MATHEMATICA MONTISNIGRI
Vol XLV (2019)

К РАЗРАБОТКЕ НЕАДДИТИВНОЙ ТЕРМОДИНАМИКИ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ СТАТИСТИКИ ТСАЛЛИСА

А.В. КОЛЕСНИЧЕНКО

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН. Москва, Россия

Ответственный автор. E-mail: kolesn@keldysh.ru

DOI: 10.20948/mathmontis-2019-45-3

Ключевые слова: Квантовая неэкстенсивная статистика, энтропия Тсаллиса, степенной закон распределения матрицы плотности.

Аннотация. 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. Каждая такая теория имеет широкий спектр важных приложений, связанных с физикой статистических систем, вероятностные свойства которых описываются не Гиббсовыми, а степенными распределениями. Среди множества неэкстенсивных систем особое значение имеют малые квантовые системы, основанные на неаддитивной параметрической энтропии Тсаллиса, связанной с матрицей плотности, описывающий системы, квантовые состояния которых известны не полностью. При изучении подобных систем возникают многочисленные новые математические проблемы, требующие своего решения. В их числе, одной из важных, является проблема разработки неаддитивной термодинамики квантовых систем в рамках статистики Тсаллиса.

В данной работе при описании квантово-механической неэкстенсивной системы вслед за фон Нейманом предполагается правильность основных двух начал термодинамики. Выполненный анализ основывается на степенном равновесном распределении матрицы плотности, полученном из условия абсолютного экстремума квантовой энтропии Тсаллиса при заданности средней энергии и среднего числа частиц для ансамбля квантовых систем, а также на осреднении наблюдаемых величин по эскортному распределению. В результате получено обобщение на квантовый случай нулевого закона термодинамики для двух независимых подсистем при их тепловом контакте и введена так называемая физическая температура, отличная от инверсии множителя Лагранжа β. С привлечением обобщённого первого закона термодинамики и преобразования Лежандра и на основе введённой энтропии Клаузиуса получены термодинамические соотношения в квантовой статистике Тсаллиса, которые отличны от выведенных ранее традиционным для неэкстенсивной статистики способом. На основе свойства выпуклости различающей информации Ратье−Каннапана, обобщённой на квантовый случай, обсуждается второй закон термодинамики. Изучены спонтанные переходы между стационарными состояниями сложной квантово-механической системы и доказана H-теорема Больцмана.

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

2010 Mathematics Subject Classification: 85A35, 91B50, 82C40.
Key words and Phrases: Quantum Nonextensive Statistics, Entropy of Tsallis, Power Law Distribution of Density Matrix.

TO DEVELOPMENT OF THE NON-ADDITIVE THERMODYNAMICS OF THE QUANTUM SYSTEMS ON BASIS STATISTICS OF TSALLIS

A.V. KOLESNICHENKO

Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Science

Corresponding author. E-mail: kolesn@keldysh.ru

DOI: 10.20948/mathmontis-2019-45-3

Summary. At present, theories of nonextensive complex systems develop substantially in an accelerated rhythm, at which new ideas emerge, which allow a deeper understanding of their nature, possibilities and limitations. Each such theory has a wide range of important applications related to the physics of statistical systems, whose probabilistic properties are described not by Gibbs, but by power distributions. Among the set of nonextensive systems, small quantum systems based on the nonadditive parametric entropy of Tsallis associated with the density matrix, describing systems whose quantum states are not fully known, are of particular importance. When studying such systems, there are numerous new mathematical problems that need to be solved. Among them, one of the most important is the problem of developing nonadditive thermodynamics of quantum systems based on Tsallis statistics.

In this paper, when describing a quantum-mechanical nonextensive system, following von Neumann, the correctness of both basic principles of thermodynamics is assumed. The analysis of the quantum system is based on the power-law equilibrium distribution of the density matrix obtained from the absolute extremum condition of the Tsallis quantum entropy with a given average energy and average number of particles for an ensemble of quantum systems, as well as averaging the observed values for the escort distribution. As a result, a generalization to the quantum case of the zero law of thermodynamics is obtained for two independent subsystems with their thermal contact, and a so-called physical temperature is introduced that is different from the inversion of the Lagrange multiplier β. Using the generalized first law of thermodynamics and the Legendre transformation on the basis of the introduced Clausius entropy, modified thermodynamic relations were found in the Tsalsis quantum statistics that are different from the previously derived method for a non-extensive statistical mechanics. The second law of thermodynamics is discussed on the basis of the convexity property of the Ratier – Kannapan information, which is generalized to the quantum case. Spontaneous transitions between stationary states of a complex quantum-mechanical system are studied and the Boltzmann *H*-theorem is proved..

The developed approach assumes the use of nonextensive quantum thermodynamics in various contexts, concerning, in particular, the simulation of quantum thermal effects in nanodevices and other quantum technologies.

1 ВВЕДЕНИЕ

Как теперь стало понятно, статистическая механика Больцмана−Гиббса и стандартная термодинамика не являются вполне универсальными теориями, поскольку они имеют ограниченные области применимости. Это связано, в частности, с тем, что в основе статистики Больцмана−Гиббса лежит постулат о полном перемешивании потока «фазовых точек» в фазовом пространстве (гипотеза молекулярного хаоса). А это означает, в свою очередь, что фазовое пространство не содержит запрещённых состояний и обладает обычными свойствами непрерывности, гладкости, евклидовости. При этом гипотеза перемешивания, дополненная предположением о бесконечном числе степеней свободы, приводит к экспоненциальному распределению вероятности состояний системы (из которого следует, в частности, свойство аддитивности экстенсивных термодинамических переменных), или, в случае кинетической теории газов, к максвелловскому распределению скоростей.

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 (всеми) элементами системы. Сложная пространственно-временная структура подобных систем приводит к нарушению принципа аддитивности для таких важнейших термодинамических величин, как энтропия или внутренняя энергия.

Довольно широкий класс подобных систем (хотя далеко не всех) адекватно описывается неэкстенсивной (неаддитивной) статистической механикой, основанной на параметрических энтропиях Тсаллиса [1] и Реньи [2], которые, однако, сохраняют гносеологическую структуру (логическую схему построения) классической статистики [3-6]. Важным преимуществом неэкстенсивных статистик по сравнению с классической статистикой Больцмана−Гиббса является асимптотический степенной закон распределения вероятностей (проявляющийся при максимизации соответствующих параметрических энтропий), который не зависит от экспоненциального поведения, обусловленного распределением Гиббса.

