ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 16 за 2019 г.

ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Колесниченко А.В.

К построению термодинамики квантовых неэкстенсивных систем в рамках статистики Тсаллиса

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Колесниченко А.В. К построению термодинамики квантовых неэкстенсивных систем в рамках статистики Тсаллиса // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2019. № 16. 44 с. doi:10.20948/prepr-2019-16
URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2019-16

О р д е н а   Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Р о с с и й с к о й   а к а д е м и и   н а у к

А.В. Колесниченко

К построению термодинамики квантовых неэкстенсивных систем в рамках статистики Тсаллиса

Москва — 2019

Колесниченко Александр Владимирович

К построению термодинамики квантовых неэкстенсивных систем в рамках статистики Тсаллиса.

В рамках квантовой статистики Тсаллиса, основанной на параметрической неаддитивной энтропии, связанной с матрицей плотности, получены термодинамические равенства для большого канонического квантового ансамбля. Получено обобщение нулевого закона термодинамики для независимых квантово-механических систем при их тепловом контакте, вводящее в рассмотрение так называемую физическую температуру, отличную от инверсии множителя Лагранжа β. С учетом обобщённого первого закона термодинамики и преобразования Лежандра проведен анализ модифицированных термодинамических соотношений в статистике Тсаллиса. На основе свойства выпуклости различающей информации Ратье−Каннапана, обобщённой на квантовый случай, обсуждается второй закон термодинамики. Изучены спонтанные переходы между стационарными состояниями сложной квантово-механической системы и доказана *H*-теорема Больцмана.

Развитый подход предполагает использование неэкстенсивной квантовой термодинамики в различных контекстах, касающихся, в частности, моделирования квантовых тепловых эффектов в наноустройствах, в материаловедении, биомедицине и других квантовых технологиях.

Ключевые слова: квантовая неэкстенсивная статистика, степенной закон распределения матрицы плотности, равновесные термодинамические соотношения.

Aleksandr Vladimirovich Kolesnichenko

To the construction of the thermodynamics of quantum nonextensive systems in the framework of the statistics of Tsallis**.**

Within the framework of quantum statistics of Tsallis, based on parametric non-additive entropy associated with the density matrix, thermodynamic equations for a large canonical quantum-mechanical ensemble are obtained. A generalization of the zero law of thermodynamics for independent quantum systems at their thermal contact is obtained, which introduces the so-called physical temperature different from the inversion of Lagrange multiplier β. Taking into account the generalized first law of thermodynamics and Legendre transformation, the modified thermodynamic relations in Tsallis statistics are considered. The second law of thermodynamics is discussed on the basis of the convexity property of Ratier−Kannappan discrimination information generalized to the quantum case. Spontaneous transitions between stationary states of a complex quantum-mechanical system are studied and Boltzmann's *H*-theorem is proved.

The developed approach involves the use of nonextensive quantum thermodynamics in various contexts, in particular, concerning the simulation of quantum thermal effects in nanoelectronic devices, in materials science, biomedicine and other quantum technologies.

Key words: nonextensive quantum statistics, a power-law distribution ща the density matrix, equilibrium thermodynamic relationships**.**

Введение

Как теперь стало понятно, статистическая механика Больцмана–Гиббса и стандартная термодинамика не являются вполне универсальными теориями, поскольку они имеют ограниченные области применимости. Это связано, в частности, с тем, что в основе статистики Больцмана–Гиббса лежит постулат о полном перемешивании потока «фазовых точек» в фазовом пространстве (гипотеза молекулярного хаоса). А это означает, в свою очередь, что фазовое пространство не содержит запрещённых состояний и обладает обычными свойствами непрерывности, гладкости, евклидовости. При этом гипотеза перемешивания, дополненная предположением о бесконечном числе степеней свободы, приводит к экспоненциальному распределению вероятности состояний системы (из которого следует, в частности, свойство аддитивности экстенсивных термодинамических переменных) или, в случае кинетической теории газов, к максвелловскому распределению скоростей. Кроме этого, в основе этих наук лежит фундаментальное предположение о малости радиуса взаимодействия между отдельными элементами системы по сравнению с размерами самой системы. Поскольку в большинстве обычных систем силы между отдельными её частями короткодействующие, то каждая «молекула» чувствует лишь несколько ближайших соседей. Таким образом, аддитивность энтропии и других термодинамических параметров для равновесных или близких к равновесию систем часто является следствием локального взаимодействия между отдельными элементами системы.

Вместе с тем существует широкий класс малых и сложных систем, элементы которых взаимодействуют глобально, чему предшествует снижение симметрии системы, связанное с формированием коллективных мод интенсивных переменных. В физике и в других естественных науках, использующих методы статистической механики, известны многочисленные примеры подобных систем, поведение и свойства которых являются аномальными с точки зрения классической статистики. Существует множество систем, в которых имеются нелокальные корреляции, сильные взаимозависимости между отдельными (всеми) элементами системы. Сложная пространственно-временная структура подобных систем приводит к нарушению принципа аддитивности для таких важнейших термодинамических величин, как энтропия или внутренняя энергия. В частности, к их числу относятся системы, которые помнят свое прошлое, поскольку движения отдельных частиц таких системах являются взаимообусловленными (т.е. сильно коррелированными).

Довольно широкий класс подобных систем (хотя далеко не всех) адекватно описывается неэкстенсивной (неаддитивной) статистической механикой, основанной на какой-либо параметрической энтропии (см. *Havrda, Charvat, 1967; Daroczy, 1970; Tsallis, 1988*) и Реньи (*Renyi, 1961, 1970*), которые, однако, сохраняют гносеологическую структуру (логическую схему построения) классической статистики (см., например, *Curado, Tsallis, 1991; Beck, Schlogl, 1993; Borges, Roditi, 1998; Tsallis и др., 1998; Tsallis, 2009; Plastino and Plastino, 1997; Tirnakli, Torres, 2000; Lenzi, Mendes, 2001; Abe, 2001; Зарипов, 2002, 2010; Gell-Mann, Tsallis, 2004; Wada, Scarfone, 2005; Scarfone, Wada, 2007; Hanel и др., 2009*). Важным преимуществом неэкстенсивных статистик по сравнению с классической статистикой Больцмана−Гиббса является асимптотический *степенной* закон распределения вероятностей (проявляющийся при максимизации соответствующих параметрических энтропий), который не зависит от экспоненциального поведения, обусловленного распределением Гиббса.

Вместе с тем следует заметить, что неэкстенсивные статистики (например, статистики Тсаллиса и Реньи) представляет собой всё же обобщение, а не альтернативу классической статистике Больцмана−Гиббса, поскольку они распространяют область применимости стандартной статистической теории на неэкстенсивные системы только путем расширения математической формы их энтропийного функционала (см., например, *Колесниченко, 2018 a-d*).

В настоящее время теории неэкстенсивных сложных систем существенно развиваются в ускоренном ритме, при котором появляются новые идеи, позволяющие глубже понять их природу, возможности и ограничения (см. Библиографию, представленную на сайте http:/tsallis. -cat.cbpf.br/biblio.htm, которая постоянно обновляется). Каждая теория имеет широкий спектр важных приложений, связанных с физикой статистических систем, вероятностные свойства которых описываются не гиббсовыми (не гауссовыми), а степенными распределениями. В частности, неэкстенсивная статистика Тсаллиса (Хаврда−Чарват−Дароши) успешно применяется ко многим сложным системам, начиная от нелинейных диффузионных уравнений (*Plastino и др., 2000*), обобщенных кинетических уравнений (*Boghosian, 1999; Kolesnichenko, Chetverushkin, 2013*), систем Фоккера-Планка (*Frank, Daffertshofer, 2001b*), *H*-теоремы Больцмана (*Mariz, 1992; Ramshaw, 1993a,b; Shiino, 1998; Frank, Daffertshofer, 2001a; Зарипов, 2002,2010*), удельной теплоемкости гармонического осциллятора (*Ito, Tsallis, 1989*), квантовой статистики (*Büyükkılıç и др., 1995*), до изучения космических систем с дальним силовым взаимодействием (*Chavanis, Delfini, 2009; Колесниченко, 2016*), межзвездной турбулентности и теории фракталов (*Esquivel, Lazarian, 2010; Колесниченко, 2018c*), эволюции астрофизических дисков (*Kolesnichenko, Marov, 2013, 2014; Колесниченко, 2015, 2017, 2019*), скорости солнечного звука (*Du, 2006*), релаксации спинового стекла (Pickup и др., 2009), городской транспортной системы (*Kolesnichenko, 2014*), биофизики, экономики, нейрофизики и многое другое.

Среди множества малых систем особую важность имеют малые квантовые системы, основанные на неаддитивной параметрической энтропии Тсаллиса $S_q(\hat{\rho})$, связанной с матрицей плотности $\hat{\rho}$, описывающей различные квантовые состояния. При изучении подобных систем возникают многочисленные новые математические проблемы, требующие своего решения. В их числе, одной из значительных, является проблема построения термодинамики квантово-механических ансамблей в рамках неэкстенсивной статистики Тсаллиса.

В данной работе для описания квантовой физической системы мы воспользуемся формализмом матрицы (оператора) плотности, с помощью которого наиболее удобно описывать системы, квантовые состояния которых известны не полностью (см. *Ландау, Лифшиц, 2006; фон Нейман, 1964; Нильсон, Чанг, 2006; Кулик и др., 2008*). Кроме этого, следуя фон Нейману (*1964,* (*стр. 266*)), будем использовать обычный формализм феноменологической термодинамики, при этом роль квантовой механики сведётся лишь к тому, что наше рассмотрение будет относиться к квантово-механическим объектам − правильность же обоих основных начал термодинамики предполагается. С учетом этого будет показано, как можно получить равновесную статистическую термодинамику неэкстенсивных систем и определить ее свойства на основе двух функционалов − квантовой параметрической энтропии Тсаллиса $S_q(\hat{\rho})$ и обобщённой квантовой относительной энтропии (квантовой различающей информации Ратье−Каннаппана). Это исследование будет базироваться на *степенном равновесном распределении* матрицы плотности, полученном из условия абсолютного экстремума энтропии $S_q(\hat{\rho})$ при заданности средней энергии и среднего числа частиц для ансамбля квантовых систем, а также на осреднении его случайных динамических параметров (наблюдаемых) по эскортному распределению. Будет получено обобщение на квантовый случай нулевого закона термодинамики для двух независимых подсистем при их тепловом контакте и введена так называемая физическая температура, отличная от инверсии множителя Лагранжа β. При её использовании, с привлечением обобщённого первого закона термодинамики и преобразования Лежандра, будут найдены модифицированные термодинамические соотношения, отличные от выведенных «обычным» для статистики способом. И, наконец, на основе функционала для квантовой относительной энтропии, обобщенного на неэкстенсивные системы, будет обсуждаться второй закон термодинамики, будут исследованы спонтанные переходы между произвольными состояниями сложной квантовой системы и доказана *H*-теорема Больцмана в рамках неэкстенсивной квантовой статистики.

1. Основные определения и статистические свойства квантовой энтропии Тсаллиса для неэкстенсивных систем

Приступим теперь к основной цели данной работы – конструированию равновесной термодинамики квантово-механических ансамблей, основанной на обобщённой неэкстенсивной статистке Тсаллиса. В основу изучения различных статистических квантовых ансамблей неэкстенсивных систем можно положить экстремальные свойства квантовой информационной энтропии (введенной впервые в работе (*Wehrl, 1978*)) и использовать их для нахождения различных матриц плотности (заменяющих функцию распределения вероятностей в классической статистике). Отметим, кстати, что при обобщении ансамблей Гиббса на случай квантовой статистики фон Нейман исходил именно из экстремальных свойств введенной им энтропии квантового состояния $S(\hat\rho) \equiv -\boldsymbol{Sp}\left(\hat\rho \ln \hat\rho\right)$ (см. *фон Нейман, 1964*), где $\hat\rho$ − матрица (оператор*)) плотности микросистемы, при помощи формализма которой, согласно теореме Глисона (*Gleason, 1957*), описывается любая квантово-механическая система (см. также, *Ландау, Лифшиц, 2006*).

В квантовой неэкстенсивной статистике при вероятностной нормировке

$$\boldsymbol{Sp}\,\hat\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = 1\,, \tag{1}$$

матрицы плотности $\hat\rho(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \sum_r w_r \psi_r(\boldsymbol{x})\psi_r^*(\boldsymbol{x}')$ (в матричном $\boldsymbol{x}$-представлении (см. Приложение)), описывающей смешанные квантовые состояния, квантовая информационная энтропия Тсаллиса $S_q(\hat\rho)$ задаётся следующим обобщенным функционалом от оператора плотности (см. *Daroczy, 1970; Wehrl, 1978; Tsallis, 1988*):

$$S_q(\hat\rho) \equiv \frac{1}{q-1}\boldsymbol{Sp}\left(\hat\rho - \hat\rho^q\right). \tag{2}$$

---

*) Далее операторы будем обозначать буквой со «шляпкой» над ней.

Здесь энтропийный индекс q (параметр деформации) представляет собой вещественное число (принадлежащее областисти $q \in \mathrm{R}$), которое характеризует неэкстенсивную особенность (неаддитивность) квантовой системы. Заметим, что шпуровая (-trace) структура определения энтропии (2) важна тем, что делает энтропию функционально независимой от унитарных преобразований в пространстве состояний, т.е. эта формула справедлива при любом представлении оператора $\hat{\rho}$, а не только при его матричном $\boldsymbol{x}$-представлении (см., например, *Зубарев и др., 2002*).

