

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 11 月 8 日

前言

主要参考书是杨孔庆老师的《数学物理方法》[1]。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

第一章 \mathbb{R}^3 空间的向量分析	1
1.1 向量分析基本知识	1
1.1.1 爱因斯坦求和约定	1
1.1.2 Kronecker delta 符号 δ_{ij}	1
1.1.3 三阶 Levi-Civita 符号 ε_{ijk}	1
1.1.4 一些简单算例	2
1.1.5 ∇ 算子	2
1.1.6 标量场的梯度、方向导数、梯度定理	3
1.1.6.1 标量场梯度的定义	3
1.1.6.2 方向导数的定义	3
1.1.6.3 标量场梯度与方向导数的关系	3
1.1.6.4 标量场梯度的意义	4
1.1.6.5 梯度定理	4
1.1.7 矢量场的散度、高斯定理	4
1.1.7.1 矢量场散度的定义	4
1.1.7.2 高斯定理	5
1.1.8 矢量场的旋度、斯托克斯定理	5
1.1.8.1 矢量场的旋度	5
1.1.8.2 斯托克斯定理	5
1.2 向量分析常用公式	6
1.2.1 分析工具	6
1.2.2 \mathbb{R}^3 空间重要微分恒等式及其证明	6
1.2.2.1 与 \vec{x} 有关的公式	6
1.2.2.2 从左往右证的公式	7
1.2.2.3 需要注意的公式	9
1.2.2.4 从右往左证的公式	10
1.2.3 \mathbb{R}^3 空间重要积分恒等式及其证明	11
1.2.3.1 高斯定理	11

1.2.3.2 斯托克斯定理	11
1.2.3.3 格林第一恒等式	12
1.2.3.4 格林第二恒等式	12
1.2.3.5 高斯定理的一个推论	13
1.2.3.6 斯托克斯定理的一个推论	14
第二章 \mathbb{R}^3 空间曲线坐标系中的向量分析	16
2.1 总结	16
2.1.1 ∇ 在三种坐标系下的表达式	16
2.1.1.1 直角坐标	16
2.1.1.2 球坐标	16
2.1.1.3 柱坐标	16
2.1.2 ∇^2 在三种坐标系下的表达式	16
2.1.2.1 直角坐标	16
2.1.2.2 球坐标	16
2.1.2.3 柱坐标	17
第三章 线性空间	18
3.1 Hilbert 空间	18
3.1.1 内积空间的定义	18
3.1.2 Hilbert 空间的定义	18
3.2 线性空间上的各种算符	18
3.2.1 算符的定义	18
3.2.2 算符之间的运算	19
3.2.2.1 算符加法	19
3.2.2.2 算符乘法	19
3.2.2.3 算符的对易括号	19
3.2.3 对算符的运算	19
3.2.3.1 线性算符	19
3.2.3.2 线性算符的转置	19
3.2.3.3 线性算符的复共轭	20
3.2.3.4 线性算符的伴随算符	20
3.2.4 线性空间上的一些特殊算符	20
3.2.4.1 对称算符与反对称算符	20
3.2.4.2 自伴算符（厄米算符）	21
3.2.4.3 幺正算符	21
3.3 线性算符的本征值和本征向量	21
3.4 一些定理	21

3.5 例题	23
3.5.1 完备性关系	23
3.5.2 纯态下可观测量期望值	23
3.5.3 混合态下可观测量期望值	25
3.5.4 不确定性关系	26
第四章 复变函数	28
4.1 复变函数的概念	28
4.1.1 复变函数的定义	28
4.2 解析函数	28
4.2.1 复变函数的连续性	28
4.2.2 复变函数的导数	28
4.2.3 柯西-黎曼条件	28
4.2.4 解析函数的定义	29
4.2.5 例题	30
4.3 复变函数积分	31
4.3.1 复变函数积分的定义	31
4.3.2 柯西积分定理	32
4.3.2.1 单连通区域柯西积分定理	32
4.3.2.2 多连通区域柯西积分定理	32
4.3.3 柯西积分公式	32
4.3.4 解析函数高阶导数的积分表达式	32
4.4 复变函数的级数展开	33
4.4.1 解析函数的泰勒展开	33
4.4.2 解析函数的洛朗展开	33
4.4.2.1 复变函数的零点	33
4.4.2.2 复变函数的奇点	33
4.4.2.3 奇点的分类	33
4.4.2.4 解析函数的洛朗展开	34
4.4.3 例题	34
4.5 留数定理及其应用	36
4.5.1 留数的定义	36
4.5.2 留数的求法	36
4.5.2.1 定义法	36
4.5.2.2 极限法	37
4.5.2.3 特殊情况	37
4.5.3 留数定理	37
4.5.4 利用留数定理求无穷级数	37