Следует заметить, что неэкстенсивные статистики (например, статистики Тсаллиса и Реньи) представляет собой всё же обобщение, а не альтернативу классической статистике Больцмана−Гиббса, поскольку они распространяют область применимости стандартной статистической теории на неэкстенсивные системы только путём расширения математической формы их энтропийного функционала [7-10].

В настоящее время теории неэкстенсивных сложных систем существенно развиваются в ускоренном ритме, при котором появляются новые идеи, позволяющие глубже понять их природу, возможности и ограничения (см. Библиографию, представленную на сайте http:/tsallis. -cat.cbpf.br/biblio.htm, которая постоянно обновляется). Каждая теория имеет широкий спектр важных приложений, связанных с физикой статистических систем, вероятностные свойства которых описываются не гиббсовыми (не гауссовыми), а степенными распределениями. В частности, неэкстенсивная статистика Тсаллиса успешно применяется ко многим сложным системам, начиная от нелинейных диффузионных уравнений], обобщённых кинетических уравнений [11], систем Фоккера-Планка, *H*-теоремы Больцмана [6], удельной теплоемкости гармонического осциллятора, до изучения космических систем с дальним силовым взаимодействием, межзвездной турбулентности и теории фракталов [9], эволюции астрофизических дисков [10, 12, 13], городской транспортной системы [14], биофизики, экономики, нейрофизики и многое другое.

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

В данной работе для описания квантовой физической системы мы воспользуемся формализмом матрицы (оператора) плотности $\hat{\rho}$, с помощью которого наиболее удобно описывать системы, квантовые состояния которых известны не полностью [15]. Кроме этого, следуя фон Нейману (1964), будем использовать обычный формализм феноменологической термодинамики, при этом роль квантовой механики сведётся лишь к тому, что наше рассмотрение будет относиться к квантово-механическим объектам − правильность же обоих основных начал термодинамики предполагается [15]. С учётом этого будет показано, как можно получить равновесную статистическую термодинамику неэкстенсивных систем и определить её свойства на основе двух функционалов − квантовой параметрической энтропии Тсаллиса $S_q(\hat{\rho})$ и обобщённой квантовой относительной энтропии (квантовой различающей информации Ратье−Каннаппана $K_q\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right)$). Это исследование будет базироваться на степенном равновесном распределении матрицы плотности, полученном из условия абсолютного экстремума энтропии $S_q(\hat{\rho})$ при заданности средней энергии и среднего числа частиц для ансамбля квантовых систем, а также на осреднении его случайных динамических параметров (наблюдаемых) по эскортному распределению. Будет получено обобщение на квантовый случай нулевого закона термодинамики для двух независимых подсистем при их тепловом контакте и введена так называемая физическая температура, отличная от инверсии множителя Лагранжа β. При её использовании, с привлечением обобщённого первого закона термодинамики и преобразования Лежандра, будут найдены модифицированные термодинамические соотношения, отличные от выводимых «обычным» для статистики способом. И, наконец, на основе функционала для квантовой относительной энтропии, обобщённого на неэкстенсивные системы, будет обсуждаться второй закон термодинамики, будут исследованы спонтанные переходы между произвольными состояниями сложной квантовой системы и доказана *H*-теорема Больцмана в рамках неэкстенсивной квантовой статистики.

2. ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ И СТАТИСТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КВАНТОВОЙ ЭНТРОПИИ ДЛЯ НЕЭКСТЕНСИВНЫХ СИСТЕМ

В основу изучения различных статистических квантовых ансамблей неэкстенсивных систем можно положить экстремальные свойства квантовой информационной энтропии (введённой впервые в работе [35]) и использовать их для нахождения различных матриц плотности, заменяющих функции распределения вероятностей в классической статистике. Отметим, кстати, что при обобщении ансамблей Гиббса на случай квантовой статистики, фон Нейман [34] исходил именно из экстремальных свойств введённой им энтропии квантового состояния $\mathrm{S}(\hat{\rho}) \equiv -\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho} \ln \hat{\rho}\right)$, где $\hat{\rho}$ − матрица (оператор[i]) плотности микросистемы, при помощи формализма которой, согласно теореме Глисона [16], описывается любая квантово-механическая система.

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

В квантовой неэкстенсивной статистике при вероятностной нормировке матрицы плотности $\hat{\rho}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}') = \sum_r w_r \psi_r(\boldsymbol{x}) \psi_r^*(\boldsymbol{x}')$ (в матричном $\boldsymbol{x}$-представлении, описывающей смешанные квантовые состояния [15]), квантовая информационная энтропия Тсаллиса $\mathrm{S}_q(\hat{\rho})$ задаётся следующим обобщённым функционалом от оператора плотности [1]:

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

Здесь энтропийный индекс q (параметр деформации) представляет собой вещественное число (принадлежащее области $q \in \mathrm{R}$), которое характеризует неэкстенсивную особенность (неаддитивность) квантовой системы. Заметим, что шпуровая структура определения энтропии (2) важна тем, что делает энтропию функционально независимой от унитарных преобразований в пространстве состояний, т.е. эта формула справедлива при любом представлении оператора $\hat{\rho}$, а не только при его матричном $\boldsymbol{x}$-представлении [17].

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

$$\mathrm{S}_q(\hat{\rho}) = -\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^q \ln_q \hat{\rho}\right) = -\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}\, \mathrm{Ln}_q \hat{\rho}\right) \equiv -\left\langle \mathrm{Ln}_q \hat{\rho} \right\rangle_1, \tag{2*}$$

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

− так называемые деформированные логарифмы [18], обладающие, как легко убедиться, следующим свойством: при $q \to 1$, $\ln_q \hat{\mathrm{A}} \to \ln \hat{\mathrm{A}}$, $\mathrm{Ln}_q \hat{\mathrm{A}} \to \ln \hat{\mathrm{A}}$. При его

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

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

В традиционной квантовой статистике любой случайной динамической переменной A ставится в соответствие эрмитовый оператор [15] $\hat A$ 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 $\Delta_q \hat A$ могут быть использованы различные формулировки [3]. Далее мы воспользуемся следующим их определением:

$$\langle \hat A\rangle_q \equiv \mathrm{Tr}(\hat P_q \hat A) = \frac{\mathrm{Tr}(\hat\rho^q \hat A)}{\mathrm{Tr}\,\hat\rho^q}, \quad \Delta_q \hat A \equiv \hat A - \langle \hat A\rangle_q, \quad \mathrm{Tr}(\hat\rho^q \Delta_q \hat A) = 0\,, \tag{4}$$

где

$$\hat P_q(x) \equiv \hat\rho^q / \mathrm{Tr}(\hat\rho^q) \tag{5}$$

– так называемое нормированное эскортное распределение [3], для которого $\mathrm{Tr}(\hat P_q) = 1$.

