УДК 536.1;538.93

Нерівноважний статистичний оператор Зубарєва у статистиці Рені. Реакційно-дифузійні процеси

Петро Костробій[1], Богдан Марків[2],
Ростислав Токарчук[3], Михайло Токарчук[4]

[1] д. ф.-м. н., професор, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів
[2] м. н. с., Інститут фізики конденсованих систем НАН України, вул. Свенцицького, 1, Львів
[3] Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів
[4] д. ф.-м. н., професор, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, вул. Свенцицького, 1, Львів,
e-mail: mtok2010@ukr.net

Запропоновано один із підходів формулювання екстенсивної статистичної механіки нерівноважних процесів на основі методу нерівноважного статистичного оператора Д. Зубарєва та принципу максимуму ентропії Рені. Для прикладу розглянуто статистичний підхід узгодженого опису реакційно-дифузійних процесів у системі «газ–адсорбат–метал» із використанням методу нерівноважного статистичного оператора в статистиці Рені.

Ключові слова: нерівноважний статистичний оператор, ентропія Рені рівняння переносу, реакційно-дифузійні процеси.

Вступ. Під час дослідження складних фізичних систем та явищ, зокрема, самоорганізаційних і фрактальних структур, субдифузії, турбулентності, хімічних реакцій, а також різних економічних, соціальних і біологічних систем розподіл Гіббса не забезпечує узгодження з явищами спостережень. Як виявляється у багатьох дослідженнях, для таких систем характерні степеневі розподіли [1]. Вони не отримуються з принципу максимуму ентропії Гіббса-Шеннона, на якому ґрунтується як рівноважна, так і нерівноважна статистична термодинаміка [2-4]. Це спричинило численні спроби побудови узагальненої статистики, яка б забезпечила степеневу асимптотику функції розподілу. Таку узагальнену статистику можна будувати на основі кількох ентропій. Серед них важливе місце посідають ентропія Рені (Renyi) й ентропія Тсалліса (Tsallis).

У роботах О. Г. Башкірова [5-8] для опису складних систем використовують ентропію Рені [9, 10] як статистичну ентропію, що залежить від параметра q ($0 < q < 1$) і для $q = 1$ співпадає з ентропією Гіббса-Шеннона. Виходячи із принципу максимуму ентропії Рені для рівноважного випадку, отримано степеневий розподіл Рені, який у разі $q = 1$ переходить у канонічний розподіл Гіббса. $\eta = 1 - q$ розглядається як параметр порядку, за його росту статистична ентропія Рені зростає до свого максимуму, якому відповідає степеневий розподіл Рені. Причому для $\eta = 0$ похідна від приросту ентропії $\Delta S = S_R - S_G$ (S_R — ентропія Рені, S_G — ентропія Гіббса) за параметром η має стрибок, що можна трактувати як фазовий перехід системи в упорядкованіший рівноважний стан. Властивості ентропії Рені розглянуто у книгах [9, 11, 12].

Іншою відправною точкою для побудови узагальненої статистичної механіки є ентропія Тсалліса, введена в [13]. Вона — лінійне наближення ентропії Рені у разі розвинення останньої у ряд в околі $q = 1$. Результатом такої апроксимації є важлива особливість — ентропія Тсалліса стає неадитивною. Ентропії Рені та Тсалліса можна зв'язати за допомогою простої монотонної функції. Тому екстремізація однієї з них, так само як і «нормованої ентропії Тсалліса» [14, 15], за однакових умов призводить до степеневих розподілів одного і того ж вигляду. Незважаючи на це, ентропії Рені та Тсалліса суттєво відрізняються, і ці відмінності є важливі під час дослідження термодинамічних систем. Наприклад, ентропія Тсалліса є вгнута функція для всіх $q > 0$, тоді як ентропія Рені вгнута лише для $0 < q < 1$. Леше [16] запропонував спосіб дослідження узагальнених ентропій на стійкість. Зокрема, він показав, що ентропія Рені є нестійка для всіх $q \neq 1$. Своєю чергою, Абе [17, 18] показав стійкість ентропії Тсалліса для всіх $q > 0$ та нестійкість «нормованої ентропії Тсалліса». Важливі відмінності та для квантових систем. Ентропія Рені є адитивна та не може бути екстенсивна (у термодинамічному сенсі) для сильно зв'язних квантових систем, наприклад, як у [19]. Тоді як неадитивна ентропія Тсалліса є екстенсивна для певних значень q, які залежать лише від розміру спінів системи. Хоча автори роботи [20] показали, що ентропія Тсалліса у поєднанні з лінійним усередненням є стійка, тоді як у поєднанні з ескортним усередненням — нестійка. З огляду на це вони запропонували використовувати однорідну ентропію як узагальнення. Запропонована однорідна ентропія є стійка й опукла для всіх значень q у поєднанні з лінійним усередненням. При цьому було показано, що ескортні розподіли, які використовують під час обчислення середніх, виникають природнім чином як вторинні структури, що дають можливість спростити вигляд ентропії.

У наш час ентропію Тсалліса широко використовують у різних напрямках неекстенсивної статистичної механіки [21-26], зокрема у дослідженнях явищ субдифузії [27], турбулентності [28, 29], дослідженнях коефіцієнтів переносу у газах і плазмі [30, 31], а також для опису квантових дисипативних систем у статистичній механіці [32]. Про проблеми побудови рівноважної термодинаміки в рамках узагальненої статистики йшлося в роботах [33-37]. У межах неекстенсивної статистики досліджували флуктуації енергії [33], кінетику нерівноважної плазми [38], проблеми самогравітаційних систем [39], озонового шару [40], універсальності у недебаєвській релаксації [41] і складних систем [42, 43]. Незважаючи на широке застосування саме ентропії Тсалліса, як узагальнення ентропії Гіббса-Шеннона, ентропія Рені також знаходить своє застосування [44-46]. Зокрема, в разі її використання можна встановити зв'язок між індексом q та теплоємністю системи.

У цій роботі розглядатимемо один із підходів формулювання екстенсивної статистичної механіки нерівноважних процесів [47] на основі методу нерівноважного статистичного оператора Д. Зубарєва [2-4] та принципу максимуму ентропії Рені. Для прикладу розглянемо статистичний підхід до узгодженого опису реакційно-дифузійних процесів у системі «газ–адсорбат–метал» із використанням методу нерівноважного статистичного оператора в статистиці Рені.

