

# 数学物理方法小班讲义

快雪时晴

兰州大学物理科学与技术学院

2025 年 10 月 26 日

# 前言

主要参考书是杨孔庆老师的《数学物理方法》[?]。请访问 [这里](#) 以获取本文档 Tex 源文件。

本文档遵循 **CC0 1.0 公共领域贡献协议 (CC0 1.0 Universal, Public Domain Dedication)**，读者可以自由复制、修改、分发、引用本文档内容而无需征得作者许可。详细协议内容请参见 <https://creativecommons.org/publicdomain/zero/1.0/>。

# 目录



# 第 1 章 $\mathbb{R}^3$ 空间的向量分析

## 1.1 向量分析基本知识

### 1.1.1 爱因斯坦求和约定

爱因斯坦求和约定就是说，在同一代数项中见到两个重复指标  $i$  就自动进行求和（除非特别指出该重复指标不求和），我们称求和指标  $i$  为“哑标”。

比如， $\mathbb{R}^3$  空间中的向量  $\vec{A} \in \mathbb{R}^3$  在直角坐标下可表示为

$$\vec{A} = A_1 \vec{e}_1 + A_2 \vec{e}_2 + A_3 \vec{e}_3 \equiv \sum_i A_i \vec{e}_i, \quad (1.1)$$

其中， $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$  分别是  $x, y, z$  轴正方向上的单位向量。

可利用爱因斯坦求和约定将  $\vec{A} \in \mathbb{R}^3$  简写为

$$\vec{A} = \sum_i A_i \vec{e}_i \rightarrow \vec{A} = A_i \vec{e}_i, \quad (1.2)$$

这样就省去了写求和符号  $\sum_i$  的工作。

### 1.1.2 Kronecher delta 符号 $\delta_{ij}$

$$\delta_{ij} \equiv \begin{cases} 1 & , i = j \\ 0 & , i \neq j \end{cases}. \quad (1.3)$$

### 1.1.3 三阶 Levi-Citita 符号 $\varepsilon_{ijk}$

$$\varepsilon_{ijk} \equiv \begin{cases} 1 & , ijk = 123, 231, 312, \text{即相邻两指标经过偶次对换能还原到} 123 \\ -1 & , ijk = 132, 213, 321, \text{即相邻两指标经过奇次对换能还原到} 123 \\ 0 & , ijk \text{中有相同指标} \end{cases}. \quad (1.4)$$

可以利用  $\varepsilon_{ijk}$  表示任何一个三阶行列式:

$$\begin{vmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{vmatrix} = \varepsilon_{ijk} a_i b_j c_k. \quad (1.5)$$

### 1.1.4 一些简单算例

例 1.1. 一些简单算例

- $\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij},$
- $\vec{e}_i \times \vec{e}_j = \varepsilon_{ijk} \vec{e}_k,$
- $A_i \delta_{ij} = A_j,$
- $\vec{A} \cdot \vec{B} = A_i B_i,$

证明.

$$\vec{A} \cdot \vec{B} = (A_i \vec{e}_i) \cdot (B_j \vec{e}_j) = A_i B_j \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = A_i B_j \delta_{ij} = A_i B_i \quad (1.6)$$

□

- $\vec{A} \times \vec{B} = \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i A_j B_k,$

证明.

$$\vec{A} \times \vec{B} = \begin{vmatrix} \vec{e}_1 & \vec{e}_2 & \vec{e}_3 \\ A_1 & A_2 & A_3 \\ B_1 & B_2 & B_3 \end{vmatrix} = \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i A_j B_k \quad (1.7)$$

□

### 1.1.5 $\nabla$ 算子

$\nabla$  算子 (nabla 算子, 或 del 算子) 定义为

$$\nabla \equiv \vec{e}_i \partial_i, \quad (1.8)$$

其中,  $\partial_i$  的定义为

$$\partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial x_i}. \quad (1.9)$$

### 1.1.6 标量场的梯度、方向导数、梯度定理

#### 1.1.6.1 标量场梯度的定义

设  $\psi(\vec{x})$  是标量场,  $\psi(\vec{x})$  的梯度, 记为  $\text{grad } \psi(\vec{x})$ , 由下式定义

$$\text{grad } \psi(\vec{x}) \cdot d\vec{x} = d\psi(\vec{x}), \quad (1.10)$$

其中,  $d\vec{x}$  是位矢  $\vec{x}$  的任意微小变化,  $d\psi(\vec{x})$  是标量场  $\psi(\vec{x})$  因位矢  $\vec{x}$  变化  $d\vec{x}$  而引起的相应的变化。具体来说,  $d\psi(\vec{x})$  的定义为

$$d\psi(\vec{x}) \equiv \psi(\vec{x} + d\vec{x}) - \psi(\vec{x}). \quad (1.11)$$

可以证明, 标量场的梯度  $\text{grad } \psi(\vec{x})$  可以用  $\nabla$  算子表达为

$$\text{grad } \psi(\vec{x}) = \nabla \psi(\vec{x}). \quad (1.12)$$

为了书写方便, 以后就用  $\nabla \psi(\vec{x})$  指代标量场  $\psi(\vec{x})$  的梯度。

#### 1.1.6.2 方向导数的定义

标量场  $\psi$  在  $\vec{x}$  点处沿  $\vec{v}$  方向的方向导数, 记为  $\left. \frac{\partial \psi(\vec{x})}{\partial l} \right|_{\vec{v}}$ , 定义为

$$\left. \frac{\partial \psi(\vec{x})}{\partial l} \right|_{\vec{v}} \equiv \lim_{t \rightarrow 0^+} \frac{\psi(\vec{x} + t\vec{v}) - \psi(\vec{x})}{tv}. \quad (1.13)$$

从方向导数的定义可以看出, 方向导数描述的是标量场沿某一方向变化的快慢。

特别地, 标量场  $\psi$  在曲面  $\Sigma$  上的  $\vec{x}$  点处沿曲面上  $\vec{x}$  点的外法向的方向导数简记为  $\left. \frac{\partial \psi(\vec{x})}{\partial n} \right|_{\Sigma}$ .

