)	114 Fl (7,1)	115 Uup (7,1)	116 Lv (7,1)	117 Uus (7,1)	118 Uuo (7,1)																												
		<table border="1"> <tr> <td>58 Ce (4,3)</td> <td>59 Pr (4,3)</td> <td>60 Nd (4,3)</td> <td>61 Pm (4,3)</td> <td>62 Sm (4,3)</td> <td>63 Eu (4,3)</td> <td>64 Gd (4,3)</td> <td>65 Tb (4,3)</td> <td>66 Dy (4,3)</td> <td>67 Ho (4,3)</td> <td>68 Er (4,3)</td> <td>69 Tm (4,3)</td> <td>70 Yb (4,3)</td> <td>71 Lu (4,3)</td> </tr> <tr> <td>90 Th (5,3)</td> <td>91 Pa (5,3)</td> <td>92 U (5,3)</td> <td>93 Np (5,3)</td> <td>94 Pu (5,3)</td> <td>95 Am (5,3)</td> <td>96 Cm (5,3)</td> <td>97 Bk (5,3)</td> <td>98 Cf (5,3)</td> <td>99 Es (5,3)</td> <td>100 Fm (5,3)</td> <td>101 Md (5,3)</td> <td>102 No (5,3)</td> <td>103 Lr (5,3)</td> </tr> </table>																58 Ce (4,3)	59 Pr (4,3)	60 Nd (4,3)	61 Pm (4,3)	62 Sm (4,3)	63 Eu (4,3)	64 Gd (4,3)	65 Tb (4,3)	66 Dy (4,3)	67 Ho (4,3)	68 Er (4,3)	69 Tm (4,3)	70 Yb (4,3)	71 Lu (4,3)	90 Th (5,3)	91 Pa (5,3)	92 U (5,3)	93 Np (5,3)	94 Pu (5,3)	95 Am (5,3)	96 Cm (5,3)	97 Bk (5,3)	98 Cf (5,3)	99 Es (5,3)	100 Fm (5,3)	101 Md (5,3)	102 No (5,3)	103 Lr (5,3)
58 Ce (4,3)	59 Pr (4,3)	60 Nd (4,3)	61 Pm (4,3)	62 Sm (4,3)	63 Eu (4,3)	64 Gd (4,3)	65 Tb (4,3)	66 Dy (4,3)	67 Ho (4,3)	68 Er (4,3)	69 Tm (4,3)	70 Yb (4,3)	71 Lu (4,3)																																
90 Th (5,3)	91 Pa (5,3)	92 U (5,3)	93 Np (5,3)	94 Pu (5,3)	95 Am (5,3)	96 Cm (5,3)	97 Bk (5,3)	98 Cf (5,3)	99 Es (5,3)	100 Fm (5,3)	101 Md (5,3)	102 No (5,3)	103 Lr (5,3)																																

شکل ۴. جدول تناوبی عناصر شیمیایی

Figure 4: The periodic table of chemical elements

اثبات. در حالتی که  $k$  زوج است،  $1 - \frac{k}{2}$  لایه از اندازه ۲ و دو لایه از اندازه ۱ در  $\widehat{I}_k$  وجود دارد. یک کپی از  $123$  می‌تواند با استفاده از هر دو، یکی یا هیچ کدام از لایه‌ها از اندازه ۱ ساخته شود. اگر از هر دو لایه از سایز ۱ استفاده کنیم، فقط می‌ماند که یک لایه از اندازه ۲ انتخاب کنیم و سپس یک نقطه از لایه انتخاب کنیم که الگوی  $123$  کامل شود. اگر از یک لایه از اندازه ۱ استفاده کنیم، ابتدا باید لایه از اندازه ۱ و سپس دو لایه از اندازه ۲ و یک نقطه از هر کدام از لایه‌ها انتخاب کنیم. اگر از هیچ کدام از لایه‌های با اندازه ۱ استفاده نکنیم، آنگاه نیاز است که سه لایه مجزا از اندازه ۲ و سپس یک نقطه از هر کدام از لایه‌ها انتخاب کنیم. بنابراین

$$2 \binom{k}{2} + 8 \binom{\frac{k}{2}}{2} + 8 \binom{\frac{k}{2}}{3} = \frac{(k-2)(k^2 - 4k + 6)}{6}$$

کپی از  $123$  در  $\widehat{I}_k$  وجود دارد، اگر  $k$  زوج است.

