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 теории линейного отклика квантовой неэкстенсивной системы на динамическое внешнее возмущение

Москва — 2019

Колесниченко Александр Владимирович

К теории линейного отклика квантовой неэкстенсивной системы на динамическое внешнее возмущение.

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 классической квантовой механики. Построение микроскопической 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 (с независящим явно от времени гамильтонианом) 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.

Aleksandr Vladimirovich Kolesnichenko

To the theory of linear response for quantum nonextensive system on dynamic external disturbance.

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 mechanics. 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 (with a time independent Hamiltonian) 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.

ВВЕДЕНИЕ

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 такая теория имеет широкий спектр важных приложений, связанных с физикой статистических систем, вероятностные свойства которых описываются не гиббсовыми, а степенными распределениями. В частности, неэкстенсивная статистическая механика Тсаллиса (см. *Havrda, Charvat, 1967; Daroczy, 1970; Tsallis, 1988; Abe, 2000a*) успешно применяется ко многим сложным системам, начиная от нелинейных диффузионных уравнений, обобщенных кинетических уравнений (*Lenzi и др., 2001*), *H*-теоремы Больцмана (*Frank, Daffertshofer, 2001*), систем Фоккера−Планка (*Frank, Daffertshofer, 2001b*), квантовой статистики, до изучения космических систем с дальним силовым взаимодействием (*Kolesnichenko, 2017*), эволюции астрофизических дисков, межзвездной турбулентности и теории фракталов (*Kolesnichenko, Marov, 2013,2014*), биофизики, экономики, нейрофизики и многое другое (см. *Beck, Schlogl, 1993; Abe, Okamoto, 2001; Gell-Mann, Tsallis, 2004; Tsallis,1999, 2009; Колесниченко 2015, 2016, 2018а,в 2019; Kolesnichenko, Marov, 2013; Kolesnichenko, Chetverushkin, 2013; Kolesnichenko, 2014, 2017*).

Среди множества неэкстенсивных систем особое значение имеют малые квантовые системы, основанные на неаддитивной параметрической энтропии Тсаллиса $S_q(\hat{\rho})$ (*Wehrl, 1978*), связанной с матрицей плотности $\hat{\rho}$, описывающий системы, квантовые состояния которых известны не полностью (*Нейман, 1964; Нильсон, Чанг, 2006*). При изучении подобных систем возникают многочисленные новые математические проблемы, требующие своего решения (см. *Abe, Rajagopal, 2000, 2003; Abe, 2003, 2004, 2006*). В их числе, одной из важных, является проблема моделирования реакции квантовой системы на механическое возмущение, нарушающее равновесие (*Зубарев,1971; Зубарев и др., 2002*). Причиной этих возмущений может быть или совершаемая над системой работа, через изменение 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 соответствующего оператора энергии возмущения $\hat{\mathcal{H}}_{ext}(t)$, зависящего от времени[*)]. Микроскопическая теория линейной реакции ансамбля классических квантовых систем обычно разрабатывается двумя способами: либо с использованием запаздывающих функций Грина (см., например, *Зубарев, 1971; Зубарев и др., 2002*), либо методом Кубо, с помощью функций отклика и релаксации (*Kubo, 1957; Kubo и др., 1957*). 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 $\delta\langle A\rangle$ средних значений $\langle A\rangle$ некоторых динамических переменных A от равновесных значений $\langle A\rangle_{eq}$, 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 (см. *Зубарев, 1971*).

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 (см., например, *Abe, 1999; Lenzi и др., 1999, 2000*), либо на основе модифицированного метода Кубо (*Abe, Okamoto, 2001; Guo, Du, 2014*), 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. Выполненный в данной работе анализ отклика квантовой системы на механические возмущения основан на осреднении наблюдаемых величин по эскортному вероятностному распределению (*Abe, 2000b*) и на соответствующем степенном представлении канонического равновесного распределения матрицы плотности.

1. ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ И СТАТИСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАНТОВОЙ ЭНТРОПИИ ТСАЛЛИСА

Приступим прежде всего к конструированию равновесной термодинамики квантово-механических ансамблей, основанной на обобщённой неэкстенсивной

[*)] По терминологии Кубо возмущения, которые не допускают такого представления, называют термическими.