Можно показать, что параметрическая квантовая энтропия (2) может быть представлена также в следующих эквивалентных формах:

$$S_q(\hat{\rho}) = -\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^q \ln_q \hat{\rho}\right) = -\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}\,\mathrm{Ln}_q \hat{\rho}\right) \equiv -\left\langle \mathrm{Ln}_q \hat{\rho}\right\rangle_1. \qquad (2^*)$$

Здесь

$$\ln_q \hat{A} \equiv \frac{\hat{A}^{1-q}-1}{1-q}, \qquad \mathrm{Ln}_q \hat{A} \equiv \frac{\hat{A}^{q-1}-1}{q-1} = \hat{A}^{q-1}\ln_q \hat{A} \qquad (3)$$

– так называемые деформированные логарифмы (*Tsallis, 1999, 2009*), обладающие, как легко убедиться, следующим свойством: при $q \to 1$, $\ln_q \hat{A} \to \ln \hat{A}$, $\mathrm{Ln}_q \hat{A} \to \ln \hat{A}$. При его использовании энтропия Тсаллиса $S_q(\hat{\rho}) = -\boldsymbol{Sp}(\hat{\rho}^q \ln_q \hat{\rho})$ переходит в классическую квантовую энтропию фон Неймана $S_1(\hat{\rho}) \equiv -\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}\right)$, являющуюся, в свою очередь, квантовым обобщением энтропии Гиббса в классической статистической механике.

В обычной квантовой статистике любой случайной динамической переменной A ставится в соответствие эрмитов оператор $\hat{A}$ (см. *фон Нейман, 1964*) так, что среднее значение этой переменной в состоянии микросистемы, описываемом матрицей плотности $\hat{\rho}$, вычисляется по формуле: $\langle A\rangle_1 = \boldsymbol{Sp}(\hat{\rho}\hat{A})$. В неэкстенсивной квантовой статистике Тсаллиса для вычисления среднего значения $\langle \hat{A}\rangle_q$ динамической переменной $\hat{A}$ и её флуктуации $\Delta_q \hat{A}$ можно использовать различные формулировки (см., например, *Tsallis, 2009*). Далее мы воспользуемся следующим их определением:

$$\langle \hat{A} \rangle_q \equiv \boldsymbol{Sp}(\hat{P}_q \hat{A}) = \frac{\boldsymbol{Sp}(\hat{\rho}^q \hat{A})}{\boldsymbol{Sp}\hat{\rho}^q}, \quad \Delta_q \hat{A} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_q, \quad \boldsymbol{Sp}(\hat{\rho}^q \Delta_q \hat{A}) = 0, \tag{4}$$

где

$$\hat{P}_q(\boldsymbol{x}) \equiv \frac{\hat{\rho}^q}{\boldsymbol{Sp}(\hat{\rho}^q)}, \tag{5}$$

– так называемое нормированное эскортное распределение (*Abe, 2000c*), для которого $\boldsymbol{Sp}(\hat{P}_q) = 1$.

Неаддитивность q-энтропии Тсаллиса для независимых систем. Энтропия (2) имеет много полезных свойств. Покажем сначала, что для независимых квантовых физических систем она неаддитивна. Действительно, пусть состояние системы, состоящей из двух подсистем, описывается совместным мультипликативным статистическим оператором $\hat{\rho}^{(1,2)} \equiv \hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}$, где $\hat{\rho}^{(1)}$ и $\hat{\rho}^{(2)}$ – операторы плотности отдельных подсистем (здесь и далее символом $\otimes$ обозначено матричное произведение). Тогда энтропии отдельных подсистем и общая энтропия системы задаются следующими выражениями:

$$S_q^{(1)} \equiv S_q\left(\hat{\rho}^{(1)}\right) = \frac{1}{q-1}\left[1 - \boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)^q\right],$$

$$S_q^{(2)} = S_q\left(\hat{\rho}^{(2)}\right) = \frac{1}{q-1}\left[1 - \boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^{(2)}\right)^q\right],$$

$$S_q^{(1,2)} = S_q\left[\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}\right] = \frac{1}{q-1}\left[1 - \boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^{(1,2)}\right)^q\right] = \frac{1}{q-1}\left[1 - \boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}\right)^q\right], \tag{*}$$

при условии нормировки

$$\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^{(1,2)}\right) = \boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^{(1)}\right) = \boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^{(2)}\right) = 1.$$

Используя (*), получим, с учетом соотношения $\boldsymbol{Sp}(\hat{A}\otimes\hat{B})=\boldsymbol{Sp}(\hat{A})\boldsymbol{Sp}(\hat{B})$, следующее выражение

$$(q-1)S_q^{(1)}S_q^{(2)}=\frac{1}{q-1}\left[1-\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)^q\right]\times\left[1-\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^{(2)}\right)^q\right]=$$

$$=\frac{1-\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)^q}{q-1}+\frac{1-\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^{(2)}\right)^q}{q-1}-\frac{1-\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)^q\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^{(2)}\right)^q}{q-1}=$$

$$=S_q^{(1)}+S_q^{(1)}-S_q^{(1,2)}.$$

Отсюда следует *свойство неаддитивности энтропии* двух независимых систем в квантовой статистике Тсаллиса

$$S_q\left(\hat{\rho}^{(1)}\otimes\hat{\rho}^{(2)}\right)=S_q\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)+S_q\left(\hat{\rho}^{(2)}\right)+(1-q)S_q\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)S_q\left(\hat{\rho}^{(2)}\right). \qquad (6)$$

Таким образом, неаддитивная квантовая энтропия $S_q\left(\hat{\rho}^{(1)}\otimes\hat{\rho}^{(2)}\right)$ является субэкстенсивным (суперэкстенсивным) функционалом при $q>1$ ($q<1$) и экстенсивным функционалом только в пределе слабой связи двух подсистем, когда $q\to 1$.

Заметим, однако, что эскортное осреднение приводит к свойству аддитивности для осреднённой энергии совокупной квантовой системы

$$U_q^{(1,2)}=U_q^{(1)}+U_q^{(2)}, \text{ где } \quad U_q\equiv\langle\hat{H}\rangle_q=\boldsymbol{Sp}\left(\hat{P}_q\hat{H}\right).$$

Условная квантовая энтропия для неэкстенсивных систем. Пусть имеется квантовая система, которая описывается оператором плотности $\hat{\rho}^{(1,2)}$. И пусть теперь эта система состоит из двух зависимых подсистем «1» и «2»**.** Согласно основным аксиомам, обосновывавшим единственность энтропии Тсаллиса для квантово-механического случая (см. *Abe, 2000a*), для двух зависимых квантовых систем «1» и «2» имеем следующее соотношение для энтропий

$$S_q(1,2) = S_q(1) + S_q(2|1) + (1-q)S_q(1)S_q(2|1) = \\ = S_q(2) + S_q(1|2) + (1-q)S_q(2)S_q(1|2), \qquad (6^*)$$

где *условная энтропия* $S_q(2|1) \equiv S_q\left(\hat{\rho}^{(2)} \middle| \hat{\rho}^{(1)}\right)$ с распределением оператора плотности $\hat{\rho}^{(1,2)}$ определяется следующим образом (*Abe, 2002a; Abe, Rajagopal, 2000a,b*)

$$S_q(2|1) = \frac{S_q(1,2) - S_q(1)}{1 + (1-q)S_q(1)}, \qquad (6^{**})$$

$$\boldsymbol{Sp}_{I,II}\hat{\rho}^{(I,II)} = \boldsymbol{Sp}_I\hat{\rho}^{(I)} = \boldsymbol{Sp}_{II}\hat{\rho}^{(II)} = 1. \qquad (6^{***})$$

В формулах (6^{**}) и (6^{***}) введены нижеследующие обозначения

$$S_q(1,2) = S_q\left(\hat{\rho}^{(1,2)}\right), \quad S_q(1) = S_q\left(\hat{\rho}^{(1)}\right), \quad \hat{\rho}^{(1,2)} = \hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)},$$

где $\hat{\rho}^{(1)} = \boldsymbol{Sp}_2\hat{\rho}^{(1,2)}$ и $\hat{\rho}^{(1,2)} = \boldsymbol{Sp}_1\hat{\rho}^{(1,2)} \otimes \boldsymbol{Sp}_2\hat{\rho}^{(1,2)}$ – матрицы плотности подсистемы «1» (здесь символ $\boldsymbol{Sp}_2\hat{\rho}^{(1,2)}$ означает частичный след матрицы плотности $\hat{\rho}^{(1,2)}$ по квантовым числам, характеризующим подсистему «2») и совокупной матрицы плотности соответственно, и используется известное свойство матрицы плотности составной системы (*фон Нейман, 1964*)

$$\boldsymbol{Sp}(\hat{\rho}^{(1,2)}) = \boldsymbol{Sp}_1\left(\boldsymbol{Sp}_2(\hat{\rho}^{(1,2)})\right) = \boldsymbol{Sp}_2\left(\boldsymbol{Sp}_1(\hat{\rho}^{(1,2)})\right).$$

При $q = 1$ соотношение (6^*) совпадает с соответствующим равенством в классической статистической механике Больцмана−Гиббса (см. *Закиров, 2002,2010*).

Экстремальность большого канонического распределения для неэкстенсивных квантовых систем. Прежде всего, отметим, что различные статистические ансамбли квантовых систем (как и классических) эквивалентны в термодинамическом отношении, что связано, в частности, с малостью флуктуаций энергии, числа частиц и объёма (см. *Зубарев, 1971*). Далее мы воспользуемся наиболее удобным для наших целей большим каноническим ансамблем квантовых систем, описывающим контакт с термостатом и резервуаром частиц и определяемым заданием средней энергии и среднего числа частиц.

Рассмотрим ансамбль систем с постоянным объёмом, находящихся в тепловом и материальном контакте с окружением. Тогда матрица равновесной плотности $\hat{\hat{\rho}}(\boldsymbol{x})$ (статистический оператор равновесного распределения) может быть определена из абсолютного экстремума квантовой информационной энтропии Тсаллиса (2) при выполнении следующих дополнительных условий:

$$\langle\hat{H}\rangle_q \equiv U_q = \boldsymbol{Sp}\left(\hat{P}_q\hat{H}\right) = const\,, \quad \langle\hat{N}\rangle_q \equiv N_q = \boldsymbol{Sp}\left(\hat{P}_q\hat{N}\right) = const\,, \tag{7}$$

т.е. при заданности осреднённых операторов плотности энергии $\hat{H}(\boldsymbol{x})$ и полного числа частиц $\hat{N}(\boldsymbol{x})$ и при сохранении нормировки (1).

Согласно вариационному принципу Джейнса (*Jaynes, 1963*), равновесная матрица плотности $\hat{\hat{\rho}}$, «экстремизирующая» энтропию Тсаллиса S_q при указанных ограничениях, определяется из условия равенства нулю первой вариации по $\hat{\rho}$ следующего лагранжиана

$$L(\hat{\rho}) \equiv -\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}\,\mathrm{Ln}_q\,\hat{\rho}\right) - \beta\frac{\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^q\hat{H}\right)}{c_q} + \beta\mu\frac{\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^q\hat{N}\right)}{c_q} - \lambda\boldsymbol{Sp}\,\hat{\rho}\,. \tag{8}$$

Здесь

$$c_q \equiv \boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^q\right) \tag{9}$$

– так называемый коэффициент Тсаллиса; $\beta, (\beta\mu)$ и λ – определяемые из уравнений (1) и (7) лагранжевы множители, которые связаны с ограничением на осреднённые операторы плотности энергии и полного числа частиц квантовой системы в неаддитивной статистике Тсаллиса; при этом величина параметра μ имеет смысл химического потенциала квантовых частиц.

Определяя абсолютный экстремум функционала (8) из условия $\delta L(\hat{\rho})/\delta\hat{\rho} = 0$, находим для неэкстенсивных квантовых систем следующее выражение для *обобщенного большого канонического распределения оператора плотности* $\hat{\hat{\rho}}(\boldsymbol{x},\beta_q)$:

$$\hat{\hat{\rho}}(\boldsymbol{x},\beta_q)=\frac{1}{\tilde{Z}_q(\beta)}\left\{1-(1-q)\beta_q\left[\left(\hat{H}(\boldsymbol{x})-\tilde{U}_q\right)-\mu\left(\hat{N}(\boldsymbol{x})-\tilde{N}_q\right)\right]\right\}^{1/(1-q)}=$$

$$=\tilde{Z}_q^{-1}\exp_q\left\{-\beta_q\left[\left(\hat{H}(\boldsymbol{x})-\tilde{U}_q\right)-\mu\left(\hat{N}(\boldsymbol{x})-\tilde{N}_q\right)\right]\right\}, \tag{10}$$

где

$$\tilde{Z}_q(\beta_q)=\boldsymbol{Sp}\left\{\exp_q\left[-\beta_q\left((\hat{H}-\tilde{U}_q)-\mu(\hat{N}-\tilde{N}_q)\right)\right]\right\} \tag{11}$$

− обобщенная статистическая сумма состояний для большого квантового ансамбля, определяемая из условия нормировки (1); параметр $\beta_q\equiv\beta/\tilde{c}_q$ является (как будет показано ниже) обратной физической температурой равновесной квантовой системы, $T_{pf}\equiv 1/\beta_q$;

$$\tilde{c}_q\equiv\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\hat{\rho}}^q\right)=\boldsymbol{Sp}\left\{\exp_q\left[-\beta_q\left((\hat{H}-\tilde{U}_q)-\mu(\hat{N}-\tilde{N}_q)\right)\right]\right\}^q/(\tilde{Z}_q)^q \tag{12}$$

− значение коэффициента Тсаллиса в равновесном случае; знак тильды «$\sim$» здесь и далее над осредненными динамическими переменными $\hat{A}$ означает, что осреднение проведено с помощью равновесного распределения (10).

