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。

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

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

其中，$\vec{\mathrm{e}}_1, \vec{\mathrm{e}}_2, \vec{\mathrm{e}}_3$ 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

$$\vec{A} = \sum_i A_i\vec{\mathrm{e}}_i \to \vec{A} = A_i\vec{\mathrm{e}}_i, \tag{1.2}$$

这样就省去了写求和符号 $\sum\limits_i$ 的工作。

1.1.2　Kronecher delta 符号 δ_{ij}

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

1.1.3　三阶 Levi-Citita 符号 ε_{ijk}

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

可以利用 ε_{ijk} 表示任何一个三阶行列式：

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

1.1.4 一些简单算例

例 1.1. 一些简单算例

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

  证明.
  $$\vec{A} \cdot \vec{B} = (A_i \vec{\mathrm{e}}_i) \cdot (B_j \vec{\mathrm{e}}_j) = A_i B_j \vec{\mathrm{e}}_i \cdot \vec{\mathrm{e}}_j = A_i B_j \delta_{ij} = A_i B_i \tag{1.6}$$
  □

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

  证明.
  $$\vec{A} \times \vec{B} = \begin{vmatrix} \vec{\mathrm{e}}_1 & \vec{\mathrm{e}}_2 & \vec{\mathrm{e}}_3 \\ A_1 & A_2 & A_3 \\ B_1 & B_2 & B_3 \end{vmatrix} = \varepsilon_{ijk} \vec{\mathrm{e}}_i A_j B_k \tag{1.7}$$
  □

1.1.5 ∇算子

∇ 算子（nabla 算子，或 del 算子）定义为

$$\nabla \equiv \vec{\mathrm{e}}_i \partial_i, \tag{1.8}$$

其中，∂_i 的定义为

$$\partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial x_i}. \tag{1.9}$$

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 $\mathrm{grad}\,\psi(\vec{x})$，由下式定义

$$\mathrm{grad}\,\psi(\vec{x})\cdot \mathrm{d}\vec{x}=\mathrm{d}\psi(\vec{x}), \tag{1.10}$$

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

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

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

$$\mathrm{grad}\,\psi(\vec{x})=\nabla\psi(\vec{x}). \tag{1.12}$$

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

$$\left.\frac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial l}\right|_{\vec{v}}\equiv\lim_{t\to0^+}\frac{\psi(\vec{x}+t\vec{v})-\psi(\vec{x})}{tv}. \tag{1.13}$$

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 ψ 在曲面 Σ 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 $\left.\dfrac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial n}\right|_{\Sigma}$.

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：

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

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

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

即

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

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 $\left.\dfrac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial l}\right|_{\vec{n}}$。

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

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

有：

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

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 $\vec{n}=\nabla\psi(\vec{x})/\left|\nabla\psi(\vec{x})\right|$ 时，$\psi(\vec{x})$ 在 $\vec{n}$ 方向上的方向导数 $\left.\dfrac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial l}\right|_{\vec{n}}$ 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

$$\psi\left(\vec{p}\right)-\psi\left(\vec{q}\right)=\int\limits_{\vec{x}\in C[\vec{q}\to\vec{p}]}\nabla\psi(\vec{x})\cdot\mathrm{d}\vec{x}. \tag{1.19}$$

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 $\mathrm{div}\,\vec{A}$，定义为

$$\operatorname{div} \vec{A} \equiv \lim_{V\to 0^+} \frac{1}{V} \oint\limits_{\partial V^+} \vec{A}\cdot \mathrm{d}\vec{S}. \tag{1.20}$$

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

$$\operatorname{div}\vec{A} = \nabla\cdot\vec{A} \tag{1.21}$$

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

$$\oint\limits_{\partial V^+} \vec{A}\cdot \mathrm{d}\vec{S} = \int\limits_{V} \left(\nabla\cdot\vec{A}\right) \mathrm{d}V. \tag{1.22}$$