حالت فرد هم مشابه همین است، با این تنظیم که اکنون  $\frac{k-1}{2}$  لایه از اندازه ۲ و یک لایه از اندازه ۱ در  $\widehat{I}_k$  وجود دارد.  $4 \binom{k-1}{2}$  راه برای ساختن یک الگوی  $123$  با استفاده از لایه اولیه از اندازه ۱ و دو لایه از اندازه ۲ وجود دارد. از طرف دیگر، باید سه لایه مجزا از اندازه ۲ و سپس یک نقطه از هر کدام از لایه‌ها انتخاب کنیم. بنابراین

$$4 \binom{k-1}{2} + 8 \binom{k-1}{3} = \frac{(k-1)(k-2)(k-3)}{6}$$

□

کپی از  $123$  در  $\widehat{I}_k$  وجود دارد، هرگاه  $k$  فرد است.

در حالی که این استدلال پیچیده نیست، خود اعداد جالب هستند. جدول ۱ مقادیر  $\nu(123, \hat{I}_k)$  را، برای  $4 \leq k \leq 10$ ، نشان می‌دهد. این دنباله  $A168380$  در دایرة المعارف آنلاین دنباله اعداد صحیح است [۱۴]. اگرچه توصیف اولیه شاید تعجب‌آور باشد: این دنباله اعداد اتمی فلزات قلیایی خاکی جدول تناوبی است. برای تأکید شکل ۴ را ببینید. مقادیر  $\nu(123, \hat{I}_k)$  مربوط به اعداد اتمی در ستون دوم است که به عنوان گروه  $AII - 2$  برچسب گذاری شده است. به عبارت دیگر، دنباله شبه چندجمله‌ای  $2, 4, 12, 20, 38, 56, 88, \dots$  نه تنها مقادیر  $\nu(123, \hat{I}_k)$ ، بلکه اعداد اتمی هلیوم، بریلیوم، منیزیم، کلسیم و موارد دیگر را نیز به دست می‌دهد. این غیر منتظره است! اگرچه الگوهای جایگشتی در زمینه‌های متنوع ظاهر می‌شوند، ارتباط با شیمی فیزیک جدید و کاملاً متفاوت از سایر ظاهرهای انتزاعی‌تر الگوها است. در ادامه این مقاله یک اثبات دوگانه ارائه می‌دهیم که مسأله دسته‌بندی الگوی مان را به زبان شیمی فیزیک پیوند میدهد.