#### 1.1.6.3 标量场梯度与方向导数的关系

标量场的梯度的定义:

$$\nabla \psi(\vec{x}) \cdot d\vec{x} = d\psi(\vec{x}), \quad (1.14)$$

设  $d\vec{x} = \vec{n}dx$ , 其中  $\vec{n}$  是与  $d\vec{x}$  同向的单位向量, 则有

$$[\nabla \psi(\vec{x})] \cdot \vec{n}dx = d\psi(\vec{x}), \quad (1.15)$$

即

$$[\nabla \psi(\vec{x})] \cdot \vec{n} = \frac{d\psi(\vec{x})}{dx} = \frac{\psi(\vec{x} + d\vec{x}) - \psi(\vec{x})}{dx} = \left. \frac{\partial \psi(\vec{x})}{\partial l} \right|_{\vec{n}}. \quad (1.16)$$

这就是说, 标量场  $\psi(\vec{x})$  的梯度  $\nabla\psi(\vec{x})$  在某一方向  $\vec{n}$  上的投影  $[\nabla\psi(\vec{x})] \cdot \vec{n}$  恰等于标量场沿这一方向  $\vec{n}$  的方向导数  $\left. \frac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial l} \right|_{\vec{n}}$ .

#### 1.1.6.4 标量场梯度的意义

考虑标量场梯度与方向导数的关系

$$[\nabla\psi(\vec{x})] \cdot \vec{n} = \left. \frac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial l} \right|_{\vec{n}}, \quad (1.17)$$

有:

$$\left. \frac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial l} \right|_{\vec{n}} = [\nabla\psi(\vec{x})] \cdot \vec{n} = |\nabla\psi(\vec{x})| |\vec{n}| \cos \langle \nabla\psi(\vec{x}), \vec{n} \rangle = |\nabla\psi(\vec{x})| \cos \langle \nabla\psi(\vec{x}), \vec{n} \rangle, \quad (1.18)$$

上式中,  $\vec{n}$  为方向任意的单位向量。

对于确定的场点  $\vec{x}$ ,  $\psi(\vec{x})$  和  $\nabla\psi(\vec{x})$  也是确定的, 则  $|\nabla\psi(\vec{x})|$  是确定的。

现在我们想看看  $\psi(\vec{x})$  沿哪个方向的变化速度最快, 也就是看  $\psi(\vec{x})$  在哪个方向上的方向导数最大。

显然, 在固定场点  $\vec{x}$  的情况下, 当  $\vec{n}$  与  $\nabla\psi(\vec{x})$  同向时, 也即  $\vec{n} = \nabla\psi(\vec{x})/|\nabla\psi(\vec{x})|$  时,  $\psi(\vec{x})$  在  $\vec{n}$  方向上的方向导数  $\left. \frac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial l} \right|_{\vec{n}}$  最大, 这个最大的方向导数为

$$\left. \frac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial l} \right|_{\vec{n}=\nabla\psi(\vec{x})/|\nabla\psi(\vec{x})|} = |\nabla\psi(\vec{x})| \cos \langle \nabla\psi(\vec{x}), \vec{n} \rangle = |\nabla\psi(\vec{x})|.$$

也就是说, 标量场  $\psi(\vec{x})$  的梯度  $\nabla\psi(\vec{x})$  的方向就是标量场  $\psi(\vec{x})$  方向导数最大的方向; 标量场梯度  $\nabla\psi(\vec{x})$  的大小  $|\nabla\psi(\vec{x})|$  就是最大方向导数。

#### 1.1.6.5 梯度定理

**定理 1.1.** 设  $\psi(\vec{x})$  是标量场,  $C$  是连结  $\vec{p}, \vec{q} \in \mathbb{R}^3$  的任一曲线, 则有

$$\psi(\vec{p}) - \psi(\vec{q}) = \int_{\vec{x} \in C[\vec{q} \rightarrow \vec{p}]} \nabla\psi(\vec{x}) \cdot d\vec{x}. \quad (1.19)$$

证明思路也很简单, 把曲线  $C$  分成很多小的有向线元, 对每一段有向线元都使用梯度的定义, 最后把结果加起来就得证。

### 1.1.7 矢量场的散度、高斯定理

#### 1.1.7.1 矢量场散度的定义

矢量场  $\vec{A}$  的散度, 记为  $\operatorname{div} \vec{A}$ , 定义为



$$\operatorname{div} \vec{A} \equiv \lim_{V \rightarrow 0^+} \frac{1}{V} \oint_{\partial V^+} \vec{A} \cdot d\vec{S}. \quad (1.20)$$

可以证明, 矢量场  $\vec{A}$  的散度  $\operatorname{div} \vec{A}$  可以用  $\nabla$  算子表达为

$$\operatorname{div} \vec{A} = \nabla \cdot \vec{A} \quad (1.21)$$

为了书写方便, 以后就用  $\nabla \cdot \vec{A}$  指代矢量场  $\vec{A}$  的散度。

### 1.1.7.2 高斯定理

**定理 1.2.** 设  $\vec{A}(\vec{x})$  是矢量场,  $V$  是  $\mathbb{R}^3$  中的封闭体, 则有

$$\oint_{\partial V^+} \vec{A} \cdot d\vec{S} = \int_V (\nabla \cdot \vec{A}) dV. \quad (1.22)$$

证明的思路也很简单, 把区域  $V$  分成很多小体积元, 对每个体积元都使用矢量场散度的定义, 最后把结果加起来就得证。

## 1.1.8 矢量场的旋度、斯托克斯定理

### 1.1.8.1 矢量场的旋度

矢量场  $\vec{A}$  的旋度, 记为  $\operatorname{curl} \vec{A}$ , 由下式定义:

$$(\operatorname{curl} \vec{A}) \cdot \vec{n} = \lim_{\sigma \rightarrow 0^+} \frac{1}{\sigma} \oint_{\partial \sigma^+} \vec{A} \cdot d\vec{l}, \quad (1.23)$$

其中,  $\sigma$  是与  $\vec{n}$  垂直的面元。  $\vec{n}$  与  $\partial \sigma$  的正绕行方向满足右手定则。

可以证明, 矢量场  $\vec{A}$  的旋度  $\operatorname{curl} \vec{A}$  可以用  $\nabla$  算子表达为

$$\operatorname{curl} \vec{A} = \nabla \times \vec{A}. \quad (1.24)$$

为了书写方便, 以后就用  $\nabla \times \vec{A}$  指代矢量场  $\vec{A}$  的旋度。

### 1.1.8.2 斯托克斯定理

**定理 1.3.** 设  $\vec{A}(\vec{x})$  是矢量场,  $\Sigma$  是  $\mathbb{R}^3$  中的封闭曲面, 则有

$$\oint_{\partial \Sigma^+} \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int_{\Sigma} (\nabla \times \vec{A}) \cdot d\vec{S}, \quad (1.25)$$