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：

$$\left(\operatorname{curl}\vec{A}\right)\cdot\vec{n} = \lim_{\sigma\to 0^+} \frac{1}{\sigma} \oint\limits_{\partial\sigma^+} \vec{A}\cdot \mathrm{d}\vec{l}, \tag{1.23}$$

其中，σ 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 ∇ 算子表达为

$$\operatorname{curl}\vec{A} = \nabla\times\vec{A}. \tag{1.24}$$

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，Σ 是 $\mathbb{R}^3$ 中的封闭曲面，则有

$$\oint\limits_{\partial\Sigma^+} \vec{A}\cdot \mathrm{d}\vec{l} = \int\limits_{\Sigma} \left(\nabla\times\vec{A}\right)\cdot \mathrm{d}\vec{S}, \tag{1.25}$$

其中，曲面 Σ 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 Σ 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

$$\begin{cases}
\vec{\mathrm{e}}_i \cdot \vec{\mathrm{e}}_j = \delta_{ij} \\
\vec{\mathrm{e}}_i \times \vec{\mathrm{e}}_j = \varepsilon_{ijk}\vec{\mathrm{e}}_k \\
\vec{A} = A_i\vec{\mathrm{e}}_i \\
A_i\delta_{ij} = A_j \\
\vec{A}\cdot\vec{B} = A_iB_i \\
\vec{A}\times\vec{B} = \varepsilon_{ijk}\vec{\mathrm{e}}_iA_jB_k \\
\left(\vec{A}\times\vec{B}\right)_l = \varepsilon_{ljk}A_jB_k \\
\nabla = \vec{\mathrm{e}}_i\partial_i \\
\nabla\cdot\vec{A} = \partial_iA_i \\
\nabla\times\vec{A} = \varepsilon_{ijk}\vec{\mathrm{e}}_i\partial_jA_k \\
\partial_i\psi = (\nabla\psi)_i \\
\nabla^2 \equiv \nabla\cdot\nabla = \partial_i\partial_i \\
\nabla^2\psi \equiv \nabla\cdot(\nabla\psi) = \partial_i\partial_i\psi \\
\nabla^2\vec{A} \equiv \left(\nabla^2A_i\right)\vec{\mathrm{e}}_i \\
\varepsilon_{ijk} = \varepsilon_{jki} = \varepsilon_{kij} \\
\varepsilon_{ijk}\varepsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl} \\
\partial_ix_j = \delta_{ij}
\end{cases} \tag{1.26}$$

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.

$$\nabla\cdot\vec{x} = 3. \tag{1.27}$$

证明.

$$\nabla\cdot\vec{x} = \partial_ix_i = \delta_{ii} = 3. \tag{1.28}$$

□

例 1.3.

$$\nabla \times \vec{x} = \vec{0}. \tag{1.29}$$

证明.

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

□

1.2.2.2 从左往右证的公式

例 1.4.

$$\nabla(\varphi\psi) = \varphi\nabla\psi + \psi\nabla\varphi. \tag{1.31}$$

证明.

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

□

例 1.5.

$$\nabla \cdot \left(\varphi\vec{A}\right) = \vec{A}\cdot(\nabla\varphi) + \varphi\nabla\cdot\vec{A}. \tag{1.33}$$

证明.

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

□

例 1.6.

$$\nabla \times \left(\varphi\vec{A}\right) = (\nabla\varphi)\times\vec{A} + \varphi\nabla\times\vec{A}. \tag{1.35}$$

证明.

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

□

例 1.7.

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

证明.

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

□

例 1.8.

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

证明.

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

□

例 1.9.

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

证明.

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

□

1.2.2.3 需要注意力的公式

例 1.10.

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

证明.