4.5.4.1 所需函数	37
4.5.4.2 例题	37
4.5.5 留数定理在实积分中的应用	40

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 Kronecker delta 符号 δ_{ij}

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

1.1.3 三阶 Levi-Civita 符号 ε_{ijk}

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

可以利用 ε_{ijk} 表示任何一个三阶行列式：

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

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 ∇ 算子

∇ 算子 (nabla 算子, 或 del 算子) 定义为

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

其中, ∂_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 ∇ 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 ψ 在 \vec{x} 点处沿 \vec{v} 方向的方向导数, 记为 $\frac{\partial \psi(\vec{x})}{\partial l} \Big|_{\vec{v}}$, 定义为

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

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 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 $\frac{\partial \psi(\vec{x})}{\partial n} \Big|_{\Sigma}$ 。

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

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

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 $\frac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial l} \Big|_{\vec{n}}$ 。

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

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

有：

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

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 $\frac{\partial\psi(\vec{x})}{\partial l} \Big|_{\vec{n}}$ 最大，这个最大的方向导数为

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

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 $\text{div } \vec{A}$ ，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 ∇ 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， 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

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

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， Σ 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 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

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

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.

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

□

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.

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

□

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, Σ 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 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.

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

证明. 注意到

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

于是由高斯定理, 有

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

□

1.2.3.4 格林第二恒等式

例 1.14.

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

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

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

于是由高斯定理可得

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

□

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.

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

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

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

于是

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

由 \vec{a} 的任意性就得到

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

□

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

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

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 ∇^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。 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 $\psi_{ij}, j = 1, 2, \dots, n$, 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

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

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

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

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 完备性关系

例 3.1. 设一组基矢 $\{|n\rangle\}$ 构成 *Hilbert* 空间中的完备基，推导完备性关系

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = I. \quad (3.37)$$

证明。完备基就是说， $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ， $|\psi\rangle$ 可写成 $\{|n\rangle\}$ 线性叠加的形式

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad (3.38)$$

上式两边左乘 $\langle n'|$ ，并利用正交性关系 $\langle n' | n \rangle = \delta_{n,n'}$ 有

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

于是

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle = \sum_n \langle n | \psi \rangle |n\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \psi \rangle = \left(\sum_n |n\rangle \langle n| \right) |\psi\rangle, \quad (3.40)$$

前后对比得

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = I. \quad (3.41)$$

□

3.5.2 纯态下可观测量期望值

例 3.2. 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

$$\langle O \rangle = \langle \psi | O | \psi \rangle. \quad (3.42)$$

证明. 考虑本征值离散情况, 本征方程为

$$O |n\rangle = o_n |n\rangle . \quad (3.43)$$

利用正交性关系和完备性关系

$$\langle n | n' \rangle = \delta_{n,n'}, \quad \sum_n |n\rangle \langle n| = I, \quad (3.44)$$

有

$$\begin{aligned} O &= IOI \\ &= \left(\sum_n |n\rangle \langle n| \right) O \left(\sum_{n'} |n'\rangle \langle n'| \right) \\ &= \sum_{n,n'} \langle n | O | n' \rangle |n\rangle \langle n'| \\ &= \sum_{n,n'} \langle n | o_{n'} | n' \rangle |n\rangle \langle n'| \\ &= \sum_{n,n'} o_{n'} \langle n | n' \rangle |n\rangle \langle n'| \\ &= \sum_{n,n'} o_{n'} \delta_{n,n'} |n\rangle \langle n'| \\ &= \sum_n o_n |n\rangle \langle n|. \end{aligned} \quad (3.45)$$

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

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &\equiv \sum_n o_n |\langle n | \psi \rangle|^2 \\ &= \sum_n o_n \langle n | \psi \rangle^* \langle n | \psi \rangle \\ &= \sum_n o_n \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \left(\sum_n o_n |n\rangle \langle n| \right) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | O | \psi \rangle . \end{aligned} \quad (3.46)$$

□

3.5.3 混合态下可观测量期望值

例 3.3. 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

$$\rho \equiv \sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|, \quad (3.47)$$

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

$$\langle O \rangle = \text{Tr}(\rho O), \quad (3.48)$$

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

$$\text{Tr}(O) \equiv \sum_j \langle j | O | j \rangle. \quad (3.49)$$

证明. 考虑本征值离散情况, 本征方程

$$O |n\rangle = o_n |n\rangle. \quad (3.50)$$

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &\equiv \sum_i p_i \sum_n o_n |\langle n | \psi_i \rangle|^2 \\ &= \sum_i p_i \sum_n o_n \langle n | \psi_i \rangle \langle n | \psi_i \rangle^* \\ &= \sum_i p_i \sum_n o_n \langle n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | n \rangle \\ &= \sum_i \sum_n o_n p_i \langle n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | n \rangle \\ &= \sum_n \sum_i o_n p_i \langle n | \psi_i \rangle \langle \psi_i | n \rangle \\ &= \sum_n o_n \langle n | \left(\sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \right) |n\rangle \\ &= \sum_n o_n \langle n | \rho |n\rangle \\ &= \sum_n \langle n | \rho o_n |n\rangle \\ &= \sum_n \langle n | \rho O |n\rangle \\ &= \text{Tr}(\rho O). \end{aligned} \quad (3.51)$$