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 (*Abe, 2000a*). Отметим, кстати, что при обобщении ансамблей Гиббса на случай квантовой статистики фон Нейман исходил именно из экстремальных свойств введенной им энтропии квантового состояния $S(\hat{\rho}) \equiv -\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\ln\hat{\rho}\right)$ (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.

В квантовой неэкстенсивной статистике при вероятностной нормировке

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

матрицы плотности $\hat{\rho}(x,x') = \sum_r w_r \psi_r(x)\psi_r^*(x')$ (в матричном x-представ-лении (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*):

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

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 x-представлении (см., например, *Зубарев и др., 2002*).

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

[†)] Далее операторы будем обозначать буквой со «шляпкой» над ней.

$$S_q(\hat{\rho}) = -\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^q ln_q \hat{\rho}\right) = -\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho} Ln_q \hat{\rho}\right). \qquad (2^*)$$

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 $S_q(\hat{\rho}) = -\mathrm{Tr}\,(\hat{\rho}^q \ln_q \hat{\rho})$ переходит в $S_1(\hat{\rho}) \equiv -\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}\right)$ – квантовую энтропию фон Неймана, являющуюся, в свою очередь, квантовым обобщением энтропии Гиббса в классической статистической механике.

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 энтропия системы

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

неаддитивна, т.е.

$$S_q\left(\hat{\rho}^{(1)} \otimes \hat{\rho}^{(2)}\right) = S_q\left(\hat{\rho}^{(1)}\right) + S_q\left(\hat{\rho}^{(2)}\right) + (1-q) S_q\left(\hat{\rho}^{(1)}\right) S_q\left(\hat{\rho}^{(2)}\right). \qquad (4)$$

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 $q \to 1$.

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: $\langle A \rangle_1 = \mathrm{Tr}\,(\hat{\rho}\hat{A})$. 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:

$$\langle \hat{A} \rangle_q \equiv \frac{\mathrm{Tr}\,(\hat{A}\hat{\rho}^q)}{\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}^q} \equiv \mathrm{Tr}\,(\hat{A}\hat{\sigma}_q), \quad \Delta_q \hat{A} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_q, \tag{5}$$

где

$$\hat{\sigma}_q \equiv \hat{\rho}^q / \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}^q, \quad \mathrm{Tr}\,\hat{\sigma}_q = 1 \tag{6}$$

– так называемое нормированное эскортное распределение (*Abe, 2000b*), для которого.

Важно отметить, 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 каноническим ансамблем квантовых систем, описывающим контакт с термостатом и резервуаром частиц и определяемым заданием средней энергии и среднего числа частиц.

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

$$\langle \hat{\mathcal{H}} \rangle_q \equiv U_q = \mathrm{Tr}\left(\hat{\sigma}_q \hat{\mathcal{H}}\right) = const, \tag{7}$$

т.е. при заданности осреднённого оператора плотности энергии $\hat{\mathcal{H}}(\boldsymbol{x})$ 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

$$\mathcal{L}(\hat{\rho}) \equiv -\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\,\mathrm{Ln}_q\,\hat{\rho}\right) - \beta\frac{\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^q\hat{\mathcal{H}}\right)}{c_q} - \lambda\,\mathrm{Tr}\,\hat{\rho}\,. \tag{8}$$

Здесь

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

– 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 *обобщенного большого канонического распределения оператора плотности* $\hat{\hat{\rho}}(\beta_q)$:

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

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

где

$$\tilde{Z}_q(\beta_q) = \mathrm{Tr}\,\exp_q\left\{-\beta_q\left[\hat{\mathcal{H}}(\boldsymbol{x})-\tilde{U}_q\right]\right\} \equiv \mathrm{Tr}\,\exp_q\left\{-\beta_q\Delta_q\hat{\mathcal{H}}\right\} \tag{11}$$

– обобщенная статистическая сумма состояний для канонического квантового ансамбля, определяемая из условия нормировки (1); параметр $\beta_q \equiv \beta/\tilde{c}_q$ является обратной физической температурой равновесной квантовой системы, $T_{pf} \equiv \beta_q^{-1}$;

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

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

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

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

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

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:

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

Используя определения (3) и (12), можно убедиться, что имеют место следующие соотношения для деформированной экспоненты (см., например, Tirnakli, Torres, 2000; Tsallis, 2009):

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

$$\frac{\partial}{\partial \hat{A}} \exp_q(\hat{A}) = \left[\exp_q(\hat{A})\right]^q \quad (\forall q). \tag{15}$$

Эти формулы будут использованы далее.