Экспонента Тсаллиса и деформированный логарифм. В формуле (10) используется так называемая деформированная экспонента Тсаллиса

$$\exp_q\hat{A}=\begin{cases}\left[1+(1-q)\hat{A}\right]^{1/(1-q)}, \text{ если } \quad \mathrm{Spec}\left[1+(1-q)\hat{A}\right]\geq 0;\\ \qquad 0, \quad \text{в других случаях,}\end{cases} \tag{13}$$

причем неравенство $\mathrm{Spec}\left[1+(1-q)\hat{A}\right]\geq 0$ означает, что существует естественное «отключение», когда спектр оператора в скобках имеет отрицательные значения, связанные с действительностью следа.

Легко проверить, что в пределе $q\to 1$ функция (12) принимает стандартный вид:

$$\exp_1 \hat{A} \equiv \lim_{q\to 1+0} \exp_q \hat{A} = \lim_{q\to 1-0} \exp_q \hat{A} = \exp \hat{A} \quad (\forall x). \tag{14}$$

Используя определения (3) и (12), можно убедиться, что имеют место следующие соотношения для деформированной экспоненты (см., например, Tsallis, 2009):

$$\exp_q(\ln_q \hat{A}) = \ln_q(\exp_q \hat{A}) = \hat{A} \quad (\forall x; \forall q), \tag{15}$$

$$(\exp_q \hat{A})(\exp_q \hat{B}) = \exp_q\left[\hat{A} + \hat{B} + (1-q)\hat{A}\hat{B}\right], \tag{16}$$

$$\frac{d}{d\hat{A}}\exp_q \hat{A} = (\exp_q \hat{A})^q. \tag{17}$$

Соответственно для деформированного логарифма $\ln_q \hat{A}$ имеем:

$$\ln_q(\hat{A}\hat{B}) = \ln_q \hat{A} + \ln_q \hat{B} + (1-q)(\ln_q \hat{A})(\ln_q \hat{B}), \tag{18}$$

$$\ln_q \hat{A}^{-1} = -\hat{A}^{q-1}\ln_q \hat{A}, \quad \ln_q(\hat{B}\hat{A}^{-1}) = \hat{A}^{q-1}(\ln_q \hat{B} - \ln_q \hat{A}), \tag{19}$$

$$\frac{d}{d\hat{A}}\ln_q \hat{A} = \frac{1}{\hat{A}^q}. \tag{20}$$

Эти формулы будут использованы далее.

Некоторые свойства равновесного распределения. Из распределения (10) следует соотношение

$$\left(\hat{\tilde{\rho}}\tilde{Z}_q\right)^{1-q} = 1 - (1-q)\beta_q\left[\Delta_q\hat{H} - \mu\Delta_q\hat{N}\right]. \tag{21}$$

Если умножить (21) на $\hat{\tilde{\rho}}^q$ и затем взять шпур, то получим равенство

$$(\tilde{Z}_q)^{1-q}\boldsymbol{Sp}(\hat{\tilde{\rho}}) = \boldsymbol{Sp}\left\{\hat{\tilde{\rho}}^q\left[1-(1-q)\beta_q\left(\Delta_q\hat{H} - \mu\Delta_q\hat{N}\right)\right]\right\} = \boldsymbol{Sp}(\hat{\tilde{\rho}}^q), \tag{22}$$

из которого, при учете (1) и (7), следует важное представление для «равновесного» коэффициента Тсаллиса

$$\tilde{c}_q \equiv \boldsymbol{Sp}(\hat{\tilde{\rho}}^q) = (\tilde{Z}_q)^{1-q} = 1 + (1-q)\tilde{S}_q. \tag{23}$$

Используя (23) и вытекающее из формулы (10) выражение

$$\tilde{c}_q \equiv \boldsymbol{Sp}(\hat{\tilde{\rho}}^q) = (\tilde{Z}_q)^{-q}\,\boldsymbol{Sp}\left\{\exp_q\left[-\beta_q\left(\Delta_q\hat{H}-\mu\Delta_q\hat{N}\right)\right]\right\}^q , \tag{24}$$

получим ещё одно представление обобщённой статистической суммы

$$\tilde{Z}_q(\beta,\mu) = \boldsymbol{Sp}\left\{\exp_q\left[-\beta_q\left(\Delta_q\hat{H}-\mu\Delta_q\hat{N}\right)\right]\right\}^q . \tag{25}$$

Далее квантово-механическая флуктуация $\Delta_q\hat{A}$ рановесного значения переменной (наблюдаемой) $\hat{A}$ будет задаваться соотношением

$$\Delta_q\hat{A} \equiv \hat{A} - \boldsymbol{Sp}(\hat{\tilde{P}}_q\hat{A}), \tag{26}$$

где равновесное экскортное распределение $\hat{\tilde{P}}_q$ определяется, как легко можно убедиться, формулой

$$\hat{\tilde{P}}_q(\boldsymbol{x},\beta_q,\mu) = \left\{\exp_q\left[-\beta_q\left(\Delta_q\hat{H}-\mu\Delta_q\hat{N}\right)\right]\right\}^q / \tilde{Z}_q(\beta_q,\mu), \tag{27}$$

где

$$\tilde{Z}_q(\beta_q,\mu) = \boldsymbol{Sp}\left\{\exp_q\left[-\beta_q\left(\Delta_q\hat{H}-\mu\Delta_q\hat{N}\right)\right]\right\} =$$

$$= \boldsymbol{Sp}\left\{\exp_q\left[-\beta_q\left(\Delta_q\hat{H}-\mu\Delta_q\hat{N}\right)\right]\right\}^q .$$

Наконец, при использовании распределения (27) и формулы (25) можно получить следующую форму записи для среднего значения $\tilde{A}_q \equiv \boldsymbol{Sp}\left(\hat{\tilde{P}}_q\hat{A}\right)$ любой наблюдаемой $\hat{A}$ в равновесной квантовой системе

$$\tilde{A}_q = \frac{\boldsymbol{Sp}\left\{\left[\exp_q\left(-\beta_q\Delta_q\hat{H}+(\mu\beta_q)\Delta_q\hat{N}\right)\right]^q\hat{A}\right\}}{\tilde{Z}_q} =$$

$$= \frac{\boldsymbol{Sp}\left\{\hat{A}\left[\exp_q\left(-\beta_q\Delta_q\hat{H}+(\mu\beta_q)\Delta_q\hat{N}\right)\right]^q\right\}}{\boldsymbol{Sp}\left[\exp_q\left(-\beta_q\Delta_q\hat{H}+(\mu\beta_q)\Delta_q\hat{N}\right)\right]^q} . \tag{28}$$

Экстремальность большого канонического распределения для неэкстенсивных квантовых систем. Заметим, что экстремальные свойства всех квантовых неэкстенсивных ансамблей можно получить из следующих неравенств:

$$\boldsymbol{Sp}\left[\hat{\sigma}\,\mathrm{Ln}_q\,\hat{\sigma}\right]-\boldsymbol{Sp}\left[\hat{\sigma}\left(\frac{\hat{\sigma}}{\hat{\rho}}\right)^{q-1}\mathrm{Ln}_q\,\hat{\rho}\right]\begin{matrix}\geq 0, & \textit{если} \quad q>0; \\ \leq 0, & \textit{если} \quad q<0,\end{matrix} \tag{29}$$

где $\hat{\rho}$ и $\hat{\sigma}$ − произвольные статистические операторы.

Действительно, поскольку для числа $r>0$ имеем (см. теорему №42 в монографии (*Харди и др., 1948*))

$$\begin{aligned}\mathrm{Ln}_q\,r=\frac{r^{q-1}-1}{q-1}&\geq 1-\frac{1}{r}, \quad \text{если } q>0,\\ &=1-\frac{1}{r}, \quad \text{если } q=0,\\ &\leq 1-\frac{1}{r}, \quad \textit{если } q<0,\end{aligned} \tag{30}$$

то, подставляя в (30) $r\equiv\hat{\sigma}\hat{\rho}^{-1}$ (где $\hat{\rho}$ и $\hat{\sigma}$ − положительно определенные операторы) и усредняя полученное выражение по распределению $\hat{\sigma}$, получим, например, для $q>0$ неравенство

$$\boldsymbol{Sp}\left\{\hat{\sigma}\,\mathrm{Ln}_q\left(\frac{\hat{\sigma}}{\hat{\rho}}\right)\right\}\geq\boldsymbol{Sp}\left\{\hat{\sigma}\left(1-\frac{\hat{\rho}}{\hat{\sigma}}\right)\right\}=1-1=0\,, \tag{31}$$

так как оба оператора $\hat{\rho}$ и $\hat{\sigma}$ нормированы на единицу и операторы под знаком шпура перестановочны. Воспользовавшись формулой (19), будем иметь

$$\mathrm{Ln}_q\left(\frac{\hat{\sigma}}{\hat{\rho}}\right)=\left(\frac{\hat{\sigma}}{\hat{\rho}}\right)^{q-1}\mathrm{ln}_q\left(\frac{\hat{\sigma}}{\hat{\rho}}\right)=\hat{\sigma}^{q-1}(\mathrm{ln}_q\,\hat{\sigma}-\mathrm{ln}_q\,\hat{\rho})=\mathrm{Ln}_q\,\hat{\sigma}-\left(\frac{\hat{\sigma}}{\hat{\rho}}\right)^{q-1}\mathrm{Ln}_q\,\hat{\rho}\,. \tag{32}$$

Подставляя теперь это соотношение в неравенство (31), получим «верхнее» неравенство (29).

Используя аналогичный метод, легко убедиться в том, что при $q<0$ имеет место «нижнее» неравенство (29).

Максимум (минимум) равновесной энтропии Тсаллиса. Докажем теперь, что в случае квантовой неэкстенсивной статистики экстремум функционала (8), т.е. большое каноническое распределение $\hat{\hat{\rho}}$, соответствует максимуму (минимуму) квантовой энтропии Тсаллиса $S_q(\hat{\rho}) = -\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}\,\mathrm{Ln}_q\,\hat{\rho}\right)$ соответственно при $q > 0$ $(q < 0)$ среди всех вероятностных распределений с одинаковыми средней энергией и среднем числом частиц.

Пусть $\hat{\hat{\rho}}$ − большое каноническое распределение, а $\hat{\sigma}$ − нормированный статистический оператор, *соответствующий той же средней энергии и среднему числу частиц*, как и (10), а в остальном − произвольный. При подстановке (10) в неравенство (29), можно получить

$$S_q(\hat{\sigma}) \equiv -\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\sigma}\,\mathrm{Ln}_q\,\hat{\sigma}\right) \le -\boldsymbol{Sp}\left[\hat{\sigma}\left(\frac{\hat{\sigma}}{\hat{\hat{\rho}}}\right)^{q-1}\mathrm{Ln}_q\,\hat{\hat{\rho}}\right] \le S_q(\hat{\hat{\rho}})\,. \tag{33}$$

Действительно, поскольку $\mathrm{Ln}_q\,\hat{A} = \hat{A}^{q-1}\ln_q\hat{A}$, то, с учетом (15) и (19), будем иметь

$$\mathrm{Ln}_q\,\hat{\hat{\rho}} = \mathrm{Ln}_q\left\{\frac{\exp_q\left[-\beta_q\left((\Delta_q\hat{H} - \mu\Delta_q\hat{N})\right)\right]}{\tilde{Z}_q}\right\} =$$

$$= \mathrm{Ln}_q\exp_q\{..\} - \left(\exp_q\{..\}\right)^{q-1}\tilde{Z}_q^{\,1-q}\,\mathrm{Ln}_q\,\tilde{Z}_q =$$

$$= \left(\exp_q\{..\}\right)^{q-1}\{..\} - \left(\exp_q\{..\}\right)^{q-1}\ln\tilde{Z}_q = \left(\exp_q\{..\}\right)^{q-1}\left[\{..\} - S_q(\hat{\hat{\rho}})\right],$$

откуда следует

$$\begin{aligned} -\boldsymbol{Sp}\left\{\hat{\sigma}\left(\frac{\hat{\sigma}}{\hat{\hat{\rho}}}\right)^{q-1}\mathrm{Ln}_q\,\hat{\hat{\rho}}\right\} &= -\boldsymbol{Sp}\left\{\hat{\sigma}^q\hat{\hat{\rho}}^{1-q}\left(\exp_q\{..\}\right)^{q-1}\left[\{..\} - S_q(\hat{\hat{\rho}})\right]\right\} = \\ &= -\boldsymbol{Sp}\left\{\hat{\sigma}^q\left[\{..\} - S_q(\hat{\hat{\rho}})\right]\right\}\tilde{Z}_q^{q-1} = S_q(\hat{\hat{\rho}}). \end{aligned} \tag{34}$$

Таким образом, большое каноническое распределение (10) соответствует максимуму квантовой информационной энтропии Тсаллиса при $q > 0$ среди всех вероятностных распределений с одинаковыми средней энергией и среднем числом частиц. Используя аналогичный метод, легко убедиться в том, что при подстановке (10) в неравенство (29) получается, что распределение (10) соответствует минимуму энтропии Тсаллиса при $q<0$.