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

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

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

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：

$$\vec{\mathrm{e}}_i\varepsilon_{ijk}\partial_j\partial_k\varphi=\vec{0}. \tag{1.46}$$

于是

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

□

例 1.11.

$$\nabla\cdot\left(\nabla\times\vec{A}\right)=0. \tag{1.48}$$

证明.

$$\begin{aligned}\nabla\cdot\left(\nabla\times\vec{A}\right)&=\partial_i\left(\nabla\times\vec{A}\right)_i\\&=\partial_i\varepsilon_{ijk}\partial_jA_k\\&=\varepsilon_{ijk}\partial_i\partial_jA_k,\end{aligned} \tag{1.49}$$

注意到

$$\begin{aligned}\varepsilon_{ijk}\partial_i\partial_jA_k&=-\varepsilon_{jik}\partial_j\partial_iA_k\\&=-\varepsilon_{ijk}\partial_i\partial_jA_k,\end{aligned} \tag{1.50}$$

于是

$$\varepsilon_{ijk}\partial_i\partial_jA_k=0, \tag{1.51}$$

这就是说：

$$\nabla\cdot\left(\nabla\times\vec{A}\right)=\varepsilon_{ijk}\partial_i\partial_jA_k=0. \tag{1.52}$$

□

1.2.2.4 从右往左证的公式

例 1.12.

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

证明.

$$
\begin{aligned}
&\nabla\left(\vec{A}\cdot\vec{B}\right)=\left(\vec{B}\cdot\nabla\right)\vec{A}+\left(\vec{A}\cdot\nabla\right)\vec{B}+\vec{B}\times\left(\nabla\times\vec{A}\right)+\vec{A}\times\left(\nabla\times\vec{B}\right)\\
=&B_i\partial_iA_j\vec{e}_j+A_i\partial_iB_j\vec{e}_j+\varepsilon_{ijk}\vec{e}_iB_j\left(\nabla\times\vec{A}\right)_k+\varepsilon_{ijk}\vec{e}_iA_j\left(\nabla\times\vec{B}\right)_k\\
=&B_i\partial_iA_j\vec{e}_j+A_i\partial_iB_j\vec{e}_j+\varepsilon_{ijk}\vec{e}_iB_j\varepsilon_{klm}\partial_lA_m+\varepsilon_{ijk}\vec{e}_iA_j\varepsilon_{klm}\partial_lB_m\\
=&B_i\partial_iA_j\vec{e}_j+A_i\partial_iB_j\vec{e}_j+\varepsilon_{kij}\varepsilon_{klm}\vec{e}_iB_j\partial_lA_m+\varepsilon_{kij}\varepsilon_{klm}\vec{e}_iA_j\partial_lB_m\\
=&B_i\partial_iA_j\vec{e}_j+A_i\partial_iB_j\vec{e}_j+(\delta_{il}\delta_{jm}-\delta_{im}\delta_{jl})\vec{e}_iB_j\partial_lA_m+(\delta_{il}\delta_{jm}-\delta_{im}\delta_{jl})\vec{e}_iA_j\partial_lB_m\\
=&B_i\partial_iA_j\vec{e}_j+A_i\partial_iB_j\vec{e}_j+\vec{e}_lB_m\partial_lA_m-\vec{e}_mB_l\partial_lA_m+\vec{e}_lA_m\partial_lB_m-\vec{e}_mA_l\partial_lB_m\\
=&B_i\partial_iA_j\vec{e}_j+A_i\partial_iB_j\vec{e}_j+B_m\vec{e}_l\partial_lA_m-B_l\partial_lA_m\vec{e}_m+A_m\vec{e}_l\partial_lB_m-A_l\partial_lB_m\vec{e}_m\\
=&B_m\vec{e}_l\partial_lA_m+A_m\vec{e}_l\partial_lB_m\\
=&B_m\nabla A_m+A_m\nabla B_m\\
=&\nabla(A_mB_m)\\
=&\nabla\left(\vec{A}\cdot\vec{B}\right)
\end{aligned}
\tag{1.54}
$$

□

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

$$\oint\limits_{\partial V^+}\vec{A}\cdot\mathrm{d}\vec{S}=\int\limits_{V}\left(\nabla\cdot\vec{A}\right)\mathrm{d}V. \tag{1.55}$$

1.2.3.2 斯托克斯定理

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

$$\oint\limits_{\partial\Sigma^+}\vec{A}\cdot\mathrm{d}\vec{l}=\int\limits_{\Sigma}\left(\nabla\times\vec{A}\right)\cdot\mathrm{d}\vec{S}, \tag{1.56}$$