其中, 曲面  $\Sigma$  的取向与  $\partial \Sigma$  的正绕行方向满足右手定则。

证明的思路也很简单, 把曲面  $\Sigma$  分成很多小面元, 对每个面元都使用矢量场旋度的定义, 最后把结果加起来就得证。

## 1.2 向量分析常用公式

### 1.2.1 分析工具

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij} \\ \vec{e}_i \times \vec{e}_j = \varepsilon_{ijk} \vec{e}_k \\ \vec{A} = A_i \vec{e}_i \\ A_i \delta_{ij} = A_j \\ \vec{A} \cdot \vec{B} = A_i B_i \\ \vec{A} \times \vec{B} = \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i A_j B_k \\ (\vec{A} \times \vec{B})_l = \varepsilon_{ljk} A_j B_k \\ \nabla = \vec{e}_i \partial_i \\ \nabla \cdot \vec{A} = \partial_i A_i \\ \nabla \times \vec{A} = \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i \partial_j A_k \\ \partial_i \psi = (\nabla \psi)_i \\ \nabla^2 \equiv \nabla \cdot \nabla = \partial_i \partial_i \\ \nabla^2 \psi \equiv \nabla \cdot (\nabla \psi) = \partial_i \partial_i \psi \\ \nabla^2 \vec{A} \equiv (\nabla^2 A_i) \vec{e}_i \\ \varepsilon_{ijk} = \varepsilon_{jki} = \varepsilon_{kij} \\ \varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl} \\ \partial_i x_j = \delta_{ij} \end{array} \right. \quad (1.26)$$

### 1.2.2 $\mathbb{R}^3$ 空间重要微分恒等式及其证明

#### 1.2.2.1 与 $\vec{x}$ 有关的公式

例 1.2.

$$\nabla \cdot \vec{x} = 3. \quad (1.27)$$

证明.

$$\nabla \cdot \vec{x} = \partial_i x_i = \delta_{ii} = 3. \quad (1.28)$$

□

**例 1.3.**

$$\nabla \times \vec{x} = \vec{0}. \quad (1.29)$$

证明.

$$\nabla \times \vec{x} = \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i \partial_j x_k = \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i \delta_{jk} = \varepsilon_{ikk} \vec{e}_i = \vec{0}. \quad (1.30)$$

□

**1.2.2.2 从左往右证的公式****例 1.4.**

$$\nabla(\varphi\psi) = \varphi\nabla\psi + \psi\nabla\varphi. \quad (1.31)$$

证明.

$$\begin{aligned} \nabla(\varphi\psi) &= \vec{e}_i \partial_i (\varphi\psi) \\ &= \vec{e}_i \varphi \partial_i \psi + \vec{e}_i \psi \partial_i \varphi \\ &= \varphi \vec{e}_i \partial_i \psi + \psi \vec{e}_i \partial_i \varphi \\ &= \varphi \nabla \psi + \psi \nabla \varphi. \end{aligned} \quad (1.32)$$

□

**例 1.5.**

$$\nabla \cdot (\varphi \vec{A}) = \vec{A} \cdot (\nabla \varphi) + \varphi \nabla \cdot \vec{A}. \quad (1.33)$$

证明.

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\varphi \vec{A}) &= \partial_i (\varphi \vec{A})_i \\ &= \partial_i (\varphi A_i) \\ &= A_i \partial_i \varphi + \varphi \partial_i A_i \\ &= (\vec{A} \cdot \nabla) \varphi + \varphi \nabla \cdot \vec{A}. \end{aligned} \quad (1.34)$$

□

**例 1.6.**

$$\nabla \times (\varphi \vec{A}) = (\nabla \varphi) \times \vec{A} + \varphi \nabla \times \vec{A}. \quad (1.35)$$

证明.

$$\begin{aligned}
 \nabla \times (\varphi \vec{A}) &= \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i \partial_j (\varphi \vec{A})_k \\
 &= \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i \partial_j (\varphi A_k) \\
 &= \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i (A_k \partial_j \varphi + \varphi \partial_j A_k) \\
 &= \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i (\nabla \varphi)_j A_k + \varphi \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i \partial_j A_k \\
 &= (\nabla \varphi) \times \vec{A} + \varphi \nabla \times \vec{A}.
 \end{aligned} \tag{1.36}$$

□

例 1.7.

$$\nabla \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) = \vec{B} \cdot (\nabla \times \vec{A}) - \vec{A} \cdot (\nabla \times \vec{B}). \tag{1.37}$$

证明.

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot (\vec{A} \times \vec{B}) &= \partial_i (\vec{A} \times \vec{B})_i \\
 &= \partial_i (\varepsilon_{ijk} A_j B_k) \\
 &= \varepsilon_{ijk} \partial_i (A_j B_k) \\
 &= \varepsilon_{ijk} B_k \partial_i A_j + \varepsilon_{ijk} A_j \partial_i B_k \\
 &= B_k \varepsilon_{kij} \partial_i A_j - A_j \varepsilon_{jik} \partial_i B_k \\
 &= B_k (\nabla \times \vec{A})_k - A_j (\nabla \times \vec{B})_j \\
 &= \vec{B} \cdot (\nabla \times \vec{A}) - \vec{A} \cdot (\nabla \times \vec{B}).
 \end{aligned} \tag{1.38}$$

□

例 1.8.

$$\nabla \times (\vec{A} \times \vec{B}) = (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{A} - (\vec{A} \cdot \nabla) \vec{B} + \vec{A} (\nabla \cdot \vec{B}) - \vec{B} (\nabla \cdot \vec{A}). \tag{1.39}$$

证明.