Большое каноническое распределение квантовых систем и термодинамические соотношения в q-статистике. До сих пор мы рассматривали квантовые неэкстенсивные системы, состоящие лишь из одного сорта частиц. Легко обобщить большое каноническое распределение (10) на системы, состоящие из нескольких сортов частиц N_j, а также если заданы средние значения каких-либо других динамических величин $\hat{A}_k$,

$$\langle \hat{A}_k(\boldsymbol{x})\rangle_q \equiv \boldsymbol{Sp}\left(\hat{P}_q\hat{A}_k\right) = A_{qk} = const\,, \quad (k=1,2,\ldots,R). \tag{35}$$

Можно представить себе, что система находится в тепловом и материальном контакте с M большими резервуарами частиц разных сортов и энергий с помощью полупроницаемых перегородок, пропускающих лишь один сорт молекул. Используя (7) и (7*), легко показать, что статистический оператор такого квантового ансамбля будет иметь вид

$$\hat{\tilde{\rho}}(\boldsymbol{x},\beta_q) = \tilde{Z}_q^{-1}\exp_q\left\{-\beta_q\left[\Delta_q\hat{H}(\boldsymbol{x}) - \sum_{k=1}^{R} a_k\Delta_q\hat{A}_k(\boldsymbol{x}) - \sum_{j=1}^{M}\mu_j\Delta_q\hat{N}_j(\boldsymbol{x})\right]\right\}, \tag{36}$$

где

$$\tilde{Z}_q(\beta_q,a_k,\mu_j) \equiv \boldsymbol{Sp}\left\{\exp_q\left[-\beta_q\left(\Delta_q\hat{H}(\boldsymbol{x}) - \sum_{k=1}^{R} a_k\Delta_q\hat{A}_k(\boldsymbol{x}) - \sum_{j=1}^{M}\mu_j\Delta_q\hat{N}_j(\boldsymbol{x})\right)\right]\right\}.$$

Здесь μ_j — химические потенциалы частиц сорта j; a_k − новые термодинамические параметры, определяемые из условий (7*).

Подставляя распределение (10) в (2), получим, при использовании (23), следующее выражение для равновесной энтропии Тсаллиса для большого канонического ансамбля квантовых систем:

$$\tilde{S}_q = -\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\tilde{\rho}}\,\mathrm{Ln}_q\,\hat{\tilde{\rho}}\right) = -\frac{1-\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\tilde{\rho}}^{\,q}\right)}{1-q} = -\frac{1-\tilde{c}_q}{1-q} = \frac{(\tilde{Z}_q)^{1-q}-1}{1-q} = \ln_q\tilde{Z}_q. \tag{37}$$

Определим теперь деформированный большой термодинамический потенциал в квантовой статистике Тсаллиса следующим соотношением:

$$\tilde{\Omega}_q \equiv \tilde{U}_q - \frac{1}{\beta}\tilde{S}_q - \mu\tilde{N}_q = \tilde{U}_q - \frac{1}{\beta}\frac{(\tilde{Z}_q)^{1-q} - 1}{1-q} - \mu\tilde{N}_q. \qquad (38)$$

При дифференцировании энтропии $\tilde{S}_q$ по $\tilde{U}_q$ в результате будем иметь

$$\frac{\partial\tilde{S}_q}{\partial\tilde{U}_q} = \frac{\partial \ln_q \tilde{Z}_q}{\partial\tilde{U}_q} = \beta. \qquad (39)$$

Действительно, используя формулы (17) и (20), а также соотношения (11) и (25), получим

$$\frac{\partial\tilde{S}_q}{\partial\tilde{U}_q} = \frac{\partial \ln_q \tilde{Z}_q}{\partial\tilde{Z}_q}\frac{\partial\tilde{Z}_q}{\partial\tilde{U}_q} = \tilde{Z}_q^{-q}\frac{\partial\tilde{Z}_q}{\partial\tilde{U}_q} = \tilde{Z}_q^{-q}\,\mathrm{Sp}\frac{\partial \exp_q\{..\}}{\partial\{..\}}\frac{\partial\{..\}}{\partial\tilde{U}_q} =$$

$$= \tilde{Z}_q^{-q}\,\mathrm{Sp}\left\{\exp_q\{..\}\right\}^q \frac{\partial\{..\}}{\partial\tilde{U}_q} = \tilde{Z}_q^{1-q}\frac{\beta}{\tilde{c}_q} = \beta.$$

Аналогичным путём получим

$$\partial\tilde{S}_q / \partial\tilde{N}_q = -\beta\mu_\alpha, \quad (\alpha = 1,\dots,M). \qquad (40)$$

В итоге, справедливы следующие обобщенные соотношения равновесной термодинамики квантовых неэкстенсивных систем

$$\tilde{S}_q = \ln_q \tilde{Z}_q, \quad \tilde{\Omega}_q = \tilde{U}_q - \frac{1}{\beta}\tilde{S}_q - \mu\tilde{N}_q, \qquad (41)$$

$$\frac{\partial\tilde{S}_q}{\partial\tilde{U}_q} = \frac{\partial}{\partial\tilde{U}_q}(\ln_q \tilde{Z}_q) = \beta, \quad \frac{\partial\tilde{S}_q}{\partial\tilde{N}_q} = -\beta\mu, \qquad (42)$$

$$\frac{\partial}{\partial\beta}(\beta\tilde{\Omega}_q) = \tilde{U}_q, \quad \frac{\partial}{\partial(\beta\mu)}(\beta\tilde{\Omega}_q) = -\tilde{N}_q. \qquad (43)$$

Здесь, однако, следует подчеркнуть, что величина $\tilde{Z}_q$ характеризуется микроскопическими энергией $\hat{H}(\boldsymbol{x})$ и числом частиц $\hat{N}_q$, вычисленными относительно средней энергии $\tilde{U}_q$ и среднего числа частиц $\tilde{N}_q$ соответственно. Если ввести новую статистическую сумму Z_q^*, которая определяется микроскопическими величинами $\hat{H}(\boldsymbol{x})$ и $\hat{N}_q$ относительно нулевой точки, согласно формуле

$$(Z_q^*)^{1-q} \equiv (\tilde{Z}_q)^{1-q} - \beta(1-q)\left(\tilde{U}_q - \mu\tilde{N}_q\right) \qquad (44)$$

и переопределить квантовый большой потенцал выражением

$$\tilde{\Omega}_q^* = -\beta^{-1} \ln_q Z_q^*, \qquad (45)$$

то соотношения (41)-(43) равновесной квантовой термодинамики принимают почти классическую форму

$$\tilde{S}_q = \beta\left(\tilde{U}_q - \mu\tilde{N}_q - \tilde{\Omega}_q^*\right), \qquad (46)$$

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\ln_q Z_q^*\right) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\beta\tilde{\Omega}_q^*\right) = -\tilde{U}_q, \qquad (47)$$

$$\frac{\partial}{\partial(\beta\mu)}\left(\ln_q Z_q^*\right) = -\frac{\partial}{\partial(\beta\mu)}\left(\beta\tilde{\Omega}_q^*\right) = \tilde{N}_q, \qquad (48)$$

$$\frac{\partial\tilde{S}_q}{\partial\tilde{U}_q} = \beta, \quad \frac{\partial\tilde{S}_q}{\partial\hat{N}_q} = -\beta\mu. \qquad (49)$$

Подчеркнём, что введённые выше соотношения обусловлены стандартной процедурой нахождения равновесного распределения матрицы плотности на основе принципа Джейнса экстремума квантовой параметрической энтропии Тсаллиса и потому применимы для весьма широкого круга квантовых аномальных явлений, описываемых неаддитивной статистической механикой.

2. Модифицированная статистическая термодинамика неэкстенсивных систем в квантовой статистике Тсаллиса

Принимая во внимание тот факт, что структура основных соотношений статистической термодинамики Гиббса существенно зависит от аддитивности классической энтропии, крайне важно выяснить, каким образом, в случае использования физической температуры T_{ph} могут быть модифицированы аналогичные соотношения (40)-(43) в неаддитивной статистике Тсаллиса.

Термодинамическое равновесие двух независимых систем. Рассмотрим для этого термодинамическое равновесие двух независимых неэкстенсивных квантовых систем с энтропиями Тсаллиса $S_q^{(1)} \equiv S_q\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)$ и $S_q^{(2)} \equiv S_q\left(\hat{\rho}^{(2)}\right)$, представляющих собой общую замкнутую систему с постоянными значениями совокупной энтропии $S_q^{(1,2)} \equiv S_q(\hat{\rho}^{(1,2)}) = const$ и совокупной осредненной энергии системы $U_q^{(1,2)} = U_q^{(1)} + U_q^{(2)} = const$.

Согласно свойству (6) неаддитивности q-энтропии Тсаллиса, совокупную энтропию квантовой системы можно записать в следующем виде

$$S_q^{(1,2)} = S_q^{(1)}\left[1 + \varepsilon S_q^{(2)}\right] + S_q^{(2)}\left[1 + \varepsilon S_q^{(1)}\right] - \varepsilon S_q^{(1)} S_q^{(2)}, \tag{50}$$

где $\varepsilon \equiv (1-q)$. Варьирование $\delta S_q^{(1,2)}$ и $\delta U_q^{(1,2)}$ для полной замкнутой системы с постоянными значениями энтропии $S_q^{(1,2)}$ и энергии $U_q^{(1,2)}$ приводит к равенству $\delta S_q^{(1,2)} = 0 = \delta S_q^{(1)}\left[1 + \varepsilon S_q^{(2)}\right] + \delta S_q^{(2)}\left[1 + \varepsilon S_q^{(1)}\right]$ для энтропии и равенству $\delta U_q^{(1,2)} = 0 = \delta U_q^{(1)} + \delta U_q^{(2)}$ для средней энергии. Объединяя их, в итоге получим уравнение

$$\frac{\delta S_q^{(1)} / \delta U_q^{(1)}}{1 + \varepsilon S_q^{(1)}} = \frac{\delta S_q^{(2)} / \delta U_q^{(2)}}{1 + \varepsilon S_q^{(2)}}, \tag{51}$$

или, с учётом (37) и (49),

$$\frac{\beta}{1 + (1-q) S_q^{(1)}} = \frac{\beta}{1 + (1-q) S_q^{(2)}} = \frac{\beta}{c_q} \equiv \beta_q. \tag{52}$$

Отношение эквивалентности (52) определяет условие теплового равновесия двух квантовых q-систем и является обобщением *нулевого закона термодина-*

мики на неаддитивные квантово-механические системы. Оно показывает, что в отличие от классического квантового случая $(q \to 1)$ физическая температура T_{ph} не является обратной величиной множителя Лагранжа, β^{-1}, но

$$T_{ph} \equiv \frac{1}{\beta_q} = \frac{c_q}{\beta} = \left(1 + \frac{1-q}{k_B} S_q\right) T = c_q T \,. \qquad (53)$$

Очевидно, что квантовая физическая температура T_{ph}, отличная от инверсии множителя Лагранжа β, отвечает за «глобальный» энергетический (тепловой) баланс между различными частями неаддитивной квантовой системы, который сильно отличается от локального теплового баланса. Локальный баланс можно охарактеризовать общей температурой $T = 1/\beta$, измеряемой термометром, но любое измерение физической температуры T_{ph} связано с необходимостью вычисления коэффициента Тсаллиса $\tilde{c}_q$, зависящего от параметра неаддитивности q.

Таким образом, отличие физической температуры от инверсии множителя Лагранжа β с неизбежностью приводит к необходимости видоизменения полученных выше термодинамических соотношений (40)-(43) для неаддитивных квантовых систем. В работе (*Abe, Okamoto, 2001*) в качестве основных предпосылок, взятых за исходный пункт построения макроскопической термодинамики с физической температурой, предлагаются первый закон термодинамики и структура преобразования Лежандра.

Деформированные термодинамические равенства для канонического квантового ансамбля. Аналогично введённой выше физической температуре T_{ph} квантовой системы можно определить квантовое физическое давление P_q путём исследования механического равновесия двух независимых q-систем. В этом случае энтропия совокупной квантовой системы должна максимизироваться с фиксацией общего объёма $V^{(1,2)} = V^{(1)} + V^{(2)} = const$. В результате будем иметь

$$\frac{\delta S_q^{(1)} / \delta V^{(1)}}{1+\varepsilon S_q^{(1)}} = \frac{\delta S_q^{(2)} / \delta V^{(2)}}{1+\varepsilon S_q^{(2)}} = \frac{P_{ph}}{T_{ph}}, \tag{54}$$

где P_{ph} – квантовое физическое давление, которое определяется соотношением

$$P_{ph} \equiv \frac{T_{ph}}{1+(1-q)S_q} \frac{\delta S_q}{\delta V} = \frac{T_{ph}}{c_q} \frac{\delta S_q}{\delta V}. \tag{55}$$

Очевидно, что определённые таким образом квантовые физическая температура и физическое давление обязательно должны привести к модификации определения термодинамической энтропии Клаузиуса.