其中，曲面 Σ 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.

$$\oint\limits_{\partial\Omega^+}\psi\nabla\phi\cdot\mathrm{d}\vec{S}=\int\limits_{\Omega}\left(\psi\nabla^2\phi+\nabla\phi\cdot\nabla\psi\right)\mathrm{d}V. \tag{1.57}$$

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

$$
\begin{aligned}
\oint\limits_{\partial\Omega^+}\psi\nabla\phi\cdot\mathrm{d}\vec{S} &= \int\limits_{\Omega}\nabla\cdot(\psi\nabla\phi)\mathrm{d}V \\
&= \int\limits_{\Omega}\left[(\nabla\phi)\cdot(\nabla\psi)+\psi\nabla^2\phi\right]\mathrm{d}V \\
&= \int\limits_{\Omega}\left[\psi\nabla^2\phi+(\nabla\phi)\cdot(\nabla\psi)\right]\mathrm{d}V.
\end{aligned}
\tag{1.59}
$$

□

1.2.3.4 格林第二恒等式

例 1.14.

$$
\oint\limits_{\partial\Omega^+}(\psi\nabla\phi-\phi\nabla\psi)\cdot\mathrm{d}\vec{S}=\int\limits_{\Omega}\left(\psi\nabla^2\phi-\phi\nabla^2\psi\right)\mathrm{d}V. \tag{1.60}
$$

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

$$
\begin{aligned}
\oint\limits_{\partial\Omega^+}(\psi\nabla\phi-\phi\nabla\psi)\cdot\mathrm{d}\vec{S} &= \int\limits_{\Omega}\nabla\cdot(\psi\nabla\phi-\phi\nabla\psi)\mathrm{d}V \\
&= \int\limits_{\Omega}\left(\psi\nabla^2\phi-\phi\nabla^2\psi\right)\mathrm{d}V.
\end{aligned}
\tag{1.62}
$$

□

1.2.3.5 高斯定理的一个推论

例 1.15.

$$\oint\limits_{\partial V^+} \psi \mathrm{d}\vec{S} = \int\limits_V \nabla\psi \mathrm{d}V. \tag{1.63}$$

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

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

这个特殊的矢量场 $\vec{A}$ 应当满足高斯定理：

$$\oint\limits_{\partial V^+} \vec{A}\cdot \mathrm{d}\vec{S} = \int\limits_V (\nabla\cdot\vec{A})\mathrm{d}V. \tag{1.65}$$

等式左边

$$\oint\limits_{\partial V^+} \vec{A}\cdot \mathrm{d}\vec{S} = \oint\limits_{\partial V^+} (\psi\vec{a})\cdot \mathrm{d}\vec{S} = \vec{a}\cdot \oint\limits_{\partial V^+} \psi \mathrm{d}\vec{S}. \tag{1.66}$$

等式右边

$$\begin{aligned}
\int\limits_V \left(\nabla\cdot\vec{A}\right)\mathrm{d}V &= \int\limits_V \left[\nabla\cdot(\psi\vec{a})\right]\mathrm{d}V \\
&= \int\limits_V \left[(\nabla\psi)\cdot\vec{a} + \psi\nabla\cdot\vec{a}\right]\mathrm{d}V \\
&= \int\limits_V (\nabla\psi)\cdot\vec{a}\mathrm{d}V \\
&= \vec{a}\cdot\int\limits_V \nabla\psi\mathrm{d}V,
\end{aligned} \tag{1.67}$$

于是

$$\vec{a}\cdot \oint\limits_{\partial V^+} \psi \mathrm{d}\vec{S} = \vec{a}\cdot\int\limits_V \nabla\psi \mathrm{d}V, \tag{1.68}$$

由 $\vec{a}$ 的任意性就得到

$$\oint\limits_{\partial V^+} \psi \mathrm{d}\vec{S} = \int\limits_V \nabla\psi \mathrm{d}V. \tag{1.69}$$

□

1.2.3.6 斯托克斯定理的一个推论

例 1.16.

