

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛИНЕЙНОГО ОТКЛИКА КВАНТОВОЙ НЕЭКСТЕНСИВНОЙ СИСТЕМЫ НА ДИНАМИЧЕСКОЕ ВНЕШНЕЕ ВОЗМУЩЕНИЕ

© 2019 г. *А.В. Колесниченко*

Институт прикладной математики имени М.В. Келдыша РАН
kolesn@keldysh.ru, web page: <http://keldysh.ru/kolesnichenko/person.htm>

DOI: 10.1134/S0234087919120086

В рамках квантовой статистической механики, основанной на параметрической неаддитивной энтропии Тсаллиса, связанной с матрицей плотности, развита динамическая теория линейного отклика неэкстенсивных квазиравновесных систем многих тел на внешнее зависящее от времени возмущение. В работе для неэкстенсивных квантовых систем предложена модификация теории Кубо, разработанная в рамках квантовой механики. Построение теории линейной реакции проведено на основе обобщённого канонического вида матрицы плотности, полученного при максимизации квантовой энтропии Тсаллиса при осреднении наблюдаемых величин по эскортному распределению. Представлены обобщённые выражения для адмитанса и функции отклика, описывающие линейную реакцию системы на слабое внешнее механическое воздействие. Обсуждается свойство симметрии для релаксационной функции при обращении времени и соотношения взаимности Онзагера для обобщённой восприимчивости. Показано, что эти известные в классической квантовой статистике свойства остаются в силе и для аномальных систем.

Ключевые слова: квантовая неэкстенсивная статистика, обобщённое каноническое распределение матрицы плотности, линейная реакция системы.

MODELING OF LINEAR RESPONSE FOR QUANTUM NONEXTENSIVE SYSTEM ON DYNAMIC EXTERNAL DISTURBANCE

A.V. Kolesnichenko

Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS, Moscow

In the framework of quantum statistical mechanics, based on the parametric nonadditive entropy of Tsallis, related to the density matrix, a dynamic theory of linear response of nonextensive quasi-equilibrium many-body systems to an external time-dependent perturbation is developed. In this paper, for the nonextensive quantum system proposed a modification of the Kubo theory developed in the framework of classical quantum me-

chanics. The construction of the microscopic theory of the linear reaction was carried out on the basis of the generalized canonical type of the density matrix, obtained by maximizing the Tsallis quantum entropy by averaging the observed values over the escort distribution. The generalized expressions for the admittance and the response function are presented, which describe the linear dependence of the system on a weak external mechanical action. The symmetry property for the relaxation function under time reversal and the Onsager reciprocity relation for generalized susceptibility are discussed. It is shown that these properties known in classical quantum statistics also remain valid for anomalous systems.

Key words: quantum nonextensive statistics, generalized canonical distribution of the density matrix, linear reaction of the system.

1. Введение

Как теперь стало понятно, статистическая механика Больцмана–Гиббса не является вполне универсальной теорией, поскольку она имеет 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, 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 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 элементами системы. К их числу относятся также системы, которые помнят своё прошлое, поскольку движения отдельных частиц в таких

системах являются взаимообусловленными (т.е. сильно коррелированными). Сложная пространственно-временная структура подобных систем приводит к нарушению принципа аддитивности для таких важнейших термодинамических величин, как энтропия или внутренняя энергия.

Довольно широкий класс аномальных систем (хотя далеко не всех) адекватно описывается неэкстенсивной (неаддитивной) статистической механикой, основанной на параметрических энтропиях Тсаллиса [1-3] и Реньи [4,5], которые, однако, сохраняют гносеологическую структуру (логическую схему построения) классической статистики [6-16]. Важным преимуществом неэкстенсивных статистик по сравнению с классической статистикой Больцмана–Гиббса является асимптотический степенной закон распределения вероятностей, который не зависит от экспоненциального поведения, обусловленного распределением Гиббса [17-20].

В настоящее время теории неэкстенсивных сложных систем 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) [1-3] успешно применяется ко многим сложным системам, начиная от нелинейных диффузионных уравнений [21], обобщённых кинетических уравнений [22,23], систем Фоккера–Планка [24], H -теоремы Больцмана [14,15], удельной теплоемкости гармонического осциллятора [25], до изучения космических систем с дальним силовым взаимодействием [26,27], межзвездной турбулентности и теории фракталов [28,29], эволюции астрофизических дисков [20,27,28,30-32], городской транспортной системы [33], биофизики, экономики, нейрофизики и многого другого.

Среди множества неэкстенсивных систем особое значение имеют малые квантовые системы, основанные на неаддитивной параметрической энтропии Тсаллиса $S_q(\hat{\rho})$ [34], связанной с матрицей плотности $\hat{\rho}$, описывающей системы, квантовые состояния которых известны не полностью [35]. При изучении подобных систем возникают многочисленные новые математические проблемы, требующие своего решения [36-39]. В их числе одной из важных является проблема моделирования реакции квантовой системы на механическое возмущение, нарушающее равновесие [40]. Причиной этих возмущений может быть или совершаемая над системой работа, через изме-

нение её объема, или взаимодействие с другими ансамблями (обладающими другой температурой или химическим потенциалом), или, наконец, включение внешних полей, непосредственно действующих на частицы системы. Этот последний случай необратимых процессов, вызванных механическими возмущениями, рассмотрен в настоящей работе.

Механические возмущения можно полностью описать добавлением к равновесному гамильтониану $\hat{\mathcal{H}}$ квантовой системы оператора энергии возмущения $\hat{\mathcal{H}}_{ext}(t)$, зависящего от времени. Микроскопическая теория линейной реакции ансамбля квантовых систем обычно разрабатывается двумя способами: либо с использованием запаздывающих функций Грина [40], либо методом Кубо, с помощью функций отклика и релаксации [41,42]. Метод Кубо основан на квантовом уравнении Лиувилля с учётом условия, что система в отдалённом прошлом (т.е. при $t = -\infty$) находилась в равновесном состоянии, а затем было «включено» внешнее механическое возмущение. Кубо показал, что отклик системы на внешнее возмущение можно описать формулами, связывающими отклонение $\delta\langle\hat{A}\rangle$ средних значений $\langle\hat{A}\rangle$ некоторых динамических переменных \hat{A} от равновесных значений $\langle\hat{A}\rangle_{eq}$, с явным видом гамильтониана механического возмущения $\hat{\mathcal{H}}_{ext}(t)$. Исключительная особенность формул Кубо состоит в том, что они выражают неравновесные свойства в виде средних по состоянию статистического равновесия и имеют весьма общий характер [40].

Влияние внешних возмущений на средние значения наблюдаемых величин в *неэкстенсивной квантовой статистике Тсаллиса* также можно описывать либо модифицированными функциями Грина, описывающими линейную реакцию на слабые механические возмущения [43-45], либо на основе модифицированного метода Кубо [46], чему мы и последуем в данной работе. Следует заметить, что в неэкстенсивной статистике Тсаллиса в зависимости от способа определения средних значений динамических величин наличествуют различные варианты представлений равновесных ансамблей [20]. Выполненный в данной работе анализ отклика квантовой системы на механические возмущения основан на осреднении наблюдаемых величин по получившему широкое распространение эскортному вероятностному распределению [9] и на соответствующем степенном представлении канонического равновесного распределения матрицы плотности.

2. Основные определения и статистические свойства квантовой энтропии Тсаллиса

Прежде всего, приступим к конструированию равновесной термодинамики квантово-механических ансамблей, основанной на обобщённой неэкстенсивной статистике Тсаллиса. В основу изучения различных статистиче-

ских квантовых ансамблей неэкстенсивных систем можно положить экстремальные свойства квантовой информационной энтропии (введенной впервые в [34] и использовать их для нахождения различных матриц плотности, заменяющих функцию распределения вероятностей в классической статистике [47]. Отметим, кстати, что при обобщении ансамблей Гиббса на случай классической квантовой статистики фон Нейман [35] исходил именно из экстремальных свойств введенной им энтропии квантового состояния $\mathcal{S}(\hat{\rho}) \equiv -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$, где $\hat{\rho}$ – матрица (оператор¹) плотности микросистемы, при помощи формализма которой описывается любая квантово-механическая система [48].