Преобразования Лежандра. Уравнение (25) $\left(\beta = \partial S_q / \partial U_q\right)$ указывает на то, что параметры β и $U_q = U_q(S_q, P_{ph}, N)$ образуют пару переменных Лежандра. Это приводит к следующему определению большого термодинамического потенциала (см.(38)):

$$\Omega'_q(T,V,\mu) \equiv U_q - TS_q - \mu N_q = U_q - T \ln_q \left[c_q^{1/(1-q)} \right] - \mu N_q$$

(в этом разделе знак «тильды» будем опускать). Это выражение, однако, является неудовлетворительным, поскольку оно не написано с точки зрения физической температуры: термодинамический потенциал должен быть функцией T_{ph}, а не зависеть от абсолютной температуры T.

По аналогии с работой (*Abe, 2000b*), которой мы далее воспользуемся, переопределим большой термодинамический потенциал (38) следующим образом:

$$\Omega_q(T_{ph}, V, \mu_\alpha) = U_q - T_{ph} \ln \left[c_q^{1/(1-q)} \right] - \mu N_q. \tag{56}$$

При учёте соотношений (23), (43) и (53) можно убедиться, что величина Ω_q на самом деле является функцией T_{ph}. Варьируя функцию Ω_q, в результате получим

$$\delta\Omega_q = \delta U_q - \frac{\ln c_q}{(1-q)}\delta T_{ph} - \frac{T_{ph}}{c_q}\delta S_q - \mu\,\delta N_q - N_q\delta\mu\,. \tag{57}$$

Если теперь использовать первый закон термодинамики в формулировке Каратеодори (*Münster, 1969*)

$$\delta' Q_q = \delta U_q + \delta' W_q = \delta U_q + P_{ph}\delta V - \mu\,\delta N_q\,, \tag{58}$$

где $\delta' Q_q$ и $\delta' W_q$ – малые изменения количества теплоты (так называемой некомпенсированной теплоты), подводимой к q-системе или отводимой от неё, и работы, которые определяются выражениями (*Jarzynski, 1997, 2011; Abe, Rajagopal, 2003; Abe, 2006; Jarzynski, Wójcik, 2004*)

$$\delta' Q_q \equiv \frac{\boldsymbol{Sp}\left[\delta\hat{\rho}^q(\hat{H} - U_q)\right]}{\boldsymbol{Sp}\hat{\rho}^q}, \quad \delta' W_q \equiv -\langle\delta\hat{H}\rangle_q = -\frac{\boldsymbol{Sp}(\hat{\rho}^q\delta\hat{H})}{\boldsymbol{Sp}\hat{\rho}^q}, \tag{59}$$

то (57) можно переписать в виде

$$\delta\Omega_q = \delta' Q_q - P_{ph}d\delta - \frac{\ln c_q}{(1-q)}\delta T_{ph} - \frac{T_{ph}}{c_q}\delta S_q - N_q\delta\mu\,. \tag{60}$$

Отсюда следует, что определение термодинамической *энтропии Клаузиуса* модифицируется для неаддитивных квантовых систем следующим образом:

$$\delta S_q = c_q\delta' Q_q / T_{ph}\,. \tag{61}$$

Введём теперь в рассмотрение следующие характеристические функции квантовой системы: обобщённую энтальпию $H_q(S_q, P_{ph}, N_\alpha) = U_q + P_{ph}V$, вободную энергию Гельмгольца $F_q(T, V, N_\alpha) = U_q - T_{ph}\left[\ln c_q^{1/(1-q)}\right]$ и свободную энергию Гиббса $G_q(T, P_{ph}, N_\alpha) = F_q + P_{ph}V$. Заметим, что все характеристические функции обладают следующим свойством: *если известна характеристическая функция, выраженная через соответствующие (свои для каждой характеристической функции) переменные, то из неё можно вычислить любую термодинамическую величину.*

В этом нетрудно убедиться. Из уравнений

$$\delta U_q = \frac{T_{ph}}{c_q}\delta S_q - P_{ph}\delta V + \mu\delta N_q, \tag{62}$$

$$\delta H_q = \frac{T_{ph}}{c_q}\delta S_q + V\delta P_{ph} + \mu\delta N_q, \tag{63}$$

$$\delta F_q = -\left[\frac{\ln c_q}{(1-q)}\right]\delta T_{ph} - P_{ph}\delta V + \mu\delta N_q, \tag{64}$$

$$\delta G_q = -\left[\frac{\ln c_q}{1-q}\right]\delta T_{ph} + V\delta P_{ph} + \mu\delta N_q, \tag{65}$$

$$\delta\Omega_q = -\left[\frac{\ln c_q}{(1-q)}\right]\delta T_{ph} - P_{ph}\delta V - N_q\delta\mu \tag{66}$$

следуют обобщённые термодинамические соотношения

$$\left(\partial U_q / \partial V\right)_{S_q,N_\alpha} = \left(\partial F_q / \partial V\right)_{T_{ph},N_\alpha} = -P_{ph}, \tag{67}$$

$$\left(\partial U_q / \partial S_q\right)_{V,N_\alpha} = \left(\partial H_q / \partial S_q\right)_{P_{ph},N_\alpha} = T_{ph} / c_q, \tag{68}$$

$$\left(\partial H_q / \partial P_{ph}\right)_{S_q,N_\alpha} = \left(\partial G_q / \partial P_{ph}\right)_{T_{ph},N_\alpha} = V, \tag{69}$$

$$\left(\partial F_q / \partial T_{ph}\right)_{V,N_\alpha} = \left(\partial G_q / \partial T_{ph}\right)_{P_{ph},N_\alpha} = -\ln c_q / (1-q). \tag{70}$$

Уравнение для квантовых теплоёмкостей. Как известно, в термодинамике теплоёмкость вещества в наиболее общем виде определяется следующим образом: $C_z = T\left(\partial S / \partial T\right)_z$. Здесь $C_z -$ теплоёмкость в таком процессе, в котором сохраняется постоянным параметр z, где $z -$ любые обобщённые координаты.

Наиболее распространёнными являются изобарная теплоёмкость и изохорная теплоёмкость:

$$C_{qp} = \frac{T_{ph}}{c_q}\left(\partial S_q / \partial T_{ph}\right)_{P_{ph}}, \quad C_{qV} = \frac{T_{ph}}{c_q}\left(\partial S_q / \partial T_{ph}\right)_V. \tag{71}$$

Так как в соответствии с формулой $\left(\dfrac{\partial y}{\partial x}\right)_z = \left(\dfrac{\partial y}{\partial u}\right)_z \left(\dfrac{\partial u)}{\partial x}\right)_z$ (справедливой для случая двух переменных, когда $y = y(x,z)$ и $u = u(x,z)$) имеем

$$\left(\frac{\partial S_q}{\partial T_{ph}}\right)_{P_{ph}} = \left(\frac{\partial S_q}{\partial H_q}\right)_{P_{ph}} \left(\frac{\partial H_q}{\partial T_{ph}}\right)_{P_{ph}} \text{ и } \left(\frac{\partial S_q}{\partial T_{ph}}\right)_V = \left(\frac{\partial S_q}{\partial U_q}\right)_V \left(\frac{\partial U_q}{\partial T_{ph}}\right)_V, \tag{72}$$

а из (68) и (70) следует, что $\left(\dfrac{\partial S_q}{\partial H_q}\right)_{P_{ph}} = \dfrac{c_q}{T_{ph}}$, $\left(\dfrac{\partial S_q}{\partial U_q}\right)_V = \dfrac{c_q}{T_{ph}}$, то соотношения (71) можно записать в виде

$$C_{qp} = \left(\partial H_q / \partial T_{ph}\right)_{P_{ph}}, \quad C_{qV} = \left(\partial U_q / \partial T_{ph}\right)_V. \tag{73}$$

Уравнение, устанавливающее связь между теплоёмкостями C_p и C_V, может быть получено следующим образом. В соответствии с соотношением (см. Сычев, 1991)

$$\left(\frac{\partial z}{\partial m}\right)_n = \left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial x}{\partial m}\right)_n + \left(\frac{\partial z)}{\partial y}\right)_x \left(\frac{\partial y}{\partial m}\right)_n, \tag{74}$$

являющимся следствием выражения для полного дифференциала функции $z = z(x, y)$, можно записать (полагая $m = x$)

$$\left(\frac{\partial S_q}{\partial T_{ph}}\right)_{P_{ph}} = \left(\frac{\partial S_q}{\partial T_{ph}}\right)_V + \left(\frac{\partial S_q}{\partial V}\right)_{T_{ph}} \left(\frac{\partial V}{\partial T_{ph}}\right)_{P_{ph}}. \tag{75}$$

Отсюда, используя уравнение Максвелла $(\partial S_q/\partial V)_{T_{ph}} = (\partial P_{ph}/T_{ph})_V$, получим

$$C_p - C_V = \frac{T_{ph}}{c_q^2}\left(\partial P_{ph} / \partial T_{ph}\right)_V \left(\partial V / \partial T_{ph}\right)_{P_{ph}}. \tag{76}$$

Это выражение можно представить в другом виде, если использовать *связку трёх производных* $\left(\frac{\partial z}{\partial x}\right)_y \left(\frac{\partial x}{\partial y}\right)_z \left(\frac{\partial y}{\partial z}\right)_x = -1$ (следствие соотношения (74) при $m = x,\ n = z$ (*Сычев, 1991*), из которой следует

$$\left(\partial P_{ph} / \partial T_{ph}\right)_V = -\left(\partial V / \partial T_{ph}\right)_{P_{ph}} \left(\partial P_{ph} / \partial V\right)_{T_{ph}}. \tag{77}$$

С учётом (77) связь между теплоёмкостями приобретает классический вид:

$$C_p - C_V = -\frac{T_{ph}}{c_q^2}\left(\partial V / \partial T_{ph}\right)^2_{P_{ph}} / \left(\partial V / \partial P_{ph}\right)_{T_{ph}}. \tag{78}$$

Таким образом, стандартная форма термодинамических соотношений (68) и (73) для уравнения состояния и теплоёмкости позволяет заключить, что они остаются инвариантными относительно неаддитивной модификации их классических аналогов. Подчеркнем важный факт, что температуры $T = 1/\beta$ и $T_{ph} = 1/\beta_q$ не зависят от выбора нуля энергий, и поэтому они допускают физическую интерпретацию. Заметим, что в дополнение к структуре Лежандра различные другие важные теоремы и свойства остаются q-инвариантными (см. *Tsallis, 2009*).

3. Квантовая относительная энтропия в статистике Тсаллиса. Обобщенная *H*-теорема Больцмана

Наряду с квантовой параметрической энтропией $S_q(\hat{\rho}) = \frac{1}{q-1}\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho} - \hat{\rho}^q\right)$ обобщённая квантовая относительная энтропия (квантовая информация различия Ратье−Каннаппана (см. *Abe, Rajagopal, 2003;Abe, 2004*))

$$K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right) \equiv \frac{1}{1-q}\left[1-\boldsymbol{Sp}(\hat{\rho}^q\hat{\sigma}^{1-q})\right] =$$

$$= \boldsymbol{Sp}\left[\hat{\rho}\ln_q\left(\hat{\sigma}\hat{\rho}^{-1}\right)\right] = \boldsymbol{Sp}\left[\hat{\rho}^q(\ln_q\hat{\rho}-\ln_q\hat{\sigma})\right] = -\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^q\ln_q\hat{\sigma}\right) - S_q(\hat{\rho}) \qquad (79)$$

относится к наиболее существенным статистическим характеристикам квантово-механической q-системы. Являясь функционалом, она характеризует переход системы от состояния с матрицей плотности $\hat{\rho}$ в состояние с матрицей $\hat{\sigma}$, когда статистические наблюдения ведутся относительно состояния $\hat{\rho}$.