2.1. Неаддитивность квантовой энтропии Тсаллиса для независимых систем

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

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

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

при условии нормировки $\mathrm{Tr}\left(\hat\rho^{(1,2)}\right) = \mathrm{Tr}\left(\hat\rho^{(1)}\right) = \mathrm{Tr}\left(\hat\rho^{(2)}\right) = 1$. Используя формулу (*), получим, с учётом известного соотношения] $\mathrm{Tr}(\hat A \otimes \hat B) = \mathrm{Tr}(\hat A)\mathrm{Tr}(\hat B)$ [15, следующее выражение

$$(q-1)\mathrm{S}_q^{(1)}\mathrm{S}_q^{(2)}=\frac{1}{q-1}\left[1-\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)^q\right]\times\left[1-\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^{(2)}\right)^q\right]=$$

$$=\frac{1-\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)^q}{q-1}+\frac{1-\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^{(2)}\right)^q}{q-1}-\frac{1-\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)^q\mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}^{(2)}\right)^q}{q-1}=\mathrm{S}_q^{(1)}+\mathrm{S}_q^{(1)}-\mathrm{S}_q^{(1,2)}.$$

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

$$\mathrm{S}_q\left(\hat{\rho}^{(1)}\otimes\hat{\rho}^{(2)}\right)=\mathrm{S}_q\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)+\mathrm{S}_q\left(\hat{\rho}^{(2)}\right)+(1-q)\mathrm{S}_q\left(\hat{\rho}^{(1)}\right)\mathrm{S}_q\left(\hat{\rho}^{(2)}\right). \tag{6}$$

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

Вместе с тем, эскортное осреднение приводит к свойству аддитивности для осреднённой энергии совокупной квантовой системы

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

Здесь $\hat{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}')=\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial^2}{\partial\boldsymbol{x}_j^2}+\frac{1}{2}\sum_{j\neq k}^{\mathrm{N}}\Phi(|\boldsymbol{x}_j-\boldsymbol{x}_k|)\right\}\prod_{i=1}^{n}\delta(\boldsymbol{x}_i-\boldsymbol{x}_i')$ − оператор энергии системы из N одинаковых бесспиновых частиц массы m, взаимодействующих между собой с потенциалом $\Phi(|\boldsymbol{x}|)$.

2.2. Экстремальность большого канонического распределения

Прежде всего, отметим, что различные статистические ансамбли квантовых систем (подобно традиционным) эквивалентны в термодинамическом отношении, что связано, в частности, с малостью флуктуаций энергии, числа частиц и объёма [17]. Далее мы воспользуемся наиболее удобным для наших целей большим каноническим ансамблем квантовых систем, описывающим контакт с термостатом и резервуаром частиц и определяемым заданием средней энергии и среднего числа частиц.

Рассматривая ансамбль систем с постоянным объёмом (находящийся в тепловом и материальном контакте с окружением), определим матрицу равновесной плотности $\hat{\bar{\rho}}(\boldsymbol{x})$ (т.е. статистический оператор равновесного распределения) из условия абсолютного экстремума квантовой информационной энтропии Тсаллиса (2), найденного при заданности осреднённых операторов плотности энергии $\hat{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x})$ и полного числа частиц $\hat{N}(\boldsymbol{x})$:

$$\langle \hat{\mathrm{H}} \rangle_q \equiv \mathrm{E}_q = \mathrm{Tr}\left(\hat{\mathrm{P}}_q \hat{\mathrm{H}}\right) = const, \quad \langle \hat{\mathrm{N}} \rangle_q \equiv \mathrm{N}_q = \mathrm{Tr}\left(\hat{\mathrm{P}}_q \hat{\mathrm{N}}\right) = const, \tag{7}$$

а также при сохранении нормировки (1).

Согласно вариационному принципу Джейнса [20], равновесная матрица плотности $\hat{\hat{\rho}}$, «экстремизирующая» энтропию S_q при указанных ограничениях, определяется из условия равенства нулю первой вариации по $\hat{\rho}$ следующего обобщённого Лагранжиана

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

Здесь

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

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

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

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

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

где

$$\tilde{Q}_q(\beta_q) = \mathrm{Tr}\left\{\exp_q\left[-\beta_q\left((\hat{\mathrm{H}}-\tilde{\mathrm{E}}_q)-\mu(\hat{\mathrm{N}}-\tilde{\mathrm{N}}_q)\right)\right]\right\} \tag{11}$$

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

$$\tilde{c}_q \equiv \mathrm{Tr}\left(\hat{\hat{\rho}}^q\right) = \mathrm{Tr}\left\{\exp_q\left[-\beta_q\left((\hat{\mathrm{H}}-\tilde{\mathrm{E}}_q)-\mu(\hat{\mathrm{N}}-\tilde{\mathrm{N}}_q)\right)\right]\right\}^q/(\tilde{Q}_q)^q \tag{12}$$

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

2.3. Экспонента Тсаллиса и деформированный логарифм

В формуле (10) использована так называемая деформированная экспонента Тсаллиса [3]

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

(13)

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

Легко проверить, что в пределе $q \to 1$ функция (13) принимает стандартный вид:

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

Используя определения (3) и (13), можно убедиться, что имеют место следующие соотношения для деформированной экспоненты [3]:

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

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

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

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

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

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

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

Эти формулы будут использованы далее.

2.4. Некоторые свойства равновесного распределения

Из выражения (10) следует соотношение

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

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

$$(\tilde{Q}_q)^{1-q}\,\mathrm{Tr}(\hat{\tilde{\rho}}) = \mathrm{Tr}\left\{\hat{\tilde{\rho}}^q\left[1-(1-q)\beta_q\left(\Delta_q\hat{\mathrm{H}}-\mu\Delta_q\hat{\mathrm{N}}\right)\right]\right\} = \mathrm{Tr}(\hat{\tilde{\rho}}^q)\,, \qquad (22)$$

из которого, с использованием (1) и (7), можно найти важное соотношение для равновесного значения коэффициента Тсаллиса

$$\tilde{c}_q \equiv \mathrm{Tr}(\hat{\tilde{\rho}}^q) = (\tilde{Q}_q)^{1-q} = 1+(1-q)\tilde{\mathrm{S}}_q\,. \qquad (23)$$