□

3.5.4 不确定性关系

例 3.4. 利用 Schwarz 不等式

$$\forall |\alpha\rangle, |\beta\rangle \in \mathcal{H}, \quad \langle\alpha|\alpha\rangle \langle\beta|\beta\rangle \geq |\langle\alpha|\beta\rangle|^2, \quad (3.52)$$

以及不等式

$$\forall z \in \mathbb{C}, \quad |z|^2 \geq |\operatorname{Im}(z)|^2, \quad (3.53)$$

推导不确定性关系

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|, \quad (3.54)$$

其中 A, B 是厄米算符,

$$\langle O \rangle = \langle \psi | O | \psi \rangle, \quad \Delta O \equiv \sqrt{\langle (O - \langle O \rangle)^2 \rangle}. \quad (3.55)$$

证明. 注意到对于厄米算符 O , 有

$$\begin{aligned} \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \Delta O &\equiv \sqrt{\langle (O - \langle O \rangle)^2 \rangle} \\ &= \sqrt{\langle (O - \langle O \rangle)(O - \langle O \rangle) \rangle} \\ &= \sqrt{\langle O^2 - 2\langle O \rangle O + \langle O \rangle^2 \rangle} \\ &= \sqrt{\langle O^2 \rangle - 2\langle O \rangle \langle O \rangle + \langle O \rangle^2} \\ &= \sqrt{\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2}, \end{aligned} \quad (3.56)$$

$$\begin{aligned} \langle \psi | (O - \langle O \rangle)^\dagger (O - \langle O \rangle) | \psi \rangle &= \langle \psi | (O^\dagger - \langle O \rangle^*) (O - \langle O \rangle) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | (O - \langle O \rangle)(O - \langle O \rangle) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | (O - \langle O \rangle)^2 | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (3.57)$$

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

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \alpha \rangle &= \langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = (\Delta A)^2 \\ \langle \beta | \beta \rangle &= \langle \psi | (B - \langle B \rangle)^2 | \psi \rangle = \langle (B - \langle B \rangle)^2 \rangle = (\Delta B)^2, \end{aligned} \quad (3.58)$$

$$\begin{aligned}
\langle \alpha | \beta \rangle &= \langle \psi | (A^\dagger - \langle A \rangle^*) (B - \langle B \rangle) | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | (A - \langle A \rangle) (B - \langle B \rangle) | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | AB - \langle A \rangle B - \langle B \rangle A + \langle A \rangle \langle B \rangle | \psi \rangle \\
&= \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle + \langle A \rangle \langle B \rangle \\
&= \langle AB \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle,
\end{aligned} \tag{3.59}$$

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle BA \rangle - \langle B \rangle \langle A \rangle, \tag{3.60}$$

$$\begin{aligned}
|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 &\geq |\text{Im } \langle \alpha | \beta \rangle|^2 \\
&= \left| \frac{1}{2i} (\langle \alpha | \beta \rangle - \langle \alpha | \beta \rangle^*) \right|^2 \\
&= \left| \frac{1}{2i} (\langle \alpha | \beta \rangle - \langle \beta | \alpha \rangle) \right|^2 \\
&= \frac{1}{4} |\langle AB \rangle - \langle BA \rangle|^2 \\
&= \frac{1}{4} |\langle AB - BA \rangle|^2 \\
&= \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2,
\end{aligned} \tag{3.61}$$

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

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \frac{1}{4} |\langle [A, B] \rangle|^2, \tag{3.62}$$

即

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [A, B] \rangle|. \tag{3.63}$$

□

第4章 复变函数

4.1 复变函数的概念

4.1.1 复变函数的定义

复变函数 f 是黎曼面 \mathbb{C}^R 到复平面 \mathbb{C} 的映射。

4.2 解析函数

4.2.1 复变函数的连续性

设复变函数 $f(z)$ 在 z_0 点及其邻域内有定义。当自变量 z 以任何路径趋于 z_0 时，都有

$$\lim_{z \rightarrow z_0} f(z) = f(z_0), \quad (4.1)$$

则称 $f(z)$ 在 z_0 点连续。

若 $f(z)$ 在区域 Ω 内的所有点都连续，则称 $f(z)$ 在 Ω 内连续。

4.2.2 复变函数的导数

设 z_0 是复变函数 $f(z)$ 定义域 Ω 内的一点。当 z 以任何路径趋于 z_0 时，即 $\Delta z = z - z_0$ 以任何方式趋于 0 时，若极限

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{f(z_0 + \Delta z) - f(z_0)}{\Delta z} \quad (4.2)$$

存在且唯一，则称 $f(z)$ 在 z_0 点可导， $f(z)$ 在 z_0 点的导数记为 $f'(z_0)$.