2. Нерівноважний статистичний оператор і максимум ентропії Рені

Нерівноважний стан класичних чи квантових систем взаємодіючих частинок повністю описується нерівноважним статистичним оператором (нерівноважною функцією розподілу) $\rho\left(x^N;t\right)$, який задовольняє класичне чи квантове рівняння Ліувілля

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho\left(x^N;t\right)+iL_N\rho\left(x^N;t\right)=0, \qquad (1)$$

iL_N — оператор Ліувілля системи взаємодіючих частинок, який у класичному випадку має вигляд

$$iL_N=\sum_{j=1}^{N}\frac{\mathbf{p}_j}{m}\cdot\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_j}-\frac{1}{2}\sum_{l\neq j=1}^{N}\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_j}\Phi\left(r_{lj}\right)\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_j}-\frac{\partial}{\partial \mathbf{p}_l}\right),$$

де $x_j=\left\{\mathbf{p}_j,\mathbf{r}_j\right\}$ — сукупність фазових змінних j-ої частинки, $\Phi\left(r_{lj}\right)$ — енергія взаємодії двох частинок, $\mathbf{p}_j$ — імпульс j-ої частинки, m — її маса, $r_{lj}=\left|\mathbf{r}_l-\mathbf{r}_j\right|$ — відстань між парою взаємодіючих частинок. Функція $\rho\left(x^N;t\right)$ є симетрична відносно перестановок $x_l\leftrightarrow x_j$ фазових змінних будь-якої пари частинок і задовольняє умову нормування

$$\int d\Gamma_N\rho\left(x^N;t\right)=1, \qquad d\Gamma_N=\frac{(dx)^N}{N!}, \qquad dx=d\mathbf{p}d\mathbf{r}.$$

Для розв’язку рівняння Ліувілля (1) використовуємо метод нерівноважного статистичного оператора Зубарєва [2-4]. Шукаємо такі розв’язки рівняння (1), що залежать від часу тільки через значення деякого набору спостережуваних змінних

$$\int d\Gamma_N\hat{P}_n\rho\left(x^N;t\right)=\left\langle\hat{P}_n\right\rangle^t,$$

достатнього для опису нерівноважного стану системи, та не залежать від вибору початкового моменту часу. Зокрема, для гідродинамічного стану системи класичних взаємодіючих частинок такими параметрами скороченого опису є нерівноважні середні значення кількості частинок $\left\langle\hat{n}(\mathbf{r})\right\rangle^t$, їх імпульсу $\left\langle\hat{\mathbf{p}}(\mathbf{r})\right\rangle^t$ та повної енергії $\left\langle\hat{\varepsilon}(\mathbf{r})\right\rangle^t$, які задовольняють відповідні закони збереження. У методі нерівноважного статистичного оператора, якщо вибрані основні параметри скороченого опису, $\rho\left(x^N;t\right)$ можна записати в загальній формі з урахуванням проектування [2-4]

$$\rho\left(x^N;t\right)=\rho_{rel}\left(x^N;t\right)-\int_{-\infty}^{t}e^{\varepsilon(t'-t)}T\left(t,t'\right)\left(1-P_{rel}\left(t'\right)\right)iL_N\rho_{rel}\left(x^N;t'\right)dt'.$$

Тут $T(t,t')=\exp_+\left\{-\int\limits_{t'}^{t}\left[1-P_{rel}(t_0)\right]iL_N dt_0\right\}$ — оператор еволюції з урахуванням проектування; $\exp_+$ — експонента впорядкування, $P_{rel}(t')$ — узагальнений оператор проектування Кавасакі-Гантона, структура якого залежить від структури релевантного статистичного оператора $\rho_{rel}(x^N;t')$. $\rho_{rel}(x^N;t')$ будемо шукати з умови максимуму функціонала ентропії Рені системи

$$S_R(\rho)=\frac{1}{1-q}\ln\int d\Gamma_N\rho^q(t),$$

де q — параметр Рені. За фіксованих параметрів скороченого опису та збереження умови нормування він матиме вигляд

$$L_R(\rho)=\frac{1}{1-q}\ln\int d\Gamma_N\rho^q(t)-\alpha\int d\Gamma_N\rho(t)-\sum_n F_n(t)\int d\Gamma_N\hat{P}_n\rho^q(t),$$

$F_n(t)$ — множники Лагранжа. Прирівнявши до нуля функціональну похідну від $L_R(\rho)$: $\frac{\delta L_R(\rho)}{\delta\rho}=0$ і визначивши параметр $\alpha=\frac{q}{1-q}-\sum_n F_n(t)\langle\hat{P}_n\rangle^t$, отримаємо релевантний статистичний оператор у вигляді

$$\rho_{rel}(t)=\frac{1}{Z_R(t)}\left(1-\frac{q-1}{q}\sum_n F_n(t)\delta\hat{P}_n\right)^{\frac{1}{q-1}}, \tag{2}$$

де

$$Z_R(t)=\int d\Gamma_N\left(1-\frac{q-1}{q}\sum_n F_n(t)\delta\hat{P}_n\right)^{\frac{1}{q-1}}$$

— його статистична сума, $\delta\hat{P}_n=\hat{P}_n-\langle\hat{P}_n\rangle^t$. Множники Лагранжа $F_n(t)$ визначаємо з умов самоузгодження

$$\langle\hat{P}_n\rangle^t=\langle\hat{P}_n\rangle^t_{rel}.$$

Оскільки релевантний статистичний оператор визначено для основного набору параметрів скороченого опису, то можемо знайти нерівноважний статистичний оператор, розкривши структуру проекційного оператора

$$P_{rel}(t)\rho'=\left(\rho_{rel}(t)-\sum_n\frac{\delta\rho_{rel}(t)}{\delta\langle\hat{P}_n\rangle^t}\langle\hat{P}_n\rangle^t\right)\int d\Gamma_N\rho'+\sum_n\frac{\delta\rho_{rel}(t)}{\delta\langle\hat{P}_n\rangle^t}\int d\Gamma_N\hat{P}_n\rho'.$$

Варіаційну похідну від релевантного статистичного оператора у проекційному операторі можна подати у вигляді

$$\frac{\delta\rho_{rel}(t)}{\delta\left\langle\hat{P}_m\right\rangle^t} = \rho_{rel}(t)\delta\left[\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\left(F_m(t) - \sum_n \frac{\delta F_n(t)}{\delta\left\langle\hat{P}_m\right\rangle^t}\delta\hat{P}_n\right)\right],$$

