Eine Bemerkung über die Entropie in der Wellenmechanik

Autor(en): **Jost, Res**

Objekttyp: **Article**

Zeitschrift: **Helvetica Physica Acta**

Band (Jahr): **20 (1947)**

Heft VI

PDF erstellt am: **10.08.2024**

Persistenter Link: https://doi.org/10.5169/seals-111815

Eine Bemerkung über die Entropie in der Wellenmechanik

von **Res Jost** (ETH. Zürich).

(9. IX. 1947.)

Die Entropie eines Ensembles mit der Dichtematrix P ist definiert als[1])

$$S = -\text{ Spur } P \log P.$$

Dabei ist P eine positive hermitische Matrix, deren Spur gleich 1 ist.

Vereinigt man zwei Ensembles P_1 und P_2 mit den nicht verschwindenden Gewichten α_1 und α_2 $(\alpha_1 + \alpha_2 = 1)$ zu einem neuen Ensemble $P = \alpha_1 P_1 + \alpha_2 P_2$, so gilt für die resp. Entropieen S_1, S_2 und S die bekannte Ungleichung

$$S \geqq \alpha_1 S_1 + \alpha_2 S_2$$

Das Gleichheitszeichen gilt genau dann, wenn $P_1 = P_2$ ist.

Weniger bekannt scheint zu sein, dass man für S in einfacher Weise auch eine obere Schranke gewinnen kann. Es gilt nämlich:

$$S \leqq \alpha_1 S_1 + \alpha_2 S_2 - \alpha_1 \log \alpha_1 - \alpha_2 \log \alpha_2 \tag{I}$$

wobei das Gleichheitszeichen genau dann gilt, wenn $P_1 P_2 = 0$ ist. In dieser Note wird ein Beweis für die Ungleichung (I) gegeben. Da sich (I) unmittelbar auf die Vereinigung beliebig vieler Ensembles verallgemeinern lässt, genügt es, den Beweis für den Fall auszuführen, in welchem P_2 ein reiner Fall ist ($P_2^2 = P_2$, $S_2 = 0$).

Zum Beweis haben wir den folgenden Hilfssatz nötig:

Hilfssatz: Die Funktion $s(x_0, x_1, \ldots x_n) = -\sum_{k=0}^{n} x_k \log x_k$ mit $0 \leqq x_k \leqq 1$ ist symmetrisch und lässt sich daher als Funktion der symmetrischen Elementarfunktionen

$$\sigma_1 = \sum x_k, \quad \sigma_2 = \sum_{k<l} x_k x_l, \quad \sigma_3 = \sum_{k<l<m} x_k x_l x_m, \ldots$$

auffassen. Sie ist, so betrachtet, bei konstantem σ_1 monoton zunehmend in $\sigma_2, \sigma_3 \ldots \sigma_{n+1}$.

---

[1]) Z. B. W. Pauli, Handbuch der Physik, Bd. 24/1, S. 151. Wir haben die Boltzmann'sche Konstante 1 gesetzt.

Wir zeigen dies dadurch, dass wir beweisen $\frac{\partial s}{\partial \sigma_k} > 0$ für $k = 2$, $3, \ldots (n+1)$. Es sei

$$f(x) = \prod_{k=0}^{n} (x - x_k) = x^{n+1} - \sigma_1 x^n + \sigma_2 x^{n-1} \ldots + (-1)^{n+1} \sigma_{n+1}$$

das Polynom mit den Nullstellen $x_0, x_1, \ldots x_n$. Leitet man $f(x_0) = 0$ nach σ_k ab, so erhält man[1]:

$$\frac{\partial}{\partial \sigma_k} f(x_0) = f'(x_0) \cdot \frac{\partial x_0}{\partial \sigma_k} + (-1)^k \cdot x_0^{n+1-k}.$$

Wegen $f'(x_0) = (x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \ldots (x_0 - x_n)$ also

$$\frac{\partial x_0}{\partial \sigma_k} = -(-1)^k \frac{x_0^{n-k+1}}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \ldots (x_0 - x_n)}.$$

Damit wird

$$\frac{\partial s}{\partial \sigma_k} = (-1)^k \sum_{\nu=1}^{n} \frac{x_\nu^{n+1-k}(1 + \log x_\nu)}{(x_\nu - x_0) \ldots (x_\nu - x_{\nu-1})(x_\nu - x_{\nu+1}) \ldots (x_\nu - x_n)}.$$

Nun gilt nach einer Verallgemeinerung des Mittelwertsatzes der Differentialrechnung[2]) für die rechte Seite

$$\frac{\partial s}{\partial \sigma_k} = (-1)^k \cdot \frac{1}{n!} \left[\frac{d^n}{d x^n} x^{n+1-k} (1 + \log x) \right]_{x=\xi}$$

wo $\text{Min}(x_0, \ldots x_n) < \xi < \text{Max}(x_0, \ldots x_n)$. Führt man die Differentiation aus, so ergibt sich:

$$\frac{\partial s}{\partial \sigma_k} = \frac{(n+1-k)!}{n!} \frac{1}{\xi^{k-1}} > \frac{(n-k+1)!}{n!} > 0 \text{ für } k = 2, 3, \ldots \tag{1}$$

damit ist der Hilfssatz bewiesen.