4.2.3 柯西-黎曼条件

定理 4.1. 设复变函数 $f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$ ，若 $f(z)$ 在 z 点可导，则必定有：

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}. \quad (4.3)$$

上面两条等式称为柯西-黎曼条件 (C-R 条件)。

证明. 设 $z = x + iy$, $f(z) = u(x, y) + iv(x, y)$, 则:

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{f(z + \Delta z) - f(z)}{\Delta z} = \lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{\Delta u + i\Delta v}{\Delta x + i\Delta y}. \quad (4.4)$$

由于 $f(z)$ 在 z 点可导, 故极限

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{f(z + \Delta z) - f(z)}{\Delta z} \quad (4.5)$$

存在且与 Δz 趋于 0 的方式无关。

特别地,

(1) 令

$$i\Delta y = 0, \quad \Delta x \rightarrow 0, \quad (4.6)$$

此时

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{\Delta u + i\Delta v}{\Delta x + i\Delta y} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\Delta u + i\Delta v}{\Delta x} = \frac{\partial u}{\partial x} + i\frac{\partial v}{\partial x}. \quad (4.7)$$

(2) 令

$$\Delta x = 0, \quad i\Delta y \rightarrow 0, \quad (4.8)$$

此时

$$\lim_{\Delta z \rightarrow 0} \frac{\Delta u + i\Delta v}{\Delta x + i\Delta y} = -i\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial y}. \quad (4.9)$$

由于 $f(z)$ 在 z_0 点可导, 则这两个导数值应该相等, 对比实部和虚部就得到

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}. \quad (4.10)$$

□

C-R 条件是 $f(z)$ 在 z 点可导的必要条件, 但不是充分条件。也就是说, 可导必定满足 C-R 条件, 但满足 C-R 条件不一定可导。

4.2.4 解析函数的定义

若复变函数 $f(z)$ 在 z_0 的邻域内每一点都可导, 则称 $f(z)$ 在 z_0 点是解析的。

若复变函数 $f(z)$ 在 Ω 内每一点都可导, 则称 $f(z)$ 在 Ω 内是解析的, 或称为全纯的。

4.2.5 例题

例 4.1. 已知解析函数 $f(z) = u + iv$ 的实部 $u = x^3 - 3xy^2$, 求该解析函数。

解 4.1. 解析函数应满足柯西-黎曼条件:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x}, \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial v}{\partial y} = \frac{\partial u}{\partial x} = 3x^2 - 3y^2, \quad \frac{\partial v}{\partial x} = -\frac{\partial u}{\partial y} = 6xy, \quad (4.12)$$

$$dv(x, y) = \frac{\partial v}{\partial x}dx + \frac{\partial v}{\partial y}dy = 6xydx + (3x^2 - 3y^2)dy. \quad (4.13)$$

选择积分路径为: $\underbrace{(0, 0) \rightarrow (x_0, 0)}_{C_1}, \underbrace{(x_0, 0) \rightarrow (x_0, y_0)}_{C_2}$, 在路径 C_1 上有 $y = 0, dy = 0$,

在路径 C_2 上有 $x = x_0, dx = 0$, 两边积分:

$$\begin{aligned} v(x_0, y_0) - v(0, 0) &= \int_{C_1} 6xydx + (3x^2 - 3y^2)dy + \int_{C_2} 6xydx + (3x^2 - 3y^2)dy \\ &= 0 + \int_{y=0}^{y=y_0} (3x_0^2 - 3y^2)dy \\ &= 3x_0^2y_0 - y_0^3. \end{aligned} \quad (4.14)$$

令 $v(0, 0) = C$, 则:

$$v(x, y) = 3x^2y - y^3 + v(0, 0) = 3x^2y - y^3 + C, \quad (4.15)$$

于是:

$$\begin{aligned} f(z) &= u(x, y) + iv(x, y) \\ &= x^3 - 3xy^2 + i(3x^2y - y^3 + C). \end{aligned} \quad (4.16)$$

例 4.2. 已知解析函数 $f(z) = u + iv$ 的虚部 $v = \frac{y}{x^2 + y^2}$, 求该解析函数。

解 4.2. 先计算偏微分:

$$\frac{\partial v}{\partial x} = \frac{-2xy}{(x^2 + y^2)^2}, \quad \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (4.17)$$