де

$$\delta[...] = [...] - \langle[...]\rangle_{rel}^t, \qquad \psi(t) = 1 - \frac{q-1}{q}\sum_n F_n(t)\delta\hat{P}_n .$$

Похідну від множників Лагранжа за параметрами скороченого опису розраховуватимемо таким чином

$$\frac{\delta F_n(t)}{\delta\left\langle\hat{P}_m\right\rangle^t} = \left(\frac{\delta\left\langle\hat{P}_m\right\rangle^t}{\delta F_n(t)}\right)^{-1} .$$

Це можна зробити в загальному випадку. Тому

$$\frac{\delta\left\langle\hat{P}_m\right\rangle^t}{\delta F_n(t)} = \int d\Gamma_N \hat{P}_m \frac{\delta\rho_{rel}(t)}{\delta F_n(t)}$$

й обчисливши $\frac{\delta\rho_{rel}(t)}{\delta F_n(t)}$ у правій частині цього співвідношення, отримаємо рівняння для знаходження похідних

$$\frac{\delta\left\langle\hat{P}_m\right\rangle^t}{\delta F_n(t)} = \left\langle\delta\hat{P}_m\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\right\rangle_{rel}^t \sum_l \frac{\delta\left\langle\hat{P}_l\right\rangle^t}{\delta F_n(t)} - \left\langle\delta\hat{P}_m\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\delta\hat{P}_n\right\rangle_{rel}^t .$$

Його розв'язок можна подати у матричному вигляді

$$\frac{\delta\left\langle\hat{P}\right\rangle^t}{\delta F(t)} = -\left[I - \left\langle\delta\hat{P}\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\right\rangle_{rel}^t F(t)\right]^{-1}\left\langle\delta\hat{P}\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\delta\hat{P}\right\rangle_{rel}^t = f(t),$$

де

$$\frac{\delta\left\langle\hat{P}_m\right\rangle^t}{\delta F_n(t)} = \left(\frac{\delta\left\langle\hat{P}\right\rangle^t}{\delta F(t)}\right)_{mn} = f_{mn}(t) .$$

Тоді функціональну похідну запишемо так

$$\frac{\delta\rho_{rel}(t)}{\delta\left\langle\hat{P}_m\right\rangle^t} = \rho_{rel}(t)\delta\left[\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\left(F_m(t) - \sum_n f_{mn}^{-1}\delta\hat{P}_n\right)\right].$$

Таким чином проекційний оператор Кавасакі-Гантона матиме таку структуру

$$P_{rel}(t)\rho' = \rho_{rel}(t)\int d\Gamma_N \rho' + \sum_m \rho_{rel}(t)\delta\left[\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\left(F_m(t) + \sum_n f_{mn}^{-1}(t)\delta\hat{P}_n\right)\right]\times$$
$$\times\left(\int d\Gamma_N \hat{P}_m \rho' - \left\langle \hat{P}_m \right\rangle^t \int d\Gamma_N \rho'\right). \qquad (3)$$

Розкриємо дію операторів $P_{rel}(t)iL_N$ на релевантний статистичний оператор. Оскільки

$$iL_N\rho_{rel}(t) = -\rho_{rel}(t)\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\sum_n F_n(t)\dot{\hat{P}}_n = A(t)\rho_{rel}(t),$$

то

$$P_{rel}(t)iL_N\rho_{rel}(t) = P_{rel}(t)A(t)\rho_{rel}(t) = \left[P(t)A(t)\right]\rho_{rel}(t),$$

де $P(t)$ — проекційний оператор, що діє на динамічні змінні,

$$P(t)... = \left\langle ...\right\rangle_{rel}^t + \sum_m \delta\left[\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\left(F_m(t) + \sum_n f_{mn}^{-1}(t)\delta\hat{P}_n\right)\right]\left\langle ...\delta\hat{P}_m\right\rangle_{rel}^t. \qquad (4)$$

Оскільки

$$A(t) = -\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\sum_n F_n(t)\dot{\hat{P}}_n,$$

то, розкривши дію операторів $P_{rel}(t)iL_N$ на релевантний статистичний оператор, для $\left(1 - P_{rel}(t)\right)iL_N\rho_{rel}(t)$ отримуємо

$$\left(1 - P_{rel}(t)\right)iL_N\rho_{rel}(t) = \left(1 - P(t)\right)iL_N\rho_{rel}(t) = -\sum_n I_n(t)F_n(t)\rho_{rel}(t), \qquad (5)$$

де $I_n(t)$ — узагальнені потоки, означені таким співвідношенням

$$I_n(t) = \left(1 - P(t)\right)\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\dot{\hat{P}}_n.$$

Тепер, врахувавши (5), можна отримати нерівноважний статистичний оператор у явному вигляді

$$\rho\left(x^N;t\right) = \rho_{rel}\left(x^N;t\right) - \sum_n \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T(t,t')I_n\left(t'\right)F_n\left(t'\right)\rho_{rel}\left(x^N;t'\right)dt'. \qquad (6)$$

За допомогою цього оператора для параметрів скороченого опису отримуємо узагальнені рівняння переносу для $\left\langle \hat{P}_m \right\rangle^t$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left\langle \hat{P}_m \right\rangle^t = \left\langle \dot{\hat{P}}_m \right\rangle^t_{rel} + \sum_n \int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)} \phi_{mn}(t,t') F_n(t') dt',$$

де

$$\phi_{mn}(t,t') = \int d\Gamma_N \dot{\hat{P}}_m T(t,t') I_n(t') \rho_{rel}(t')$$

— узагальнені ядра переносу (функції пам’яті), які описують дисипативні процеси в системі.

Далі буде запропоновано статистичний підхід узгодженого опису реакційно-дифузійних процесів у системі «газ–адсорбат–метал» із використанням методу нерівноважного статистичного оператора Д. Зубарєва у статистиці Рені.