В квантовой неэкстенсивной статистике при вероятностной нормировке

$$\text{Tr} \hat{\rho}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 1, \tag{1}$$

матрицы плотности $\hat{\rho}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \sum_r w_r \psi_r(\mathbf{x}) \psi_r^*(\mathbf{x}')$ (в матричном \mathbf{x} -представлении), описывающей смешанные квантовые состояния, квантовая информационная энтропия Тсаллиса $\mathcal{S}_q(\hat{\rho})$ задается следующим обобщенным функционалом от оператора плотности [1-3,34,49]:

$$\mathcal{S}_q(\hat{\rho}) \equiv \frac{1}{q-1} \text{Tr}(\hat{\rho} - \hat{\rho}^q). \tag{2}$$

Здесь энтропийный индекс q (параметр деформации) представляет собой вещественное число (принадлежащее области $q \in \mathbb{R}$), 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 плотности $\hat{\rho}$, а не только при его матричном \mathbf{x} -представлении [40].

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

$$\mathcal{S}_q(\hat{\rho}) = -\text{Tr}(\hat{\rho}^q \ln_q \hat{\rho}) = -\text{Tr}(\hat{\rho} \text{Ln}_q \hat{\rho}). \tag{2^*}$$

Здесь

$$\ln_q \hat{A} \equiv \frac{\hat{A}^{1-q} - 1}{1-q}, \quad \text{Ln}_q \hat{A} \equiv \frac{\hat{A}^{q-1} - 1}{q-1} = \hat{A}^{q-1} \ln_q \hat{A} \tag{3}$$

– так называемые деформированные логарифмы [9,14], обладающие, как лег-

¹ Далее операторы будем обозначать буквой со «шляпкой» над ней.

ко убедиться, следующим свойством: при $q \rightarrow 1$, $\ln_q \hat{A} \rightarrow \ln \hat{A}$, $\text{Ln}_q \hat{A} \rightarrow \ln \hat{A}$. При его использовании энтропия Тсаллиса $\mathcal{S}_q(\hat{\rho}) = -\text{Tr}(\hat{\rho}^q \ln_q \hat{\rho})$ переходит в $\mathcal{S}_1(\hat{\rho}) \equiv -\text{Tr}(\hat{\rho} \ln \hat{\rho})$ – квантовую энтропию фон Неймана, являющуюся, в свою очередь, квантовым обобщением энтропии Гиббса в классической статистической механике.

Квантовая энтропия Тсаллиса (2) имеет много полезных свойств. В частности, если состояние совокупной квантовой системы, состоящей из двух независимых подсистем, описывается совместным мультипликативным статистическим оператором $\hat{\rho}^{(1,2)} \equiv \hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}$, где $\hat{\rho}^{(1)}$ и $\hat{\rho}^{(2)}$ – матрицы плотности отдельных подсистем (здесь и далее символом \otimes обозначено матричное произведение), то общая квантовая энтропия системы

$$\mathcal{S}_q^{(1,2)} \equiv \mathcal{S}_q(\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}) = \frac{1}{q-1} \left[1 - \text{Tr}(\hat{\rho}^{(1,2)})^q \right]$$

неаддитивна, т.е.

$$\mathcal{S}_q(\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}) = \mathcal{S}_q(\hat{\rho}^{(1)}) + \mathcal{S}_q(\hat{\rho}^{(2)}) + (1-q)\mathcal{S}_q(\hat{\rho}^{(1)})\mathcal{S}_q(\hat{\rho}^{(2)}). \quad (4)$$

Отсюда следует, что неаддитивная квантовая энтропия $\mathcal{S}_q(\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)})$ является субэкстенсивным (суперэкстенсивным) функционалом при $q > 1$ ($q < 1$) и экстенсивным функционалом только в пределе слабой связи двух подсистем, когда $q \rightarrow 1$. Таким образом, неаддитивность энтропии Тсаллиса является её характерной особенностью как в случае неэкстенсивной статистической механики, так и для неэкстенсивной квантовой механики [9,11,16].

В традиционной квантовой статистике любой случайной динамической переменной \mathcal{A} ставится в соответствие эрмитов оператор $\hat{\mathcal{A}}$ [35] так, что среднее значение этой переменной в состоянии микросистемы, описываемом матрицей плотности $\hat{\rho}$, вычисляется по формуле: $\langle \mathcal{A} \rangle_1 = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{\mathcal{A}})$. В неэкстенсивной квантовой статистике Тсаллиса для вычисления среднего значения $\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle_q$ динамической переменной $\hat{\mathcal{A}}$ и её флуктуации $\Delta_q \hat{\mathcal{A}}$ можно использовать различные формулировки [9, 17-20]. Далее мы воспользуемся следующим их определением:

$$\langle \hat{\mathcal{A}} \rangle_q \equiv \text{Tr}(\hat{\mathcal{A}} \hat{\rho}^q) / \text{Tr} \hat{\rho}^q \equiv \text{Tr}(\hat{\mathcal{A}} \hat{\sigma}_q), \quad \Delta_q \hat{\mathcal{A}} \equiv \hat{\mathcal{A}} - \langle \hat{\mathcal{A}} \rangle_q, \quad (5)$$

где

$$\hat{\sigma}_q \equiv \hat{\rho}^q / \text{Tr} \hat{\rho}^q, \quad \text{Tr} \hat{\sigma}_q = 1 \quad (6)$$

– так называемое нормированное эскортное распределение [9,20].

2.1. Экстремальность канонического распределения. Важно отметить, что различные статистические ансамбли классических и квантовых систем эквивалентны в термодинамическом отношении, что связано, в частности, с малостью флуктуаций энергии, числа частиц и объёма [40]. Далее мы воспользуемся наиболее удобным для наших целей каноническим ансамблем квантовых систем.

Рассмотрим ансамбль замкнутых систем с заданным числом частиц и постоянным объёмом, находящихся в тепловом и материальном контакте с окружением. Тогда матрица равновесной плотности $\hat{\rho}$ (статистический оператор равновесного распределения) может быть определена из абсолютного экстремума квантовой информационной энтропии Тсаллиса (2) при выполнении следующих дополнительных условий [9,14,40]:

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_q \equiv \mathcal{E}_q = \text{Tr}(\hat{\sigma}_q \hat{\mathcal{H}}) = \text{const}, \quad (7)$$

т.е. при заданности осреднённого оператора плотности энергии $\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{x})$ и при сохранении нормировки (1).

Согласно вариационному принципу Джейнса [50], равновесная матрица плотности $\hat{\rho}$, «экстремизирующая» энтропию Тсаллиса \mathcal{S}_q при указанных ограничениях, определяется из условия равенства нулю первой вариации по $\hat{\rho}$ следующего обобщённого лагранжиана:

$$\mathcal{L}(\hat{\rho}) \equiv -\text{Tr}(\hat{\rho} \text{Ln}_q \hat{\rho}) - \beta \frac{\text{Tr}(\hat{\rho}^q \hat{\mathcal{H}})}{c_q} - \lambda \text{Tr} \hat{\rho}. \quad (8)$$

Здесь

$$c_q \equiv \text{Tr}(\hat{\rho}^q) \quad (9)$$

– так называемый коэффициент Тсаллиса; β и λ – определяемые из уравнений (1) и (7) лагранжевы множители, которые связаны с ограничением на осреднённый оператор плотности энергии квантовой системы в неаддитивной статистике Тсаллиса.