$$\begin{aligned}
 \nabla \times (\vec{A} \times \vec{B}) &= \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i \partial_j (\vec{A} \times \vec{B})_k \\
 &= \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i \partial_j \varepsilon_{klm} A_l B_m \\
 &= \varepsilon_{kij} \varepsilon_{klm} \vec{e}_i \partial_j (A_l B_m) \\
 &= (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) \vec{e}_i (B_m \partial_j A_l + A_l \partial_j B_m) \\
 &= \vec{e}_l B_j \partial_j A_l + \vec{e}_l A_l \partial_m B_m - \vec{e}_m B_m \partial_l A_l - \vec{e}_m A_j \partial_j B_m \\
 &= B_j \partial_j A_l \vec{e}_l + \vec{e}_l A_l \partial_m B_m - \vec{e}_m B_m \partial_l A_l - A_j \partial_j B_m \vec{e}_m \\
 &= (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{A} + \vec{A} (\nabla \cdot \vec{B}) - \vec{B} (\nabla \cdot \vec{A}) - (\vec{A} \cdot \nabla) \vec{B} \\
 &= (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{A} - (\vec{A} \cdot \nabla) \vec{B} + \vec{A} (\nabla \cdot \vec{B}) - \vec{B} (\nabla \cdot \vec{A}).
 \end{aligned} \tag{1.40}$$

□

**例 1.9.**

$$\nabla \times (\nabla \times \vec{A}) = \nabla (\nabla \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}. \quad (1.41)$$

证明.

$$\begin{aligned}
\nabla \times (\nabla \times \vec{A}) &= \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i \partial_j (\nabla \times \vec{A})_k \\
&= \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i \partial_j \varepsilon_{klm} \partial_l A_m \\
&= \varepsilon_{kij} \varepsilon_{klm} \vec{e}_i \partial_j \partial_l A_m \\
&= (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) \vec{e}_i \partial_j \partial_l A_m \\
&= \vec{e}_l \partial_m \partial_l A_m - \vec{e}_m \partial_l \partial_l A_m \\
&= \vec{e}_l \partial_l \partial_m A_m - \partial_l \partial_l A_m \vec{e}_m \\
&= \nabla (\nabla \cdot \vec{A}) - \nabla^2 \vec{A}.
\end{aligned} \quad (1.42)$$

□

### 1.2.2.3 需要注意力的公式

**例 1.10.**

$$\nabla \times (\nabla \varphi) = \vec{0}. \quad (1.43)$$

证明.

$$\begin{aligned}
\nabla \times (\nabla \varphi) &= \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i \partial_j (\nabla \varphi)_k \\
&= \vec{e}_i \varepsilon_{ijk} \partial_j \partial_k \varphi,
\end{aligned} \quad (1.44)$$

由于我们只考虑性质比较好的函数, 于是  $\partial_j \partial_k \varphi = \partial_k \partial_j \varphi$ , 再结合  $\varepsilon_{ijk} = -\varepsilon_{ikj}$ , 有

$$\begin{aligned}
\vec{e}_i \varepsilon_{ijk} \partial_j \partial_k \varphi &= -\vec{e}_i \varepsilon_{ikj} \partial_k \partial_j \varphi \\
&= -\vec{e}_i \varepsilon_{ijk} \partial_j \partial_k \varphi.
\end{aligned} \quad (1.45)$$

最后一步是因为  $j, k$  都是用于求和的哑标, 因此可以作替换  $j \leftrightarrow k$ 。上式说明:

$$\vec{e}_i \varepsilon_{ijk} \partial_j \partial_k \varphi = \vec{0}. \quad (1.46)$$

于是

$$\nabla \times (\nabla \varphi) = \vec{e}_i \varepsilon_{ijk} \partial_j \partial_k \varphi = \vec{0}. \quad (1.47)$$

□

例 1.11.

$$\nabla \cdot (\nabla \times \vec{A}) = 0. \quad (1.48)$$

证明.

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (\nabla \times \vec{A}) &= \partial_i (\nabla \times \vec{A})_i \\ &= \partial_i \varepsilon_{ijk} \partial_j A_k \\ &= \varepsilon_{ijk} \partial_i \partial_j A_k, \end{aligned} \quad (1.49)$$

注意到

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ijk} \partial_i \partial_j A_k &= -\varepsilon_{jik} \partial_j \partial_i A_k \\ &= -\varepsilon_{ijk} \partial_i \partial_j A_k, \end{aligned} \quad (1.50)$$

于是

$$\varepsilon_{ijk} \partial_i \partial_j A_k = 0, \quad (1.51)$$

这就是说:

$$\nabla \cdot (\nabla \times \vec{A}) = \varepsilon_{ijk} \partial_i \partial_j A_k = 0. \quad (1.52)$$

□

#### 1.2.2.4 从右往左证的公式

例 1.12.

$$\nabla (\vec{A} \cdot \vec{B}) = (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{A} + (\vec{A} \cdot \nabla) \vec{B} + \vec{B} \times (\nabla \times \vec{A}) + \vec{A} \times (\nabla \times \vec{B}). \quad (1.53)$$

证明.

$$\begin{aligned}
\nabla (\vec{A} \cdot \vec{B}) &= (\vec{B} \cdot \nabla) \vec{A} + (\vec{A} \cdot \nabla) \vec{B} + \vec{B} \times (\nabla \times \vec{A}) + \vec{A} \times (\nabla \times \vec{B}) \\
&= B_i \partial_i A_j \vec{e}_j + A_i \partial_i B_j \vec{e}_j + \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i B_j (\nabla \times \vec{A})_k + \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i A_j (\nabla \times \vec{B})_k \\
&= B_i \partial_i A_j \vec{e}_j + A_i \partial_i B_j \vec{e}_j + \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i B_j \varepsilon_{klm} \partial_l A_m + \varepsilon_{ijk} \vec{e}_i A_j \varepsilon_{klm} \partial_l B_m \\
&= B_i \partial_i A_j \vec{e}_j + A_i \partial_i B_j \vec{e}_j + \varepsilon_{kij} \varepsilon_{klm} \vec{e}_i B_j \partial_l A_m + \varepsilon_{kij} \varepsilon_{klm} \vec{e}_i A_j \partial_l B_m \\
&= B_i \partial_i A_j \vec{e}_j + A_i \partial_i B_j \vec{e}_j + (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) \vec{e}_i B_j \partial_l A_m + (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{im} \delta_{jl}) \vec{e}_i A_j \partial_l B_m \\
&= B_i \partial_i A_j \vec{e}_j + A_i \partial_i B_j \vec{e}_j + \vec{e}_l B_m \partial_l A_m - \vec{e}_m B_l \partial_l A_m + \vec{e}_l A_m \partial_l B_m - \vec{e}_m A_l \partial_l B_m \\
&= B_i \partial_i A_j \vec{e}_j + A_i \partial_i B_j \vec{e}_j + B_m \vec{e}_l \partial_l A_m - B_l \partial_l A_m \vec{e}_m + A_m \vec{e}_l \partial_l B_m - A_l \partial_l B_m \vec{e}_m \\
&= B_m \vec{e}_l \partial_l A_m + A_m \vec{e}_l \partial_l B_m \\
&= B_m \nabla A_m + A_m \nabla B_m \\
&= \nabla (A_m B_m) \\
&= \nabla (\vec{A} \cdot \vec{B})
\end{aligned} \tag{1.54}$$