جدول ۱. مقادیر  $\nu(123, \hat{I}_k)$  برای  $4 \leq k \leq 10$

Table 1: Values of  $\nu(123, \hat{I}_k)$  for  $4 \leq k \leq 10$

$k$	4	5	6	7	8	9	10
$\nu(123, \hat{I}_k)$	2	4	12	20	38	56	88

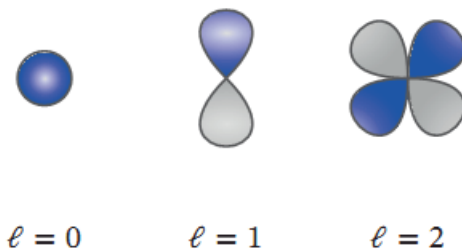
## ۵. شیمی فیزیک

در جدول تناوبی، عدد اتمی یک عنصر تعداد پروتون‌ها در یک اتم از آن عنصر است. در حالی که یون‌های مختلف وجود دارند، عدد اتمی تعداد الکترون در یک اتم خنثی را نیز می‌دهد. در مدل شرودینگر، الکترون‌ها در فضا در اطراف هسته اتم حرکت می‌کنند و از معادله موج شرودینگر برای پیش‌بینی اوربیتال‌های احتمالی الکترون استفاده می‌شود، یعنی نواحی که احتمال بیش‌تری برای یافتن الکترون‌ها وجود دارد. در فضای سه‌بعدی، برای توصیف اندازه، شکل و جهت اوربیتال، سه متغیر نیاز داریم. این‌ها عدد کوانتومی اصلی  $(n)$  (این عدد که همیشه عددی صحیح و مثبت است، بیانگر لایه‌ای است که الکترون در آن قرار دارد (مترجمان))، عدد کوانتومی زاویه‌ای  $(\ell)$  (عدد کوانتومی زاویه‌ای، شکل اوربیتال را توصیف می‌کند که چند خط بعد به آن پرداخته خواهد شد (مترجمان)) و عدد کوانتومی مغناطیسی  $(m)$  (این عدد نشان‌دهنده سطح انرژی موجود در هر لایه الکترونی است (مترجمان)) هستند. جزئیات بیش‌تر را می‌توان در هر کتاب شیمی استاندارد مانند [۱۳] یافت.

عدد کوانتومی اصلی  $n$  با اندازه یک اوربیتال الکترونی مطابقت دارد.  $n$  به عنوان یک عدد صحیح مثبت داده می‌شود و مقادیر بزرگتر  $n$  مربوط به اوربیتال‌های بزرگتر است. گفته می‌شود تمام اوربیتال‌هایی که عدد کوانتومی اصلی یکسانی دارند در یک پوسته اتم قرار دارند.

عدد کوانتومی زاویه‌ای  $(\ell)$ ، شکل یک اوربیتال را می‌دهد. در حالی که ممکن است چندین الکترون در یک پوسته باشند، عدد کوانتومی زاویه‌ای اوربیتال‌های یک پوسته را به زیرپوسته‌ها تقسیم می‌کند. مقادیر بزرگتر  $n$ ، فضای بیش‌تری را برای اشکال مختلف زیرپوسته‌ها فراهم می‌کند. با توجه به  $n$ ،  $\ell$  یک عدد صحیح است با شرط  $0 \leq \ell \leq n-1$ . اشکال اوربیتال‌ها برای مقادیر کوچک  $\ell$  در شکل ۵ نشان داده شده است. برای تعیین جفت‌های  $(n, \ell)$  که زیرپوسته‌ها را در یک اتم خاص توصیف می‌کنند، رنگ جدول تناوبی ارائه شده در شکل ۴ را در نظر بگیرید. هر رنگ با یک مقدار  $\ell$  مطابقت دارد. از آن‌جا که  $\ell \leq n-1$ ، اولین عناصر با مقدار  $\ell$  خاص، دارای عدد اصلی  $n = \ell + 1$  هستند. ردیف‌های بعدی عناصر با مقدار  $\ell$  خاص  $n$  به اندازه‌ی ۱ افزایش می‌یابد. این یک نگاهت مستقیم از یک عنصر به یک جفت  $(n, \ell)$  می‌دهد. هر جفت

$(n, \ell)$  که مربوط به عنصری با عدد اتمی کوچکتر باشد نیز در عنصر اصلی امکان پذیر است. برای مثال کلسیم (عدد اتمی  $20$ ) به صورت  $\ell = 0$  سایه زده می شود. این ردیف چهارم اوربیتال های  $\ell = 0$  است. بنابراین کلسیم دارای اوربیتال هایی با  $(n, \ell) = (4, 0)$  است. با این حال، با نگاه کردن به عناصری با اعداد اتمی کوچکتر، می بینیم که کلسیم دارای اوربیتال هایی با  $(n, \ell) \in \{(1, 0), (2, 0), (2, 1), (3, 0), (3, 1)\}$  است. توجه کنید که  $(n, \ell) = (3, 2)$  ابتدا در اسکاندیم (عدد اتمی  $21$ ) رخ می دهد، بنابراین کلسیم زیر پوسته (لایه فرعی)  $(n, \ell) = (3, 2)$  ندارد.