Определяя абсолютный экстремум функционала (8) из условия $\delta \mathcal{L}(\hat{\rho}) / \delta \hat{\rho} = 0$, находим для неэкстенсивных квантовых систем следующее выражение для обобщённого канонического распределения оператора плотности $\hat{\rho}(\beta_q)$ [50]:

$$\hat{\rho}(\mathbf{x}, \beta_q) = \tilde{Z}_q^{-1} \left\{ 1 - (1-q)\beta_q \left[\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{x}) - \tilde{\mathcal{E}}_q \right] \right\}^{1/(1-q)} =$$

$$= \tilde{Z}_q^{-1} \exp_q \left\{ -\beta_q \left[\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{x}) - \tilde{\mathcal{E}}_q \right] \right\}, \quad (10)$$

где

$$\tilde{Z}_q(\beta_q) = \text{Tr} \exp_q \left\{ -\beta_q \left[\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{x}) - \tilde{\mathcal{E}}_q \right] \right\} \equiv \text{Tr} \exp_q \left\{ -\beta_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}} \right\} \quad (11)$$

– обобщенная статистическая сумма состояний для канонического квантового ансамбля, определяемая из условия нормировки (1). Важно иметь в виду, что функционал $\beta_q \equiv \beta / \tilde{c}_q$, фигурирующий в распределении (10), не является обратной абсолютной температурой, поскольку зависит от самого распределения (самозависимость) и не сохраняет структуру Лежандра термодинамически аномальных систем. Это нежелательное последствие использования нормированного эскортного распределения (6), которое является необычным с точки зрения устоявшихся классических физических представлений (см., например, [8-10, 18]). Величина $T_{pf} \equiv \beta_q^{-1}$ является по определению обратной физической температурой равновесной квантовой системы [9,36,49];

$$\tilde{c}_q \equiv \text{Tr}(\hat{\rho}^q) = (\tilde{Z}_q)^{-q} \text{Tr} \exp_q \left\{ -\beta_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}} \right\} \quad (12)$$

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

В формуле (11) и далее везде квантово-механическая флуктуация $\Delta_q \hat{\mathcal{A}}$ для любого оператора $\hat{\mathcal{A}}$ определяется относительно его равновесного среднего значения, т.е. задаётся соотношением $\Delta_q \hat{\mathcal{A}} \equiv \hat{\mathcal{A}} - \text{Tr}(\hat{\sigma}_q \hat{\mathcal{A}})$.

2.2. Экспонента Тсаллиса и деформированный логарифм. В формуле (10) используется так называемая деформированная экспонента Тсаллиса [9]

$$\exp_q(\hat{\mathcal{A}}) \equiv \begin{cases} [1 + (1-q)\hat{\mathcal{A}}]^{1/(1-q)}, & \text{если } \text{Spec}[1 + (1-q)\hat{\mathcal{A}}] \geq 0; \\ 0 & \text{в других случаях,} \end{cases} \quad (13)$$

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

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

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

Используя определения (3) и (12), можно убедиться, что имеют место следующие соотношения для деформированной экспоненты [9]:

$$\begin{aligned} \exp_q(\ln_q \hat{A}) &= \ln_q(\exp_q \hat{A}) = \hat{A}, \quad \frac{\partial}{\partial \hat{A}} \exp_q(\hat{A}) = [\exp_q(\hat{A})]^q \quad (\forall q), \\ \exp_q(\hat{A}) \exp_q(\hat{B}) &= \exp_q[\hat{A} + \hat{B} + (1-q)\hat{A}\hat{B}]\hat{B}. \end{aligned} \quad (15)$$

Эти формулы будут использованы далее.

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

$$(\hat{\rho} \tilde{Z}_q)^{1-q} = 1 - (1-q)\beta_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}}. \quad (16)$$

Если умножить (16) на $\hat{\rho}^q$ и затем взять шпур, то получим равенство

$$(\tilde{Z}_q)^{1-q} \text{Tr} \hat{\rho} = \text{Tr} \left\{ \hat{\rho}^q [1 - (1-q)\beta_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}}] \right\} = \text{Tr} \hat{\rho}^q, \quad (17)$$

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

$$\tilde{c}_q \equiv \text{Tr} \hat{\rho}^q = (\tilde{Z}_q)^{1-q} = 1 + (1-q)\tilde{\mathcal{S}}_q. \quad (18)$$

Используя (18) и вытекающее из формулы (10) выражение

$$\tilde{c}_q \equiv \text{Tr} \hat{\rho}^q = (\tilde{Z}_q)^{-q} \text{Tr} \left\{ \exp_q(-\beta_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}}) \right\}^q, \quad (19)$$

получим ещё одно представление обобщённой статистической суммы

$$\tilde{Z}_q(\beta_q) = \text{Tr} \left\{ \exp_q(-\beta_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}}) \right\}^q \equiv \text{Tr} Q_q(\hat{\mathcal{H}}, \beta_q). \quad (20)$$

Заметим, что согласно (10) имеем:

$$\exp_q(-\beta_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}}) \equiv \left\{ \exp_q(-\beta_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}}) \right\}^q \times \left\{ 1 - (1-q)\beta_q [\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{x}) - \tilde{\mathcal{E}}_q] \right\}.$$

Отсюда, при учёте двух различных выражений для $\tilde{Z}_q(\beta_q)$, равных

$$\tilde{Z}_q(\beta_q) = \text{Tr} \left\{ \exp_q(-\beta_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}}) \right\} = \text{Tr} \left\{ \exp_q(-\beta_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}}) \right\}^q,$$

получим

$$\text{Tr} \left\{ [\exp_q(-\beta_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}})]^q \beta_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}} \right\} = 0, \quad (21)$$

$$\hat{\sigma}_q = \frac{[\exp_q(-\beta_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}})]^q}{\tilde{Z}_q} \equiv \frac{Q_q(\hat{\mathcal{H}}, \beta_q)}{\text{Tr} Q_q(\hat{\mathcal{H}}, \beta_q)}. \quad (22)$$

Наконец, при использовании равновесного канонического распределения (22) и формулы (20) можно получить следующую форму записи для среднего значения $\langle \hat{A} \rangle_q \equiv \tilde{A}_q$ любой наблюдаемой \hat{A} равновесного ансамбля квантовых систем:

$$\begin{aligned} \tilde{A}_q &\equiv \text{Tr}(\hat{A} \hat{\sigma}_q) = \tilde{Z}_q^{-1} \text{Tr} \left\{ \hat{A} [\exp_q(-\beta_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}})]^q \right\} = \\ &= \text{Tr} \left\{ \hat{A} Q_q(\hat{\mathcal{H}}, \beta_q) \right\} / \text{Tr} Q_q(\hat{\mathcal{H}}, \beta_q). \end{aligned} \quad (23)$$

Следует иметь в виду, что формулы (22) и (23) справедливы и для квазиравновесного случая, когда $\hat{A} \rightarrow \hat{A}(t)$ и $\hat{\mathcal{H}} \rightarrow \hat{\mathcal{H}}(t)$. Дифференцируя в этом случае тождество (23) по времени, найдём

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A} \rangle_q = \text{Tr} \left(\frac{\partial \hat{\sigma}_q}{\partial t} \hat{A}(t) + \hat{\sigma}_q \frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} \right). \quad (24)$$

Подставляя сюда $\partial \hat{\sigma}_q / \partial t$ из обобщённого уравнения Лиувилля, получим

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A}(t) \rangle_q = \text{Tr} \left\{ \left(\frac{\partial \hat{A}(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [\hat{A}(t), \hat{\mathcal{H}}] \right) \hat{\sigma}_q \right\} = \text{Tr} \left(\frac{d\hat{A}(t)}{dt} \hat{\sigma}_q \right) = \left\langle \frac{d\hat{A}(t)}{dt} \right\rangle_q, \quad (25)$$

где $d\hat{A}(t)/dt = \partial \hat{A}(t)/\partial t + [\hat{A}(t), \hat{\mathcal{H}}]/i\hbar$ – производная динамической переменной \hat{A} по времени. Если переменная \hat{A} не зависит явно от времени, то

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{A}(t) \rangle_q = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \left\{ [\hat{A}(t), \hat{\mathcal{H}}] \hat{\sigma}_q \right\} = -\frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \left\{ [\hat{\sigma}_q, \hat{\mathcal{H}}] \hat{A}(t) \right\}. \quad (26)$$

3. Реакция квантовой неэкстенсивной системы на механическое возмущение

Как хорошо известно, в равновесной статистической термодинамике классических и квантовых систем кинетические коэффициенты в линейных уравнениях релаксации непосредственно связаны с флуктуационными процессами, происходящими в квазиравновесной системе [41]. Проанализируем эту связь более подробно для случая квазиравновесных квантовомехани-

ческих неэкстенсивных систем Тсаллиса и выясним линейную реакцию на механическое возмущение релаксационных уравнений для наблюдаемых величин.