$$\oint_{\partial S} \psi \mathrm{d}\vec{l} = -\int_S \nabla\psi \times \mathrm{d}\vec{S}. \tag{1.70}$$

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

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

这个特殊的矢量场 $\vec{A}$ 应当满足斯托克斯定理：

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

等式左边

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

等式右边

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

于是

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

由 $\vec{a}$ 的任意性就得到

$$\oint\limits_{\partial S} \psi \mathrm{d}\vec{l} = -\int\limits_S \nabla\psi \times \mathrm{d}\vec{S}. \tag{1.76}$$

□

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　∇在三种坐标系下的表达式

2.1.1.1　直角坐标

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

2.1.1.2　球坐标

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

2.1.1.3　柱坐标

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

2.1.2　∇^2在三种坐标系下的表达式

2.1.2.1　直角坐标

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \tag{2.4}$$

2.1.2.2　球坐标

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

2.1.2.3 柱坐标

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

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

$$\langle\cdot,\cdot\rangle : L \times L \to \mathbb{F}, \tag{3.1}$$

若这个映射满足以下三个条件

(1)共轭对称：

$$\forall \psi, \phi \in L, \quad \langle \psi, \phi \rangle = \langle \phi, \psi \rangle^* , \tag{3.2}$$

(2)对第二个元素是线性的，对第一个元素是反线性的：

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

(3)非负性：

$$\forall \psi \in L, \quad \langle \psi \,|\, \psi \rangle \geqslant 0, \tag{3.4}$$

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

$$O : L \to L. \tag{3.5}$$

因此有

$$\forall \psi \in L, \quad O\psi \in L. \tag{3.6}$$

3.2.2 算符之间的运算

3.2.2.1 算符加法

$$(A + B)\psi = A\psi + B\psi. \tag{3.7}$$

3.2.2.2 算符乘法

$$(AB)\psi = A(B\psi). \tag{3.8}$$

3.2.2.3 算符的对易括号

$$[A, B] \equiv AB - BA. \tag{3.9}$$

3.2.3 对算符的运算

3.2.3.1 线性算符

若算符 O 满足

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

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

$$\forall \psi, \phi \in L, \quad \left\langle \phi, O^{\mathrm{T}}\psi \right\rangle = \langle \psi, O\phi \rangle \,. \tag{3.11}$$

可以证明

$$(AB)^{\mathrm{T}} = B^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}. \tag{3.12}$$

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

$$\forall\psi,\phi\in L,\quad \langle\phi,O^*\psi\rangle=\langle\phi,O\psi\rangle^*. \tag{3.13}$$

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

$$\forall\psi,\phi\in L,\quad \left\langle\phi,O^\dagger\psi\right\rangle=\langle O\phi,\psi\rangle. \tag{3.14}$$

注意到

$$\langle O\phi,\psi\rangle=\left(\langle O\phi,\psi\rangle^*\right)^*=\langle\psi,O\phi\rangle^*=\left\langle\phi,O^{\mathrm{T}}\psi\right\rangle^*=\left\langle\phi,\left(O^{\mathrm{T}}\right)^*\psi\right\rangle, \tag{3.15}$$

即

$$\left\langle\phi,O^\dagger\psi\right\rangle=\left\langle\phi,\left(O^{\mathrm{T}}\right)^*\psi\right\rangle, \tag{3.16}$$

对比得

$$O^\dagger=\left(O^{\mathrm{T}}\right)^*. \tag{3.17}$$

可以证明

$$(AB)^\dagger=B^\dagger A^\dagger. \tag{3.18}$$

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

$$O^{\mathrm{T}}=O, \tag{3.19}$$

则称 O 为对称算符。
反对称算符：若线性算符 O 满足

$$O^{\mathrm{T}}=-O, \tag{3.20}$$

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

$$O^\dagger = O, \tag{3.21}$$

则称 O 为自伴算符或厄米算符。

3.2.4.3 幺正算符

对于线性算符 U，若其满足

$$U^\dagger U = UU^\dagger = I, \tag{3.22}$$

则称 U 为幺正算符。

3.3 线性算符的本征值和本征向量

形如

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

的方程称为线性算符 A 的本征方程。λ 称为 A 的本征值，ψ 称为 A 的本征向量。

若某个本征值 λ_i 对应着 n 个线性独立的 $\psi_{ij}, j = 1, 2, \cdots, n$，则称本征值 λ_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

$$A\psi = \lambda\psi, \quad A^\dagger = A. \tag{3.24}$$

一方面

$$\langle\psi, A\psi\rangle = \langle\psi, \lambda\psi\rangle = \lambda\langle\psi, \psi\rangle, \tag{3.25}$$