شکل ۵. اشکال مداری الکترونی ساده

Figure 5: Simple electron orbital shape

اگرچه تنها یک راه برای جهت دهی یک مدار  $\ell = 0$  (کروی) به دور هسته اتم وجود دارد، زیرپوسته ها با  $\ell \geq 1$  را می توان به روش های مختلف جهت گیری کرد. عدد کوانتومی مغناطیسی  $m$  جهت اوربیتال را در فضا توصیف می کند. با توجه به  $n$  و  $m$ ،  $\ell$  به عنوان یک عدد صحیح گزارش می شود به طوری که  $-\ell \leq m \leq \ell$ . برای مثال، یک اوربیتال قطبی ( $\ell = 1$ ) سه جهت ممکن دارد، یعنی  $m = -1$ ،  $m = 0$  و  $m = 1$ ، که می تواند به عنوان جهت گیری این شکل، مدار در امتداد محور  $x$ ، محور  $y$  یا محور  $z$  در فضا در نظر گرفته شود.

در نهایت یک عدد کوانتومی چهارم وجود دارد که مستقل از سه عدد دیگر است که به آن عدد کوانتومی اسپین ( $s$ ) می گویند. برای هر ترکیب معتبری از  $(n, \ell, m)$  دو اسپین ممکن برای یک الکترون وجود دارد.

به طور خلاصه در مدل شرودینگر از اتم، جفت الکترون ها با چند عدد صحیح  $(n, \ell, m)$  در تناظر یک به یک هستند به طوری که  $n \geq 1$ ،  $0 \leq \ell \leq n - 1$  و  $m \leq \ell$ . با این حال دانستن بالاترین مقدار  $n$  که در یک اتم خاص ظاهر می شود به این معنی نیست که همه چندتایی های  $(n, \ell, m)$  به دنبال این نابرابری ها ظاهر می شوند. مشاهده کنید که در جدول تناوبی همیشه دو پوسته با اوربیتال های شکل  $\ell$  قبل از معرفی اوربیتال هایی با شکل  $\ell + 1$  وجود دارد.

## ۶. تناظر یک به یک

می خواهیم کپی های  $123$  در  $\hat{I}_k$  را به چندتایی های معتبر  $(n, \ell, m)$  از اعداد کوانتومی برای الکترون های فلزات قلیایی خاکی، پیوند دهیم.

ابتدا به عدد اسپین (چرخشی) ( $s$ ) می پردازیم. همان طور که برای هر چندتایی  $(n, \ell, m)$  معتبر، دو عدد اسپین وجود دارد، توجه داشته باشید که کپی های  $123$  در  $\hat{I}_k$  به صورت جفت می آیند. به ویژه اگر  $\pi_a \pi_b \pi_c$  یک الگوی  $123$  در  $\hat{I}_k = \pi$  تشکیل دهد، آن گاه  $\pi_a$ ،  $\pi_b$  و  $\pi_c$  باید از لایه های مختلف  $\pi$  باشد. فرض کنیم  $\pi'_b$  رقم دیگر در همان لایه  $\pi_b$  باشد. پس  $\pi_a \pi_b \pi_c$  دومین الگوی  $123$  در  $\hat{I}_k$  است. دو کپی از  $123$  که از لایه های یکسان  $\hat{I}_k$  برای رقم دوم استفاده می کنند، مربوط به جفت الکترون هایی است که اعداد کوانتومی اصلی ( $n$ )، زاویه ای ( $\ell$ ) و مغناطیسی ( $m$ ) یکسان دارند اما اعداد اسپینی متفاوتی دارند.