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

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

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

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

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

$$\tilde{c}_q \equiv \mathrm{Tr}\,\hat{\tilde{\rho}}^q = (\tilde{Z}_q)^{1-q} = 1 + (1-q)\tilde{S}_q\,. \tag{18}$$

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

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

получим ещё одно представление обобщённой статистической суммы

$$\tilde{Z}_q(\beta_q) = \mathrm{Tr}\left\{\exp_q\left(-\beta_q\Delta_q\hat{\mathcal{H}}\right)\right\}^q. \tag{20}$$

Заметим, что согласно (10) имеем

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

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

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

получим

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

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

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

$$\tilde{A}_q \equiv \mathrm{Tr}\left(\hat{A}\,\hat{\tilde{\sigma}}_q\right) = \frac{\mathrm{Tr}\left\{\hat{A}Q_q(\hat{\mathcal{H}},\beta_q)\right\}}{\tilde{Z}_q} = \frac{\mathrm{Tr}\left\{\hat{A}\left[\exp_q\left(-\beta_q\Delta_q\hat{\mathcal{H}}\right)\right]^q\right\}}{\mathrm{Tr}\left[\exp_q\left(-\beta_q\Delta_q\hat{\mathcal{H}}\right)\right]^q}. \quad (23)$$

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

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

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

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

где $\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = \frac{\partial\hat{A}(t)}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{A}(t),\hat{\mathcal{H}}\right]$ – производная динамической переменной $\hat{A}$ по времени. Если динамическая переменная $\hat{A}$ независит явно от времени, то

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

2. 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 (см. *Kubo, 1957*). Проанализируем эту связь более подробно для случая квазиравновесных квантовомеханических неэкстесивных систем Тсаллиса и выясним линейную реакцию на механическое возмущение релаксационных уравнений для наблюдаемых величин.

Модифицированное уравнение Лиувилля для оператора $\hat{\sigma}_q(t)$. 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.

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

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

Следует заметить, что в общем случае на систему могут действовать разные возмущающие силы $F_j(t)$ механического типа. В этом случае добавка к равновесному гамильтониану $\hat{\mathcal{H}}$ имеет вид $\hat{\mathcal{H}}_{ext}(t) = -\sum\limits_{j=1}^{n} \hat{A}_j F_j(t) = -\hat{\boldsymbol{A}} \cdot \boldsymbol{F}(t)$, где $\hat{A}_j$− динамические переменные, на которые с силой $F_j(t)$ действует внешнее поле; $\hat{\boldsymbol{A}} = (\hat{A}_1, \ldots, \hat{A}_n)$, $\boldsymbol{F}(t) = (F_1(t), \ldots, F_n(t))$.

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

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

где $\{|\psi_r(t)\rangle\}$− 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

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

и начальному условию $\hat{\rho}\big|_{t=-\infty} = \hat{\rho}_{eq} \equiv \hat{\bar{\rho}}$, которое означает, что при $t = -\infty$ система находится в состоянии статистического равновесия и описывается равновесным каноническим ансамблем[‡)]. Здесь

$$\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{a},\hat{c}\right] \equiv \frac{1}{i\hbar}(\hat{a}\hat{c} - \hat{c}\hat{a})$$

− квантовая скобка Пуассона для операторов $\hat{a}$ и $\hat{c}$; $\hbar$ − постоянная Планка. Уравнение (29) является естественным обобщением классического уравнения Лиувилля на квантовые системы (см., Зубарев и др., 2002).

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

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

С учётом того, что след произведения некоммутирующих операторов $\hat{a}$ и $\hat{c}$ не изменяется при их циклической перестановке $\mathrm{Tr}(\hat{a}\hat{c}) = \mathrm{Tr}(\hat{c}\hat{a})$ (см. *фон-Нейман, 1964*), получим при взятии шпура от обеих частей уравнения (4) следующий важный результат: коэффициент Тсаллиса $c_q \equiv \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}^{q}$ не зависит явно от времени t. Следовательно, уравнение для эскортного распределения $\hat{\sigma}_q \equiv \hat{\rho}^{q} / \mathrm{Tr}\,\hat{\rho}^{q}$ имеет вид:

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

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

[‡)] Распределение $\hat{\rho}_{eq}$ 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.