函数解析, 故满足 C-R 条件, 即满足:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (4.18)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial v}{\partial x} = \frac{2xy}{(x^2 + y^2)^2}, \quad (4.19)$$

于是：

$$du = \frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial y} dy = \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2} dx + \frac{2xy}{(x^2 + y^2)^2} dy, \quad (4.20)$$

看到 $(x^2 + y^2)$, 很自然想到极坐标变换：

$$\begin{cases} x = \rho \cos \varphi \\ y = \rho \sin \varphi \end{cases} \implies \begin{cases} dx = \frac{\partial x}{\partial \rho} d\rho + \frac{\partial x}{\partial \varphi} d\varphi = \cos \varphi d\rho - \rho \sin \varphi d\varphi \\ dy = \frac{\partial y}{\partial \rho} d\rho + \frac{\partial y}{\partial \varphi} d\varphi = \sin \varphi d\rho + \rho \cos \varphi d\varphi \end{cases}, \quad (4.21)$$

于是：

$$\begin{aligned} du &= \frac{x^2 - y^2}{(x^2 + y^2)^2} dx + \frac{2xy}{(x^2 + y^2)^2} dy \\ &= \frac{\cos \varphi}{\rho^2} d\rho + \frac{\sin \varphi}{\rho} d\varphi \\ &= d\left(\frac{-\cos \varphi}{\rho}\right), \end{aligned} \quad (4.22)$$

于是：

$$u = \frac{-\cos \varphi}{\rho} + C = -\frac{x}{x^2 + y^2} + C, \quad (4.23)$$

综上，

$$\begin{aligned} f(z) &= u + iv \\ &= \left(-\frac{x}{x^2 + y^2} + C\right) + i\left(\frac{y}{x^2 + y^2}\right). \end{aligned} \quad (4.24)$$

4.3 复变函数积分

4.3.1 复变函数积分的定义

复变函数的积分是指复变函数 $f(z)$ 在其有定义的区域中，沿某一曲线 C 的有向的线积分。

复变函数 $f(z)$ 沿曲线 C 的积分，记为 $\int_C f(z) dz$ ，由下式定义：

$$\int_C f(z) dz \equiv \lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ |z_j - z_{j-1}| \rightarrow 0}} \sum_{j=1}^n f(\xi_j)(z_j - z_{j-1}). \quad (4.25)$$

右边的东西就是说， C 分成 n 段，每段都很短，端点记为 z_0, z_1, \dots, z_n ， ξ_j 是 C 上 z_{j-1} 点到 z_j 点的中的某一点，最后再令 n 趋于无穷。

4.3.2 柯西积分定理

4.3.2.1 单连通区域柯西积分定理

设 $f(z)$ 在单连通区域（内部没有洞的区域） Ω 上解析，当积分路径为 Ω 内的任一闭合曲线 C 时，有：

$$\oint_{C^+} f(z) dz = 0. \quad (4.26)$$

其中， \oint_{C^+} 代表积分沿闭合曲线 C 的逆时针方向进行。

4.3.2.2 多连通区域柯西积分定理

设 $f(z)$ 在具有 k 个内边界 C_1, C_2, \dots, C_k 的回路 C 内的多连通区域内解析，规定 C, C_1, C_2, \dots, C_k 的正方向为逆时针，则：

$$\oint_{C^+} f(z) dz = \oint_{C_1^+} f(z) dz + \oint_{C_2^+} f(z) dz + \dots + \oint_{C_k^+} f(z) dz. \quad (4.27)$$

4.3.3 柯西积分公式

若 $f(z)$ 在闭合回路 C 所包围的区域上解析， z_0 是此区域中的一点，则：

$$\oint_{C^+} \frac{f(z)}{z - z_0} dz = 2\pi i f(z_0). \quad (4.28)$$

4.3.4 解析函数高阶导数的积分表达式

设 $f(z)$ 在区域 Ω 内解析， C 为 Ω 内的任一闭合回路，对于 C 所包围的区域内的任一点 z ，有：

$$f^{(n)}(z) \equiv \frac{d^n}{dz^n} f(z) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_{C^+} \frac{f(\zeta)}{(\zeta - z)^{n+1}} d\zeta. \quad (4.29)$$

4.4 复变函数的级数展开

4.4.1 解析函数的泰勒展开

设 z_0 为函数 $f(z)$ 解析区域 Ω 内的一点, 以 z_0 为圆心的圆周 C 在 Ω 内, 则 $f(z)$ 可以在 C 内展成泰勒级数:

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (z - z_0)^n, \quad (4.30)$$

其中, 展开系数为:

$$a_n = \frac{f^{(n)}(z_0)}{n!} = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C^+} \frac{f(z)}{(z - z_0)^{n+1}} dz. \quad (4.31)$$