3. Нерівноважний статистичний оператор для системи «газ–адсорбат–метал»

Будемо виходити з гамільтоніану системи «газ–адсорбат–метал», який має вигляд [48]

$$H = H' + H_{reac}, \qquad H' = H_a + H_a^{int}.$$

Тут H_a — гамільтоніан газової підсистеми, атоми якої розглядаються згідно класичного підходу; H_a^{int} — гамільтоніан, який описує взаємодії між атомами газу й атомами, адсорбованими на поверхні металу; H_{reac} — гамільтоніан взаємодії для хімічних реакцій між адсорбованими атомами чи молекулами на поверхні металу типу

$$H_{reac} = \sum_{\bar{a},\bar{b},\bar{a}',\bar{b}'} \left(\left\langle \overline{a'},\overline{b'} \middle| \Phi_{reac} \middle| \bar{a},\bar{b} \right\rangle \hat{q}^+_{\bar{a}'} \hat{q}^+_{\bar{b}'} \hat{q}_{\bar{a}} \hat{q}_{\bar{b}} + \left\langle \overline{a'},\overline{b'} \middle| \Phi_{reac} \middle| \bar{a},\bar{b} \right\rangle^* \hat{q}^+_{\bar{a}} \hat{q}^+_{\bar{b}} \hat{q}_{\bar{a}'} \hat{q}_{\bar{b}'} \right)$$

з амплітудами $\left\langle \overline{a'},\overline{b'} \middle| \Phi_{reac} \middle| \bar{a},\bar{b} \right\rangle = \left\langle \bar{a},\bar{b} \middle| \Phi_{reac} \middle| \overline{a'},\overline{b'} \right\rangle$ реакцій між реагентами A, B і продуктів реакцій AB, які вважаємо відомими з квантової механіки (ми будемо використовувати індекси $\bar{a},\bar{b}$ і $\overline{a'},\overline{b'}$ для станів реагентів A, B (атомів чи молекул) і для станів атомів у продуктах реакцій AB). Тут $\hat{q}^+_{\bar{a}'}$, $\hat{q}^+_{\bar{b}'}$, $\hat{q}^+_{\bar{a}}$, $\hat{q}^+_{\bar{b}}$ і $\hat{q}_{\bar{a}'}$, $\hat{q}_{\bar{b}'}$, $\hat{q}_{\bar{a}}$, $\hat{q}_{\bar{b}}$ є оператори породження та знищення станів атомів $\overline{a'},\overline{b'}$ для молекул AB, $\bar{a},\bar{b}$ для A, B відповідно.

Для узгодженого опису атомних реакційно-дифузійних процесів у системі «газ–адсорбат–метал» за основні параметри скороченого опису виберемо: середні значення густин адсорбованих і неадсорбованих на поверхні металу атомів газу [48]

$$\left\langle \hat{n}^{\nu}_{\bar{a}}(\mathbf{R}) \right\rangle^t = \mathrm{Sp}\left(\hat{n}^{\nu}_{\bar{a}}(\mathbf{R}) \rho(t) \right),$$

$$\left\langle \hat{n}_a(\mathbf{r}) \right\rangle^t = \mathrm{Sp}\left(\hat{n}_a(\mathbf{r}) \rho(t) \right),$$

де $\hat{n}^{\alpha}_{\bar{a}}(\mathbf{R})$ — оператор густини атомів газу, адсорбованих у стані ν на поверхні металу

$$\hat{n}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R})=\sum_{j}^{N_a^{ad}}\hat{\psi}_{\nu j}^{+}(\mathbf{R})\hat{\psi}_{\nu j}(\mathbf{R}),$$

$\hat{\psi}_{\nu j}^{+}(\mathbf{R}),\hat{\psi}_{\nu j}(\mathbf{R})$ — оператори породження та знищення адсорбованих атомів газу у стані ν на поверхні металу, що задовольняють комутаційним співвідношенням бозе-типу. Оскільки у цій моделі явно не будемо розглядати поверхню каталізатора, то під станами ν та μ розумітимемо адсорбційні центри, у яких можуть перебувати атоми.

$$\hat{n}_a(\mathbf{r})=\sum_{j=1}^{N_a}\delta\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_j\right)$$

— мікроскопічна густина числа атомів газу,

$$\left\langle\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}\left(\mathbf{R},\mathbf{R}'\right)\right\rangle^t=\mathrm{Sp}\left(\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}\left(\mathbf{R},\mathbf{R}'\right)\rho(t)\right)$$

— нерівноважна парна функція розподілу адсорбованих атомів чи молекул на поверхні металу, де $\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}\left(\mathbf{R},\mathbf{R}'\right)=\hat{n}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R})\hat{n}_{\bar{b}}^{\mu}\left(\mathbf{R}'\right)$.

Таке введення нерівноважних парних функцій розподілу для адсорбованих атомів є розширення параметрів скороченого опису з метою опису хімічних реакцій і колективних ефектів на поверхні металу. Якщо між адсорбованими атомами виникає хімічний зв’язок, стимульований поверхнею металу, то перейшовши від систем координат, пов’язаних із кожним з атомів $\hat{n}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R}),\hat{n}_{\bar{b}}^{\mu}(\mathbf{R})$, до системи центрів мас, знайдемо координату $L_{\bar{a}\bar{b}}$ молекули (кластера), що складається з двох атомів у стані μ та ν. Тоді $\left\langle\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}\left(\mathbf{R},\mathbf{R}'\right)\right\rangle^t$ — середня густина молекул, які утворилися внаслідок хімічної реакції між адсорбованими атомами на поверхні металу. І навпаки, молекули, які складаються з двох атомів у стані μ та ν, під дією неоднорідного електричного поля поверхні металу можуть спочатку дисоціювати на атоми, які далі адсорбуються поверхнею металу. Тоді $\left\langle\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}\left(\mathbf{R},\mathbf{R}'\right)\right\rangle^t$ — нерівноважна функція розподілу адсорбованих атомів на поверхні металу. Для вибраного основного набору параметрів скороченого опису для атомних реакційно-дифузійних процесів у системі «газ–адсорбат–метал» відповідно до (2), релевантний статистичний оператор буде мати такий вигляд

$$\rho_{rel}(t)=\frac{1}{Z_R(t)}\left[1-\frac{q-1}{q}\beta\left(\delta H(t)-\sum_a\int d\mathbf{r}\mu_a(\mathbf{r};t)\delta\hat{n}_a(\mathbf{r};t)-\sum_{\bar{a}}\sum_{\nu}\int d\mathbf{R}\mu_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R};t)\times\right.\right.$$
$$\left.\left.\times\delta\hat{n}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R};t)-\sum_{\bar{a}\bar{b}}\sum_{\nu\mu}\int d\mathbf{R}d\mathbf{R}'M_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}\left(\mathbf{R},\mathbf{R}';t\right)\delta\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}\left(\mathbf{R},\mathbf{R}';t\right)\right)\right]^{\frac{1}{q-1}},\qquad(7)$$

$$Z_R(t) = Sp\left[1 - \frac{q-1}{q}\beta\left(\delta H - \sum_a \int d\mathbf{r}\mu_a(\mathbf{r};t)\delta\hat{n}_a(\mathbf{r};t) - \sum_{\bar{a}}\sum_{\nu}\int d\mathbf{R}\mu_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R};t)\delta\hat{n}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R};t) - \right.\right.$$
$$\left.\left. - \sum_{\bar{a}\bar{b}}\sum_{\nu\mu}\int d\mathbf{R}d\mathbf{R}' M_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}';t)\delta\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}';t)\right)\right]^{\frac{1}{q-1}}$$