3.1. Модифицированное уравнение Лиувилля. Рассмотрим реакцию квантового статистического ансамбля неэкстенсивных систем с равновесным гамильтонианом $\hat{\mathcal{H}}$, не зависящим от времени, на включение внешнего оператора энергии возмущения $\hat{\mathcal{H}}_{ext}(t)$, зависящего от времени. Предположим, что внешняя возмущающая сила имеет механическую природу и может быть представлена малым добавочным членом в гамильтониане системы, т.е.

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}} + \hat{\mathcal{H}}_{ext}(t), \quad \hat{\mathcal{H}}_{ext}(t) = -\hat{\mathcal{A}}\mathcal{F}(t), \quad (27)$$

где $\hat{\mathcal{A}}$ – квантовомеханический оператор, независящий явно от времени, сопряженный полю $\mathcal{F}(t)$; $\mathcal{F}(t) \equiv \mathcal{F}_t$ – возмущающая сила (функция времени, не имеющая операторной структуры); $\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) \equiv \hat{\mathcal{H}}_t$ – возмущённый гамильтониан (самосопряженный оператор), действующий в гильбертовом пространстве на матрицу плотности $\hat{\rho}$ для смешанных ансамблей. Предположим также, что при $t \rightarrow -\infty$ внешнее возмущение отсутствует, т.е. $\hat{\mathcal{H}}_{ext}|_{t=-\infty} = 0$.

Следует заметить, что в общем случае на систему могут действовать разные возмущающие силы $\mathcal{F}_j(t)$ механического типа. В этом случае добавка к равновесному гамильтониану $\hat{\mathcal{H}}$ имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}_{ext}(t) = -\sum_{j=1}^n \hat{\mathcal{A}}_j \mathcal{F}_j(t) = -\hat{\mathcal{A}} \cdot \mathcal{F}(t),$$

где $\hat{\mathcal{A}}_j$ – динамические переменные, на которые с силой $\mathcal{F}_j(t)$ действует внешнее поле; $\hat{\mathcal{A}} = (\hat{\mathcal{A}}_1, \dots, \hat{\mathcal{A}}_n)$, $\mathcal{F}(t) = (\mathcal{F}_1(t), \dots, \mathcal{F}_n(t))$.

Матрица плотности $\hat{\rho}$, являющаяся унитарным оператором, в координатном \mathbf{x} -представлении задаётся формулой

$$\hat{\rho}(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; t) = \sum_r w_r \psi_r(\mathbf{x}, t) \psi_r^*(\mathbf{x}', t), \quad (28)$$

где $\{\psi_r(t)\}$ – возможные квантовые состояния системы и w_r – их классические вероятности. Статистический оператор $\hat{\rho}(t)$ удовлетворяет фундаментальному уравнению квантовой механики (уравнению движения Лиувилля – фон Неймана) в операторной форме

$$\frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{\mathcal{H}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}}(t), \hat{\rho}(t) \right] \quad (29)$$

и начальному условию $\hat{\rho}|_{t=-\infty} = \hat{\rho}_{\text{eq}} \equiv \hat{\hat{\rho}}$, которое означает, что при $t = -\infty$ система находится в состоянии статистического равновесия и описывается равновесным каноническим ансамблем². Здесь $\frac{1}{i\hbar} [\hat{a}, \hat{c}] \equiv \frac{1}{i\hbar} (\hat{a}\hat{c} - \hat{c}\hat{a})$ – квантовая скобка Пуассона для операторов \hat{a} и \hat{c} ; \hbar – постоянная Планка. Уравнение (29) является естественным обобщением классического уравнения Лиувилля на квантовые системы [40].

Поскольку матрица плотности является унитарной, то уравнение, которому подчиняется любая степень оператора $\hat{\rho}(t)$, имеет ту же форму, что и исходное уравнение Лиувилля (29):

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}^q(t)}{\partial t} = \left[\hat{\mathcal{H}} + \hat{\mathcal{H}}_{\text{ext}}(t), \hat{\rho}^q(t) \right] = \left[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\rho}^q(t) \right] - \left[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\rho}^q(t) \right] \cdot \mathcal{F}(t). \quad (30)$$

С учётом того, что след произведения некоммутирующих операторов \hat{a} и \hat{c} не изменяется при их циклической перестановке $\text{Tr}(\hat{a}\hat{c}) = \text{Tr}(\hat{c}\hat{a})$ [35], получим при взятии шпура от обеих частей уравнения (4) следующий важный результат: коэффициент Тсаллиса $c_q \equiv \text{Tr} \hat{\rho}^q$ не зависит явно от времени t . Следовательно, уравнение для эскортного распределения $\hat{\hat{\sigma}}_q$ имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\hat{\sigma}}_q(t)}{\partial t} = \left[\hat{\mathcal{H}} - \hat{\mathcal{A}} \cdot \mathcal{F}(t), \hat{\hat{\sigma}}_q(t) \right]. \quad (31)$$

Начальное условие для этого уравнения, с учётом формулы (22) для канонического распределения, принимает следующий вид:

$$\hat{\hat{\sigma}}_q(t = -\infty) = \hat{\hat{\sigma}}_q(\beta_q) = \frac{\left\{ \exp_q(-\tilde{\beta}_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}}) \right\}^q}{\text{Tr} \left\{ \exp_q(-\tilde{\beta}_q \Delta_q \hat{\mathcal{H}}) \right\}}. \quad (32)$$

Учитывая, что внешнее силовое воздействие на систему мало, представим эскортное распределение $\hat{\hat{\sigma}}_q(t)$ также в виде суммы невозмущенной равновесной $\hat{\hat{\sigma}}_q$ части и малой добавки $\delta \hat{\hat{\sigma}}_q(t)$, описывающей возмущение:

² Распределение $\hat{\rho}_{\text{eq}}$ может быть не только каноническим распределением, но любым равновесным распределением (в частности, большим каноническим распределением – наиболее удобным при вычислении средних для бозе- и ферми- систем). Канонический ансамбль больше подходит к некоторым другим системам, например, спиновым.

$$\hat{\sigma}_q(t) = \hat{\sigma}_q + \delta\hat{\sigma}_q(t), \quad (33)$$

где равновесное эскортное распределение $\hat{\sigma}_q$ удовлетворяет условию

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\sigma}_q] = 0. \quad (34)$$

Подставляя (27) и (33) в (31), получим уравнение

$$i\hbar \frac{\partial \delta\hat{\sigma}_q(t)}{\partial t} = [\hat{\mathcal{H}}, \delta\hat{\sigma}_q(t)] - [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\sigma}_q] \cdot \mathbf{F}(t), \quad (35)$$

определяющее флуктуацию $\delta\hat{\sigma}_q(t)$ распределения $\hat{\sigma}_q(t)$ в первом порядке по возмущению.

3.2. Основные формулы метода Кубо в теории линейной реакции.