另一方面

$$\langle\psi, A\psi\rangle = \left\langle\psi, A^\dagger\psi\right\rangle = \langle A\psi, \psi\rangle = \langle\lambda\psi, \psi\rangle = \lambda^*\langle\psi, \psi\rangle, \tag{3.26}$$

对比得

$$\lambda^* = \lambda. \tag{3.27}$$

□

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 ψ_1, ψ_2 分别对应本征值 $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_1 \neq \lambda_2$，则有

$$A\psi_1 = \lambda_1\psi_1, \quad A\psi_2 = \lambda_2\psi_2. \tag{3.28}$$

一方面

$$\langle \psi_2, A\psi_1 \rangle = \langle \psi_2, \lambda_1\psi_1 \rangle = \lambda_1 \langle \psi_2, \psi_1 \rangle, \tag{3.29}$$

另一方面

$$\langle \psi_2, A\psi_1 \rangle = \left\langle \psi_2, A^\dagger\psi_1 \right\rangle = \langle A\psi_2, \psi_1 \rangle = \langle \lambda_2\psi_2, \psi_1 \rangle = \lambda_2^* \langle \psi_2, \psi_1 \rangle = \lambda_2 \langle \psi_2, \psi_1 \rangle, \tag{3.30}$$

作差得

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

由于 $\lambda_1 \neq \lambda_2$，于是

$$\langle \psi_2, \psi_1 \rangle = 0. \tag{3.32}$$

□

定理 3.3. 若 U 为幺正算符，则有

$$\forall \psi, \phi \in L, \quad \langle U\psi, U\phi \rangle = \langle \psi, \phi \rangle. \tag{3.33}$$

证明.

$$\langle U\psi, U\phi \rangle = \left\langle \psi, U^\dagger U\phi \right\rangle = \langle \psi, I\phi \rangle = \langle \psi, \phi \rangle. \tag{3.34}$$

□

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

$$\langle \phi, A\phi \rangle = \left\langle \phi, A^\dagger\phi \right\rangle = \langle A\phi, \phi \rangle = \langle \phi, A\phi \rangle^*. \tag{3.35}$$

前后对比得

$$\langle \phi, A\phi \rangle \in \mathbb{R}. \tag{3.36}$$

把上面过程反过来就能证明必要性。

□

3.5 例题

3.5.1 纯态下可观测量期望值

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

$$\langle O\rangle = \langle \psi \,|\, O \,|\, \psi\rangle\,. \tag{3.37}$$

证明. 考虑本征值离散情况，本征方程为

$$O\,|n\rangle = o_n\,|n\rangle\,. \tag{3.38}$$

利用正交性关系和完备性关系

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

有

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

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

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

□

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

$$\langle O\rangle = \mathrm{Tr}\left(\rho O\right), \tag{3.43}$$

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

$$\mathrm{Tr}\left(O\right) \equiv \sum_j \langle j\,|\,O\,|\,j\rangle\,. \tag{3.44}$$

证明. 考虑本征值离散情况，本征方程

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

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

□

3.5.3 不确定性关系

例 3.3. 利用 *Schwarz* 不等式

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

以及不等式

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

推导不确定性关系

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

其中 A, B 是厄米算符，

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

证明. 注意到对于厄米算符 O，有

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

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

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

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

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

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

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

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

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

即

$$\Delta A \Delta B \geqslant \frac{1}{2}\,|\langle[A,B]\rangle|\,. \tag{3.58}$$

□

参考文献