□

### 1.2.3 $\mathbb{R}^3$ 空间重要积分恒等式及其证明

#### 1.2.3.1 高斯定理

定理 1.4. 设  $\vec{A}(\vec{x})$  是矢量场,  $V$  是  $\mathbb{R}^3$  中的封闭体, 则有

$$\oint_{\partial V^+} \vec{A} \cdot d\vec{S} = \int_V (\nabla \cdot \vec{A}) dV. \tag{1.55}$$

#### 1.2.3.2 斯托克斯定理

定理 1.5. 设  $\vec{A}(\vec{x})$  是矢量场,  $\Sigma$  是  $\mathbb{R}^3$  中的封闭曲面, 则有

$$\oint_{\partial \Sigma^+} \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int_{\Sigma} (\nabla \times \vec{A}) \cdot d\vec{S}, \tag{1.56}$$

其中, 曲面  $\Sigma$  的取向与  $\partial \Sigma$  的正绕行方向满足右手定则。

#### 1.2.3.3 格林第一恒等式

例 1.13.

$$\oint_{\partial \Omega^+} \psi \nabla \phi \cdot d\vec{S} = \int_{\Omega} (\psi \nabla^2 \phi + \nabla \phi \cdot \nabla \psi) dV. \tag{1.57}$$

证明. 注意到

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot (\psi \nabla \phi) &= \partial_i (\psi \nabla \phi)_i \\
 &= \partial_i (\psi \partial_i \phi) \\
 &= (\partial_i \phi) (\partial_i \psi) + \psi \partial_i \partial_i \phi \\
 &= (\nabla \phi)_i (\nabla \psi)_i + \psi \nabla^2 \phi \\
 &= (\nabla \phi) \cdot (\nabla \psi) + \psi \nabla^2 \phi,
 \end{aligned} \tag{1.58}$$

于是由高斯定理, 有

$$\begin{aligned}
 \oint_{\partial\Omega^+} \psi \nabla \phi \cdot d\vec{S} &= \int_{\Omega} \nabla \cdot (\psi \nabla \phi) dV \\
 &= \int_{\Omega} [(\nabla \phi) \cdot (\nabla \psi) + \psi \nabla^2 \phi] dV \\
 &= \int_{\Omega} [\psi \nabla^2 \phi + (\nabla \phi) \cdot (\nabla \psi)] dV.
 \end{aligned} \tag{1.59}$$

□

#### 1.2.3.4 格林第二恒等式

例 1.14.

$$\oint_{\partial\Omega^+} (\psi \nabla \phi - \phi \nabla \psi) \cdot d\vec{S} = \int_{\Omega} (\psi \nabla^2 \phi - \phi \nabla^2 \psi) dV. \tag{1.60}$$

证明. 利用  $\nabla \cdot (\varphi \vec{A}) = \vec{A} \cdot (\nabla \varphi) + \varphi \nabla \cdot \vec{A}$  有

$$\begin{aligned}
 \nabla \cdot (\psi \nabla \phi - \phi \nabla \psi) &= \nabla \phi \cdot \nabla \psi + \psi \nabla \cdot (\nabla \phi) - (\nabla \psi \cdot \nabla \phi + \phi \nabla \cdot (\nabla \psi)) \\
 &= \psi \nabla^2 \phi - \phi \nabla^2 \psi,
 \end{aligned} \tag{1.61}$$

于是由高斯定理可得

$$\begin{aligned}
 \oint_{\partial\Omega^+} (\psi \nabla \phi - \phi \nabla \psi) \cdot d\vec{S} &= \int_{\Omega} \nabla \cdot (\psi \nabla \phi - \phi \nabla \psi) dV \\
 &= \int_{\Omega} (\psi \nabla^2 \phi - \phi \nabla^2 \psi) dV.
 \end{aligned} \tag{1.62}$$

□



## 1.2.3.5 高斯定理的一个推论

例 1.15.

$$\oint_{\partial V^+} \psi d\vec{S} = \int_V \nabla \psi dV. \quad (1.63)$$

证明. 对任意标量场  $\psi(\vec{x})$  和任意常矢量  $\vec{a}$ , 构造矢量场

$$\vec{A}(\vec{x}) \equiv \psi(\vec{x})\vec{a}, \quad (1.64)$$

这个特殊的矢量场  $\vec{A}$  应当满足高斯定理:

$$\oint_{\partial V^+} \vec{A} \cdot d\vec{S} = \int_V (\nabla \cdot \vec{A}) dV. \quad (1.65)$$

等式左边

$$\oint_{\partial V^+} \vec{A} \cdot d\vec{S} = \oint_{\partial V^+} (\psi \vec{a}) \cdot d\vec{S} = \vec{a} \cdot \oint_{\partial V^+} \psi d\vec{S}. \quad (1.66)$$

等式右边

$$\begin{aligned} \int_V (\nabla \cdot \vec{A}) dV &= \int_V [\nabla \cdot (\psi \vec{a})] dV \\ &= \int_V [(\nabla \psi) \cdot \vec{a} + \psi \nabla \cdot \vec{a}] dV \\ &= \int_V (\nabla \psi) \cdot \vec{a} dV \\ &= \vec{a} \cdot \int_V \nabla \psi dV, \end{aligned} \quad (1.67)$$

于是

$$\vec{a} \cdot \oint_{\partial V^+} \psi d\vec{S} = \vec{a} \cdot \int_V \nabla \psi dV, \quad (1.68)$$

由  $\vec{a}$  的任意性就得到

$$\oint_{\partial V^+} \psi d\vec{S} = \int_V \nabla \psi dV. \quad (1.69)$$

□

## 1.2.3.6 斯托克斯定理的一个推论

例 1.16.

