# Quantenmechanik II. Musterlösung 12.

---

*FS 11*

## 1. Entropie

Sei $f(x) = x \log x$, $(x \geq 0)$. Die Funktion $f$ ist konvex, $f(x) \leq 0$ für $0 \leq x \leq 1$ und $= 0$ nur für $x = 0, 1$. Zudem ist $f'(x) = 1 + \log x$.

i) Ein gemischter Zustand ist von der Form $P = \sum_i w_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ mit $\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \delta_{ij}$, $w_i \geq 0$, $\sum_i w_i = 1$ und folglich $w_i \leq 1$. Die Behauptung folgt aus $S(P) = -\sum_i w_i \log w_i$ und der Vorbemerkung.

ii) Eine Anwendung von (3) ist $(0 \leq \lambda \leq 1)$

$$\operatorname{tr} f(\lambda B_1 + (1-\lambda)B_2) \leq \lambda \operatorname{tr} f(B_1) + (1-\lambda) \operatorname{tr} f(B_2) \tag{5}$$

(falls $f$ strikt konvex: "=" nur $\lambda = 0, 1$ oder $B_1 = B_2$). Mit $A = \lambda B_1 + (1-\lambda)B_2$ ist nämlich

$$B_1 = A - (1-\lambda)(B_2 - B_1)\ , \qquad B_2 = A + \lambda(B_2 - B_1)\ ,$$

also

$$\begin{aligned}
\operatorname{tr} f(B_1) &\geq \operatorname{tr} f(A) - (1-\lambda) \operatorname{tr}[f'(A)(B_2 - B_1)]\ , \\
\operatorname{tr} f(B_2) &\geq \operatorname{tr} f(A) + \lambda \operatorname{tr}[f'(A)(B_2 - B_1)]\ .
\end{aligned}$$

Die gewichtete Summe davon ist (5). Der Spezialfall $f(x) = x \log x$ ist (2).

iii) Für den selben Fall halten wir noch (3) fest $(A, B \geq 0)$:

$$\operatorname{tr}(B \log B) \geq \operatorname{tr}(B \log A + B - A) \tag{6}$$

(= nur für $B = A$). Für $A = P$, $B = \tilde{P}$ folgt wegen $\operatorname{tr} \tilde{P} = \operatorname{tr} P$.

$$\operatorname{tr} \tilde{P} \log \tilde{P} \geq \operatorname{tr} \tilde{P} \log P \tag{7}$$

(= nur für $\tilde{P} = P$).

iv) Aus (7) folgt

$$\operatorname{tr}_{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2}(P \log P) \geq \operatorname{tr}_{\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2}(P \underbrace{\log(P_1 \otimes P_2)}_{(\log P_1) \otimes \mathbb{1} + \mathbb{1} \otimes (\log P_2)}) = \operatorname{tr}_{\mathcal{H}_1}(P_1 \log P_1) + \operatorname{tr}_{\mathcal{H}_2}(P_2 \log P_2)\ .$$

*Bemerkung zum Hinweis.* Sei $\{\psi_j\}$ eine o.n. Eigenbasis für $B$, $B|\psi_j\rangle = b_j|\psi_j\rangle$. Dann gilt für $\psi$ mit $\|\psi\| = 1$

$$\langle\psi|f(B)\psi\rangle = \sum_j |c_j|^2 f(b_j) \geq f\Big(\sum_j |c_j|^2 b_j\Big) = f(\langle\psi|B\psi\rangle)\ , \tag{8}$$

da $\sum_j |c_j|^2 = 1$ für $c_j = \langle\psi_j|\psi\rangle$. Durch nochmalige Anwendung der Konvexität ist

$$f(\langle\psi|B\psi\rangle) \geq f(\langle\psi|A\psi\rangle) + f'(\langle\psi|A\psi\rangle) \cdot \langle\psi|(B-A)\psi\rangle$$

und für einen Eigenvektor $\psi$ von $A$ ist die rechte Seite gleich

$$\langle \psi | [f(A) + f'(A) \cdot (B - A)] \psi \rangle \ . \tag{9}$$

Summation von (8, 9) über eine Eigenbasis von $A$ liefert (3).

**2. Das Gibbssche Variationsprinzip**

i) Aus (7) folgt

$$\operatorname{tr}(\tilde{P} \log \tilde{P}) \geq \operatorname{tr}(\tilde{P} \log P) = \operatorname{tr}\big(\tilde{P} \log P_\Delta(E)\big) - \big(\log \Sigma_\Delta(E)\big) \operatorname{tr} \tilde{P} = -\log \Sigma_\Delta(E) \ ,$$

wobei Gleichheit genau im Fall $\tilde{P} = P$ gilt. Die letzte Gleichung folgt aus $P_\Delta(E) \log P_\Delta(E) = 0$, denn

$$\operatorname{tr}\big(\tilde{P} \log P_\Delta(E)\big) = \operatorname{tr}\big(\tilde{P} P_\Delta(E) \log P_\Delta(E)\big) = 0 \ ;$$

sie gilt so übrigens auch für $P$ anstelle von $\tilde{P}$. Also ist $\operatorname{tr}(\tilde{P} \log \tilde{P}) \geq \operatorname{tr}(P \log P)$, bzw. $S(\tilde{P}) \leq S(P)$.

ii) Ist $\tilde{P}$ ein weiterer Zustand mit dem selben Energiemittelwert $\langle H \rangle = \operatorname{tr}(\tilde{P} H) = \operatorname{tr}(P H)$, so ist wiederum nach (7)

$$\begin{aligned}
\operatorname{tr}(\tilde{P} \log \tilde{P}) &\geq \operatorname{tr}(\tilde{P} \log P) \\
&= \operatorname{tr}(\tilde{P}(-\beta H - \log Z)) = \operatorname{tr}(P(-\beta H - \log Z)) \\
&= \operatorname{tr}(P \log P) \ ,
\end{aligned}$$

d.h. seine Entropie ist kleiner: $S(\tilde{P}) \leq S(P)$.