Введём для удобства линейный оператор коммутирования³ $\hat{\mathcal{H}}^\times$, определяемый соотношением $\hat{\mathcal{H}}^\times \hat{\mathbf{A}} \equiv [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathbf{A}}]$. Оператор $\hat{\mathcal{H}}^\times$ действует на другие операторы. Используя этот оператор, перепишем уравнение (35) в виде

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \delta\hat{\sigma}_q(t) = \hat{\mathcal{H}}^\times \delta\hat{\sigma}_q(t) - [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\sigma}_q(t)] \cdot \mathcal{F}(t). \quad (36)$$

Используя теперь начальное условие (32), запишем уравнение (36) в интегральной форме; в линейном приближении по возмущению получим

$$\begin{aligned} \delta\hat{\sigma}_q(t) &= -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \exp\left(\frac{\hat{\mathcal{H}}(t-t')}{i\hbar}\right) [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\sigma}_q(t')] \cdot \mathcal{F}(t') \exp\left(\frac{-\hat{\mathcal{H}}(t-t')}{i\hbar}\right) \simeq \\ &\simeq -\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \exp\left(\frac{\hat{\mathcal{H}}(t-t')}{i\hbar}\right) [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\sigma}_q] \cdot \mathcal{F}(t') \exp\left(\frac{-\hat{\mathcal{H}}(t-t')}{i\hbar}\right). \end{aligned} \quad (37)$$

Здесь использовано предположение, что $\mathcal{F}(-\infty) = 0$ и $\delta\hat{\sigma}_q(-\infty) = 0$, т.е. предполагалось, что в момент времени $t = -\infty$ система находилась в равновесии.

С использованием формулы (37) можно найти среднее значение q -флуктуации $\Delta_q \hat{\mathcal{B}} \equiv \hat{\mathcal{B}} - \text{Tr}(\hat{\sigma}_q \hat{\mathcal{B}})$ любой динамической переменной $\hat{\mathcal{B}}(t)$, которое определяется соотношением

$$\langle \Delta_q \hat{\mathcal{B}}(t) \rangle_q = \text{Tr}(\hat{\sigma}_q(t) \hat{\mathcal{B}}) - \text{Tr}(\hat{\sigma}_q \hat{\mathcal{B}}) = \text{Tr}(\delta\hat{\sigma}_q(t) \hat{\mathcal{B}}), \quad (38)$$

³ Оператор коммутирования \hat{a}^\times подчиняется следующим правилам [41]:

$$\exp(\hat{a}^\times) \hat{b} = \sum_{n!} \frac{1}{n!} (\hat{a}^\times)^n \hat{b} = \sum_{n!} \frac{1}{n!} [\hat{a} \cdot [\hat{a} \cdot [\hat{a} \cdot \hat{b} \cdot \dots]]] = \exp(\hat{a}) \hat{b} \exp(-\hat{a}); \quad \hat{a}^\times \hat{b}^\times - \hat{b}^\times \hat{a}^\times = [\hat{a}, \hat{b}]^\times.$$

где $\hat{\hat{\sigma}}_q$ – равновесное экскортное распределение, задаваемое формулой (32). В результате получим

$$\langle \Delta_q \hat{\mathcal{B}}(t) \rangle_q = -\frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \int_{-\infty}^t dt' \hat{\mathcal{B}}(t-t') \left[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\hat{\sigma}}_q \right] \cdot \mathcal{F}(t'). \quad (39)$$

Здесь

$$\hat{\mathcal{B}}(t) = \exp(it\hat{\mathcal{H}}/\hbar) \hat{\mathcal{B}} \exp(-it\hat{\mathcal{H}}/\hbar) \quad (40)$$

– оператор динамической переменной $\hat{\mathcal{B}}(t)$ в представлении Гейзенберга, удовлетворяющий уравнению $i\hbar \dot{\hat{\mathcal{B}}}(t) = [\hat{\mathcal{B}}(t), \hat{\mathcal{H}}]$ с граничным условием $\hat{\mathcal{B}}(0) \equiv \hat{\mathcal{B}}$. Соотношение (39) можно записать в другом виде. Вводя так называемую равновесную функцию отклика (response function)

$$\tilde{\Phi}_{\text{вА}}^{(q)}(t) = -\frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\hat{\sigma}}_q \right] \hat{\mathcal{B}}(t) = \frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \hat{\hat{\sigma}}_q \left[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}(t) \right] \quad (41)$$

(описывающую реакцию системы на воздействие внешней силы, которая приводит к изменению равновесного среднего значения динамической переменной $\hat{\mathcal{B}}$), получим

$$\langle \Delta_q \hat{\mathcal{B}}(t) \rangle_q = \int_{-\infty}^t dt' \tilde{\Phi}_{\text{вА}}^{(q)}(t-t') \cdot \mathcal{F}(t'). \quad (42)$$

Формулы (41) и (42) являются основным результатом теории линейной реакции Кубо и называются формулами Кубо.

Воспользуемся теперь необходимой для дальнейшего модификацией известного в квантовой механике тождества Кубо [40,41]

$$\left[\hat{a}, \exp \hat{b} \right] \equiv \exp \hat{b} \int_0^1 \exp(x\hat{b}) \left[\hat{a}, \hat{b} \right] \exp(-x\hat{b}) dx,$$

справедливого для любых операторов \hat{a} и \hat{b} . Модификация этого тождества на случай неэкстенсивных квантовых систем с каноническим распределением матрицы плотности $\hat{\hat{\sigma}}_q = \hat{\hat{Q}}_q(\hat{\mathcal{H}}; \beta) / \tilde{Z}_q$ имеет вид [46]

$$\left[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\hat{Q}}_q(\hat{\mathcal{H}}; \beta_q) \right] \equiv q \hat{\hat{Q}}_q(\hat{\mathcal{H}}; \beta_q) \int_0^{\beta_q} d\lambda \left[\hat{\hat{Q}}_q(\hat{\mathcal{H}}; \lambda) \right]^{-1} \left[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{A}}(\lambda) \right] \hat{\hat{Q}}_q(\hat{\mathcal{H}}; \lambda), \quad (43)$$

где

$$\hat{\mathcal{A}}(\lambda) = \frac{1}{1 - \lambda(1-q)\Delta_q \hat{\mathcal{H}}} \hat{\mathcal{A}} \frac{1}{1 - \lambda(1-q)\Delta_q \hat{\mathcal{H}}}. \quad (44)$$

Подставляя (43) в формулу (42), получаем (при учёте уравнения движения $i\hbar d\hat{\mathcal{B}}(t)/dt = [\hat{\mathcal{B}}(t), \hat{\mathcal{H}}]$ с граничным условием $\hat{\mathcal{B}}(0) = \hat{\mathcal{B}}$) следующую формулу для равновесной функции отклика (функции последствия):

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{\text{ВА}}^{(q)}(t) &= -\frac{1}{i\hbar} \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\sigma}_q \right] \hat{\mathcal{B}}(t) = \\ &= -q \text{Tr} \hat{\sigma}_q \int_0^{\beta_q} d\lambda \left[\hat{\sigma}_q(\hat{\mathcal{H}}, \lambda) \right]^{-1} \tilde{\mathcal{A}}(\lambda) \hat{\sigma}_q(\hat{\mathcal{H}}, \lambda) \frac{d}{dt} \hat{\mathcal{B}}(t). \end{aligned} \quad (45)$$

Заметим, что уравнение (42) можно интерпретировать двояким образом. С одной стороны, величина $-\left[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\sigma}_q\right]$ является изменением эскортного распределения под воздействием внешней силы. Первое из уравнений (42) описывает влияние изменения этого распределения на среднее значение оператора $\hat{\mathcal{B}}(t)$ по истечении некоторого времени. С другой стороны, можно представить себе, что внешняя сила влияет на изменение самой динамической переменной $\hat{\mathcal{B}}$. Это влияние описывается членом $\left[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}(t)\right]$ во втором уравнении (42).