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

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

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

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

$$\left[\hat{\mathcal{H}},\hat{\tilde{\sigma}}_q\right]=0. \tag{34}$$

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

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

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

Основные формулы метода Кубо в теории линейной реакции. Введём для удобства линейный оператор коммутирования[§)] $\hat{\mathcal{H}}^{\times}$, определяемый соотношением $\hat{\mathcal{H}}^{\times}\,\hat{A}\equiv\left[\hat{\mathcal{H}},\hat{A}\right]$. Оператор $\hat{\mathcal{H}}^{\times}$ действует на другие операторы. Используя этот оператор, перепишем уравнение (35) в виде

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

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

[§)] Оператор коммутирования $\hat{a}^{\times}$ подчиняется следующим правилам (см. *Cubo, 1957*):

$$\exp(\hat{a}^{\times})\hat{b}=\sum\frac{1}{n!}\left(\hat{a}^{\times}\right)^n\hat{b}=\sum\frac{1}{n!}[\hat{a}[\hat{a}\ldots[\hat{a},\hat{b}]\ldots]=\exp(\hat{a})\hat{b}\exp(-\hat{a});$$

$$\hat{a}^{\times}\hat{b}^{\times}-\hat{b}^{\times}\hat{a}^{\times}=\left[\hat{a},\hat{b}\right]^{\times}.$$

$$\delta\hat{\sigma}_q(t) = -\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \exp\left(\frac{\hat{\mathcal{H}}(t-t')}{i\hbar}\right)\left[\hat{\boldsymbol{A}}, \hat{\sigma}_q(t')\right]\cdot \boldsymbol{F}(t')\exp\left(\frac{-\hat{\mathcal{H}}(t-t')}{i\hbar}\right) \simeq$$

$$\cong -\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{t} dt' \exp\left(\frac{\hat{\mathcal{H}}(t-t')}{i\hbar}\right)\left[\hat{\boldsymbol{A}}, \hat{\tilde{\sigma}}_q\right]\cdot \boldsymbol{F}(t')\exp\left(\frac{-\hat{\mathcal{H}}(t-t')}{i\hbar}\right). \quad (37)$$

Здесь использовано предположение, что $F(-\infty)=0$ 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 $\Delta_q\hat{B} \equiv \hat{B} - \mathrm{Tr}(\hat{\tilde{\sigma}}_q\hat{B})$ любой динамической переменной $\hat{B}(t)$, которое определяется соотношением

$$\langle \Delta_q\hat{B}(t)\rangle_q = \mathrm{Tr}\left(\hat{\sigma}_q(t)\hat{B}\right) - \mathrm{Tr}\,(\hat{\tilde{\sigma}}_q\hat{B}) = \mathrm{Tr}\left(\delta\hat{\sigma}_q(t)\hat{B}\right), \quad (38)$$

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

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

Здесь

$$\hat{B}(t) = \exp\left(i\,t\frac{\hat{\mathcal{H}}}{\hbar}\right)\hat{B}\,\exp\left(-i\,t\frac{\hat{\mathcal{H}}}{\hbar}\right) \quad (40)$$

– оператор динамической переменной $\hat{B}(t)$ в представлении Гейзенберга, удовлетворяющий уравнению $i\hbar\dot{\hat{B}}(t) = \left[\hat{B}(t), \hat{\mathcal{H}}\right]$ с граничным условием $\hat{B}(0) \equiv \hat{B}$.

Соотношение (39) можно записать в другом виде. Вводя так называемую *равновесную функцию отклика* (*response function*)

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

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

$$\langle \Delta_q \hat{B}(t) \rangle_q = \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \tilde{\phi}_{B\boldsymbol{A}}^{(q)}(t-t') \boldsymbol{F}(t') . \qquad (42)$$

Формулы (13) и (16) являются основным результатом теории линейной реакции Кубо и называются формулами Кубо.