$$\oint_{\partial S} \psi d\vec{l} = - \int_S \nabla \psi \times d\vec{S}. \quad (1.70)$$

证明. 对任意标量场  $\psi(\vec{x})$  和任意常矢量  $\vec{a}$ , 构造矢量场

$$\vec{A}(\vec{x}) \equiv \psi(\vec{x})\vec{a}, \quad (1.71)$$

这个特殊的矢量场  $\vec{A}$  应当满足斯托克斯定理:

$$\oint_{\partial S} \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int_S (\nabla \times \vec{A}) \cdot d\vec{S}. \quad (1.72)$$

等式左边

$$\begin{aligned} \oint_{\partial S} \vec{A} \cdot d\vec{l} &= \oint_{\partial S} (\psi \vec{a}) \cdot d\vec{l} \\ &= \vec{a} \cdot \oint_{\partial S} \psi d\vec{l}, \end{aligned} \quad (1.73)$$

等式右边

$$\begin{aligned} \int_S (\nabla \times \vec{A}) \cdot d\vec{S} &= \int_S [\nabla \times (\psi \vec{a})] \cdot d\vec{S} \\ &= \int_S [(\nabla \psi) \times \vec{a} + \psi \nabla \times \vec{a}] \cdot d\vec{S} \\ &= \int_S [(\nabla \psi) \times \vec{a}] \cdot d\vec{S} \\ &= \int_S [d\vec{S} \times (\nabla \psi)] \cdot \vec{a} \\ &= -\vec{a} \cdot \int_S \nabla \psi \times d\vec{S}, \end{aligned} \quad (1.74)$$

于是

$$\vec{a} \cdot \oint_{\partial S} \psi d\vec{l} = -\vec{a} \cdot \int_S \nabla \psi \times d\vec{S}, \quad (1.75)$$

由  $\vec{a}$  的任意性就得到

$$\oint_{\partial S} \psi d\vec{l} = - \int_S \nabla \psi \times d\vec{S}. \quad (1.76)$$

□

## 第 2 章 $\mathbb{R}^3$ 空间曲线坐标系中的向量分析

### 2.1 总结

#### 2.1.1 $\nabla$ 在三种坐标系下的表达式

##### 2.1.1.1 直角坐标

$$\nabla = \vec{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \vec{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \quad (2.1)$$

##### 2.1.1.2 球坐标

$$\nabla = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \varphi} \quad (2.2)$$

##### 2.1.1.3 柱坐标

$$\nabla = \vec{e}_\rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \vec{e}_\varphi \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \vec{e}_z \frac{\partial}{\partial z} \quad (2.3)$$

#### 2.1.2 $\nabla^2$ 在三种坐标系下的表达式

##### 2.1.2.1 直角坐标

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.4)$$

##### 2.1.2.2 球坐标

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (2.5)$$

### 2.1.2.3 柱坐标

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.6)$$

## 第 3 章 线性空间

### 3.1 Hilbert 空间

#### 3.1.1 内积空间的定义

设  $L$  是一个域  $\mathbb{F}$  上的线性空间。在  $L$  上定义一个映射

$$\langle \cdot, \cdot \rangle : L \times L \rightarrow \mathbb{F}, \quad (3.1)$$

若这个映射满足以下三个条件

(1) 共轭对称:

$$\forall \psi, \phi \in L, \quad \langle \psi, \phi \rangle = \langle \phi, \psi \rangle^*, \quad (3.2)$$

(2) 对第二个元素是线性的, 对第一个元素是反线性的:

$$\forall a \in \mathbb{F}, \quad \psi, \phi \in L, \quad \langle \psi, a\phi \rangle = a \langle \psi, \phi \rangle, \quad \langle a\psi, \phi \rangle = a^* \langle \psi, \phi \rangle, \quad (3.3)$$

(3) 非负性:

$$\forall \psi \in L, \quad \langle \psi | \psi \rangle \geq 0, \quad (3.4)$$

则称  $L$  是一个内积空间。映射  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  称为内积。

#### 3.1.2 Hilbert 空间的定义

完备的内积空间称为 Hilbert 空间。一般用  $\mathcal{H}$  表示希尔伯特空间。

在量子力学中, 一般用  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  表示 Hilbert 空间中的向量。

## 3.2 线性空间上的各种算符

#### 3.2.1 算符的定义

线性空间  $L$  上的算符  $O$  是一个从  $L$  到  $L$  的映射

$$O : L \rightarrow L. \quad (3.5)$$

因此有

$$\forall \psi \in L, \quad O\psi \in L. \quad (3.6)$$

### 3.2.2 算符之间的运算

#### 3.2.2.1 算符加法

$$(A + B)\psi = A\psi + B\psi. \quad (3.7)$$

#### 3.2.2.2 算符乘法

$$(AB)\psi = A(B\psi). \quad (3.8)$$

#### 3.2.2.3 算符的对易括号

$$[A, B] \equiv AB - BA. \quad (3.9)$$

### 3.2.3 对算符的运算

#### 3.2.3.1 线性算符

若算符  $O$  满足

$$\forall \psi, \phi \in L, \quad \forall a, b \in \mathbb{F}, \quad O(a\psi + b\phi) = aO\psi + bO\phi, \quad (3.10)$$

则称  $O$  为线性算符。

#### 3.2.3.2 线性算符的转置

设  $O$  是  $L$  上的线性算符，则  $O$  的转置  $O^T$  由下式定义

$$\forall \psi, \phi \in L, \quad \langle \phi, O^T \psi \rangle = \langle \psi, O\phi \rangle. \quad (3.11)$$

可以证明

$$(AB)^T = B^T A^T. \quad (3.12)$$

### 3.2.3.3 线性算符的复共轭

设  $O$  是  $L$  上的线性算符, 则  $O$  的复共轭算符, 记为  $O^*$ , 由下式定义

$$\forall \psi, \phi \in L, \quad \langle \phi, O^* \psi \rangle = \langle \phi, O \psi \rangle^*. \quad (3.13)$$

### 3.2.3.4 线性算符的伴随算符

设  $O$  是  $L$  上的线性算符, 则  $O$  的伴随算符, 记为  $O^\dagger$ , 由下式定义

$$\forall \psi, \phi \in L, \quad \langle \phi, O^\dagger \psi \rangle = \langle O \phi, \psi \rangle. \quad (3.14)$$