Легко показать, что в пределе слабой связи $q\to 1$ величина $K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right)$ переходит в традиционную квантовую относительную энтропию матрицы $\hat{\sigma}$ по отношению к матрице $\hat{\rho}$ (или в квантовую различающую информацию Кульбака–Лейблера)

$$\begin{gathered}\lim_{q\to 1} K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right) = K_1\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right) = \\ = \boldsymbol{Sp}\left[\hat{\rho}\left(\ln\frac{\hat{\rho}}{\hat{\sigma}}\right)\right] = -\boldsymbol{Sp}\left[\hat{\rho}\ln\hat{\sigma}\right] - S_1(\hat{\rho}).\end{gathered} \qquad (80)$$

Действительно, в пределе $q\to 1$ имеем

$$\begin{gathered}\frac{1}{1-q}\left[1-\boldsymbol{Sp}(\hat{\rho}^q\hat{\sigma}^{1-q})\right] = \frac{1}{1-q}\boldsymbol{Sp}\left\{\hat{\rho}\left[1-\left(\hat{\rho}/\hat{\sigma}\right)^{q-1}\right]\right\} = \\ = \frac{1}{1-q}\boldsymbol{Sp}\left\{\hat{\rho}\left[1-\exp\ln\left(\hat{\rho}/\hat{\sigma}\right)^{q-1}\right]\right\} \simeq \qquad (81) \\ \simeq \frac{1}{1-q}\boldsymbol{Sp}\left\{\hat{\rho}\left[1-1-(q-1)\ln\left(\hat{\rho}/\hat{\sigma}\right)\right]\right\} = \boldsymbol{Sp}\left\{\hat{\rho}\left[\ln\left(\frac{\hat{\rho}}{\hat{\sigma}}\right)\right]\right\} = K_1\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right).\end{gathered}$$

Выпуклость обобщённой квантовой относительной энтропии. Покажем, что энтропия $K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right)$ является вещественным, выпуклым и положительным (отрицательным) функционалом с минимумом (максимумом) при $q>0$ $\left(q<0\right)$. Это можно сделать, используя квантовую относительную энтропию (79), преобразованную к виду

$$K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right)=\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}\,\mathrm{Ln}_q\,\hat{\rho}\right)-\boldsymbol{Sp}\left[\hat{\rho}\left(\frac{\hat{\rho}}{\hat{\sigma}}\right)^{q-1}\mathrm{Ln}_q\,\hat{\sigma}\right]$$

и неравенства (29), записанные в виде

$$\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}\,\mathrm{Ln}_q\,\hat{\rho}\right)-\boldsymbol{Sp}\left[\hat{\rho}\left(\frac{\hat{\rho}}{\hat{\sigma}}\right)^{q-1}\mathrm{Ln}_q\,\hat{\sigma}\right]\begin{matrix}\geq 0, & \textit{если}\; q>0;\\ \leq 0, & \textit{если}\; q<0.\end{matrix}$$

В результате получим

$$K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right)\geq 0\,,\quad \left(q\geq 0\right);\quad K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right)\leq 0\,,\quad \left(q<0\right). \tag{82}$$

Таким образом, обобщённая квантовая относительная энтропия неотрицательна, т.е. функционал $K_q\left(\hat{\sigma}:\hat{\rho}\right)$ при $q>0$ удовлетворяет такому же обобщённому *неравенству Клейна* $K_1\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right)\geq 0$ (являющемуся квантовым аналогом неравенства Гиббса для информации различия Кульбака−Лейблера (см., например, Колесниченко, 2018а)), как и *квантовая относительная энтропия фон Неймана* ($K_1\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right)\geq 0$), а потому может использоваться для тех же целей. Однако в рассматриваемом случае имеется свобода выбора параметра деформации q, что позволяет адекватно исследовать неэкстенсивную квантовую систему.

При $\hat{\rho}\equiv\hat{\sigma}$ имеем равенство $K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\rho}\right)=0$. Таким образом, квантовая информация различия Ратье−Каннаппана является знакоопределённой функцией Ляпунова.

Неаддитивность квантовой относительной энтропии для независимых систем. Пусть состояние физической квантовой системы описывается нормированными совместными распределениями операторов плотности $\hat{\rho}_{(1,2)}=\hat{\rho}_1\otimes\hat{\rho}_2$ и $\hat{\sigma}_{(1,2)}=\hat{\sigma}_1\otimes\hat{\sigma}_2$ при статистической независимости двух физических систем. Квантовые относительные энтропии для неэкстенсивных совокупной и отдельных систем определяются выражениями

$$K_q\left(\hat{\rho}_{(1,2)}:\hat{\sigma}_{(1,2)}\right)\equiv\frac{1}{1-q}\left[1-\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^{q}_{(1,2)}\hat{\sigma}^{1-q}_{(1,2)}\right)\right], \tag{83}$$

$$K_q\left(\hat{\rho}_1:\hat{\sigma}_1\right)\equiv\frac{1}{1-q}\left[1-\boldsymbol{Sp}(\hat{\rho}_1^{q}\hat{\sigma}_1^{1-q})\right],\quad K_q\left(\hat{\rho}_2:\hat{\sigma}_2\right)\equiv\frac{1}{1-q}\left[1-\boldsymbol{Sp}(\hat{\rho}_2^{q}\hat{\sigma}_2^{1-q})\right], \tag{84}$$

где условия нормировки имеют вид

$$\boldsymbol{Sp}\,\hat{\rho}_{(1,2)}=\boldsymbol{Sp}\,\hat{\rho}_1=\boldsymbol{Sp}\,\hat{\rho}_2,\quad \boldsymbol{Sp}\,\hat{\sigma}_{(1,2)}=\boldsymbol{Sp}\,\hat{\sigma}_1=\boldsymbol{Sp}\,\hat{\sigma}_2. \tag{85}$$

Отсюда следует, что квантовая информация различия Ратье–Каннаппана обладает следующим свойством псевдоаддитивности для независимых систем

$$K_q\left(\hat{\rho}_{(1,2)}:\hat{\sigma}_{(1,2)}\right)=$$

$$=K_q\left(\hat{\rho}_1:\hat{\sigma}_1\right)+K_q\left(\hat{\rho}_2:\hat{\sigma}_2\right)+(q-1)K_q\left(\hat{\rho}_1:\hat{\sigma}_1\right)K_q\left(\hat{\rho}_2:\hat{\sigma}_2\right). \tag{86}$$

При $q=1$ из (86) следует свойство аддитивности для квантовой информация различия Кульбака–Лейблера $K_1\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right)\equiv\boldsymbol{Sp}\left[\hat{\rho}\ln\left(\hat{\rho}\hat{\sigma}^{-1}\right)\right]$ в классической модели с мерой фон Неймана.

Формула перехода системы от произвольного в равновесное состояние. Пусть равновесная неаддитивная квантовая система находится в термостате с температурой $1/\beta$. Для определения равновесного оператора плотности $\hat{\hat{\sigma}}$ находим безусловный экстремум лагранжиана

$$L(\hat{\sigma})\equiv-\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\sigma}\,\mathrm{Ln}_q\,\hat{\sigma}\right)-\beta\frac{\boldsymbol{Sp}\left(\hat{\sigma}^{q}\hat{H}\right)}{c_q}-\lambda\boldsymbol{Sp}\,\hat{\sigma},\quad \text{где } c_q\equiv\boldsymbol{Sp}\,\hat{\sigma}^{q}.$$

В результате получим следующее каноническое распределение для нормированной матрицы плотности в квантовой статистике Тсаллиса:

$$\hat{\hat{\sigma}}(\boldsymbol{x},\tilde{\beta}_q)=\frac{1}{\tilde{Z}_q(\tilde{\beta}_q)}\left\{1-(1-q)\tilde{\beta}_q\left[\left(\hat{H}(\boldsymbol{x})-\tilde{U}_q\right)\right]\right\}^{1/(1-q)}, \tag{87}$$

где

$$\tilde{U}_q=\boldsymbol{Sp}\left[\hat{\hat{\sigma}}^{q}H(\boldsymbol{x})\right]/\,\boldsymbol{Sp}\,\hat{\hat{\sigma}}^{q},\quad \tilde{\beta}_q=\beta/\tilde{c}_q,\quad \tilde{c}_q=\boldsymbol{Sp}\,\hat{\hat{\sigma}}^{q}, \tag{88}$$

$$\tilde{Z}_q(\tilde{\beta}_q) \equiv \boldsymbol{Sp}\left\{\exp_q\left[-\tilde{\beta}_q\left(\hat{H}(\boldsymbol{x})-\tilde{U}_q\right)\right]\right\} \tag{89}$$

– статистическая сумма.

Используя каноническое распределение (87) для термостата с температурой $1/\beta$ можно найти соответствующие значения энтропии $\tilde{S}_q = \ln_q \tilde{Z}_q$, энергии $\tilde{U}_q = \boldsymbol{Sp}(\hat{\tilde{\sigma}}^q \hat{H}) / \boldsymbol{Sp}\,\hat{\tilde{\sigma}}^q$ и свободной энергии $\tilde{F}_q = \tilde{U}_q - \tilde{\beta}_q^{-1}\tilde{S}_q$ для квантовой системы, находящейся в равновесном состоянии. Дифференцируя выражение $\tilde{S}_q = \ln_q \tilde{Z}_q$, можно получить полную систему термодинамических равенств для замкнутой системы, обобщающую классические квантовые соотношения на равновесные квантовые q-системы (ср. с формулами (41)-(43)):

$$d\,\tilde{S}_q = \beta\, d\,\tilde{U}_q, \quad d(\beta\tilde{F}_q) = \tilde{U}_q d\,\beta. \tag{90}$$

Рассмотрим теперь спонтанный переход между произвольным состоянием системы с матрицей плотности $\hat{\rho}$ и его равновесным состоянием с матрицей плотности $\hat{\tilde{\sigma}}$. Подставляя (87) в выражение $\tilde{c}_q K_q\left(\hat{\tilde{\sigma}} : \hat{\rho}\right)$, в результате получим неравенство

$$\begin{aligned}
\tilde{c}_q K_q\left(\hat{\rho} : \hat{\tilde{\sigma}}\right) &= \frac{1}{1-q}\left[\tilde{c}_q - \tilde{c}_q \boldsymbol{Sp}\left(\hat{\rho}^q \hat{\tilde{\sigma}}^{1-q}\right)\right] = \\
&= \frac{\tilde{c}_q - \boldsymbol{Sp}\left\{\hat{\rho}^q\left[1-(1-q)\tilde{\beta}_q\left((\hat{H}(\boldsymbol{x}) - \tilde{U}_q)\right)\right]\right\}}{1-q} = \\
&= \frac{\tilde{c}_q - c_q + c_q(1-q)\tilde{\beta}_q(U_q - \tilde{U}_q)}{1-q} = -\frac{1-\tilde{c}_q}{(1-q)} + \frac{1-c_q}{(1-q)} + c_q\tilde{\beta}_q(U_q - \tilde{U}_q) = \\
&= \tilde{S}_q - S_q + c_q\tilde{\beta}_q\left[\left(U_q - \tilde{U}_q\right)\right] = \tilde{S}_q - S_q + \tilde{\beta}_q \boldsymbol{Sp}\left[\hat{\rho}^q\left(\hat{H}(\boldsymbol{x}) - \tilde{U}_q\right)\right],
\end{aligned} \tag{91}$$

совпадающее при $q=1$ с известным термодинамическим неравенством для информации различия Кульбака–Лейблера для аддитивных квантовых систем.

Неравенство Клаузиуса. Варьируя оператор $\tilde{c}_q K_q\left(\hat{\rho} : \hat{\tilde{\sigma}}\right)$ относительно матрицы плотности $\hat{\rho}$, т.е. считая, что $\hat{\rho} \to \hat{\tilde{\rho}} + \delta\hat{\rho}$ и $\boldsymbol{Sp}(\delta\hat{\rho}) = 0$, получим

$$\tilde{c}_q \delta K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\tilde{\rho}}\right) = -\,\delta S_q(\hat{\rho}) + \tilde{\beta}_q \boldsymbol{Sp}\left[\delta\hat{\rho}^q\left(\hat{H}(\boldsymbol{x}) - \tilde{U}_q\right)\right]. \tag{92}$$

Здесь использовано преобразование

$$S_q(\hat{\rho}) \equiv \frac{\boldsymbol{Sp}(\hat{\rho}-\hat{\rho}^q)}{q-1} \to \frac{\boldsymbol{Sp}(\hat{\tilde{\rho}}-\hat{\tilde{\rho}}^q)}{q-1} + \delta\frac{\boldsymbol{Sp}(\hat{\rho}-\hat{\rho}^q)}{q-1} = \tilde{S}_q + \delta S_q(\hat{\rho}).$$

Учитывая теперь выражение (59) для вариации количества теплоты, поступающего в систему $\delta' Q_q \equiv \boldsymbol{Sp}\left[\delta\hat{\rho}^q(\hat{H} - U_q)\right]/\tilde{c}_q$, перепишем выражение (88) следующим образом

$$\tilde{c}_q \delta K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\tilde{\rho}}\right) = \beta\,\delta' Q_q - \delta S_q(\hat{\rho}). \tag{93}$$

Используя теперь положительное унитальное отображение $\hat{\rho} \to \hat{\tilde{\rho}} + \delta\hat{\rho} \equiv \Lambda(\hat{\rho})$ (полностью сохраняющее след), представим вариацию $\delta K_q\left(\hat{\tilde{\rho}}:\hat{\rho}\right)$ в виде:

$$\delta K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\tilde{\rho}}\right) = \delta K_q\left(\Lambda(\hat{\rho}):\hat{\tilde{\rho}}\right) - \delta K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\tilde{\rho}}\right). \tag{94}$$

В работе (*Abe, Rajagopsal, 2003*), было показано, что только если параметр деформации q лежит в интервале $q \in (0,2)$, то справедливо следующее неравенство

$$\delta K_q\left(\Lambda(\hat{\rho}):\hat{\tilde{\rho}}\right) - \delta K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\tilde{\rho}}\right) \le 0. \tag{95}$$

Следовательно, при учёте (87)-(89) можно получить следующее фундаментальное неравенство Клаузиуса

$$\beta\,\delta' Q_q \le \delta S_q(\hat{\rho}), \quad q \in (0,2), \tag{96}$$

связывающее энтропию замкнутой квантовой системы с теплотой и температурой.

Таким образом, второй закон термодинамики (90) в квантовой термодинамике Тсаллиса также справедлив, что согласуется с принципом термодинамики в классической квантовой термодинамике (см. *фон Нейман, 1964*). Однако в отличие от последней, он справедлив только для значений энтропийного индекса, ограниченого интервалом $q \in (0,2)$, а для квантовых систем с $q > 2$ он нарушается. Отметим ещё одно обстоятельство. В классической термодинамике второй закон определяет направление реально осуществляющихся процессов. Следовательно, адиабатические необратимые процессы ($\delta' Q_q = 0$) в квантовой термодинамике Тсаллиса, согласно неравенству (90), могут происходить в направлении роста энтропии только для значений параметра деформации $q \in (0,2)$.