Воспользуемся теперь необходимой для дальнейшего модификацией известного в квантовой механике тождества Кубо (см. Kubo,1957; Зубарев и др., 2002)

$$\left[\hat{a}, \exp\hat{b}\right] \equiv \exp\hat{b} \int\limits_0^1 \exp(x\hat{b}) \left[\hat{a}, \hat{b}\right] \exp(-x\hat{b}) d\,x ,$$

справедливого для любых операторов $\hat{a}$ и $\hat{b}$. Модификация этого тождества на случай неэкстенсивных квантовых систем с каноническим распределением матрицы плотности

$$\hat{\tilde{\sigma}}_q = \left[\exp_q(-\tilde{\beta}\Delta_q\hat{\mathcal{H}})\right]^q / \tilde{Z}_q \equiv \hat{\tilde{Q}}_q(\hat{\mathcal{H}};\tilde{\beta}) / \tilde{Z}_q)$$

имеет вид (см., например, Abe, Okamoto, 2001):

$$\left[\hat{A}, \hat{\tilde{Q}}_q(\hat{\mathcal{H}};\beta_q)\right] \equiv q \hat{\tilde{Q}}_q(\hat{\mathcal{H}};\beta_q) \int\limits_0^{\beta_q} d\lambda \left[\hat{\tilde{Q}}_q(\hat{\mathcal{H}};\lambda)\right]^{-1} \left[\hat{\mathcal{H}}, \tilde{A}(\lambda)\right] \hat{\tilde{Q}}_q(\hat{\mathcal{H}};\lambda), \qquad (43)$$

где

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

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

$$\tilde{\phi}_{B\boldsymbol{A}}^{(q)}(t) = -\frac{1}{i\hbar} \mathrm{Tr}\left[\hat{\boldsymbol{A}}, \hat{\tilde{\sigma}}_q\right] \hat{B}(t) =$$

$$= -q \,\mathrm{Tr}\; \hat{\tilde{\sigma}}_q \int\limits_0^{\beta_q} d\lambda \left[\hat{\tilde{\sigma}}_q(\hat{\mathcal{H}},\lambda)\right]^{-1} \tilde{A}(\lambda)\, \hat{\tilde{\sigma}}_q(\hat{\mathcal{H}},\lambda) \frac{d}{dt} \hat{B}(t) . \qquad (45)$$

Заметим, что уравнение (42) можно интерпретировать двояким образом. С одной стороны, величина $-\left[\hat{\boldsymbol{A}}, \hat{\tilde{\sigma}}_q\right]$ является изменением эскортного распределения под воздействием внешней силы. Первое из уравнений (42) как раз и описывает влияние изменения этого распределения на среднее значение оператора $\hat{B}(t)$ по истечении некоторого времени. С другой стороны, можно представить себе, что внешняя сила влияет на изменение самой динамической переменной $\hat{B}$. Это влияние описывается членом $\left[\hat{\boldsymbol{A}}, \hat{B}(t)\right]$ 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 (*Зубарев, 1971*). Вторая проблема связана с тем, что в процессе измерения возникают возмущения в рассматриваемой квантовой системе. Согласно (39), величина $\langle \Delta_q \hat{B}(t) \rangle_q$ 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.

3. ОБЩЕЕ ВЫРАЖЕНИЕ ДЛЯ АДМИТАНСА И СООТНОШЕНИЯ СИММЕТРИИ ОНЗАГЕРА

Запишем теперь формулу (42) для случая периодической возмущающей силы

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

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

$$\langle \Delta_q \hat{B}(t) \rangle_q = \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \tilde{\phi}_{B\boldsymbol{A}}^{(q)}(t-t') \boldsymbol{F}(t') =$$

$$= \frac{1}{2} \int\limits_{-\infty}^{t} dt' \tilde{\phi}_{B\boldsymbol{A}}^{(q)}(t-t') \boldsymbol{F}_0 \left[\exp(i\omega t) + \exp(-i\omega t) \right] =$$

$$= \frac{1}{2} \int\limits_{-\infty}^{t} dx\, \tilde{\phi}_{B\boldsymbol{A}}^{(q)}(x) \boldsymbol{F}_0 \left[\exp(-i\omega x + i\omega t) + \exp(i\omega x - i\omega t) \right] =$$

$$= \mathrm{Re} \left\{ \chi_{B\boldsymbol{A}}^{(q)}(\omega) \boldsymbol{F}_0 \exp(i\omega t) \right\}, \tag{47}$$