4.4.2 解析函数的洛朗展开

4.4.2.1 复变函数的零点

若复变函数 $f(z)$ 在 z_0 点的函数值 $f(z_0) = 0$, 则称 z_0 为复变函数 $f(z)$ 的零点。

4.4.2.2 复变函数的奇点

若复变函数 $f(z)$ 在 z_0 点不解析, 即 $f(z)$ 在 z_0 点的导数不存在或不唯一, 则称 z_0 为复变函数 $f(z)$ 的奇点。

4.4.2.3 奇点的分类

- 孤立奇点: 若 z_0 为函数 $f(z)$ 的奇点, 而在 z_0 点任意小的邻域内, 函数 $f(z)$ 解析, 则称 z_0 为 $f(z)$ 的孤立奇点。
- 非孤立奇点: 若 z_0 为函数 $f(z)$ 的奇点, 而在 z_0 点任意小的邻域内, 除 z_0 点外存在 $f(z)$ 的其他奇点, 则称 z_0 为 $f(z)$ 的非孤立奇点。

还可以进一步对孤立奇点分类。

- 极点: 设 z_0 是 $f(z)$ 的孤立奇点, 若存在一个正整数 k , 使得 $(z - z_0)^k f(z)$ 为非零的解析函数, 则称 z_0 为 $f(z)$ 的 k 阶极点。

- **本性奇点:** 设 z_0 是 $f(z)$ 的孤立奇点, 若不存在一个正整数 k , 使得 $(z - z_0)^k f(z)$ 为非零的解析函数, 则称 z_0 为 $f(z)$ 的本性奇点。
- **可去奇点:** 设 z_0 为函数 $f(z)$ 的孤立奇点, $f(z)$ 在 z_0 点没有定义, 但在 z_0 的去心邻域内解析, 此时可定义 $f(z_0) \equiv \lim_{z \rightarrow z_0} f(z)$ 使 $f(z)$ 在 z_0 点解析, 则称 z_0 为 $f(z)$ 的可去奇点。

4.4.2.4 解析函数的洛朗展开

若函数 $f(z)$ 在以 z_0 为圆心, 半径为 R_1, R_2 的两个圆周 C_1, C_2 所包围的环形区域 $R_2 < |z - z_0| < R_1$ 上解析, 则在此区域内 $f(z)$ 可展成 Laurent 级数:

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n (z - z_0)^n, \quad (4.32)$$

其中,

$$a_n = \frac{1}{2\pi i} \oint_{C^+} \frac{f(\zeta)}{(\zeta - z_0)^{n+1}} d\zeta. \quad (4.33)$$

C 是任一条在环形区域内把 C_2 包围在内的闭曲线。

4.4.3 例题

例 4.3. 求 $f(z) = \frac{1}{z(z-1)}$ 在环形区域 $0 < |z| < 1$ 和 $|z| > 1$ 内, 在 $z_0 = 0$ 处的展开式。

解 4.3. 首先想到几何级数:

$$\frac{1}{1-z} = \sum_{n=0}^{\infty} z^n, \quad |z| < 1. \quad (4.34)$$

把 $f(z)$ 拆分:

$$\begin{aligned} f(z) &= \frac{1}{z(z-1)} \\ &= \frac{z - (z-1)}{z(z-1)} \\ &= \frac{1}{z-1} - \frac{1}{z} \\ &= \frac{1}{z-1} - z^{-1}. \end{aligned} \quad (4.35)$$

当 $|z| < 1$ 时, 有

$$\begin{aligned}
f(z) &= \frac{1}{z-1} - z^{-1} \\
&= -\frac{1}{1-z} - z^{-1} \\
&= -\left(\sum_{n=0}^{\infty} z^n\right) - z^{-1} \\
&= \sum_{n=-1}^{\infty} (-1)z^n.
\end{aligned} \tag{4.36}$$

当 $|z| > 1$ 时, 注意到 $|1/z| < 1$, 于是:

$$\begin{aligned}
f(z) &= \frac{1}{z-1} - z^{-1} \\
&= \frac{1}{z(1-\frac{1}{z})} - z^{-1} \\
&= \frac{1}{z} \cdot \frac{1}{1-\frac{1}{z}} - z^{-1} \\
&= \frac{1}{z} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{z}\right)^n - z^{-1} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} z^{-n-1} - z^{-1} \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} z^{-n-1}.
\end{aligned}$$