— статистична сума релевантного статистичного оператора, де $\mathrm{Sp}(\ldots) = = \prod_{\alpha}\int \frac{(dx)^{N_\alpha}}{N_\alpha!(2\pi\hbar)^{3N_\alpha}}\mathrm{Sp}_{(\nu,\xi,\sigma)}(\ldots)$, $dx = d\mathbf{r}d\mathbf{p}$, $N_\alpha = \{N_a, N_{\bar{a}}\}$, $\mathrm{Sp}_{(\nu,\xi,\sigma)}$ — усереднене сумування за всіма значеннями спіна та квантових чисел.

Параметри $\mu_a(\mathbf{r};t), \mu_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R};t), M_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}';t)$ визначають із відповідних умов самоузгоджень

$$\langle\hat{n}_a(\mathbf{r})\rangle^t = \langle\hat{n}_a(\mathbf{r})\rangle_{rel}^t,\ \langle\hat{n}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R})\rangle^t = \langle\hat{n}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R})\rangle_{rel}^t,\ \langle\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}')\rangle^t = \langle\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}')\rangle_{rel}^t,$$

з яких знаходимо, що $\mu_a(\mathbf{r};t)$ має значення локального хімічного потенціалу атомів газу; $\mu_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R};t)$ — локальний хімічний потенціал адсорбованого атома в стані ν на поверхні металу. $\delta H(t) = H - \langle H\rangle^t$, $\delta\hat{n}_a(\mathbf{r};t) = \hat{n}_a(\mathbf{r}) - \langle\hat{n}_a(\mathbf{r})\rangle^t$, $\delta\hat{n}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R};t) = = \hat{n}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R}) - \langle\hat{n}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R})\rangle^t$, $\delta\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}';t) = \hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}') - \langle\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}')\rangle^t$. Відповідно до (6) і (7) нерівноважний статистичний оператор системи «газ–адсорбат–метал» матиме такий вигляд

$$\rho(t) = \rho_{rel}(t) + \sum_a\int d\mathbf{r}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T(t,t')\times$$
$$\times\left(\int_0^1 d\tau\rho_{rel}^{\tau}(t')I_a(\mathbf{r};t')\rho_{rel}^{1-\tau}(t')\beta\mu_a(\mathbf{r};t')\right)dt' + \sum_{\bar{a}}\sum_{\nu}\int d\mathbf{R}\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}T(t,t')\times$$
$$\times\left(\int_0^1 d\tau\rho_{rel}^{\tau}(t')I_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R};t')\rho_{rel}^{1-\tau}(t')\beta\mu_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R};t')\right)dt' + \sum_{\bar{a},\bar{b}}\sum_{\nu,\mu}\int d\mathbf{R}\int d\mathbf{R}'\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\times$$
$$\times T(t,t')\left(\int_0^1 d\tau\rho_{rel}^{\tau}(t')I_{G_{\bar{a}\bar{b}}}^{\nu\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}';t')\rho_{rel}^{1-\tau}(t')\beta M_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}';t')\right)dt', \tag{8}$$

де

$$I_a(\mathbf{r};t') = (1 - P(t'))\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\dot{\hat{n}}_a(\mathbf{r}),\quad I_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R};t') = (1 - P(t'))\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\dot{\hat{n}}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R}),$$

$$I_{G_{\bar{a}\bar{b}}}^{\nu\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}';t') = (1 - P(t'))\frac{1}{q}\psi^{-1}(t)\dot{\hat{G}}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}') \tag{9}$$

— узагальнені потоки, які описують реакційно-дифузійні процеси, оператор еволюції $T(t,t')$, у якому проекційні оператори $P_{rel}(t')$ і $P(t')$ визначені відповідно формулами (3) та (4). При цьому функція $\psi(t)$ визначається співвідношенням

$$\psi(t) = 1 - \frac{q-1}{q}\beta\Bigg(\delta H(t) - \sum_a \int d\mathbf{r}\mu_a(\mathbf{r};t)\delta\hat{n}_a(\mathbf{r};t) -$$
$$-\sum_{\bar{a}}\sum_{\nu}\int d\mathbf{R}\mu_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R};t)\delta\hat{n}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R};t) - \sum_{\bar{a}\bar{b}}\sum_{\nu\mu}\int d\mathbf{R}d\mathbf{R}'M_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}';t)\delta\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}';t)\Bigg).$$

За допомогою нерівноважного статистичного оператора (8) одержуємо самоузгоджені узагальнені рівняння переносу для середніх значень густин адсорбованих та неадсорбованих атомів і для парної нерівноважної функції розподілу адсорбованих атомів (чи молекул). Ця система має вигляд

