Quantenmechanik II. Übung 12.

FS 11 *Abgabe:* Di 24. Mai 2011

1. Entropie

Die **Entropie** eines gemischten Zustands P ist

$$S(P) = -k\,\mathrm{tr}(P\log P) \tag{1}$$

mit k der Boltzmann-Konstanten. Zeige folgende Eigenschaften:

i) $S(P) \geq 0$, und $= 0$ nur für reine Zustände $P = |\psi\rangle\langle\psi|$.

ii) S ist strikt konkav in P, d.h. die Entropie nimmt zu bei Mischung zweier Zustände: Für $P = \lambda P_1 + (1-\lambda)P_2$, $0 \leq \lambda \leq 1$ ($P_{1,2}$: Zustände) gilt

$$S(P) \geq \lambda S(P_1) + (1-\lambda)S(P_2) \tag{2}$$

mit "$=$" nur für $\lambda = 0, 1$ oder $P_1 = P_2$.

iii) Die **relative Entropie** zweier Zustände ist $S(P|\tilde{P}) := -k\,\mathrm{tr}(\tilde{P}(\log P - \log\tilde{P}))$. Zeige $S(P|\tilde{P}) \geq 0$ mit "$=$" nur für $P = \tilde{P}$.

iv) Trennungssatz: Sei P ein Zustand auf dem Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ eines zusammengesetzen Systems "1+2". Die partiellen Spuren

$$P_1 = \mathrm{tr}_{\mathcal{H}_2} P\,, \qquad P_2 = \mathrm{tr}_{\mathcal{H}_1} P$$

($\mathrm{tr}_{\mathcal{H}_2} P$ ist ein Operator auf $\mathcal{H}_1$ definiert durch

$$\mathrm{tr}_{\mathcal{H}_1}(A \cdot \mathrm{tr}_{\mathcal{H}_2} P) = \mathrm{tr}_{\mathcal{H}_1\otimes\mathcal{H}_2}((A \otimes \mathbb{1})P)$$

für alle Operatoren A auf $\mathcal{H}_1$) sind Zustände auf $\mathcal{H}_1$ bzw. $\mathcal{H}_2$. Es gilt

$$S(P) \leq S(P_1) + S(P_2)$$

mit "$=$" genau dann, falls P_1 und P_2 unkorreliert sind, d.h. falls $P = P_1 \otimes P_2$.

Hinweis für (ii-iv): Allgemein, für eine konvexe Funktion $f : D \to \mathbb{R}$ und selbstadjungierte Operatoren A, B mit Spektrum in $D \subset \mathbb{R}$, gilt die Kleinsche Ungleichung:

$$\mathrm{tr}\, f(B) \geq \mathrm{tr}\big(f(A) + f'(A)\cdot(B - A)\big) \tag{3}$$

(falls f strikt konvex: "$=$" nur für $B = A$). Spezialisiere die Gleichung auf $f(x) = x\log x$.

2. Das Gibbssche Variationsprinzip

i) Die mikrokanonische Gesamtheit ist der gemischte Zustand

$$P = \frac{P_\Delta(E)}{\Sigma_\Delta(E)}\,, \qquad (\Sigma_\Delta(E) = \mathrm{tr}\, P_\Delta(E))\,,$$

wo $P_\Delta(E)$ der Projektor auf die Eigenvektoren des Hamiltonoperators H mit Eigenwerten in $[E, E+\Delta]$ ist. Zeige, dass P unter allen Zuständen $\tilde{P}$ mit

$$\tilde{P} P_\Delta(E) = \tilde{P}$$

die grösste Entropie hat.

ii) Zeige, dass die kanonische Gesamtheit

$$P = \frac{1}{Z(\beta)} \mathrm{e}^{-\beta H} , \qquad (Z(\beta) = \operatorname{tr} \mathrm{e}^{-\beta H}) .$$

die grösste Entropie hat unter allen Zuständen $\tilde{P}$ mit festem Erwartungswert $\langle H \rangle = \operatorname{tr}(H\tilde{P})$.

Hinweis: Aufgabe 1(iii).

3. Golden-Thompson Ungleichung

Betrachte ein mechanisches System mit Hamiltonfunktion, bzw. -Operator

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2} + V(\vec{x}) , \qquad (\vec{x} \in \mathbb{R}^n)$$

sowohl klassisch als auch quantenmechanisch. Zeige, dass für die entsprechenden kanonischen Zustandssummen gilt:

$$\operatorname{tr}\Big(e^{-\beta(\frac{\vec{p}^2}{2}+V)}\Big) \leq \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int d^n x d^n p \, \mathrm{e}^{-\beta(\frac{\vec{p}^2}{2}+V(\vec{x}))} \tag{4}$$

(man nehme an, dass die rechte Seite endlich sei, z.B. $V(\vec{x})$ nach unten beschränkt und $V(\vec{x}) \to \infty$ für $|\vec{x}| \to \infty$).

Hinweise:

(1) Trotter-Produkt-Formel: $\mathrm{e}^{A+B} = \lim_{N\to\infty} \big(\mathrm{e}^{\frac{A}{N}} e^{\frac{B}{N}}\big)^N$ für $A = A^*$, $B = B^*$.

(2) $\langle \vec{x} \big| \mathrm{e}^{-\beta\frac{\vec{p}^2}{2}} \big| \vec{x} \rangle = (2\pi\hbar)^{-n} \int d^n p \, \mathrm{e}^{-\beta\frac{\vec{p}^2}{2}}$.

(3) $t \mapsto \mathrm{e}^{-t}$ ist eine konvexe Funktion.

Als Beispiel vergleiche die beiden Zustandssummen für den harmonischen Oszillator, s. QMI, und verifiziere die Ungleichung (4) direkt.