例 4.4. 求 $f(z) = \frac{1}{z(z-1)}$ 在 $z_1 = 0$ 和 $z_2 = 1$ 附近的展开式。

解 4.4. 先算 $f(z)$ 在 $z_1 = 0$ 附近的展开式。

由于 $0 < |z-0| < 1$, 于是:

$$\begin{aligned}
f(z) &= \frac{1}{z(z-1)} \\
&= \frac{1}{z-1} - \frac{1}{z} \\
&= -\frac{1}{1-z} - z^{-1} \\
&= -\sum_{n=0}^{\infty} z^n - z^{-1} \\
&= \sum_{n=-1}^{\infty} (-1)z^n.
\end{aligned} \tag{4.37}$$

再算 $f(z)$ 在 $z_2 = 1$ 附近的展开式。

由于 $0 < |z - 1| < 1$, 于是:

$$\begin{aligned}
 f(z) &= \frac{1}{z(z-1)} \\
 &= \frac{1}{z-1} - \frac{1}{z} \\
 &= (z-1)^{-1} - \frac{1}{1-(1-z)} \\
 &= (z-1)^{-1} - \sum_{n=0}^{\infty} (1-z)^n \\
 &= (z-1)^{-1} - \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n (z-1)^n \\
 &= (z-1)^{-1} + \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{n+1} (z-1)^n \\
 &= \sum_{n=-1}^{\infty} (-1)^{n+1} (z-1)^n.
 \end{aligned} \tag{4.38}$$

4.5 留数定理及其应用

4.5.1 留数的定义

设 z_0 是函数 $f(z)$ 的孤立奇点, 设 $f(z)$ 在其孤立奇点 z_0 附近的环形区域中的洛朗展开式为:

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n (z - z_0)^n. \tag{4.39}$$

$f(z)$ 在 z_0 点的留数, 记为 $\text{Res}f(z_0)$, 定义为:

$$\text{Res}f(z_0) \equiv a_{-1}, \tag{4.40}$$

其中, a_{-1} 是 $f(z)$ 在 z_0 点的洛朗展开式中 $(z - z_0)^{-1}$ 项的系数。

4.5.2 留数的求法

4.5.2.1 定义法

直接把 $f(z)$ 在其孤立奇点 z_0 点作洛朗展开:

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n (z - z_0)^n, \tag{4.41}$$

找到 $(z - z_0)^{-1}$ 前的系数 a_{-1} , 由留数的定义可知:

$$\text{Res}f(z_0) \equiv a_{-1}.$$

4.5.2.2 极限法

当 z_0 为 $f(z)$ 的 m 阶极点时, $f(z)$ 可在其孤立奇点 z_0 点作如下的洛朗展开:

$$f(z) = \sum_{n=-m}^{\infty} a_n(z - z_0)^n, \quad a_{-m} \neq 0, \quad (4.42)$$

则

$$\text{Res}f(z_0) = \frac{1}{(m-1)!} \lim_{z \rightarrow z_0} \frac{d^{m-1}}{dz^{m-1}} [(z - z_0)^m f(z)]. \quad (4.43)$$

4.5.2.3 特殊情况

若 $f(z) = \frac{h(z)}{g(z)}$, z_0 为 $g(z)$ 的一阶极点, 且 $h(z)$ 和 $g(z)$ 在 z_0 点及其邻域内解析, 则:

$$\text{Res}f(z_0) = \frac{h(z_0)}{g'(z_0)}. \quad (4.44)$$

4.5.3 留数定理

若 $f(z)$ 在回路 C 所包围的区域内除有限个孤立奇点 z_1, z_2, \dots, z_k 外解析, 则 $f(z)$ 沿 C^+ 的回路积分值等于 $f(z)$ 在 z_1, z_2, \dots, z_k 的留数之和乘 $2\pi i$, 即:

$$\oint_{C^+} f(z) dz = 2\pi i \sum_{j=1}^k \text{Res}f(z_j).$$

4.5.4 利用留数定理求无穷级数

4.5.4.1 所需函数

4.5.4.2 例题

例 4.5. 计算 $\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2 - a^2}$, 其中 $a > 0, a \notin \mathbb{Z}$.

解 4.5. 为了计算目标无穷级数, 考虑如下的无穷级数: $\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{n^2 - a^2}$, 其中 $a > 0, a \notin \mathbb{Z}$.

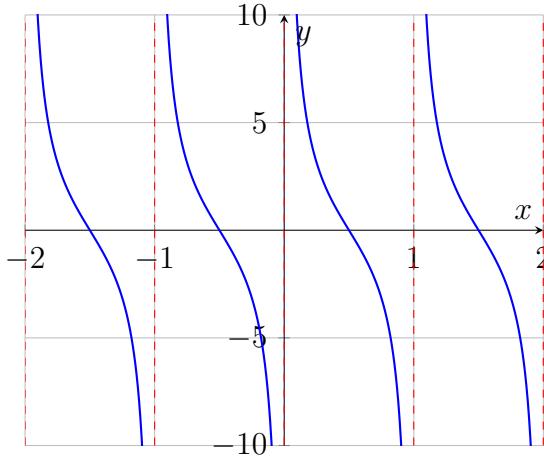


图 4.1: Plot of $y = \pi \cot(\pi x)$ with vertical asymptotes at integers.