**3. Golden-Thompson Ungleichung**

Am einfachsten rechnet man in der Ortsbasis (wir lassen Vektorpfeile weg):

$$\operatorname{tr} \mathrm{e}^{-\beta\left(\frac{p^2}{2} + V\right)} = \int dx_1 \, \langle x_1 | \mathrm{e}^{-\beta\left(\frac{p^2}{2} + V\right)} | x_1 \rangle = \lim_{N \to \infty} \int dx_1 \, \langle x_1 | \left[ \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{N} \frac{p^2}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{N} V} \right]^N | x_1 \rangle \ ,$$

wobei wir die Trotter-Produkt-Formel benutzt haben. Durch Einfügen von $\mathbb{1} = \int dx_j \, |x_j\rangle\langle x_j|$ zwischen allen Faktoren ist dies gleich

$$\lim_{N \to \infty} \int dx_1 \ldots dx_N \, \langle x_1 | \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{N} \frac{p^2}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{N} V} | x_2 \rangle \, \langle x_2 | \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{N} \frac{p^2}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{N} V} | x_3 \rangle \ldots \langle x_N | \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{N} \frac{p^2}{2}} \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{N} V} | x_1 \rangle \ .$$

Mit der Konvention $x_{N+1} = x_1$ und mit $\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{N} V} |x\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{N} V(x)} |x\rangle$ bekommen wir also

$$\operatorname{tr} \mathrm{e}^{-\beta\left(\frac{p^2}{2} + V\right)} = \lim_{N \to \infty} \int dx_1 \ldots dx_N \prod_{j=1}^N \langle x_j | \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{N} \frac{p^2}{2}} | x_{j+1} \rangle \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{N} V(x_{j+1})} \ .$$

Aus der Konvexität von $\mathrm{e}^{-t}$ folgt nun

$$\prod_{j=1}^N \mathrm{e}^{-\frac{\beta}{N} V(x_{j+1})} = \mathrm{e}^{-\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \beta V(x_{j+1})} \leq \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \mathrm{e}^{-\beta V(x_{j+1})} \ ,$$

so dass

$$\begin{aligned}
\operatorname{tr} \mathrm{e}^{-\beta\left(\frac{p^2}{2}+V\right)} &\le \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} \int dx_1\ldots dx_N \prod_{j=1}^{N} \langle x_j|\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{N}\frac{p^2}{2}}|x_{j+1}\rangle\, \mathrm{e}^{-\beta V(x_k)} \\
&= \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} \int dx_k\, \langle x_k|\mathrm{e}^{-\beta\frac{p^2}{2}}|x_k\rangle \mathrm{e}^{-\beta V(x_k)} = \int dx\, \langle x|\mathrm{e}^{-\beta\frac{p^2}{2}}|x\rangle\, \mathrm{e}^{-\beta V(x)} \\
&= \frac{1}{(2\pi\hbar)^n}\int dx\, dp\, \mathrm{e}^{-\beta\left(\frac{p^2}{2}+V(x)\right)}\ ,
\end{aligned}$$

wobei im letzten Schritt Hinweis (4) benutzt wurde.

Für einen harmonischen Oszillator mit Hamiltonian $H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{\omega^2}{2}x^2$ gilt

$$\operatorname{tr} \mathrm{e}^{-\beta H} = \sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega(n+1/2)} = \frac{1}{2\sinh(\beta\hbar\omega/2)}\ ,$$

und

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\int dx\, dp\, \mathrm{e}^{-\beta H} = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dx \mathrm{e}^{-\beta\omega^2x^2/2}\int dp\, \mathrm{e}^{-\beta p^2/2} = \frac{1}{\beta\hbar\omega}\ .$$

Die Behauptung ist in diesem Fall direkt aus $\sinh x \ge x$, $(x \ge 0)$ ersichtlich.

*Bemerkungen zu den Hinweisen.* (1) Für Matrizen $A$, $B$ folgt der Hinweis aus $\|\mathrm{e}^{(A+B)/n} - \mathrm{e}^{A/n}\mathrm{e}^{B/n}\| = O(n^{-2})$, das seinerseits aus

$$\mathrm{e}^{(A+B)t}\mathrm{e}^{-Bt}\mathrm{e}^{-At} = 1 + \int_0^t ds\, \mathrm{e}^{(A+B)s}(\underbrace{A\mathrm{e}^{-Bs} - \mathrm{e}^{-Bs}A}_{O(s)})\mathrm{e}^{-As} = 1 + O(t^2)\ , \qquad (t\to 0)$$

folgt. (2) folgt aus $\langle x|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-n/2}\mathrm{e}^{\mathrm{i}px}$.