注意到

$$\langle O \phi, \psi \rangle = (\langle O \phi, \psi \rangle^*)^* = \langle \psi, O \phi \rangle^* = \langle \phi, O^T \psi \rangle^* = \langle \phi, (O^T)^* \psi \rangle, \quad (3.15)$$

即

$$\langle \phi, O^\dagger \psi \rangle = \langle \phi, (O^T)^* \psi \rangle, \quad (3.16)$$

对比得

$$O^\dagger = (O^T)^*. \quad (3.17)$$

可以证明

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger. \quad (3.18)$$

## 3.2.4 线性空间上的一些特殊算符

### 3.2.4.1 对称算符与反对称算符

对称算符: 若线性算符  $O$  满足

$$O^T = O, \quad (3.19)$$

则称  $O$  为对称算符。

反对称算符: 若线性算符  $O$  满足

$$O^T = -O, \quad (3.20)$$

则称  $O$  为反对称算符。



### 3.2.4.2 自伴算符（厄米算符）

若线性算符  $O$  满足

$$O^\dagger = O, \quad (3.21)$$

则称  $O$  为自伴算符或厄米算符。

### 3.2.4.3 么正算符

对于线性算符  $U$ ，若其满足

$$U^\dagger U = UU^\dagger = I, \quad (3.22)$$

则称  $U$  为么正算符。

## 3.3 线性算符的本征值和本征向量

形如

$$A\psi = \lambda\psi, \quad \lambda \in \mathbb{F}, \psi \in L, \quad (3.23)$$

的方程称为线性算符  $A$  的本征方程。 $\lambda$  称为  $A$  的本征值， $\psi$  称为  $A$  的本征向量。

若某个本征值  $\lambda_i$  对应着  $n$  个线性独立的  $\psi_{ij}, j = 1, 2, \dots, n$ ，则称本征值  $\lambda_i$  是  $n$  重简并的。

## 3.4 一些定理

**定理 3.1.** 厄米算符本征值为实数。

**证明.** 设  $A$  是厄米算符，本征方程

$$A\psi = \lambda\psi, \quad A^\dagger = A. \quad (3.24)$$

一方面

$$\langle \psi, A\psi \rangle = \langle \psi, \lambda\psi \rangle = \lambda \langle \psi, \psi \rangle, \quad (3.25)$$

另一方面

$$\langle \psi, A\psi \rangle = \langle \psi, A^\dagger \psi \rangle = \langle A\psi, \psi \rangle = \langle \lambda\psi, \psi \rangle = \lambda^* \langle \psi, \psi \rangle, \quad (3.26)$$

对比得

$$\lambda^* = \lambda. \quad (3.27)$$

□

**定理 3.2.** 属于厄米算符不同本征值的本征向量是正交的。

证明. 设厄米算符  $A$  的本征向量  $\psi_1, \psi_2$  分别对应本征值  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_1 \neq \lambda_2$ , 则有

$$A\psi_1 = \lambda_1\psi_1, \quad A\psi_2 = \lambda_2\psi_2. \quad (3.28)$$

一方面

$$\langle \psi_2, A\psi_1 \rangle = \langle \psi_2, \lambda_1\psi_1 \rangle = \lambda_1 \langle \psi_2, \psi_1 \rangle, \quad (3.29)$$

另一方面

$$\langle \psi_2, A\psi_1 \rangle = \langle \psi_2, A^\dagger\psi_1 \rangle = \langle A\psi_2, \psi_1 \rangle = \langle \lambda_2\psi_2, \psi_1 \rangle = \lambda_2^* \langle \psi_2, \psi_1 \rangle = \lambda_2 \langle \psi_2, \psi_1 \rangle, \quad (3.30)$$

作差得

$$(\lambda_1 - \lambda_2) \langle \psi_2, \psi_1 \rangle = 0. \quad (3.31)$$

由于  $\lambda_1 \neq \lambda_2$ , 于是

$$\langle \psi_2, \psi_1 \rangle = 0. \quad (3.32)$$

□

**定理 3.3.** 若  $U$  为么正算符, 则有

$$\forall \psi, \phi \in L, \quad \langle U\psi, U\phi \rangle = \langle \psi, \phi \rangle. \quad (3.33)$$

证明.

$$\langle U\psi, U\phi \rangle = \langle \psi, U^\dagger U\phi \rangle = \langle \psi, I\phi \rangle = \langle \psi, \phi \rangle. \quad (3.34)$$

□

**定理 3.4.** 复内积空间  $L$  中的线性算符  $A$  为厄米算符的充要条件是  $\forall \phi \in L, \langle \phi, A\phi \rangle \in \mathbb{R}$ .

证明. 若  $A$  为厄米算符, 即  $A^\dagger = A$  则

$$\langle \phi, A\phi \rangle = \langle \phi, A^\dagger\phi \rangle = \langle A\phi, \phi \rangle = \langle \phi, A\phi \rangle^*. \quad (3.35)$$

前后对比得

$$\langle \phi, A\phi \rangle \in \mathbb{R}. \quad (3.36)$$

把上面过程反过来就能证明必要性。

□

## 3.5 例题

### 3.5.1 纯态下可观测期望值

**例 3.1.** 假设体系处在纯态  $|\psi\rangle$ , 若对体系的可观测量  $O$  进行测量, 证明测量期望值  $\langle O \rangle$  可表达为

$$\langle O \rangle = \langle \psi | O | \psi \rangle. \quad (3.37)$$

证明. 考虑本征值离散情况, 本征方程为

$$O |n\rangle = o_n |n\rangle. \quad (3.38)$$

利用正交性关系和完备性关系

$$\langle n | n' \rangle = \delta_{n,n'}, \quad \sum_n |n\rangle \langle n| = I, \quad (3.39)$$

有

$$\begin{aligned} O &= IOI \\ &= \left( \sum_n |n\rangle \langle n| \right) O \left( \sum_{n'} |n'\rangle \langle n'| \right) \\ &= \sum_{n,n'} \langle n | O | n' \rangle |n\rangle \langle n'| \\ &= \sum_{n,n'} \langle n | o_{n'} | n' \rangle |n\rangle \langle n'| \\ &= \sum_{n,n'} o_{n'} \langle n | n' \rangle |n\rangle \langle n'| \\ &= \sum_{n,n'} o_{n'} \delta_{n,n'} |n\rangle \langle n'| \\ &= \sum_n o_n |n\rangle \langle n|. \end{aligned} \quad (3.40)$$