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

$$\tilde{c}_q \equiv \mathrm{Tr}(\hat{\tilde{\rho}}^q) = (\tilde{Q}_q)^{-q}\,\mathrm{Tr}\left\{\exp_q\left[-\beta_q\left(\Delta_q\hat{\mathrm{H}}-\mu\Delta_q\hat{\mathrm{N}}\right)\right]\right\}^q, \qquad (24)$$

получим ещё одно представление обобщённой статистической суммы

$$\tilde{Q}_q(\beta,\mu) = \mathrm{Tr}\left\{\exp_q\left[-\beta_q\left(\Delta_q\hat{\mathrm{H}}-\mu\Delta_q\hat{\mathrm{N}}\right)\right]\right\}^q. \qquad (25)$$

Далее везде квантово-механическую флуктуацию $\Delta_q\hat{\mathrm{A}}$ наблюдаемой величины $\tilde{\mathrm{A}}$ будем задавать соотношением

$$\Delta_q\hat{\mathrm{A}} \equiv \hat{\mathrm{A}}-\tilde{\mathrm{A}} = \hat{\mathrm{A}}-\mathrm{Tr}(\hat{\tilde{\mathrm{P}}}_q\hat{\mathrm{A}})\,, \qquad (26)$$

где «равновесное» эскортное распределение $\hat{\tilde{\mathrm{P}}}_q$ определяется, как легко можно убедиться, формулой

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

Здесь

$$\tilde{Q}_q(\beta_q,\mu) \equiv \mathrm{Tr}\left\{\exp_q\left[-\beta_q\left(\Delta_q\hat{\mathrm{H}}-\mu\Delta_q\hat{\mathrm{N}}\right)\right]\right\} = \mathrm{Tr}\left\{\exp_q\left[-\beta_q\left(\Delta_q\hat{\mathrm{H}}-\mu\Delta_q\hat{\mathrm{N}}\right)\right]\right\}^q.$$

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

$$\tilde{\mathrm{A}}_q = \tilde{Q}_q^{-1}\,\mathrm{Tr}\left\{\left[\exp_q\left(-\beta_q\Delta_q\hat{\mathrm{H}}+(\mu\beta_q)\Delta_q\hat{\mathrm{N}}\right)\right]^q\hat{\mathrm{A}}\right\} =$$

$$= \mathrm{Tr}\left\{\hat{\mathrm{A}}\left[\exp_q\left(-\beta_q\Delta_q\hat{\mathrm{H}}+(\mu\beta_q)\Delta_q\hat{\mathrm{N}}\right)\right]^q\right\} / \mathrm{Tr}\left[\exp_q\left(-\beta_q\Delta_q\hat{\mathrm{H}}+(\mu\beta_q)\Delta_q\hat{\mathrm{N}}\right)\right]^q. \qquad (28)$$

2.5. Экстремальность большого канонического распределения

Заметим, что экстремальные свойства любых квантовых неэкстенсивных ансамблей можно получить из следующего неравенства:

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

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

Действительно, поскольку для числа $r>0$ имеем (см. теорему № 42 в монографии [19])

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

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

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

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

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

Подставляя теперь это соотношение в неравенство (31), получим «верхнее» неравенство (29). Используя аналогичный подход, легко убедиться в том, что при $q<0$ имеет место «нижнее» неравенство (29).

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

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

$$\tilde{S}_q(\hat{\sigma}) \equiv -\mathrm{Tr}\left(\hat{\sigma}\,\mathrm{Ln}_q\,\hat{\sigma}\right) \le -\mathrm{Tr}\left[\hat{\sigma}\left(\frac{\hat{\sigma}}{\hat{\tilde{\rho}}}\right)^{q-1}\mathrm{Ln}_q\,\hat{\tilde{\rho}}\right] \le \tilde{S}_q(\hat{\tilde{\rho}})\,. \qquad (33)$$

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

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

$$= \left\{\exp_q\left[-\beta_q\left((\Delta_q\hat{H} - \mu\Delta_q\hat{N}\,)\right)\right]\right\}^{q-1}\left[-\beta_q\left((\Delta_q\hat{H} - \mu\Delta_q\hat{N}\,)\right) - \tilde{S}_q(\hat{\tilde{\rho}})\right], \qquad (34)$$

откуда следует

$$-\mathrm{Tr}\left\{\hat{\sigma}\left(\hat{\sigma}/\hat{\tilde{\rho}}\right)^{q-1}\mathrm{Ln}_q\,\hat{\tilde{\rho}}\right\} = -\mathrm{Tr}\left\{\hat{\sigma}^q\left[-\beta_q\left((\Delta_q\hat{H} - \mu\Delta_q\hat{N}\,)\right) - \tilde{S}_q(\hat{\tilde{\rho}})\right]\right\}\tilde{Q}_q^{q-1} = \tilde{S}_q(\hat{\tilde{\rho}}). \qquad (35)$$

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

2.6. Равновесные термодинамические соотношения

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

$$\tilde{S}_q = -\mathrm{Tr}\left(\hat{\tilde{\rho}}\,\mathrm{Ln}_q\,\hat{\tilde{\rho}}\right) = -\frac{1-\tilde{c}_q}{1-q} = \frac{(\tilde{Q}_q)^{1-q}-1}{1-q} = \ln_q\tilde{Q}_q\,. \qquad (36)$$

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

$$\tilde{\Omega}_q \equiv \tilde{E}_q - \frac{1}{\beta}\tilde{S}_q - \mu\hat{N}_q = \tilde{E}_q - \frac{1}{\beta}\frac{(\tilde{Q}_q)^{1-q}-1}{1-q} - \mu\hat{N}_q\,. \qquad (37)$$

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

$$\partial\tilde{S}_q/\partial\tilde{E}_q = \partial\ln_q\tilde{Q}_q/\partial\tilde{E}_q = \beta\,. \qquad (38)$$

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

$$\frac{\partial \tilde{S}_q}{\partial \tilde{E}_q} = \frac{\partial \ln_q \tilde{Q}_q}{\partial \tilde{Q}_q} \frac{\partial \tilde{Q}_q}{\partial \tilde{E}_q} = \tilde{Q}_q^{-q} \frac{\partial \tilde{Q}_q}{\partial \tilde{E}_q} = \tilde{Q}_q^{-q} \, \mathrm{Tr} \frac{\partial \exp_q\{..\}}{\partial\{..\}} \frac{\partial\{..\}}{\partial \tilde{E}_q} =$$

$$= \tilde{Q}_q^{-q} \, \mathrm{Tr} \left\{ \exp_q\{..\} \right\}^q \frac{\partial\{..\}}{\partial \tilde{E}_q} = \tilde{Q}_q^{1-q} \frac{\beta}{\tilde{c}_q} = \beta . \qquad (39)$$