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}_a(\mathbf{r})\rangle^t = \langle\dot{\hat{n}}_a(\mathbf{r})\rangle_{rel}^t + \sum_b\int d\mathbf{r}'\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\phi_{n_a n_b}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')\beta\mu_b(\mathbf{r}';t')dt' +$$
$$+\sum_{\bar{b}}\sum_{\nu'}\int d\mathbf{R}'\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\phi_{n_a n_{\bar{b}}}^{\nu'}(\mathbf{r},\mathbf{R}';t,t')\beta\mu_{\bar{b}}^{\nu'}(\mathbf{R}';t')dt' +$$
$$+\sum_{\bar{a}'\bar{b}}\sum_{\nu'\mu'}\int d\mathbf{R}'\int d\mathbf{R}''\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\phi_{n_a G_{\bar{a}'\bar{b}}}^{\nu'\mu'}(\mathbf{r},\mathbf{R}',\mathbf{R}'';t,t')\beta M_{\bar{a}'\bar{b}}^{\nu'\mu'}(\mathbf{R}',\mathbf{R}'';t')dt', \tag{10}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{n}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R})\rangle^t = \left\langle\frac{1}{i\hbar}[\hat{n}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R}),H']\right\rangle_{rel}^t + \left\langle\frac{1}{i\hbar}[\hat{n}_{\bar{a}}^{\nu}(\mathbf{R}),H_{reac}]\right\rangle_{rel}^t +$$
$$+\sum_b\int d\mathbf{r}'\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\phi_{n_{\bar{a}} n_b}^{\nu}(\mathbf{R},\mathbf{r}';t,t')\beta\mu_b(\mathbf{r}';t')dt' +$$
$$+\sum_{\bar{b}}\sum_{\nu'}\int d\mathbf{R}'\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\phi_{n_{\bar{a}} n_{\bar{b}}}^{\nu\nu'}(\mathbf{R},\mathbf{R}';t,t')\beta\mu_{\bar{b}}^{\nu'}(\mathbf{R}';t')dt' +$$
$$+\sum_{\bar{a}'\bar{b}}\sum_{\nu'\mu'}\int d\mathbf{R}'\int d\mathbf{R}''\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\phi_{n_{\bar{a}} G_{\bar{a}'\bar{b}}}^{\nu'\mu'}(\mathbf{r},\mathbf{R}',\mathbf{R}'';t,t')\beta M_{\bar{a}'\bar{b}}^{\nu'\mu'}(\mathbf{R}',\mathbf{R}'';t')dt', \tag{11}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}')\rangle^t = \left\langle\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}'),H'\right]\right\rangle_{rel}^t + \left\langle\frac{1}{i\hbar}\left[\hat{G}_{\bar{a}\bar{b}}^{\nu,\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}'),H_{reac}\right]\right\rangle_{rel}^t +$$
$$+\sum_{b'}\int d\mathbf{r}'\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\phi_{G_{\bar{a}\bar{b}} n_{b'}}^{\nu\mu}(\mathbf{R},\mathbf{R}',\mathbf{r}';t,t')\beta\mu_{b'}(\mathbf{r}';t')dt' +$$
$$+\sum_{\bar{b}}\sum_{\nu'}\int d\mathbf{R}''\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\phi_{G_{\bar{a}\bar{b}} n_{\bar{b}'}}^{\nu\mu\nu'}(\mathbf{R},\mathbf{R}',\mathbf{R}'';t,t')\beta\mu_{\bar{b}}^{\nu'}(\mathbf{R}';t')dt' +$$
$$+\sum_{\bar{a}'\bar{b}'}\sum_{\nu'\mu'}\int d\mathbf{R}''\int d\mathbf{R}'''\int_{-\infty}^{t} e^{\varepsilon(t'-t)}\phi_{G_{\bar{a}\bar{b}} G_{\bar{a}'\bar{b}'}}^{\nu\mu\nu'\mu'}(\mathbf{R},\mathbf{R}',\mathbf{R}''\mathbf{R}''';t,t')\beta M_{\bar{a}'\bar{b}'}^{\nu'\mu'}(\mathbf{R}'',\mathbf{R}''';t')dt', \tag{12}$$

де $\phi_{n_a n_b}, \phi^{\nu\nu'}_{n_{\bar a} n_{\bar b}}, \phi^{\nu'}_{n_a n_{\bar b}}, \phi^{\nu\mu\nu'\mu'}_{G_{\bar a\bar b} G_{\bar a'\bar b'}}$ — узагальнені ядра переносу, які описують дисипативні процеси в системі. У рівнянні (11) другий доданок $\left\langle \left[\hat n^{\nu}_{\bar a}(\mathbf{R}), H_{reac}\right] / (i\hbar) \right\rangle^{t}_{rel}$ у правій частині визначає середнє значення оператора швидкості хімічних реакцій між адсорбованими атомами на поверхні металу. Прямий вклад амплітуд хімічних реакцій містить також доданок $\left\langle \left[\hat G^{\nu,\mu}_{\bar a\bar b}(\mathbf{R},\mathbf{R}'), H_{reac}\right] / (i\hbar) \right\rangle^{t}_{rel}$ у правій частині рівняння (12) для парної нерівноважної функції розподілу адсорбованих атомів на поверхні металу. Ядра переносу побудовані на узагальнених потоках (9) з урахуванням вкладів амплітуд хімічних реакцій у потоках $I^{\nu}_{\bar a}(\mathbf{R};t')$ та $I^{\nu\mu}_{G_{\bar a\bar b}}(\mathbf{R},\mathbf{R}';t')$ і мають таку структуру

$$\phi_{BB'}(t,t') = \mathrm{Sp}\left(I_B(t) T(t,t') \int_0^1 d\tau \rho^{\tau}_{rel}(t') I_{B'}(t') \rho^{1-\tau}_{rel}(t') \right).$$