量子力学告诉我们, 在  $|\psi\rangle$  态下对可观测量  $O$  进行测量, 测得  $o_n$  的概率为  $|\langle n | \psi \rangle|^2$ , 于是期望值

$$\begin{aligned}
\langle O \rangle &\equiv \sum_n o_n |\langle n | \psi \rangle|^2 \\
&= \sum_n o_n \langle n | \psi \rangle^* \langle n | \psi \rangle \\
&= \sum_n o_n \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | \left( \sum_n o_n |n\rangle \langle n| \right) | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | O | \psi \rangle.
\end{aligned} \tag{3.41}$$

□

### 3.5.2 混合态下可观测量期望值

**例 3.2.** 已知若体系以  $p_i$  的概率处于纯态  $|\psi_i\rangle$ ，则体系的状态可用密度矩阵

$$\rho \equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \tag{3.42}$$

来描述。证明在上述状态下对可观测量  $O$  进行测量，测量期望值  $\langle O \rangle$  可写为

$$\langle O \rangle = \text{Tr}(\rho O), \tag{3.43}$$

其中，求迹操作  $\text{Tr}(\cdot)$  的定义为：设  $\{|j\rangle\}$  是任意一组正交完备基，则

$$\text{Tr}(O) \equiv \sum_j \langle j | O | j \rangle. \tag{3.44}$$

证明. 考虑本征值离散情况，本征方程

$$O |n\rangle = o_n |n\rangle. \tag{3.45}$$

$$\begin{aligned}
\langle O \rangle &\equiv \sum_i p_i \sum_n o_n |\langle n | \psi_i \rangle|^2 \\
&= \sum_i p_i \sum_n o_n \langle n | \psi_i \rangle \langle n | \psi_i \rangle^* \\
&= \sum_i p_i \sum_n o_n \langle n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | n \rangle \\
&= \sum_i \sum_n o_n p_i \langle n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | n \rangle \\
&= \sum_n \sum_i o_n p_i \langle n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | n \rangle \\
&= \sum_n o_n \langle n | \left( \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \right) | n \rangle \\
&= \sum_n o_n \langle n | \rho | n \rangle \\
&= \sum_n \langle n | \rho o_n | n \rangle \\
&= \sum_n \langle n | \rho O | n \rangle \\
&= \text{Tr}(\rho O).
\end{aligned} \tag{3.46}$$

□

### 3.5.3 不确定性关系

例 3.3. 利用 Schwarz 不等式

$$\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}, \quad \langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2, \tag{3.47}$$

以及不等式

$$\forall z \in \mathbb{C}, \quad |z|^2 \geq |\text{Im}(z)|^2, \tag{3.48}$$

推导不确定性关系

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|, \tag{3.49}$$

其中  $A, B$  是厄米算符,

$$\langle O \rangle = \langle \psi | O | \psi \rangle, \quad \Delta O \equiv \sqrt{\langle (O - \langle O \rangle)^2 \rangle}. \tag{3.50}$$

证明. 注意到对于厄米算符  $O$ , 有

$$\begin{aligned}
\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \Delta O &\equiv \sqrt{\langle (O - \langle O \rangle)^2 \rangle} \\
&= \sqrt{\langle (O - \langle O \rangle)(O - \langle O \rangle) \rangle} \\
&= \sqrt{\langle O^2 - 2\langle O \rangle O + \langle O \rangle^2 \rangle} \\
&= \sqrt{\langle O^2 \rangle - 2\langle O \rangle \langle O \rangle + \langle O \rangle^2} \\
&= \sqrt{\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2},
\end{aligned} \tag{3.51}$$

$$\begin{aligned}
\langle \psi | (O - \langle O \rangle)^\dagger (O - \langle O \rangle) | \psi \rangle &= \langle \psi | (O^\dagger - \langle O \rangle^*) (O - \langle O \rangle) | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | (O - \langle O \rangle) (O - \langle O \rangle) | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | (O - \langle O \rangle)^2 | \psi \rangle,
\end{aligned} \tag{3.52}$$

令  $|\alpha\rangle = (A - \langle A \rangle) |\psi\rangle$ ,  $|\beta\rangle = (B - \langle B \rangle) |\psi\rangle$ , 则

$$\begin{aligned}
\langle \alpha | \alpha \rangle &= \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = (\Delta A)^2 \\
\langle \beta | \beta \rangle &= \langle \psi | (B - \langle B \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle (B - \langle B \rangle)^2 \rangle = (\Delta B)^2,
\end{aligned} \tag{3.53}$$

$$\begin{aligned}
\langle \alpha | \beta \rangle &= \langle \psi | (A^\dagger - \langle A \rangle^*) (B - \langle B \rangle) | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | (A - \langle A \rangle) (B - \langle B \rangle) | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | AB - \langle A \rangle B - \langle B \rangle A + \langle A \rangle \langle B \rangle | \psi \rangle \\
&= \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \\
&= \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle,
\end{aligned} \tag{3.54}$$

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle BA \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle, \tag{3.55}$$

$$\begin{aligned}
|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 &\geq |\operatorname{Im} \langle \alpha | \beta \rangle|^2 \\
&= \left| \frac{1}{2i} (\langle \alpha | \beta \rangle - \langle \alpha | \beta \rangle^*) \right|^2 \\
&= \left| \frac{1}{2i} (\langle \alpha | \beta \rangle - \langle \beta | \alpha \rangle) \right|^2 \\
&= \frac{1}{4} |\langle AB \rangle - \langle BA \rangle|^2 \\
&= \frac{1}{4} |\langle AB - BA \rangle|^2 \\
&= \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2,
\end{aligned} \tag{3.56}$$

代入 Schwarz 不等式  $\langle \alpha | \alpha \rangle \langle \beta | \beta \rangle \geq |\langle \alpha | \beta \rangle|^2 \geq |\operatorname{Im} \langle \alpha | \beta \rangle|^2$ , 有

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2, \quad (3.57)$$

即

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|. \quad (3.58)$$

□

## 参考文献

- [1] 杨孔庆. 数学物理方法. Gao deng jiao yu chu ban she, 2012.