

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》[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 Kronecher delta 符号 δ_{ij}	1
1.1.3 三阶 Levi-Citita 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 需要注意力的公式	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	11
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	么正算符	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	纯态下可观测量期望值	23
3.5.2	混合态下可观测量期望值	24
3.5.3	不确定性关系	25

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 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-Citita 符号 ε_{ijk}

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

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 $\left. \frac{\partial \psi(\vec{x})}{\partial l} \right|_{\vec{v}}$, 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 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 $\left. \frac{\partial \psi(\vec{x})}{\partial n} \right|_{\Sigma}$.

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 ∇ 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

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

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, 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.

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

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 ∇ 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

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

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 纯态下可观测量期望值

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

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

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.