где величина

$$\tilde{\chi}_{B\boldsymbol{A}}^{(q)}(\omega) \equiv \int\limits_{0}^{\infty} dt\, \tilde{\phi}_{B\boldsymbol{A}}^{(q)}(t) \exp(-i\omega t), \tag{48}$$

или более точно

$$\chi_{B\boldsymbol{A}}^{(q)}(\omega) = \lim_{\varepsilon \to +0} \int\limits_{0}^{\infty} dt\, \tilde{\phi}_{B\boldsymbol{A}}^{(q)} \exp(-i\omega t - \varepsilon t), \tag{49}$$

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

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

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

$$\tilde{\chi}_{B\boldsymbol{A}}^{(q)}(\omega) = \lim_{\varepsilon \to +0} \frac{1}{i\omega + \varepsilon} \left\{ \tilde{\phi}_{B\boldsymbol{A}}^{(q)}(0) + \int\limits_{0}^{\infty} \tilde{\phi}_{B\boldsymbol{A}}^{(q)}(x) \exp(-i\omega x - \varepsilon x) dx \right\} =$$

$$=\tilde{\Phi}_{\boldsymbol{BA}}(0)-i\omega\int_0^\infty \tilde{\Phi}_{\boldsymbol{BA}}(t)\,e^{-i\omega t}dt\,, \tag{50}$$

где *релаксационная функция* $\tilde{\Phi}_{\boldsymbol{BA}}(t)$, определяемая выражением

$$\tilde{\Phi}^{(q)}_{\boldsymbol{BA}}(t)\equiv\lim_{\varepsilon\to+0}\int_t^\infty \tilde{\phi}^{(q)}_{\boldsymbol{BA}}(x)\exp(-\varepsilon x)dx=$$

$$=\sum_{k,j}\left(\frac{\tilde{\sigma}_q(k)-\tilde{\sigma}_q(j)}{E_k-E_j}\right)\left\langle k\left|\hat{\boldsymbol{A}}\right|j\right\rangle\left\langle j\left|\hat{B}\right|k\right\rangle\exp\left\{-i(E_k-E_j)t/\hbar\right\}, \tag{51}$$

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

Из выражения (51) вытекают четыре важных свойства симметрии для релаксационной функции $\tilde{\Phi}^{(q)}_{\boldsymbol{BA}}(t)$ и адмитанса[**)]:

(I) Функция $\tilde{\Phi}^{(q)}_{\boldsymbol{BA}}(t)$ является действительной величиной, что доказывается путём комплексного сопряжения обоих сторон выражения (51), перестановки индексов суммирования i,j и использования свойств эрмитовости матричных элементов[††)].

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

[**)]. Свойство симметрии для адмитанса в случае классической статистической механики впервые были рассмотрены Казимиром (*Casimir, 1945*).

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

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

$$\tilde{\Phi}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(t,\boldsymbol{H}) = \varepsilon_A\varepsilon_B\,\tilde{\Phi}_{\boldsymbol{AB}}^{(q)}(-t,-\boldsymbol{H}) = \varepsilon_A\varepsilon_B\,\tilde{\Phi}_{\boldsymbol{AB}}^{(q)}(t,-\boldsymbol{H}), \tag{52}$$

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

(IV) В силу соотношения (50) теми же свойствами симметрии обладает и *комплексная восприимчивость* $\chi_{BA}^{(q)}(\omega)$; их удобно записать для функции $\sigma_{BA}(\omega)$, определенной следующим образом:

$$\tilde{\sigma}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(\omega) \equiv \int_t^{\infty} d\,t\;\tilde{\Phi}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(t)\exp(-i\,\omega t). \tag{52}$$

Она также имеет свойства симметрии Онзагера:

(a) $$\operatorname{Re}\tilde{\sigma}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(\omega) = \operatorname{Re}\tilde{\sigma}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(-\omega);$$

(b) $$\operatorname{Im}\tilde{\sigma}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(\omega) = -\operatorname{Im}\operatorname{Re}\tilde{\sigma}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(-\omega)$$