Здесь введено обозначение $\{..\} \equiv -\beta_q \left(\Delta_q \hat{H} - \mu \Delta_q \hat{N} \right)$. Аналогично получим

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

В результате будем иметь следующие соотношения равновесной термодинамики квантовых неэкстенсивных систем:

$$\tilde{S}_q = \ln_q \tilde{Q}_q , \quad \tilde{\Omega}_q = \tilde{E}_q - \beta^{-1} \tilde{S}_q - \mu \hat{N}_q , \qquad (41)$$

$$\partial \tilde{S}_q / \partial \tilde{E}_q = \partial (\ln_q \tilde{Q}_q) / \partial \tilde{E}_q = \beta , \quad \partial \tilde{S}_q / \partial \hat{N}_q = -\beta \mu , \qquad 42)$$

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

По поводу соотношений (41)-(43) следует иметь в виду следующее. Величина $\tilde{Q}_q$ характеризуется микроскопическими значениями энергии $\hat{H}(\boldsymbol{x})$ и числа частиц $\hat{N}_q$, вычисленными относительно средней энергии $\tilde{E}_q$ и среднего числа частиц $\tilde{N}_q$ соответственно. Если ввести новую статистическую сумму Q_q^*, которая определяется микроскопическими величинами $\hat{H}(\boldsymbol{x})$ и $\hat{N}_q$ относительно нулевой точки, согласно формуле

$$(Q_q^*)^{1-q} \equiv (\tilde{Q}_q)^{1-q} - \beta(1-q) \left(\tilde{E}_q - \mu \tilde{N}_q \right) \qquad (44)$$

и переопределить квантовый большой термодинамический потенциал формулой

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

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

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

$$\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\ln_q Q_q^*\right) = -\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\beta\tilde{\Omega}_q^*\right) = -\tilde{E}_q\,, \tag{47}$$

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

$$\partial\tilde{S}_q / \partial\tilde{E}_q = \beta\,, \quad \partial\tilde{S}_q / \partial\tilde{N}_q = -\beta\mu\,. \tag{49}$$

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

3. МОДИФИЦИРОВАННАЯ КВАНТОВАЯ ТЕРМОДИНАМИКА НЕЭКСТЕНСИВНЫХ СИСТЕМ

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

3.1. Термодинамическое равновесие двух независимых систем

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

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

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

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

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

или, с учётом (37) и (49),

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

Отношение эквивалентности (52) определяет условие теплового равновесия двух квантовых q-систем и является обобщением нулевого закона термодинамики на неаддитивные квантово-механические системы. Оно показывает, что в отличие от классического квантового случая $(q \to 1)$ физическая температура T_{ph} не является обратной величиной множителя Лагранжа, β^{-1}, но

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

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

Таким образом, отличие физической температуры от инверсии множителя Лагранжа β приводит, вообще говоря, к необходимости видоизменения полученных выше термодинамических соотношений (40)-(43) для неаддитивных квантовых систем. В работе [21 в качестве основных предпосылок, взятых за исходный пункт построения модифицированной макроскопической термодинамики Тсаллиса с физической температурой, предлагается использование первого закона термодинамики и преобразования Лежандра.

3.2. Модифицированные термодинамические равенства для квантово - механического ансамбля

Введём по аналогии с физической температурой квантовой системы T_{ph} квантовое физическое давление P_q путём рассмотрения механического равновесия двух независимых q-систем. В этом случае энтропия совокупной квантовой системы должна максимизироваться с фиксацией общего объёма $V^{(1,2)} = V^{(1)} + V^{(2)} = const$. В результате будем иметь

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

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

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

Ясно, что определённые таким образом квантовые физическая температура и физическое давление обязательно должны привести к модификации определения термодинамической энтропии Клаузиуса [23].

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

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

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

По аналогии с работой [22], которой мы далее воспользуемся, переопределим большой термодинамический потенциал (38) следующим образом:

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

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

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

Если теперь использовать первый закон термодинамики в формулировке Каратеодори [23]

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

где $\delta' Q_q$ и $\delta' W_q$ − малые изменения количества теплоты (так называемой некомпенсированной теплоты), подводимой к q-системе или отводимой от неё, и работы, которые определяются выражениями [24-26]

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

то выражение (57) можно переписать в виде

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

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

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

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

В этом нетрудно убедиться. В частности, из уравнений

$$\delta \mathrm{E}_q = \frac{T_{ph}}{c_q} \delta \mathrm{S}_q - P_{ph} \delta V + \mu \delta \mathrm{N}_q\,, \tag{62}$$

$$\delta H_q = \frac{T_{ph}}{c_q} \delta \mathrm{S}_q + V \delta P_{ph} + \mu \delta \mathrm{N}_q\,, \tag{63}$$

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

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

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

следуют обобщённые термодинамические соотношения

$$\left(\partial \mathrm{E}_q / \partial V\right)_{S_q, N_q} = \left(\partial F_q / \partial V\right)_{T_{ph}, N_q} = -P_{ph}\,, \tag{67}$$

$$\left(\partial \mathrm{E}_q / \partial \mathrm{S}_q\right)_{V,\mathrm{N}_q} = \left(\partial H_q / \partial \mathrm{S}_q\right)_{P_{ph},\mathrm{N}_q} = T_{ph} / c_q, \tag{68}$$

$$\left(\partial H_q / \partial P_{ph}\right)_{\mathrm{S}_q,\mathrm{N}_q} = \left(\partial G_q / \partial P_{ph}\right)_{T_{ph},\mathrm{N}_q} = V, \tag{69}$$

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

Как известно, в термодинамике теплоёмкость вещества в наиболее общем виде определяется следующим образом: $c_z = T\left(\partial \mathrm{S} / \partial T\right)_z$. Здесь c_z − теплоёмкость в таком процессе, в котором сохраняется постоянным параметр z, где z − любые обобщённые координаты. Наиболее распространёнными являются изобарная теплоёмкость и изохорная теплоёмкость:

$$c_{qp} = T_{ph} c_q^{-1} \left(\partial \mathrm{S}_q / \partial T_{ph}\right)_{P_{ph}}, \quad c_{qV} = T_{ph} c_q^{-1} \left(\partial \mathrm{S}_q / \partial T_{ph}\right)_V. \tag{71}$$