Зокрема, $\phi_{n_a n_b}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t,t')$ описує динамічні кореляції дифузійних потоків атомів газу, і, як буде показано, зв’язане з неоднорідним коефіцієнтом дифузії $D_{ab}(\mathbf{r},\mathbf{r}';t)$ атомів газу (чи молекул). Подібно, ядра переносу $\phi^{\nu\nu'}_{n_{\bar a} n_{\bar b}}(\mathbf{R},\mathbf{R}';t,t')$ описують динамічні дисипативні кореляції дифузійних потоків адсорбованих атомів у станах ν і ν' (адсорбційних центрах) на поверхні металу та визначають неоднорідний коефіцієнт дифузії $D^{\nu\nu'}_{\bar a\bar b}(\mathbf{R},\mathbf{R}';t)$ адсорбованих атомів на поверхні металу. Ядра переносу $\phi^{\nu}_{n_{\bar a} n_b}(\mathbf{R},\mathbf{r}';t,t')$, $\phi^{\nu'}_{n_a n_{\bar b}}(\mathbf{r},\mathbf{R}';t,t')$ описують дисипативні кореляції між потоками атомів газу й адсорбованими атомами на поверхні металу та визначають неоднорідний коефіцієнт взаємної дифузії $D^{\nu'}_{a\bar b}(\mathbf{r},\mathbf{R}';t)$ «атом газу–адсорбований атом». Дослідження цих коефіцієнтів дифузії в адсорбційних процесах дуже важливе. Ядра переносу $\phi^{\nu\mu}_{G_{\bar a\bar b} p}(\mathbf{R},\mathbf{R}';t,t')\left\{p = n,\bar n\right\}$ описують дисипативні кореляції потоків і густини адсорбованих атомів із потоками атомів, молекул та адсорбованих атомів. Функції пам’яті $\phi^{\nu\mu\nu'\mu'}_{G_{\bar a\bar b} G_{\bar a'\bar b}}(\mathbf{R},\mathbf{R}',\mathbf{R}'',\mathbf{R}''';t,t')$ описують дифузійно-реакційні процеси на поверхні металу між адсорбованими атомами. Вони — вищі функції пам’яті за динамічними змінними $G^{\nu\mu}_{\bar a\bar b}$. Отже, ми отримали узагальнені рівняння переносу (10)-(12) для середніх нерівноважних значень густин неадсорбованих і адсорбованих атомів для узгодженого опису атомних реакційно-дифузійних процесів у системі «газ–адсорбат–метал» у статистиці Рені. Для $q = 1$ ці рівняння співпадають із рівняннями реакційно-дифузійних процесів у статистиці Гіббса [48]. Як бачимо, ці рівняння є нелінійні та просторово неоднорідні, вони можуть описувати як сильно, так і слабо нерівноважні процеси в системі.

Література

[1] *Bak, P.* How nature works. The science of self-organized criticality / *P. Bak.* — Berlin: Springer, 1996. — 212 p.
[2] *Zubarev, D. N.* Nonequilibrium statistical thermodynamics / *D. N. Zubarev*. — New-York: Consultant Bureau, 1974. — 489 p.
[3] *Zubarev, D. N.* Statistical mechanics of nonequilibrium processes: 1. Basic concepts, kinetic theory / *D. N. Zubarev, V. G. Morozov, G. Röpke*. — Berlin: Alademie Verlag, 1996. — 270 p.
[4] *Зубарев, Д. Н.* Статистическая механика неравновесных процессов / *Д. Н. Зубарев, В. Г. Морозов, Г. Репке*. — Москва: Физматлит, 2002. — 432 с.
[5] *Башкиров, А. Г.* Функция распределения для подсистемы, испытывающей флуктуации температры / *А. Г. Башкиров, А. Д. Суханов* // ЖЭТФ. — 2002. — Т. 122, вып. 3(9). — С. 513-520.
[6] *Bashkirov, A. G.* On maximum entropy principle, superstatistics, power-law distribution and Renyi parameter / *A. G. Bashkirov* // Physica A. — 2004. — Vol. 340. — P. 153-162.
[7] *Bashkirov, A. G.* Maximum Renyi Entropy Principle for Systems with Power-Law Hamiltonians / *A. G. Bashkirov* // Phys. Rev. Lett. — 2004. — Vol. 93, No 13. — P. 130601:1-4.
[8] *Башкиров, А. Г.* Энтропия Реньи как статистическая энтропия сложных систем / *А. Г. Башкиров* // ТМФ. — 2006. — Т. 149, № 2. — С. 299-317.
[9] *Renyi, A*. Probability theory / *A. Renyi*. — Amsterdam: North-Holland, 1970.
[10] Selected papers by Alfred Renyi. Vol. 2; ed. *P. Turan*. — Budapest: Akademiai Kiado, 1976. — 662 p.
[11] *Beck, C.* Thermodynamics of chaotic systems / *C. Beck, F. Schlogl*. — Cambridge, Cambridge Univ. Press, 1993. — 308 p.
[12] *Климонтович, Ю. Л.* Статистическая теория открытых систем / *Ю. Л. Климонтович*. — Москва: ТОО «Янус», 1995. — 624 с.
[13] *Tsallis, C.* Possible generalization of boltzmann-gibbs statistics / *C. Tsallis* // J. Stat. Phys. — 1988. — Vol. 52, No 1-2. — P. 479-489.
[14] *Rajagopal, A. K.* Implications of form invariance to the structure of nonextensive entropies / *A. K. Rajagopal, S. Abe* // Phys. Rev. Lett. — 1999. — Vol. 83. — P. 1711-1714.
[15] *Abe, S.* Microcanonical foundation for systems with power-law distributions / *S. Abe, A. K. Rajagopal* // J. Phys. A. — 2000. — Vol. 33. — P. 8733-8739.
[16] *Lesche, B*. Renyi entropies and observables / *B. Lesche* // Phys. Rev. E. — 2004. — Vol. 70, No 1. — P. 017102:1-4.
[17] *Abe, S.* Stability of Tsallis entropy and instabilities of Renyi and normalized Tsallis entropies: A basis for q-exponential distributions / *S. Abe* // Phys. Rev. E. — 2002. — Vol. 66, No 4. — P. 046134:1-6.
[18] *Abe, S.* Necessity of q-expectation value in nonextensive statistical mechanics / *S. Abe, G. B. Bagci* // Phys. Rev. E. — 2005. — Vol. 71, No 1. — P. 016139:1-5.
[19] *Saguia, A.* Nonadditive entropy for random quantum spin-*S* chains / *A. Saguia, M. S. Sarandy* // Phys. Lett. A. — 2010. — Vol. 374. — P. 3384-3388.
[20] *Lutsko, J. F.* Is the Tsallis entropy stable? / *J. F. Lutsko, J. P. Boon, P. Grosfils* // Europhys. Lett. — 2009. — Vol. 86 — P. 40005:1-5.
[21] *Jizba, P.* Generalized statistics: yet another generalization / *P. Jizba, T. Arimitsu* // Physica A. — 2004. — Vol. 340. — P. 110-116.
[22] *Jizba, P.* The world according to Renyi: thermodynamics of multifractal systems / *P. Jizba, T. Arimitsu* // Ann. Phys. — 2004. — Vol. 312. — P. 17-59.
[23] *Masi, M.* A step beyond Tsallis and Renyi entropies / *M. Masi* // Phys. Lett. A. — 2005. — Vol. 338. — P. 217-224.
[24] Nonextensive statistical mechanics and its applications; ed. *S. Abe* and *Y. Okamoto*. — Heidelberg, Spriger-Verlag, 2001. — 272 p.