اکنون برای اعداد کوانتومی باقی مانده،  $m$  مقدار "۱" را در الگوی ۱۲۳ رمزگذاری می‌کند،  $l$  لایه‌ی "۲" را رمزگذاری می‌کند و  $n$  مقدار "۳" را رمزگذاری می‌کند. برای دقیق‌تر بودن، لایه  $J_1$  از  $\hat{I}_k$  را  $l$  لایه‌های باقی مانده را که با لایه‌ی ۱ شروع می‌شود، برشمارید. یک کپی  $\pi_a \pi_b \pi_c$  از ۱۲۳ در  $\hat{I}_k = \pi$  به روش زیر به چندین عدد صحیح نگاشته می‌شود:  $m$  لایه‌ای از  $\hat{I}_k$  است که  $\pi_a$  در آن یافت می‌شود. پس

$$m = \begin{cases} -\hat{m} & \pi_a \text{ کمترین داده لایه } \hat{m} \text{ است.} \\ \hat{m} & \pi_a \text{ بزرگترین داده لایه } \hat{m} \text{ است.} \end{cases}$$

$l+1$  لایه‌ای از  $\hat{I}_k$  است که  $\pi_b$  در آن یافت می‌شود. در نهایت با توجه به  $l$  و  $\pi_c$ ،  $n = \pi_c - l - 3$  را محاسبه می‌کنیم. به طور شهودی، مقادیر بزرگتر  $n$  مربوط به شکاف بزرگتر بین لایه‌بندی  $\pi_b$  و  $\pi_c$  در  $\hat{I}_k$  است، اما با یک آفست (تعادل) مناسب برای اطمینان از مثبت بودن  $n$ .

به عنوان مثال، کپی‌های ۱۲۳ در  $1325476 = J_1 \oplus J_2 \oplus J_2 \oplus J_2 = \hat{I}_7$  را در نظر بگیرید. ۲۰ کپی از ۱۲۳ در  $\hat{I}_7$  وجود دارد و این ۲۰ کپی مربوط به ۲۰ الکترون در یک اتم کلسیم است. همان‌طور که کپی‌های ۱۲۳ به صورت جفت می‌آیند، الکترون‌های موجود در کلسیم نیز به صورت ۱۰ جفت هستند که مربوط به ۱۰ چندتایی مختلف از اعداد کوانتومی  $(n, l, m)$  است. ۲۰ نسخه از ۱۲۳ در  $\hat{I}_7$  به صورت جفت با چندتایی‌های  $(n, l, m)$  متناظر آن‌ها در جدول ۲ آورده شده است. برای مثال هر دوی ۲۴۶ و ۲۵۶ کپی‌هایی از ۱۲۳ در  $\hat{I}_7$  هستند. هر دو عنصر اولیه‌ی خود را در لایه‌ی ۱ دارند، بنابراین هر دو با  $\hat{m} = 1$  مطابقت دارند. از آنجایی که ۲، رقم کوچکتر در این لایه است، داریم  $m = -1$ . می‌بینیم که در هر دو کپی،  $\pi_j$  از لایه‌ی ۲ آمده است، بنابراین  $l+1 = 2$  یعنی  $l = 1$ . در نهایت  $2 = 3 - 1 - 6 = n$ . بنابراین این دو کپی با چندتایی  $(-1, 1, 2)$  مطابقت دارد. چندتایی‌های مربوط به دیگر (جفت) کپی‌های ۱۲۳ ممکن است به طور مشابه تایید شوند. لایه‌های  $\hat{I}_7$  با رنگ‌های مختلف برای ارجاع آسان در جدول ۲ مشخص شده‌اند.

جدول ۲. کپی‌های ۱۲۳ در  $\hat{I}_7 = 1325476$  که با چندتایی‌های  $(n, l, m)$  از اعداد کوانتومی برای ۲۰ الکترون در یک اتم کلسیم مطابقت دارد

Table 2: Copies of 123 in  $\hat{I}_7 = 1325476$ , which correspond to tuples  $(n, l, m)$  of quantum numbers for the 20 electrons in an atom of calcium

copies	tuple	copies	tuple	copies	tuple
124,134	(1,0,0)	146,156	(2,1,0)	147,157	(3,1,0)
125,135	(2,0,0)	246,256	(2,1,-1)	247,257	(3,1,-1)
126,136	(3,0,0)	346,356	(2,1,1)	347,357	(3,1,1)
127,137	(4,0,0)				

ما همچنان باید نشان دهیم که نگاشت جفت‌های پیشامدهای ۱۲۳ در  $\hat{I}_k$  به چندتایی‌های صحیح، از نابرابری‌هایی تبعیت می‌کند که اعداد کوانتومی معتبر را تعیین می‌کنند. ابتدا طبق ساختار، لایه‌ی  $l$  از  $\hat{I}_k$  حاوی رقم ۱ است، در حالی که برای  $l \leq \frac{k-1}{2}$ ، لایه‌ی  $l$  شامل ارقام  $2L+1$  و  $2L$  است. وقتی  $k$  زوج باشد، لایه‌ی  $\frac{k}{2}$  دارای رقم  $k$  است.