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

$$\left(\partial \mathrm{S}_q/\partial T_{ph}\right)_{P_{ph}} = \left(\partial \mathrm{S}_q/\partial H_q\right)_{P_{ph}} \left(\partial H_q/\partial T_{ph}\right)_{P_{ph}} \text{ и } \left(\partial S_q/ \partial T_{ph}\right)_V = \left(\partial S_q/ \partial \mathrm{E}_q\right)_V \left(\partial \mathrm{E}_q/ \partial T_{ph}\right)_V, \tag{72}$$

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

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

Наконец, уравнение, устанавливающее связь между теплоёмкостями c_p и c_V, может быть получено следующим образом. В соответствии с соотношением

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

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

$$\left(\partial \mathrm{S}_q/ \partial T_{ph}\right)_{P_{ph}} = \left(\partial \mathrm{S}_q / \partial T_{ph}\right)_V + \left(\partial \mathrm{S}_q / \partial V\right)_{T_{ph}} \left(\partial V/ \partial T_{ph}\right)_{P_{ph}}. \tag{75}$$

Отсюда, используя уравнение Максвелла $(\partial S_q/\partial V)_{T_{ph}} = (\partial P_{ph}/T_{ph})_V$ [23], получим

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

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

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

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

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

Таким образом, стандартная форма для термодинамических соотношений (67)-(70) и теплоёмкостей (73) позволяет заключить, что они остаются инвариантными относительно неаддитивной модификации их классических аналогов. Подчеркнём тот важный факт, что температуры $T = 1/\beta$ и $T_{ph} = 1/\beta_q$ не зависят от выбора нуля энергий, и поэтому они допускают физическую интерпретацию. Заметим, что в дополнение к структуре Лежандра различные другие важные теоремы и свойства также остаются q-инвариантными [3].

4. КВАНТОВАЯ ОТНОСИТЕЛЬНАЯ ЭНТРОПИЯ В СТАТИСТИКЕ ТСАЛЛИСА. ОБОБЩЕННАЯ *H*-ТЕОРЕМА БОЛЬЦМАНА

Наряду с квантовой параметрической энтропией $\mathrm{S}_q(\hat\rho) = (q-1)^{-1}\,\mathrm{Tr}\left(\hat\rho - \hat\rho^q\right)$ обобщённая квантовая относительная энтропия (или квантовая информация различия Ратье−Каннаппана [25, 27, 28])

$$\mathrm{K}_q\left(\hat\rho : \hat\sigma\right) \equiv \left[1 - \mathrm{Tr}(\hat\rho^q \hat\sigma^{1-q})\right]/(1-q) =$$

$$= \mathrm{Tr}\left[\hat\rho \ln_q\left(\hat\sigma\hat\rho^{-1}\right)\right] = \mathrm{Tr}\left[\hat\rho^q(\ln_q\hat\rho - \ln_q\hat\sigma)\right] = -\mathrm{Tr}\left(\hat\rho^q \ln_q \hat\sigma\right) - S_q(\hat\rho) \tag{79}$$

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

Можно показать, что в пределе слабой связи $q \to 1$ величина $\mathrm{K}_q\left(\hat\rho : \hat\sigma\right)$ переходит в традиционную квантовую относительную энтропию матрицы $\hat\sigma$ по отношению к матрице $\hat\rho$ (или в квантовую различающую информацию Кульбака−Лейблера [6])

$$\lim_{q\to 1} \mathrm{K}_q\left(\hat\rho : \hat\sigma\right) = \mathrm{K}_1\left(\hat\rho : \hat\sigma\right) = \mathrm{Tr}\left[\hat\rho\left(\ln\frac{\hat\rho}{\hat\sigma}\right)\right] = -\mathrm{Tr}\left[\hat\rho \ln\hat\sigma\right] - \mathrm{S}_1(\hat\rho). \tag{80}$$

Действительно, в пределе $q \to 1$ имеем

$$\varepsilon^{-1}\left[1-\mathrm{Tr}(\hat{\rho}^{q}\hat{\sigma}^{1-q})\right]=\varepsilon^{-1}\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}\left[1-\left(\hat{\rho}/\hat{\sigma}\right)^{q-1}\right]\right\}=\varepsilon^{-1}\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}\left[1-\exp\ln\left(\hat{\rho}/\hat{\sigma}\right)^{q-1}\right]\right\}\approx$$

$$\approx\varepsilon^{-1}\,\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}\left[1-1-\varepsilon\ln\left(\hat{\rho}/\hat{\sigma}\right)\right]\right\}=\mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}\left[\ln\left(\frac{\hat{\rho}}{\hat{\sigma}}\right)\right]\right\}=\mathrm{K}_1\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right). \tag{81}$$

4.1. Выпуклость обобщённой квантовой относительной энтропии

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

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

и неравенства (29), записанные в виде

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

В результате получим

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

Таким образом, обобщённая квантовая относительная энтропия неотрицательна, т.е. функционал $\mathrm{K}_q\left(\hat{\sigma}:\hat{\rho}\right)$ при $q>0$ удовлетворяет такому же обобщённому неравенству Клейна $\mathrm{K}_1\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right)\geq 0$ (являющемуся квантовым аналогом неравенства Гиббса для информации различия Кульбака–Лейблера [7], как и квантовая относительная энтропия фон Неймана ($\mathrm{K}_1\left(\hat{\rho}:\hat{\sigma}\right)\geq 0$), а потому может использоваться для тех же целей. Однако в рассматриваемом случае имеется свобода выбора параметра деформации q, что позволяет адекватно исследовать неэкстенсивную квантовую систему.

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

4.2. Неаддитивность квантовой относительной энтропии для независимых систем

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

$$\mathrm{K}_q\left(\hat{\rho}_{(1,2)} : \hat{\sigma}_{(1,2)}\right) \equiv \varepsilon^{-1}\left[1 - \mathrm{Tr}\left(\hat{\rho}_{(1,2)}^q \hat{\sigma}_{(1,2)}^{1-q}\right)\right], \tag{83}$$

$$\mathrm{K}_q\left(\hat{\rho}_1 : \hat{\sigma}_1\right) \equiv \varepsilon^{-1}\left[1 - \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_1^q \hat{\sigma}_1^{1-q})\right], \quad \mathrm{K}_q\left(\hat{\rho}_2 : \hat{\sigma}_2\right) \equiv \varepsilon^{-1}\left[1 - \mathrm{Tr}(\hat{\rho}_2^q \hat{\sigma}_2^{1-q})\right], \tag{84}$$

где условия нормировки имеют вид

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

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

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

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

При $q = 1$ из (86) следует свойство аддитивности для квантовой информация различия Кульбака–Лейблера $\mathrm{K}_1\left(\hat{\rho} : \hat{\sigma}\right) \equiv \mathrm{Tr}\left[\hat{\rho}\ln\left(\hat{\rho}\,\hat{\sigma}^{-1}\right)\right]$ в традиционной квантовой механике с мерой фон Неймана.