***H*-теорема в квантовой статистике Тсаллиса.** Сравним теперь значения энтропий Клаузиуса для двух состояний квантово-механической системы с распределениями $\hat{\rho}$ и $\hat{\tilde{\rho}}$ при условии Гиббса, т.е. при одинаковости средних энергий

$$\boldsymbol{Sp}(\hat{H}\hat{P}_q) = \boldsymbol{Sp}(\hat{H}\hat{\tilde{P}}_q). \tag{97}$$

С учётом условия $\tilde{c}_q \equiv \left(\tilde{Z}_q\right)^{1-q} > 0$ и свойства выпуклости (82) информации различия Ратье–Каннаппана, из (85) получим

$$K_q\left(\hat{\tilde{\rho}} : \hat{\rho}\right) = \tilde{S}_q(\hat{\tilde{\rho}}) - S_q(\hat{\rho}^q) \geq 0 \qquad q \in (0,2) \tag{98}$$

Из неравенств (92) следует обобщённая теорема Гиббса: квантовая q-энтропия равновесного состояниямаксимальна $\tilde{S}_q(\hat{\tilde{\rho}}) \geq S_q(\hat{\rho}^q)$ при $0 < q < 2$

Из (92) также вытекает, что при увеличении энтропии $S_q(\hat{\rho}^q) \to \tilde{S}_q(\hat{\tilde{\rho}})$, положительная мера информации различия уменьшается, т.е. имеет место уменьшение статистической упорядоченности в микросостояниях квантовой неэкстенсивной системы.

Согласно свойству выпуклости (82), квантовая информация различия Ратье–Каннаппана является знакоопределенной функцией Ляпунова. Чтобы состояние полного равновесия было устойчивым необходимы следующие неравенства[†]

$$\frac{d}{dt}\left[\tilde{c}_q K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\tilde{\rho}}\right)\right]=-\frac{d}{dt}\left[S_q\left(\hat{\rho}\right)-\tilde{S}_q\left(\hat{\tilde{\rho}}\right)\right]<0 \quad \text{при } 0<q<2\,. \tag{99}$$

Таким образом, при стремлении системы к равновесному состоянию во временной эволюции информация различия уменьшается. Из (93) следует закон возрастания энтропии Тсаллиса со временем в квантовой неаддитивной статистической механике

$$\frac{dS_q\left(p\right)}{dt}>0 \quad \text{при } 0<q<2, \tag{100}$$

который справедлив при приближении к состоянию полного статистического равновесия (H-теорема Больцмана). Таким образом, происходит хаотизация макроскопической системы при спонтанных переходах.

Заключение

Область неэкстенсивной (неаддитивной) статистической механики в настоящее время переживает фазу интенсивного развития. Обсуждаются различные подходы и идеи, в том числе методы исследования равновесных и неравновесных состояний, базирующиеся на статистических моделях с параметрическими функционалами для энтропий. В случае квантовых систем, описываемых методом статистических операторов (матрицами плотности) комплексов частиц, были получены обобщения ряда этих функционалов для статистик Ферми–Дирака и Бозе–Эйнштейна.

---

†) Напомним, что функцией Ляпунова для данной системы называется знакоопределённая функция, которая обращается в нуль в точке равновесия системы. Состояние равновесия является аттрактором, когда поизводная по времени от функции Ляпунова имеет знак, противоположный знаку самой функции.

В данной работе для описания квантово-механической неэкстенсивной системы также использован формализм матрицы плотности, описывающий системы, квантовые состояния которых известны не полностью. Кроме этого, широко использован обычный формализм феноменологической термодинамики, причём правильность обоих основных начал термодинамики, вслед за фон Нейманом, подразумевается. С учетом этих предположений получена равновесная статистическая термодинамика квантовых неэкстенсивных систем и определнены её термодинамические свойства. Проведенное рассмотрение базируется на двух функционалах − квантовой параметрической энтропии Тсаллиса и обобщённой квантовой различающей информации Ратье-Каннаппана. Выполненный анализ квантовой системы основывается на степенном равновесном распределении матрицы плотности, полученном из условия абсолютного экстремума квантовой энтропии Тсаллиса при заданности средней энергии и среднего числа частиц для ансамбля квантовых систем, а также на осреднении наблюдаемых по эскортному распределению. В результате получено обобщение на квантовый случай нулевого закона термодинамики для двух независимых подсистем при их тепловом контакте и введена так называемая физическая температура, отличная от инверсии множителя Лагранжа β. С привлечением обобщённого первого закона термодинамики и преобразования Лежандра найдены модифицированные термодинамические соотношения на основе введённой энтропии Клаузиуса, которые отличны от выведенных ранее традиционным для статистической механики способом. С использованием свойства выпуклости различающей информации Ратье-Каннаппана (обобщенной на квантовый случай) обсуждается второй закон термодинамики квантовых систем. Изучены также спонтанные переходы между стационарными состояниями сложной квантово-механической системы и доказана *H*-теорема Больцмана.

Развитый подход предполагает использование неэкстенсивной квантовой термодинамики в различных квантовых технологиях, связанных, в частности, с моделированием тепловых квантовых эффектов в различных наноустройствах.

Приложение: Статистические операторы квантовых систем

Напомним некоторые понятия статистической механики квантовых систем в той мере, насколько это требуется для понимания дальнейшего (см., например, *Зубарев, 1971; фон Нейман, 1064*)

Чистые квантовые состояния. В отличие от классической статистической механики, в которой микроскопическое состояние системы описывается точкой $\boldsymbol{r} \equiv \{\boldsymbol{x}^n \boldsymbol{p}^n\} = \{\boldsymbol{x}_1,...,\boldsymbol{x}_n; \boldsymbol{p}_1,...,\boldsymbol{p}_n\}$ в $6n$-мерном фазовом пространстве, а эволюция состояния во времени − уравнениями Гамильтона, в квантовой механике состояние динамической системы описывается волновой функцией $\psi(\boldsymbol{x}_1,...,\boldsymbol{x}_n,t)$ (или, короче, $\psi(\boldsymbol{x},t)$, где $\boldsymbol{x}$ − совокупность координат $\boldsymbol{x}_1,...,\boldsymbol{x}_n$), заданной в гильбертовом пространстве и зависящей от времени и координат частиц, или от другой системы одновременно измеряемых физических величин. Заметим, что используемые в квантовой механике волновые функции в общем случае комплекснозначны и нормированы на единицу:

$$\left(\psi^*(\boldsymbol{x},t), \psi(\boldsymbol{x},t)\right) = 1, \tag{П.1}$$

где звездочка означает операцию комплексного сопряжения. Скобки означают скалярное произведение функций в гильбертовом пространстве состояний, т.е.

$$\left(\psi_1^*, \psi_2\right) = \int \psi_1^*(\boldsymbol{x})\psi_2(\boldsymbol{x},t)d\boldsymbol{x}\,. \tag{П.2}$$

Динамические переменные в квантовой механике представляются линейными самосопряженными (эрмитовыми) операторами[‡)] $\hat{A}$, действующими в гильбертовом пространстве состояний на волновые функции ψ (далее операторы будем обозначать буквой со «шляпкой» над ней). Их спектр определяет возможные наблюдаемые значения физических величин. Среднее значение динамической переменной $\hat{A}$ в произвольном квантовом состоянии ψ определяется выражением

[‡)] Напомним, что оператор $\hat{A}^+$ называется сопряженным оператору $\hat{A}$, если для каждой пары функций ψ_1 и ψ_2 имеет место соотношение $\left\langle \psi_1, \hat{A}\psi_2 \right\rangle = \left\langle \hat{A}^+\psi_1, \psi_2 \right\rangle$. Эрмитов (или самосопряженный) оператор $\hat{A}$ совпадает со своим сопряженным: $\hat{A} = \hat{A}^+$. Собственные значения эрмитовых операторов являются действительными числами.

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle = \left(\psi^*, \hat{A}\psi \right), \qquad (П.4)$$

Эта формула дает только вероятностное предсказание о наблюдаемых значениях любых физических свеличин. Лишь в частном случае, когда ψ есть собственная функция оператора $\hat{A}$, формула (П.4) дает точное значение величины $\hat{A}$ в состоянии ψ.

Статистические аспекты квантовой механики описываются с помощью ансамбля невзаимодействующих «копий» системы, находящихся в одном и том же квантовом состоянии ψ. Введенный таким способом статистический ансамбль называется чистым квантовым ансамблем.

Смешанные квантовые ансамбли. В более общем случае в квантовой статистической механике вводятся так называемые смешанные ансамбли, которые основаны на неполном наборе данных о системе. Рассмотрим ансамбль, состоящий из большого числа тождественных невзаимодействующих копий данной системы, которые могут находиться в некоторых различных квантовых состояниях ψ_r $(r = 1, 2, ...)$. При этом определены лишь вероятности w_r $(w_r \geq 0$, $\sum_r w_r = 1)$ обнаружить систему в каждом из возможных квантовых состояний.

Тогда среднее значение любой динамической величины A в смешанном ансамбле определяется выражением

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle = \sum_r w_r \left(\psi_r^*, \hat{A}\psi_r \right), \qquad (П.5)$$

где $\left(\psi_r^*, \hat{A}\psi_r \right)$ – квантово-механическое среднее оператора $\hat{A}$ в состоянии r. В случае чистого ансамбля все вероятности w_r равны нулю, кроме одной, равной единице.

Для изучения смешанных ансамблей вводится статистический оператор $\hat{\rho}$ следующим способом. Для этого запишем линейный оператор $\hat{A}$ в матричном $\boldsymbol{x}$ -представлении, определив его с помощью матричных элементов

$$\hat{A}\psi(\boldsymbol{x}) = \int A(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\psi(\boldsymbol{x}')\, d\boldsymbol{x}'. \qquad (П.6)$$

Подставляя (П.7) в (П.6), получим

$$\left\langle \hat{A} \right\rangle = \int A(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')\hat{\rho}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}')d\boldsymbol{x}d\boldsymbol{x}' = \mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{\rho}), \qquad (П.7)$$

где

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \sum_r w_r \psi_r(\boldsymbol{x})\, \psi_r^*(\boldsymbol{x}') \qquad (П.8)$$

– статистический оператор в матричном $\boldsymbol{x}$-представлении, который называется матрицей плотности. Статистический оператор (П.8) зависит от $2n$ переменных $\boldsymbol{x}_1,...,\boldsymbol{x}_n;\boldsymbol{x}'_1,...,\boldsymbol{x}'_n$.

Заметим, что статистический оператор $\hat{\rho}$ является эрмитовым, он положительно определен, т.е. не имеет отрицательных собственных значений, и подчиняется условию нормировки

$$\boldsymbol{Sp}\,\hat{\rho}=1, \tag{П.9}$$

так как $\boldsymbol{Sp}\,\hat{\rho}\equiv\int\hat{\rho}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})d\boldsymbol{x}=\sum_r w_r\left(\psi_r^*,\psi_r\right)=1$. Кроме того, если число частиц в квантовой системе не фиксировано, то n играет роль дополнительного квантового числа, характеризующего возможные состояния, и смешанный ансамбль должен включать системы с различными числами частиц.

Формула (П.7) удобна тем, что шпур матрицы инвариантен относительно унитарных преобразований операторов. Поэтому формула (П.7) не зависит от представления операторов $\hat{A}$ и $\hat{\rho}$.

Уравнение Лиувилля в квантовом случае. Рассмотрим эволюцию во времени статистического оператора для ансамбля систем с гамильтонианом $\hat{H}$, который может зависеть от времени. Статистический оператор в момент времени имеет вид (П.7), где w_r не зависят от t, так как они соответствуют распределению вероятностей при $t=0$. Функции $\psi_r(\boldsymbol{x},t)$ – решения уравнения Шредингера (П.5), удовлетворяющие начальному условию $\psi_r(\boldsymbol{x},t)\big|_{t=0}=\psi_r(\boldsymbol{x})$, где $\psi_r(\boldsymbol{x})$ – некоторая система волновых функций, определяющих статистический оператор при $t=0$:

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\sum_r w_r\psi_r(\boldsymbol{x})\,\psi_r^*(\boldsymbol{x}')\,. \tag{П.10}$$

Статистический оператор (П.8) удовлетворяет следующему уравнению движения (квантовому уравнению Лиувилля в операторной форме)

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\rho}}{\partial t}=\left[\hat{H},\hat{\rho}\right]=(\hat{H}\hat{\rho}-\hat{\rho}\hat{H}), \tag{П.11}$$

где $\hat{H}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')$ – самосопряжпенный оператор (гамильтониан), действующий в гильбертовом пространстве на матрицу плотности $\hat{\rho}$; $\hbar$ – постоянная Планка; $i\hbar\left[\hat{H},\hat{\rho}\right]=i\hbar(\hat{H}\hat{\rho}-\hat{\rho}\hat{H})$ – квантовые скобки Пуассона. В частностном случае для системы из n одинаковых бесспиновых частиц массы m, взаимодействующих между собой с потенциалом $\Phi(|\boldsymbol{x}|)$, оператор энергии $\hat{H}$ имеет вид:

$$\hat{H}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}') = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2}{\partial \boldsymbol{x}_j^2} + \frac{1}{2}\sum_{j\neq k}^{N}\Phi(|\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_k|) \right\} \prod_{i=1}^{n}\delta(\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}'_i). \qquad (\text{П.12})$$

Коммутативность операторов $\hat{\rho}$ и $\hat{H}$ и их эрмитовость показывают, что они имеют общую систему собственных функций. Поэтому статистический оператор в случае статистического равновесия можно представить в виде (П.10), где $\psi_r(\boldsymbol{x})$ − собственные функции гамильтониана $\hat{H}\psi_r = E_r\psi_r$.