В заключение этого пункта сделаем следующее общее замечание. При рассмотренном подходе возникает следующий капитальный вопрос: можно ли считать, что вычисленное среднее значение динамической переменной \hat{B} действительно представляет собой величину, наблюдаемую в эксперименте? Подобный скептицизм связан с двумя проблемами. Первая из них относится к использованию усреднения по статистическому ансамблю, при котором значение любой наблюдаемой отождествляется со статистическим средним по ансамблю одинаковых квантовых систем. Право на такое отождествление связано с макроскопичностью динамического параметра \hat{B} и рассматриваемой квантовой системы [40]. Вторая проблема связана с тем, что в процессе измерения возникают возмущения в рассматриваемой квантовой системе. Согласно (39), величина $\langle \Delta_q \hat{\mathcal{B}}(t) \rangle_q$ вычисляется как среднее по ансамблю, каждый член которого не испытывает возмущений в процессе измерения. В действительности же каждая отдельная система непрерывно подвергается возмущающему воздействию внешних сил, и это обстоятельство не принималось во внимание при вычислении (39). Таким образом, в данной работе предполагается, что для рассматриваемых величин и для применяемых способов наблюдения подобное квантовомеханическое возмущение будет несущественным.

4. Общее выражение для адмитанса и соотношения симметрии Онзагера

Запишем теперь формулу (42) для случая периодической возмущающей силы

$$\mathcal{F}(t) = \mathcal{F}_0 \exp(i\omega t), \text{ или } \mathcal{F}(t) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \mathcal{F}_0 \exp(i\omega t + i\varepsilon t). \quad (46)$$

Здесь второе выражение подчёркивает, что возмущение включается адиабатически в бесконечно отдаленное в прошлое время. Для этого возмущения реакцию системы можно записать в виде

$$\begin{aligned} \langle \Delta_q \hat{\mathcal{B}}(t) \rangle_q &= \int_{-\infty}^t dt' \tilde{\phi}_{\mathcal{BA}}^{(q)}(t-t') \cdot \mathcal{F}(t') = \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^t dt' \tilde{\phi}_{\mathcal{BA}}^{(q)}(t-t') \cdot \mathcal{F}_0 [\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t)] = \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^t dx \tilde{\phi}_{\mathcal{BA}}^{(q)}(x) \mathcal{F}_0 [\exp(-i\omega x + i\omega t) + \exp(i\omega x - i\omega t)] = \\ &= \text{Re} \left\{ \chi_{\mathcal{BA}}^{(q)}(\omega) \cdot \mathcal{F}_0 \exp(i\omega t) \right\}, \end{aligned} \quad (47)$$

где величина

$$\chi_{\mathcal{BA}}^{(q)}(\omega) \equiv \int_0^{\infty} dt \tilde{\phi}_{\mathcal{BA}}^{(q)}(t) \exp(-i\omega t), \quad (48)$$

или более точно

$$\chi_{\mathcal{BA}}^{(q)}(\omega) = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_0^{\infty} dt \tilde{\phi}_{\mathcal{BA}}^{(q)} \exp(-i\omega t - \varepsilon t), \quad (49)$$

является так называемой комплексной восприимчивостью, или адмитансом, которая, как видно, является просто фурье-образом функции отклика $\tilde{\phi}_{\mathcal{BA}}^{(q)}$; символ Re означает действительную часть соответствующего выражения; $\mathcal{A} = \{\mathcal{A}_i\}$. Соотношение (47) получается при подстановке (46) в (42).

Заметим, что если оператор $\hat{\mathcal{B}} \equiv \hat{\mathbf{J}}$ соответствует макроскопическому потоку, то величины $\chi_{J_i A_i}^{(q)}(\omega) \equiv L_{li}(\omega)$ обычно называют обобщёнными кинетическими коэффициентами, так как они определяют средний поток $\langle \Delta_q \mathbf{J}^{(0)} \rangle_q$ под воздействием периодического возмущения.

Наконец, при интегрировании по частям, уравнение (49) можно записать в следующем виде:

$$\begin{aligned}\tilde{\chi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \frac{1}{i\omega + \varepsilon} \left\{ \tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(0) + \int_0^{\infty} \tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(x) \exp(-i\omega x - \varepsilon x) dx \right\} = \\ &= \tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(0) - i\omega \int_0^{\infty} \tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(t) \exp(-i\omega t) dt,\end{aligned}\quad (50)$$

где релаксационная функция $\tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(t)$, определяемая выражением

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(t) &\equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \int_t^{\infty} \tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(x) \exp(-\varepsilon x) dx = \\ &= \sum_{k,j} \left(\frac{\tilde{\sigma}_q(k) - \tilde{\sigma}_q(j)}{\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_j} \right) \langle k | \hat{\mathcal{A}} | j \rangle \langle j | \hat{\mathcal{B}} | k \rangle \exp\{-i(\mathcal{E}_k - \mathcal{E}_j)t / \hbar\},\end{aligned}\quad (51)$$

описывает релаксацию системы на внешнее механическое воздействие. Здесь $\tilde{\sigma}_q(j) = \tilde{Z}_q^{-1} [1 - \tilde{\beta}_q(1-q)(\mathcal{E}_j - \tilde{\mathcal{E}}_q)]^{q/(1-q)}$; \mathcal{E}_j – полный набор собственных функций оператора Гамильтона, $\hat{\mathcal{H}}|j\rangle = \mathcal{E}_j|j\rangle$.

Из выражения (51) вытекают четыре важных свойства симметрии для релаксационной функции $\tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(t)$ и адмитанса:

(I) Функция $\tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(t)$ является действительной величиной, что доказывается путём комплексного сопряжения обеих сторон выражения (51), перестановки индексов суммирования i, j и использования свойств эрмитовости матричных элементов⁴.

(II) Имеет место симметрия обращения времени, $\tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(t) = \tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(-t)$; это свойство доказывается путём перестановки операторов $\hat{\mathcal{A}} = \{\mathcal{A}_i\}$ и $\hat{\mathcal{B}}$, перестановки индексов суммирования i, j , замены t на $-t$ и сравнения полученного результата с выражением (51).

(III) При обращении времени, сопровождающемся изменением направления магнитного поля \mathbf{H} на обратное, волновая функция заменяется сопряжённой ей величиной; следовательно

$$\tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(t, \mathbf{H}) = \varepsilon_{\mathcal{A}} \varepsilon_{\mathcal{B}} \tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(-t, -\mathbf{H}) = \varepsilon_{\mathcal{A}} \varepsilon_{\mathcal{B}} \tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(t, -\mathbf{H}),\quad (52)$$

⁴ Напомним, что оператор $\hat{\mathcal{A}}^+$ называется сопряженным оператору $\hat{\mathcal{A}}$, если для каждой пары функций ψ_1 и ψ_2 имеет место соотношение $\langle \psi_1, \hat{\mathcal{A}}\psi_2 \rangle = \langle \hat{\mathcal{A}}^+\psi_1, \psi_2 \rangle$. Эрмитовый (или самосопряженный) оператор $\hat{\mathcal{A}}$ совпадает со своим сопряженным: $\hat{\mathcal{A}} = \hat{\mathcal{A}}^+$. Собственные значения эрмитовых операторов являются действительными числами.

где параметры ε_j равны $+1$ или -1 в зависимости от того, являются ли чётными или нечётными функциями скоростей молекул динамические переменные \mathcal{A} и \mathcal{B} . В большинстве случаев $\varepsilon_{\mathcal{A}}$ и $\varepsilon_{\mathcal{B}}$ имеют один и тот же знак.