Пусть равновесная неаддитивная квантовая система находится в термостате с температурой $1/\beta$. Для определения равновесного оператора плотности $\hat{\tilde{\sigma}}$ находим безусловный экстремум лагранжиана

$$\mathrm{L}(\hat{\sigma}) \equiv -\mathrm{Tr}\left(\hat{\sigma}\,\mathrm{Ln}_q\,\hat{\sigma}\right) - \beta c_q^{-1}\,\mathrm{Tr}\left(\hat{\sigma}^q \hat{\mathrm{H}}\right) - \lambda\,\mathrm{Tr}\,\hat{\sigma}, \quad \text{где } c_q \equiv \mathrm{Tr}\,\hat{\sigma}^q\,.$$

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

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

где

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

$$\tilde{Q}_q(\tilde{\beta}_q) \equiv \mathrm{Tr}\left\{\exp_q\left[-\tilde{\beta}_q\left(\hat{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}) - \tilde{\mathrm{E}}_q\right)\right]\right\} \tag{89}$$

– статистическая сумма.

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

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

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

$$\tilde{c}_q \mathrm{K}_q\left(\hat{\rho} : \hat{\tilde{\sigma}}\right) = \varepsilon^{-1}\left[\tilde{c}_q - \tilde{c}_q \operatorname{Tr}\left(\hat{\rho}^q \hat{\tilde{\sigma}}^{1-q}\right)\right] =$$

$$= \varepsilon^{-1}\left\{\tilde{c}_q - \operatorname{Tr}\left[\hat{\rho}^q\left(1-(1-q)\tilde{\beta}_q(\hat{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}) - \tilde{\mathrm{E}}_q)\right)\right]\right\} = -\frac{1-\tilde{c}_q}{(1-q)} + \frac{1-c_q}{(1-q)} + c_q\tilde{\beta}_q(\mathrm{E}_q - \tilde{\mathrm{E}}_q) =$$

$$= \tilde{\mathrm{S}}_q - \mathrm{S}_q + c_q\tilde{\beta}_q\left[\left(\mathrm{E}_q - \tilde{\mathrm{E}}_q\right)\right] = \tilde{\mathrm{S}}_q - \mathrm{S}_q + \tilde{\beta}_q \operatorname{Tr}\left[\hat{\rho}^q\left(\hat{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}) - \tilde{\mathrm{E}}_q\right)\right], \tag{91}$$

совпадающее при $q = 1$ с известным термодинамическим неравенством для информации различия Кульбака–Лейблера для аддитивных квантовых систем [6, 17].

4.3. Неравенство Клаузиуса

Варьируя оператор $\tilde{c}_q \mathrm{K}_q\left(\hat{\rho} : \hat{\tilde{\sigma}}\right)$ относительно матрицы плотности $\hat{\rho}$, т.е. считая, что $\hat{\rho} \to \hat{\tilde{\rho}} + \delta\hat{\rho}$ и $\operatorname{Tr}(\delta\hat{\rho}) = 0$, получим

$$\tilde{c}_q \delta\mathrm{K}_q\left(\hat{\rho} : \hat{\tilde{\rho}}\right) = -\,\delta\mathrm{S}_q(\hat{\rho}) + \tilde{\beta}_q \operatorname{Tr}\left[\delta\hat{\rho}^q\left(\hat{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}) - \tilde{\mathrm{E}}_q\right)\right]. \tag{92}$$

Здесь использовано преобразование

$$\mathrm{S}_q(\hat{\rho}) \equiv \varepsilon^{-1}\operatorname{Tr}(\hat{\rho} - \hat{\rho}^q) \to \varepsilon^{-1}\operatorname{Tr}(\hat{\tilde{\rho}} - \hat{\tilde{\rho}}^q) + \varepsilon^{-1}\delta\operatorname{Tr}(\hat{\rho} - \hat{\rho}^q) = \tilde{\mathrm{S}}_q + \delta\mathrm{S}_q(\hat{\rho})\,.$$

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

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

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

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

В работе [25], было показано, что только когда параметр деформации q лежит в интервале $q \in (0,2)$, то справедливо неравенство

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

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

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

связывающее энтропию замкнутой квантовой системы с теплотой и температурой.

Таким образом, второй закон термодинамики (90) в квантовой термодинамике Тсаллиса также справедлив, что согласуется с принципом термодинамики в классической квантовой термодинамике [15]. Однако в отличие от последней, он справедлив только для значений энтропийного индекса, ограниченного интервалом $q \in (0,2)$. Однако для квантовых систем с $q > 2$ он нарушается. Отметим ещё одно обстоятельство. В классической термодинамике второй закон определяет направление реально осуществляющихся процессов. Следовательно, адиабатические необратимые процессы ($\delta' Q_q = 0$) в квантовой термодинамике Тсаллиса, согласно неравенству (90), могут происходить в направлении роста энтропии только для значений параметра деформации $q \in (0,2)$.

4.4. *H*-теорема в квантовой статистике Тсаллиса

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

$$\mathrm{Tr}(\hat{\mathrm{H}}\hat{\mathrm{P}}_q) = \mathrm{Tr}(\hat{\mathrm{H}}\hat{\tilde{\mathrm{P}}}_q). \tag{97}$$

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

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

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

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

Согласно свойству выпуклости (82), квантовая информация различия Ратье–Каннаппана является знакоопределённой функцией Ляпунова. Чтобы состояние полного равновесия было устойчивым необходимо выполнение следующего неравенства[ii]:

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

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

$$d\mathrm{S}_q\left(p\right)/dt > 0 \quad \text{при } 0 < q < 2 , \tag{100}$$

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

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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

В представленной работе для описания квантово-механической неэкстенсивной системы использован формализм матрицы плотности, описывающий системы, квантовые состояния которых известны не полностью. Кроме этого, широко использован обычный формализм феноменологической термодинамики, причём правильность обоих основных начал термодинамики, вслед за фон Нейманом, подразумевается. С учётом этих предположений получена равновесная статистическая термодинамика квантовых неэкстенсивных систем и определены её термодинамические свойства. Проведённое рассмотрение базируется на двух функционалах – на квантовой параметрической энтропии Тсаллиса и на обобщённой квантовой различающей информации Ратье–Каннаппана. Выполненный в работе анализ квантовой системы основывается на степенном равновесном распределении матрицы плотности, полученном из условия абсолютного экстремума квантовой энтропии Тсаллиса при заданности средней энергии и среднего числа частиц для ансамбля систем, а также на осреднении наблюдаемых по эскортному распределению.