پیشامد  $\pi_a \pi_b \pi_c$  از  $\widehat{I}_k$  را در نظر بگیرید. چون  $\pi_b$  از لایه  $l+1$  می‌آید، می‌دانیم  $l \geq 0$  و  $\pi_c$  از لایه  $l+2$  یا بالاتر می‌آید، که این ایجاب می‌کند  $\pi_c \geq 2(l+2)$ . چون  $n = \pi_c - l - 3$  داریم  $1 \geq l+1 = 2(l+2) - l - 3 = n$ . همچنین  $n \geq l+1$  ایجاب می‌کند  $l \leq n-1$ . در نهایت چون  $|m|$  نشان‌دهنده‌ی لایه‌ی  $\pi_a$  و  $l+1$  نشان‌دهنده‌ی لایه‌ی  $\pi_b$  است، همان‌طور که می‌خواستیم داریم  $l+1 \leq |m| + l$  یا  $|m| \leq l$ . این‌ها دقیقاً همان محدودیت‌هایی است که قبلاً در مورد اعداد کوانتومی صحبت شد! توجه داشته باشید که یک مقدار جدید  $l$  برای هر مقدار زوج  $k$  معرفی می‌شود، زیرا  $\widehat{I}_{2i}$  یک لایه بیشتر از  $\widehat{I}_{2i-1}$  دارد. این دقیقاً با فرکانس معرفی اشکال زیرپوسته جدید در جدول تناوبی مطابقت دارد.

## ۷. نتیجه

ارتباط بین دسته‌بندی الگویی و شیمی فیزیک حتی برای پژوهشگران قدیمی الگوهای جایگشت قابل توجه است. به‌طور مشابه، دنباله‌ی شبه چندجمله‌ای به‌دست آمده برای  $\nu(123, \widehat{I}_k)$  هیچ تفسیر قبلی در تاریخچه به‌جز دنباله‌ای از اعداد اتمی نداشت. در صورت وجود، چه تفسیر شیمی گونه‌ای برای  $\nu(123, \widehat{I}_k)$  وجود دارد، هرگاه  $k > 10$ ؟ چه ساختارهای شیمیایی یا فیزیکی دیگری را می‌توان از نظر دسته‌بندی الگو یا اجتناب از الگو توصیف کرد؟ آیا ساختارهای ترکیباتی دیگری وجود دارد که راه‌های جایگزینی برای تولید دنباله‌های اعداد اتمی گروه‌های خاصی از عناصر شیمیایی ارائه دهد؟ تنوع کاربردهای الگوهای جایگشت در دهه‌های اخیر به شدت افزایش یافته است و اکنون می‌توان اوربیتال‌های الکترونی مدل سازی را به فهرست افزود.