(IV) В силу соотношения (50) теми же свойствами симметрии обладает и комплексная восприимчивость $\chi_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega)$; их удобно записать для функции $\tilde{\sigma}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega)$, определенной следующим образом:

$$\tilde{\sigma}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega) \equiv \int_t^{\infty} dt \tilde{\Phi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(t) \exp(-i\omega t). \quad (53)$$

Она также имеет свойства симметрии Онзагера [51]:

$$\begin{aligned} (a) \quad & \operatorname{Re} \tilde{\sigma}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega) = \operatorname{Re} \tilde{\sigma}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(-\omega); \\ (b) \quad & \operatorname{Im} \tilde{\sigma}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega) = -\operatorname{Im} \tilde{\sigma}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(-\omega) \\ (c) \quad & \tilde{\sigma}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega, -\mathbf{H}) = \varepsilon_{\mathcal{A}}\varepsilon_{\mathcal{B}} \tilde{\sigma}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega, \mathbf{H}). \end{aligned} \quad (54)$$

Следовательно, согласно свойству (II) имеем

$$\begin{aligned} (d) \quad & \operatorname{Re} \tilde{\sigma}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega, \mathbf{H}) = \operatorname{Re} \tilde{\sigma}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(-\omega, \mathbf{H}) = \varepsilon_{\mathcal{A}}\varepsilon_{\mathcal{B}} \operatorname{Re} \tilde{\sigma}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega, -\mathbf{H}); \\ (e) \quad & \operatorname{Im} \tilde{\sigma}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega, \mathbf{H}) = -\operatorname{Im} \tilde{\sigma}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(-\omega, \mathbf{H}) = \varepsilon_{\mathcal{A}}\varepsilon_{\mathcal{B}} \operatorname{Im} \tilde{\sigma}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega, -\mathbf{H}). \end{aligned} \quad (55)$$

(V) Наконец, в рассматриваемом здесь случае неэкстенсивных систем справедливы (известные в классической квантовой теории) соотношения Крамерса-Кронига для действительной и мнимой частей адмитанса $\tilde{\chi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega)$, имеющие, в силу уравнения (51), следующий вид:

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega) &= \operatorname{Re} \tilde{\chi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega) + i \operatorname{Im} \tilde{\chi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega), \\ \operatorname{Re} \tilde{\chi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega) &= P. \sum_{k,j} \left(\frac{\tilde{\sigma}_q(k) - \tilde{\sigma}_q(j)}{\hbar\omega + \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_j} \right) \langle k | \hat{\mathcal{A}} | j \rangle \langle j | \hat{\mathcal{B}} | k \rangle \\ \operatorname{Im} \tilde{\chi}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}^{(q)}(\omega) &= \pi \sum_{k,j} \left[\tilde{\sigma}_q(k) - \tilde{\sigma}_q(j) \right] \langle k | \hat{\mathcal{A}} | j \rangle \langle j | \hat{\mathcal{B}} | k \rangle \delta(\hbar\omega + \mathcal{E}_k - \mathcal{E}_j). \end{aligned} \quad (56)$$

Здесь символ $P.$ означает, что учитывается только главное значение комплексной величины.

Таким образом, приведенные соотношения теории линейной реакции, полученные в рамках статистической квантовой механики, справедливы и

для механики неэкстенсивных систем, основанных на параметрической квантовой энтропии Тсаллиса.

Заключение

В работе был использован подход Тсаллиса для получения в рамках квантовой неэкстенсивной статистической механики обобщённых соотношений для адмитанса и функции отклика, описывающих линейную реакцию системы на слабое внешнее механическое воздействие. Для характеристики квантово-механической системы был использован формализм матрицы плотности $\hat{\rho}$, описывающий системы, квантовые состояния которых известны не полностью. Выполненное исследование в рамках квантовой неэкстенсивной статистики основывалось на каноническом (степенном) распределении модифицированной матрицы плотности $\hat{\sigma}_q \equiv \hat{\rho}^q / \text{Tr} \hat{\rho}^q$, полученном из условия абсолютного экстремума квантовой параметрической энтропии Тсаллиса при заданной средней энергии частиц, а также на осреднении наблюдаемых величин по эскортному распределению. Было показано, что известные в классической квантовой статистике свойство симметрии для релаксационной функции при обращении времени, причинность и соотношения взаимности Онзагера для обобщённой восприимчивости остаются справедливыми и для неэкстенсивных систем, т.е. они не связаны с фактической формой исходной матрицы плотности.

Полученные результаты могут быть полезным инструментарием при изучении динамических характеристик неэкстенсивных квантовых систем, проявляющих аномальные с точки зрения классической статистики свойства.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *J. Havrda, F. Charvat.* Quantification method of classification processes. Concept of structural α -entropy // *Kybernetika*, 1967, v.3, p.30-35.
2. *Z. Daroczy.* Generalized information functions // *Inf. Control.*, 1970, v.16, № 1, p.36-51.
3. *C. Tsallis.* Possible generalization of Boltzmann-Gibbs statistics // *J. Stat. Phys.*, 1988, v.52, №1-2, p.479-487.
4. *A. Renyi.* 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.
5. *A. Renyi.* *Probability Theory.* – Amsterdam: North-Holland Publ. Co., 1970, 573p.
6. *E.M.F. Curado, C. Tsallis.* Generalized statistical mechanics: connection with thermodynamics // *J. Phys. A: Mathematical and General*, 1991, v.24, № 2, L69-72.
7. *C. Beck, F. Schlögl.* *Thermodynamics of chaotic systems: an introduction.* Cambridge: Cambridge University Press, 1993, 286p.
8. *C. Tsallis, R. Mendes, A. Plastino.* The role of constraints within generalized nonexten-

- sive statistics // *Physica A*, 1998, v.261, p.543-554.
9. C. Tsallis. Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics. Approaching a Complex World, New York: Springer, 2009, 382p.
 10. A. Plastino, A.R. Plastino. On the universality of thermodynamics' Legendre transform structure // *Phys. Lett. A.*, 1997, v.226, № 5, p.257-263.
 11. U. Tirnakli, D.F. Torres. Exact and approximate results of non-extensive quantum statistics // *Eur. J. Phys. B*, 2000, v.14 № 4, p.691-698.
 12. E.K. Lenzi, R.S. Mendes. Collisionless Boltzmann equation for systems obeying Tsallis distribution // *Eur. J. Phys. B*. 2001, v.21, № 3, p.401-406.
 13. S. Abe. 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.
 14. P.Г. Зарипов. Самоорганизация и необратимость в неэкстенсивных системах. – Казань: ФЭН, 2002, 251 с.
R.G. Zaripov. Samoorganizatsiy i neobratimosty v neekstensivnykh sistemakh. – Kazan: Fen, 2002, 251 s.
 15. P.Г. Зарипов. Принципы неэкстенсивной статистической механики и геометрия мер беспорядка и порядка. – Казань: Изд-во Казан. Гос. техн. ун-та, 2010, 404 с.
R.G. Zaripov. Printsipy neekstensivnoy statisticheskoy mekhaniki i geometrii mer besporjadka i poryadka. – Kazan: Izd. Kazanskogo Gostekhuniversiteta, 2010, 404 s.
 16. M. Gell-Mann, C. Tsallis. Eds. Nonextensive Entropy-Interdisciplinary Applications // Oxford University Press, 2004, 440 p.
 17. А.В. Колесниченко. К построению неаддитивной термодинамики сложных систем на основе статистики Курадо–Тсаллиса // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2018, №25, 40с.
A.V. Kolesnichenko. K postroeniyu neadditivnoy termodinamiki slozhnykh sistem na osnove statistiki Kurado–Tsallisa // Preprinty IPM im. M.V. Keldysha, 2018, № 25, 40 s.
 18. А.В. Колесниченко. К конструированию термодинамики неаддитивных сред на основе статистики Тсаллиса–Мендеса–Пластино // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2018, № 23, 28 с.
A.V. Kolesnichenko. K konstruirovaniyu termodinamiki neadditivnykh sred na osnove statistiki Tsallisa–Mendesа–Plastino // Preprinty IPM im. M.V. Keldysha, 2018, №23, 28 s.
 19. А.В. Колесниченко Двухпараметрический энтропийный функционал Шарма–Миттала как основа семейства обобщённых термодинамик неэкстенсивных систем // *Mathematica Montisnigri*, 2018, т.42, с.74-101.
A.V. Kolesnichenko. Dvukhparametricheskii entropiynny funktsional Sharma–Mittala kak osnova semeystva obobshchennykh termodinamik neekstensivnykh system // *Mathematica Montisnigri*, 2018, t.42, s.74-101.
 20. А.В. Колесниченко. Статистическая механика и термодинамика Тсаллиса неаддитивных систем. Введение в теорию и приложения. – М.: ЛЕНАНД, 2019, 360 с.
A.V. Kolesnichenko. Statisticheskay mekhanika i termodinamika Tsallisa neadditivnykh system. Vvedenie v teoriyu i prilozheniya. – M.: LENAND. (Sinergetika: ot proshlogo k budushchemu № 87) 2019, 360 s.
 21. A.R. Plastino, M. Casas, A. Plastino. A nonextensive maximum entropy approach to a fa-