(c) $$\tilde{\sigma}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(\omega,-\boldsymbol{H}) = \varepsilon_A\varepsilon_B\,\tilde{\sigma}_{\boldsymbol{AB}}^{(q)}(\omega,\boldsymbol{H}). \tag{53}$$

Следовательно, согласно свойству (II) имеем

(d) $$\operatorname{Re}\tilde{\sigma}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(\omega,\boldsymbol{H}) = \operatorname{Re}\tilde{\sigma}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(-\omega,\boldsymbol{H}) = \varepsilon_A\varepsilon_B\operatorname{Re}\tilde{\sigma}_{\boldsymbol{AB}}^{(q)}(\omega,-\boldsymbol{H});$$

(e) $$\operatorname{Im}\tilde{\sigma}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(\omega,\boldsymbol{H}) = -\operatorname{Im}\tilde{\sigma}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(-\omega,\boldsymbol{H}) = \varepsilon_A\varepsilon_B\operatorname{Im}\tilde{\sigma}_{\boldsymbol{AB}}^{(q)}(\omega,-\boldsymbol{H}). \tag{54}$$

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

$$\tilde{\chi}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(\omega) = \operatorname{Re}\tilde{\chi}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(\omega) + \operatorname{Im}\tilde{\chi}_{\boldsymbol{BA}}^{(q)}(\omega),$$

$$\operatorname{Re}\tilde{\chi}^{(q)}_{B\boldsymbol{A}}(\omega) = P.\sum_{k,j}\left(\frac{\tilde{\sigma}_q(k)-\tilde{\sigma}_q(j)}{\hbar\omega + E_k - E_j}\right)\langle k|\hat{\boldsymbol{A}}|j\rangle\langle j|\hat{B}|k\rangle$$

$$\operatorname{Im}\tilde{\chi}^{(q)}_{B\boldsymbol{A}}(\omega) = \pi\sum_{k,j}\left[\tilde{\sigma}_q(k)-\tilde{\sigma}_q(j)\right]\langle k|\hat{\boldsymbol{A}}|j\rangle\langle j|\hat{B}|k\rangle\delta(\hbar\omega + E_k - E_j). \qquad (55)$$

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

Таким образом, приведенные соотношения теории линейной реакции, полученные в рамках классической 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 $\hat{\sigma}_q \equiv \hat{\rho}^q / \operatorname{Tr}\hat{\rho}^q$, 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 анализе динамических характеристик неэкстенсивных квантовых систем, проявляющих аномальные с точки зрения классической статистики свойства.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

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 астрофизических систем в рамках статистики Тсаллиса // Mathematica Montisnigri. 2016. Т. 37. С. 45-75.

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. 2018а. № 60. 44 с.

Колесниченко А.В. Двухпараметрический энтропийный функционал Шарма−Миттала как основа семейства обобщенных термодинамик неэкстенсивных систем // Mathematica Montisnigri. 2018в. 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.

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

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

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

Abe S. A problem with the escort distribution representation of nonextensive statistical mechanics. 2000b. 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. The thermal Green functions in nonextensive quantum statistical mechanics // The European Physical Journal B. 1999. V. 9. № 4. P. 679-683.

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., Okamoto Y. Eds., “Nonextensive Statistical Mechanicsand Its Applications” (Chapter II). Series Lecture Notes in Physics. Springer: Verlag, Berlin, New York. 2001.

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.

Casimir H.B. On Onsager's Principle of Microscopic Reversibility // Reviews of Modern Physics. 1945. V. 17. № 2-3. P. 343-350.

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.

Guo R., Du J.The adiabatic static linear response function in nonextensive statistical mechanics // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. 2014. V. 414. P. 414-420.

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.

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

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., 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.

Kubo R. 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.

Kubo R., Yokota M., Nakajima S. Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. II. Response to Thermal Disturbance // J. Phys. Soc. Jap. 1957. V 12. № 11. P. 1203–1211.

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.

Lenzi E.K., Mendes R.S., Rajagopal A.K. 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.

Lenzi E.K., Mendes R.S., Rajagopal A.K Quantum statistical mechanics for nonextensive systems // Physical Review E (Statistical Physics, Plasmas, Fluids, and Related Interdisciplinary Topics). 1999. V. 59. № 2, P.1398-1407.

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.

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

ОГЛАВЛЕНИЕ