## مراجع

- [1] M. H. Albert, M. D. Atkinson, C. C. Handley, D. A. Holton, and W. Stromquist, On packing densities of permutations, *Electron. J. Combin.* 9 (2002), no. 1.
- [2] D. André, Developpements de secx et de tanx, *C. R. Acad. Sci. Paris* 88 (1879), 965–967.
- [3] D. André, Mèmoire sur les permutations alternées, *J. Math.* 7 (1881), 167–184.
- [4] R. W. Barton, Packing densities of patterns, *Electron. J. Combin.* 11 (2004), no. 1, Research Paper 80, 16.
- [5] C. B. Presutti and W. Stromquist, *Packing rates of measures and a conjecture for the packing density of 2413*, *Permutation patterns*, London Math. Soc. Lecture Note Ser., vol. 376, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2010, pp. 287–316.
- [6] M. Bóna, Exact enumeration of 1342-avoiding permutations: a close link with labeled trees and planar maps, *J. Combin. Theory Ser. A* 80 (1997), no. 2, 257–272.
- [7] M. Bóna, *Combinatorics of permutations*, Discrete Mathematics and its Applications (Boca Raton), Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, FL, 2004. With a foreword by Richard Stanley.
- [8] A. Burstein, P. Hästö, and T. Mansour, Packing patterns into words, *Electron. J. Combin.* 9 (2002/03), no. 2, Research paper 20, 13. *Permutation patterns* (Otago, 2003). MR2028289
- [9] P. Erdős and G. Szekeres, A combinatorial problem in geometry, *Compositio Math.* 2 (1935), 463–470. MR1556929
- [10] I. M. Gessel, Symmetric functions and P-recursiveness, *J. Combin. Theory Ser. A* 53 (1990), no. 2, 257–285, DOI 10.1016/0097-3165(90)90060-A. MR1041448



- [11] P. A. Höstö, The packing density of other layered permutations, *Electron. J. Combin.* 9 (2002/03), no. 2, Research paper 1, 16. Permutation patterns (Otago, 2003). MR2028271
- [12] D. Knuth, *The Art of Computer Programming: Volume 1*, Addison-Wesley, 1968.
- [13] G. Miessler and D. Tarr, *Inorganic Chemistry*, 2nd edition, Prentice Hall, 1998.
- [14] OEIS Foundation Inc., The On-Line Encyclopedia of Integer Sequences, 2019, oeis.org/A168380.
- [15] A. L. Price, *Packing densities of layered patterns*, ProQuest LLC, Ann Arbor, MI, 1997. Thesis (Ph.D.)—University of Pennsylvania. MR2695616
- [16] R. P. Stanley, *Catalan numbers*, Cambridge University Press, New York, 2015. MR3467982
- [17] W. Stromquist, Packing layered posets into posets, preprint, 1993. Available at walterstromquist.com/publications.html.
- [18] D. Warren, Optimal packing behavior of some 2-block patterns, *Ann. Comb.* 8 (2004), no. 3, 355–367, DOI 10.1007/s00026-004-0225-3. MR2161643
- [19] D. Warren, *Optimizing the packing behavior of layered permutation patterns*, ProQuest LLC, Ann Arbor, MI, 2005. Thesis (Ph.D.)—University of Florida. MR2707381
- [20] D. Warren, Packing densities of more 2-block patterns, *Adv. in Appl. Math.* 36 (2006), no. 2, 202–211, DOI 10.1016/j.aam.2005.06.004. MR2199989

## سعید علیخانی

دانشکده علوم ریاضی، دانشگاه یزد، یزد.

alikhani@yazd.ac.ir

سعید علیخانی استاد دانشکده علوم ریاضی دانشگاه یزد است. تحقیقاتش در حوزه نظریه گراف و ترکیبیات جبری می‌باشد. معرفی چندجمله‌ای احاطه‌گر گراف به عنوان یک چندجمله‌ای جدید وابسته به گراف‌ها، در رساله دکتری ایشان از فعالیت‌های اصلی و تاثیرگذاری بوده است که مورد توجه بسیاری از ریاضیدانان قرار گرفت. تاکنون ۵ پژوهشگر پسادکتری (از بنیاد نخبگان، صندوق حمایت از پژوهشگران و فناوران کشور و داخلی دانشگاه) و ۱۰ دانشجوی دکتری تحت نظارت و راهنمایی ایشان دانش آموخته شده‌اند.



## مریم صفازاده

دانشکده علوم ریاضی، دانشگاه یزد، یزد.

msafazadeh92@gmail.com

مریم صفازاده دانشجوی دکتری ریاضی گرایش جبر و ترکیبیات دانشگاه یزد و تحت راهنمایی آقای دکتر سعید علیخانی است. ایشان به مباحث شمارشی تعداد انواع مجموعه‌های احاطه‌گر گراف علاقمند است.