- mily of nonlinear reaction-diffusion equations // Phys. A.: Statistical Mechanics and its Applications, 2000, v.280, № 3, p.289-303.
22. *B.M. Boghosian*. Navier-Stocks Equations for Generalized Thermostatistics // Bras. J. Phys., 1999, v.29, № 1, p.91-107.
 23. *A.V. Kolesnichenko, B.N. Chetverushkin*. Kinetic derivation of a quasihydrodynamic system of equations on the base of nonextensive statistics // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling, 2013, v.28, p.547-576.
 24. *T.D. Frank, A. Daffertshofer*. Multivariate nonlinear Fokker-Planck equations and generalized thermostatistics // Phys. A.: Statistical Mechanics and its Applications, 2001, v.292, № 1, p.392-410.
 25. *N. Ito, C. Tsallis*. Specific heat of the harmonic oscillator within generalized equilibrium statistics // Nuovo Cimento D., 1989, v.11, № 6, p.907-911.
 26. *P.H. Chavanis, L. Delfini*. 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.
 27. *A.B. Колесниченко*. Критерий термической устойчивости и закон распределения частиц для самогравитирующих астрофизических систем в рамках статистики Тсаллиса // Mathematica Montisnigri, 2016, т.37, с.45-75.
A.V. Kolesnichenko. Kriteriy termicheskoy ustoychivosti i zakon raspredeleniy chastits dlia samogravitiruiushchikh astro-fizicheskikh system v ramkakh statistiki Tsallisa // Mathematica Montisnigri, 2016, t.37, s.45-75.
 28. *A.B. Колесниченко*. К разработке статистической термодинамики и техники фрактального анализа для неэкстенсивных систем на основе энтропии и различающей информации Реньи // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша, 2018, № 60, 44 с.
A.V. Kolesnichenko. K razrabotke statisticheskoy termodinamiki i tekhniki fraktalnogo analiza dlya neekstensivnykh system na osnove entropii i razlichayushchey informatsii Ren'i // Preprinty IPM im. M.V. Keldysha, 2018, № 60, 44 s.
 29. *A. Esquivel, A. Lazarian*. Tsallis Statistics as a Tool for Studying Interstellar Turbulence // Astrophys. J., 2010, v.710, № 1, p.125-132.
 30. *A.V. Kolesnichenko, M.Ya. Marov*. 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.
 31. *A.V. Kolesnichenko*. Power Distributions for Self-Gravitating Astrophysical Systems Based on Nonextensive Tsallis Kinetics // Solar System Research, 2017, v.51, № 2, p.127-144.
 32. *A.B. Колесниченко*. Модификация в рамках статистики Тсаллиса критериев гравитационной неустойчивости астрофизических дисков с фрактальной структурой фазового пространства // Mathematica Montisnigri, 2015, v.32, p.93-118 .
A.V. Kolesnichenko. Modifikatsiya v ramkakh statistiki Tsallisa kriteriev gravitatsionnoy neustoychivosti astroficheskikh diskov s fraktalnoy strukturoy fazovogo prostranstva // Mathematica Montisnigri, 2015, v.32, p.93-118.
 33. *A.V. Kolesnichenko*. On construction of the entropy transport model based on the formalism of nonextensive statistics // Math. Mod. & Comp. Simul. 2014, v.6, № 6, p.587-597.
 34. *A. Wehrl*. General properties of entropy // Reviews of Modern Physics, 1978, v.50, № 2, p.221-260.
 35. *J. von Neumann*. Mathematical Foundations of Quantum Mechanics, Princeton (NJ): Princeton University Press, 1955, 325.

36. *S. Abe, A.K. Rajagopal.* Validity of the Second Law in Nonextensive Quantum Thermodynamics // *Physical Review Letters*, 2003, v.91, id. 120601.
37. *S. Abe.* Nonadditive generalization of the quantum Kullback–Leibler divergence for measuring the degree of purification // *Physical Review A*, 2003, v.68, № 3, id. 032302
38. *S. Abe.* Quantum q -divergence // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2004, v.344, № 3, p.359-365.
39. *S. Abe.* Geometric effect in nonequilibrium quantum thermodynamics // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2006, v. 372, № 2, p. 387-392.
40. *D. Zubarev, V. Morozov, and G. Röpke.* *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes*, 1996, v.1, Basic Concepts, Kinetic Theory, Akademie-Verlag, Berlin, 1996, 375.
41. *R. Kubo.* *Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems* // *J. Phys. Soc. Jap.*, 1957, v.12, № 6, p.570–586.
42. *R. Kubo, M. Yokota, S. Nakajima.* *Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. II. Response to Thermal Disturbance* // *J. Phys. Soc. Jap.*, 1957, v.12, № 11, p.1203–1211.
43. *E.K. Lenzi, R.S. Mendes.* Collisionless Boltzmann equation for systems obeying Tsallis distribution // *Eur. J. Phys. B*, 2001, v.21, № 3, p.401-406.
44. *E.K. Lenzi, R.S. Mendes, A.K. Rajagopal.* Green functions based on Tsallis nonextensive statistical mechanics: normalized q -expectation value formulation // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2000, v.286, № 3, p.503-517.
45. *E.K. Lenzi, R.S. Mendes, A.K. Rajagopal.* Quantum statistical mechanics for nonextensive systems // *Physical Review E (Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics)*, 1999, v.59, № 2, p.1398-1407.
46. *S. Abe, Y. Okamoto* (Eds). *Nonextensive Statistical Mechanics and Its Applications (Chapter II)*. Series Lecture Notes in Physics. Springer: Verlag, Berlin, New York, 2001.
47. *S. Abe.* Axioms and uniqueness theorem for Tsallis entropy // *Physics Letters A*, 2000, v.271, № 1-2, p.74-79.
48. *A.M. Gleason.* Measures on the closed subspaces of a Hilbert space // *Mathematics Journal (Indiana University)*, 1957, v.6, p.885-893.
49. *A.V. Колесниченко.* К построению термодинамики квантовых неэкстенсивных систем в рамках статистики Тсаллиса // *Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша*, 2019, № 16.
A.V. Kolesnivhenko. К построению термодинамики квантовых неэкстенсивных систем в рамках статистики Тсаллиса // *Preprinty IPM im. M.V. Keldysha*, 2019, № 16.
50. *E.T. Jaynes.* *Information theory and statistical mechanics* // In com.: «Statistical Physics». Brandeis Lectures, 1963, v.3, p.160.
51. *A.V. Колесниченко.* К выводу симметричности матрицы кинетических коэффициентов Онзагера в рамках неэкстенсивной статистической механики Тсаллиса // *Препринты ИПМ им.М.В. Келдыша*, 2019, № 15.
A.V. Kolesnivhenko. К выводу симметричности матрицы кинетических коэффициентов Онзагера в рамках неэкстенсивной статистической механики Тсаллиса // *Preprinty IPM im. M.V. Keldysha*, 2019, № 15.

Поступила в редакцию 02.04.2019

После доработки 02.04.2019

Принята к публикации 20.05.2019