Im weiteren beziehen wir uns auf eine Darstellung, in welcher P_1 und damit $\Omega_1 = \alpha_1 P_1$ diagonal sind. Die Eigenwerte von Ω_1 mögen $r_1, r_2, \ldots$ heissen. In diesem Koordinatensystem sind P_2 und damit $\Omega_2 = \alpha_2 P_2$ im allgemeinen nicht diagonal, sondern von der Gestalt $\| a_m^* a_n \|$. Schliesslich bezeichnen wir die Eigenwerte von $P = \Omega_1 + \Omega_2$ mit $x_1, x_2, \ldots$. Es ist weiter zweckmässig, $r_0 = \alpha_2$ und $x_0 = 0$ zu setzen. Dann schreibt sich nämlich die Ungleichung (I) (für $S_2 = 0$) in der Form:

$$-\sum_{k=0}^{\infty} x_k \log x_k \leqq -\sum_{k=0}^{\infty} r_k \log r_k. \tag{2}$$

---

[1]) Die folgende Überlegung gilt nur, wenn die x_k alle verschieden sind und nicht verschwinden. Doch gilt das Schlussresultat (1) aus Stetigkeitsgründen allgemein.

[2]) Vgl. z. B. G. Polya und G. Szegö, Aufgaben und Lehrsätze aus der Analysis, Bd. I, S. 54, Aufgabe 97.

Dieser Bezeichnung entsprechend verstehen wir in der Zukunft unter den Matrizen Ω_1, Ω_2 und P diejenigen, die aus den ursprünglichen Matrizen Ω_1, Ω_2 und P durch Hinzufügen einer nullten Zeile und Spalte aus lauter Nullen entstehen. Wir setzen auch $a_0 = 0$.

Um unseren Hilfssatz, der sich auf eine endliche Zahl von Variabeln bezieht, anwenden zu können, approximieren wir Ω_2 durch Matrizen derselben Spur, die nur endlich viele nicht verschwindende Elemente besitzen:

$$(m \mid \Omega_2 (N) \mid n) = a_m^* (N)\, a_n(N)$$

mit

$$a_0 (N) = \sqrt{\sum_{\nu=N+1}^{\infty} |a_\nu|^2},$$

$$a_n (N) = a_n \text{ für } n = 1, 2, \ldots N$$

$$a_n (N) = 0 \quad \text{für } n = N+1, N+2, \ldots$$

Entsprechend setzen wir $P(N) = \Omega_1 + \Omega_2 (N)$ und bezeichnen die zugehörigen Eigenwerte mit $x_0(N)$, $x_1 (N)$, ...

Nun behaupte ich, dass die Folge

$$S (N) = - \sum_{k=0}^{\infty} x_k (N) \log x_k (N)$$

monoton nicht abnimmt. Da $x_k(0) = r_k$ und $\lim\limits_{N \to \infty} x_k (N) = x_k$ ist in dieser Behauptung die Ungleichung (2) enthalten.

Zeigen wir also, dass $S (N) \geqq S (N + 1)$. Die Matrizen $P (N)$ und $P (N + 1)$ stimmen nur in den ersten $N + 2$ — reihigen Unterkasten nicht überein. Diese Unterkasten werden mit $P' (N)$ und $P' (N + 1)$ bezeichnet. Ihre Eigenwerte sind die $N + 2$ ersten Eigenwerte der ungestrichenen Matrizen. Es bleibt nur zu zeigen:

$$s (N) = - \sum_{k=0}^{N+1} x_k (N) \log x_k (N) \geqq s (N + 1) =$$
$$- \sum_{k=0}^{N+1} x_k (N + 1) \log x_k (N + 1). \tag{3}$$

Das geschieht auf Grund des Hilfssatzes. Es seien $\sigma_k (N)$ und $\sigma_k (N + 1)$ die symmetrischen Elementarfunktionen der Eigenwerte von $P'(N)$ und $P'(N + 1)$. Es gilt z. B.

$$\sigma_k (N) = \Sigma\, k \text{ reihigen Hauptminoren von } P' (N)$$

Durch Auswerten der Determinanten nach bekannten Regeln[1]) ergibt sich

$$\sigma_1(N) - \sigma_1(N+1) = 0$$

$$\sigma_2(N) - \sigma_2(N+1) = r_{N+1} \, |a_{N+1}|^2 \geqq 0$$

$$\sigma_3(N) - \sigma_3(N+1) = r_{N+1} \sum_{k=1}^{N} r_k \, (|a_k|^2 + |a_{N+1}|^2) \geqq 0$$

$$\sigma_4(N) - \sigma_4(N+1) = r_{N+1} \sum_{0<k<l<N+1} r_k r_l \, (|a_k|^2 + |a_l|^2 + |a_{N+1}|^2) \geqq 0$$

. . . .

woraus nach dem Hilfssatz (3) folgt. Weiter erkennt man, dass die $S(N)$ nur dann alle übereinstimmen, wenn für jedes k gilt $r_k \, |a_k|^2 = 0$. Das ist aber gleichbedeutend mit $P_1 P_2 = 0$. Damit ist der Beweis der Ungleichung (I) erbracht.

Ich danke Herrn Prof. FIERZ dafür, dass er mich auf diese Ungleichung aufmerksam gemacht hat.

---

[1]) Vgl. z. B. A. C. AITKEN, Determinants and Matrices (University Mathematical Texts), S. 87, § 37.