Заметим, что в квантовой механике не все собственные функции являются допустимыми волновыми функциями системы, а лишь те из них, которые удовлетворяют необходимым свойствам симметрии. Для системы частиц с нулевым или целым, кратным $\hbar$, спином допустимы лишь симметричные относительно одновременной перестановки координат и спинов частиц волновые функции. В этом случае говорят, что частицы подчиняются статистике Бозе.

Для системы частиц с полуцелым в единицах $\hbar$ спином допустимы лишь антисимметричные относительно перестановки координат и спинов волновые функции. В этом случае говорят, что частицы подчиняются статистике Ферми.

В выражении (П.10) для статистического оператора предполагается суммирование не по всем, а лишь по допустимым квантовым состояниям системы.

Работа выполнена при частичной поддержке Программы Президиума РАН № 28 и гранта РФФИ № 18-01-00064.

Список литературы

Зарипов Р.Г. Самоорганизация и необратимость в неэкстенсивных системах // Казань: Фэн. 2002. 251 с.

Зарипов Р.Г. Принципы неэкстенсивной статистической механики и геометрия мер беспорядка и порядка. Казань: Изд-во Казан. Гос. техн. ун-та. 2010. 404 с.

Зубарев Д.П. Неравновесная статистическая механика. М.: Наука, 1971.416 с.

Зубарев Д.Н., Морозов В.Г., Рёпке Г. Статистическая механика неравновесных процессов. М.:Физматлит. 2002. Т.1. 431 с.

Колесниченко А.В. Модификация в рамках статистики Тсаллиса критериев гравитационной неустойчивости астрофизических дисков с фрактальной структурой фазового пространства // Mathematica Montisnigri. 2015. V. 32. P. 93-118.

Колесниченко А.В. Критерий термической устойчивости и закон распределения частиц для самогравитирующих астро-физических систем в рамках статистики Тсаллиса // Mathematica Montisnigri. 2016. Т. 37. С. 45-75.

Колесниченко А.В. К построению неаддитивной термодинамики сложных систем на основе статистики Курадо–Тсаллиса // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2018a. № 25. 40 с.

Колесниченко А.В. К конструированию термодинамики неаддитивных сред на основе статистики Тсаллиса–Мендеса–Пластино // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2018b. № 23. 28 с.

Колесниченко А.В. К разработке статистической термодинамики и техники фрактального анализа для неэкстенсивных систем на основе энтропии и различающей информации Реньи // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша. 2018c, № 60. 44 с.

Колесниченко. А.В. Двухпараметрический энтропийный функционал Шарма–Миттала как основа семейства обобщенных термодинамик неэкстенсивных систем // Mathematica Montisnigri. 2018d. Vol XLII P.74-101.

Колесниченко А.В. Статистическая механика и термодинамика Тсаллиса неаддитивных систем. Введение в теорию и приложения. М.: ЛЕНАНД. (Синергетика: от прошлого к будущему. № 87). 2019. 360 с.

Кулик С.Д., Берков А.В., Яковлев В.П. Введение в теорию квантовых вычислений (Методы квантовой механики и кибернетики). Кн 2. М.: МИФИ. 2008. 532 с.

Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука. 2006. 757 с.

Нейман И. Математические основы квантовой механики. М.: 1964. 367 с.

Нильсон М., Чанг И. Кавантовые вычисления и квантовая информация. М.: Мир. 2006. 824 с.

Харди Г.Г, Литтльвуд Дж. Е., Полиа Г. Неравенства. М.: Ин.-Лит. 1948. 456 с.

Abe S. Axioms and uniqueness theorem for Tsallis entropy //Physics Letters A, 2000a. V. 271. № 1-2. P. 74-79.

Abe S. Heat and generalized Clausius entropy of nonextensive systems // Eprint arXiv:cond-mat/0012115. 2000b. V.3. P.1-14.

Abe S. A problem with the escort distribution representation of nonextensive statistical mechanics. 2000c. arXiv:cond-mat/0006053.

Abe S. Nonadditive generalization of the quantum Kullback-Leibler divergence for measuring the degree of purification // Physical Review A. 2003. V. 68. № 3. id. 032302.

Abe S. Quantum q-divergence // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2004. V. 344. № 3 P. 359-365.

Abe S. Geometric effect in nonequilibrium quantum thermodynamics //Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2006. V. 372. № 2. P. 387-392.

Abe S., Rajagopal A.K. Nonadditive Conditional Entropy and Its Significance for Local Realism // Physics Letters A. 2000a. V 272. № 5-6. P. 341-345.

Abe S., Rajagopal A.K. Towards Nonadditive Quantum Information Theory // eprint arXiv:quant-ph/0003145. 2000b. (12 pages. Invited talk at International Workshop on Classical and Quantum Complexity and Nonextensive Thermodynamics (3-6 April, 2000, Denton, Texas)).

Abe S. Heat and entropy in nonextensive thermodynamics: transmutation from Tsallis theory to Rényi-entropy-based theory // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2001. V. 300. № 3. P. 417-423.

Abe S., Okamoto Y. Eds., "Nonextensive Statistical Mechanicsand Its Applications". Series Lecture Notes in Physics. Springer: Verlag, Berlin, New York. 2001. ISBN 3-540-41208-5.

Abe S., Rajagopal A.K. Validity of the Second Law in Nonextensive Quantum Thermodynamics // Physical Review Letters.2003. V. 91. № 12. id. 120601.

Beck C., Schlogl F. Thermodynamics of chaotic systems: an introduction. Cambridge: Cambridge University Press. 1993. 286 p.

Büyükkılıç F.,Demirhan D., Güleç A. A statistical mechanical approach to generalized statistics of quantum and classical gases // Phys. Lett. A 1995. V. 197. № 3. P. 209-220.

Boghosian B. M. Navier-Storts Equations for Generalized Thermostatistics// Bras. J. Phys**.** 1999. V. 29**.** № 1. P. 91-107.

Borges E., Roditi I. A family of nonextensive entropies // Phys. Lett. A. 1998. V. 246. P.399-402.

Chavanis P.H., Delfini L. Dynamical stability of systems with long-range interactions: application of the Nyquist method to the HMF model // Eur. Phys. J. B. 2009. V. 69. № 3. P. 389-429.

Curado E. M. F., Tsallis C. Generalized statistical mechanics: connection with thermodynamics// J. Phys. A : Mathematical and General.1991. V. 24. № 2. P. L69-72.

Daroczy Z. Generalized information functions . // Inf. Control. 1970. V. 16. № 1. P. 36–51.

Du J. Test of nonextensive statistical mechanics by solar sound speeds // Europhys. Lett. 2006. V. 75 .№ 6. P. 861-867.

Esquivel A., Lazarian A. Tsallis Statistics as a Tool for Studying Interstellar Turbulence // Astrophys. J. 2010. V. 710. № 1. P. 125-132.

Frank T.D., Daffertshofer A. *H*-theorem for nonlinear Fokker-Planck equations related to generalized thermostatistics // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2001a. V. 295. № 3. P. 455-474.

Frank T.D., Daffertshofer A. Multivariate nonlinear Fokker-Planck equations and generalized thermostatistics // Phys. A.: Statistical Mechanics and its Applications. 2001b. V. 292. № 1. P. 392-410.

Gell-Mann M., Tsallis C. Eds. "Nonextensive Entropy- Interdisciplinary Applications. Oxford University Press. 2004. 440 p

Gleason A. M. Measures on the closed subspaces of a Hilbert space // Mathematics Journal (Indiana University). 1957. V. 6. P. 885–893.

Hanel R., Thurner S., Tsallis C. Limit distributions of scale-invariant probabilistic models of correlated random variables with the q-Gaussian as an explicit example // Eur. J. Phys. B. 2009. V. 72. № 2. P. 263-268.

Havrda J., Charvat F. Quantiication method of classiication processes. Concept of structural α-entropy // Kybernetika. 1967. V. 3. P. 30–35.

Ito N., Tsallis C. Specific heat of the harmonic oscillator within generalized equilibrium statistics // Nuovo Cimento D. 1989. V. 11. № 6. P. 907-911.

Jarzynski C. Equilibrium free-energy differences from nonequilibrium measurements: A master-equation approach // Physical Review E (Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics), 1997. V. 56. № 5. P.5018-5035.

Jarzynski C., Wójcik D. Classical and Quantum Fluctuation Theorems for Heat Exchange //Physical Review Letters. 2004. V. 92 №23, id. 230602.

Jarzynski C. Equalities and inequalities: irreversibility and the second law of thermodynamics at the nanoscale. Annu. Rev. Cond. Matt. Phys. 2011. V. 2: P. 329-335.

Jaynes E.T. Information theory and statistical mechanics // В сб. «Statistical Physics». Brandeis Lectures. 1963. V.3. P. 160.

Kolesnichenko A.V., Chetverushkin B.N. Kinetic derivation of a quasi-hydrodinamic system of equations on the base of nonextensive statistics", RJNAMM (Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling). 2013. V.28. № 6. P. 547-576.

Kolesnichenko A. V. On construction of the entropy transport model based on the formalism of nonextensive statistics // Mathematical Models and Computer Simulations. 2014. V. 6. № 6. P. 587-597.

Kolesnichenko A.V. Power distributions for self-gravitating astrophysical systems based on nonextensive Tsallis kinetics // Solar System Research. 2017. V. 51. № 2. P.127-144.

Kolesnichenko A. V. On construction of the entropy transport model based on the formalism of nonextensive statistics // Mathematical Models and Computer Simulations. 2014. V.6. № 6 P. 587-597.

Kolesnichenko A.V., Marov M.Ya. Modeling of aggregation of fractal dust clusters in a laminar protoplanetary disk // Solar System Research. 2013. V. 47. № 2. P. 80-98.

Kolesnichenko A.V., Marov M.Ya. Modification of the jeans instability criterion for fractal-structure astrophysical objects in the framework of nonextensive statistics // Solar System Research. 2014. V. 48. № 5. P. 354-365.

Lenzi E.K., Mendes R.S. Collisionless Boltzmann equation for systems obeying Tsallis distribution // Eur. J. Phys. B. 2001. V. 21. № 3. P. 401-406.

Mariz A.M. On the irreversible nature of the Tsallis and Renyi entropies // Phys. Lett. A. 1992. V. 165. № 5-6. P. 409-411.

Münster A. Chemische thermodynamic. Akademie-Verlag Berlin, 1969. 261 s.

Pickup R.M., Cywinski R., Pappas C., Farago B., Fouquet P. Generalized Spin-Glass Relaxation // Phys. Rev. Lett. 2009. V.102. № 9. id. 097202.

Plastino A., Plastino A.R. On the universality of thermodynamics' Legendre transform structure // Phys. Lett. A . 1997. V. 226. № 5. P. 257-263.

Plastino A.R., Casas M., Plastino A. A nonextensive maximum entropy approach to a family of nonlinear reaction-diffusion equations // Phys. A.: Statistical Mechanics and its Applications. 2000. V. 280. № 3. P. 289-303.

Ramshaw J.D. H-theorems for the Tsallis and Renyi entropies // Phys. Lett. A. 1993a. V. 175. № 3-4. P. 169-170.

Ramshaw J.D. Irreversibility and generalized entropies // Phys. Lett. A. 1993b. V. 175. № 3-4. P. 171-172.

Renyi A. Probability Theory. Amsterdam: North-Holland Publ. Co., 1970. 573 p.

Renyi A. On measures of entropy and information // In: Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium on Mathematics, Statistics and Probability. University California Press. Berkeley. 1961. V. 1. P. 547–561.

Scarfone A. M., Wada T. Equivalence among different formalisms in the Tsallis entropy framework // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2007. V. 384. № 2. P. 305-317.

Shiino M. *H*-theorem with generalized relative entropies and the Tsallis statis Tics //.J. Phys. Soc. Jpn. 1998. V.67. № 11. P. 3658-3660.

Tirnakli U., Torres D.F. Exact and approximate results of non-extensive quantum statistics // Eur. J. Phys. B. 2000. V. 14. № 4. P. 691-698.

Tsallis C. Possible Generalization of Boltzmann-Gibbs-Statistics //J. Stat. Phys. 1988. V.52. № 1/2. P.479–487. (a regular updated bibliography is accessible at http:/tsallis. cat.cbpf.br/biblio.htm).

Tsallis C. Nonextensive Statistic: Theoretical, Experimental and Computational Evidences and Connections // Brazilian J. Phys. 1999. V. 29. № 1. P.1-35.

Tsallis C. Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics. Approaching a Complex World. New York: Springer. 2009. 382 p.

Tsallis C., Mendes R., Plastino A. The role of constraints within generalized nonextensive statistics // Physica A. 1998. V. 261. P.543-554.

Wada T., Scarfone A.M. A non self-referential expression of Tsallis' probability distribution function // Eur. J. Phys. B. 2005. V. 47. № 4. P. 557-561.

Wehrl A. General properties of entropy // Reviews of Modern Physics. 1978. V. 50. № 2. P. 221-260.

Оглавление