[25] Special issue of Physica A, ed. by *G. Kaniadakis*, *M. Lissia* and *A. Rapisarda*. — 2002. — Vol. 305, No 1, 2. — 350 p.
[26] Nonextensive entropy — interdisciplinary applications; ed. *M. Gell-Mann* and *C. Tsallis*. — New York: Oxford Univ. Press, 2004. — 440 p.
[27] Tsallis and Renyi entropies in fractional diffusion and entropy production / *C. Essex, C. Schulzky, A. Franz, K. H. Hoffmann* // Physica A. — 2000. — Vol. 284. — P. 299-308.
[28] *Arimitsu, T.* Analysis of fully developed turbulence in terms of Tsallis / *T. Arimitsu, N. Arimitsu* // Phys. Rev. E. — 2000. — Vol. 61, No 3. — P. 3227-3240.
[29] *Arimitsu, T.* Tsallis statistics and turbulence / *T. Arimitsu, N. Arimitsu* // Chaos, Solutions and Fractals. — 2002. — Vol. 13. — P. 479-489.
[30] *Bezerra, J. R.* Transport coefficients and nonextensive statistics / *J. R. Bezerra, R. Silva, J. A. S. Lima* // Physica A. — 2003. — Vol. 322. — P. 256-266.
[31] *Lima, J. A. S.* Plasma oscillations and nonextensive statistics / *J. A. S. Lima*, *R. Silva, J. Santos* // Phys. Rev. E. — 2000. — Vol. 61, No 3. — P. 3260-3263.
[32] *Kirchanov, V. S.* Using the Renyi entropy to describe quantum dissipative systems in statistical mechanics / *V. S. Kirchanov* // Teor. Math. Phys. — 2008. — Vol. 156, No 3. — P. 1347-1355.
[33] *Feng, Z-H.* Energy fluctuation and correlation in Tsallis statistics / *Z-H. Feng, L-Y. Liu* // Physica A. — 2010. — Vol. 389. — P. 237-241.
[34] *Boon, J. P.* Is nonextensive statistics applicable to continuous Hamiltonian systems? / *J. P. Boon, J. F. Lutsko*. — arXiv:1003.3592v1 [cond-mat. stat-mech], 2010. — 6 p.
[35] *Du, J. L.* A new form of Tsallis distribution based on the probabilistically independent postulate / *J. L. Du* // Chin. Phys. B. — 2010. — Vol. 19. — P. 070501:1-11.
[36] *Keshavarzi, E.* Quantum vibrational partition in the non-extensive Tsallis framework / *E. Keshavarzi, M. Sabzehzari, M. Eliasi* // Physica A. — 2010. — Vol. 389. — P. 2733-2738.
[37] *Hasegawa, H.* The interpolation approach to nonextensive quantum statistics / *H. Hasegawa* // Physica A. — 2010. — Vol. 389. — P. 2358-2375.
[38] *Du, J. L.* Nonextensivity in nonequilibrium plasma systems with Coulombian long-range interactions / *J. L. Du* // Phys. Lett. A. — 2004. — Vol. 329. — P. 262-267.
[39] *Du, J. L.* Jeans' criterion in nonextensive statistical mechanics / *J. L. Du* // Physica A. — 2004. — Vol. 335. — P. 107-114.
[40] *Ferri, G. L.* Tsallis' *q*-triplet and the ozone layer / *G. L. Ferri, M. F. R. Savio, A. Plastino* // Physica A. — 2010. — Vol. 389. — P. 1829-1833.
[41] *Brouers, F.* Burr, Levy, Tsallis / *F. Brouers, O. Sotolongo-Costa, K. Weron* // Physica A. — 2004. — Vol. 344. — P. 409-416.
[42] Intensity approximation of random fluctuation in complex systems / *R. M. Yulmetyev, F. M. Gafarov, D. G. Yulmetyeva, N. A. Emeljanova* // Physica A. — 2002. — Vol. 303. — P. 427-438.
[43] *Yulmetyev, R. M.* Dynamical Shannon entropy and information Tsallis entropy in complex systems / *R. M. Yulmetyev, N. A. Emeljanova, F. M. Gafarov* // Physica A. — 2004. — Vol. 341. — P. 649-676.
[44] *Parvan, A. S.* Extensive Renyi statistics from non-extensive entropy / *A. S. Parvan, T. S. Biro* // Phys. Lett. A. — 2005. — Vol. 340. — P. 375-387.
[45] *Parvan, A. S.* Renyi statistics in equilibrium statistical mechanics / *A. S. Parvan, T. S. Biro* // Phys. Lett. A (in press).
[46] *Figueiredo, A.* On the statistical interpretation of generalized entropies / *A. Figueiredo, M. A. Amato, M. T. R. Filho* // Physica A. — 2006. — Vol. 367. — P. 191-206.
[47] Nonequilibrium statistical operator method in the Renyi statistics / *B. Markiv, R. Tokarchuk, P. Kostrobij, M. Tokarchuk*. — arXiv:1008.4907v1[cond-vat.stat-mech], 2010. — 13 p.
[48] Реакційно-дифузійні процеси в системах «метал-газ» / *П. П. Костробій, М. В. Токарчук, Б. М. Маркович* та ін. — Львів, НУ «Львівська політехніка», 2009. — 208 с.

Zubarev nonequilibrium statistical operator in the Renyi statistics. Reaction-diffusion processes

Petro Kostrobii, Bohdan Markiv, Rostyslav Tokarchuk, Mykhajlo Tokarchuk

One of the approaches to formulation of extensive statistical mechanics of nonequilibrium processes based on the Zubarev nonequilibrium statistical operator method and the principle of Renyi entropy is proposed. The statistical approach of a consistent description of reaction-diffusion processes in the system «gas-adsorbate-metal» using the method of nonequilibrium statistical operator in the Renyi statistics is considered as an example.

Неравновесный статистический оператор Зубарева в статистике Ренъи. Реакционно-диффузионные процессы

Петр Костробий, Богдан Маркив, Ростислав Токарчук, Михаил Токарчук

Предложен один из подходов формулирования экстенсивной статистической механики неравновесных процессов на основании метода неравновесного статистического оператора Зубарева и принципа максимума энтропии Ренъи. В качестве примера рассмотрен статистический подход согласованного описания реакционно-диффузионных процессов в системе «газ-адсорбат-металл» с использованием метода неравновесного статистического оператора в статистике Ренъи.

Отримано 03.11.10