构造函数 $f(z) = \pi \cot(\pi z) \cdot \frac{1}{z^2 - a^2}$, 由 $\pi \cot(\pi z)$ 的性质可知, $f(z)$ 的全部奇点 $z_{\pm} = \pm a, z_i = i \in \mathbb{Z}$ 都是一阶极点。

考虑如下的正方形围道:

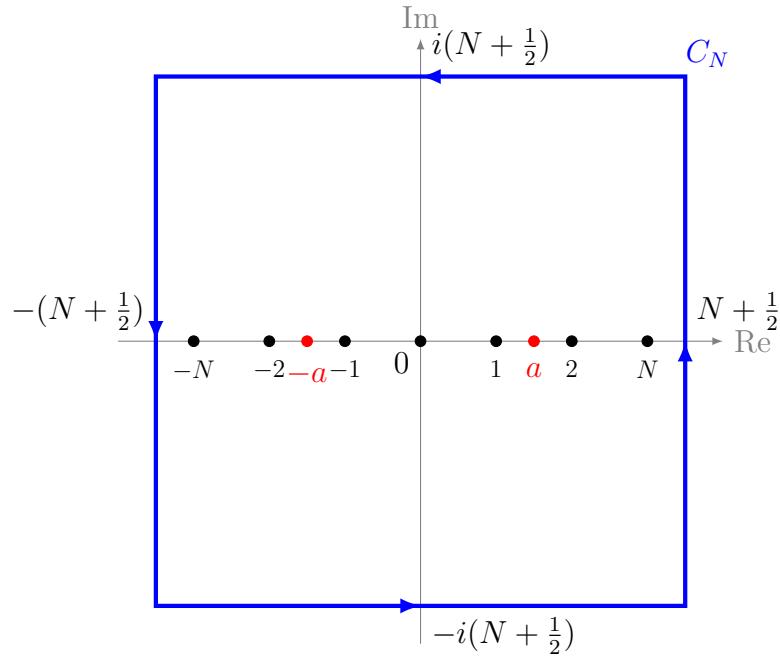


图 4.2: 正方形围道 C_N

由留数定理, 有

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \oint_{C_N} f(z) dz = \lim_{N \rightarrow \infty} 2\pi i \left(\text{Res}_+ f(z_+) + \text{Res}_- f(z_-) + \sum_{n=-N}^N \text{Res}_n f(z_n) \right). \quad (4.45)$$

可以证明,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \oint_{C_N} f(z) dz = 0, \quad (4.46)$$

因此有

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \operatorname{Res} f(z_n) = - [\operatorname{Res} f(z_+) + \operatorname{Res} f(z_-)]. \quad (4.47)$$

注意到 $z_n = n$ 作为 $f(z) = \pi \cot(\pi z) / (z^2 - a^2) = \pi \cos(\pi z) / [(z^2 - a^2) \sin(\pi z)]$ 的一阶极点, 若令

$$h(x) = \frac{\pi \cos(\pi z)}{(z^2 - a^2)}, \quad g(x) = \sin(\pi z), \quad f(z) = \frac{h(x)}{g(x)}, \quad (4.48)$$

那么 $z_n = n$ 也是 $g(x)$ 的一阶极点, 利用求留数方法中的第三种情况, 有

$$\begin{aligned} \operatorname{Res} f(z_n) &= \frac{h(z_n)}{g'(z_n)} \\ &= \frac{\pi \cos(\pi z_n) / (z_n^2 - a^2)}{\pi \cos(\pi z_n)} \\ &= \frac{\pi \cos(n\pi) / (n^2 - a^2)}{\pi \cos(n\pi)} \\ &= \frac{1}{(n^2 - a^2)}. \end{aligned} \quad (4.49)$$

再计算

$$\operatorname{Res} f(z_+) = \frac{\pi \cos(\pi a)}{2a}, \quad (4.50)$$

$$\operatorname{Res} f(z_-) = \frac{\pi \cot(\pi a)}{2a}, \quad (4.51)$$

代入留数定理就得到

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{1}{(n^2 - a^2)} = -\frac{\pi \cot(\pi a)}{a}, \quad (4.52)$$

于是

$$-\frac{1}{a^2} + 2 \cdot \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n^2 - a^2)} = -\frac{\pi \cot(\pi a)}{a}, \quad (4.53)$$

最终得到

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2 - a^2} = \frac{1}{2a^2} - \frac{\pi}{2a} \cot(\pi a), \quad a \notin \mathbb{Z}. \quad (4.54)$$

4.5.5 留数定理在实积分中的应用

参考文献

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