[ii] Напомним, что функцией Ляпунова для данной системы называется знако-определённая функция, которая обращается в нуль в точке равновесия системы. Состояние равновесия является аттрактором, когда производная по времени от функции Ляпунова имеет знак, противоположный знаку самой функции.

В результате получено обобщение на квантовый случай нулевого закона термодинамики для двух независимых подсистем при их тепловом контакте и введена так называемая физическая температура, отличная от инверсии множителя Лагранжа β. С привлечением обобщённого первого закона термодинамики и преобразования Лежандра найдены модифицированные термодинамические соотношения на основе введённой энтропии Клаузиуса, которые отличны от выведенных ранее традиционным для статистической механики способом. С использованием свойства выпуклости обобщённой различающей информации Ратье−Каннаппана обсуждается второй закон термодинамики квантовых систем. Изучены также спонтанные переходы между стационарными состояниями сложной квантово-механической системы и доказана *H*-теорема Больцмана.

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

REFERENCES

[1] C. Tsallis, “Possible generalization of Boltzmann−Gibbs statistics”, *J. Stat. Phys.*, **52** (1-2), 479-487 (1988).

[2] A. Renyi, *Probability Theory*, Amsterdam: North-Holland Publ. Co., (1970).

[3] C. Tsallis, *Introduction to Nonextensive Statistical Mechanics. Approaching a Complex World*, New York: Springer, (2009).

[4] E.K. Lenzi, R.S. Mendes, “Collisionless Boltzmann equation for systems obeying Tsallis distribution”, *Eur. J. Phys., B*, **21** (3), 401-406 (2001).

[5] S. Abe, “Heat and entropy in nonextensive thermodynamics: transmutation from Tsallis theory to Rényi-entropy-based theory”, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **300** (3), 417-423 (2001).

[6] R.G. Zaripov, *Printsipy neekstensivnoy statisticheskoy mekhaniki i geometrii mer besporyadka i poryadka*. Kazan: Izdatelstvo Kazanskogo Gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta, (2010).

[7] A.V. Kolesnichenko, *K postroeniyu neadditivnoy termodinamiki slozhnykh sistem na osnove statistiki Kurado−Tsallisa*, Preprint IPM No 25 (Moscow: KIAM), (2018). doi:10.20948/prepr-25.

[8] A.V. Kolesnichenko, *K konstruirovaniyu termodinamiki neadditivnykh sred na osnove statistiki Tsallisa−Mendesa−Plastino*, Preprint IPM No 23 (Moscow: KIAM), (2018). doi:10.20948/prepr-23.

[9] A.V. Kolesnichenko, “Dvukhparametricheskiy entropiynyy funktsional Sharma−Mittala kak osnova semeystva obobshchennykh termodinanik neekstensivnykh sistem”, *Mathematica Montisnigri*. **42**, 74-101 (2018).

[10] A.V. Kolesnichenko, *Statisticheskay mekhanika i termodinamika Tsallisa neadditivnykh system. Vvedenie v teoriiu i prilozheniia*, Moskwa: LENAND. (Sinergetika: ot proshlogo k budushchemu № 87), (2019).

[11] A.V. Kolesnichenko, B.N. Chetverushkin, “Kinetic derivation of a quasihydrodinamic system of equations on the base of nonextensive statistics”, *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, **28**, 547-576 (2013).

[12] 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*. **48** (5), 354-365 (2014).

[13] A.V. Kolesnichenko, “Modifikatsiya v ramkakh statistiki Tsallisa kriteriev gravitatsionnoy neustoychivosti astrofisicheskikh diskov s fraktalnoy strukturoy fazovogo prostranstva”, *Mathematica Montisnigri*, **32**, 93-118 (2015).

[14] A. V. Kolesnichenko, "On construction of the entropy transport model based on the formalism of nonextensive statistics", *Mathematical Models and Computer Simulations*, **6** (6), 587-597 (2014).
[15] J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton (NJ): Princeton University Press, (1955).
[16] A. M. Gleason, "Measures on the closed subspaces of a Hilbert space", *Mathematics Journal* (Indiana University), **6**, 885-893 (1957).
[17] D. Zubarev, V. Morozov and G. Röpke, *Statistical Mechanics of Nonequilibrium Processes*, Vol. 1, *Basic Concepts, Kinetic Theory*, Akademie-Verlag, Berlin, (1996).
[18] C. Tsallis, "Nonextensive Statistics: Theoretical, Experimental and Computational Evidences and Connections", *Brazilian Journal of Physics*, **29** (1), 1-35 (1999).
[19] G. H. Hardy, J. E. Littlewood, G. Pólya, *Inequalities* (2nd ed.). Cambridge: Cambridge University Press, (1952).
[20] E.T. Jaynes, "Information theory and statistical mechanics", *In com.: «Statistical Physics». Brandeis Lectures,* **3,** 160 (1963).
[21] S. Abe, Y. Eds. Okamoto, *Nonextensive Statistical Mechanicsand Its Applications, Series Lecture Notes in Physics*, Springer: Verlag, Berlin, New York. (2001).
[22] S. Abe, "Heat and generalized Clausius entropy of nonextensive systems", *Eprint arXiv:condmat/0012115,* **3,** 1-14 (2000).
[23] A. Münster. *Chemische thermodynamic*, Akademie-Verlag Berlin, (1969).
[24] C. Jarzynski,"Equalities and inequalities: irreversibility and the second law of thermodynamics at the nanoscale", *Annu. Rev. Cond. Matt. Phys,* **2**, 329-335 (2011).
[25] S. Abe, A.K. Rajagopal, "Validity of the Second Law in Nonextensive Quantum Thermodynamics", *Physical Review Letters*, **91** (12), id. 120601 (2003).
[26] C. Jarzynski, D. Wójcik, "Classical and Quantum Fluctuation Theorems for Heat Exchange", *Physical Review Letters*, **92** (23), id. 230602 (2004).
[27] S. Abe, "Quantum q-divergence", *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, **344** (3), 359-365 (2004).
[28] S. Abe, "Nonadditive generalization of the quantum Kullback−Leibler divergence for measuring the degree of purification", *Physical Review A*, **68** (3), id. 032302 (2003).

Received March 23, 2019